

ВОПРОСЫ ТЕОРИИ ПЛАЗМЫ

Вып. 12

Под ред. академиков
М. А. ЛЕОНОВИЧА
и Б. Б. КАДОМЦЕВА



МОСКВА · ЭНЕРГОИЗДАТ · 1982

УДК 533.9.01

Вопросы теории плазмы. Сб. статей. Вып. 12 / Под ред. акад. М. А. Леонтовича и Б. Б. Кадомцева. М.: Энергоиздат, 1982, с. 272.

Рассмотрен широкий круг вопросов, связанных в основном с проблемой многозарядных ионов в высокотемпературной термоядерной плазме. Представлены расчеты параметров многозарядных ионов, а также процессов, происходящих при столкновении этих ионов с различными частицами плазмы. Излагаются физические аспекты взаимодействия высокотемпературной плазмы со стенками термоядерных реакторов.

Большое внимание уделено вопросам излучения высокотемпературной плазмы: линейчатому и тормозному. Представлены результаты расчетов кинетики примесей, т. е. скоростей их обдирки в плазме и заселенностей возбужденных состояний.

Для специалистов, занимающихся физикой плазмы, спектроскопией многозарядных ионов и термоядерной энергетикой.

Редколлегия: А. А. Галеев, В. В. Параил, О. П. Погуце,
Д. Д. Рютов

~~Отвественный~~ за выпуск М. И. Чибисов

В $\frac{1704040000-569}{051(01)-82}$ КБ-48-177-1981 Подписное

© Энергоиздат, 1982

СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ТЕОРИИ СПЕКТРОВ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ

У. И. Сафронова, В. С. Сенашенко

§ 1. Введение

Спектроскопия многозарядных ионов является в настоящее время бурно развивающейся областью атомной физики. Ее современное состояние характеризуется широким фронтом проводимых исследований, достижением рекордных кратностей ионизации ионов, развитием прецизионных методов спектроскопических измерений в вакуумной УФ и рентгеновской областях спектра, возможностью на основе методов теоретической спектроскопии расшифровки сложных энергетических структур, содержащих сотни спектральных линий.

Успехи экспериментальных исследований в этой области определяются прежде всего созданием новой уникальной аппаратуры и наличием большого числа источников излучения, охватывающих широкую спектральную область. Среди них вакуумная искра, лазерная плазма, взрывающиеся проволочки, а также спектры рентгеновских солнечных вспышек, исследования которых проводятся с борта искусственных спутников Земли [1]. Особое место занимают методы «пучок — пленка» (beam — foil) спектроскопии, широко используемые для измерения времени жизни возбужденных состояний многозарядных ионов [2, 3]. С развитием этих методов связаны многие успехи в физике автоионизационных (АИ) состояний ионов. Так, использование метода временной задержки позволяет разделить, а затем детально исследовать распад короткоживущих и долгоживущих АИ состояний. Регистрация на совпадение ионов определенной зарядности и образующихся в результате распада возбужденных состояний жесткого излучения или АИ электронов существенно повышает определенность отождествления экспериментально наблюдаемых переходов.

В последние годы центр тяжести экспериментальных исследований спектров многозарядных ионов перемещается в область тяжелых элементов [4, 5]. Уже подробно исследованы спектры Fe XXIV и Fe XXV, получены спектры Mo XXXIII — Ag XXXVIII и Ta XXXVI, активно проводятся исследования спектров различных ионов вольфрама [6—8]. Важным применением спектроскопии многозарядных ионов, стимулирующим ее развитие, является проблема диагностики лабораторной и астрофизической плазмы [9], решение которой требует надежных данных о вероятностях и энергиях радиационных и безрадиационных переходов, сечениях образования возбужденных состояний ионов.

Быстрое развитие исследований обеспечивается также дальнейшим совершенствованием теоретических основ атомной спектроскопии, разработкой новых алгоритмов и вычислительных методов, широким использованием мощных ЭВМ для проведения систематических расчетов различных атомных характеристик [10]. Основой теоретических исследований являются хорошо известные методы, разработанные первоначально для приближенного вычисления уровней энергии и волновых функций нейтральных атомных систем. Это метод самосогласованного поля Хартри — Фока и Хартри — Фока — Дирака, теория возмущений, прямые вариационные методы.

Спектры многозарядных ионов по своей общей структуре повторяют спектры нейтральных атомов, смещаясь с увеличением заряда ядра в коротковолновый диапазон спектра, растет энергия переходов. Однако в отличие от атомных спектров в рассматриваемом случае возникает ряд новых физических аспектов, требующих специального рассмотрения. Быстрый рост магнитных взаимодействий, изменение соотношения между вероятностями переходов различной, мультипольности приводит к качественным изменениям структуры наблюдаемых спектров. Различия в изоэлектронных зависимостях вероятностей излучательных и безызлучательных переходов является причиной появления в спектрах многозарядных ионов богатой спутной структуры [4, 5].

При идентификации спектров многозарядных ионов весьма существен правильный выбор типа связи угловых и спиновых моментов электронов, определяемый соотношением электростатического и релятивистских взаимодействий. Для ионов малой кратности ионизации обычно используется приближение LS-связи, соответствующее тому, что электростатическое взаимодействие преобладает над релятивистскими эффектами. В пределе больших значений заряда ядра иона Z возникает обратная ситуация — релятивистские взаимодействия становятся преобладающими, что соответствует приближению jj -связи. В этом случае уже нельзя рассматривать релятивистские эффекты как поправки и теоретическое описание многозарядных ионов приходится строить на основе последовательной релятивистской теории. В области промежуточных значений Z , когда электростатическое и релятивистское взаимодействия одного порядка, многозарядные ионы принято описывать на основе приближения промежуточной связи.

В настоящее время систематические расчеты спектров многозарядных ионов проводятся, главным образом, на основе двух подходов: теории возмущений, построенной на кулоновских функциях и определяющей энергии и волновые функции ионов в виде разложений по параметру $1/Z$, и метода самосогласованного поля [11]. Широкое применение для изучения АИ состояний ионов находит диагонализационный метод [12].

В нерелятивистском приближении теория возмущений представляет собой наиболее удобный теоретический подход для изучения изоэлектронных последовательностей и получения Z -зависимостей различных атомных характеристик [13, 14]. При этом уже для двух-

трехкратноионизованных атомов два порядка теории возмущений дают результаты, не уступающие по точности расчетам, выполненным методом Хартри — Фока. Однако с увеличением кратности ионизации, когда роль релятивистских эффектов становится значительной, теория возмущений теряет свою универсальность. Мы не имеем больше простых изоэлектронных закономерностей, которые были в нерелятивистском приближении [15, 16]. При этом описание многозарядных ионов на основе метода Хартри — Фока с учетом гамильтониана Брейта для учета релятивистских эффектов (приближение Хартри — Фока — Паули) и методом теории возмущений по $1/Z$ с учетом релятивистских взаимодействий, включая поправки порядка $\alpha^2 Z^4$ (α — постоянная тонкой структуры) приводит к близким количественным результатам. При переходе к промежуточной схеме связи в обоих обсуждаемых методах учитываются одни и те же физические эффекты, описываемые на основе различных базисов нулевого приближения [17, 18]. Необходимо, однако, отметить, что непрерывным условием согласия выполненных различными методами расчетов спектроскопических характеристик многозарядных ионов с экспериментом является учет наложения вырожденных в кулоновском приближении конфигураций, который практически полностью исчерпывает многоконфигурационные эффекты.

Теоретическое описание спектров ионов высокой кратности ионизации строится обычно на основе уравнений релятивистской теории. При этом теория возмущений в качестве функций нулевого приближения использует волновые функции Дирака, а аналогом уравнений Хартри — Фока являются уравнения Хартри — Фока — Дирака. Важным практическим результатом, который следует из сравнения релятивистских расчетов с расчетами, выполненными в приближении Хартри — Фока — Паули, является то, что при кратности ионизации ионов, не превышающей 20—30, данные, полученные различными методами, практически совпадают, это служит основанием для проведения расчетов с нерелятивистскими волновыми функциями в области промежуточных значений Z .

Следует, конечно, отметить, что имеющиеся в настоящее время расчеты спектров многозарядных ионов включают, как правило, получение энергий и вероятностей радиационных и безрадиационных переходов и лишь в отдельных случаях, важных для приложений, сечений образования возбужденных состояний. Форма отдельных линий спектра, их зависимость от условий возбуждения, характер угловых распределений фотонов и электронов, образующихся в результате распада возбужденных ионов, все еще остаются мало изученными.

В настоящем обзоре рассматриваются теоретические методы описания спектров многозарядных ионов. Рассмотрение ограничено областью значений Z , в которой для получения основных спектроскопических характеристик достаточно нерелятивистского приближения либо приближения промежуточной связи. Обсуждаются корреляционные эффекты и влияние релятивистских взаимодействий на характер спектров многозарядных ионов. Рассмотрены некоторые результаты расчетов энергий переходов, потенциалов ионизации, сил

осцилляторов, вероятностей радиационных и безрадиационных переходов, времен жизни возбужденных состояний. Результаты расчетов, выполненных различными методами, сравниваются между собой и с имеющимися экспериментальными данными.

§ 2. Теоретические методы описания спектров многозарядных ионов

Перед теорией многозарядных ионов стоит задача получения основных спектроскопических характеристик с точностью, обеспечивающей идентификацию наблюдаемых спектров, которая успешно решается на основе целого ряда теоретических подходов. Ниже остановимся лишь на наиболее распространенных методах расчета энергий и волновых функций ионов, вероятностей радиационных и безрадиационных переходов, а также некоторых результатах расчетов атомных характеристик многозарядных ионов.

Метод теории возмущений по $1/Z$ (приближение LS -связи). В настоящее время одним из основных методов исследования структуры многозарядных ионов является теория возмущений, построенная на кулоновских волновых функциях. Часто для получения спектроскопических характеристик многоэлектронных систем используют полевою формулировку теории возмущений, позволяющую на основе результатов математического анализа формально точного решения уравнения Шредингера, представляемого в виде бесконечного ряда, глубже понять и сопоставить между собой различные приближенные подходы и методы. В приближении LS -связи теория возмущений строится на нерелятивистском базисе, а релятивистские поправки вычисляются как средние от брейтовских операторов с точными нерелятивистскими волновыми функциями.

Проблема определения собственных энергий и собственных функций многоэлектронной системы сводится к решению уравнения Шредингера. Для развития полевой формы теории возмущений удобным оказывается представление вторичного квантования, в котором условие антисимметрии волновых функций учитывается автоматически [19, 20]. Гамильтониан рассматриваемой системы в нерелятивистском приближении определяется выражением

$$H(t) = H_0(t) + H_{\text{int}}(t), \quad (1)$$

где

$$H_0(t) = \sum_j E_j a_j^\dagger(t+0) a_j(t) \quad (2)$$

представляет собой гамильтониан нулевого приближения, включающий операторы кинетической и потенциальной энергии электронов в поле ядра, а

$$H_{\text{int}}(t) = \sum_{j_1 j_2 j_3 j_4} V_{j_1 j_2 j_3 j_4} a_{j_1}^\dagger(t+0) a_{j_2}^\dagger(t+0) a_{j_3}(t) a_{j_4}(t) \quad (3)$$

— оператор взаимодействия электронов между собой. Здесь $a_j^\dagger(t)$ и $a_j(t)$ — операторы рождения и уничтожения электронов;

$E_j = -Z^2/2n_j^2$ — одноэлектронная энергия; j_i — четверка квантовых чисел $n_i l_i m_i s_i$, описывающих состояние i -го электрона; Z — заряд ядра. Для матричного элемента $V_{j_1 j_2 j_3 j_4}$ имеем:

$$V_{j_1 j_2 j_3 j_4} = \sum_{\sigma\sigma'} \int dr dr' \psi_{j_1}^*(r, \sigma) \psi_{j_2}^*(r', \sigma') \times \\ \times \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \psi_{j_3}(r', \sigma') \psi_{j_4}(r, \sigma), \quad (4)$$

где $\psi_j(\mathbf{r}, \sigma) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi) \delta_{m_s, \sigma}$ — водородоподобные волновые функции. В общем случае волновая функция системы невзаимодействующих n электронов $\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_n$ с конфигурацией a в состоянии $LSMM_S$ строится следующим образом:

$$\Phi_n^Q = \frac{1}{n!} \sum_{\beta_1 \dots \beta_n} C_{\beta_1 \dots \beta_n}^Q a_{\beta_1}^+ \dots a_{\beta_n}^+ \Phi_0, \quad (5)$$

где $Q = aLSMM_S$; волновая функция Φ_0 описывает состояния с полностью заполненными оболочками. Коэффициенты $C_{\beta_1 \dots \beta_n}^Q$ обеспечивают связь моментов электронов в состояниях β_1, \dots, β_n в полный орбитальный L и спиновый S моменты с проекциями M и M_S соответственно и выполнение требования антисимметрии функции Φ_n^Q . Точная волновая функция n -электронной системы строится с помощью S -матрицы

$$\Psi_n^Q = \lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{\langle S_\gamma(0, -\infty | g) \Phi_n^Q \rangle}{\langle \Phi_n^Q | S_\gamma(0, -\infty | g) | \Phi_n^Q \rangle}, \quad (6)$$

где

$$S_\gamma(0, -\infty | g) = 1 + \sum_{p=1}^{\infty} \left(-\frac{i}{Z}\right)^p \frac{g^p}{p!} \times \\ \times \int_{-\infty}^0 dt_1 \exp(\gamma t_1) \dots \int_{-\infty}^0 dt_p \exp(\gamma t_p) \{T[H_{\text{Int}}(t_1) \dots H_{\text{Int}}(t_p)]\}. \quad (7)$$

Здесь γ — адиабатический параметр; g — константа связи; T — хронологический оператор, переставляющий операторы под знаком T -произведения так, чтобы их временные аргументы убывали слева направо. Определив S -матрицу, можно получить выражения для всех атомных характеристик. Так, для энергии имеем:

$$E = Z^2[E_0 + \Delta E], \quad (8)$$

где

$$E_0 = - \sum_{nl} q_{nl} \frac{1}{2n^2},$$

а

$$\Delta E = \lim_{\gamma \rightarrow 0} i\gamma \frac{\partial}{\partial g} \ln \langle S_\gamma(0, -\infty | g) \rangle |_{g=1}. \quad (9)$$

Здесь q_{nl} — число электронов в оболочке.

Для матричных элементов, определяющих вероятность радиационных переходов из состояния Q в состояние Q' , имеем:

$$P(Q, Q') = \langle \Psi_n^Q | A(\mathbf{r}) | \Psi_n^{Q'} \rangle. \quad (10)$$

Используя волновые функции (6), получаем

$$P(Q, Q') = - \frac{1}{N_{QQ} N_{Q'Q'}} \sum_{j_i j_i'} A_{j_i j_i'} \times \\ \times \lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{\langle \Phi_{Q'} | T \{ a_{j_i}(t) a_{j_i}^+(t+0) S_\gamma(\infty, -\infty) \} | \Phi_Q \rangle}{\langle \Phi_{Q'} | S_\gamma(0, -\infty) | \Phi_{Q'} \rangle \langle \Phi_Q | S_\gamma(\infty, 0) | \Phi_Q \rangle}, \quad (11)$$

где N_{QQ} — нормировочные множители волновых функций Ψ_n^Q , а матричный элемент $A_{j_i j_i'}$, определяется следующим образом:

$$A_{j_i j_i'} = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \psi_{j_i}^*(\mathbf{r}, \sigma) A(\mathbf{r}) \psi_{j_i'}(\mathbf{r}, \sigma). \quad (12)$$

В частном случае дипольных радиационных переходов $A(\mathbf{r}) = \mathbf{r}$. При расчете матричных элементов других одночастичных операторов имеем аналогично (11)

$$\langle H_i \rangle^Q = \langle \Psi_n^Q | H_i(\mathbf{r}) | \Psi_n^Q \rangle, \quad (13)$$

где

$$\langle \Psi_n^Q | H_i(\mathbf{r}) | \Psi_n^Q \rangle = - \sum_{j_i j_i'} V_{j_i j_i'} \times \\ \times \lim_{\gamma \rightarrow 0} \frac{\langle \Phi_Q | T \{ a_{j_i}(t) a_{j_i}^+(t+0) S_\gamma(\infty, -\infty) \} | \Phi_Q \rangle}{\langle \Phi_Q | S_\gamma(\infty, -\infty) | \Phi_Q \rangle}. \quad (14)$$

Для двухчастичных операторов можно получить аналогичные формулы. Однако до настоящего времени расчеты матричных элементов таких операторов проводятся лишь с функциями Φ_n^Q . Для каждой из величин (8), (11) и (13), используя приведенные выше формулы, можно получить выражение для любого члена ряда по $1/Z$. Часто в целях большей наглядности используют графическое представление рассмотренных выше выражений [21].

В приведенных формулах переход к водородному базису производится заменой переменных $Zr \rightarrow u$ с выделением явной зависимости от Z . Для состояний дискретного спектра

$$R_{nl}(r) \Rightarrow Z^{3/2} R_{nl}^H(1, u), \quad E_n \Rightarrow Z^2 E_n^H, \quad (15)$$

а для волновой функции и энергии состояний непрерывного спектра нормированной на δ -функцию от импульса,

$$R_{kl} \Rightarrow Z R_{kl}^H(1, u), \quad E_k \Rightarrow Z^2 E_k^H. \quad (15a)$$

С учетом (15) выражение для матричного элемента $V_{j_1 j_2; j_3 j_4}$ принимает вид

$$V_{j_1 j_2; j_3 j_4} \Rightarrow Z V_{j_1 j_2; j_3 j_4}^H, \quad (16)$$

где V^H — матричный элемент, вычисляемый с водородными волновыми функциями. Учитывая явную зависимость матрицы S_ν от Z (7), получаем на основе определения (9) ряд для нерелятивистской энергии атомной системы

$$E = E_0 Z^2 + \Delta E_1 Z + \Delta E_2 + \frac{1}{Z} \Delta E_3 + \dots \quad (17)$$

Метод Хартри — Фока. Широкое распространение для расчета сложных атомных спектров находят различные модификации уравнений Хартри — Фока. Приближенная волновая функция атомной системы строится из одноэлектронных волновых функций, которые находятся численным интегрированием системы интегродифференциальных уравнений. Пространственная часть одноэлектронных волновых функций берется в виде, который соответствует приближению центрального поля, а радиальные волновые функции R_{nl}^{HF} и $R_{n\alpha l\alpha}^{HF}$ электронов в заполненных и незаполненных оболочках определяются из уравнений

$$\begin{aligned} & H_0(r) R_{nl}^{HF}(r) + \sum_{n', l' \in f_0} 2(2l' + 1) F_0^{n'l', n'l'}(r) R_{nl}^{HF}(r) - \\ & - \sum_{n', l' \in f_0} (2l' + 1) \sum_k \begin{pmatrix} l & l' & k \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 F_k^{nl, n'l'}(r) R_{n'l'}^{HF}(r) + \\ & + \sum_{n\alpha l\alpha \in f'} q_{n\alpha l\alpha} F_0^{n\alpha l\alpha, n\alpha l\alpha}(r) R_{nl}^{HF}(r) - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{n\alpha l\alpha \in f'} q_{n\alpha l\alpha} \sum_k \begin{pmatrix} l\alpha & l & k \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 F_k^{n\alpha l\alpha, nl}(r) R_{n\alpha l\alpha}^{HF}(r) = \mathcal{E}_{nl} R_{nl}^{HF}(r) + \\ & + \sum_{n\alpha l\alpha \in f'} \frac{q_{n\alpha l\alpha}}{2(2l+1)} \mathcal{E}_{nl, n\alpha l\alpha} R_{n\alpha l\alpha}^{HF}(r) \end{aligned} \quad (18)$$

и

$$\begin{aligned} & H_0(r) R_{n\alpha l\alpha}^{HF}(r) + \sum_{nl \in f_0} 2(2l+1) F_0^{nl, nl}(r) R_{n\alpha l\alpha}^{HF}(r) - \\ & - \sum_{nl \in f_0} (2l+1) \sum_k \begin{pmatrix} l & k & l\alpha \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 F_k^{nl, n\alpha l\alpha}(r) R_{nl}^{HF}(r) + \\ & + \frac{2}{q_{n\alpha l\alpha}} E^{n\alpha l\alpha, n\alpha l\alpha}(r) R_{n\alpha l\alpha}^{HF}(r) + \frac{1}{q_{n\alpha l\alpha}} \times \\ & \times \sum_{n\beta l\beta \in f'} \{ E^{n\beta l\beta, n\beta l\beta}(r) R_{n\alpha l\alpha} + E^{n\beta l\beta, n\alpha l\alpha}(r) R_{n\beta l\beta}^{HF}(r) \} = \\ & = \mathcal{E}_{n\alpha l\alpha} R_{n\alpha l\alpha}^{HF}(r) + \mathcal{E}_{n\alpha l\alpha, nl} R_{nl}^{HF}(r). \end{aligned} \quad (19)$$

Здесь \mathcal{E}_{nl} и $\mathcal{E}_{nl, n\alpha l\alpha}$ — диагональные и недиагональные множители Лагранжа; nl и $n\alpha l\alpha$ — заполненные и незаполненные электронные оболочки соответственно; $H_0(r)$ — гамильтониан (2) в конфигурационном представлении; $F_k^{nl, nl}(r)$ и $E^{n\alpha l\alpha, n\alpha l\alpha}(r)$ — радиаль-

ные интегралы. Искомые решения системы уравнений (18) и (19) должны удовлетворять граничным условиям: $R_{nl}^{\text{HF}}(0) = 0$ и $R_{nl}^{\text{HF}}(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$. Получаемые при этом радиальные волновые функции являются «наилучшими» в смысле вариационного принципа.

О соотношении метода Хартри — Фока и теории возмущений. Разлагая хартри-фоковские волновые функции по собственным функциям гамильтониана H_0 , можно установить соотношение между методом Хартри — Фока и теорией возмущений:

$$R_{nl}^{\text{HF}}(r) = \sum_{n'} C_{nn'}(l) R_{n'l}(r). \quad (20)$$

Подставляя разложение (20) в систему уравнений (19), получаем систему для определения коэффициентов $C_{nn'}(l)$. Зависимость от Z легко выделяется и коэффициенты разложения (20), множители Лагранжа, а также энергия системы определяются следующими рядами:

$$C_{np}(l) = \delta_{np} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{Z^k} C_{np}^{(k)}(l); \quad (21a)$$

$$\mathcal{E}_{nl} = -\frac{Z^2}{2n^2} + \sum_{k=1}^{\infty} Z^{1-k} \mathcal{E}_{nl}^{(k)}; \quad (21b)$$

$$E^{\text{HF}} = - \sum_{nl \in I_0, I'} \frac{Z^2}{2n^2} + \sum_{k=1}^{\infty} Z^{1-k} \Delta E_k^{\text{HF}}. \quad (21v)$$

Аналитические выражения для коэффициентов разложения по $1/Z$ приводятся в работе [22] для трех членов разложения E^{HF} и двух членов разложения для $C_{nl}(l)$ и \mathcal{E}_{nl} .

Для термов конфигурации $1s^2 2s 2p^n$ ($n = 0 \div 6$) в табл. 1 приводятся числовые значения коэффициентов ΔE_1^{HF} , ΔE_2^{HF} и ΔE_3^{HF} . Там же приведены значения E_2^{HF} и E_3^{HF} , определяемые выражением

$$E_{k_0}^{\text{HF}} = -Z^2 \left(1 + \frac{1+n}{8} \right) + \sum_{k=1}^{k_0} Z^{1-k} \Delta E_k^{\text{HF}}, \quad (22)$$

которое при $Z = 3 + n$ соответствует нейтральному атому. Из таблицы видно, что во всех рассмотренных случаях в расчетах, выполненных по теории возмущений, необходимо учитывать поправки третьего порядка. При этом типичное отклонение теории возмущений от хартри-фоковских расчетов энергии составляет 0,1—0,2%. Это отклонение уменьшается с увеличением кратности ионизации. Тем самым результаты табл. 1 иллюстрируют хорошую сходимость разложения хартри-фоковской энергии в ряд теории возмущений (21v). Для энергий переходов различия между теорией возмущений и расчетами, выполненными методом Хартри — Фока, могут быть несколько больше [22]. Однако даже для ионов малой кратности ионизации включение в расчеты по теории возмущений членов третьего порядка приводит к удовлетворительному согласию расчетов, выполненных различными методами.

Таблица 1. Сравнение E_2^{HF} и E_3^{HF} с полной хартри-фоковской энергией E^{HF} для Z , равного полному числу электронов в атоме. Конфигурация $1s^2 2s^2 2p^n$; $E_n^{\text{HF}} = E_0 Z^2 + \sum_{k=1}^n Z^{2-k} \Delta E_k^{\text{HF}}$

n	Терм	E_0	ΔE_1^{HF}	ΔE_2^{HF}	ΔE_3^{HF}	E_2^{HF}	E_3^{HF}	$E^{\text{HF}}[26]$
0	3S	-1,125	1,022805	-0,354549	-0,04135	-7,4111	-7,4249	-7,43273
1	3P	-1,25	1,624144	-0,940215	-0,19640	-14,4436	-14,4927	-14,51152
	1P		1,682730	-0,996656	-0,29655	-14,2686	-14,3399	-14,39475
2	4P	-1,375	2,389545	-1,900492	-0,46067	-14,3278	-24,2199	-24,45067
	2D		2,439936	-1,983550	-0,56034	-24,1589	-24,2709	-24,31189
	2S		2,471576	-2,066628	-0,59639	-24,0837	-24,2030	-24,24810
	2P		2,477436	-2,000597	-0,69964	-23,9884	-24,1283	-24,17908
3	6S	-1,5	3,319009	-3,326341	-0,86618	-37,4123	-37,5566	-37,59922
	3D		3,379946	-3,451170	-1,01424	-37,1715	-37,3405	-37,39438
	3P		3,401040	-3,514610	-1,04061	-37,1084	-37,2818	-37,33772
	1D		3,438540	-3,524113	-1,25317	-36,8929	-37,1017	-37,16963
	3S		3,436196	-3,474169	-1,32724	-36,8570	-37,0782	-37,14213
	1P		3,459634	-3,588007	-1,85609	-36,8302	-37,1395	-37,11579
4	4P	-1,625	4,494566	-5,511649	-1,67008	-53,6747	-53,9133	-53,98836
	2D		4,544957	-5,624363	-1,86310	-53,4347	-53,7008	-53,78384
	2S		4,576597	-5,734187	-1,91481	-53,3230	-53,5965	-53,68339
	2P		4,582457	-5,643463	-2,16026	-53,1913	-53,4999	-53,58384
5	3P	-1,75	5,834186	-8,395421	-2,82015	-73,7219	-74,0744	-74,18229
	1P		5,892780	-8,493923	-3,24375	-73,3517	-73,7572	-73,88509
6	2S	-1,875	7,337868	-12,061334	-4,73376	-97,8955	-97,4215	-98,53124

Корреляционная энергия. Корреляционная энергия атомной системы определяется как разность полной и хартри-фоковской энергии. В общем случае для получения корреляционной энергии сравниваются два ряда теории возмущений: для полной и хартри-фоковской энергий. В результате корреляционная энергия определяется разложением

$$E^{\text{corr}} = \Delta E_1^{\text{corr}} Z + \Delta E_2^{\text{corr}} + \frac{1}{Z} \Delta E_3^{\text{corr}} + \dots \quad (23)$$

В качестве примера в табл. 2 приведены результаты расчетов двух членов разложения E^{corr} в ряд по $1/Z$ для основных состояний легких атомов вместе с экспериментальными данными из работы [23]. Можно видеть, что результаты расчетов удовлетворительно согласуются с экспериментальными данными даже для нейтральных атомов.

Таблица 2. Корреляционная энергия для основных состояний легких атомов $E_2^{\text{согг}} = \Delta E_1^{\text{согг}} Z + \Delta E_2^{\text{согг}}$

Конфигурация	Терм	$\Delta E_1^{\text{согг}}$	$\Delta E_2^{\text{согг}}$	$E_2^{\text{согг}} (Z=N)$	$E_{\text{экс}}^{\text{согг}}$ [28]
$1s^2$	$1S$		-0,0467	-0,0467	-0,0421
$1s^2 2s$	$2S$		-0,0537	-0,0537	-0,0453
$1s^2 2s^2$	$1S$	-0,01173	-0,0720	-0,1189	-0,0953
$1s^2 2s^2 2p$	$2P$	-0,00692	-0,1276	-0,1622	-0,125
$1s^2 2s^2 2p^2$	$3P$	-0,00309	-0,1828	-0,2013	-0,158
$1s^2 2s^2 2p^3$	$4S$		-0,2373	-0,2373	-0,188
$1s^2 2s^2 2p^4$	$3P$		-0,3064	-0,3064	-0,269
$1s^2 2s^2 2p^5$	$2P$		-0,3694	-0,4278	-0,324
$1s^2 2s^2 2p^6$	$1S$		-0,4278	-0,4278	-0,398
$1s^2 2s^2 2p^6 3s$	$2S$		-0,4591	-0,4591	-0,403

Естественно, что с увеличением кратности ионизации согласно расчетов с экспериментом будет гораздо лучше.

Заметим, что значение $\Delta E_1^{\text{согг}}$ отлично от нуля лишь в том случае, когда имеется несколько термов с одинаковыми значениями L и S , но с отличающимися промежуточными моментами, относящимися к одной и той же или к различным конфигурациям, например состояния $1s^2 2s^2 1S$ и $1s^2 2p^2 1S$, $1s^2 2s^2 2p^2 P$ и $1s^2 2p^3 2P$ и т. д. Для конфигурации $1s2s2p$ имеем два совпадающих термина с различными промежуточными спиновыми моментами: $1s2s[1S]2p^2 P$ и $1s2s[3S]2p^2 P$. Вклад в $\Delta E_2^{\text{согг}}$ состоит из нескольких частей. Так, для состояния $1s^2$ — это непосредственно вклад корреляционных диаграмм [21], для $1s^2 2s$ — учет корреляций, возникающих из-за отклонений от приближения сферически-симметричного поля. Наконец, для состояний типа $1s^2 2s^2$, кроме поправок, имеющих место для двух предыдущих состояний, добавляются члены, учитывающие наложение конфигураций.

Расчеты корреляционной энергии были проведены с различными базисными волновыми функциями. Так, корреляционная поправка к энергии основного состояния двухэлектронной системы, вычисленная с водородными и хартри-фоковскими волновыми функциями, равна соответственно: $\Delta E_2^{\text{согг}}(\text{Вод}) = -0,04666$ и $\Delta E_2^{\text{согг}}(\text{HF}) = -0,03717$. При этом отличие $\Delta E_2^{\text{согг}}(\text{HF})$ от экспериментального значения $E_{\text{экс}}^{\text{согг}} = -0,04205$ того же порядка, что и для $\Delta E_2^{\text{согг}}(\text{Вод})$, что, по крайней мере для легких атомов, свидетельствует о достаточно быстрой сходимости разложения (23).

Приближение Томаса — Ферми. Для расчета характеристик многозарядных ионов наряду с методом Хартри — Фока широко используется приближение, в котором взаимодействие электрона с ядром и другими электронами описывается статистической теорией Томаса — Ферми [24, 25]. Так, в [25] статистическая модель использовалась для определения энергетических уровней и потенциалов ионизации многозарядных ионов с зарядом ядра $Z = 14 \div 92$ и степенью ионизации $q = 0,1 \div 0,95$. При этом взаимодействие электронов описывается

универсальной функцией, не зависящей от Z . Согласно статистической теории атома энергия электрона, находящегося в поле $(Zq + 1)$ -кратно заряженного атомного остатка, имеет вид

$$U(r) = \begin{cases} -\frac{z}{r} \varphi\left(\frac{r}{\mu}\right) + U_0 & r \leq r_0, \\ -\frac{Zq+1}{r} & r > r_0, \end{cases} \quad (24)$$

$$U_0 = -\frac{Zq+1}{r_0}, \quad \mu = 0,88534/Z^{1/3}. \quad (25)$$

$\varphi(x)$ — решение уравнения Томаса — Ферми. Спектр собственных значений E_{nl} и одночастичные волновые функции R_{nl} иона определяются уравнением Шредингера

$$\frac{d^2 R_{nl}}{dr^2} + \left[2E_{nl} - 2U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{nl} = 0 \quad (26)$$

с обычными граничными условиями. Такой расчет дает уровни энергии и потенциалы ионизации многозарядных ионов несколько ниже их экспериментальных значений [25].

Метод «усеченной» диагонализации. Этот метод широко используется для расчета энергий и волновых функций АИ состояний, которые рассматриваются как стационарные, а их связь с непрерывным спектром учитывается приближенно — в первом порядке теории возмущений [12]. В этом случае задача определения энергий и волновых функций ионов решается довольно просто. Полная волновая функция иона записывается в виде линейной комбинации функций, относящихся к одночастичному гамильтониану. Так, если гамильтониан в нерелятивистском приближении представить в виде

$$H = H_0 + V, \quad (27)$$

а волновую функцию иона, являющуюся решением уравнения

$$(H_0 + V)\Psi_{LS} = E\Psi_{LS}, \quad (28)$$

разложить по собственным функциям H_0

$$\Psi_{LS} = \sum_n C_n \varphi_n^{LS}, \quad (29)$$

то, подставляя разложение (29) в уравнение (28), затем умножая на φ_m^{LS} и интегрируя по пространственным переменным, получаем бесконечную систему линейных алгебраических уравнений относительно коэффициентов C_n :

$$\sum_{n=0}^{\infty} \{(E - E_{0n}) \delta_{nm} - V_{nm}\} C_n = 0. \quad (30)$$

Условием разрешимости системы уравнений (30) является равенство нулю ее детерминанта. В конкретных задачах систему уравнений (30) заменяют на систему N -го порядка, оставляя в разложении (29)

лишь наиболее важные конфигурации, выбор которых определяется особенностями рассматриваемой физической задачи. Такой подход позволяет достаточно полно учесть эффекты наложения конфигураций, решая системы уравнений (30) относительно невысокого порядка [26, 27].

Приближение промежуточной связи и учет релятивистских взаимодействий. С увеличением кратности ионизации ионов растет влияние релятивистских взаимодействий, которые смешивают между собой состояния с различными значениями полного орбитального и спинового моментов иона. При этом все расчеты проводятся в приближении промежуточной связи с брейтовским гамильтонианом. Задача на собственные значения, так же как и в диагонализационном методе, сводится к решению системы алгебраических уравнений. Одночастичные и двухчастичные операторы, которые включаются в гамильтониан Брейта, принято делить на две группы: операторы, определяющие сдвиг терма, и операторы, обуславливающие его расщепление. Матрицу энергии, определяющую структуру спектра, удобно строить на основе теории возмущений.

Для одночастичных операторов Брейта

$$H_1(\mathbf{r}) = -\frac{\alpha^2}{8} \nabla^4; \quad H_4'(\mathbf{r}) = \frac{\alpha^2}{2} \pi Z \delta^3(\mathbf{r}); \quad H_3'(\mathbf{r}) = \frac{\alpha^2}{2} Z \frac{\mathbf{L}\mathbf{S}}{r^3}; \quad (31)$$

используя формулу (14), получаем разложение в ряд по $1/Z$:

$$\langle H_i^{(1)} \rangle = \frac{1}{4} \alpha^2 \{E_i^{(0)} Z^4 + \Delta E_i^{(1)} Z^3 + \Delta E_i^2 Z^2 + \dots\} \quad (32)$$

Двухчастичные операторы Брейта

$$\left. \begin{aligned} H_2^{(2)} &= -\frac{1}{2} \alpha^2 \frac{1}{r_{12}} \left[\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 + \frac{\mathbf{r}_{12} (\mathbf{r}_{12} \mathbf{p}_1) \mathbf{p}_2}{r_{12}^2} \right]; \quad H_4'' = -\alpha^2 \pi \delta^3(\mathbf{r}_{12}); \\ H_5' &= -\frac{8}{3} \alpha^2 \pi \mathbf{s}_1 \mathbf{s}_2 \delta^3(\mathbf{r}_{12}); \quad H_3'' = -\frac{\alpha^2}{r_{12}^3} [\mathbf{r}_{12} \times \mathbf{p}_1] (\mathbf{s}_1 + 2\mathbf{s}_2); \\ H_5^{(2)} &= \frac{\alpha^2}{r_{12}^3} \left[\mathbf{s}_1 \mathbf{s}_2 - \frac{3}{r_{12}^2} (\mathbf{s}_1 \mathbf{r}_{12}) (\mathbf{s}_2 \mathbf{r}_{12}) \right] \end{aligned} \right\} \quad (33)$$

можно представить аналогичным образом:

$$\langle H_i^{(2)} \rangle_Q = \frac{1}{4} \alpha^2 [\mathcal{E}_i^{(0)} Z^3 + \Delta \mathcal{E}_i^{(1)} Z^2 + \Delta \mathcal{E}_i^{(2)} Z + \dots]. \quad (34)$$

С учетом разложений (32) и (34) можно вычислить сдвиг терма, определяемый операторами H_1 , H_4' , H_2 , H_4'' и H_5' .

$$E^{\text{rel}} = \frac{\alpha^2}{4} [E_0^r Z^4 + \Delta E_1^r Z^3 + \Delta E_2^r Z^2 + \dots], \quad (35)$$

где

$$E_0^r = E_1^{(0)} + E_4^{(0)} \quad (35a)$$

и

$$\Delta E_1^r = \Delta E_1^{(1)} + \Delta E_4^{(1)} + \mathcal{E}_2^{(0)} + \mathcal{E}_4^{(0)} + \mathcal{E}_5^{(0)},$$

Аналогичное разложение получается и для расщепления термов, определяемого вкладом от операторов $H_{3'}$, $H_{3''}$ и $H_{5''}$:

$$\Delta E(LSJ, L' S' J) = \frac{1}{4} \alpha^2 Q_1 \{E_3^{(0)} Z^4 + \Delta E_3^{(1)} Z^3 + \mathcal{E}_3^{(0)} Z^3\} + \frac{1}{4} \alpha^2 Q_2 \mathcal{E}_5^{(0)} Z^3, \quad (36)$$

$$\text{где } Q_h = (-1)^{J+L+S} \begin{Bmatrix} L' & S' & J \\ S & L & k \end{Bmatrix},$$

Объединяя разложение для нерелятивистской части энергии (17) и релятивистские поправки, определяемые формулами (35), (36), получаем матрицу энергии, диагонализировав которую, находим энергии $E_J(aLS)$ и собственные векторы $C_J(aLS, a'L'S')$ различных состояний многозарядных ионов в приближении промежуточной связи.

§ 3. Некоторые результаты расчетов атомных характеристик многозарядных ионов

Теоретическому изучению спектров многозарядных ионов на основе методов, изложенных в § 2, посвящено большое число работ. Были проведены расчеты основных спектроскопических характеристик ионов различной кратности ионизации. Остановимся только на некоторых из них.

Энергии состояний, длины волн, потенциалы ионизации. Излучательные переходы между различными состояниями многозарядного иона можно разделить на две категории: переходы без изменения и с изменением главного квантового числа. В первом случае разложение по $1/Z$ для нерелятивистской части энергии начинается с $\Delta E_1 Z$, а во втором с $E_0 Z^2$. Что касается потенциалов ионизации, то их расчет сводится к получению разности энергий рассматриваемой системы и основного состояния иона на единицу большей кратности ионизации. Это практически переходы с изменением главного квантового числа, так что значение $E_0 Z^2$ для потенциалов ионизации всегда отлично от нуля. Их расчеты проведены в работах [25, 28, 29].

Что касается влияния релятивистских эффектов на энергии переходов, то хотя и изменяются их значения в обоих случаях, тем не менее на энергиях переходов различных типов проявляется это по-разному. В качестве примера на рис. 1 и 2 показано сравнение нерелятивистских и релятивистских расчетов энергий переходов $1s2s^2 2p^3 P_0 - 1s^2 2s^2 1S_0$, $1s2s^3 2p^5 3P_0 - 1s^2 2s^2 2p^4 3P_2$ (рис. 1) с изменением главного квантового числа и переходов $1s2s^2 2p^3 P_2 - 1s2p^3 5S_2$, $1s2p^3 1P_1 - 1s2p^3 3D_1$ (рис. 2) без изменения главного квантового числа. На рисунках приводится относительное изменение энергии после выделения ведущих членов разложения: в первом случае это $Z^2 \{E_0(a_1) - E_0(a_2)\}$, а во втором $Z \{\Delta E_1(a_1) - \Delta E_1(a_2)\}$. Отклонение функций

$$\frac{E(a_1) - E(a_2)}{Z^2 \{E_0(a_1) - E_0(a_2)\}} \text{ и } \frac{E(a_1) - E(a_2)}{Z \{\Delta E_1(a_1) - \Delta E_1(a_2)\}} \text{ от}$$

единицы является мерой влияния корреляционных поправок (нерелятивистский расчет), а также релятивистских эффектов, включаемых в приближении промежуточной связи. Как видно из рисунков, влияние релятивистских эффектов на переходы с изменением главного квантового числа значительно меньше, чем на переходы без изменения главного квантового числа.

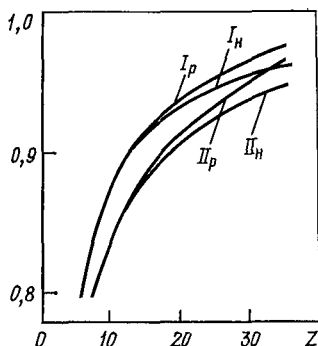


Рис. 1. Z-зависимость

$$\frac{E(a_1) - E(a_2)}{Z^2 \{E_0(a_1) - E_0(a_2)\}} :$$

I : $a_1 = 1s2s^22p^3P_0$, $a_2 = 1s^22s^2^1S_0$;
 II : $a_1 = 1s2s^22p^4^3P_0$, $a_2 = 1s^22s^22p^4^3P_2$;
 I_H , II_H — нерелятивистские энергии;
 I_p , II_p — энергии с учетом релятивистских поправок

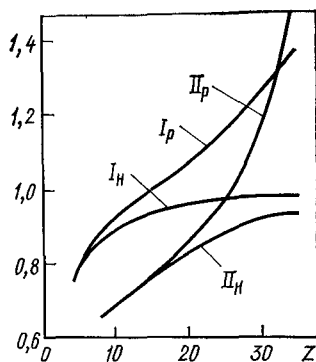


Рис. 2. Z-зависимость

$$\frac{E(a_1) - E(a_2)}{Z \{\Delta E_1(a_1) - \Delta E_1(a_2)\}} :$$

I : $a_1 = 1s2s^22p^3P_2$; $a_2 = 1s2p^3^4S_2$;
 II : $a_1 = 1s2p^3^3P_1$, $a_2 = 1s2p^3^3D_1$;
 I_H , II_H — нерелятивистские энергии;
 I_p , II_p — энергии с учетом релятивистских поправок

В качестве примера расчетов, выполненных в приближении промежуточной связи, в табл. 3 приведены энергии уровней конфигурации $1s^22s^22p^53l$ ионов изоэлектронной последовательности Ne, отсчитанные от основного состояния $1s^22s^22p^6^1S_0$. Там же дается расщепление мультиплетов 3P_J , 3D_J и 3F_J . Из таблицы видно, что результаты расчетов хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными для ионов AlIV [30] и SiV [31].

В табл. 4 приведены длины волн для переходов в ионах из AI состояний различных трехэлектронных конфигураций, вычисленные по теории возмущений и в приближении Хартри — Фока — Паули. Согласие расчетов достаточно хорошее. Дальнейшее увеличение точности расчетов приводит к необходимости учета радиационных эффектов, т. е. релятивистских поправок более высокого порядка $\alpha^3 Z^4$, $\alpha^4 Z^6$, $\alpha^6 Z^8$ и т. д.

О степени влияния релятивистских эффектов на характер спектра многозарядных ионов можно судить также по структуре собственных векторов, получаемых в приближении промежуточной связи. Коэффициенты смешивания термов с различными значениями L и S при фиксированном значении J для конфигурации $1s^22s^22p^53p$ приведены на рис. 3 и 4 в зависимости от Z . Из приведенных результатов видно,

Таблица 3. Энергии (см⁻¹) ионизов изоэлектронной последовательности Ne, отсчитанные от основного состояния 1s² 2s² 2p⁶ 1S₀ (конфигурации 1s² 2s² 2p⁵ 3l)

Конфигурация	Терм	Al IV	Al IV [30]	Si V	Si V [31]	S VI
3s	³ P ₂	616 652	616 644	837 788	818 017	1 371 200
	³ P ₁ — ³ P ₂	1917	1830	2692	2573	4640
	³ P ₀ — ³ P ₁	1733	1586	2653	2481	5787
	¹ P ₁	624 846	624 717	848 638	848 511	1 388 500
3p	³ S ₁	671 728	671 633	906 115	906 252	1 466 500
	³ D ₃	680 845	680 860	917 667	917 929	1 182 600
	³ D ₂ — ³ D ₃	1031	824	1306	1031	1715
	³ D ₁ — ³ D ₂	1426	1299	2029	1905	3594
	¹ D ₂	685 694	685 720	924 032	924 292	1 492 000
	¹ P ₁	686 801	686 959	925 722	925 947	1 495 800
	³ P ₂	688 164	687 831	927 567	927 398	1 499 200
	³ P ₁ — ³ P ₂	919	819	1144	1007	1447
	³ P ₀ — ³ P ₁	—260	—339	—557	—600	—1724
	¹ S ₀	714 065	714 097	963 425	962 960	1 553 800
3d	³ P ₀	759 224	759 193	1 016 043	1 017 629	1 620 200
	³ P ₁ — ³ P ₀	303	404	504	606	1041
	³ P ₂ — ³ P ₁	764	875	1189	1303	2350
	³ F ₄	761 670	761 688	1 019 756	1 021 384	1 626 600
	³ F ₃ — ³ F ₄	573	585	988	967	1794
	³ F ₂ — ³ F ₃	1544	1341	2307	1899	4162
	¹ F ₃	764 193	764 297	1 024 306	1 025 526	1 635 100
	³ D ₁	766 407	766 881	1 028 068	1 029 407	1 642 100
	³ D ₂ — ³ D ₁	637	870	912	1007	1800
	³ D ₃ — ³ D ₂	357	—405	—171	—539	—1205
	¹ D ₂	767 404	767 036	1 028 146	1 029 875	1 642 136
	¹ P ₁	770 860	770 837	1 037 961	1 036 915	1 664 504

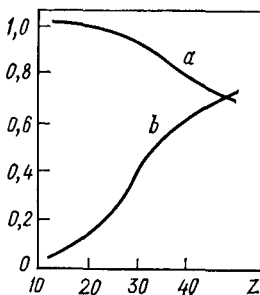


Рис. 3. Собственные векторы как функции Z, полученные при диагонализации матрицы для состояний с J=0 (1s²2s²2p³3p), $\psi_1 = a^4 S_0 + b^3 P_0$

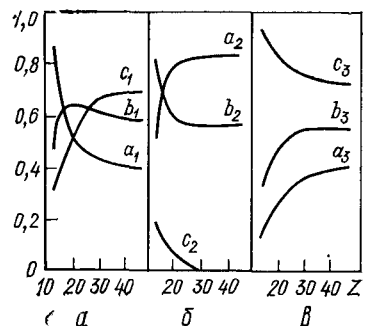


Рис. 4. Собственные векторы для 1s²2s²2p⁵3p(LS₂):

$$a - \psi_1 = a_1 {}^3P_2 + b_1 {}^1D_2 + c_1 {}^3D_2;$$

$$b - \psi_2 = a_2 {}^3P_2 + b_2 {}^1D_2 + c_2 {}^3D_2;$$

$$e - \psi_3 = a_3 {}^3P_2 + b_3 {}^1D_2 + c_3 {}^3D_2;$$

Таблица 4. Переходы $2s\ 2p\ 1s\ LSJ - 1s^2\ 2s^2\ S_{1/2}$; $1s\ 2p^2\ LSJ - 1s^2\ 2p^2P_J$; $1s\ 2s^2\ ^2S_{1/2} - 1s^2\ 2p\ ^2P_J$.

Переходы	Термы*	$J - J'$	$\lambda, \text{Å}$	$\lambda, \text{Å} [32]$
$2s\ 2p\ 1s - 1s^2\ 2s$	$^2P(1) - ^2S$	$1/2 - 1/2$	1,8567	1,8571
	$^2P(2) - ^2S$	$1/2 - 1/2$	1,8557	1,8565
	$^2P(1) - ^2S$	$3/2 - 1/2$	1,8630	1,8633
	$^2P(2) - ^2S$	$3/2 - 1/2$	1,8605	1,8603
	$^4P - ^2S$	$1/2 - 1/2$	1,8743	1,8744
	$^4P - ^2S$	$3/2 - 1/2$	1,8733	1,8730
$1s\ 2s^2 - 1s^2\ 2p$	$^2S - ^2P$	$1/2 - 1/2$	1,8918	1,8880
	$^2S - ^2P$	$1/2 - 3/2$	1,8963	1,8895
$1s\ 2p^2 - 1s^2\ 2p$	$^2S - ^2P$	$1/2 - 1/2$	1,8519	1,8520
	$^2P - ^2P$	$1/2 - 1/2$	1,8623	1,8621
	$^2P - ^2P$	$3/2 - 1/2$	1,8573	1,8573
	$^2D - ^2P$	$3/2 - 1/2$	1,8626	1,8633
	$^4P - ^2P$	$1/2 - 1/2$	1,8717	1,8719
	$^4P - ^2P$	$3/2 - 1/2$	1,8694	1,8697
	$^2S - ^2P$	$1/2 - 3/2$	1,8562	1,8563
	$^2P - ^2P$	$1/2 - 3/2$	1,8667	1,8669
	$^2P - ^2P$	$3/2 - 3/2$	1,8617	1,8616
	$^2D - ^2P$	$3/2 - 3/2$	1,8670	1,8677
	$^2D - ^2P$	$5/2 - 3/2$	1,8654	1,8657
	$^4P - ^2P$	$1/2 - 3/2$	1,8762	1,8763
	$^4P - ^2P$	$3/2 - 3/2$	1,8739	1,8741
	$^4P - ^2P$	$5/2 - 3/2$	1,8722	1,8721

* $^2P(1) = 2s\ 2p\ [^1P]\ 1s\ ^2P$; $^2P(2) = 2s\ 2p\ [^3P]\ 1s\ ^2P$.

что смешивание различных термов в рассматриваемой области Z может быть значительным. При этом следует отметить, что в области больших Z ($Z > 30$), где происходит переход к jj -связи, весовые коэффициенты, соответствующие различным термам, выходят на константы.

Силы линий, силы осцилляторов и вероятности электрических дипольных переходов. Силы линий, вероятности переходов и силы осцилляторов можно определить, имея энергию и матричные элементы радиационных переходов. Воспользуемся для этого теорией возмущений. Используя формулы (8), (9) и (11), а также включая эффекты промежуточной связи, запишем для электрических дипольных переходов общее выражение силы линии

$$S(aLSJ, a', L' S' J') = 3 \left| \sum_{a_1 L_1 S_1 a_2 L_2} B_1 C_J(aLS, a_1 L_1 S_1) \times \right. \\ \left. \times \frac{\mathcal{E}^{(0)}(a_1 L_1 S_1, a_2 L_2 S_1)}{Z - \tau(a_1 L_1 S_1, a_2 L_2 S_1)} C_{J'}(a_2 L_2 S_1, a' L' S') \right| \quad (37)$$

вероятности перехода

$$W(aLSJ, a' L' S' J') = \frac{2}{2J+1} [E_J(aLS) - E_{J'}(a' L' S')]^3 \times \\ \times \left| \sum_{\substack{a_1 L_1 S_1 \\ a_2 L_2}} B_1 C_J(aLS, a_1 L_1 S_1) \times \right. \\ \left. \times \frac{\mathcal{E}^{(0)}(a_1 L_1 S_1, a_2 L_2 S_1)}{Z - \tau(a_1 L_1 S_1, a_2 L_2 S_1)} C_{J'}(a_2 L_2 S_1, a' L' S') \right|^2 3,21 \cdot 10^{10} \text{ с}^{-1} \quad (38)$$

и силы осцилляторов

$$f(aLSJ, a' L' S' J') = \frac{2}{3} \frac{1}{2J+1} [E_J(aLS) - E_{J'}(a' L' S')] \times \\ \times S(aLSJ, a' L' S' J'), \quad (39)$$

где τ — константа экранирования; множитель B_1 включает угловую часть матричного элемента дипольного перехода.

Используя формулы (37)–(39), были проведены систематические расчеты характеристик дипольных переходов. В качестве примера на рис. 5 приведена Z -зависимость силы линий перехода $2s^2 2p^3 - 2s2p^4$. Для получения более полного представления о характере возможных Z -зависимостей расчеты проведены в широком интервале изменения Z ($Z = 10 \div 100$). Из рисунка видно, что характер зависимости от Z может быть самым разнообразным. В интервале $10 \leq Z \leq 20$ применимо приближение LS -связи и поэтому можем говорить о разрешенных и интеркомбинационных переходах. При этом сила линий разрешенных переходов с ростом Z уменьшается как $1/(Z - \alpha)^2$, тогда как для интеркомбинационных переходов ее значение растет пропорционально aZ^4 . В области промежуточных значений Z ($20 \leq Z \leq 60$) наблюдаются самые разнообразные Z -зависимости. Именно в этом интервале изменения Z происходит пересечение уровней, подробно обсуждавшееся в [32]. Естественно, что моменты L и S , а в некоторых случаях и конфигурация a , имеют приближенный характер.

Силы осцилляторов (39) выражаются через силы линий (37) и для переходов с изменением и без изменения главного квантового числа имеют различные Z -зависимости: так, при $n = 0$ величина $f \approx \alpha/Z$, тогда как при $\Delta n \neq 0$ $f \approx \alpha(1 + \frac{\beta}{Z} + \dots)$. Аналогичные отличия в Z -зависимостях получаются и для вероятностей переходов. В качестве примера приведем результаты расчетов всех трех рассматриваемых спектроскопических характеристик для иона РИХ (переход $2s2p^4 LSJ - 2p^5 L'S'J'$) с указанием отклонения этих значений от результатов, полученных в приближении LS -связи. В табл. 5 под каждым значением атомной характеристики приводится вклад относительно верхнего суммарного значения. Сопоставляя эти результаты с рас-

четами в LS -связи, можно оценить отклонение. Как видно из таблицы, наибольшие отклонения имеют для ${}^2S - {}^2P$ -перехода.

Излучение высших мультипольностей. Электрические квадрупольные, магнитно-дипольные и магнитные квадрупольные переходы. Электрические квадрупольные $E2$ - и магнитно-дипольные $M1$ -переходы наблюдаются между состояниями одной и той же конфигурации.

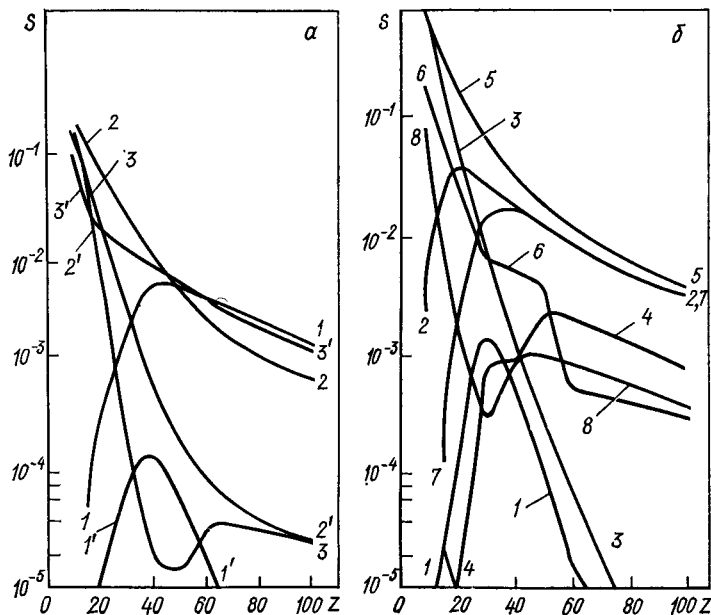


Рис. 5. Z -зависимость сил линий перехода $2s^22p^3LSJ - 2s2p^4L'S'J'$:

$$\begin{aligned}
 a: & 1 - {}^2P \frac{1}{2} - {}^4P \frac{1}{2}; 2 - {}^2P \frac{1}{2} - {}^2S \frac{1}{2}; 3 - {}^2P \frac{1}{2} - {}^2P \frac{1}{2}; 1' - {}^2P \frac{1}{2} - {}^4P \frac{3}{2}; 2' - {}^2P \frac{1}{2} - \\
 & \quad - {}^2D \frac{3}{2}; 3' - {}^2P \frac{1}{2} - {}^2P \frac{3}{2}; \\
 b: & 1 - {}^2D \frac{3}{2} - {}^4P \frac{1}{2}; 2 - {}^2D \frac{3}{2} - {}^2S \frac{1}{2}; 3 - {}^2D \frac{3}{2} - {}^2P \frac{1}{2}; 4 - {}^2D \frac{3}{2} - {}^4P \frac{3}{2}; 5 - {}^2D \frac{3}{2} - \\
 & \quad - {}^2D \frac{3}{2}; 6 - {}^2D \frac{3}{2} - {}^2P \frac{3}{2}; 7 - {}^2D \frac{3}{2} - {}^4P \frac{5}{2}; 8 - {}^2D \frac{3}{2} - {}^2D \frac{5}{2}
 \end{aligned}$$

Часто это переходы между компонентами одной и той же конфигурации. Их изучению посвящено большое число работ. Наиболее обширные данные приводятся в монографиях [33, 34].

Приведем некоторые результаты расчетов вероятностей таких переходов. Так, уровни, относящиеся к конфигурациям, $1s^22p$ и $1s^22s^22p$, распадаются в результате $M1$ и $E2$ переходов, вероятности

Таблица 5. Атомные характеристики для Р IX ($2s\ 2p^4\ LSJ-2p^5\ L'S'J'$)

$LS-L'S$	$J-J'$	S		f		W	
		LS	промежу- точная связь	LS	промежу- точная связь	LS	промежу- точная связь
$^2S-^2P$	$1/2-1/2$	0,075	0,081	0,040	0,043	10	9,8
	$1/2-3/2$	$1/3$ $2/3$	$1/11$ $10/11$	$1/3$ $2/3$	$1/10,5$ $1/1,11$	1 1	$1/2,8$ $1/0,61$
$^2P-^2P$	$1/2-1/2$	1,11	1,10	0,185	0,180	99	126
	$3/2-1/2$						
	$1/2-3/2$	$2/9$	$1/4,2$	$2/3$	$1/1,38$	$2/3$	$1/1,38$
	$3/2-3/2$	$1/9$	$1/8,2$	$1/6$	$1/5,36$	$1/3$	$1/2,56$
		$1/9$	$1/11,1$	$1/3$	$1/3,38$	$1/6$	$1/7,9$
	$5/9$	$1/1,83$	$5/6$	$1/1,22$	$5/6$	$1/1,22$	
$^2D-^2P$	$3/2-1/2$	0,634	0,626	0,084	0,0825	159	172
	$3/2-3/2$						
	$5/2-3/2$	$1/3$	$1/3,2$	$5/6$	$1/1,25$	1	0,198
		$1/15$	$1/11,8$	$1/6$	$1/4,77$	$1/10$	$1/8,1$
	$3/5$	$1/1,67$	1	0,99	0,9	0,88	

которых определяются выражениями

$$\left. \begin{aligned} W(M1) (^2P_{3/2} - ^2P_{1/2}) &= 0,438 \cdot 10^{-12} (Z-\alpha)^9 (Z-\beta)^3 c^{-1}; \\ W(E2) (^2P_{3/2} - ^2P_{1/2}) &= 1,314 \cdot 10^{-22} \frac{(Z-\alpha)^{15} (Z-\beta)^5}{(Z-\tau)^4} c^{-1}, \end{aligned} \right\} \quad (40)$$

где α , β и τ равны соответственно

$$\begin{array}{ll} \alpha = \frac{1s^2 2p}{1,4926} & \alpha = \frac{1s^2 2s^2 2p}{1,9493} \\ \beta = 2,5021 & \beta = 2,5177 \\ \tau = 1,7063 & \tau = 2,3580 \end{array}$$

Вероятности рассматриваемых переходов, как следует из формул (40), очень сильно зависят от Z :

$$W(M1) \sim Z^{12}, \quad W(E2) \sim Z^{16}.$$

При рассмотрении переходов между состояниями, относящимися к конфигурациям с двумя и большим числом электронов во внешних оболочках, ситуация становится гораздо сложнее. Например, для конфигурации $1s^2 2s 2p$ разрешенными являются переходы между компонентами тонкой структуры 3P_J , тогда как переходы между 1P_1 и 3P_J , уровнями происходят лишь за счет эффектов перемешивания 1P_1 3P_1 уровней в приближении промежуточной связи. Z -зависимость

для различных переходов оказывается при этом существенно различной. Так, вероятность переходов $M1$ при изменении Z от $Z = 10$ до $Z = 40$ изменяется следующим образом (c^{-1}):

	$Z = 10$	$Z = 40$
$W(^3P_1 - ^3P_0) =$	$0,199 \cdot 10^{-2}$	$0,159 \cdot 10^5$
$W(^3P_2 - ^3P_1) =$	$0,146 \cdot 10^{-1}$	$0,333 \cdot 10^7$
$W(^1P_1 - ^3P_0) =$	$1,06$	$0,380 \cdot 10^7$
$W(^1P_1 - ^3P_1) =$	$0,781$	$0,215 \cdot 10^7$
$W(^1P_1 - ^3P_2) =$	$1,26$	$0,164 \cdot 10^6$

Аналогичные результаты получены и для других переходов. В табл. 6 приведены вероятности электрического квадрупольного перехода для ионов OII (конфигурация $1s^2 2s^2 2p^3$). Для этого иона имеются еще более значительные различия вероятностей $E2$ -переходов. Так, вероятности $^3P_{3/2} - ^2D_{5/2}$ и $^2P_{1/2} - ^2P_{3/2}$ различаются в $3 \cdot 10^{-24}$ раза. Для ионов $ArXV$ (конфигурация $1s^2 2s 2p$) в табл. 7 приведены вероятности $E2$ - и $M1$ -переходов. Полученные результаты показывают, что основной вклад вносят $M1$ -переходы.

Интересным примером магнитных квадрупольных переходов ($M2$) является радиационный распад АИ состояния $1s2s2p^4 P_{5/2}$ трехэлектронных систем. Скорость такого распада определяется вероятностью магнитного квадрупольного перехода в основное состояние $1s^2 2s^2 S_{1/2}$, которая с увеличением заряда растет как Z^8 . Экспериментально такие переходы были обнаружены в ионах $S XIV$, $Cl XV$ и $Al XI$ [35, 36]. Детальные теоретические исследования $M2$ -переходов в трехэлект-

Таблица 6. Вероятности переходов для OII ($1s^2 2s^2 2p^3$)

$LS - L'S'$	$J - J'$	Настоящий расчет	[36]
$2P - 2D$	$1/2 - 3/2$	0,065	0,090
	$1/2 - 5/2$	0,044	0,061
	$3/2 - 3/2$	0,0325	0,045
	$3/2 - 5/2$	0,0768	0,106
$2P - 2P$	$1/2 - 3/2$	$1,98 \cdot 10^{-25}$	$3 \cdot 10^{-25}$
$3D - 2D$	$3/2 - 5/2$	$1,46 \cdot 10^{-15}$	$1,5 \cdot 10^{-15}$
$2P - 4S$	$1/2 - 3/2$	$10,1 \cdot 10^{-7}$	$7,4 \cdot 10^{-7}$
	$3/2 - 3/2$	$2,17 \cdot 10^{-7}$	$1,5 \cdot 10^{-7}$
$2D - 4S$	$3/2 - 3/2$	$2,55 \cdot 10^{-5}$	$2,66 \cdot 10^{-5}$
	$5/2 - 3/2$	$3,85 \cdot 10^{-5}$	$4,14 \cdot 10^{-5}$

Таблица 7. Вероятности переходов для Ag XV ($1s^2 2s 2p$)

$LSJ - L'S'J'$	Тип перехода	Настоящий расчет	[37]
$^3P_2 - ^3P_1$	M_1 E_2	63,8 $0,399 \cdot 10^{-3}$	62,5 $0,366 \cdot 10^{-3}$
$^3P_2 - ^3P_0$	E_2	$0,106 \cdot 10^{-2}$	$0,103 \cdot 10^{-2}$
$^3P_1 - ^3P_0$	M_1	6,73	7,37
$^1P_1 - ^3P_2$	M_1 E_2	510 0,487	492 0,408
$^1P_1 - ^3P_1$	M_1 E_2	391 0,213	0,345 0,203
$^1P_1 - ^3P_0$	M_1	719	555

ронных системах с релятивистскими и нерелятивистскими волновыми функциями выполнены в работах [37, 38].

Ширины АИ уровней многозарядных ионов. Задача изучения АИ состояний оказывается гораздо сложнее и наряду со спектроскопическими характеристиками, описывающими обычные возбужденные состояния, должна включать определение параметров, описывающих взаимодействие АИ уровней с непрерывным спектром. При этом одной из основных спектроскопических характеристик является собственная ширина АИ уровней, определяющая скорость АИ переходов.

В нерелятивистском приближении ширины АИ уровней определяются межэлектронным электростатическим взаимодействием, тогда как в релятивистской теории, определяя скорость распада АИ уровней, необходимо учитывать как электростатическое, так и магнитные взаимодействия. При этом в ионах малой кратности ионизации можно выделить две группы АИ состояний: а) короткоживущие АИ состояния, которые связаны с непрерывным спектром оператором электростатического взаимодействия и быстро распадаются за время $\tau \leq 10^{-11}$ с и б) метастабильные АИ состояния, безызлучательный распад которых в нерелятивистском приближении запрещен правилами отбора. Эти состояния связаны с непрерывным спектром только магнитными взаимодействиями. Характерное время жизни таких состояний $\tau \leq 10^{-5} - 10^{-7}$ с [39].

Для получения ширины АИ уровней разработаны строгие теоретические методы: метод сильной связи каналов [40], метод Фано [41]. Однако большинство количественных расчетов ширин выполнены в простейшем приближении, когда взаимодействие АИ уровня с непрерывным спектром рассматривается в первом порядке теории возмущений по межэлектронному взаимодействию. В этом случае в рас-

четах ширин АИ уровней можно воспользоваться волновыми функциями, полученными одним из теоретических методов, кратко изложенных в § 2.

Для АИ ширины, определяемой в нерелятивистском приближении как квадрат матричного элемента оператора электростатического взаимодействия, имеем:

$$\Gamma_{\mu}(\gamma, \gamma'; LS) = 2\pi |\langle \Phi_E(\gamma'LS) V \Phi_{\mu}(\gamma LS) \rangle|^2. \quad (41)$$

Здесь $\Phi_{\mu}(\gamma LS)$ — волновая функция АИ уровня, $\Phi_E(\gamma'LS)$ — волновая функция непрерывного спектра, когда один из электронов иона переходит в результате автоионизации в непрерывный спектр. Если АИ состояния исходного иона распадаются на различные состояния остаточного иона, то полная собственная ширина АИ уровня определяется суммой парциальных ширин, соответствующих переходам в определенные конечные состояния

$$\Gamma_{\mu}^{\text{tot}}(\gamma; LS) = \sum_{\gamma'} \Gamma_{\mu}(\gamma, \gamma'; LS). \quad (42)$$

Формулы (41) и (42) приведены без учета релятивистских эффектов, однако их легко обобщить и на более сложные случаи.

Детальный анализ результатов теоретических исследований АИ состояний многозарядных ионов представлен в работах [42–46]. Поэтому ниже ограничимся лишь отдельными иллюстрациями результатов численных расчетов. Так, на рис. 6 приводятся Z-зависимости АИ ширин, полученные в

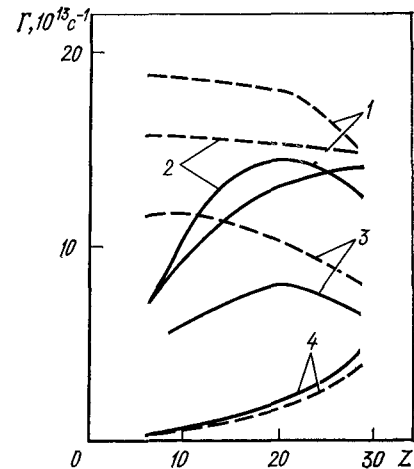


Рис. 6. Z-зависимость ширины АИ уровней:

----- кулоновские функции, ——— хартри-фоковские:

$$1 - (1s2s^2) {}^2S \frac{1}{2}; \quad 2 - (1s2p^2) {}^2D \frac{5}{2};$$

$$3 - (2p2s [{}^3P] 1s) {}^2P \frac{1}{2}; \quad 4 - (2p2s [{}^1P] 1s) {}^2P \frac{1}{2}$$

приближении промежуточной связи на кулоновском и хартри-фоковском базисе [47]. Расчеты показывают, что для ионов с малыми Z ширины, вычисленные с различными волновыми функциями, отличаются довольно сильно. Однако с увеличением Z эти отличия, конечно, уменьшаются и для $Z = 28$ не превышают 10%.

Результаты расчетов, представленных в табл. 8 для АИ состояний ионов железа FeXXV , были получены в четырех вариантах [48]. В первом из них волновые функции и энергии АИ уровней получались решением системы уравнений (30) с учетом операторов электростатического и спин-орбитального взаимодействия на кулоновском базисе 23×23 , включающем 1P_1 , 3P_1 и 3D_1 уровни десяти низших конфигураций: $2lnl'$ ($l = 0, 1, l' = 1, 2, n \leq 5$). Во втором рассматривался лишь оператор электростатического взаимодействия, что соответ-

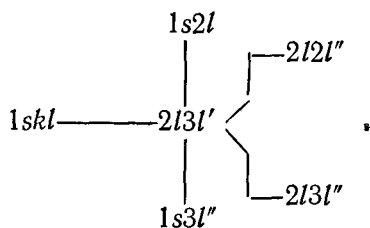
Таблица 8. Энергии возбуждения E (кэВ) и ширина Γ (эВ) автоионизационных $1P_1^{(-)}$ и $3P_1^{(-)}$ состояний гелиподобных ионов Fe XXV, рассчитанные диагонализационным методом и по теории возмущений

Термы	LS-связь		Промежуточная связь						Только вырожденные состояния		Теория возмущений [49]	
	10×10		23×23						E	Γ^{tot}		
	E	Γ	E	Γ_0	Γ_s	Γ^{tot}	$\Gamma_s/\Gamma^{tot}, \%$					
$1P_1^{(-)}$	2s 2p	13,639	0,125	13,641	0,121	$0,417 \cdot 10^{-3}$	0,121	$0,127 \cdot 10^{-2}$	0,34	13,643	0,127	0,129
	23sp —	14,832	$0,228 \cdot 10^{-3}$	14,826	$0,497 \cdot 10^{-3}$	$0,776 \cdot 10^{-3}$	$0,127 \cdot 10^{-2}$	$0,123 \cdot 10^{-2}$	61,10	14,826	$0,123 \cdot 10^{-2}$	$0,112 \cdot 10^{-2}$
	23sp +	14,860	$0,600 \cdot 10^{-1}$	14,862	$0,565 \cdot 10^{-1}$	$0,154 \cdot 10^{-3}$	$0,567 \cdot 10^{-1}$	$0,571 \cdot 10^{-1}$	0,27	14,863	$0,571 \cdot 10^{-1}$	$0,581 \cdot 10^{-1}$
	23d	14,871	$0,313 \cdot 10^{-2}$	14,874	$0,149 \cdot 10^{-2}$	$0,764 \cdot 10^{-4}$	$0,157 \cdot 10^{-2}$	$0,281 \cdot 10^{-2}$	4,87	14,875	$0,281 \cdot 10^{-2}$	
	24sp —	15,262	$0,160 \cdot 10^{-3}$	15,268	$0,254 \cdot 10^{-2}$	$0,193 \cdot 10^{-3}$	$0,273 \cdot 10^{-2}$	$0,274 \cdot 10^{-2}$	7,07	15,269	$0,274 \cdot 10^{-2}$	
	24sp +	15,273	$0,263 \cdot 10^{-1}$	15,277	$0,212 \cdot 10^{-1}$	$0,953 \cdot 10^{-3}$	$0,213 \cdot 10^{-1}$	$0,192 \cdot 10^{-1}$	0,45	15,277	$0,192 \cdot 10^{-1}$	
$3P_1^{(-)}$	2s 2p	13,599	$0,994 \cdot 10^{-2}$	13,590	$0,481 \cdot 10^{-2}$	$0,116 \cdot 10^{-1}$	$0,164 \cdot 10^{-1}$	$0,168 \cdot 10^{-1}$	29,23	13,59113	$0,168 \cdot 10^{-1}$	$0,134 \cdot 10^{-1}$
	23sp +	14,840	$0,494 \cdot 10^{-2}$	14,836	$0,407 \cdot 10^{-2}$	$0,335 \cdot 10^{-2}$	$0,742 \cdot 10^{-2}$	$0,757 \cdot 10^{-2}$	54,85	14,8371	$0,757 \cdot 10^{-2}$	
	23sp —	14,841	$0,149 \cdot 10^{-3}$	14,839	$0,616 \cdot 10^{-3}$	$0,193 \cdot 10^{-2}$	$0,255 \cdot 10^{-2}$	$0,249 \cdot 10^{-2}$	24,26	14,839	$0,249 \cdot 10^{-2}$	
	23d	14,862	$0,251 \cdot 10^{-7}$	14,866	$0,404 \cdot 10^{-3}$	$0,401 \cdot 10^{-5}$	$0,408 \cdot 10^{-3}$	$0,427 \cdot 10^{-3}$	99,02	14,867	$0,427 \cdot 10^{-3}$	
	24sp +	15,265	$0,209 \cdot 10^{-2}$	15,252	$0,130 \cdot 10^{-2}$	$0,560 \cdot 10^{-3}$	$0,186 \cdot 10^{-2}$	$0,171 \cdot 10^{-2}$	69,89	15,252	$0,171 \cdot 10^{-2}$	
	24sp —	15,267	$0,133 \cdot 10^{-3}$	15,265	$0,207 \cdot 10^{-2}$	$0,153 \cdot 10^{-2}$	$0,360 \cdot 10^{-2}$	$0,349 \cdot 10^{-2}$	57,50	15,264	$0,349 \cdot 10^{-2}$	

уется приближению LS -связи, которое позволяет рассматривать независимо состояния 1P_1 , 3P_1 и 3D_1 . При решении системы уравнений (30) в этом приближении для 1P_1 и 3P_1 АИ состояний использовался базис 10×10 . В третьем варианте, как и в первом, учитывалось электростатическое и спин-орбитальное взаимодействие, но лишь между вырожденными в кулоновском приближении конфигурациями. Во всех трех вариантах ширины АИ состояний вычислялись с кулоновской функцией непрерывного спектра в заряде $(Z - 1)$. Последний, четвертый вариант, соответствует учету взаимодействия также только между вырожденными в кулоновском приближении конфигурациями, но с включением полного оператора Брейта и межэлектронного электростатического взаимодействия во втором порядке теории возмущений по $1/Z$. При этом АИ ширины вычислялись с кулоновской функцией непрерывного спектра в заряде Z . Данные, приведенные в табл. 8, показывают, что энергии возбуждения и полные ширины 1P_1 и 3P_1 АИ состояний, вычисленные в различных приближениях, оказываются устойчивыми к выбору волновых функций. При этом парциальные ширины, соответствующие переходам в состоянии непрерывного спектра различной мультиплетности, вычисленные в различных приближениях, отличаются весьма существенно.

Отношение парциальных ширин, соответствующих АИ переходам с изменением мультиплетности, к полной ширине АИ уровня показывает, что более сильно изменяются парциальные ширины триплетных АИ уровней. Сравнение различных вариантов расчета полных ширин АИ уровней указывает на устойчивость полученных результатов к выбору операторов магнитных взаимодействий.

Времена жизни уровней. Для расчета времен жизни уровней необходимо рассмотреть все возможные переходы и распады. Так, например, для уровней конфигурации $2l3l'$ имеем:



Из радиационных переходов наиболее существенными являются, конечно, переходы типа $1-2$ и $1-3$, $2-3$. Вклад переходов с $\Delta n = 0$ на несколько порядков меньше. АИ распад играет существенную роль при малых кратностях ионизации. С увеличением кратности ионизации Γ мало меняется, в то время как $W \approx aZ^4$. Для $Z = 15 \div 25$ обе величины обычно сравниваются и дальше основную роль играют уже радиационные переходы. В ряде случаев АИ распады запрещены в схеме чистой LS -связи и тогда Z -зависимость Γ имеет довольно сложный вид. Иллюстрацией может служить рис. 7, где приведены суммарные значения вероятностей переходов с уровня $2p3p$ 3P_2 . Как видно из рисунка, в интервале $Z = 5 \div 15$ различие всех вероятностей не пре-

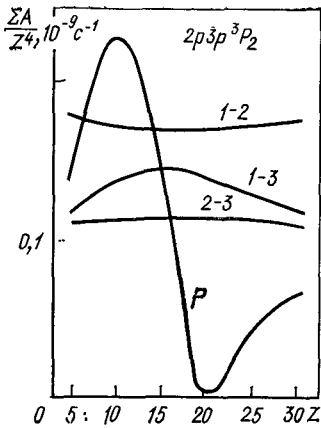


Рис. 7. Сравнение суммарных вероятностей переходов по различным каналам в зависимости от Z

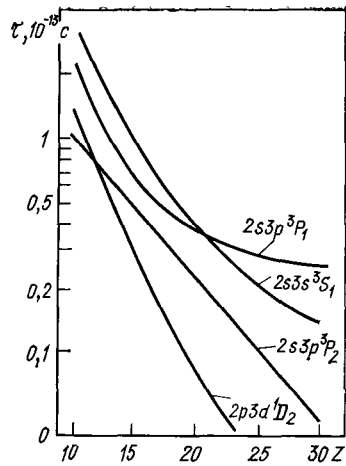


Рис. 8. Времена жизни АИ состояний $2I3I'$ как функция Z

Таблица 9. Время жизни (10^{-9} с) $1s^2 2s^2 2p^5 3p$ LSJ уровней для ионов изоэлектронной последовательности Ne

LS	J	Si V			S VII			Ar IX		Ca XI	
		Настоящая работа	[50]	[51]	Настоящая работа	[50]	[52]	Настоящая работа	[50]	Настоящая работа	[50]
3S	1	2,91	1,52		1,63	0,922		0,952	0,628	0,658	0,463
3D	3	1,73	1,01	$1,5 \pm 0,4$	0,893	0,593	$0,78 \pm 0,06$	0,562	0,411	0,392	0,305
	2	1,75	1,03		0,917	0,634		0,588	0,439	0,424	0,337
	1	1,72	1,03	$1,1 \pm 0,4$	0,893	0,618		0,578	0,415	0,418	0,311
1D	2	1,77	0,95	$1,1 \pm 0,3$	0,885	0,571	$0,7 \pm 0,1$	0,546	0,395	0,377	0,291
1P	1	1,69	0,976		0,885	1,19		0,562	0,435	0,395	0,338
3P	2	1,58	0,85	$1,2 \pm 0,2$	0,800	0,522	$0,78 \pm 0,3$	0,498	0,362	0,342	0,261
	1	1,64	0,854		0,813	0,514	0,6	0,498	0,356	0,342	0,267
	0	1,46	0,801		0,730	0,484		0,450	0,324	0,310	0,241
1S	0	0,575	0,33	$0,43 \pm 0,05$	0,267	0,114	$0,25 \pm 0,01$	0,160	0,075	0,110	0,063

вышает одного порядка. Таким образом, при расчете нужно аккуратно учитывать все каналы распада переходов. На рис. 8 приведена зависимость времен жизни уровней для ряда состояний двухэлектронного элемента.

В табл. 9 приведены времена жизни уровней $1s^2 2s^2 2p^5 3p LSJ$ ионов изоэлектронной последовательности Ne: SiV, SVII, ArIX, CaXI. Для сопоставления даны результаты из других работ, как теоретической [50], так и экспериментальных [51, 52]. Результаты достаточно хорошо согласуются.

Заключение

Подводя общие итоги обсуждавшихся выше работ, следует отметить, что теория спектров многозарядных ионов достигла уровня, который обеспечивает практические потребности многочисленных приложений в данных об основных спектроскопических характеристиках ионов различной кратности ионизации: потенциалах ионизации, энергиях и вероятностях радиационных и безрадиационных переходов. Для теоретической спектроскопии характерно использование современных теоретических методов и широкое применение ЭВМ для систематических исследований различных изоэлектронных последовательностей.

Получение необходимой экспериментальной информации о спектрах многозарядных ионов обеспечивается сочетанием уникальных возможностей плазменных исследований и исследований по физике атомных столкновений. Их дальнейшее развитие уже в ближайшее время позволит получить новые интересные данные о структуре спектров тяжелых многозарядных ионов, для теоретического описания которых необходимо использование релятивистской теории.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Grineva Yu. I., Karev V. I., Korneev V. V. e. a. — In: Proc. of 16 th Cosmic Space Research, Seattle, 1971, p. 243.
2. Beam-foil Spectroscopy. V. 1, 2. Ed. Sellin I. A., Pegg D. J. N. Y., Lond., Plenum Press, 1976.
3. Colloque Cl. — J. Phys. Suppl., (France), 1979, № 2, v. 40.
4. Копонов Е. У. — Physica Scripta, 1978, v. 17, p. 425.
5. Воико В. А., Фаенов А. Я., Пикюз С. А. — J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 1978, v. 19, p. 11.
6. Аглицкий Е. В. и др. — Квантовая электроника, 1974, т. 1, с. 1731.
7. Burkhalter P. G., Dozier C. M., Nagel D. J. — Phys. Rev., 1977. v. 15A p.700.
8. Zigler A. e. a. — J. Opt. Soc. Amer., 1980, v. 70, p. 129.
9. Пресняков Л. П. — Успехи физ. наук, 1976, т. 119, с. 49.
10. Спектроскопия многозарядных ионов. М.: АН СССР. Отделение общей физики и астрономии. Научный совет по спектроскопии, 1980.
11. Fischer C. F. The Hartree — Fock Method for Atoms. N. Y., Lond., Sydney, Toronto, 1977.
12. Балашов В. В. и др. — Оптика и спектроскопия, 1970, т. 28, с. 859.
13. Сафронова У. И., Толмачев В. В. — Лит. физ. сб., 1967, т. 7, с. 53.
14. Сафронова У. И., Толмачев В. В. — Там же, 1964, т. 4, с. 13.
15. Vainshtein L. A., Safronova U. I. — Atomic data and nuclear data tables, 1978, v. 21, p. 49.

16. Коионов Э. Я., Сафронова У. И. — Оптика и спектроскопия, 1977, т. 43, с. 3.
17. Богданович П. О. и др. — В кн.: Спектроскопия многозарядных ионов. М.: 1980, с. 30.
18. Bogdanovich P. O., Merkelis G. V., Rudzikas Z. B. e. a. — Phys. Scripta, 1978, v. 17, p. 549.
19. Толмачев В. В. Теория ферми-газа. М.: Изд. МГУ, 1975.
20. Боголюбов М. М. Лекции по квантовой статистике. Киев: Радянська школа, 1949, гл. II.
21. Швебер С. Введение в релятивистскую квантовую теорию поля/ Пер. с англ. М.: Изд-во иностр. лит., 1963.
22. Иваниов Е. П., Сафронова У. И. Препринт ИСАН № 11. М.; 1973.
23. Clementy E. — J. Chem. Phys., 1963, v. 38, p. 2248.
24. Nussbaumer H. — J. Phys., 1976, v. 9B, p. 1757.
25. Степаиов К. Л. — Оптика и спектроскопия, 1975, т. 38, с. 3.
26. Балашов В. В., Липовецкий С. С., Павличенков А. В. и др. — Вестн. Моск. ун-та. Сер. физ. астр., 1971, № 1, с. 65.
27. Conneely M. J., Lipsky L. — J. Phys., 1978, v. IIB, p. 4135.
28. Сафронова У. И. — Оптика и спектроскопия, 1972, т. 33, с. 813.
29. Moore C. Ionization potentials and ionization limits derived from the analysis of optical spectra, Washington, NSRDS—NBS-34, 1970.
30. Kaufman V., Artri M. Ch., Brillet W. — J. Opt. Soc. Amer., 1974, v. 64, p. 197.
31. Artri M. Ch., Kaufman V. — J. O.S.A., 1975, v. 65, p. 594.
32. Сафронова У. И., Иванова А. Н. — Оптика и спектроскопия, 1970, т. 27, с. 193.
33. Wiese W. L., Smith M. W., Miles B. M. — Atomic transition probabilities, Washington, NSRDS-NBS 1969, v. 2, p. 22.
34. Wiese W. L. — Atomic transition probabilities, Washington, NBS-4, 1966, v. I
35. Cocks J. R., Curnutte B., Randall R. — Phys. Rev., 1974, v. 9A, p. 1823.
36. Mowat J. R., Jones K. W., Johnson B. M. — Ibid., 1976, v. 14A, p. 1109.
37. Сафронова У. И., Сеиашенко В. С., Шавтвалишвили И. А. — Изв. вузов. Физика, 1977, т. 12, с. 13.
38. Сеиашенко В. С., Симонов Г. А. — Журн. прикл. спектроскоп., 1980, т. 32, с. 117.
39. Сеиашенко В. С. — В кн.: Лекции I Всесоюзной школы по физике электронно-атомных столкновений. Т. 2. Харьков, 1969, с. 52.
40. Burke P. G., McVicar D. — Proc. Phys. Soc., 1965, v. 86, p. 989.
41. Fano V. — Phys. Rev., 1961, v. 124, p. 1866.
42. Вайнштейн Л. А., Сафронова У. И. — В сб. Спектроскопические константы атомов. М.: АН СССР. Отделение общей физики и астрономии. Научный совет по спектроскопии, 1974, с. 5.
43. Safronova U. I., Lisina T. T. — Atomic data and nuclear data tables, 1979, v. 24, p. 49.
44. Сеиашенко В. С. Физика электронных и атомных столкновений. — В кн.: Лекции IV Всесоюзной школы по физике электронно-атомных столкновений М.: Изд. МГУ, 1978, с. 92.
45. Сафронова У. И., Сеиашенко В. С. — Журн. прикл. спектроскоп., 1978, т. 29, с. 900.
46. Сафронова У. И., Сеиашенко В. С. — Там же, 1978, т. 29, с. 699.
47. Bhalla C. P., Gabriel A. H., Presnyakov L. P. — Monthly Notices Roy Astron. Soc., 1975, v. 172, p. 359.
48. Varg A., Иваниов П. Б., Сеиашенко В. С., Черкашин Е. Ю. Вестн. Моск. ун-та. Сер. физ. астр., 1981, т. 22, с. 86.
49. Вайнштейн Л. А., Сафронова У. И. Препринт ИСАН № 6, М.: 1975,
50. Grance M. — Atomic data, 1973, v. 5, p. 185.
51. Garnir H. P. e. a. — J. Opt. Soc. Amer., 1977, v. 67, p. 751.
52. Garnir H. P., Baudinet — Robinet V., Dumont P. — Physica Scripta, 1978, v. 17, p. 463.

ВОЗБУЖДЕНИЕ И ИОНИЗАЦИЯ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ ЭЛЕКТРОНАМИ

В. А. Базылев, М. И. Чибисов

Введение

Процессы с участием многозарядных ионов изучены к настоящему моменту в значительно меньшей степени, чем процессы с нейтральными атомами. Это объясняется трудностями получения ионов большой кратности. В условиях «чистого» эксперимента (эксперименты типа пучок—газ или пучок — пучок) изучались ионы кратности не более 5. Лишь в отдельных редких случаях изучались ионы кратности около 15. В условиях плохо контролируемого «пассивного» эксперимента (разряд, плазма, «плазменная точка») наблюдались и изучались более глубоко ионизованные ионы с кратностью порядка 30—40.

Теоретические исследования процессов с многозарядными ионами ведутся уже 10—15 лет. Они связаны в основном с потребностями астрофизики. Лишь в последние 5—7 лет поток информации о процессах с многозарядными ионами сильно возрос в связи с возникшей проблемой примесей в термоядерных установках.

Подавляющей большинством задач физики атомных столкновений, к которым относятся обсуждаемые процессы возбуждения и ионизации многозарядных ионов электронами, не имеет точного аналитического решения. Эти задачи относятся к разряду теории многих тел. В задачах о рассеянии электронов на нейтральных атомах нет какого-либо общего малого параметра, при разложении по которому можно было бы построить приближенное решение. Исключением является лишь область больших скоростей столкновения v , когда можно произвести разложение по степеням малого параметра v^{-1} . Этот случай носит название борновского приближения.

При взаимодействии электронов с многозарядными ионами ситуация, как мы увидим ниже, более благоприятная.

Везде в этой главе, где не оговорено особо, используется система атомных единиц измерения ($e = m_e = \hbar = 1$), в которой за единицу длины принят борковский радиус $a_0 = 5,29 \cdot 10^{-9}$ см, скорости — $v_0 = 2,19 \cdot 10^8$ см/с, времени — $\tau_0 = a_0/v_0 = 2,42 \cdot 10^{-17}$ с.

Многие свойства многозарядных ионов удобно рассматривать для так называемых изоэлектронных рядов. Под ними понимаются последовательности ионов с одинаковым количеством электронов. Например, H , He^+ , Li^{++} образуют последовательность водородоподобных ионов, He , Li^+ , Be^{++} — гелийподобных ионов и т. д. Изоэлектронный ряд мы будем обозначать атомным символом в фигурных скобках: $\{H\}$ — водородподобные ионы, $\{He\}$ — гелийподобные ионы и т. д.

§ 1. О методе Кулон — Борна с обменом (КБО). Резонансы. Релятивизм

Для расчетов сечений возбуждения многозарядных ионов электронами используется соответствующую теорию возмущений при всех энергиях столкновения, в том числе и в припороговой области. В качестве малого возмущения можно рассматривать взаимодействие налетающего электрона со связанным (или с несколькими связанными) в ионе. Это взаимодействие мало по сравнению с взаимодействием налетающего электрона с кулоновским полем иона. Иными словами, в рассматриваемой задаче имеется малый параметр Z_i^{-1} , где Z_i — заряд иона. Этот параметр для расчета характеристик связанных состояний уже использовался в предыдущей статье. В расчетах же по неупругому взаимодействию электронов с ионами не было дано четкого обоснования теории возмущений, и, по этой причине, очень часто неоправданно использовались значительно более сложные методы. Поэтому следует подробно обсудить вопрос о применимости теории возмущений к задаче рассеяния.

Для анализа явлений, происходящих при рассеянии электрона на атомной частице, часто используют представления классической механики. И налетающий, и связанный электроны рассматривают как классические точечные частицы (так называемый бинарный классический подход). Такой подход, несмотря на грубость, дает качественно правильные выводы. На основании классической механики легко прийти к неверному выводу о том, что теория возмущений неприменима. Согласно классической механике, для того чтобы обменяться энергией ΔE , электроны должны сблизиться на относительное расстояние $r_{12} \sim (\Delta E)^{-1}$. Потенциальная энергия их взаимного расталкивания будет порядка ΔE . Для применимости теории возмущений необходимо, чтобы эта энергия была бы много меньше энергии взаимодействия электрона с полем иона Z_i/r , где r — расстояние электрона от ядра. Взаимодействие электронов существенно в области порядка размеров орбиты связанного электрона, т. е. Z_i/J , где J — потенциал ионизации связанного электрона. Тогда средняя энергия взаимодействия электрона с ионами — порядка J . Таким образом, видно, что теория возмущений неприменима, поскольку для большинства переходов связанного электрона $\Delta E \sim J$.

При бинарном классическом подходе получается, что играют роль относительно малые межэлектронные расстояния. В квантовой механике положение иное. Расстояние между частицами вообще не может быть определено с погрешностью, меньшей дебройлевской длины волны. Для связанного электрона роль длины волны играет расстояние между соседними узлами волновой функции, которое порядка размера орбиты, примерно равно Z_i/J . Межэлектронное взаимодействие следует рассматривать для расстояний порядка длины волны, т. е. в среднем $r_{12}^{-1} \approx J/Z_i$. Энергия взаимодействия должна быть много меньше энергии взаимодействия с ионом, которое по-прежнему порядка J . Отсюда получаем условие применимости теории возмущений при квантовомеханическом подходе: $Z_i \gg 1$.

Таким образом, в квантовой механике в неупругое взаимодействие основной вклад вносят относительно большие межэлектронные расстояния, так что теория возмущений оказывается справедливой при $Z_i \gg 1$.

Если N число связанных электронов иона мало по сравнению с зарядом ядра $Z(N \ll Z)$, то в нулевом приближении можно считать, что налетающий электрон движется в кулоновском поле ядра Z/r , а взаимодействие со всеми связанными электронами является малым возмущением, вызывающим переходы. Такой подход наиболее последователен, так как при этом волновые функции всех возможных состояний системы ион + налетающий электрон являются собственными функциями одного и того же гамильтониана. В частности, волновые функции начального и конечного состояний ортогональны друг другу также и с учетом обмена.

Метод квантовомеханического расчета по указанной теории возмущений называют обычно методом Кулон — Борна с обменом (КБО). Он отличается от борновского приближения тем, что вместо плоских волн для налетающего и рассеянного электронов используются кулоновские волновые функции в поле ядра или иона. Если обмен не учитывается, то соответствующий метод обозначают КБ.

Если число связанных в ионе электронов велико — порядка заряда ядра и заряда иона, то для взаимодействия налетающего электрона с ионом можно использовать так называемое статическое приближение. В этом приближении считают, что налетающий электрон не возмущает состояния связанных электронов. Это оправдано тем, что энергия взаимодействия связанных электронов между собой и ядром много больше их взаимодействия с одним налетающим электроном. В практических расчетах для статического поля ионов иногда используют приближение Томаса — Ферми.

Из практики расчетов сечений возбуждения нейтральных атомов электронами известно, что в борновском приближении вклад в сечение отдельных моментов рассеиваемой электронной волны может превышать теоретический предел для той области энергий, где теория возмущений неприменима. Поэтому в некоторых случаях борновские расчеты возбуждения нейтральных атомов сильно завышают сечения вблизи порога. Для устранения этого недостатка прибегают к искусственному приему — унификации борновского приближения. Цель этой операции — ограничить вклад указанных выше моментов теоретическим пределом. Согласно работе [1] для этого можно производить перенормировку вычисленного сечения. Согласно Ситону [2] для этого следует вычислять матрицу реакций, что автоматически обеспечивает унитарность матрицы рассеяния. Оба способа равноценны и имеют смысл лишь тогда, когда теория возмущений в несколько раз завышает результат.

При возбуждении многозарядных ионов, когда $Z_i \ll 1$, вклады любых моментов не превышают теоретический предел. Поэтому в унификации нет надобности. Ее применение означает при этом превышение точности, которое в большинстве случаев мало сказывается на количественном результате. Установить, при каких конкретно значе-

ниях зарядов ионов начинает работать теория возмущений, можно, вычислив следующее приближение, или каким-либо другим косвенным путем.

Для ионов небольших кратностей используют другие методы расчетов, опробованные для рассеяния электронов на нейтральных атомах. Некоторые из них описаны в [3].

Хотя метод КБО значительно проще многих других, реализовать его можно практически только численно. Наиболее распространен способ вычисления сечения методом КБО — разложением по моментам налетающего электрона. Подробное изложение этого метода см. в статье [4].

Рассмотрим вкратце математическую постановку задачи о неупругом рассеянии электрона на положительном водородоподобном ионе, простейшем из всех ионов.

В нерелятивистском приближении полный гамильтониан системы: водородоподобный ион + налетающий электрон равен:

$$\hat{H} = \hat{h}(Z, r_1) + \hat{h}(Z, r_2) + 1/r_{12}; \quad (1)$$

$$\hat{h}(Z, r) = -\frac{\Delta}{2} - \frac{Z}{r}. \quad (2)$$

Волновые функции нулевого приближения являются собственными функциями гамильтониана \hat{h} . Они равны симметризованным (в зависимости от значения спина системы $e + \{\hat{H}\}$) произведениям одноэлектронных функций ψ , являющихся решениями уравнений:

$$[\hat{h}(Z, r) - E_n] \psi_n = 0; \quad (3)$$

$$[\hat{h}(Z, r) - k^2/2] \psi_k = 0, \quad (4)$$

где E_n, ψ_n — энергия и волновая функция n -го связанного состояния иона; $k^2/2, \psi_k$ — энергия и волновая функция налетающего электрона. Решение уравнения (4), имеющее асимптотику $\psi_k \rightarrow \exp(ikr)$ (при $r \rightarrow \infty$), равно [5]:

$$\psi_k = \exp\left(\frac{\pi Z}{2k}\right) \Gamma\left(1 - \frac{iZ}{k}\right) \exp(ikr) F\left(\frac{iZ}{k}; 1; i(kr - kr)\right), \quad (5)$$

где $F(\dots)$ — вырожденная гипергеометрическая функция. Полное Q_{0n} и дифференциальное $Q_{0n}(\theta)$ сечения возбуждения иона с уровня 0 на уровень n равны:

$$Q_{0n} = 2\pi \int Q_{0n}(\theta) \sin \theta d\theta; \quad (6)$$

$$Q_{0n}(\theta) = \frac{k_n}{k_0} \left[\frac{1}{4} |f(\theta) + g(\theta)|^2 + \frac{3}{4} |f(\theta) - g(\theta)|^2 \right], \quad (7)$$

где k_0 и k_n — начальный и конечный импульсы налетающего электрона; θ — угол рассеяния. Прямая $f(\theta)$ и обменная $g(\theta)$ амплитуды

рассеяния равны:

$$f(\theta) = \frac{1}{2\pi} \int \psi_n^*(r_2) \psi_0(r_2) \psi_{k_0}(r_1) \psi_{k_n}^*(r_1) \frac{dr_1 dr_2}{r_{12}}; \quad (8)$$

$$g(\theta) = \frac{1}{2\pi} \int \psi_n^*(r_1) \psi_0(r_2) \psi_{k_0}(r_1) \psi_{k_n}^*(r_2) \frac{dr_1 dr_2}{r_{12}}. \quad (9)$$

Выписанные формулы соответствуют строгой постановке задачи в теории возмущений. В качестве возмущения в формулах (8) и (9) фигурирует только межэлектронное взаимодействие, что соответствует физике неупругого взаимодействия электронов.

Часто в расчетах по методу КБО используют функции $\psi_k(Z-1; r)$, считая ядро полностью экранированным связанным электроном. Такой учет является, во-первых, превышением точности. Во-вторых, при попадании налетающего электрона внутрь оболочки связанного электрона экранировка не может быть полной. Кроме того, при такой постановке задачи волновые функции начального и конечного состояний неортогональны друг другу. Однако при $Z \gg 1$ погрешности от такого рода некорректностей в постановке задачи невелики ($\sim Z^{-1}$).

Волновая функция (5) нормирована так, что при $r \rightarrow \infty$ имеем $\psi_k \rightarrow \exp(ikr)$. При приближении к порогу эта функция для конечного состояния ($k_n \rightarrow 0$) в области координат $r < k_n^{-1}$ (т. е. в зоне реакций) расходится пропорционально $k_n^{-1/2}$. Тогда из (7)–(9) следует, что сечение реакции $0 \rightarrow n$ в пороге ($k_n = 0$) имеет конечное значение. Сечение обратного процесса девозбуждения $n \rightarrow 0$ очень медленными электронами ($k_n \rightarrow 0$) расходится как k_n^{-2} . Этот результат следует также и из принципа детального равновесия

$$Q_{0n}/k_n^2 = Q_{n0}/k_0^2. \quad (10)$$

Расходимость сечения девозбуждения объясняется притяжением кулоновского поля иона, которое эффективно увеличивает поток электронов в зоне реакции.

Конечность сечения возбуждения в пороге и расходимость сечения девозбуждения объясняются только наличием кулоновского притяжения на больших расстояниях между ионом и налетающим электроном. Следовательно, эти свойства имеют место при рассеянии электронов на любом положительном ионе.

Установим зависимость сечения возбуждения вблизи порога от параметров иона. Сечение по порядку величины равно произведению среднего квадрата геометрического размера R_0 начального состояния иона на вероятность w_{0n} возбуждения перехода $0 \rightarrow n$, если налетающий электрон уже попал внутрь оболочки иона, т. е. имеем $Q_{0n} \sim R_0^2 w_{0n}$. Согласно теории возмущений $w_{0n} \sim [(\bar{r}_{12}^{-1})/\Delta E_{0n}]^2$. Очевидно, $(\bar{r}_{12}^{-1}) \sim R_0^{-1}$. Тогда получаем хорошо известную оценку сечения вблизи порога

$$Q_{0n} \simeq (1/\Delta E_n)^2. \quad (11)$$

При увеличении энергии E налетающего электрона сечение уменьшается по-разному в зависимости от свойств перехода $0 \rightarrow n$. Если

переход разрешен в дипольном приближении, то $Q_{0n} \sim E^{-1} \ln E$ ($E \gg \gg \Delta E$). Это наиболее медленное убывание сечения. Для других переходов сечение убывает быстрее [1].

Поведение сечений при больших энергиях столкновения $E \gg \Delta E$ можно определить уже в чисто борновском приближении. Дело в том, что средняя энергия взаимодействия электрона с ионом на расстояниях порядка размера орбиты или большего близка или меньше потенциала ионизации J . При $\Delta E \approx J$ тогда выполняется и неравенство $E \gg J$, которое совпадает с определением области применимости борновского приближения.

Оценка (11) справедлива для любых переходов. Для переходов с изменением главного квантового числа $\Delta E \simeq c_1 Z^2$, так что $Q_{0n} \sim \sim Z^4 c_1^{-2}$. Отметим, что константа c_1 для большинства ионов, как правило, очень мала: $c_1 \ll 1$. Для переходов без изменения главного квантового числа, но с изменением орбитального момента, $\Delta E \simeq \simeq c_2 Z$ для ионов, имеющих остов (например, переход $2s - 2p$ у ионов $\{Li\}$), так что сечение порядка Z^{-2} .

При расчетах сечений возбуждения и ионизации часто вводят так называемую силу столкновения $\Omega(E)$. Сечение процесса связано с этой величиной следующим соотношением:

$$Q_{0n} = \frac{\pi}{g_0} \frac{\Omega(E)}{E}, \quad (12)$$

где g_0 — статистический вес начального состояния.

Перейдем к вопросу о резонансах. В очень узких областях энергий столкновения сечения упругого и неупругого рассеяния имеют резкие скачки, обусловленные образованием автоионизационных (АИ) состояний систем из налетающего электрона и иона. Эти промежуточные состояния аналогичны компаунд-системам в ядерной физике. АИ состояния образуются в результате возбуждения внутреннего электрона и перехода налетающего электрона на связанную орбиту. Время жизни этого состояния много больше периодов обращения образующих его электронов на дискретных уровнях. Это обстоятельство эффективно увеличивает время взаимодействия налетающего электрона с ионом; что и приводит к всплескам на сечениях. Распад АИ состояния в начальный канал приводит к резонансам в упругом рассеянии. Эти резонансы были изучены А. И. Базем [6]. Если при распаде АИ состояния ион не возвращается в начальное состояние, а переходит в другое (возбужденное) состояние, то произойдет неупругий переход. Общие свойства таких резонансов в неупругом рассеянии изучались М. К. Гайлитисом [7], Л. П. Пресняковым и А. М. Урновым [8], а также другими авторами.

Число АИ состояний системы ион + налетающий электрон бесконечно. Они образуют кулоновские сгущения вблизи энергии возбуждения каждого возбужденного уровня иона. Эти состояния, вообще говоря, могут перекрываться, т. е. их энергетическая ширина Γ может быть порядка разности ΔE энергий АИ состояний или меньше.

Если эти состояния разрешены ($\Gamma \ll \Delta E$), то для описания резонансного рассеяния можно использовать теорию Брейта — Вигнера

(см., например, [5]), согласно которой резонансное сечение перехода иона из состояния 1 и 2 равно

$$Q_{1 \rightarrow 2}^{\text{рез}} = \frac{\pi}{E} \frac{2l+1}{2} \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{(E-E_1)^2 + \Gamma^2/4}, \quad (13)$$

где l — резонирующий момент налетающего иона; E и E_1 — энергии соответственно налетающего электрона и АИ состояния; Γ_1 и Γ_2 — ширины АИ распада по входному и выходному каналам соответственно; Γ — полная ширина данного АИ состояния, включающая и ширину излучательного распада.

Интенсивность возбуждения ионов плазменными электронами описывается скоростью реакции \mathcal{K} , связанной с сечением Q соотношением

$$\mathcal{K} = \int Qv \frac{df}{dE} dE, \quad (14)$$

где df/dE — функция распределения плазменных электронов по энергии.

Определим вклад резонансного рассеяния в скорость процесса. Для этого подставим (13) в (14) и проинтегрируем только резонансный множитель в (13), полагая все остальные множители равными их значениям при $E = E_1$:

$$\mathcal{K}_{\text{рез}} = \frac{\pi^2 (2l+1)}{E_1} \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\Gamma} v_1 \left. \frac{df}{dE} \right|_{E=E_1}. \quad (15)$$

Полный вклад всех АИ состояний в рассматриваемый процесс равен сумме $\mathcal{K}_{\text{рез}}$, определяемых формулой (15), по всем начальным каналам, отмеченным индексом 1. Строго говоря, такое суммирование обосновано только для случая, если резонансы не перекрываются между собой. Если резонансы перекрываются, то энергетическая зависимость резонансного сечения не равна просто сумме выражений (13). Однако полный вклад резонансов должен с достаточной точностью определяться суммой выражений (15). Это можно качественно пояснить тем, что при наличии малого параметра Z_i^{-1} сохраняют свой смысл ширины отдельных (хотя и перекрывающихся) резонансов.

Сравним теперь сечения возбуждения: потенциального, определяемого формулой (6) и оценкой (11), и резонансного (13). Как видно из (13), резонансное сечение при $E = E_1$ равно по порядку величины $Q_{1 \rightarrow 2}^{\text{рез}} \simeq \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\Gamma^2} E_1^{-1}$. Тогда в резонансе отношение этого сечения к потенциальному [при использовании оценки (11)] равно:

$$\left. \frac{Q_{1 \rightarrow n}^{\text{рез}}}{Q_{1n}} \right|_{E=E_1} \sim \frac{\Delta E_n^2 \Gamma_1 \Gamma_2}{E_1 \Gamma^2}. \quad (16)$$

Если вероятность излучательной стабилизации АИ состояния мала, то $\Gamma_1 \Gamma_2 / \Gamma^2 \sim 1$ (при $\Gamma_1 \sim \Gamma_2$, $\Gamma \simeq \Gamma_1 + \Gamma_2$).

Энергия E_1 АИ состояний, которые могут вносить вклад в неупругое рассеяние, порядка потенциала ионизации: $E_1 \sim J$. Для возбуждения переходов с изменением главного квантового числа ΔE_n

тоже порядка J . Следовательно, для этих переходов отношение (16) порядка $J \sim c_1 Z_i^2 \gg 1$, т. е. в резонансе сечение возрастает очень сильно. Для переходов без изменения главного квантового числа, но с изменением орбитального момента у сложных ионов $\Delta E_n \sim c_2 Z_i$ и отношение (16) для этих переходов не зависит от Z_i и, вообще говоря, порядка единицы. Оно может быть лишь численно большим в зависимости от абсолютных значений констант c_1 и c_2 .

Для возбуждения некоторых переходов у некоторых ионов сечение оказывается аномально малым из-за случайной численной малости матричного элемента от межэлектронного взаимодействия. Для этих

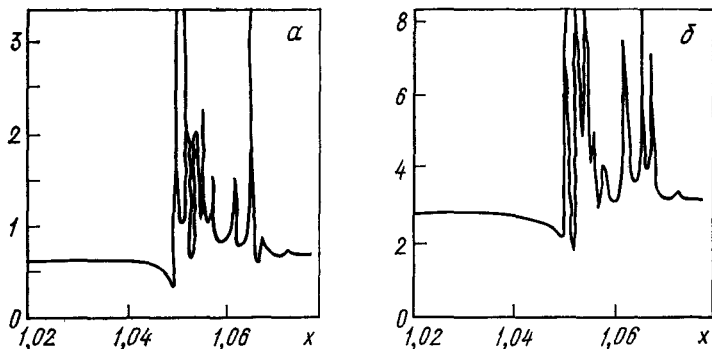


Рис. 1. Резонансная структура в приведенной силе столкновения $Z^2\Omega$ электрона с водородоподобным ионом Ne^{9+} :

α — переход $1s \rightarrow 2s$; δ — переход $1s \rightarrow 2p$. Расчет методом сильной связи атомных состояний $1s, 2s, 2p$ и автоионизационных $3s^2, 3p^2, 3d^2$ [9]; $x = E/\Delta E$:

переходов вклад резонансного рассеяния особенно велик [8]. Исследование резонансного рассеяния еще далеко от своего завершения.

На рис. 1 показана резонансная структура в приведенной силе столкновения $Z^2\Omega$ [см. формулу (12)], вычисленной Хейесом и Ситонем [9] для водородоподобного иона Ne^{9+} с учетом атомных состояний $1s, 2s, 2p$ и нелетающего электрона, и АИ состояний $3s^2, 3p^2, 3d^2$. На рис. 2 показана тоже резонансная структура, но уже у сечения возбуждения перехода $2s \rightarrow 2p$ у литийподобного иона C^{3+} . Расчет произведен в работе [10] методом сильной связи. Представленные на этих рисунках данные качественно согласуются с проведенной выше оценкой резонансного рассеяния: резонансные всплески на сечении возбуждения сильного перехода $2s \rightarrow 2p$ без изменения главного квантового числа у литийподобного иона углерода заметно меньше, чем такие же всплески на сечениях возбуждения переходов $1s \rightarrow 2s, 2p$ водородоподобного иона неона.

С ростом заряда иона Z_i возрастает вероятность излучательной стабилизации промежуточного АИ состояния. Вероятность АИ распада практически не зависит от Z_i , а вероятность дипольно разрешенных излучательных переходов растет пропорционально Z_i^4 . Для нейтральных атомов или ионов с небольшими Z_i вероятность автоио-

низации, как правило, много больше вероятности излучения. Когда по мере роста Z_i вероятность излучения догоняет и становится больше вероятности АИ распада, второй множитель в (16) становится малым, так как полная ширина Γ содержит в качестве слагаемого и излучательную ширину. При больших Z_i , таким образом, резонансное возбуждение подавляется излучательной стабилизацией, которая приводит к диэлектронной рекомбинации. Это происходит обычно при $Z_i \approx 15 \div 20$.

Проанализируем теперь вклады резонансного и потенциального рассеяния в константу скорости процесса \mathcal{K} . При $E \sim \Delta E$ скорость

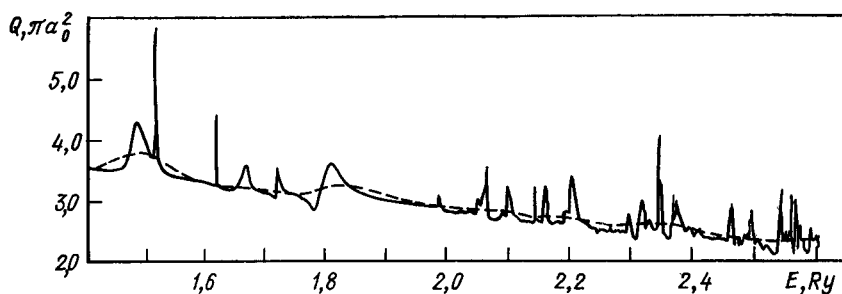


Рис. 2. Сечение возбуждения электронами перехода $2s \rightarrow 2p$ у иона C^{3+} , вычисленное методом сильной связи [10] с включением АИ состояний иона C^{2+} (пунктир — усредненное сечение)

столкновения $v \sim \sqrt{\Delta E}$, поэтому для прямого, потенциального рассеяния $\mathcal{K} \sim (\Delta E)^{-3/2}$. Для оценки вклада резонансного рассеяния заметим, что производная функции распределения $\frac{df}{dE} \sim \frac{1}{\bar{E}}$, где \bar{E} — средняя энергия плазменных электронов. Эта энергия пропорциональна температуре электронов при максвелловской функции распределения. В наиболее интересной области значений $\bar{E} \sim \Delta E$ мы получаем из формулы (15): $\mathcal{K}_{\text{рез}} \sim \frac{v_1}{E_1 \Delta E_1} \frac{\Gamma_1 \Gamma_2}{\Gamma}$. Первый множитель этого произведения $\sim (\Delta E)^{-3/2}$, т. е. порядка потенциального рассеяния. Второй множитель всегда мал: $\Gamma_1 \Gamma_2 / \Gamma \ll 1$ из-за численной малости значений АИ ширин. Таким образом, хотя сечение в резонансе много больше потенциального сечения, вклад в константу скорости отдельного резонанса относительно мал. Эта малость объясняется узостью резонанса. Суммирование по всем резонансам несколько увеличивает $\mathcal{K}_{\text{рез}}$, но все же она остается небольшой. Так, для показанных на рис. 1 переходов в водородоподобном ионе неона Хейес и Ситон [9] нашли, что этот вклад порядка 10% для перехода $1s - 2p$ и $\sim 20\%$ для $1s - 2s$. Для перехода $2s - 2p$ у литийподобного углерода C^{3+} (см. рис. 2) авторы работы [10] оценили $\mathcal{K}_{\text{рез}} \approx 5\%$. Когда прямое сечение аномально мало, относительная роль резонансного рассеяния возрастает. Количество конкретных расчетов, учитывающих резонансное рассеяние, относительно невелико.

Таким образом, мы видим, что в большинстве случаев вкладом резонансов в усредненную характеристику — скорость процесса \mathcal{K} — можно пренебречь.

Обсудим теперь вкратце релятивистские эффекты. Как известно, эти эффекты, например, для нейтрального атома водорода малы, но с ростом Z_i сильно возрастают. Необходимо поэтому выяснить, при каких Z_i эти эффекты становятся существенными.

В задаче о неупругом рассеянии релятивистские эффекты проявляются как в самом взаимодействии налетающего и связанного электронов, так и в свойствах возбуждаемого иона. Оба эти проявления влияют на вероятность неупругого рассеяния.

В релятивистской постановке задачи, как и в нерелятивистской, применима теория возмущений по межэлектронному взаимодействию, которое должно учитывать релятивистские эффекты: запаздывание и магнитное взаимодействие. Оператор релятивистского межэлектронного взаимодействия имеет вид

$$\hat{V}_{12} = r_{12}^{-1} (1 - \alpha_1 \alpha_2) \exp i \frac{E_1 - E_2}{c} r_{12}, \quad (17)$$

где α — матрицы Дирака. Именно с помощью этого взаимодействия Уолкер [11] методом КБО рассчитал сечения возбуждения некоторых переходов водородоподобных ионов. Волновыми функциями нулевого приближения были взяты кулоновские функции Дирака. Было найдено, что релятивистские эффекты лишь при $Z = 50$ изменяют сечения на 30—50%. При $Z = 100$ сечения меняются в 2—3 раза. На основании расчетов Уолкера можно сделать вывод, что для возбуждения переходов с изменением главного квантового числа водородоподобных ионов с $Z \approx 50$ релятивистские эффекты малы.

Для переходов без изменения главного квантового числа релятивистские эффекты начинают играть заметную роль при более малых Z_i . Это объясняется тем, что релятивизм значительно раньше начинает влиять на параметры переходов с $\Delta n = 0$: на энергию и силы осцилляторов. Возбуждение переходов с $\Delta n = 0$ подробно обсуждается в § 2.

В заключение этого параграфа приведем данные по скоростям возбуждения некоторых переходов, дополняющие данные работы [1]. Они получены на основе анализа оригинальных работ других авторов (более полно они изложены в [12]).

Талли [13] методом КБ без обмена вычислил предельные при $n \rightarrow \infty$ сечения возбуждения переходов $1s \rightarrow ns$, $1s \rightarrow np$ и $1s \rightarrow nd$ водородоподобных ионов. Учет обмена для возбуждения ионов всегда приводит к незначительному изменению сечений вблизи порога. Аппроксимация аналитическими выражениями [12] полученных Талли [13] сечений позволяет написать для скоростей реакций следующие выражения:

{H}

$$\mathcal{K}(1s \rightarrow ns) = \frac{6,54}{Z^3 n^3} \alpha^{1/2} e^{-\alpha}, \quad (18)$$

$$\mathcal{K}(1s \rightarrow np) = \frac{24,6\alpha^{1/2} e^{-\alpha}}{Z^3 n^3} [1 + 0,70e^\alpha I(\alpha)]; \quad (19)$$

$$\mathcal{K}(1s \rightarrow nd) = \frac{2,98\alpha^{1/2} e^{-\alpha}}{Z^3 n^3} [1 + 0,81e^\alpha I(\alpha)]; \quad (20)$$

$$\alpha = \frac{\Delta E}{T}; \quad n \geq 4; \quad 0,05 \leq \alpha < \infty.$$

Напомним, что атомной единицей константы скорости реакции является величина $\mathcal{K}_0 = a_0^2 v_0 = 6,12 \cdot 10^{-9}$ см³/с. Функция $I(\alpha)$ определяется как

$$I(\alpha) = \int_1^\infty \frac{\exp(-\alpha x)}{x} dx, \quad (21)$$

она связана с интегральной показательной функцией, таблицы которой имеются, например, в справочнике [14].

Семпсон, Паркс и Кларк [15] методом КБО с водородоподобными волновыми функциями вычислили сечения возбуждения переходов $1s^2 \rightarrow nl$ у гелийподобных ионов. Аппроксимация аналитическими выражениями [12] этих сечений позволяет написать для скоростей реакций следующие выражения:

{He}, ($n \geq 3$)

$$\mathcal{K}(1^1S \rightarrow n^1S) = 24,2 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z_i^2} \frac{V\bar{\alpha}}{n^3 Z_i^3}} [e^{-\alpha} - 0,45\alpha I(\alpha)]; \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{K}(1^1S \rightarrow n^3S) &= 15,5 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z_i^2} \frac{\alpha V\bar{\alpha}}{n^3 Z_i^3}} \times \\ &\times [(1 + 0,3\alpha)e^{-\alpha} - \alpha(1,3 + 0,3\alpha)I(\alpha)]; \end{aligned} \quad (23)$$

$$\mathcal{K}(1^1S \rightarrow n^1P) = 97,8 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z_i^2} \frac{V\bar{\alpha}}{n^3 Z_i^3}} (1 + 0,37\alpha) I(\alpha); \quad (24)$$

$$\mathcal{K}(1^1S \rightarrow n^3P) = 24,2 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z_i^2} \frac{V\bar{\alpha}}{n^3 Z_i^3}} (e^{-\alpha} + 0,64I(\alpha)); \quad (25)$$

$$\mathcal{K}(1^1S \rightarrow n^1D) = 4,50 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z_i^2} \frac{V\bar{\alpha}}{n^3 Z_i^3}} (e^{-\alpha} + 0,89I(\alpha)); \quad (26)$$

$$\mathcal{K}(1^1S \rightarrow n^3D) = 4,72 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z_i^2} \frac{V\bar{\alpha}}{n^3 Z_i^3}} (e^{-\alpha} + 0,059\alpha I(\alpha)), \quad (27)$$

а для переходов из метастабильного состояния 2^3S : {He}, ($n \geq 4$)

$$\mathcal{K}(2^3S \rightarrow n^1S) = 71,4 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z_i^2} \frac{V\bar{\alpha} e^{-\alpha}}{n^3 Z_i^3}}; \quad (28)$$

$$\mathcal{K}(2^3S \rightarrow n^3S) = 1214 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z_i^2} \frac{V\bar{\alpha} e^{-\alpha}}{n^3 Z_i^3}}; \quad (29)$$

$$\mathcal{K}(2^3 S \rightarrow n^1 P) = 258 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z_i^2} \frac{\sqrt{\alpha} e^{-\alpha}}{n^3 Z_i^3}}; \quad (30)$$

$$\mathcal{K}(2^3 S \rightarrow n^3 P) = 392 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z_i^2} \frac{\sqrt{\alpha}}{n^3 Z_i^3}} (e^{-\alpha} + 1,22I(\alpha)); \quad (31)$$

$$\mathcal{K}(2^3 S \rightarrow n^1 D) = 142 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z_i^2} \frac{\alpha \sqrt{\alpha}}{n^3 Z_i^3}} [-e^{-\alpha} + (4,52 + \alpha)I(\alpha)]; \quad (32)$$

$$\mathcal{K}(2^3 S \rightarrow n^3 D) = 642 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z_i^2} \frac{\alpha \sqrt{\alpha}}{n^3 Z_i^3}} [-e^{-\alpha} + (1 + 1,83\alpha)I(\alpha)]. \quad (33)$$

Таким же путем найдем константы скоростей переходов $2s \rightarrow np$ ($n \geq 5$) литийподобных ионов с использованием результатов Били [16], полученных методом КБ: $\{Li\}$, ($n \geq 5$)

$$\mathcal{K}(2s \rightarrow np) = 4,8 \cdot 10^3 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z_i^2} \frac{\sqrt{\alpha}}{n^3 Z_i^3}} [1 + 0,58\alpha] I(\alpha). \quad (34)$$

Остерброком [17] методом сильной связи для бериллийподобных ионов B^+ , C^{2+} , N^{3+} , O^{4+} , Ne^{6+} с учетом резонансных конфигураций $2s2p\ ^1P$, nI были вычислены сечения интеркомбинационного перехода $2s^2\ ^1S \rightarrow 2s2p\ ^3P$. Аппроксимация его результатов [12] приводит к следующему выражению для константы скорости реакции: $\{Be\}$

$$\mathcal{K}(2s^2\ ^1S \rightarrow 2s2p\ ^3P) = 5,4 \cdot 10^3 \sqrt{\frac{2\Delta E}{\pi Z_i^2} \frac{\sqrt{\alpha}}{n^3 Z_i^3}} (e^{-\alpha} + 0,46\alpha I(\alpha)). \quad (35)$$

Для всех приведенных констант скоростей реакций использовались сечения, полученные в нерелятивистском приближении.

§ 2. Возбуждение дипольных переходов с $\Delta n = 0$

Метод КБО, хотя и является простейшим из методов расчета сечений возбуждения и ионизации, может быть реализован только численно. Лишь для сечений возбуждения некоторых переходов у простейших водородподобных ионов были получены в последнее время аналитические выражения, содержащие сложные специальные функции. Эти случаи являются исключениями.

Рассмотрим пример, когда метод КБО можно упростить, а именно, рассмотрим дипольное приближение Бете [18]. Разложение межэлектронного взаимодействия по полиномам Лежандра $P_l(\cos \theta)$ имеет вид

$$\frac{1}{r_{12}} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{r_{>}} \left(\frac{r_{<}}{r_{>}} \right)^l P_l(\cos \theta), \quad (36)$$

$$r_{>} = \max(r_1, r_2); \quad r_{<} = \min(r_1, r_2),$$

где θ — угол между векторами r_1 и r_2 . При расчетах сечений переходов с изменением момента иона $L \rightarrow L'$ методом КБ ненулевой вклад да-

дуг только конечное число слагаемых сумм (36) с $|L' - L| \leq l \leq \leq |L + L'|$. Приближение Бете [18] состоит в том, что вместо точного значения суммы этих слагаемых используется ее предел при $r_2 \gg r_1$, так что вместо (36) для дипольных переходов пишут:

$$\frac{1}{r_{12}} \approx \frac{r_1 r_2}{r_2^2} \quad (r_2 \gg r_1), \quad (37)$$

т. е. считают, что налетающий электрон всегда находится значительно дальше от ядра иона, чем связанный. При возбуждении налетающий электрон совершает дипольный переход в непрерывном спектре положительного иона. Матричный элемент такого перехода совпадает с таковым в теории тормозного излучения и был вычислен Зоммерфельдом [19]. Используя результат Зоммерфельда, сечение дипольных переходов в приближении Бете можно записать в виде [20]

$$Q_{0n} = \frac{4\pi^3 |d_{0n}|^2}{E} \frac{e^{2\pi\eta} x_0 \frac{d}{dx_0} |F(i\eta; i\eta'; 1; x_0)|^2}{(e^{2\pi\eta} - 1)(e^{2\pi\eta'} - 1)};$$

$$x_0 = -\frac{4\eta\eta'}{(\eta' - \eta)^2}; \quad \eta = -\frac{Z}{\sqrt{2E}}; \quad \eta' = -\frac{Z}{\sqrt{2(E - \Delta E)}}. \quad (38)$$

Выражение (38) было затабулировано Гайлитисом [21]. Оно справедливо только тогда, когда основной вклад в сечение вносят большие расстояния налетающего электрона $r_2 \gg r_1$.

Условие применимости дипольного приближения выполняется, как известно, в бете-борновском пределе $E \gg \Delta E$. Выражение (38) для этого предела упрощается. При $E \gg \Delta E$ имеем $x_0 \gg \eta$, η' и $x_0 \gg 1$. Тогда, воспользовавшись асимптотическим пределом для полной гипергеометрической функции F в (38), получим хорошо известный результат Бете для сечения дипольных переходов:

$$Q_{0n}^{ББ} = \frac{4\pi |d_{0n}|^2}{E} \ln\left(\frac{4E}{E}\right). \quad (39)$$

Установим более детально область справедливости формулы (39). Согласно определению $x_0 = -4\sqrt{x(x-1)}/(\sqrt{x} - \sqrt{x-1})^2$, где $x = E/\Delta E$ — энергия в пороговых единицах. Уже при $x \geq 2$ x_0 близко к асимптотическому значению $x_0 \approx -16x^2$. Тогда условие $|x_0| \gg \gg |\eta, \eta'|$, при котором справедлива формула (39), примет вид $x^{5/2} \gg Z/16\sqrt{2\Delta E}$ или

$$E > Z_i^{2/5} \Delta E^{4/5}. \quad (39a)$$

Для переходов с изменением главного квантового числа $\Delta E \sim \sim J \sim Z_i^2$ и условие (39a) переходит в условие применимости обычного борновского приближения $E \gg Z_i^2$. Для переходов с меньшими ΔE формула (39) становится применимой при меньших E . Так, для переходов без изменения главного квантового числа, когда $\Delta E \approx c_1 Z_i$, условие (39a) переходит в условие $E > c_1^{4/5} Z_i^{6/5}$. Более быстрый при малых ΔE выход сечения на бете-борновский предел объясняется

тем, что в этом случае вклад в сечения вносят столкновения со столь большими прицельными параметрами, что соответствующие им траектории прямолинейны.

Как видно из определения переменных x_0 , η , η' , выражение (38) зависит от двух параметров: $x = E/\Delta E$ и $y = Z/\sqrt{2\Delta E}$. В области $y \gg 1$ и $x \sim 1$ существует еще один аналитический предел выражения (38). При $y \gg 1$ и $x \sim 1$ имеем: $\eta, \eta' \gg x_0$. При таких значениях параметров существует «квазиклассический» предел полной гипергеометрической функции F .

Условию $y \gg 1$ или $\Delta E \ll Z_i^2$ удовлетворяют дипольные переходы с малой энергией возбуждения — переходы без изменения главного квантового числа, но с изменением углового момента. Это, например, переходы между компонентами тонкой структуры у водородоподобных ионов. Энергия этих переходов определяется релятивистскими эффектами. У сложных ионов энергия аналогичных переходов определяется обменным взаимодействием внешних электронов с остовными, если $Z_i \lesssim 20$. При $Z_i > 20$ заметный вклад в расщепление энергий вносят релятивистские эффекты. Примерами таких переходов являются: $2s \rightarrow 2p$ у литийподобных ионов, $2s^2 \rightarrow 2s2p^1P$ у бериллийподобных ионов и т. д.

Вычисление сечения возбуждения указанных переходов при формальном переходе в формуле (38) к пределу $\eta, \eta' \gg x_0$ не позволит наглядно убедиться в применимости дипольного приближения. Поэтому мы ниже рассматриваем иной способ.

Матричный элемент от взаимодействия (37) заменим матричным элементом от дипольных моментов:

$$\frac{r_1 r_2}{r_2^3} = -\frac{r_1}{Z_i} \nabla_2 \frac{Z_i}{r_2} = \frac{r_1 r_2}{Z_i} = -\frac{\Delta E^2}{Z_i} (r_1 r_2). \quad (40)$$

Эта замена справедлива, если сила, действующая на налетающий электрон, F_2 действительно равна $-\nabla_2 Z_i/r_2$. Это выполняется для больших расстояний, пока электрон не попадает внутрь орбиты иона. Следовательно, использование соотношения (40) справедливо при тех же предположениях, что и использование самого дипольного приближения.

Рассматриваем налетающий электрон как классическую частицу, движущуюся в поле иона. Сечение

$$Q = 2\pi \int_0^\infty w(\rho) \rho d\rho, \quad (41)$$

где $w(\rho)$ — вероятность перехода при заданном прицельном параметре ρ . В рассматриваемой постановке задача полностью эквивалентна задаче вычисления дипольного тормозного излучения классической частицы в кулоновском поле. Поэтому, используя результаты работы [22, § 70], получаем:

$$w(\rho) = \frac{\pi^2 \Delta E^2}{4E^2} \left| (x_1)_{0n} H_{iv}^{(1)'}(i v \varepsilon) - (y_1)_{0n} \frac{\sqrt{\varepsilon^2 - 1}}{\varepsilon} H_{iv}^{(1)}(i v \varepsilon) \right|^2; \quad (42)$$

$$\varepsilon = \sqrt{1 + (2E\rho/Z_i)^2}; \quad (43)$$

$$v = Z_i \Delta E / (2E)^{3/2}, \quad (44)$$

где x_1 и y_1 — координаты связанного электрона в плоскости столкновения; $H_{iv}^{(1)}(iv\varepsilon)$ — функция Ханкеля. Интегрируя (42) по прицельному параметру, усредняя по начальным и суммируя по конечным подстояниям, получаем [22]:

$$Q_{0n} = \frac{\pi^2 f_{0n}}{g_0 \Delta E} \frac{F(v)}{v^2}; \quad (45)$$

$$F(v) \equiv v |H_{iv}^{(1)}(iv)| |H_{iv}^{(1)'}(iv)|. \quad (46)$$

Здесь f_{0n} — сила осциллятора перехода; g_0 — статистический вес начального состояния.

Сечение (45) оказалось выраженным через комбинацию спецфункций F , зависящую от одной универсальной переменной v .

Теперь найдем те условия, при которых оправдано использование классического приближения для налетающего электрона и дипольного приближения для взаимодействия. Необходимо проанализировать зависимость $\omega(\rho)$ или функций Ханкеля $H_{iv}^{(1)}(iv\varepsilon)$ от ε . Используем для этих функций следующее интегральное представление:

$$H_{iv}^{(1)}(iv\varepsilon) = \frac{1}{i\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[iv\xi - i\varepsilon \operatorname{sh} \xi] d\xi. \quad (47)$$

Рассмотрим припороговую область энергий столкновения $E \sim \Delta E$, когда $v \sim Z_i/\sqrt{\Delta E}$. Мы предполагаем выполненным условие

$$\Delta E \ll Z_i^2, \quad (48)$$

при котором пороговое значение $v(E \sim \Delta E) \gg 1$. При этих значениях v основной вклад в интеграл (47) дают малые ξ . Раскладывая $\operatorname{sh} \xi$ в ряд при $\xi \ll 1$, приводим (47) к виду

$$H_{iv}^{(1)}(iv\varepsilon) \simeq \frac{\sqrt{\varepsilon-1}}{i\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left[-iv(\varepsilon-1)^{3/2}\left(x + \frac{x^3}{6}\right)\right] dx. \quad (49)$$

Отсюда видно, что функция Ханкеля $H_{iv}^{(1)}(iv\varepsilon)$ при $v \gg 1$ сильно затухает при больших ε , так что при интегрировании вероятности по прицельному параметру (или по $d\varepsilon$) основной вклад в сечение вносят значения ε , удовлетворяющие условию

$$v(\varepsilon-1)^{3/2} \sim 1 \text{ или } \varepsilon-1 \sim v^{-2/3}. \quad (50)$$

Характерные расстояния наибольшего сближения [23] $r_{\text{мин}} = (Z_i/2E)(\varepsilon-1) \sim (Z_i/\Delta E^2)^{1/3}$. Тогда необходимое для выполнения дипольности требование, чтобы $r_{\text{мин}}$ было много больше размера иона, который Z_i/J , приводит к условию

$$\Delta E \ll J^3/2/Z_i. \quad (51)$$

Поскольку $J \sim Z_i^2$, то (51) буквенно совпадает с условием (48).

Для классического рассмотрения налетающего электрона необходимо, чтобы в сечение вносили вклад большие моменты: $\nu \gg 1$. Из формул (43) и (50) получаем тогда требование, чтобы средний момент удовлетворял условию $\bar{l} \sim (Z_i^2/\Delta E)^{1/3} \gg 1$, которое буквенно опять совпадает с (48).

Рассмотренные значения $\nu \gg 1$ отвечают сильному искривлению траекторий.

При $\nu \lesssim 1$ или $\nu \ll 1$ (когда траектории искривляются слабо) вклад в сечение вносят значения $\epsilon - 1 \sim \nu^{-1}$. При этом $r_{\text{мин}} \sim \rho \sim \sqrt{2x/\Delta E}$. Дипольность выполняется опять при условии (48), а классичность — при $E \gg \Delta E$.

Таким образом, формула (45) справедлива при выполнении условия (48). Практическую точность этой формулы можно установить, вычислив следующее приближение либо сравнив ее с результатами расчетов по полному методу КБО.

Функция $F(\nu)$, определенная формулой (46), имеет аналитические пределы при $\nu \gg 1$ и $\nu \ll 1$ [22]. Соответственно им имеем два предельных аналитических выражения для сечения.

В припороговой области

$$Q_{0n} = \frac{4\pi^2}{\sqrt{3}} \frac{f_{0n}}{g_0 \Delta E} \frac{1}{v^2};$$

$$\left(\frac{E}{\Delta E}\right)^{3/2} \ll \frac{Z_i}{2\sqrt{2\Delta E}}; (\nu \gg 1)$$
(52)

и для области вдали от порога

$$Q_{0n} = \frac{4\pi f_{0n}}{g_0 \Delta E} \frac{1}{v^2} \ln \left(\frac{4E}{\Delta E} \frac{\sqrt{2E}}{\gamma Z_i} \right);$$

$$\left(\frac{E}{\Delta E}\right)^{3/2} \gg \frac{Z_i}{2\sqrt{2\Delta E}}; (\nu \ll 1),$$
(53)

где константа под логарифмом $\gamma = e^C = 1,781$; $C = 0,577$ — постоянная Эйлера.

Исследуем, какова конкретно вероятность возбуждения для пролетов по траекториям с прицельными параметрами, вносящими основной вклад в сечение вблизи порога. Обозначим эти прицельные параметры как средние: $\bar{\rho}$. Из оценки (50) и формулы (43) следует, что $\bar{\rho} \sim \frac{1}{v} \left(\frac{Z_i^2}{\Delta E}\right)^{1/3}$. Поскольку сечение (52) порядка $Q_{0n} \approx (f_{0n}/\Delta E v^2)$, то средняя вероятность $\bar{w} \approx (f_{0n}/\Delta E)(\Delta E/Z_i^2)^{1/3}$. Это значение, как и должно быть, много меньше единицы, так как малы оба множителя: $(f_{0n}/\Delta E) \ll 1$ и $\Delta E/Z_i^2 \ll 1$. Так, для перехода $2s - 2p$ у литийподобного углерода C^{3+} имеем $\Delta E = 0,304$; $f = 0,286$; $Z_i = 3$ и $(f/\Delta E) = 0,94$, а $(\Delta E/Z_i^2)^{1/3} = 0,32$.

Сечения дипольных переходов часто записывают, формально вводя гаунт-фактор G :

$$Q_{0n} = \frac{4\pi^2 f_{0n}}{\sqrt{3} g_0 \Delta E} \frac{G(E/\Delta E, Z^2/\Delta E)}{v^2},$$
(54)

Величина G — медленно меняющаяся функция энергии столкновения E . При сравнении этой формулы с результатами большого количества численных расчетов для возбуждения нейтральных атомов было найдено, что вблизи порога $G \approx 0,2$. Как видно из формул (52), (53), для переходов, удовлетворяющих условию (48), гаунт-фактор равен единице вблизи порога.

В области вдали от порога полученное нами сечение, определяемое формулой (53), отличается от бете-борновского предела (39). Различны подлогарифмические множители. Однако для практически интересных значений E , ΔE , Z_i количественное различие сечений оказывается небольшим. Несущественное количественное отличие формул (39) и (53) обусловлено причиной принципиального характера. При $E \gg \Delta E$ вклад в сечение начинают вносить настолько большие моменты налетающего электрона, для которых уже неприменимо классическое приближение. При больших энергиях нарушается условие квазиклассичности $\Theta l \gg 1$ из-за того, что существенными становятся очень малые углы рассеяния Θ . Следовательно, при больших энергиях верна формула (39), а не (53).

Таким образом, сечения возбуждения дипольных переходов, удовлетворяющих условию (48), при всех энергиях столкновения даются формулой (38). Для энергий столкновений $\Delta E \leq E \leq Z_i^2$ эта формула упрощается до выражения (45), которое в свою очередь имеет еще более простые предельные значения (52) и (53). Предельное выражение (53) несправедливо при очень больших энергиях из-за квантовости рассеяния на очень малые углы.

Функция $F(v)$ была найдена численно в работе [20] в интервале $0,1 \leq v \leq 4$, а в более широкой области $0,01 \leq v \leq 20$ — в [24]. Результаты вычисления можно аппроксимировать следующей зависимостью:

$$F(v) \simeq \begin{cases} \frac{4}{\pi^2} \ln \frac{1,123}{v} + 1,46v^{0,7}; & v \leq 0,2 \\ \frac{4}{\pi \sqrt{3}} + \frac{0,163}{\sqrt{v}}; & v \geq 0,2. \end{cases} \quad (55)$$

Пределы этой аппроксимации при $v \rightarrow 0, \infty$ совпадают с точными.

На рис. 3 показано сравнение сечений возбуждения перехода $2s \rightarrow 2p$ у литийподобных ионов C^{3+} , N^{4+} , Ne^{7+} , Ar^{15+} электронным ударом, даваемых формулами (39) и (45), и полученных экспериментально или вычисленных методами КБ и сильной связи. Из рисунка видно, что уже для Ne^{7+} формула (45) дает сечение, близкое к вычисленному методом КБ. Видно также, что борновское сечение (39) уже при $x = 2 \div 3$ практически совпадает с сечением (45). Вблизи порога борновское приближение занижает сечение (а не завышает, как при возбуждении нейтральных атомов). Это объясняется искривлением траекторий возбуждающих электронов с энергией $E \simeq \Delta E$.

Для расчетов по формулам (39) и (45) использовались следующие значения сил осцилляторов и энергий перехода $2s \rightarrow 2p$ литийподобных ионов: $f = 1,35 Z^{-1} + 2,20Z^{-2}$; $\Delta E = 0,0707 Z - 0,120$, где Z —

заряд ядра иона (атомный номер). Зависимость силы осциллятора от Z была получена в результате аппроксимации данных, собранных в работе [30]. Энергия возбуждения взята из [31].

С увеличением заряда иона становится более существенным влияние релятивистских эффектов на силы осцилляторов и энергии перехода. Приведенные выше зависимости $f(Z)$ и $\Delta E(Z)$ справедливы для $Z \lesssim 20$, когда этими эффектами можно пренебречь. Уже для литий-

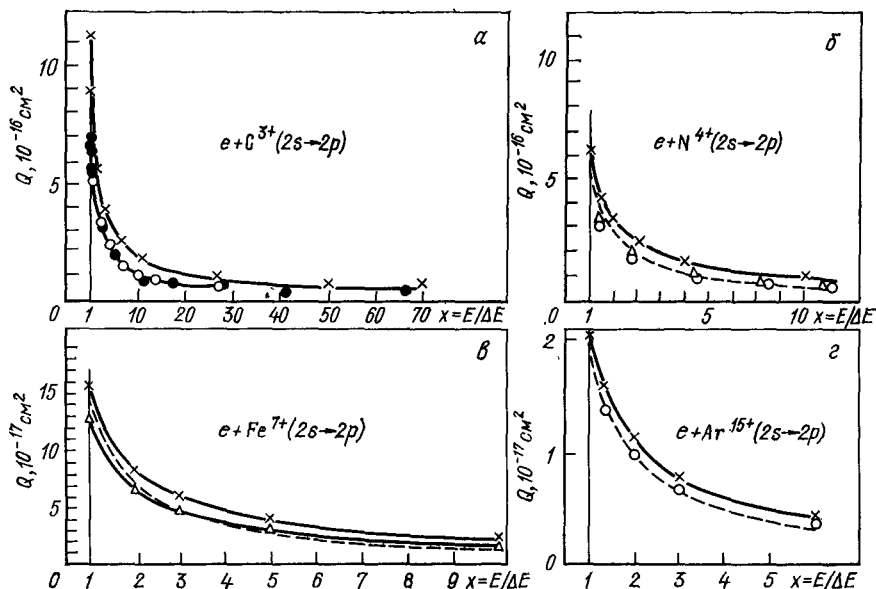


Рис 3. Сечения возбуждения перехода $2s \rightarrow 2p$ литийподобных ионов электрона как функция энергии в пороговых единицах $x = E/\Delta E$:

\times — формула (45); — — — формула (39); a — \bullet — эксперимент [25]; \circ — расчет по методу сильной связи ($2s, 2p, 3s, 3p$) [26]; b — \triangle — расчет по методу КБ [27]; \circ — по методу сильной связи [28]; c — \triangle — расчет методом КБ [29]; d — \circ — расчет по методу сильной связи [26]

подобных ионов железа Fe^{23+} расщепление уровней компонент тонкой структуры $2P_{3/2}$ и $2P_{1/2}$ становится сравнимым с энергиями переходов $2S - 2P_{1/2, 3/2}$: $\Delta E(2S \rightarrow 2P_{3/2}) = 2,37$, $f_{2S-2P_{3/2}} = 0,048$, $\Delta E(2S \rightarrow 2P_{1/2}) = 1,785$, $f_{2S-2P_{1/2}} = 0,018$ [30]. В соответствии с этим согласно формуле (45) имеем два различных сечения возбуждения двух различных переходов $2S \rightarrow 2P_{1/2}$ и $2S \rightarrow 2P_{3/2}$. Релятивистскими эффектами в непосредственном взаимодействии между налетающим и связанным электронами можно еще пренебречь.

На рис. 4 показано сравнение сечений возбуждения перехода $2s^2 |^1S \rightarrow 2s2p |^1P$ у бериллийподобных ионов N^{3+} , O^{4+} , Ne^{6+} , даваемых формулами (39) и (45), и вычисленных методами КБ и сильной связи. Силы осцилляторов и энергии переходов взяты равными [34]: $N^{3+} - f = 0,64$, $\Delta E = 0,59$; $O^{4+} - f = 0,53$, $\Delta E = 0,72$; $Ne^{6+} - f = 0,39$, $\Delta E = 0,97$. Видно, что для N^{3+} и O^{4+} согласие результатов, получен-

ных разными методами удовлетворительное, а для Ne^{6+} — хорошее. Как и для литийподобных ионов, борновское приближение — формула (39) — обеспечивает правильный результат уже для $x \geq 3$. Это согласуется с оценкой (39a), по которой борновская формула (39) справедлива при $x \gg Z_i^{2/5} \Delta E^{-1/5} \equiv x_2$. Для ряда $\text{N}^{3+} - \text{Ne}^{6+}$ значения x_2 меняются от 1,7 до 2,0.

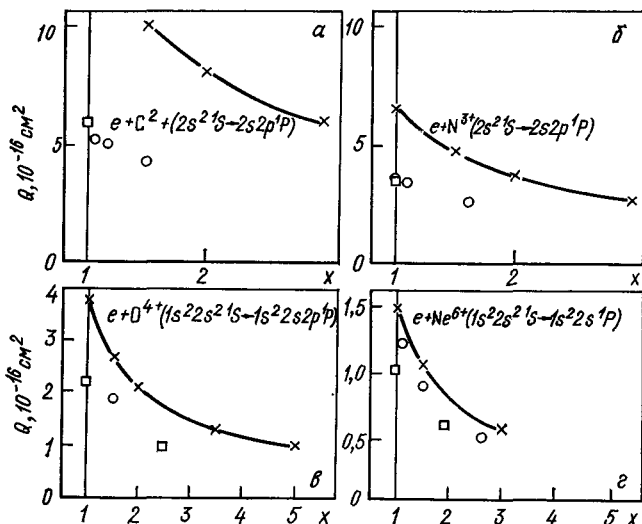


Рис. 4. Сечения возбуждения перехода $2s^2 |^1S \rightarrow 2s2p |^1P$ бериллийподобных ионов электронами как функция энергии в пороговых единицах:

—x—x— формула (45); ○ — расчет методом сильной связи [32]; □ — расчет методом КБ, [33]

Для вычисления скорости возбуждения усредним произведение Qv по максвелловской функции распределения электронов по скоростям:

$df = \frac{2}{\sqrt{\pi}} e^{-\frac{E}{T}} \frac{\sqrt{E} dE}{T^{3/2}}$. Используя (45), получаем

$$\mathcal{K} = \frac{\pi^2 \sqrt{2\pi} f_{0n}}{g_0 \Delta E T^{3/2}} \int_0^\infty F(v) \exp\left(-\frac{E}{T}\right) dE. \quad (56)$$

Для вычисления этого интеграла воспользуемся тем, что $F(v)$ — медленно меняющаяся функция. Используем метод взятия такого интеграла, предложенный в [35]. Этот метод в принципе основан на известном математическом способе оценки таких интегралов: за знак интеграла выносятся некоторое среднее значение медленно меняющейся функции, а быстро меняющаяся функция интегрируется. Согласно [35] определение выносимого за знак интеграла среднего значения медленно меняющейся функции можно произвести более точно. Аппроксимируем эту функцию степенной функцией с малым показателем степени. После взятия интеграла выразим результат через

значение той же медленно меняющейся функции от некоторого значения ее переменной. Таким образом, получаем:

$$\left. \begin{aligned} \mathcal{K} &= \frac{\pi^{5/2} \sqrt{2} f_{0n}}{g_0 \Delta E \sqrt{T}} \exp(-\Delta E/T) F(\tilde{\nu}), \\ \tilde{\nu} &= \frac{Z_i \Delta E}{[2(\Delta E + 1,78T)]^{3/2}} \end{aligned} \right\} \quad (57)$$

Здесь T — температура в энергетических безразмерных атомных единицах.

Для относительно больших температур $T > \Delta E$ можно пользоваться борновским пределом сечения (39). Тогда скорость возбуждения

$$\mathcal{K}^B = \frac{4\sqrt{2\pi} f_{0n}}{T^{3/2}} \left[\frac{e^{-\alpha}}{\alpha} \ln 4 + I(\alpha) \right]. \quad (58)$$

Напомним, что атомная единица константы скорости $\mathcal{K}_0 = a_0^3 u_0 = 6,12 \cdot 10^{-9} \text{ см}^3/\text{с}$, где $a_0 = 5,29 \cdot 10^{-9} \text{ см}$ — борновский радиус, $u_0 = 2,19 \cdot 10^8 \text{ см}$ (v_0 — атомная единица скорости).

Борновский предел (58) для скорости возбуждения применим в наиболее интересной области температур. Действительно, температуры плазмы, при которых появляется ион данной кратности, определяются потенциалом ионизации J иона предыдущей кратности, т. е. можно считать, что когда ион данной кратности уже появился в плазме, для рассматриваемых переходов выполняется неравенство $T \approx J \gg \Delta E$, при котором и справедлива формула (58). Ситуация наиболее выигрышна в этом отношении для переходов между компонентами тонкой структуры у водородоподобных ионов, так как здесь энергии переходов особенно малы (например, переход $2S_{1/2} - 2P_{3/2}$). Кроме того, из рис. 3 и 4 видно, что отличие борновского сечения от точного вблизи порога (где борновское приближение в принципе неприменимо) численно невелико, так что скорости, даваемые формулой (58), отличаются от более точных (57) не более чем на 30%.

§ 3. Ионизация многозарядных ионов.

Вклад внутренних оболочек

Ионизация изучена экспериментально [36] для ионов значительно большей кратности, чем возбуждение. В расчете Селопы [46] методом бинарных классических столкновений получены сечения ионизации также для глубоко ободранных ионов: для всех ионов атомов углерода, азота, кислорода, неона и аргона.

Наиболее последовательным методом расчета сечений ионизации является метод КБО. Подобным методом Вайнштейн, Собельман и Юков [1] рассчитали сечения ионизации многих ионов вплоть до неоподобных.

Хотя и возбуждение, и ионизация могут рассматриваться с единой точки зрения (с помощью теории возмущений), при ионизации проявляются новые эффекты. В отличие от возбуждения в ионизацию вносят вклад все оставшиеся оболочки иона. Вклад в ионизацию внут-

ренных электронов особенно важен для ионов с небольшим числом внешних электронов. Радж и Шварц [37] вычислили сечения ионизации ионов Fe^{14+} и Fe^{15+} методами КБ и КБО. Было найдено, что сечение ионизации натрийподобного иона Fe^{15+} ($1s^2 2s^2 2p^6 3s$) с удалением электрона из оболочки $2p^6$ такое же по величине, как и для удаления $3s$ -электрона. Это объясняется тем, что в оболочке $2p^6$ шесть электронов, тогда как внешний $3s$ -электрон только один. В работе [38] был повторен расчет Раджа и Шварца, но с использованием водородоподобных функций и с введением в окончательные результаты эффективных зарядов для каждой подоболочки. Результаты этих работ практически совпадают друг с другом.

В этом параграфе речь будет идти еще об одном дополнительном вкладе в ионизацию электронов внутренних оболочек. В работах [37, 38] исследовалась только непосредственная ионизация внутренних оболочек, т. е. удаление внутреннего электрона прямо в непрерывный спектр. К ионизации приводит, однако, еще и возбуждение внутренних электронов, т. е. переход внутреннего электрона на свободное состояние внешней оболочки. После такого возбуждения образуется так называемое дырочное состояние иона: в одной из внутренних оболочек отсутствует электрон, а на более внешней оболочке находятся два электрона или более. Такое состояние подвержено АИ распаду: один из внешних электронов переходит на свободное место во внутренней оболочке, а выделяющаяся при этом энергия передается второму внешнему электрону, который из-за этого вылетает в непрерывный спектр. Такой процесс называют оже-распадом. Он и приводит уже к непосредственной ионизации иона.

Обсуждаемый эффект для ионизации нейтральных атомов известен уже давно. Для многозарядных ионов его роль относительно велика, так как число свободных состояний на внешних оболочках у ионов больше, чем у нейтральных атомов. По оценкам Били [39] для натрийподобного иона железа Fe^{15+} ($1s^2 2s^2 2p^6 3s$) сечение одноэлектронной ионизации через возбуждение одного из внутренних $2p$ -электронов вблизи порога примерно на порядок больше сечения ионизации одного $3s$ -электрона. Причем по оценкам В. П. Жданова [40] наибольший вклад в такую ионизацию вносит возбуждение перехода $2p \rightarrow 3d$: только один этот переход увеличивает скорость ионизации в несколько раз.

Если на внешней орбите иона находятся два электрона и более, то при удалении внутреннего электрона сразу в непрерывный спектр тоже образуется АИ состояние иона, оже-распад которого приводит к вылету еще одного электрона, т. е. в итоге к двухэлектронной ионизации иона.

Образованные тем или иным путем АИ состояния ионов могут релаксировать не только при оже-распаде, но и при излучении фотона одним или несколькими возбужденными электронами. Для нейтральных атомов вероятность излучательного перехода, как правило, на пять-шесть порядков меньше вероятности оже-распада. Как уже говорилось в § 1, с ростом заряда иона вероятность оже-распада практически не меняется, а вероятность дипольного излучательного пере-

хода быстро ($\sim Z_i^4$) возрастает. Уже при $Z_i \geq 15 \div 20$ вероятность дипольного излучения догоняет вероятность оже-распада и становится больше нее. Наличие излучательного канала уменьшает вклад внутренних оболочек в ионизацию, так как этот канал конкурирует с оже-распадом. Как правило, однако, излучательная стабилизация не может полностью подавить ионизационный канал из-за образования таких АИ состояний, которые метастабильны по отношению к излучению и не метастабильны по отношению к оже-распаду.

По оценкам Кована и Мана [41] излучательная стабилизация уменьшает вклад внутренних оболочек в ионизацию иона Fe^{15+} примерно в 2 раза. Для натрийподобного иона Mo^{31+} этот вклад остается примерно равным вкладу $3s$ -электрона из-за образования метастабильных состояний.

При возбуждении или ионизации внутренних оболочек иона с большим числом связанных электронов происходит процесс выхода наружу образованной дырки. Этот процесс состоит из каскада переходов: излучения фотонов или оже-электронов, причем может оказываться так, что при поднятии дырки из самых внутренних оболочек преобладают процессы излучения фотонов, а при приближении к внешним оболочкам более вероятными становятся оже-распады, так что первичное удаление внутреннего электрона может привести к вылету из иона еще нескольких электронов, т. е. многократной ионизации иона, и к излучению нескольких фотонов.

Мы не будем здесь интересоваться всем многообразием явлений, происходящих при возбуждении внутренних оболочек, а исследуем влияние этого процесса на одноэлектронную ионизацию простейших ионов.

Образование АИ состояний при возбуждении внутренних электронов не носит резонансного характера. В первом параграфе этой статьи говорилось об АИ состояниях системы ион + налетающий электрон, образование которых носит резонансный характер. Сечение образования обсуждаемых здесь АИ состояний одного иона без налетающего электрона равно просто сечению возбуждения внутренних электронов. Поэтому вклад этих процессов в константу скорости ионизации значительно больше, чем резонансных процессов.

Недавно была опубликована первая экспериментальная работа [42], в которой обсуждаемые эффекты были изучены методом пересечения электронного и ионного пучков. Простейшими ионами, для которых эти эффекты возможны, являются литийподобные ионы. В работе [42] были измерены сечения одноэлектронной ионизации литийподобных ионов C^{3+} , N^{4+} и O^{5+} как функции энергии налетающих электронов. На сечениях были обнаружены всплески, положение которых определялось энергией возбуждения одного из внутренних электронов $1s^2$.

В работе Генри [43] был выполнен расчет методом сильной связи сечений одноэлектронной ионизации этих же ионов с учетом АИ состояний, соответствующих возбуждению внутренних электронов $1s2s^2$ и $1s2s2p$. Положения и величины измеренных и вычисленных всплесков на сечениях хорошо согласуются друг с другом.

В этом параграфе мы будем изучать вклад внутренней оболочки $1s^2$ в сечение одноэлектронной ионизации литийподобных ионов в борновской области энергий столкновения. При этих энергиях открыты практически все неупругие каналы. Вклад внутренней оболочки, определяемый ее возбуждением, естественно объединить с вероятностью непосредственного удаления внутренних электронов в непрерывный спектр. Тогда полный вклад внутренней оболочки в одноэлектронную ионизацию иона будет равен суммарной вероятности всех неупругих процессов, возможных при возбуждении внутренних электронов. Мы предполагаем, что излучательной стабилизацией АИ состояний можно пренебречь, что выполняется для $Z_i \lesssim 15$. Суммирование вероятностей всех неупругих процессов в борновском приближении можно провести методом Бете [44], примененным им для исследования возбуждения атома водорода из основного состояния. Ниже излагается обобщенный метод Бете, пригодный для возбуждения любой атомной частицы.

В первом борновском приближении полное сечение возбуждения всех переходов $0 \rightarrow n$ (возбуждения и ионизации) равно [5]:

$$Q_{\Sigma} = \frac{8\pi}{v^2} \sum_{n \neq 0} \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} |M_{0n}|^2 \frac{dq}{q^3}; \quad (59)$$

$$M_{0n} = \langle \psi_n^* | \sum_a e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_a} | \psi_0 \rangle. \quad (60)$$

Суммирование \sum_a означает суммирование по всем связанным электронам. Квадрат переданного импульса q

$$q^2 = k_1^2 \left[2 - \frac{\Delta E_n}{E} - 2 \sqrt{1 - \frac{\Delta E_n}{E} \cos \theta} \right] \quad (61)$$

и зависит от знака n (θ — угол рассеяния).

Борновское приближение для возбуждения избранного перехода $0 \rightarrow n$ справедливо при условии $E \gg \Delta E_n$. Выражение (59) для суммарного сечения справедливо при $E \gg \overline{\Delta E} \sim J$, так как с ростом ΔE матричный элемент (60) довольно резко падает. При сколь угодно большом E можно указать переходы с $\Delta E \geq E$, но вклад этих переходов в полное сечение (59) пренебрежимо мал.

Метод Бете состоит в разделении интервала абсолютных значений переданного импульса на два интервала: больших и малых q . При малых q справедливо дипольное приближение, а при больших переданный импульс не зависит от n . Действительно, малые q соответствуют далеким пролетам, так что можно ограничиться учетом только дипольных переходов. При неслишком малых углах рассеяния из (61) следует: $q^2 \simeq 2k_1^2 (1 - \cos \theta)$ и не зависит от n . Для этих q за знак суммы в формуле (59) можно вынести все, кроме квадрата модуля матричного элемента. Характеристики вероятностей перехода в этих двух интервалах q взаимно не исключают друг друга, т. е. можно указать такое значение q_0 , удовлетворяющее условиям $q_{\min} \ll q_0 \ll q_{\max}$,

для которого выполняется и дипольное приближение, и которое уже столь велико, что значения $q \approx q_0$ не зависят от знака n .

Записываем (59) в виде

$$Q_{\Sigma} = Q_{\Sigma}^{(1)} + Q_{\Sigma}^{(2)}; \quad (62)$$

$$Q_{\Sigma}^{(1)} = \frac{8\pi}{v^2} \sum_{n \neq 0} \int_{q_{\text{мин}}}^{q_0} |M_{0n}|^2 \frac{dq}{q^3}; \quad (63)$$

$$Q_{\Sigma}^{(2)} = \frac{8\pi}{v^2} \int_{q_0}^{q_{\text{макс}}} \Phi(q) \frac{dq}{q^3}; \quad (64)$$

$$\Phi(q) = \sum_{n \neq 0} \left| \langle \psi_n^* | \sum_a e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_a} | \psi_0 \rangle \right|^2. \quad (65)$$

При вычислении $Q_{\Sigma}^{(1)}$ разлагаем экспоненту в формуле (60) по положительным степеням и оставляем только дипольный член. После этого получаем:

$$Q_{\Sigma}^{(1)} = \frac{8\pi}{v^2} \sum_{n \neq 0} |d_{0n}|^2 \ln \left(\frac{q_0}{q_{\text{мин}}} \right), \quad (66)$$

где d_{0n} — матричный элемент дипольного момента. Свойства дифференциального сечения неупругого рассеяния для области переданных импульсов $q \geq q_0$ подробно изложены в [5]. Функция $\Phi(q)$ может быть выражена через форм-фактор. Наша цель состоит в том, чтобы избавиться от явного присутствия в полном сечении Q_{Σ} величины q_0 . Для этого заметим, что при $q \rightarrow 0$ из определения (65) следует:

$$\Phi(q) \simeq \Phi_2 q^2 + \Phi_3 q^3 + \dots; \quad q \rightarrow 0 \quad (67)$$

$$\Phi_2 = \sum_{n \neq 0} |d_{0n}|^2, \quad (68)$$

а при $q \rightarrow \infty$

$$\Phi(q) \xrightarrow{q \rightarrow \infty} N + \frac{a_1}{q} + \frac{a_2}{q^2} + \dots, \quad (69)$$

где N — число связанных электронов иона. Используя эти разложения, получаем после трехкратного интегрирования по частям:

$$\int_{q_0}^{q_{\text{макс}}} \Phi(q) \frac{dq}{q^3} \simeq \Phi_2 \left[\frac{3}{2} - \ln q_0 \right] - \frac{1}{2} \int_{q_0}^{q_{\text{макс}}} \Phi'''(q) \ln q \, dq. \quad (70)$$

При получении этого результата мы пренебрегли величинами порядка q_0 и $2/q_{\text{макс}}^2$. С той же точностью в последнем интеграле формулы (70) пределы интегрирования $\{q_0, q_{\text{макс}}\}$ можно заменить $\{0, \infty\}$. Тогда суммарное сечение можно записать в виде:

$$Q_{\Sigma} = \frac{4\pi}{v^2} A \ln(BE), \quad (71)$$

где

$$A = \sum_{n \neq 0} |d_{0n}|^2 = (d^2)_{00} - (d_{00})^2; \quad (72)$$

$$B = 2 \exp \left\{ 3 - \frac{2}{A} \left[\sum_{n \neq 0} |d_{0n}|^2 \ln (\Delta E_n) + \frac{1}{2} \int_0^\infty \Phi'''(q) \ln q dq \right] \right\}. \quad (73)$$

Формулы (71)—(73) представляют собой результат, к которому мы стремились. Проблема суммирования сечений возбуждения отдельных переходов заменена значительно более простой проблемой вычисления величин A и B . Использованный нами прием Бете применен в [5] для вычисления эффективного торможения быстрых заряженных частиц в веществе (см. [5], § 149). Для этой проблемы получается более простой ответ, так как оказывается возможным использовать правило суммирования сил осцилляторов. В нашем случае вид конечного решения оказывается более сложным, но тем не менее проблема значительно упрощается. Для вычисления величин A и $\Phi(q)$ нужно знать волновую функцию только основного состояния. Для A это видно из формулы (72). Поменяв в формуле (65) местами интегрирование и суммирование, величину $\Phi(q)$ можно записать в виде [5]

$$\Phi(q) = N - F^2(q) + G(q), \quad (74)$$

где

$$F(q) = \int |\psi_0|^2 \sum_a e^{i q r_a} d\tau \quad (75)$$

— атомный форм-фактор;

$$G(q) = \int |\psi_0|^2 \sum_{a \neq b} e^{i q (r_a - r_b)} d\tau, \quad (76)$$

откуда видно, что и для вычисления $\Phi(q)$ надо знать только ψ_0 . Весь спектр иона надо знать лишь для вычисления фигурирующей в формуле (73) суммы $\sum_{n \neq 0} |d_{0n}|^2 \ln (\Delta E_n)$. Однако для этой суммы можно использовать достаточно надежную оценку. Поскольку логарифм — медленно меняющаяся функция, то можно положить $\overline{\Delta E_n} \simeq J$ и

$$\sum_{n \neq 0} |d_{0n}|^2 \ln (\Delta E_n) \simeq \ln J \sum_{n \neq 0} |d_{0n}|^2 = A \ln J. \quad (77)$$

После этого формула (73) примет вид

$$B \simeq \frac{2}{I^2} \exp \left\{ 3 - \frac{1}{A} \int_0^\infty \Phi'''(q) \ln q dq \right\}. \quad (78)$$

Согласно формулам (72) и (78) для вычисления A и B надо знать ψ_0 .

Для возбуждения водородоподобных ионов из основного состояния все расчеты можно проделать до конца, вычислив сумму

$\sum_{n \neq 0} |d_{0n}|^2 \ln(\Delta E_n)$ на ЭВМ. В итоге получаем:

$$Q_{\Sigma}(1s) = \frac{4\pi}{Z^4} \frac{\ln(6,27x)}{x}; \quad x = \frac{E}{J} = \frac{2E}{Z^2}, \quad (79)$$

что при $Z = 1$ совпадает с результатом Бете [44].

Вернемся теперь к вопросу об ионизации литийподобных ионов. Поскольку у этих ионов в оболочке $2s$ имеется один электрон, то полный вклад оболочки $1s^2$ в сечение одноэлектронной ионизации равен:

$$Q_{\Sigma}\{Li\}(1s^2) = 2Q_{\Sigma}(1s) - Q_{1s \rightarrow 2s}, \quad (80)$$

где $Q_{1s \rightarrow 2s}$ — сечение возбуждения перехода $1s \rightarrow 2s$. Для оболочек $1s$ и $2s$ литийподобных ионов будем использовать водородоподобные волновые функции. При этом борновское сечение

$$Q_{1s \rightarrow 2s} = \frac{2^{17} \pi}{5 \cdot 3^{10} Z^4} \frac{1}{x}. \quad (81)$$

Тогда нужное нам полное борновское сечение неупругих переходов электронов из оболочки $1s^2$ во все свободные состояния литийподобных ионов равно:

$$Q_{\Sigma}\{Li\}(1s^2) = \frac{8\pi}{Z^4} \frac{\ln(5,93x)}{x}. \quad (82)$$

Сечение ионизации $Q_{2s \rightarrow k}$ водородоподобных ионов из состояния $2s$ методом КБО было вычислено Мурисом и др. [45]. Борновский предел полученного в этой работе сечения

$$Q_{2s \rightarrow k} = \frac{3,29\pi}{Z^4} \frac{\ln(354x)}{x}. \quad (83)$$

Складывая выражения (82) и (83), получаем наблюдаемое в эксперименте полное приведенное сечение $Z^4 Q_{\text{ион}}\{Li\}$ ионизации в борновской области энергий:

$$Z^4 Q_{\text{ион}}\{Li\} = \frac{8\pi}{x} \left[\ln(5,93x) + 0,41 \ln(354x) \right]. \quad (84)$$

Отношение g полного вклада внутренних электронов $1s^2$ в сечение ионизации (переход в континуум и возбуждения на свободные уровни) к вкладу от внешнего $2s$ -электрона оказывается равным

$$g_{2s}^{1s^2}\{Li\} = \frac{Q_{\Sigma}(1s^2)}{Q_{2s \rightarrow k}} = 2,43 \frac{\ln(5,93x)}{\ln(354x)}. \quad (85)$$

Эта величина очень медленно растет при увеличении x : на интервале $3 \leq x \leq 20$ она увеличивается от 1 до 1,31, т. е. вклад в ионизацию от внутренних электронов $1s^2$ примерно равен вкладу $2s$ -электрона.

На рис. 5 дано сравнение теоретического сечения (84) [для получения сечения в обычных единицах следует умножить выражение (84) на квадрат борновского радиуса $a_0^2 = 0,280 \cdot 10^{-16} \text{ см}^2$] с экспериментально полученными сечениями Донца и Овсянникова [36] и Кренде-

ла и др. [42]. На рисунке отчетливо видна тенденция приближения (уже при $x \simeq 3 \div 5$) экспериментальных точек к полному сечению (84), а не к сечению ионизации только $2s$ -электрона. Экспериментальная точка для Ag^{15+} при $x = 1,1$ лежит заметно ниже точек для элементов с меньшими Z . Этот факт можно объяснить частичной стабилиза-

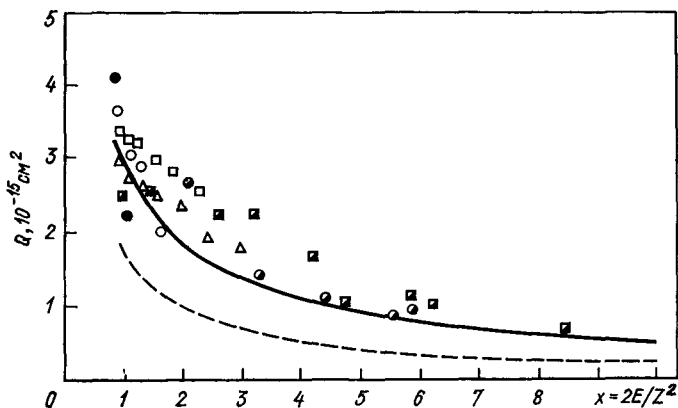


Рис. 5. Приведенное сечение ионизации литийподобных ионов электронами: теоретические сечения: — — — — полное сечение, формула (84); — — — — сечение ионизации $2s$ -электрона, формула (83). Экспериментальные сечения: Δ — C^{3+} ; \square — N^{4+} ; \circ — O^{5+} из работы Крендела и др. [42]; \blacksquare — N^{4+} , \circ — O^{5+} , \bullet — Ag^{15+} из работы Донца и Овсяникова [36]

цией промежуточных АИ состояний при излучении фотона. Неожидан тот факт, что теоретическое сечение и вблизи порога (при $x \simeq 1$) очень близко к экспериментальным сечениям.

У бериллийподобных ионов роль внутренней оболочки значительно меньше. По оценкам с помощью водородоподобных волновых функций по формуле борновского приближения (71) получается, что вклад двух $1s$ -электронов не превышает 30%. Для этих ионов, однако, появляется новый эффект, теоретически возможный уже в первом борновском приближении для модели независимых связанных электронов: процесс двухэлектронной ионизации. При ионизации $1s$ -электрона из бериллийподобного иона образуется АИ конфигурация $1s2s^2\text{S}$, которая распадается при испускании оже-электрона. Заметим, что это состояние метастабильно по отношению к излучению фотона. По оценкам в борновском приближении с водородоподобными волновыми функциями получается, что сечение двухэлектронной ионизации бериллийподобных ионов в 4—5 раз меньше полного сечения одноэлектронной ионизации этих же ионов.

В заключение отметим, что при ионизации внутренних электронов многозарядных ионов, как и при ионизации нейтральных атомов, возможны процессы встряхивания: при быстром удалении одного внутреннего электрона эффективный заряд, в котором движутся внешние электроны, возрастает на единицу, что приводит к их перестройке и в том числе к ионизации. Для многозарядных ионов эти процессы особенно малы потому, что изменение заряда на единицу мало по сравнению с кратностью заряда иона.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Вайнштейн Л. А., Собельман И. И., Юков Е. А. Сечения возбуждения атомов и ионов электронами. М.: Наука, 1973.
2. Seaton M. J. — Proc. Phys. Soc., 1961, v. 77, p. 184.
3. Друкaрев Г. Ф. Столкновения электроионов с атомами и молекулами. М.: Наука, 1978.
4. Burgess A., Hummer D. G., Tully J. A. — Philos. Trans. Roy. Soc. (Lond.), 1970, v. 266, p. 225—279.
5. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
6. Базь А. И. — Журн. эксперим. и теорет. физ. 1959, т. 36, с. 1762.
7. Гайлитис М. К. — Там же, 1963, т. 44, с. 1974.
8. Пресняков Л. М., Урнов А. М. — Там же, 1975, т. 68, с. 61.
9. Hayes M. J., Seaton M. J. — J. Phys., 1978, v. BII, p. 79.
10. Callaway J., Gau J. N., Henry R. J. W. e. a. — Phys. Rev., 1977, v. A16, p. 2228.
11. Walker D. W. — J. Phys., 1975, v. B8, p. 760.
12. Базылев В. А., Чибисов М. И. Препринт ИАЭ № 3125 и 3152, 1979; Успехи физ. наук, 1981, т. 133, с. 617.
13. Tully J. A. — Canad. J. Pys., 1973, v. 51, p. 2047.
14. Янке Е., Эмде Ф., Леш Ф. Специальные функции/ Пер. с англ. М.: Изд-во иностр. лит., 1964.
15. Sampson D. H., Parks A. D., Clark R. E. H. — Phys. Rev., 1978, v. A17, p. 1619.
16. Bely O. — Proc. Phys. Soc., 1966, v. 88, p. 587.
17. Osterbrock D. E. — J. Phys., 1970, v. B3, p. 149.
18. Bete H. — Ann. Phys., 1930, v. 5, p. 325.
19. Зомерфельд А. Строение атома и спектры. Т.2/ Пер. с нем. М.: Изд-во иностр. лит., 1956.
20. Aider K. e. a. — Rev. Mod. Phys., 1956, v. 28, p. 432.
21. Гайлитис М. К. — В кн.: Атомные столкновения. Рига: Изд. Латв. гос. ун-та, 1963, с. 93.
22. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория поля. М.: Наука, 1967.
23. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Механика. М.: Физматгиз, 1958.
24. Гервидс В. И. Излучение примесей в горячей плазме. — Автореф. дисс. на соиск. учен. степ. канд. физ.-матем. наук. М.: МИФИ, 1976.
25. Taylor P. O. e. a. — Phys. Rev., 1977, v.39A, p. 1256.
26. Gau J. N., Henry R. J. W. — Phys. Rev., 1977, v. A16, p. 986.
27. Burke P. G., Tait J. H., Lewis B. E. — Proc. Phys. Soc., 1966, v. 87, p. 209.
28. Van Wyngaarden W. L., Henry R. J. W. — J. Phys., 1976, v. B9, p. 1461.
29. Bely O. — Proc. Phys. Soc., 1966, v. 88, p. 587.
30. Martin G. A., Wiese W. L. — Phys. Chem. Ref. Data, 1976, v. 5, p. 537.
31. Ivanova E. P., Safronova U. I. — J. Phys., 1975, v. B8, p. 1591.
32. Osterbrock D. E. — J. Phys., 1970, v. B3, p. 149.
33. Nakasaki S., Hashino T. — J. Phys. Soc. Japan, 1977, v. 43, p. 281.
34. Moore C. E. — NSRDS-NBS-34. Washington, 1970.
35. Смирнов Б. М., Чибисов М. И. — Теплофизика высоких структур, 1971, т. 9, с. 513.
36. Донец Е. Д., Овсянников В. П. Препринт ОИЯИ, P7-10780, 1977.
37. Rudge M. R. H., Schwartz S. B. — Proc. Phys. Soc., 1966, v. 88, p. 579.
38. Golden L. B., Sampson D. H., Omidvar K. — J. Phys., 1978, v. BII, p. 3235.
39. Bely O. — Ibid., 1968, v. BI, p. 23.
40. Жданов В. П. Элементарные процессы в высокотемпературной плазме. Препринт № 80-110 ИЯФ СО АН СССР, 1980.
41. Cowan R. D., Mann J. B. — Astroph. J., 1979, v. 232, p. 940.
42. Crandall D. H. e. a. — J. Phys., 1979, v. B12, p. 249.
43. Henry R. J. W. — J. Phys., 1979, v. B12, p. 309.
44. Bete H. — Ann. Phys., 1930, Bd 5, S. 325.
45. Moores D. L., Golden L. B., Sampson D. H. — J. Phys., 1980, v. B13, p. 385.
46. Salop A. — Phys. Rev., 1976, v. A14, p. 2095.

ТОРМОЗНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ В ГОРЯЧЕЙ ПЛАЗМЕ

*В. И. Гервидс, В. П. Жданов, В. И. Коган,
Б. А. Трубников, М. И. Чибисов*

Введение

Тормозное излучение (ТИ) фотонов при столкновениях электронов с ионами в горячей термоядерной плазме является одним из механизмов потерь энергии плазмы. ТИ можно использовать для диагностики плазмы, поэтому существует необходимость детального его изучения. В этой статье дается обзор результатов теоретических исследований ТИ.

Атомы легких элементов (водород, углерод, азот, кислород) присутствуют в горячей термоядерной плазме в полностью ионизованном виде, т. е. в виде голых ядер с соответствующим зарядом $Z_{я}$. ТИ электронов на таких положительных ионах (ТИ на чисто кулоновских центрах) изучено к настоящему времени весьма детально и не представляет собой теоретической проблемы. При расчете ТИ на ионах, содержащих связанные электроны, мы сталкиваемся с многочастичной задачей, которая не имеет пока точного решения. В излучении принимает участие не только налетающий, но и связанные электроны [1]. Необходимо прежде всего выяснить, как конкретно проявляется роль связанных электронов для ионов различной кратности ионизации.

По этой причине § 1 этой статьи целиком посвящен обоснованию статического приближения, обычно применяемого для вычисления интенсивности ТИ на нейтральных атомах или ионах, имеющих связанные электроны. В этом же параграфе описана схема строгого квантовомеханического расчета интенсивности ТИ в рамках статического приближения. § 2 содержит простые (но достаточно точные) оценки абсолютной величины интенсивности и ее зависимости от заряда иона и температуры электронов плазмы. В § 3 изложено борновское приближение и аппроксимационный подход, основанный на использовании результатов теории для низкочастотного предела излучения; § 4 посвящен квазиклассическому приближению. В § 5 — дано сравнение результатов различных приближений.

§ 1. Статическое приближение

В нерелятивистском дипольном приближении спектральная интенсивность излучения, отнесенная на один электрон и один ион в единице объема, равна:

$$\frac{dW}{d\omega} = \frac{\omega^4}{6\pi^3 c^3} \frac{v_2}{v_1} \int |\langle \Psi_2^* | \sum_i \mathbf{r}_i | \Psi_1 \rangle|^2 d\Omega_2, \quad (1)$$

где $v_{1,2}$ — скорость налетающего электрона до и после столкновения; $\Psi_{1,2}$ — волновые функции системы всех электронов в поле ядра: N связанных электронов плюс один налетающий. Суммирование по i в матричном элементе формулы (1) производится по всем $N + 1$ электронам; $d\Omega_2$ — элемент телесного угла рассеяния налетающего электрона. Волновые функции нормируются на плоскую волну $\exp(i\mathbf{v}_1\mathbf{r})$ налетающего электрона. Используются атомные единицы: $e^2 = \hbar = m_e = 1$. В этих единицах фигурирующая в (1) скорость света $c = 137$, а единица энергии $27, 21$ эВ. Из коммутационных соотношений следует связь матричного элемента дипольного момента с матричными элементами импульса и силы:

$$\left\langle \sum_i \mathbf{r}_i \right\rangle_{12} = \frac{i}{\omega} \left\langle \sum_i \mathbf{p}_i \right\rangle_{12}; \quad (2)$$

$$\left\langle \sum_i \mathbf{r}_i \right\rangle_{12} = \frac{1}{\omega^2} \left\langle \sum_i \frac{Z_{\text{я}} \mathbf{r}_i}{r_i^3} \right\rangle_{12}. \quad (3)$$

В (3) входит сумма сил, действующих на каждый электрон только со стороны ядра, так как сумма всех внутренних межэлектронных сил равна нулю. Это не означает, конечно, что связанные электроны вообще не участвуют в излучении, ибо межэлектронное взаимодействие влияет на волновую функцию системы электронов, а стало быть, и на величину матричного элемента в (3).

Волновая функция системы $N + 1$ электронов удовлетворяет уравнению Шредингера:

$$\left\{ \sum_i^{N+1} \left(-\frac{\nabla_i^2}{2} - \frac{Z_{\text{я}}}{r_i} \right) + \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} - E \right\} \Psi(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_N, \mathbf{r}) = 0, \quad (4)$$

где $Z_{\text{я}}$ — заряд ядра атома. Если кратность заряда иона велика по сравнению с единицей: $Z \gg 1$ ($Z = Z_{\text{я}} - N$), то естественно предположить, что налетающий электрон слабо возмущает состояние связанных электронов. Этот факт уже использовался в виде теории возмущений по малому параметру $1/Z$ (см. с. 3, 31 настоящей сборника).

В указанных статьях малым считалось взаимодействие между всеми электронами. Если число связанных электронов велико, то такая теория возмущений для получения хорошей точности требует вычислений многих порядков разложения. В этой статье используется другое, так называемое статическое приближение, или метод искаженных волн.

Если волновая функция связанных электронов $\Phi_0(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_N)$ мало меняется от присутствия налетающего электрона, то, пренебрегая обменом, полную волновую функцию можно записать в виде

$$\Psi(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_N, \mathbf{r}) \simeq \Phi_0(\mathbf{r}_1 \dots \mathbf{r}_N) F(\mathbf{r}), \quad (5)$$

где $F(\mathbf{r})$ — волновая функция налетающего электрона. Уравнение для ее определения получим, если подставим (5) в (4), умножим после

этого (4) на $\Phi_0^*(r_1 \dots r_N)$ и проинтегрируем по $dr_1 \dots dr_N$:

$$\left[-\frac{\Delta}{2} - \frac{Z_{\text{я}}}{r} + U_{00}(r) - \frac{v^2}{2} \right] F(r) = 0; \quad (6)$$

$$U_{00}(r) = \left\langle \Phi_0^*(r_1 \dots r_N) \left| \sum_i \frac{1}{|r - r_i|} \right| \Phi_0(r_1 \dots r_N) \right\rangle. \quad (7)$$

Отсюда видно, что волновая функция $F(r)$ описывает движение налетающего электрона в статическом поле иона, равном $-Z_{\text{я}}/r + U_{00}(r)$.

В этом приближении роль связанных электронов сводится лишь к созданию дополнительной силы, действующей на налетающий электрон. Непосредственное излучение связанных электронов отсутствует. Точнее, интенсивность их излучения много меньше, чем у налетающего электрона, так как они сильно связаны с ионом. В этом проявляется отличие ТИ на многозарядных ионах ($Z \gg 1$) от ТИ на нейтральных атомах [1].

Поскольку в основном состоянии Φ_0 ионные оболочки не обладают дипольным моментом, а полный их импульс и сила взаимодействия с ядром равны нулю, то прямая подстановка (5) в соотношении (2) и (3) приводит к следующим соотношениям для матричных элементов между волновыми функциями только налетающего электрона:

$$\langle F_{v_1}^* | r | F_{v_2} \rangle = \frac{i}{\omega} \langle F_{v_1}^* | p | F_{v_2} \rangle = \frac{1}{\omega^2} \left\langle F_{v_1}^* \left| \frac{Z_{\text{я}} r}{r^3} \right| F_{v_2} \right\rangle. \quad (3a)$$

Эти соотношения уже одноэлектронные, причем в (3a) входит сила взаимодействия налетающего электрона только с ядром. С другой стороны, из вида уравнения (6) следует совсем другая связь между матричными элементами (3a). Уже после того, как получено уравнение (6), мы видим, что на налетающий электрон действует сила не только от ядра, но также и от связанных электронов $U_{00}(r)$. Поэтому вместо (3a) мы имеем в статическом приближении равенства

$$\langle F_{v_1}^* | r | F_{v_2} \rangle = \frac{i}{\omega} \langle F_{v_1}^* | p | F_{v_2} \rangle = \frac{1}{\omega^2} \left\langle F_{v_1}^* \left| \frac{Z_{\text{я}} r}{r^3} + \nabla U_{00} \right| F_{v_2} \right\rangle. \quad (3b)$$

Выражение (3b) не совпадает с (3a), причем их отличие на силу от связанных электронов, вообще говоря, не мало, если число связанных электронов $N \sim Z_{\text{я}}$ (при $Z_{\text{я}} - N = Z \gg 1$). Естественно, возникает вопрос: в чем причина такого сильного различия и какое из выражений более точное?

Ответ на этот вопрос таков: более правильным является вычисление матричного элемента (3b) от поля всего иона, а не только от поля ядра (3a). Дело в том, что подстановка функции (5) в (3) незаконна. Статическое приближение (5) учитывает воздействие связанных электронов на налетающий и не учитывает равного ему по абсолютной величине (но противоположного по знаку) обратного воздействия налетающего электрона на связанные. Поэтому при использовании (5) более

последовательным при получении (3) является учет силы, действующей на налетающий электрон, от связанных электронов и пренебрежение обратной силой несмотря на то, что сумма этих сил точно равна нулю. При таком вычислении мы получим (3б), а не (3а).

Статическое приближение (5) является нулевым приближением при разложении по малому корреляционному взаимодействию налетающего электрона со связанными [2]:

$$V = \sum_{i=1}^N \frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}_i|} - U_{00}(r). \quad (8)$$

Если построить следующее приближение для многоэлектронной волновой функции, то при вычислении (3) в одноэлектронном матричном элементе вновь появляется сила статического поля связанных электронов [2]. Сильное отличие (3а) от (3б) ставит под сомнение выводы теории возмущений, так как остается неясным, не приведут ли более высокие порядки теории возмущений к еще большему изменению матричного элемента силы. Приведенные выше соображения говорят в пользу того, что этого не произойдет.

Укажем еще на следующее обстоятельство. Переход в статическом приближении к одноэлектронным матричным элементам дипольного момента и импульса не содержит никаких некорректностей. Но, как уже говорилось, из вида уравнения (6) для волновой функции налетающего электрона следует уже с формальной математической необходимостью равенство (3б), а не (3а).

Для столкновений электронов с нейтральными атомами корреляционное взаимодействие не мало, так что статическое приближение для этого случая дает неточные результаты [1]. Для рассеяния медленных и быстрых [3—5] электронов учет поляризуемости нейтрального атома существенно сказывается на результате. Такой учет для области частот излучения, удовлетворяющих условию $\Gamma_n \ll |E_n - \omega| \ll |E_n|$ (где Γ_n — естественная ширина линии), приводит к интерференции тормозного излучения с излучением атома, возбужденного налетающим электроном на уровень E_n [3—5].

Для столкновений электронов с многозарядными ионами корреляционные эффекты уменьшаются пропорционально Z^{-1} . Неучтенные обменные эффекты в тормозном излучении из-за аддитивности взаимодействия электронов с полем проявляются только при учете корреляционных взаимодействий налетающего электрона со связанными или связанных электронов друг с другом. Поэтому неточность статического приближения уменьшается с ростом заряда иона пропорционально Z^{-1} . Для излучения жестких квантов при столкновении быстрых электронов с нейтральными атомами статическое приближение также применимо, ибо такие кванты излучаются на малых расстояниях, когда налетающий электрон взаимодействует с сильно связанными электронами внутренних оболочек.

Разложив волновую функцию налетающего электрона по сферическим гармоникам, получим следующее выражение для спектраль-

ной интенсивности ТИ:

$$\frac{dW}{d\omega} = \frac{32}{3c^3} \frac{v_2}{v_1} \sum_{l=0}^{\infty} (l+1) [M_{l1, (l+1)2}^2 + M_{(l+1)1, l2}^2]; \quad (9)$$

$$M_{l1, l'2} = \int_0^{\infty} \varphi_l(v_1, r) \varphi_{l'}(v_2, r) \left[\frac{Z_{\pi}}{r^2} + \frac{dU_{00}}{dr} \right] dr. \quad (10)$$

Радиальные волновые функции являются решениями уравнения

$$\varphi_l'' + 2 \left(\frac{Z_{\pi}}{r} - U_{00} - \frac{l(l+1)}{2r^2} + \frac{v^2}{2} \right) \varphi_l = 0. \quad (11)$$

Формулами (9)—(11) исчерпывается квантовая постановка задачи вычисления интенсивности ТИ в статическом приближении. Для ее конкретного решения необходимо знать статический потенциал связанных электронов U_{00} .

Отметим, что исследованиям ТИ при столкновениях электронов с полностью ионизованными или нейтральными атомами в статическом приближении посвящены обзоры [6—8].

В работах [9, 10] рассчитана интенсивность в статическом приближении по формулам (9)—(11) при столкновениях электронов с атомами и ионами различных кратностей некоторых элементов. В качестве статического поля ионов использовалось поле Томаса — Ферми [11]. Результаты обсуждаются в последнем параграфе. В работе [12] аналогичные расчеты проделаны для нейтральных атомов с использованием хартри-фоковского статического потенциала.

§ 2. Анализ зависимостей интенсивности ТИ от энергии, температуры и частоты излучения

В подавляющем большинстве расчетов статическое поле иона предполагается сферически симметричным, т. е. зависящим только от абсолютного значения r — расстояния точки наблюдения до ядра. Функциональная зависимость $U(r)$ несложна. На больших расстояниях r , за пределами электронных оболочек иона, статическое поле должно приближаться к кулоновскому полю иона — Z/r . На малых расстояниях, внутри оболочек, оно близко к кулоновскому полю ядра — $Z_{\text{я}}/r$. Для промежуточных расстояний должен наблюдаться, по-видимому, плавный переход от $Z_{\text{я}}/r$ до Z/r . Такое поведение $U(r)$ делает необходимым исследование ТИ в чисто кулоновском поле и позволяет также провести простые и, как окажется, довольно точные оценки интенсивности ТИ.

Оценим величину эффекта. Пусть электрон со скоростью v и прицельным параметром ρ пролетает мимо ядра с зарядом Z . Интенсивность дипольного излучения, равная $2|\ddot{d}|^2/3C^3$, миксимальна при наибольшем сближении, когда $r = r_{\text{мин}}$, где она оказывается порядка $\frac{2}{3} \frac{Z^2 e^6}{c^3 m^2 r_{\text{мин}}^4}$ (в этом абзаце используем обычные единицы измерения).

При этом излучаемая частота $\omega \approx v_{\text{макс}}/r_{\text{мин}}$, где $v_{\text{макс}}$ — скорость в точке наибольшего сближения. Величины $r_{\text{мин}}$ и $v_{\text{макс}}$ находятся из законов сохранения энергии $1 = \rho^2/r_{\text{мин}}^2 - \frac{2Ze^2}{mv^2 r_{\text{мин}}}$ и момента $r_{\text{мин}}v_{\text{макс}} = \rho v$; при рассматриваемых $\rho \ll Ze^2/mv^2$ $r_{\text{мин}} \sim mv^2\rho^2/2Ze^2$, $v_{\text{макс}} \sim 2Ze^2/mv\rho$. Умножая интенсивность на время столкновения $\tau \sim 1/\omega$, находим энергию, излучаемую при одном пролете $\Delta E(\rho) \sim (8/3)Z^4e^{10}/m^4c^3v^5\rho^5$. Спектральную плотность излучения $dW/d\omega$ получим, умножив $\Delta E(\rho)$ на $2\pi\rho d\rho$; учитывая, что

$$d\omega \sim d\left(\frac{v_{\text{макс}}}{r_{\text{мин}}}\right), \text{ получаем } \frac{dW}{d\omega} \sim \frac{4\pi}{9} \frac{Z^2 e^6}{m^2 v^2 c^3}.$$

При малых скоростях, когда $v_1 \ll Z$, классическое приближение для налетающего электрона обосновано строго и для спектральной плотности мы имеем формулу Крамерса:

$$\frac{dW_k}{d\omega} = \frac{16\pi Z^2 e^6}{3\sqrt{3} m^2 c^3 v_1^2}; \quad \omega \gg \frac{mv_1^2}{Ze^2}. \quad (12)$$

Для произвольных значений энергий электрона и частот излучения точную спектральную плотность излучения можно записать в виде

$$\frac{dW}{d\omega} = g\left(\frac{Z}{v_1}; \frac{2\omega}{v_1^2}\right) \frac{dW_k}{d\omega}, \quad (13)$$

введя фактор Гаунта g , зависящий от двух переменных Z/v_1 и $2\omega/v_1^2$.

Для рассеяния на чисто кулоновском центре этот множитель был получен Зоммерфельдом [8]:

$$g = \frac{\pi\sqrt{3}}{[1 - \exp(-2\pi\eta_1)][1 - \exp(-2\pi\eta_2)]} x_0 \frac{d}{dx_0} |F(i\eta_1; i\eta_2; 1; x_0)|^2, \quad (14)$$

$$\eta_{1,2} = Z/v_{1,2}; \quad x_0 = -\frac{4\eta_1\eta_2}{(\eta_1 - \eta_2)^2}.$$

Запись спектральной плотности в виде выражения (13) удобна потому, что классическая плотность излучения Крамерса $dW_k/d\omega$ не зависит от частоты, а гаунт-фактор g близок к 1 и мало изменяется в широком интервале значений Z , v_1 , ω .

Для практики интересны характеристики ТИ, усредненные по максвелловской функции распределения $f(v)$ плазменных электронов. Спектральная интенсивность ТИ из единицы объема плазмы с плотностью электронов N_e и ионов N_Z равна:

$$\frac{dQ}{d\omega} = \bar{g}\left(\frac{\omega}{T}; \frac{Z^2}{2T}\right) \frac{dQ_k}{d\omega}; \quad (15)$$

$$\frac{dQ_k}{d\omega} = \frac{32\pi Z^2 N_e N_Z}{3\sqrt{3} c^3 \sqrt{2\pi T}} e^{-\frac{\omega}{T}}; \quad (16)$$

$$\bar{g} = \int_{\sqrt{2\omega}}^{\infty} g v_1 f(v_1) dv_1 / \langle v \rangle. \quad (17)$$

Здесь \bar{g} — среднее значение фактора Гаунта; $dQ_k/d\omega$ — средняя крамерсовская плотность ТИ.

Полная интенсивность ТИ по всем частотам из единицы объема плазмы

$$Q = \bar{g}_T \left(\frac{Z^2}{2T} \right) Q_k; \quad (18)$$

$$\bar{g}_T = \int_0^\infty \bar{g} \left(\frac{\omega}{T}; \frac{Z^2}{2T} \right) e^{-\frac{\omega}{T}} \frac{d\omega}{T}, \quad (19)$$

где \bar{g}_T — дважды усредненный фактор Гаунта. Фигурирующая в формуле (18) полная крамерсовская мощность излучения из единицы объема [эрг/(см³·с)] равна:

$$Q_k = 1,54 \cdot 10^{-25} N_e N_Z Z^2 T^{1/2}. \quad (20)$$

Основными свойствами потерь энергии плазмой на ТИ являются, как видно из (20), квадратичный рост потерь с увеличением заряда примесных ионов и возрастание их $\sim T^{1/2}$ с ростом температуры. ТИ электронов на протонах ($Z = 1$) при плотностях $N_e = N_p = 10^{14}$ см⁻³ и температуре 10 кэВ = 367,5 а. е. составит согласно формуле (20) около 0,003 Вт/см³. Если в такой плазме имеются примесные ионы с $Z = 26$ и плотностью $N_Z = 10^{12}$ см⁻³, то на этих ионах $Q_k = 0,02$ Вт/см³. Для точного расчета характеристик ТИ необходимо вычислять гаунт-фактор g .

Выражение (14) для g в чисто кулоновском поле через гипер-геометрическую функцию очень сложно. В работах [13, 14] приведены численные расчеты функции (14), а в [15] получено \bar{g} , даваемое формулой (17). Подробная классификация более чем 20 предельных аналитических формул для (14) содержится в обзоре [7]. Приведем две из них. В борновском приближении имеем:

$$g_B = \frac{\sqrt{3}}{\pi} \ln \left(\frac{v_1 + v_2}{v_1 - v_2} \right). \quad (21)$$

При $v_1 \gg Z$ это выражение хорошо описывает спектральную интенсивность ТИ практически во всем интервале частот, за исключением области $v_2 \ll Z$, когда энергия электрона после излучения мала, т. е. вблизи коротковолновой границы спектра. Полная (по частотам) интенсивность ТИ в борновском приближении

$$W_B = \frac{2\sqrt{3}}{\pi} W_K \quad (22)$$

и отличается от полной интенсивности ТИ в приближении Крамерса всего на 11%. Улучшить борновское приближение вблизи коротковолновой границы можно, домножив (21) на множитель Эльверта, учитывающий изменение амплитуды волновой функции улетающего электрона вблизи ядра. Таким путем получаем:

$$g_E = \frac{v_1}{v_2} \frac{1 - \exp(-2\pi\eta_1)}{1 - \exp(-2\pi\eta_2)} g_B. \quad (23)$$

На рис. 1 показаны гаунт-факторы для чисто кулоновского поля, вычисленные в различных приближениях: точно [13] по формуле (14), в борновском пределе без поправки по формуле (21) и с поправкой по

Рис. 1. Зависимость определенного формулой (13) гаунт-фактора от относительного значения энергии фотона $\hbar\omega/E_1$ для тормозного излучения электрона в чисто кулоновском поле:

1 — борновское приближение, формула (21); 2 — точное квантовомеханическое значение, формула (14) при $Z/v_1=0,1$; гаунт-фактор Борна — Эльверта, формула (23), с точностью до толщины линии совпадает с кривой 2.

Квазиклассическое приближение: 3 — полуклассический спектр [21] при $\eta_1 \ll 1$; 4 — классический спектр (40) при $\eta_1=0,1$; 5 — классический спектр (40) при $\eta_1=50$; 6 — квазиторновский спектр (37)

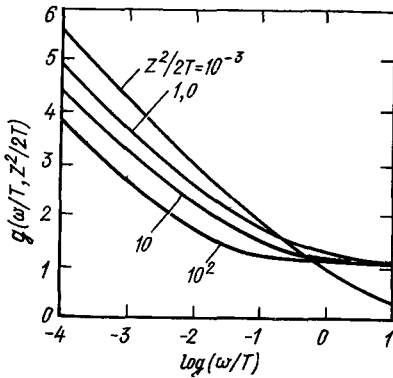
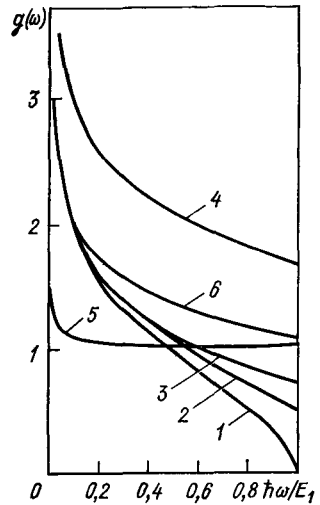


Рис. 2. Зависимость чисто кулоновского гаунт-фактора от частоты излучения и температуры электронов, полученная в работах [14, 16] численным усреднением по максвелловскому распределению формулы Зоммерфельда (14)

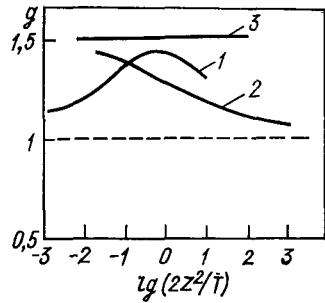


Рис. 3. Зависимость чисто кулоновского полного гаунт-фактора (19) от температуры:

1 — точная квантовомеханическая кривая из работ [15, 16]; 2 — полуклассическая кривая [21]; 3 — квазиторновское значение $g_{KB}=1,52$

формуле (23). Гаунт-фактор (23) с поправкой Эльверта практически совпадает с точными результатами (в пределах толщины линии рисунка). На этом же рисунке приведены гаунт-факторы, полученные в § 4.

На рис. 2 показан усредненный по максвелловскому распределению частотный гаунт-фактор для чисто кулоновского поля для разных

температур плазмы. На рис. 3 показан чисто кулоновский полный гаунт-фактор. Следует обратить внимание на масштабы по осям: при изменении параметра Z^2/T на четыре порядка \bar{g}_T меняется в пределах 40%, оставаясь близким к единице.

§ 3. Борновское приближение и аппроксимация интенсивности ТИ на основе результатов для низкочастотного предела $\omega \rightarrow 0$

В борновском приближении матричный элемент от силы статического поля атомной частицы, имеющей связанные электроны, легко выражается через ее форм-фактор $f(q)$:

$$\langle \nabla U(r) \rangle_{12} = \frac{4\pi i (\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1)}{(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)^2} [Z_{Я} - f(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)]^2; \quad (24)$$

$$f(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) = \int |\Phi_0|^2 \exp [i(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) \mathbf{r}] d\mathbf{r}. \quad (25)$$

Спектральная интенсивность ТИ в этом приближении равна:

$$\frac{dW_B}{d\omega} = \frac{16v_2}{3c^3 v_1} \int_{-1}^{+1} [Z_{Я} - f(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)]^2 \frac{d \cos \theta}{(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)^2}, \quad (26)$$

где θ — угол рассеяния — угол между векторами \mathbf{v}_1 и \mathbf{v}_2 .

Для водородоподобных ионов форм-фактор является простой аналитической функцией. Для произвольных нейтральных атомов с большим числом связанных электронов универсальный численный форм-фактор, полученный в приближении Томаса — Ферми и зависящий от параметра $Z^{-1/3} |\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2|$, приведен в обзоре [6]. Согласно Мотту и Мессе [17] статический потенциал атома вида

$$U(r) = \frac{Z_{Я}}{r} \exp(-\lambda r) \quad (27)$$

дает в борновском приближении для упругого рассеяния примерно тот же результат, что и точный потенциал Томаса — Ферми при $\lambda = 0,75Z^{1/3}$. С помощью этого потенциала получаем следующее выражение для спектральной интенсивности:

$$\frac{dW_B}{d\omega} = \frac{8Z^2}{3c^3 v_1^2} \left[\ln \left(\frac{1 + \beta + \alpha}{1 + \beta - \alpha} \right) - \frac{2\alpha\beta}{(1 + \beta)^2 - \alpha^2} \right]; \quad (28)$$

$$\alpha \equiv 2v_1 v_2 / (v_1^2 + v_2^2); \quad \beta = \lambda^2 / (v_1^2 + v_2^2)$$

при $\lambda = 0$ формула (28) переходит в чисто кулоновский результат. Отметим, что недостатком борновского приближения является обращение в нуль спектра ТИ на коротковолновой границе (см. (21) и (28)).

Покажем, в развитие работы [18], как можно элементарно устранить этот недостаток и, пользуясь нестрогими, но правдоподобными соображениями, получить аналитические формулы для расчета спектров ТИ для ионов с остовом. Используем классическую формулу ди-

польного излучения за один пролет (в обычных единицах):

$$\frac{dW}{d\omega} = \frac{8\pi e^2}{3c^3} |\dot{\mathbf{v}}_\omega|^2; \quad \dot{\mathbf{v}}_\omega = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \dot{\mathbf{v}} \exp(i\omega t) dt. \quad (29)$$

Вычислим интеграл в (20) в «приближении мягких квантов», т. е. в пределе $\omega \rightarrow 0$:

$$\dot{\mathbf{v}}_{\omega \rightarrow 0} = \Delta \mathbf{v} / 2\pi; \quad \frac{dW}{d\omega} = \frac{2e^2}{3\pi c^3} |\Delta \mathbf{v}|^2. \quad (30)$$

Умножая (30) на число столкновений $v_1 d\sigma$ и интегрируя по $d\sigma = 2\pi r dr$, получаем спектр излучения из единицы объема плазмы, отнесенный на один электрон и ион:

$$\frac{dW_\omega}{d\omega} = \frac{2e^2}{3\pi c^3} v_1 \int |\Delta v|^2 d\sigma. \quad (31)$$

Сечение рассеяния $d\sigma$ будем описывать модифицированной формулой Резерфорда с эффективным зарядом $Z_{\text{эф}}$:

$$d\sigma = \frac{8\pi e^2 Z_{\text{эф}}^2}{m^2 v_1 v_2} \frac{d|\Delta v|}{|\Delta v|^3}, \quad (32)$$

Тогда гаунт-фактор — отношение излучения на ионе к крамерсовскому излучению на ядре — равен:

$$g_\omega = \frac{\sqrt{3}}{\pi Z_{\text{я}}^2 \sqrt{1-x}} \int_{v_1-v_2}^{v_1+v_2} Z_{\text{эф}}^2 (\Delta v) \frac{d|\Delta v|}{|\Delta v|}; \quad (33)$$

$$x = \hbar \omega / E_1.$$

В чисто кулоновском поле ($Z_{\text{эф}} = Z$) это выражение переходит в борновский гаунт-фактор (21), поправленный на множитель $(1-x)^{-1/2}$, который обеспечивает конечность g_ω при $x = 1$.

Обсудим свойства зависимости эффективного заряда от изменения скорости при рассеянии $Z_{\text{эф}}(\Delta v)$. Если «зондирующая длина волны» электрона $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{m|\Delta v|}$ больше размера оболочек связанных электронов, то эффективный заряд должен быть близок к заряду иона: $Z_{\text{эф}} \simeq Z$. Если же длина волны электрона $\tilde{\lambda}$ мала (быстрый электрон) по сравнению с размером K -оболочки, то $Z_{\text{эф}} \simeq Z_{\text{я}}$. Исходя из этих граничных значений, выберем для эффективного заряда следующую простейшую зависимость:

$$Z_{\text{эф}} = Z + N\varphi(\Delta v); \quad (34)$$

$$\varphi(\Delta v) = \frac{|\Delta v|}{[|\Delta v|^2 + \Delta v_0^2]^{1/2}}, \quad (35)$$

содержащую один подгоночный параметр Δv_0^2 (N — число связанных электронов). Для его определения перепишем (35) в виде

$$\varphi(\Delta v) = \left[1 + \frac{\Delta v_0^2}{|\Delta v|^2} \right]^{-1/2} = \left[1 + \left(\frac{\tilde{\lambda}_{\text{зонд}}}{r} \right)^2 \right]^{-1/2}, \quad (35a)$$

где \bar{r} — некоторый средний размер иона. Этот размер примем равным среднему геометрическому $\bar{r} = \sqrt{r_{\text{мин}} r_{\text{макс}}}$ между минимальным размером $r_{\text{мин}} = 2/Z_{\text{Я}}$ размером K -оболочки и максимальным размером $r_{\text{макс}}$ — размером внешней оболочки иона, который можно принять равным [18]:

$$r_{\text{макс}} = \frac{9}{(1+Z)^{1/3}} \left[1 - \left(\frac{1+Z}{Z_{\text{Я}}} \right)^{1/4} \right]. \quad (36)$$

Подставляя (34) и (35) в (33), получаем:

$$g_{\omega} = \frac{\sqrt{3}}{\pi Z_{\text{Я}}^2 \sqrt{1-x}} \left[Z^2 \ln \left(\frac{v_+}{v_-} \right) + 2NZ \ln \left(\frac{v_+ + \sqrt{1+v_+^2}}{v_- - \sqrt{1+v_-^2}} \right) + N^2 \ln \left(\sqrt{\frac{1+v_+^2}{1+v_-^2}} \right) \right], \quad (37)$$

где $v_{\pm} = (1 \pm \sqrt{1-x})v_0$, а $v_0 = v_1/Z^*$ и введен «средний заряд»:

$$Z^* = 1,5 \left[\frac{Z_{\text{Я}} (1+Z)^{1/3}}{1 - \left(\frac{1+Z}{Z_{\text{Я}}} \right)^{1/4}} \right]^{1/2} \quad (38)$$

На рис. 4 гаунт-фактор (37) сравнивается с полученными другими способами. Видно, что зависимость (37) от частоты очень слабая, так

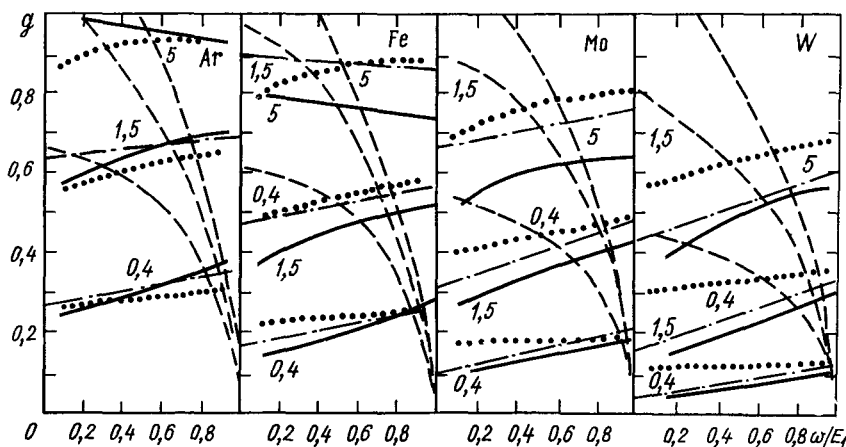


Рис. 4. Спектральный гаунт-фактор для ТИ на нейтральных атомах Ar, Fe, Mo, W, полученный в статистическом приближении с томас-фермиевским потенциалом: сплошные линии — численный расчет методом парциальных волн [9, 10] (см. также табл. 1); пунктир — борновское приближение, формула (21); точки — квазиторновская формула (37); штрихпунктир — классическая формула (55). Числа над кривыми — начальная энергия электронов в кэВ

что g_ω можно заменить его значением на высокочастотном конце спектра:

$$g_{\omega \rightarrow v_1^2/2} \simeq \frac{2\sqrt{3} v_0^2}{\pi (1+v_0^2)}. \quad (39)$$

Зависимости (37) и (39) близки к точному гаунт-фактору, полученному численным интегрированием уравнения Шредингера (6).

Проинтегрированный по частотам, полный гаунт-фактор (37) равен:

$$g = \int_0^1 g_\omega dx = \frac{2\sqrt{3}}{\pi Z_\pi^2} [Z^2 \ln 4 + 2Z (Z_\pi - Z) \Psi_1 + (Z_\pi - Z)^2 \Psi_2], \quad (37a)$$

где

$$\Psi_1(v_0) = 2 \ln \left(\frac{2v_0 + \sqrt{1+4v_0^2}}{v_0 + \sqrt{1+v_0^2}} \right) + \frac{v_0}{1 + \sqrt{1+v_0^2}} - \frac{3v_0}{\sqrt{1+v_0^2} + \sqrt{1+4v_0^2}};$$

$$\Psi_2(v_0) = \ln \left(\frac{1+4v_0^2}{1+v_0^2} \right) - \frac{1}{v_0} \operatorname{arctg} \left(\frac{2v_0^3}{1+3v_0^2} \right).$$

§ 4. Аппроксимация на основе квазиклассического приближения

В этом параграфе обсуждаются результаты, получаемые в квазиклассическом приближении, в котором налетающий электрон рассматривается как классическая (неквантовая) частица. Для неупругих процессов (возбуждение атомной частицы, излучение в ее поле) это приближение справедливо при выполнении двух условий: обычной классичности ($d\lambda/dx \ll 1$) движения по начальной и конечной траекториям и малости теряемой налетающим электроном энергии по сравнению с ее начальным значением (требование единственности траектории). Второе условие должно выполняться, вообще говоря, не для всей траектории, а лишь для той ее части, где интенсивность излучения максимальна. При невыполнении этого условия необходимо строить усложненный вариант квазиклассического приближения.

Для ТИ в кулоновском поле эти условия выполняются при $\eta_1 \gg 1$ — малых скоростях столкновения. В этом случае обычное требование классичности выполнено. Электрон движется по сильно искривленной (почти параболической) траектории, излучая в основном на расстояниях наибольшего сближения с ионом, которые много меньше прицельных параметров, соответствующих этим траекториям. На этих расстояниях кинетическая энергия электрона за счет притяжения к иону много больше начальной энергии, так что второе условие классичности также выполнено.

Вывод гаунт-фактора методами классической электродинамики содержится в [19]. Он приводит к результату

$$g_{\text{кл}} = \frac{\pi \sqrt{3}}{4} i \nu H_{i\nu}^{(1)}(i\nu) H_{i\nu}^{(1)'}(i\nu), \quad (40)$$

где $\nu = \frac{\omega}{v_1^2} \eta_1$; $\eta_1 \gg 1$. Предельный переход от (14) к (40) при $\eta_1 \rightarrow \infty$ выполнен в [20], а путем прямого вычисления предела выражения (14) при $\hbar \rightarrow 0$ в [21].

Функция (40) монотонна, ее предельные выражения имеют вид [22]

$$g_{\text{кл}} \simeq \begin{cases} 1 + \frac{3^{2/3} \Gamma^2(1/3)}{10\pi \sqrt{3}} \frac{1}{2^{1/3}} \frac{1}{\nu^{2/3}} + \dots; & \nu \gg 1; & (41) \\ \frac{\sqrt{3}}{\pi} \ln\left(\frac{2}{\gamma\nu}\right) - \frac{2\sqrt{3}}{3\pi} \nu^2 \left(\ln\frac{2}{\gamma\nu}\right)^2 + \dots; & \nu \ll 1; & (42) \end{cases}$$

где $\gamma = 1,781$ — постоянная Эйлера.

Значение $g \simeq 1$ при $\nu \gg 1$ соответствует приближению Крамерса [23]. Выражение (40) более общее, оно правильно описывает и низкочастотный предел $\omega \rightarrow 0$.

В работах [21, 24] был предложен приближенный полуклассический метод (ПКП) рассмотрения ТИ. Суть метода состоит в использовании результатов классической теории ТИ [19] в комбинации с некоторыми квантовыми ограничениями, состоящими в требовании относительной малости квантовых неопределенностей классических величин, существенных для процесса излучения.

Исходным основанием для использования ПКП являются свойства симметрии кулоновского поля, приводящие к характерной нечувствительности вероятностей ряда процессов к параметру η , наиболее ярко проявляющейся в выпадении \hbar из резерфордского сечения рассеяния, а в несколько ослабленном виде — в практической независимости (дипольного) полного эффективного излучения от η . И действительно, в случае чисто кулоновского поля ПКП позволяет воспроизвести основные результаты точной квантомеханической теории Зоммерфельда [8].

В случае многоэлектронного иона поле в переходной области $Z \lesssim Z_{\text{эф}} \lesssim Z_{\text{я}}$ ($Z_{\text{эф}}$ — эффективный заряд, определяющий интенсивность ТИ) уже не является кулоновским, но, как можно показать, во всей этой области при $Z_{\text{эф}} \gg 1$ автоматически выполняется условие квазиклассичности движения $|d\lambda/dr| \ll 1$, благодаря чему ПКП правильно описывает ТИ также и для этой области.

В классическом приближении для налетающего электрона эффективное сечение тормозного излучения всех частот (т. е. полной потери энергии) равно:

$$\kappa(v_1) = \int_0^{\infty} 2\pi\rho d\rho \Delta E(v_1, \rho); \quad (43)$$

$$\Delta E = \frac{2}{3c^3} \int_{-\infty}^{+\infty} |\ddot{r}(\rho, t)|^2 dt, \quad (44)$$

где ΔE — полная энергия излучения за все столкновение ($\kappa = \int_0^{E_1} dW$).
 Проинтегрировав (43) сначала по ρ , получим:

$$\kappa(v_1) = \frac{8\pi}{3v_1 c^3} \int_{r_{\text{мин}}^*}^{\infty} \left(\frac{dU}{dr} \right)^2 \sqrt{1 - \frac{U(r)}{E_1}} r^2 dr, \quad (45)$$

$r_{\text{мин}}^*$ — минимальное расстояние между электроном и рассеивающим центром при $\rho = 0$. Для поля притяжения $r_{\text{мин}}^* = 0$ и интеграл (45) расходится на нижнем пределе, если при $r \rightarrow 0$ $U \rightarrow r^{-\alpha}$ ($\alpha > \frac{2}{5}$).

Физически обязательная конечность $\kappa(v_1)$ может быть достигнута обрезанием интеграла на некотором конечном $r_{\text{мин}}^* > 0$. Потребовав, чтобы квантовая неопределенность энергии электрона не превышала E_1 , получим условие для определения расстояния обрезания

$$A \frac{\hbar}{r_{\text{мин}}^*} \sqrt{1 - \frac{U(r_{\text{мин}}^*)}{E_1}} = 1, \quad (46)$$

где A — числовой коэффициент порядка 1. Его можно определить из условия, чтобы для чисто кулоновского поля полная потеря энергии

$$\kappa(v_1) = \frac{8\pi}{9A} \frac{Z^2}{3c^3} \frac{(1+2x)^{3/2} - 1}{x(1+2x)^{1/2}}. \quad (47)$$

(где $x = Z/v_1^2 r_{\text{мин}}^*$) при $x \gg 1$ совпала с крамерсовским полным излучением. Это дает $A = 2/\sqrt{3} = 1,154$. При этом, как видно из рис. 3, в физически наиболее интересной области $0,1 \leq 2Z^2/T \leq 10$ отличие (47) от результата точной теории Зоммерфельда [8] составляет примерно 5%, в «антиклассическом» борновском пределе $\eta_1 \rightarrow 0$ формула (47) завышает результат всего на 36%.

Результат полуклассического расчета κ по формулам (45) и (46) с $A = 2/\sqrt{3}$ для ряда ионов Fe, Mo, W с использованием зоммерфельдовской аппроксимации [25] потенциала U Томаса — Ферми показан на рис. 5. Отличие от результатов численного расчета [9, 10] не превышает 30%.

С помощью полуклассического метода можно найти спектр ТИ в произвольном центральном поле. Для кулоновского поля результат

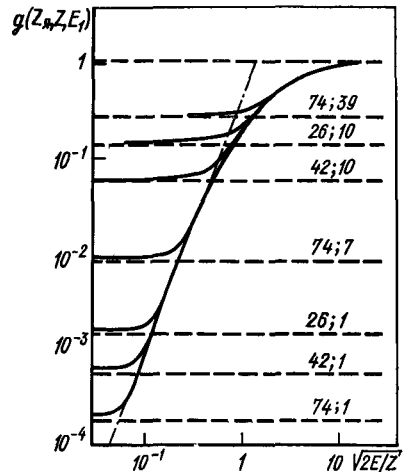


Рис. 5. Полуклассический гаунт-фактор [24] $g = \kappa_{\text{пн}}/\kappa_{\text{к}}$:

пунктир — асимптотические значения g . Числа у асимптот — значения Z_n и $Z_e/3$.

Штрихпунктир — зависимость $g = 0,47(2E_1/Z)^{1/3}$

имеет вид:

$$g(\omega) = \frac{\pi\sqrt{3}}{4} iv \left(1 + \frac{1}{\eta_1'}\right) H_{iv}^{(1)} \left[iv \left(1 + \frac{1}{\eta_1'}\right) \right] H_{iv}^{(1)'} \left[iv \left(1 + \frac{1}{\eta_1'}\right) \right], \quad (48)$$

где $\eta_1' = \eta_1 \gamma$, $H^{(1)}$ и $H^{(1)'}$ — функция Ганкеля и ее производная по аргументу. Результат (48) для $\eta_1 \ll 1$ показан на рис. 1.

Формула (48) хорошо воспроизводит результаты точной теории Зоммерфельда [8] практически во всей области энергий и частот. Исключение составляет сугубо квантовый предельный случай «борновских» энергий ($\eta_1 \ll 1$) в окрестности коротковолновой границы.

В случае томас-фермиевского (ТФ) иона полуклассический метод, требующий фурье-анализа траекторий, не может привести к простым аналитическим формулам. Однако в силу отмеченной выше квазиклассичности движения в переходной области, и, как можно показать, небольшой радиальной протяженности зоны, ответственной за ТИ, и для иона можно приближенно воспользоваться формулой (48), заменив в ней всюду Z на эффективный заряд $Z_{зф}(v, \omega)$, соответствующий расстоянию r_0 , ответственному за излучение данной частоты: $Z_{зф} = r_0 U(r_0)$, где r_0 — решение уравнения [24]*:

$$\omega = \frac{2^{3/4} 3^{1/4}}{5^{3/2}} \frac{v}{r_0} \sqrt{1 - \frac{U(r_0)}{E_1}}. \quad (49)$$

Некоторые из результатов приближенного расчета по формулам (48) и (49) сравниваются с результатами численных расчетов на рис. 7; согласие вполне удовлетворительное.

Имеются основания рассчитывать на успешность и чисто классического описания спектра ТИ на ТФ атоме или ионе: для малых ω сечение ТИ выражается через транспортное сечение рассеяния, в котором, во-первых, дифференциальное сечение рассеяния электронов интересующих нас киловольтных энергий в ТФ потенциале хорошо описывается квазиклассической теорией [25, 26] и, во-вторых, подавлено рассеяние на малые, «неклассические» углы; для больших же ω , за которые отвечают достаточно малые расстояния, потенциал уже не сильно отличается от кулоновского, для которого классичность спектра обеспечивается классичностью движения [21].

Гаунт-фактор $g(\omega, E, Z)$ классического спектра ТИ электрона в ТФ потенциале нейтрального атома, получаемый с помощью [19, 24], оказывается сложной функцией двух параметров (по существу, чисто классической природы, поскольку содержащееся в них \hbar входит просто как параметр жестко фиксированного потенциала):

$$\Omega = \frac{\hbar^3}{me^4} \frac{\omega}{Z}; \quad \varepsilon = 0,885 \frac{\hbar^2}{me^4} \frac{E}{Z^{4/3}}. \quad (50)$$

Анализ всего массива соответствующих результатов [10] показывает*, что они с точностью не хуже 15% являются функциями только

* В уравнении (8) работы [24] вместо $4/\pi\sqrt{3}$ должно быть $5^{3/2}/2^{3/4} \cdot 3^{1/4}$.

** В излагаемой части работы принимал участие А. Б. Кукушкин.

от Ω и ε , играющих тем самым роль приближенных параметров подбоя квантового спектра ТИ.

Анализ классического спектра, учитывая его вялый ход, проведем для характерных значений частоты — нулевой и близкой к максимальной.

Так, для $\omega = 0$ гаунт-фактор выражается через транспортное сечение рассеяния, что дает

$$\left. \begin{aligned} g_0(\varepsilon) &\approx \frac{\sqrt{3}}{\pi} \ln(2,1\varepsilon), & \varepsilon \gg 1; \\ g_0(\varepsilon) &\approx 4,34\varepsilon^{4/3}, & \varepsilon \ll 0,01; \\ g_0(\varepsilon) &= \frac{4\sqrt{3}}{\pi} \chi^2(x^*), & 0,01 \lesssim \varepsilon \leq 1, \end{aligned} \right\} \quad (51)$$

где χ — функция ТФ; x^* — корень уравнения $\chi(x^*) = \varepsilon x^*$. Для частот $\omega \gg v_1/a$, где $|U(a)| = \bar{E}_1$, можно построить приближение, основанное на близости ω к круговой частоте поворота электрона в точке наибольшего сближения с рассеивающим центром [ср. формулу (49)], а также качественный вывод формулы Крамерса, § 2]. Вводя соответствующую δ -функцию в подынтегральное выражение формулы типа (45) и калибруя результат по пределу $\omega \rightarrow \infty$, для случая нейтрального атома получаем:

$$g(\Omega, \varepsilon) = 3 [\chi(y) - y\chi'(y)]^2 \left[2 + \frac{\chi(y) - \chi'(y)}{\chi(y) + \varepsilon y} \right]^{-1}, \quad (52)$$

где штрих означает производную, а y является корнем уравнения

$$\chi(y) + \varepsilon y = \frac{1}{2} (0,885)^3 \Omega^2 y^3. \quad (53)$$

Применяя (52), (53) к области $\omega \leq \omega_{\text{макс}}$, видим из (50), что параметр $\Omega_{\text{макс}}$ отличается от ε функционально всего лишь множителем $Z^{1/3}$, что позволяет описать эту область спектра с помощью некоторой универсальной функции. Для сравнения с [10] разобьем элементы на группы: I — Ar, Fe, Cu, Kr; II — Mo, Ag, Xe, W, Pb и используем функцию

$$g_1(\varepsilon) = g \left[\left(\frac{Z_{\text{мин}}}{Z} \right)^{1/3} \Omega_{\text{макс}}, \varepsilon \right], \quad (54)$$

где $Z_{\text{мин}}^{\text{I}} = 18$, $Z_{\text{мин}}^{\text{II}} = 42$. При выбранном разбиении «универсализующие» частоты в (54) заключены в интервале $(0,8-1,0) \omega_{\text{макс}}$. Кривые $g_0(\varepsilon)$ и $g_1(\varepsilon)$ естественно дополняют друг друга, хорошо согласуются с результатами [10] и особенно [12] и в совокупности достаточны для приближенного описания всего спектра ТИ нейтрального (и слабоионизованного) ТФ атома, например, с помощью линейной интерполяции вида

$$g(\Omega, \varepsilon) = g_0(\varepsilon) + \left(\frac{Z}{Z_{\text{мин}}} \right)^{1/3} \frac{\Omega}{\Omega_{\text{макс}}} [g_1(\varepsilon) - g_0(\varepsilon)]. \quad (55)$$

§ 5. Сравнение результатов различных приближений

В табл. 1 даны результаты численных расчетов интенсивности ТИ, выполненных в работах [9, 10] по формулам (9)—(11) и с томас-фермиевским потенциалом $U(r)$. Исследован спектральный интервал $0,1 \leq \omega/E_1 \leq 0,9$, вносящий основной вклад в интегральные потери

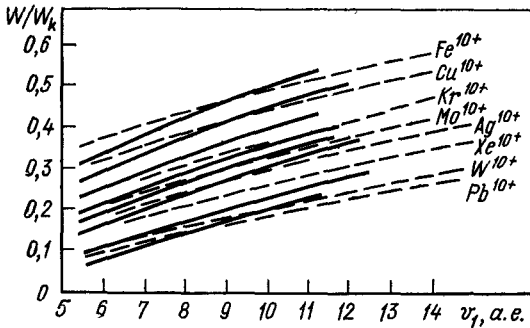


Рис. 6. Зависимость полного гаунт-фактора десятикратно ионизованных атомов восьми элементов от скорости электронов:

сплошные линии — численный расчет [9, 10] (см. табл. 1); пунктир — квазиборновская формула (37a)

энергии плазмы. Логарифмический рост спектральной интенсивности начинается при $\frac{\omega}{E_1} \lesssim 0,1$, и в работах [9, 10] не исследовался, так как в этой области частот необходимо суммировать очень много

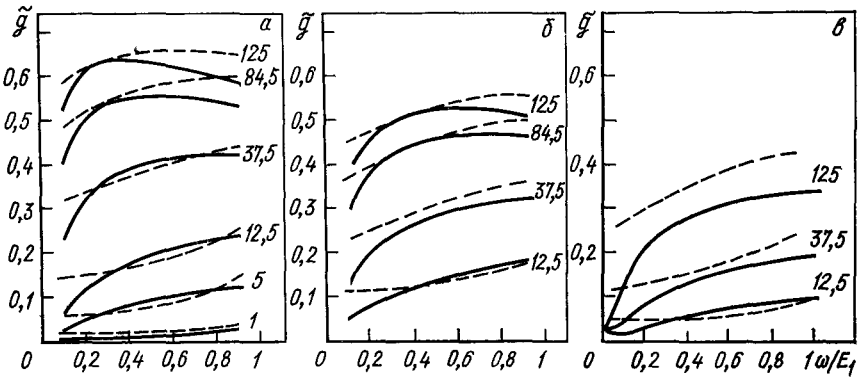


Рис. 7. Зависимость гаунт-фактора от частоты для однократного иона железа (а), пятикратного иона молибдена (б), восьмикратного иона вольфрама (в):

сплошные кривые — полуклассический расчет по формулам (48), (49); пунктир — численный расчет [9, 10] (см. табл. 1). Число у кривых — энергии налетающего электрона в атомных единицах.

моментов налетающего электрона, т. е. учитывать много слагаемых в формуле (9). Типичное количество моментов, учтенных при получении данных табл. 1, 7—10.

На рис. 4 показан спектральный гаунт-фактор ТИ на нейтральных атомах Ag, Fe, Mo, W, вычисленный в разных приближениях. Борновский гаунт-фактор обладает тем недостатком, что он обращается в нуль на коротковолновой границе. Классический спектр (55)

Таблица 1. Спектральная $\frac{dW/d\omega}{dW/d\omega} \hbar$ и полная $\frac{W}{W \hbar}$ интенсивности тормозного излучения

E_1 , кэВ	ω/E_1					$W/W \hbar$
	0,1	0,3	0,5	0,7	0,9	
Ar ($Z_{\text{я}}=18, Z=0$)						
0,4	0,257	0,282	0,312	0,345	0,376	0,314
0,7	0,378	0,413	0,447	0,476	0,507	0,444
1,0	0,469	0,507	0,544	0,574	0,596	0,538
1,5	0,580	0,621	0,655	0,678	0,694	0,646
2,5	0,767	0,788	0,796	0,800	0,800	0,790
5,0	1,012	0,989	0,969	0,952	0,937	0,972
Fe ($Z_{\text{я}}=26, Z=0$)						
0,4	0,152	0,170	0,197	0,230	0,270	0,204
0,7	0,235	0,263	0,294	0,325	0,361	0,296
1,0	0,307	0,337	0,374	0,407	0,433	0,372
1,5	0,384	0,421	0,458	0,485	0,507	0,451
2,5	0,595	0,618	0,640	0,656	0,668	0,635
5,0	0,779	0,772	0,764	0,756	0,745	0,763
Fe ($Z_{\text{я}}=26, Z=5$)						
0,4	0,183	0,204	0,226	0,253	0,285	0,230
0,7	0,262	0,288	0,316	0,343	0,381	0,318
1,0	0,333	0,362	0,395	0,426	0,455	0,394
1,5	0,405	0,437	0,471	0,500	0,523	0,467
Fe ($Z_{\text{я}}=26, Z=10$)						
0,4	0,263	0,287	0,310	0,334	0,359	0,311
0,7	0,335	0,355	0,379	0,401	0,425	0,379
1,0	0,383	0,412	0,437	0,463	0,488	0,437
1,5	0,449	0,479	0,504	0,525	0,552	0,502
Cu ($Z_{\text{я}}=29, Z=0$)						
0,4	1,138	0,159	0,183	0,212	0,241	0,187
0,7	0,217	0,243	0,271	0,303	0,342	0,275
1,0	0,275	0,306	0,345	0,379	0,407	0,342
1,5	0,350	0,384	0,425	0,454	0,476	0,418
2,5	0,513	0,535	0,555	0,570	0,580	0,551
5,0	0,728	0,717	0,707	0,697	0,688	0,707
Cu ($Z_{\text{я}}=29, Z=5$)						
0,4	0,167	0,187	0,209	0,236	0,267	0,213
0,7	0,243	0,265	0,293	0,323	0,362	0,297
1,0	0,298	0,326	0,361	0,396	0,427	0,362
1,5	0,366	0,400	0,435	0,467	0,492	0,432
Cu ($Z_{\text{я}}=29, Z=10$)						
0,4	0,233	0,253	0,276	0,299	0,324	0,277
0,7	0,299	0,328	0,343	0,369	0,396	0,347
1,0	0,341	0,370	0,398	0,426	0,451	0,397
1,5	0,404	0,432	0,462	0,488	0,513	0,460

E_1 , кэВ	ω/E_1					W/W_R
	0,1	0,3	0,5	0,7	0,9	
Kr ($Z_R=36$, $Z=0$)						
0,4	0,119	0,132	0,151	0,172	0,196	0,154
0,7	0,183	0,207	0,236	0,269	0,308	0,241
1,0	0,230	0,263	0,300	0,335	0,367	0,299
1,5	0,298	0,340	0,379	0,412	0,442	0,374
2,5	0,392	0,433	0,473	0,499	0,515	0,462
5,0	0,583	0,626	0,646	0,648	0,652	0,631
Kr ($Z_R=36$, $Z=5$)						
0,4	0,139	0,153	0,171	0,194	0,220	0,175
0,7	0,199	0,223	0,250	0,280	0,318	0,254
1,0	0,247	0,277	0,311	0,346	0,381	0,312
1,5	0,312	0,349	0,388	0,423	0,456	0,386
Kr ($Z_R=36$, $Z=10$)						
0,4	0,182	0,197	0,217	0,244	0,271	0,222
0,7	0,235	0,260	0,287	0,317	0,345	0,289
1,0	0,278	0,310	0,341	0,373	0,406	0,342
1,5	0,334	0,373	0,410	0,442	0,470	0,406
Mo ($Z_R=42$, $Z=0$)						
0,4	0,102	0,119	0,136	0,153	0,168	0,136
0,7	0,163	0,186	0,212	0,237	0,267	0,213
1,0	0,210	0,240	0,273	0,306	0,334	0,273
1,5	0,270	0,307	0,347	0,383	0,410	0,343
2,5	0,374	0,412	0,451	0,485	0,505	0,445
5,0	0,526	0,574	0,609	0,621	0,624	0,591
Mo ($Z_R=42$, $Z=5$)						
0,4	0,114	0,131	0,151	0,172	0,200	0,154
0,7	0,172	0,195	0,222	0,256	0,293	0,228
1,0	0,220	0,249	0,283	0,321	0,360	0,287
1,5	0,279	0,316	0,357	0,395	0,434	0,356
Mo ($Z_R=42$, $Z=10$)						
0,4	0,151	0,172	0,191	0,211	0,236	0,192
0,7	0,203	0,226	0,249	0,278	0,313	0,254
1,0	0,246	0,273	0,304	0,337	0,373	0,307
1,5	0,304	0,337	0,372	0,408	0,441	0,372
Ag ($Z_R=47$, $Z=0$)						
0,4	0,096	0,109	0,125	0,144	0,159	0,127
0,7	0,147	0,168	0,195	0,220	0,249	0,196
1,0	0,196	0,222	0,259	0,290	0,318	0,257
1,5	0,246	0,285	0,328	0,365	0,395	0,324
2,5	0,340	0,337	0,436	0,453	0,495	0,425
5,0	0,500	0,545	0,581	0,602	0,616	0,563

$E_1,$ кэВ	ω/E_1					
	0,1	0,3	0,5	0,7	0,9	W/W_R
Ag ($Z_R=47, Z=10$)						
0,4	0,138	0,154	0,172	0,191	0,216	0,174
0,7	0,185	0,206	0,229	0,255	0,287	0,232
1,0	0,222	0,248	0,279	0,314	0,350	0,282
1,5	0,276	0,308	0,345	0,383	0,420	0,346
Xe ($Z_R=54, Z=0$)						
0,4	0,085	0,097	0,114	0,137	0,160	0,119
0,7	0,133	0,154	0,180	0,209	0,244	0,184
1,0	0,168	0,193	0,226	0,262	0,291	0,228
1,5	0,222	0,256	0,298	0,339	0,377	0,298
2,5	0,301	0,355	0,400	0,433	0,461	0,390
5,0	0,478	0,519	0,555	0,575	0,585	0,542
Xe ($Z_R=54, Z=10$)						
0,4	0,120	0,129	0,143	0,165	0,186	0,149
0,7	0,165	0,185	0,208	0,232	0,268	0,212
1,0	0,194	0,219	0,249	0,284	0,320	0,253
1,5	0,247	0,278	0,315	0,353	0,390	0,317
W ($Z_R=74, Z=0$)						
0,4	0,048	0,055	0,064	0,076	0,090	0,067
0,7	0,086	0,099	0,116	0,140	0,168	0,122
1,0	0,110	0,131	0,160	0,198	0,221	0,164
1,5	0,141	0,175	0,215	0,255	0,291	0,215
2,5	0,237	0,278	0,325	0,370	0,404	0,323
5,0	0,380	0,433	0,489	0,525	0,549	0,475
W ($Z_R=74, Z=10$)						
0,4	0,067	0,076	0,088	0,105	0,123	0,092
0,7	0,098	0,112	0,130	0,157	0,190	0,137
1,0	0,125	0,147	0,178	0,217	0,245	0,182
1,5	0,157	0,190	0,232	0,270	0,306	0,231
Pb ($Z_R=82, Z=0$)						
0,4	0,037	0,041	0,047	0,055	0,066	0,049
0,7	0,063	0,077	0,095	0,113	0,134	0,096
1,0	0,091	0,112	0,137	0,166	0,196	0,140
1,5	0,131	0,160	0,196	0,236	0,271	0,199
2,5	0,205	0,248	0,292	0,335	0,372	0,290
5,0	0,332	0,391	0,441	0,477	0,507	0,430
Pb ($Z_R=82, Z=10$)						
0,4	0,049	0,058	0,067	0,076	0,087	0,067
0,7	0,075	0,090	0,107	0,128	0,148	0,110
1,0	0,103	0,125	0,150	0,182	0,214	0,155
1,5	0,142	0,170	0,207	0,246	0,283	0,210

хорошо совпадает с численными расчетами [10, 12]. Квазиборновская формула (37) качественно и количественно также близка к ним. Во всех численных расчетах использовался томас-фермиевский потенциал.

На рис. 5 приведен гаунт-фактор, полученный полуклассическим методом (см. § 4) для полной потери энергии электроном на ионах различных кратностей. Виден переход от излучения на ионе к излучению на ядре.

На рис. 6 показана зависимость полного гаунт-фактора для десятикратно ионизованных атомов восьми элементов от скорости электронов.

На рис. 7 показаны некоторые из результатов расчетов по формулам (48), (49) в сравнении с численными результатами.

Рисунки показывают близость аппроксимационных формул к точным численным результатам. Это позволяет применять их к тем ионам, которые не были исследованы численно в [9, 10].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

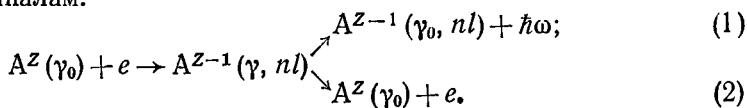
1. Фирсов О. Б., Чибисов М. И. — Журн. эксперим. и теорет. физ., 1960, т. 39, с. 1770.
2. Жданов В. П. — Там же, 1977, т. 73, с. 112.
3. Зон Б. А. — Там же, 1977, т. 73, с. 128.
4. Амусья М. Я., Балтенков А. С., Пайзиев А. А. — Письма ЖЭТФ, 1976, т. 24, с. 366.
5. Буймистров В. М., Трахтенберг Л. И. — Журн. эксперим. и теорет. физ., 1975, т. 69, с. 108; 1977, т. 73, с. 850.
6. Koch W. H., Motz J. W. — Rev. Mod. Phys., 1959, v. 31, p. 920.
7. Brussard P. J., Van de Hulst C. H. — Ibid., 1962, v. 34, p. 507.
8. Зоммерфельд А. Строение атома и спектры. М.: ГТТИ, 1956.
9. Жданов В. П., Чибисов М. И. — Письма ЖЭТФ, 1976, т. 23, с. 199; Журн. техн. физ., 1977, т. 47, с. 1804.
10. Жданов В. П. — Физика плазмы, 1978, т. 4, с. 128.
11. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
12. Lee C. M., Kissel L. e. a. — Phys. Rev., 1975, v. 13A, p. 1714.
13. Berger J. M. — Phys. Rev., 1957, v. 105, p. 35.
14. Karzas W. J., Latter R. — Astroph. J., Suppl. Ser., 1961, v. 6, p. 197.
15. Groom J. — Astroph. J., 1959, v. 130, p. 693.
16. Бекефи Дж. Радиационные процессы в плазме: Пер. с англ. М.: Мир, 1971.
17. Мотт Н., Мессин Г. Теория атомных столкновений: Пер. с англ. М.: Мир, 1969.
18. Кириллов В. Д., Трубников Б. А., Трушин С. А. — Физика плазмы, 1975, т. 1, с. 218.
19. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория поля. М.: Наука, 1967.
20. Biedenharn L. C. — Phys. Rev., 1956, v. 102, p. 262.
21. Гервидс В. И., Коган В. И. Препринт ИАЭ № 2720. М.: 1976.
22. Бабиков В. В. — В кн.: Физика плазмы и проблема управляемых термоядерных реакций. Т. 2./ Под ред. М. А. Леонтовича. М.: Изд-во АН СССР, 1958.
23. Kramers H. A. — Philos. Mag., 1923, v. 46, p. 836.
24. Гервидс В. И., Коган В. И. — Письма ЖЭТФ, 1975, т. 22, с. 308.
25. Гамбоз П. Статистическая теория атома и ее применения. М.: Изд-во иностр. лит., 1951.
26. Henneberg W. — Z. Phys., 1933, Bd 83, S. 555.

ДИЭЛЕКТРОННАЯ РЕКОМБИНАЦИЯ

В. П. Жданов

§ 1. Механизм диэлектронной рекомбинации и общие формулы

Автоионизационные состояния $A^{Z-1}(\gamma, nl)$, образующиеся при столкновении электрона с многозарядным ионом $A^Z(\gamma_0)$, распадаются по двум каналам:



Здесь Z — заряд иона до столкновения; γ_0, γ — набор квантовых чисел основного и возбужденного состояний иона A^Z . Безызлучательный распад в канал (2) приводит к упругому рассеянию электрона на ионе. Радиационная стабилизация по каналу (1) приводит к связыванию налетающего электрона с ионом, т. е. к рекомбинации, так как ион $A^{Z-1}(\gamma_0, nl)$ с одним возбужденным электроном nl после излучения второго фотона переходит в свое стабильное основное состояние. Такая рекомбинация носит название диэлектронной (ДР), поскольку происходит в результате переходов двух электронов.

Впервые механизм ДР был описан Месси и Бейтсом [1] в 1942 г. Но только в 1964 г. Берджес [2] провел количественные расчеты ДР и показал, что в высокотемпературной плазме эффективность ДР заметно превышает эффективность фоторекомбинации. Таким образом, в высокотемпературной плазме низкой плотности (когда скорость трехчастичной безызлучательной рекомбинации мала) ДР, как правило, является основным каналом рекомбинации.

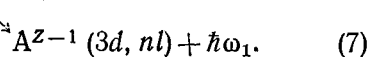
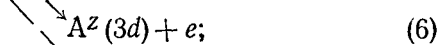
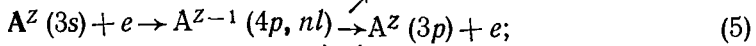
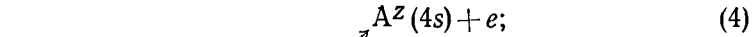
ДР является резонансным процессом. Вероятность образования АИ состояния велика лишь в случае, когда энергия налетающего электрона и энергия АИ состояния совпадают с точностью до ширины распада. Подобные процессы описываются хорошо известными формулами Брейта — Вигнера. В частности, коэффициент ДР через переход ($\gamma \rightarrow \gamma_0$) наиболее просто можно получить, усреднив формулы Брейта — Вигнера с помощью функции распределения электронов по скорости. Для максвелловского распределения получим:

$$\alpha_d^0 = \langle v\sigma \rangle = \left(\frac{2\pi}{T}\right)^{3/2} \sum_i \frac{g(i)}{2g(\gamma_0)} \frac{\Gamma_r \Gamma_i}{\Gamma_i + \Gamma_r} \exp\left(-\frac{E_i}{T}\right), \quad (3)$$

Здесь суммирование идет по всем возможным АИ состояниям конфигураций (γ, nl) ; $g(i)$, E_i и Γ_i — статистический вес, энергия и шири-

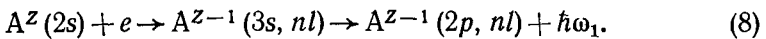
на упругого распада i -го АИ состояния; Γ_r — скорость радиационной стабилизации АИ состояния; $g(\gamma_0)$ — статистический вес основного состояния; T — температура электронов плазмы. Здесь и далее используется атомная система единиц ($e = m_e = \hbar = 1$).

Формула (3) учитывает АИ распад только в основное состояние γ_0 . Во многих случаях возможны также и другие каналы распада. Например, при столкновении электрона с натрийподобным ионом помимо радиационной стабилизации в основном состоянии (1) и упругого рассеяния (2) возможны также процессы



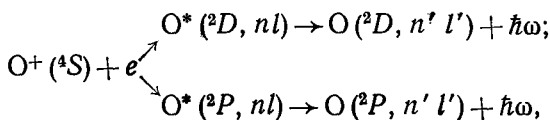
Канал (4) открыт, если энергия сильно возбужденного электрона $Z^2/2n^2$ меньше, чем разность энергий между $4p$ - и $4s$ -состояниями. Процессы (4)—(6) приводят к уменьшению константы скорости ДР. Процесс (7) является дополнительным каналом рекомбинации, если $Z^2/2n^2$ больше, чем разность энергий между $3d$ - и $3s$ -состояниями. Сила осциллятора для перехода $4p \rightarrow 3d$ значительно меньше силы осциллятора для перехода $4p \rightarrow 3s$, поэтому процессом (7) можно пренебречь. Наоборот, процессы типа (4) — (6) могут заметно повлиять на коэффициент ДР и учет их сводится к замене в знаменателе формулы (3) суммы упругой и радиационной ширины распада полной шириной распада i -го АИ состояния.

Помимо ДР через оптически разрешенные переходы возможна и ДР через оптически запрещенные переходы. Например, при столкновении электрона с литийподобным ионом возможен процесс



Если $Z^2/2n^2$ превышает разность энергий между состояниями $2p$ и $2s$, то процесс (7) приводит к рекомбинации. Практическое значение подобных процессов обычно невелико. Например, процесс (8) примерно на порядок уступает по эффективности процессу ДР через переход $2s - 3p$.

Исключением из этого правила является, по-видимому, ДР через переход $2s - 3d$ многозарядных литие и бериллийподобных ионов. Согласно оценкам автора ДР через переход $2s - 3d$ более эффективна, чем ДР через наиболее важный оптически разрешенный переход $2s - 3p$. Возможна также ДР через оптически запрещенные состояния, имеющие ту же конфигурацию, что и основное состояние. Например, Бейгман и Чичков [3] рассмотрели процесс



в котором термы 4S , 2D и 2P принадлежат одной и той же конфигурации $2p^3$. Радиационная стабилизация АИ состояния в этом случае происходит вследствие излучения сильновозбужденного электрона. Интересной особенностью ДР такого рода является то, что АИ ширина распада в этом случае значительно превышает АИ ширину распада при любых значениях главного квантового числа n . Этот факт существенно упрощает расчет коэффициента ДР. Эффективность подобных процессов можно сопоставить с эффективностью фоторекомбинации. Практическое значение ДР подобного рода не велико, так как она может быть существенна лишь в ситуациях, когда температура электрона мала, а степень ионизации ионов велика.

Полный коэффициент ДР равен сумме коэффициентов ДР через различные переходы ($\gamma_0 \rightarrow \gamma$). Практически основной вклад в ДР дают несколько первых оптически разрешенных уровней γ . Иногда можно ограничиться лишь учетом ДР через один, резонансный уровень.

Обсудим основные приближения, используемые при расчете коэффициентов ДР. Прежде всего следует обратить внимание на соотношение радиационной и АИ ширин распада в формуле (3). Радиационная ширина распада пропорциональна $1/c^3$, где c — скорость света. АИ ширина распада в атомной системе единиц имеет порядок $1/n^3$ (см. далее). Поэтому обычно АИ ширина распада вплоть до больших значений n значительно превышает радиационную ширину распада. Таким образом, основной вклад в ДР чаще (при не слишком больших Z) дают АИ состояния (γ, nl) с большим значением n . Этот факт позволяет заметно упростить расчет скорости ДР. В частности, при описании АИ состояний можно пренебречь влиянием сильно возбужденного электрона на внутренние электроны и считать, что радиационная ширина распада равна:

$$\Gamma_r = \frac{2\omega^2}{c^3} f_{\gamma\gamma_0}; \quad f_{\gamma\gamma_0} = \frac{2\omega}{3g(\gamma)} \sum_{\gamma\gamma_0} |\langle \Psi_\gamma | r | \Psi_{\gamma_0} \rangle|^2, \quad (9)$$

где ω и $f_{\gamma\gamma_0}$ — энергия и сила осциллятора для перехода ($\gamma \rightarrow \gamma_0$) в ионе AZ . Сильновозбужденный электрон можно описывать чисто кулоновскими функциями. Энергия АИ состояния (γ, nl)

$$E_i = \omega - Z^2/2n^2. \quad (10)$$

При расчете ширины АИ состояний можно пренебречь обменными эффектами.

В формулу (3) входит суммирование по различным термам конфигурации (γ, nl). В рамках LS -связи терм характеризуется квантовыми числами LSJ , где L — орбитальный, S — спиновый и J — полный моменты АИ состояния. АИ ширина распада определяется межэлектронным взаимодействием и, очевидно, не зависит от квантового числа J , но зависит от квантовых чисел LS . Суммирование по термам существенно упрощает расчет, особенно если учесть, что с ростом n LS -связь переходит в jl -связь. На практике обычно суммирование по термам заменяется суммированием по конфигурациям, т. е. все

термы конфигурации (γ, nl) характеризуют одной средней АИ шириной распада

$$\Gamma_{nl} = \frac{2\pi}{g(\gamma)(2l+1)} \sum_{\gamma\gamma_0} \sum_{ml' m'} \left| \langle \Psi_{\gamma}(r_1) \varphi_{nlm}(r_2) \times \right. \\ \left. \times \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \Psi_{\gamma_0}(r_1) \varphi_{El' m'} \rangle \right|^2. \quad (11)$$

Функции непрерывного спектра здесь нормированы на энергию. Учитывая, что статистический вес конфигурации (γ, nl) равен $2(2l+1)g(\gamma)$, получаем следующее выражение для коэффициента ДР через переход $(\gamma_0 \rightarrow \gamma)$

$$\alpha_d^2 = \left(\frac{2\pi}{T} \right)^{3/2} \frac{g(\gamma)}{g(\gamma_0)} \sum_n \sum_{l=0}^{n-1} \frac{(2l+1) \Gamma_r \Gamma_{nl}}{\Gamma_{nl} + \Gamma_r} \exp\left(-\frac{\omega}{T} + \frac{Z^2}{2n^2 T} \right). \quad (12)$$

АИ ширина распада быстро убывает с ростом n . Поэтому обычно для всех термов конфигурации (γ, nl) АИ ширина распада либо заметно больше, либо заметно меньше, чем радиационная ширина распада. И в том и в другом случае суммирование по термам эквивалентно суммированию по конфигурациям. Поэтому замена суммирования по термам суммированием по конфигурациям обычно не приводит к количественным погрешностям. Более подробно этот вопрос рассмотрен Вайнштейном и др. [4].

§ 2. Численные расчеты

Расчет коэффициентов ДР сводится прежде всего к расчету АИ ширины распада. Как мы уже отмечали, благоприятным для теории фактором является то, что основной вклад в ДР обычно дают АИ состояния (γ, nl) с большими значениями n . Хорошо известно, что радиальная волновая функция сильно возбужденного электрона в кулоновском поле с зарядом Z выражается через функцию Бесселя

$$R_{nl}^Z(r) \simeq \frac{1}{n^{3/2}} \sqrt{\frac{2}{r}} J_{2l+1}(\sqrt{8Zr}). \quad (13)$$

Отсюда видно, что зависимость АИ ширины распада (11) от главного квантового числа n содержится лишь в множителе $1/n^3$. Другим благоприятным фактором является то, что основной вклад в ДР обычно дают уровни со сравнительно большим моментом. Это позволяет при вычислении АИ ширины распада воспользоваться дипольным приближением, т. е. учесть $\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 / r_2^3$ — первый не исчезающий диполь-дипольный член разложения межэлектронного взаимодействия по обратным степеням расстояния до ядра слабосвязанного электрона. Используя хорошо известные правила вычисления дипольных матричных элементов, получаем следующее выражение для АИ ширины распада:

$$\Gamma_{nl} = \frac{\pi f_{\gamma\gamma_0}}{\omega(2l+1)} \left(\sum_{l' = l \pm 1} l'_{\text{марс}} \langle R_{nl}^Z \left| \frac{1}{r^2} \right| R_{El'}^Z \rangle \right)^2, \quad (14)$$

Дипольное приближение явилось основой для вывода аналитических выражений для коэффициентов ДР в работах [5—7].

Берджес [5] аппроксимировал с погрешностью около 10% результаты большого числа своих численных расчетов коэффициентов ДР формулой

$$\left. \begin{aligned} \alpha_d^0 &= \frac{2,40 \cdot 10^{-9} B(Z) A(x)}{T^{3/2}} f_{\nu_0} \nu \exp\left(-\frac{\omega}{aT}\right); \\ B(Z) &= \left(\frac{Z}{Z^2 + 13,4}\right)^{1/2} (Z+1)^{5/2}; \quad A(x) = \sqrt{x} (1 + 0,105x + 0,015x^2); \\ x &= \frac{\omega}{(Z+1)}, \quad a = 1 + \frac{0,015Z^3}{(Z+1)^2}; \\ x &> 0,05; \quad Z \gtrsim 20; \quad \hbar\omega/akT \lesssim 5. \end{aligned} \right\} (15)$$

В настоящее время формула Берджеса наиболее универсальная и широко используемая для вычисления коэффициентов ДР. Коэффициент α в (15) измеряется в $\text{см}^3/\text{с}$, энергия ω и температура T — в эВ.

Тюкер и Гоулд [6] получили аналитическое выражение для коэффициента ДР, предположив, что при фиксированном n АИ состояния с разными моментами имеют одну и ту же среднюю ширину распада

$$\bar{\Gamma}_n = \frac{1}{n^2} \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) \Gamma_{nl} = \frac{2Z^2 f_{\nu\nu_0}}{\sqrt{3} \omega n^5},$$

заменяя также суммирование по n интегрированием от 0 до ∞ и пренебрегая в формуле (12) множителем $\exp(Z^2/2n^2T)$:

$$\alpha_d^0 = \frac{1,83 \cdot 10^{-8} Z^{6/5} \omega^{1/5}}{T^{3/2}} f_{\nu_0} \nu \exp\left(-\frac{\omega}{T}\right); \quad (16)$$

В действительности ширина АИ распада быстро убывает с увеличением l , поэтому формула (16) завышает вклад больших моментов и вследствие этого обычно дает завышенное (в 2—8 раз) значение для коэффициента ДР.

Простое выражение для коэффициента ДР можно получить [7], воспользовавшись тем, что согласно формулам (13) и (14) АИ ширина распада может быть представлена в виде

$$\Gamma_{nl} = \frac{Z^2 f_{\nu\nu_0}}{\omega n^3} g_l\left(\frac{\nu}{Z}\right); \quad \frac{\nu}{Z} = \frac{\sqrt{2\omega}}{Z} = \frac{1}{Z} \sqrt{\frac{\omega [\text{эВ}]}{\text{Ry}}}. \quad (17)$$

Заменяя суммирование по n интегрированием и пренебрегая множителем $\exp(Z^2/2n^2)$, получаем:

$$\alpha_d^0 = \left(\frac{2\pi}{T}\right)^{3/2} \frac{2^{2/3} \pi \omega Z^{2/3}}{3c^2 \sin(\pi/3)} f_{\nu_0} \nu D\left(\frac{\nu}{Z}\right) \exp\left(-\frac{\omega}{T}\right); \quad (18)$$

$$D\left(\frac{\nu}{Z}\right) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) g_l^{1/3}\left(\frac{\nu}{Z}\right). \quad (19)$$

Численные расчеты показывают, что с хорошей точностью функцию (19) можно представить выражением $D(v/Z) \approx 5,0 (Z/v)^{1/2}$. В этом случае получим следующую формулу, удобную для практического использования:

$$\alpha_d^0 = \frac{4,94 \cdot 10^{-10} \omega^{3/4} Z^{7/6}}{T^{3/2}} f_{\gamma_0} \gamma \exp\left(-\frac{\omega}{T}\right). \quad (20)$$

Основным допущением при получении формулы (20) было предположение о том, что основной вклад в ДР дают сильно возбужденные состояния. Из формул (9), (12) и (17) видно, что при данном l основной вклад в ДР дают состояния с главным квантовым числом, удовлетворяющим условию

$$n \leq n_l = Z^{2/3} g_l^{1/3} c/2^{1/3} \omega. \quad (21)$$

Поэтому, по крайней мере для нескольких первых моментов, должно выполняться условие $n_l \gg Z/v$. Используя в качестве оценки для первых нескольких моментов в среднем $g_l \sim 0,25$, получим следующее условие применимости формулы (20):

$$Z^{1/3} \omega \ll 500. \quad (22)$$

При нестрогом выполнении условия (22) или при его невыполнении формула (20) дает соответственно завышенное или сильно завышенное значение коэффициента ДР. Условие (22) выполняется в случае ДР через переходы без изменения главного квантового числа. В случае переходов с изменением главного квантового числа условие (22) выполняется, если степень ионизации иона невелика.

Из формулы (20) видно, что предэкспоненциальный множитель коэффициента ДР растет с увеличением частоты и силы осциллятора перехода ($\gamma_0 \rightarrow \gamma$). Поэтому предэкспоненциальные множители коэффициентов ДР через переходы с изменением главного квантового числа превышают предэкспоненциальные множители коэффициентов ДР через переходы без изменения главного квантового числа. Однако ДР через переходы с изменением главного квантового числа ослаблена экспоненциальным множителем и наличием неупругих каналов АИ распада типа (5). Расчеты показывают, что в условиях коронального равновесия переходы с изменением и без изменения главного квантового числа дают сопоставимый вклад в ДР при температурах порядка 100 эВ или меньше. С ростом температуры и степени ионизации отношение потенциала ионизации иона к температуре и, следовательно, отношение частот переходов с изменением главного квантового числа к температуре уменьшается. Это приводит к возрастанию значения ДР через переходы с изменением главного квантового числа. При килоэлектронвольтовых температурах ДР целиком определяется переходами с изменением главного квантового числа.

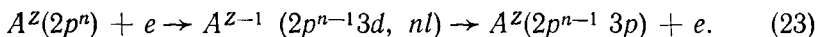
Численные расчеты коэффициентов ДР для конкретных ионов были проведены в работах [4, 8—11].

Бейгман и др. [8] в борн-кулоновском приближении рассчитали коэффициенты ДР для всех степеней ионизации железа. Рассматривалась в основном ДР через переходы без изменения главного кван-

тового числа. Сопоставление коэффициентов ДР, полученных в работе [8], с коэффициентами ДР, вычисленными по формуле Берджеса (15) и по (20), было проведено в [7]. Оказалось, что результаты работы [8] с хорошей точностью (в среднем 25%) согласуются с результатами, полученными по формулам (15) и (20). Этот факт не случаен. Частоты и радиационные ширины переходов без изменения главного квантового числа малы. Поэтому вклад в коэффициент ДР дают АИ состояния с очень большими числами n [см. формулу (21)] и сравнительно большими числами l . Все это оправдывает использование дипольного приближения при вычислении АИ ширин и замену суммирования по n интегрированием. Таким образом, формулы (15) и (20) могут быть использованы для количественного описания ДР через переходы без изменения главного квантового числа. В случае ДР через переходы с изменением главного квантового числа множители g_l в формуле (17) значительно быстрее убывают с ростом l , поэтому использование дипольного приближения становится менее оправданным.

Дональдсон и Пеакок [9] табулировали борн-кулоновские расчеты коэффициентов ДР водородоподобных ионов. Результаты работы [9] можно использовать также для гелийподобных ионов, так как коэффициент ДР гелийподобного иона равен удвоенному коэффициенту ДР водородоподобного иона. ДР можно классифицировать по значению параметра $v/Z = \sqrt{2\omega}/Z$. Для переходов без изменения главного квантового числа $v/Z \ll 1$. Водородоподобные ионы являются другим предельным случаем, здесь $v/Z \simeq 1$. В случае водородоподобных ионов в ДР дают вклад АИ состояния с небольшими главными квантовыми числами n и небольшими моментами $l \leq 3$. Этот предельный случай наиболее неблагоприятен для дипольного приближения. По-видимому вследствие этого уже в случае водородоподобного иона кислорода формула Берджеса (15) примерно в 2 раза, а формула (20) примерно в 4 раза превышает значение коэффициента ДР по сравнению с расчетами [9].

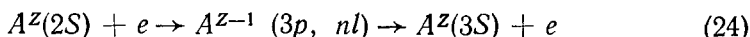
Якобс и др. [10] рассчитали в приближении искаженных волн сумму коэффициентов диэлектронной рекомбинации и фоторекомбинации для ионов железа с $Z \geq 8$ и сопоставили свои результаты с результатами, полученными по формуле Берджеса. Оказалось, что формула Берджеса завышает коэффициент рекомбинации в среднем в 1,5—3 раза, и наиболее сильно (в 3—10 раз) завышает коэффициент рекомбинации кислород-, фтор- и неонподобных ионов железа. Причина этого состоит в том, что основной канал рекомбинации ослаблен наличием следующего неупругого процесса:



Автоионизационная ширина неупругого распада (23) значительно превышает АИ ширину упругого распада, что и приводит к заметному уменьшению коэффициента рекомбинации.

Здесь можно отметить, что роль неупругих каналов распада, подобных (23), уменьшается с ростом заряда иона. Например, в случае неонподобного иона молибдена неупругий канал распада (23) уже не

играет роли (см. [11]). Аналогично, если для литийподобного иона кислорода неупругий канал распада



существенно уменьшает коэффициент ДР через переход ($2s \rightarrow 3p$), то в случае литийподобного иона железа им можно пренебречь. Связано это с тем, что главное квантовое число n , начиная с которого открывается неупругий АИ распад типа (23) или (24), растет с увеличением заряда иона. В то же время число АИ состояний, дающих вклад в ДР, уменьшается с ростом заряда иона [см. (21)]. Оба этих фактора приводят к уменьшению значения неупругих каналов распада с ростом заряда иона.

Вайнштейн и др. [4] табулировали борн-кулоновские расчеты коэффициентов ДР ионов, начиная с водородоподобных и кончая неонподобными. Авторы [4] отмечают, что, как правило, результаты их расчетов хорошо согласуются с результатами, полученными по формуле Берджеса.

Розман [11] рассчитал в приближении искаженных волн с учетом обмена коэффициент ДР неонподобного иона молибдена. Суммирование в формуле (3) проводилось не по конфигурациям, а по термам, построенным в рамках LS -связи. В случае неонподобного иона молибдена коэффициент ДР через переход $2p^6 - 2p^5 3d$ примерно на порядок превышает коэффициент ДР через переход $2s^2 2p^6 - 2s 2p^6 3p$ и примерно в 20—30 раз превышает коэффициент ДР через переход $2p^6 - 2p^5 3s$. Формула Берджеса дает с погрешностью 10% коэффициент ДР через переход $2p^6 - 2p^5 3d$, в 1,9 раз завышает коэффициент ДР через переход $2s^2 2p^6 - 2s 2p^6 3p$ и в 4,7 раз завышает коэффициент ДР через переход $2p^6 - 2p^5 3s$. Формула Берджеса хорошо (с погрешностью примерно 10%) описывает полный коэффициент ДР, так как он определяется главным образом рекомбинацией через переход $2p^6 - 2p^5 3d$. Согласно мнению Розмана [11], основным источником погрешности формулы Берджеса при описании ДР через переходы $2s^2 2p^6 - 2s 2p^6 3p$ и $2p^6 - 2p^5 3s$ является неучет влияния основных электронов иона на сильновозбужденный электрон и неучет обменных эффектов.

С целью сопоставления различных расчетов рассмотрим (табл. 1) ДР неон-, литий- и водородоподобного ионов железа. Коэффициенты ДР неонподобного иона железа, вычисленные Якобсом и др. [10] и

Таблица 1. Коэффициенты рекомбинации ионов железа (в единицах $10^{-12} \text{ см}^3/\text{с}$)

Z	$\nu_0 - \gamma$	T , кэВ	α_d^0 (15), [5]	α_d^0 [4]	α_d^0 [9]	α_d^0 [7]	α_d^0 [10]	α_r (25)	$\alpha_d^0 + \alpha_r$ [10]
16	$2p^6 - 2p^5 3d$	0,4	67	3,8			4,0	1,6	7,6
23	$2s - 3p$	2	5,6	1,4				1,3	3,1
	$2s - 2p$	2	0,27	0,17		0,18			
25	$1s - 2p$	10	0,21	0,24	0,3			0,66	1,3

Вайнштейном и др. [4], хорошо согласуются между собой. Формула (15) более чем на порядок завышает значение коэффициента ДР вследствие неучета неупругого канала АИ распада (23); в случае литий-подобного иона железа она примерно в 4 раза завышает коэффициент ДР через переход ($2s - 3p$) по сравнению с расчетом Вайнштейна и др. [4]; коэффициенты ДР через переход $2s - 2p$, вычисленные по формуле Берджеса автором этой статьи [7] и Вайнштейном и др. [4], хорошо согласуются между собой. В случае водородоподобного иона железа результаты Берджеса [5], Дональдсона и Пеокока [9] и Вайнштейна и др. [4] расходятся между собой примерно на 50%.

Для сравнения в табл. 1 также приведены коэффициенты фото-рекомбинации, вычисленные по формуле, полученной на основе приближения Крамерса:

$$\left. \begin{aligned} \alpha_r &= 9,6 \cdot 10^{-14} \frac{Z^2}{T_{\text{эВ}}^{1/2}} \Phi \left(\frac{I_{Z-1}}{T} \right) \left[\frac{\text{см}^3}{\text{с}} \right]; \\ \Phi(x) &= 0,577 + \ln x - \exp(x) \text{Ei}(-x) \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

(T — в эВ, α — в $\text{см}^3/\text{с}$). Здесь I_{Z-1} — потенциал ионизации иона после рекомбинации; Ei — интегральная показательная функция. Функция $\Phi(x)$ приведена в табл. 2. Из табл. 1 видно, что вклад фото-рекомбинации в полный коэффициент рекомбинации растет с ростом заряда иона.

Таблица 2. Функция $\Phi(x)$

x	0,3	0,5	1	2	3	5	7	10
$\Phi(x)$	0,60	0,81	1,2	1,6	1,9	2,4	2,7	3,0

§ 3. Влияние плотности электронов на диэлектронную рекомбинацию

ДР происходит в основном через сильновозбужденные уровни, с которых рекомбинировавший электрон может быть ионизован электронами плазмы. Подобная ионизация оказывает наибольшее влияние на ДР через переходы без изменения главного квантового числа, так как в этом случае вклад в ДР дают АИ уровни с очень большими значениями главного квантового числа n [см. формулу (21)].

Влияние плотности электронов на ДР описывается системой кинетических уравнений, включающих ДР и фоторекомбинацию, радиационные переходы возбужденного электрона в более низкие состояния, переходы между состояниями с различными квантовыми числами n и l , вызванные электронами и ионами плазмы, и, наконец, ионизацию сильновозбужденных электронов. В общей постановке такая система уравнений может быть решена лишь численно для конкретных ионов (см. работы [12, 13]. Бейгман и др. [8] использовали для описания влияния плотности электронов на ДР следующие упрощения.

1. Основной вклад в ДР дают АИ состояния с временами распада, меньшими времени излучения $A^Z(\gamma) \rightarrow A^Z(\tilde{\gamma}_0)$, поэтому можно не учитывать влияния плотности электронов плазмы на элементарный акт ДР.

2. При данном n сечения перемешивания состояний с разными l значительно превышают сечение ионизации, поэтому можно считать, что на уровнях nl , заметно ослабляемых ионизацией, происходит полное перемешивание по моментам l .

3. Сечения переходов между уровнями с разными n и сечения ионизации одного порядка, поэтому в первом приближении можно не учитывать заселение уровня n за счет переходов, вызванных столкновениями с электронами плазмы, с уровней с другими n .

При этом учет плотности электронов сводится к уменьшению вклада в ДР уровня с главным квантовым числом n на множитель $A_n/(A_n + N_e \langle v\sigma_i \rangle)$:

$$\alpha_d = \left(\frac{2\pi}{T} \right)^{3/2} \frac{2\omega^2 f_{\gamma_0} \nu}{c^3} \exp \left(-\frac{\omega}{T} \right) \sum_{nl} \frac{(2l+1) \Gamma_{nl} A_n}{(\Gamma_r + \Gamma_{nl}) (A_n + N_e \langle v\sigma_i \rangle)}, \quad (26)$$

где A_n — вероятность спонтанного излучательного распада на уровне, не подверженные ионизации; $N_e \langle v\sigma_i \rangle$ — вероятность ионизации электронным ударом; N_e — концентрация электронов в плазме.

Константа скорости, см³/с, ионизации сильновозбужденных электронов в полуклассическом приближении имеет вид

$$\langle v\sigma_i \rangle = 10^{-7} \frac{n^2}{Z^2} \sqrt{Ry/T_e} \text{ (эВ)}. \quad (27)$$

Вероятность A_n (с⁻¹) в приближении Крамерса равна [14]:

$$A_n \simeq 2,4 \cdot 10^{10} Z^4 / n^5. \quad (28)$$

Используя формулы (17), (26)—(28) и заменяя суммирование по n интегрированием, автор [14] получил следующее выражение для коэффициента ДР:

$$\alpha_d = \left(\frac{2\pi}{T} \right)^{3/2} \frac{(2Z)^{2/3} \omega f_{\gamma_0} \nu}{c^2} \exp \left(-\frac{\omega}{T} \right) F \left(\frac{v}{Z}, x \right);$$

$$F \left(\frac{v}{Z}, x \right) = \int_0^\infty \sum_{l=0}^\infty \frac{(2l+1) g_l^{1/3} dy}{(1+y)^3 [1+(g_l^{1/3} y/x)^2]}; \quad (29)$$

$$x = 3,19 \cdot 10^{-4} Z^{1/3} \omega \left(\frac{10^{17} \sqrt{T}}{ZN_e} \right)^{1/7}$$

Вводя функцию $\mathcal{K}_e(v/Z, x) = F(v/Z, x)/(F(v/Z, \infty))$, запишем коэффициент ДР в виде

$$\alpha_d = \alpha_d^0 \mathcal{K}_e \left(\frac{v}{Z}, x \right), \quad (30)$$

где α_d^0 — коэффициент ДР без учета плотности электронов. Значения коэффициента $\mathcal{K}_e(v/Z, x)$, показывающего, во сколько раз уменьшается коэффициент ДР при учете плотности электронов, приведены в табл. 3.

Таблица 3. Функция $\mathcal{K}_e(v/Z, x)$

x	v/Z				
	0,1	0,2	0,3	0,6	1
1,0	1,0	0,98	0,96	0,94	0,91
0,8	1,0	0,96	0,94	0,91	0,86
0,6	0,98	0,93	0,90	0,84	0,80
0,4	0,94	0,86	0,82	0,75	0,71
0,3	0,89	0,79	0,74	0,68	0,62
0,2	0,78	0,66	0,61	0,55	0,51
0,1	0,54	0,45	0,41	0,39	0,34
0,08	0,47	0,39	0,36	0,34	0,29
0,06	0,37	0,31	0,29	0,28	0,25
0,04	0,27	0,23	0,22	0,20	0,19
0,03	0,20	0,18	0,18	0,17	0,15
0,02	0,14	0,13	0,13	0,12	0,11
0,01	0,07	0,07	0,07	0,07	0,07

При фиксированной температуре электронов влияние плотности электронов на ДР падает с увеличением заряда иона и частоты перехода ($\gamma_0 \rightarrow \gamma$). Расчеты показывают, что при температуре электронов 1—10 кэВ и плотности электронов 10^{14} — 10^{16} см $^{-3}$ вторичная ионизация может в несколько раз уменьшить значение коэффициента ДР иона, если степень ионизации иона значительно меньше степени ионизации, соответствующей корональному равновесию. В условиях коронального равновесия вторичная ионизация влияет лишь на ДР через переходы без изменения главного квантового числа. Мы уже отмечали, что роль таких переходов при килоэлектронвольтовых температурах не велика. Поэтому в целом в условиях коронального равновесия плотность электронов практически не влияет на ДР.

Влияние плазмы на элементарный акт ДР обсуждалось в работе [15]. Было показано, что переходы $A^{Z-1}(\gamma, nl \rightarrow \gamma, nl + 1)$, вызванные ионами или электронами плазмы, могут увеличить скорость ДР на уровни с большими значениями главного квантового числа. Практическое значение подобного эффекта, однако, не велико, так как увеличение рекомбинации происходит на уровни, вероятность вторичной ионизации которых близка к единице.

В условиях астрофизической плазмы иногда может иметь значение вторичная ионизация излучением, имеющим планковское распределение спектральной плотности энергии

$$\frac{dQ}{d\omega} = \frac{\beta\omega^3}{\pi^2 c^3 [\exp(\omega/T_\nu) - 1]},$$

где T_ν — эффективная температура излучения; β — безразмерный коэффициент, показывающий, во сколько раз плотность излучения плазмы меньше термодинамически равновесной плотности излучения, соответствующей температуре T_ν . Используя приближения

Бейгмана и др. [8], автор [16] представил в этом случае коэффициент ДР в виде (ω и T — в эВ)

$$\alpha_d = \alpha_d^0 \mathcal{K}_v(v/Z, x); \quad x = 0,00216 \frac{Z^{1/3} \omega}{\beta^{1/2} T^{1/2}}. \quad (31)$$

Значения коэффициента $\mathcal{K}_v(v/Z, x)$, показывающего, во сколько раз уменьшается коэффициент ДР при учете вторичной ионизации излучением, приведены в табл. 4.

Т а б л и ц а 4. Ф у н к ц и я $\mathcal{K}_v(v/Z, x)$

x	v/Z				
	0,1	0,2	0,3	0,6	1
1,0	0,99	0,94	0,92	0,89	0,86
0,8	0,96	0,92	0,90	0,86	0,83
0,6	0,94	0,87	0,85	0,80	0,78
0,4	0,88	0,80	0,77	0,72	0,69
0,3	0,83	0,74	0,71	0,65	0,62
0,2	0,74	0,64	0,61	0,55	0,52
0,1	0,55	0,46	0,43	0,38	0,36
0,08	0,49	0,40	0,38	0,33	0,32
0,06	0,40	0,34	0,31	0,29	0,27
0,04	0,30	0,25	0,25	0,22	0,21
0,03	0,23	0,21	0,20	0,18	0,17
0,02	0,17	0,16	0,15	0,14	0,13
0,01	0,10	0,09	0,09	0,08	0,08

Берджес и Зумерс [12] отметили, что использование приближений Бейгмана и др. [8] приводит к завышению влияния вторичной ионизации излучением. Поэтому формула (31) позволяет лишь сверху оценить влияние плотности излучения на ДР.

В условиях лабораторной плазмы низкой плотности излучение не влияет на ДР.

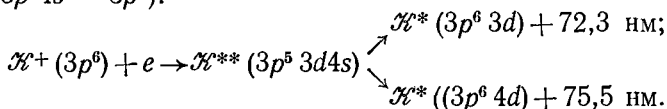
§ 4. Экспериментальные исследования

Экспериментальных исследований ДР немного [17—20]. Брукс и др. [17] измеряли зависимость от времени интенсивности спектральных линий ионов железа с зарядом 7—10 в плазме $\theta =$ пинча с температурой электронов до 220 эВ и плотностью электронов $3 \cdot 10^{16} \text{ см}^{-3}$. Экспериментальные результаты обрабатывались в рамках зависящей от времени корональной модели. Были определены эффективные коэффициенты рекомбинации и ионизации. При температуре электронов 105 эВ скорости рекомбинации ионов железа с зарядом 8, 9 и 10 оказались примерно в 2 раза меньше, чем рассчитанные Якобсом и др. [10], и примерно в 3 раза меньше, чем вычисленные по формуле Берджеса. Согласно теории (см. § 3) к такому уменьшению коэффициентов ДР может привести ионизация электронами плазмы сильновозбужденных ионов, образовавшихся в результате ДР. Эффективные скорости ионизации ионов железа с зарядом 10 и 11 оказались также примерно

в 2 раза меньше, чем теоретические, полученные в рамках уточненной модели Лотца [21]. К сожалению, как отмечают сами авторы работы [17], довольно сложно оценить точность полученных результатов.

Бретон и др. [18] экспериментально исследовали поведение примесных ионов молибдена в плазме токамака с плотностью электронов $8 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$. Вследствие МГД-неустойчивости температура электронов осциллировала в диапазоне от 1,9 до 2,2 кэВ. Измерение зависимости от времени интенсивности излучения спектральных линий ионов молибдена с зарядом 30 (магнийподобный ион) и 31 (натрийподобный ион) позволили оценить скорости ионизации и рекомбинации. Скорости рекомбинации оказались в 1—2 раза меньше, чем вычисленные по формуле Берджеса. Скорости ионизации оказались в 1—1,5 раза больше, чем теоретические, полученные по формуле Лотца [21].

Попытка исследования ДР в экспериментах со скрещенными пучками ионов калия и электронов была предпринята И. С. Алексахиным и др. [19]. Относительная энергия пучков менялась в диапазоне от 2 до 20 эВ и была меньше энергии возбуждения резонансной линии иона калия. В эксперименте наблюдалось излучение с длиной волны 72,3 и 75,5 нм. Авторы [19] измерили функции возбуждения этих линий и предположили, что они являются диэлектронными сателлитами линии $\mathcal{K}^+(3p^5 4s - 3p^6)$:



Диэлектронная рекомбинация возможна и через другие конфигурации, однако, поскольку фон был значительным, регистрировались лишь упомянутые две линии.

Ширина энергетического распределения пучка в экспериментах [19] около 2 эВ велика по сравнению с ширинами АИ состояний. В этом случае коэффициент ДР через i -е АИ состояние имеет вид [16]

$$\alpha_{d,i}^0 = \frac{\pi^2 g(i)}{v_0 g(\gamma_0)} \frac{\Gamma_r \Gamma_i}{\Gamma_i + \Gamma_r} f(E_i), \quad (32)$$

где E_i — энергия АИ состояния; $v_0 = \sqrt{2E_i}$; $f(E)$ — функция распределения по относительной энергии, нормированная условием $\int_0^\infty f(E) dE = 1$. В случае максвелловского распределения по скоростям формула (32) переходит в приведенную ранее формулу (3).

Формула (32) отличается от формулы, полученной в работе [16], отсутствием в числителе коэффициента, равного двум, так как в [16] предполагалось, что в $g(i)$ — статистический вес АИ состояния — не входит спиновой статистический вес сильно возбужденного электрона. Здесь предполагается, что $g(i)$ — полный статистический вес АИ состояния.

Если при изменении \bar{E} — средней энергии пучка — функция распределения по энергиям сохраняет свою форму, т. е. имеет вид $f(E) = \varphi(E - \bar{E})$, то согласно формуле (26) функция возбуждения

диэлектронных сателлитов является зеркальным отражением функции распределения по энергиям в пучке, как это и наблюдалось в эксперименте [19].

Противоречит теории ДР заключение работы [19], где сказано: «сравнение интенсивностей исследованных линий с интенсивностями резонансных линий показывает, что они — величины одного порядка, таким образом, по крайней мере для иона калия, вероятность захвата электрона в процессе ДР и вероятность прямого возбуждения его резонансных уровней электронным ударом одинаковы по порядку величины».

Согласно теории ДР вероятность захвата электрона в процессе ДР пропорциональна вероятности радиационной стабилизации и, следовательно, пропорциональна $1/c^3$, т. е. примерно на пять-шесть порядков меньше, чем вероятность прямого возбуждения электронным ударом, когда оно энергетически возможно. Выяснение природы излучения, зарегистрированного в [19], требует по-видимому, дальнейшего исследования.

Заключение

К настоящему времени подробно исследованы различные аспекты ДР. Наиболее универсальные результаты получены Берджесом [5] и Вайнштейном и др. [4]. В работе [4] табулированы борн-кулоновские расчеты коэффициентов ДР для ионов, начиная от водородоподобных и кончая неонподобными. В случаях, не охваченных работой [4], можно использовать формулу Берджеса, но следует помнить, что она имеет тенденцию завышать (в отдельных случаях вплоть до порядка) значения коэффициентов ДР через переходы с изменением главного квантового числа. Коэффициенты ДР через переходы без изменения главного квантового числа с хорошей точностью можно вычислять по формуле (20), полученной в работе [7]. Влияние вторичной ионизации электронами и излучением на ДР можно оценить, используя формулы (30) и (31), полученные автором [14, 16].

Экспериментально измеренные [17, 18] коэффициенты ДР в пределах точности измерений согласуются с теоретическими расчетами. В настоящее время есть все основания считать, что теоретические расчеты типа [10], выполненные в рамках приближения искаженных волн, дают значения коэффициентов ДР с погрешностью примерно 10%. Поэтому в будущем, по-видимому, результаты теоретических расчетов будут использоваться чаще для получения информации о поведении примесных ионов в плазме.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Massey H. S. W., Bates D. R. — Rept. Progr. Phys., 1942, v. 9, p. 62.
2. Burges A. — Astrophys. J., 1964, v. 139, p. 776.
3. Beigman I. L., Chichkov B. N. — J. Phys., 1980, v. B13, p. 565.
4. Вайнштейн Л. А., Собельман И. И., Юков Е. А. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. М.: Наука, 1979.
5. Burges A. — Astrophys. J., 1965, v. 141, p. 1588.

6. Tucker W. H., Gould R. J. — *Astrophys. J.*, 1966, v. 144, p. 244.
7. Жданов В. П. — *Журн. эксперим. и теорет. физ.*, 1978, т. 75, с. 1214.
8. Бейгман И. Л., Вайнштейн Л. А., Сюняев Р. А. — *Успехи физ. наук*, 1968, т. 95, с. 267.
9. Donaldson T. P., Peacock N. J. — *J. Quant. Spectros. Radiation Transfer*, 1976., v. 16, p. 599.
10. Jacobs V. L. e. a. — *Astrophys. J.*, 1977, v. 211, p. 605.
11. Roszman L. J. — *Phys. Rev.*, 1979, v. A20, p. 673.
12. Burges A., Sammers H. P. — *Astrophys. J.*, 1969, v. 157, p. 1007.
13. Jacobs V. L., Davis J. — *Phys. Rev.*, 1978, v. A.18, p. 697.
14. Жданов В. П. — *Физика плазмы*, 1979, т. 5, с. 572.
15. Jacobs V. L., Davis J., Kerple P. C. — *Phys. Rev. Lett.*, 1976, v. 37, p. 1390.
16. Жданов В. П. — *Физика плазмы*, 1980, т. 6, с. 181.
17. Brooks R. L. e. a. — *Phys. Rev. Lett.*, 1978, v. 41, p. 107; *Phys. Rev.*, 1980, v. A21, p. 1387.
18. Breton C. e. a. — *Phys. Rev. Lett.*, 1978, v. 41, p. 110.
19. Алексахин И. С., Запесочный А. И., Имре А. И. — *Письма ЖЭТФ*, 1978, т. 28, с. 576.
20. Kunze H. J. — *Phys. Rev.*, 1971, v. A3, 1971; *Space Sci. Rev.*, 1972, v. 13, p. 565.
21. Lotz W. — *Z. Phys.*, 1970, Bd 232, S.101.

ПЕРЕЗАРЯДКА АТОМОВ НА МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНАХ

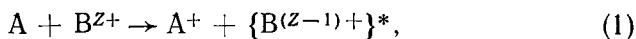
*В. А. Абрамов, Ф. Ф. Барышников, А. И. Казанский,
И. В. Комаров, В. С. Лисица, М. И. Чибисов*

Введение

Современные исследования плазмы требуют обширных сведений по сечениям перезарядки атомов на ионах весьма различных кратностей Z в широком диапазоне скоростей столкновения v . Необходимо знать как полные $\sigma(v)$, так и парциальные $\sigma_{n,l}(v)$ сечения заселения на многозарядных ионах уровней с главными квантовыми числами n и орбитальными l .

Теоретическое рассмотрение столкновений тяжелых атомных частиц различно в двух областях скоростей столкновения: $v \ll v_0$ и $v \gg v_0$, где v_0 — скорость орбитального электрона, который совершает переход. В этой статье освещены теоретические исследования сечений перезарядки в области адиабатически малых скоростей столкновений $v \ll v_0$. Излагаются результаты простых подходов, носящих оценочный характер. Исследуются те случаи, когда задачу можно решить более точно.

Рассмотрим одноэлектронную перезарядку атома A на ионе B^{Z+} (Z — кратность заряда иона):



т. е. переход одного электрона от атома A к иону B^{Z+} при их столкновении. Этот процесс имеет важное значение для исследований по проблеме управляемого термоядерного синтеза (УТС) в связи с программами нагрева и диагностики плазмы путем инжекции пучков быстрых нейтральных атомов [1]. При больших кратностях иона $Z \gg 1$ электрон переходит на высоковозбужденные уровни [конечное возбужденное состояние иона в (1) отмечено звездочкой], и поэтому после перезарядки может излучиться жесткий квант. Этот факт делает задачу интересной также и для создания лазеров в рентгеновском диапазоне [2].

Вероятность перезарядки зависит от обменного взаимодействия или, другими словами, от обменного матричного элемента гамильтониана системы между волновыми функциями электрона в атоме A и в ионе $B^{(Z-1)+}$. Под обменом здесь будет пониматься перестановка одного и того же электрона от одного атома к другому.

§ 1. Асимптотика обменного взаимодействия и модель распада для вычисления сечения

В области адиабатически малых скоростей столкновения ($v \ll v_0$), система из атома и иона описывается энергетическими термами и электронными волновыми функциями, параметрически зависящими от межъядерного расстояния R . Ядра атомов можно считать классическими частицами. При достаточно больших R полная энергия начального в реакции (1) состояния

$$E^{(A)} \simeq E_1 - \frac{Z(Z_1 - 1)}{R} + \dots, \quad (2)$$

а энергия конечного состояния

$$E^{(B)} \simeq E_{2n} - \frac{Z_1(Z - 1)}{R} + \dots, \quad (3)$$

где Z_1 — заряд атомного остатка атома А. Если А — нейтральный атом, то $Z_1 = 1$; $E_{1,2n}$ — энергии электрона в изолированном атоме А и ионе $B^{(Z-1)+}$ соответственно. При $Z \neq Z_1$ термы (2) и (3) при уменьшении R опускаются вниз с разными скоростями. При расстояниях

$$R_n = \frac{Z - Z_1}{E_1 - E_{2n}} \quad (4)$$

они совпадают (или пересекаются). При учете обменного взаимодействия термы в точках R_n слегка раздвигаются, пересечения становятся квазипересечениями.

Вычислим расщепление термов ΔE_n при квазипересечениях для больших R_n . Поскольку в нулевом приближении энергии термов совпадают, то для вычисления расщепления можно использовать формулу Фирсова [3]:

$$\Delta E_n = \oint_S [\psi_1 \nabla \psi_n - \psi_n \nabla \psi_1] dS, \quad (5)$$

где $\psi_{1,n}$ — волновые функции электрона в атоме и ионе, соответственно; S — плоскость, проходящая через середину межъядерной оси, перпендикулярно к ней.

Расщепление термов ΔE_n связано с обменным матричным элементом H_{1n} гамильтониана \hat{H} соотношением $\Delta E_n = 2H_{12}(R = R_n)$.

Найдем волновые функции $\psi_{1,n}$ на межъядерной оси вдали от атомов, где проходит плоскость S . В этой области на электрон действуют только силы кулоновского притяжения к ионам, поэтому уравнение Шредингера для волновых функций в этой области имеет вид

$$\left(-\frac{\Delta}{2} - \frac{Z_1}{r} - \frac{Z}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}|} - E \right) \psi = 0, \quad (6)$$

где \mathbf{r} — радиус-вектор электрона, отсчитываемый от ядра атома А. Ищем решение этого уравнения для волновой функции атома А в виде

$$\psi_1 = \frac{q_1(r)}{r} Y_{l,m}(\theta, \varphi), \quad (7)$$

где $Y_{l,m}$ — угловая часть волновой функции электрона с моментом l и проекцией m . Новая неизвестная функция q_1 удовлетворяет граничному условию $q_1 \rightarrow a_1 r^{Z_1/n_1} \exp\left(-\frac{r}{n_1}\right)$ при $r \ll R$, $n_1 = (2|E_1|)^{-1/2}$, т. е. стремится к асимптотике невозмущенной атомной волновой функции. Подставляя (7) в (6) и пренебрегая малыми величинами порядка R^{-2} , получаем уравнение для q_1 [4]:

$$\frac{d^2 q_1}{dr^2} + 2 \left(E + \frac{Z_1}{r} + \frac{Z}{|r-R|} \right) q_1 = 0. \quad (8)$$

Это уравнение одномерное, зависимость от углов — параметрическая.

Полученное уравнение справедливо при больших межъядерных расстояниях R . Конкретно R должно быть настолько велико, чтобы потенциальный барьер, разделяющий атомные частицы, был широким. Для этого необходимо потребовать

$$R \gg R_0 = \frac{2\sqrt{ZZ_1} + Z_1}{|E_1|}, \quad (9)$$

где R_0 — расстояние между ядрами, при котором энергия $E^{(A)}$, определяемая формулой (2), точно совпадает с вершиной потенциального барьера, разделяющего атом и ион.

Решение уравнения (8) в квазиклассическом приближении [условие применимости которого совпадает с условием (9)], удовлетворяющее указанному выше граничному условию, следующее:

$$\left. \begin{aligned} q_1 &\simeq \frac{a_1 \left(\frac{Z_1 n_1^2}{2e} \right)^{n_1 Z_1}}{\sqrt{\rho n_1}} \exp \left(- \int_{r_1}^r p(r') dr' \right); \\ p &\equiv \left[2 \left(-E - \frac{Z_1}{r} - \frac{Z}{|r-R|} \right) \right]^{1/2}. \end{aligned} \right\} \quad (10)$$

Из формул (5) и (10) следует, что искомое расщепление термов связано с квантовой проникаемостью барьера вдоль межъядерной оси:

$$\Delta E_n \sim R^{-m-1} \exp \left[- \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx \right], \quad (11)$$

где $x_{1,2}$ — точки поворота при движении электрона по межъядерной оси. Барьерный фактор следует разложить, используя условие (9). Это разложение имеет вид [5, 6]

$$\begin{aligned} \int_{x_1}^{x_2} p(x) dx &\simeq R \sqrt{2|E_1|} - \frac{Z_1}{\sqrt{2|E_1|}} \ln \left(\frac{16eE_1^2 R^2}{ZZ_1} \right) - \\ &- \frac{2(Z-Z_1)}{\sqrt{2|E_1|}} \ln \left[\sqrt{\frac{R|E_1|}{2} + 1} + \sqrt{\frac{R|E_1|}{Z} + 1} \right]. \end{aligned} \quad (12)$$

Подставляя (10) и (12) в (5), получаем окончательно:

$$\Delta E_n = a_1 a_2 B_{l,m} \left(\frac{E}{E_1} \right)^{1/4} \left(\frac{4|E_1|}{Z} \right)^{n_1} Z_1 \left(\frac{Z}{4e|E_1|} \right)^{nZ} R^{2n_1} Z_1^{-m-1} \times$$

$$\times \exp \left[-R \sqrt{2|E_1|} + \frac{2(Z-Z_1)}{\sqrt{2|E_1| + \frac{2Z}{R}}} \times \right.$$

$$\left. \times \ln \left(\sqrt{\frac{R|E_1|}{Z} + 1} + \sqrt{\frac{R|E_1|}{Z} + 1} \right) \right]; \quad (13)$$

$$n = (2|E|)^{-1/2};$$

$$B_{l,m} = \frac{1}{m!} \left(\frac{n_1}{2} \right)^m \left[\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)(l_1+m)!(l_2+m)!}{(l_1-m)!(l_2-m)!} \right]^{1/2}.$$

Выражение (13) является наиболее общим результатом для асимптотики одноэлектронного обменного расщепления термов. Оно соответствует обмену между атомными состояниями, квантованными в сферической системе координат. Для случая взаимодействия одинаковых атома и иона ($Z = Z_1$; $a_1 = a_2$ и т. д.) формула (13) переходит в полученный ранее результат [7] для разности энергий четного и нечетного квазимолекулярных состояний. В частности, для взаимодействия атома водорода в основном состоянии с протоном ($Z = Z_1 = 1$; $a_1 = a_2 = 2$; $n_1 = 1$; $l_{1,2} = m = 0$) из (13) следует прежний [8] результат: $\Delta E = 4R \exp(-R - 1)$. Формула (11) является трехмерным обобщением известного одномерного результата [8, с. 219].

Для столкновений атомов водорода в основном состоянии ($a_1 = 2$; $n_1 = Z_1 = 1$) с голыми ядрами заряда Z (так называемая задача $Z_1 e Z$) обменное расщепление термов отлично от нуля только для одного из вырожденных подуровней с параболическими квантовыми числами $m = 0$, $n_1 = 0$, $n_2 = n - 1$. Волновая функция этого подуровня является линейной комбинацией сферических функций со сферическими квантовыми числами n , $n - 1 \geq l \geq 0$, $m = 0$. Поэтому необходимый обменный матричный элемент можно построить с помощью той же линейной комбинации сферических обменных матричных элементов. Проще, однако, воспользоваться асимптотикой волновой функции параболического состояния $|n, 0, n - 1, 0\rangle$, главный член которой формально совпадает с выражением (7) для $l = m = 0$ на межъядерной оси ($\theta = 0$). В результате

$$\Delta E = Z^{3/2} \frac{v^v e^{-v-1}}{v!} \frac{1}{R} \exp \left\{ -R + \ln \left(\frac{4eR^2}{Z} \right) + \right.$$

$$\left. + \frac{2(Z-1)}{\sqrt{1 + \frac{2Z}{R}}} \ln \left[\sqrt{\frac{R}{2Z} + 1} + \sqrt{\frac{R}{2Z} + 1} \right] \right\} \quad (14)$$

$$v = 1, 2, 3, \dots; Z_1 = 1.$$

Одноэлектронная задача $Z_1 e Z$ на собственные значения — квантование движения одного электрона e в поле двух неподвижных кулоновских центров Z_1 и Z — допускает разделение переменных в вытянутых сферических координатах ξ и η

$$\xi = \frac{r - |r - R|}{R}; \quad \eta = \frac{r - |r - R|}{R} \quad (15)$$

плюс азимутальный угол φ вращения вокруг R . В результате для волновой функции электрона получается система двух обыкновенных дифференциальных уравнений [9] (см. также [8, с. 348]):

$$\Psi = X(\xi) Y(\eta) \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}; \quad (16)$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{d}{d\xi} (\xi^2 - 1) \frac{dX}{d\xi} + \left[A - p^2 (\xi^2 - 1) + R(Z + Z_1) \xi - \frac{m^2}{\xi^2 - 1} \right] X(\xi) &= 0; \\ \frac{d}{d\eta} (1 - \eta^2) \frac{dY}{d\eta} + \left[-A - p^2 (1 - \eta^2) + R(Z - Z_1) \eta - \frac{m^2}{1 - \eta^2} \right] Y(\eta) &= 0, \end{aligned} \right\} (17)$$

где A — константа разделения; $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ — азимутальное квантовое число.

Результаты общих исследований свойств системы уравнений (17) изложены в работах [9, 10]. Аналитическое решение этой системы до сих пор получено не было. Однако численное ее решение позволило найти с большой точностью термы $E(R)$ для многих значений Z_1 и Z [9—13], а также и волновые функции. В работе [14] было обнаружено, что найденные при численном решении значения расщепления термов ΔE при квазипересечениях хорошо укладываются на простую аппроксимирующую зависимость

$$\Delta E = \frac{18,26}{\sqrt{Z}} \exp \left[-\frac{1,324R}{\sqrt{Z}} \right]. \quad (18)$$

В табл. 1 сравниваются точные числовые [11—13] значения ΔE и значения, даваемые формулами (14) и (18). Видно, что (14) дает примерно в 1,5 раза большие значения ΔE по сравнению с точными

Таблица 1. Положения некоторых квазипересечений R_n и минимальные разности ΔE_n для столкновения атома водорода в основном состоянии с ядрами элементов с номером Z ; Nlm — сферические квантовые числа в пределе объединенного атома ($R = 0$)

Z	N	l	m	N'	l'	m'	R_n		ΔE		
							точное	формула (4)	точное [13]	формула (14)	формула (18)
6	(5	4	0)	(4	3	0)	8,081	8,00	0,0988	0,143	0,0945
7	(6	5	0)	(5	4	0)	11,619	12,5	0,0234	0,0178	0,0206
8	(6	5	0)	(5	4	0)	8,929	8,971	0,1006	0,151	0,0988
26	(14	13	0)	(13	12	0)	16,181	16,7	0,0640	0,0969	0,0536

для четных значений Z . Для единственного нечетного значения $Z = 7$ наблюдается занижение результата. Как видно из этой же таблицы межъядерные расстояния R_n , при которых имеют место квазипересечения, определяются асимптотической формулой (4) значительно точнее для четных Z , чем для нечетных. Видно также, что значения ΔE , даваемые поднощной формулой (18), весьма близки к точным.

Обратимся теперь к вычислению сечения перезарядки атомной частицы с $Z_1 \approx 1$ на многозарядном ионе: $Z \gg 1$. При возрастании кратности заряда иона увеличивается число ионных термов, пересекаемых термом начального состояния в реакции (1). Будем считать, что этих термов бесконечно много, т. е. они образуют почти непрерывный спектр. Тогда перезарядку можно рассматривать как процесс туннелирования атомного электрона через барьер в непрерывный спектр ионных состояний. В области межъядерных расстояний $\sqrt{Z} \ll R \ll Z$ барьер формируется потенциалом самого атома A и почти однородным в области атома полем иона. Напряженность этого поля есть $F = Z/R^2$. В этом случае вероятность перезарядки равна вероятности распада атома A в однородном электрическом поле. Эта вероятность [8] порядка $\exp - \left[\frac{\text{const}}{F} \right]$, откуда уже видно, что эффективные расстояния перезарядки $R_{\text{эф}} \sim \sqrt{Z}^{1/2}$, а сечение $\sigma \sim Z$. Распад произвольного атома в однородном электрическом поле изучался в [15]. С помощью полученных там результатов в работе [16] было вычислено сечение перезарядки в распадном приближении:

$$\left. \begin{aligned} \sigma_{\text{пер}} &\simeq \frac{3\pi a_0^2}{2} n_1 Z \ln \left\{ \frac{c \sqrt{Z}}{(v/v_0)} \left\{ \ln \left[\frac{c \sqrt{Z}}{(v/v_0)} \right]^{2n_1 Z_1 - 1} \right\} \right\}; \\ c &= \frac{a_1^2 e^{0,577}}{6} \sqrt{\frac{\pi}{2}} (3n_1)^{2n_1 Z_1 + \frac{1}{2}} \frac{m!}{3^m} \frac{(2l_1 + 1)(l_1 + m)!}{(l_1 - m)!}. \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

Учет ряда эффектов, связанных с точной формой потенциального барьера [17] и его вращения в процессе столкновения [18], количественно не сильно изменяет результат (19).

В работах [14, 19] для вычисления сечения перезарядки использовалась модель поглощающей сферы, идеологически близкая к модели распада.

Согласно формуле (19) сечение перезарядки логарифмически медленно падает при увеличении скорости столкновения v . С ростом заряда иона сечение возрастает пропорционально $Z \ln Z$. Эти теоретические выводы удовлетворительно согласуются с результатами первых экспериментальных измерений [20, 21]. Абсолютные значения сечений, даваемые формулой (19), в среднем в 1,5—2 раза больше экспериментальных [20—22].

При получении формулы (19) для сечения перезарядки использовалось предположение, что электрон переходит от атома к иону под барьером. Это справедливо при выполнении условия (9). Оценив из формулы (19) средние межъядерные расстояния, убеждаемся, что перезарядка в области $v \simeq v_0$ происходит при $R \lesssim R_0$, так что нера-

венство (9), строго говоря, не выполняется. Это означает, что перезарядка происходит хотя и на больших, но уже не асимптотически больших расстояниях. В работе [23] сечение было оценено при обратном предположении: переход электрона от атома к иону происходит только тогда, когда исчезает потенциальный барьер, т. е. тогда, когда движение электрона из одной потенциальной ямы в другую становится классически разрешенным. При $v \sim v_0$ для сечения было получено [23]

$$\sigma \simeq 8\pi Z a_0^2. \quad (20)$$

Количественно этот результат близок к результату, даваемому формулой (19) при $v \sim v_0$. Отметим, что при таком подходе наиболее отчетливо видно, что сечение перезарядки порядка Z в области $v \sim v_0$, так как межъядерные расстояния, определяемые условием (9), — расстояния, при которых исчезает потенциальный барьер, — пропорциональны \sqrt{Z} .

§ 2. Перезарядка атома водорода на полностью ионизованных ионах. Расчеты с использованием модели Ландау — Зинера

Формула (19) годна только для оценки сечения перезарядки с точностью до множителя ~ 2 при $v \sim v_0$, так как получена она при довольно большом числе упрощающих предположений, многие из которых, строго говоря, не выполняются.

В качестве следующего шага можно рассмотреть способ вычисления сечения перезарядки, который использует модель Ландау — Зинера [24, 25]. Этот способ предполагает, что переходы между адиабатическими состояниями происходят только в области квазипересечений, причем интерференцией между ближайшими квазипересечениями пренебрегают, т. е. считают, что разность фаз волновых функций состояний, набегающая при движении атомов между любыми двумя квазипересечениями, велика. Такой способ решения многоканальной задачи впервые был применен С. С. Герштейном [26] для перезарядки мезоатомов. Для перезарядки атомов на многозарядных ионах этот метод применялся в работах [27, 28]. Отметим, что Л. П. Пресняковым и А. Д. Уланцевым [27] использовалось несколько более общее, чем ландау-зинеровское решение двухуровневой задачи, а именно, они использовали интерполяционную формулу Вайнштейна, Преснякова, Собельмана [29], учитывающую переходы двух типов Ландау — Зинера и Розена — Зинера [30].

Следующими по сложности являются расчеты, учитывающие переходы, вызванные вращением межъядерной оси. На важность эффектов вращения для перезарядки впервые обратил внимание Бейтс [31].

В работе [32] был предложен упрощенный метод для учета эффектов вращения в случае перезарядки ионов небольшой кратности. Метод состоит в следующем. Область перехода электрона от атома к иону сосредоточена вблизи квазипересечения и предполагалась малой по

сравнению с областью между двумя квазипересечениями. Вероятность вращательных переходов пропорциональна углу поворота межъядерной оси. Следовательно, эта вероятность при прохождении области квазипересечения мала, так как мал соответствующий угол вращения. Тогда собственно перезарядка (переход электрона от одного центра к другому) оказывается как бы отделенной от вращательных переходов: в области квазипересечения происходит перезарядка, а при движении ядер между двумя точками квазипересечения — вращательные переходы.

Такие рассуждения позволяют получить интересный качественный результат: сечение перезарядки в вырожденное состояние с уменьшением скорости столкновения уменьшается гораздо медленнее экспоненциального спада, предсказываемого двухуровневым приближением.

В двухуровневом приближении вероятность перехода для прямолинейной траектории ядер с прицельным параметром ρ (в данном случае вероятность перезарядки) равна

$$w_n = 2p_n(1 - p_n), \quad (21)$$

где p_n — вероятность неадиабатического квантового перехода при однократном проходе точки n -го квазипересечения. В модели Ландау — Зинера эта вероятность [24, 25]

$$p_n = \begin{cases} \exp[-2\pi H_{12}^2/v_R F]; & \rho \leq R_n; \\ 0; & \rho > R_n, \end{cases} \quad (22)$$

где обменный матричный элемент H_{12} , радиальная составляющая скорости v_R и разность сил F — разность наклонов пересекающихся термов — берутся в точке пересечения термов R_n .

Из формул (21) и (22) видно, что при стремлении скорости к нулю ($v_R \rightarrow 0$) величина p_n , а с ней и полная вероятность W_n экспоненциально стремятся к нулю.

При перезарядке в вырожденное состояние экспоненциальный спад сечения не имеет места. Это можно понять из следующих качественных соображений. Обменный матричный элемент H_{12} удовлетворяет следующему правилу отбора: он отличен от нуля только для переходов без изменения проекции момента на межъядерную ось. Поэтому в области квазипересечения перезарядка происходит только на один подуровень. Поскольку при движении ядер между двумя точками квазипересечения происходит перераспределение вероятности по подуровням, то второй проход квазипересечения не полностью вернет систему в исходное состояние.

Наиболее наглядно эффект перемешивания проявляется при относительно больших скоростях столкновения, когда момент электрона не успевает измениться за время движения. Влияние многоуровневости на перезарядку происходит в этом случае из-за того, что ось квантования — межъядерная ось — имеет разные направления при двух проходах одного и того же квазипересечения. Состояние, в которое произошла перезарядка при первом проходе, можно представить в виде линейной комбинации состояний, квантованных на нап-

равление R при втором проходе. Вероятность перезарядки будет при этом отличаться от формулы (21) [32].

Рассмотрим теперь специально случай столкновения атома водорода в основном состоянии с голыми ядрами, т. е. с атомами, у которых удалены все электроны. Здесь мы имеем задачу о движении одного электрона в поле двух кулоновских центров, которая обладает рядом интересных особенностей [9, 33]. Они связаны с тем, что при закрепленных центрах задача на собственные значения допускает разделение переменных в вытянутых сфероидальных координатах [9] [см. формулы (16), (17)].

Детальный анализ показывает [9], что из мультиплета вырожденных на бесконечности состояний иона Ze квазипересечения с термами атома водорода могут испытывать лишь состояния с одинаковыми радиальным и азимутальным квантовыми числами. В частности с основным состоянием атома водорода могут испытывать квазипересечения лишь ионные параболические термы $[n, 0, n - 1, 0]$.

Наличие точных пересечений термов может серьезно повлиять на поведение сечения перезарядки при малых скоростях столкновения, поскольку между этими состояниями имеется вращательная связь. Экспоненциальная зависимость $\exp(-r_0/\tau)$ сечения от скорости заменяется здесь степенной зависимостью [32]: сечение пропорционально первой степени скорости столкновения.

Рассматриваемый случай интересен также тем, что задача перемешивания конечных вырожденных подуровней заряженной частицей (в данном случае, протоном) может быть решена точно в дипольном приближении для состояний с одним и тем же значением главного квантового числа n . Учесть переходы между состояниями, относящимися к разным n , не удается. Для частного значения $n = 2$ решение соответствующей системы трех уравнений было дано в работах [34, 35]. Обобщение решения на случай произвольного n , основанное на использовании специфической четырехмерной симметрии кулоновской задачи [36], было проделано в [37, 38] (см. также [39]).

Результатом теории является зависимость волновой функции от времени t :

$$\Psi_{n', n''}(t) = \Psi_{n', n''}(t=0) \exp \left[-i \int_0^t E_{n', n''}(\tau) d\tau \right]; \quad (23)$$

$$E_{n', n''} = -\frac{Z-1}{R(\tau)} - \frac{n' + n''}{R^2(\tau)} \sqrt{\frac{9n^2}{4Z^2} + \rho^2 v^2}; \quad (24)$$

Функции $\Psi_{n', n''}$ связаны с параболическими волновыми функциями Ψ_{i_1, i_2} соотношениями

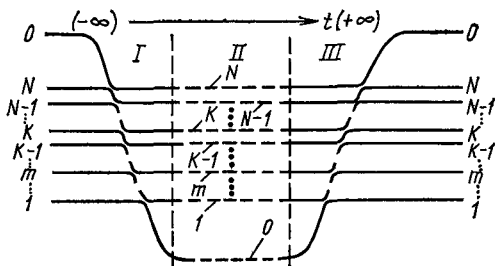
$$\left. \begin{aligned} \Psi_{n', n''} &= \sum_{i_1, i_2} D_{n', i_1}^j(\beta) D_{n'', i_2}^j(\pi - \beta) \Psi_{i_1, i_2}; \\ \operatorname{tg} \beta &= \frac{2Z\rho v}{3n}; \quad j = \frac{n-1}{2}; \quad i_1 = \frac{1}{2}(n_1 - n_2 + m); \\ & \quad i_2 = \frac{1}{2}(n_2 - n_1 + m), \end{aligned} \right\} \quad (25)$$

где $D_{n,i}^j(\beta)$ — матрицы поворота на угол β Вигнера [40]. Параболические функции Ψ_{i_1, i_2} квантованы на направление электрического поля протона.

Из (24), (25) видно, что при учете вращательного перемешивания система вырожденных состояний движется по своеобразным термам, параметрически зависящим от скорости, которые поэтому уместно называть динамическими [38]. Основная цель введения динамических термов состоит в том, чтобы учесть эффекты вращательного перемешивания состояний, рассматривая перезарядку непосредственно с исходного термина в систему независимых друг от друга динамических термов [41].

Рис. 1. Схема двукратного квазипересечения одного термина с полосой N -термов, не взаимодействующих друг с другом:

I — область прохождение квазипересечения при сближении частиц; III — то же при разлете; II — промежуточная область



Волновая функция термина $|0\rangle$, на который происходит перезарядка без учета вращения, входит в качестве слагаемого в несколько состояний (23). Поэтому с учетом вращения межъядерной оси мы имеем при каждом квазипересечении перезарядку на многие из динамических термов (23), (24). Поскольку эти состояния не взаимодействуют между собой, то для вычисления вероятности такой многоуровневой перезарядки можно использовать модель Демкова — Ошерова [42—44]. В этой модели, как и в модели Ландау — Зинера, предполагается, что обменный матричный элемент состояния $|0\rangle$ (рис. 1) с состояниями (23) не зависит от R [на самом деле, как следует из формулы (13), он экспоненциально падает с ростом R], причем в нулевом приближении термы 1, ..., N параллельны друг другу, а терм $|0\rangle$ пересекает их по линейному закону. Точное решение многоуровневой модели Демкова — Ошерова состоит в том, что вероятности p_k перехода в k -е состояние совпадает с таковой в модели Ландау — Зинера, т. е. она дается формулой (22). Для получения полной вероятности перезарядки необходимо рассмотреть более общую ситуацию, учитывающую тот факт, что область пересечения термов проходит дважды, при сближении и разлете частиц (области I и III на рис. 1). Это можно сделать, если пренебречь интерференцией между областями I и III .

Вычислим вероятность W_k выхода системы при $t = +\infty$ по терму k , если при $t = -\infty$ она находилась в состоянии 0 (рис. 1). Введем $\Omega_{k,s}$ — вероятность выхода по терму k при $t = +\infty$ при условии, что в промежуточной области II система движется по терму s . Очевидно, при $s > k$ $\Omega_{k,s} = 0$. Полная вероятность $W_k = \sum_{s=0}^k \Omega_{k,s}$.

Для значений $s = k, k - 1$ и 0 легко получаем:

$$\Omega_{k,k} = p_N p_{N-1} \dots p_{k-1} (1 - p_k) p_k; \quad (26)$$

$$\Omega_{k,k-1} = p_N p_{N-1} \dots p_k (1 - p_{k-1})^2 (1 - p_k); \quad (27)$$

$$\Omega_{k,0} = p_N p_{N-1} \dots p_1 p_2 \dots p_{k-1} (1 - p_k). \quad (28)$$

Для произвольного случая $s \leq k - 2$ имеем:

$$\Omega_{k,s} = p_N p_{N-1} \dots p_{s+1} (1 - p_s)^2 p_{s+1} \dots p_{k+1}. \quad (29)$$

Система параллельных термов нумеруется числами от 1 до N , т. е. может быть $1 \leq s \leq N$. Величина p_0 отсутствует в системе. Можно поэтому, формально положив $p_0 = 0$, привести выражение для W_k к виду

$$W_k = (1 - p_k) p_N \dots p_k \left[1 + \sum_{s=0}^{k-1} (1 - p_s)^2 \prod_{t=s+1}^{k-1} p_t^2 \right] \quad (30)$$

($p_0 = 0$), причем произведение Π полагается равным 1 , если начальное значение индекса произведения $s + 1$ меньше верхнего $k - 1$ при $s = k - 1$.

Из формулы (26) видно, например, что $W_k = 0$, если $p_s = 0$ для какого-либо значения s , лежащего в интервале $k \leq s \leq N$ — как и должно быть. Если $p_s = 1$ для всех $s \leq k - 1$, т. е. все эти уровни как бы отсутствуют (или рассматривается столкновение с $\rho > R_{k-1}$), то все слагаемые суммы в формуле (30) равны нулю, за исключением слагаемого $s = 0$, которое равно 1 . Мы получаем тогда, что в этом случае $W_k = 2p_k(1 - p_k)p_N \dots p_{k-1}$, т. е. равна произведению вероятности $2p_k(1 - p_k)$ перезарядки при пересечении только двух термов (терма 0 с термом k), на вероятность $p_N \dots p_{k-1}$, того, что при сближении, в области I , система дойдет до терма k , как и должно быть.

Для практического проведения расчетов удобнее пользоваться не формулой (30), а следующими рекуррентными соотношениями. Введем величину S_k , равную сумме вероятностей переходов за весь пролет на термы от первого до k -го. Тогда можно написать

$$S_k = \sum_{i=1}^k W_i; \quad (31)$$

$$W_k = p_N \dots p_{k+1} 2p_k (1 - p_k) - (1 - p_k) S_{k-1}; \quad (32)$$

$$S_k = W_k + S_{k-1} = p_N \dots p_{k+1} 2p_k (1 - p_k) + p_k S_{k-1}; \quad (33)$$

$$S_0 = 0.$$

Формулы (32) и (33) являются теми рекуррентными соотношениями, которые позволяют по известному значению S_{k-1} вычислить W_k . Затем по известному W_k вычислить S_k и т. д. Из формулы (33)

по индукции можно получить суммарную вероятность $W_{\Sigma} = \sum_{k=1}^N W_k$ перехода на все подуровни от 1 до N :

$$W_{\Sigma} = \sum_{k=1}^N W_k \equiv S_N = w_N + p_N^2 [w_{N-1} + p_{N-1}^2 [w_{N-2} + \dots + p_1^2 w_1]]; \quad (34)$$

$$w_k = 2p_k (1 - p_k).$$

Напомним, что вероятность p_k неадиабатического перехода для k -го пересечения дается формулой (22).

Эффективное сечение вычисляется с помощью интегрирования по плоскости параметра удара

$$\sigma = 2\pi \int_0^{\infty} W \rho d\rho. \quad (35)$$

Для большого диапазона практически важных значений энергий столкновения траектории можно считать прямолинейными, поскольку из оценок известно, что реакция перезарядки атома водорода на многозарядном ионе определяется большими межъядерными расстояниями, где искривление траекторий несущественно.

Расчеты заселенностей различных подуровней в приближении прямолинейных пролетов по формулам (32)—(35) были проделаны в работах [41] для столкновений атома водорода в основном состоянии с ядрами элементов с номерами $Z = 6 \div 44$ в области скоростей столкновения $v = 0,05 \div 2,0$.

В области скоростей столкновения $v \sim 1$ ($\approx 2,2 \cdot 10^8$ см/с) осуществляется ситуация типа встряхивания. При первом проходе квазипересечения происходит перезарядка в одно подсостояние $|0\rangle$, определяемое правилами отбора [9], тогда как при движении между двумя проходами квазипересечения правильными являются параболические состояния $|n_1, n_2\rangle$, квантованные на направление, перпендикулярное плоскости столкновения. В этом приближении вероятность заселения состояния с моментом l получается перерасложением исходного состояния $|0\rangle$ по новому базису

$$W_l = \frac{1}{2^{4J-1}} \left[\sum_{i_1, i_2} |C_{J, i_1, J_1, i_2}^l|^2 \binom{2J}{J-i_1} \binom{2J}{J-i_2} - |C_{JJJ-J}^{l0}|^2 \right]; \quad (36)$$

$$J = \frac{n-1}{2}; \quad i_{1,2} = \frac{1}{2} [m \pm (n_1 - n_2)]; \quad \binom{n}{k} = \frac{n!}{(n-k)! k!}$$

Здесь C с индексами — коэффициенты Клебша-Гордана.

В рассмотренной области скоростей столкновения результаты расчетов по формуле (36) хорошо согласуются с результатами более общей схемы расчетов, описанной выше.

Полные сечения перезарядки, вычисленные по формулам (34) и (35), в исследованной области скоростей и для зарядов ионов $Z \geq 18$ хорошо (с точностью 5—10%) укладываются на простую зависимость [41]

$$\sigma_{\text{пер}} = 1,91 \cdot 10^{-16} Z \ln \left(\frac{17v_0}{v} \right) [\text{см}^2]. \quad (37)$$

§ 3. Перезарядка атома водорода на полностью ионизованных ионах — голых ядрах. Метод сильной связи

Наиболее точные результаты для перезарядки при малых скоростях ($v \sim 0,1 \div 0,5$ а. е.) может дать численное интегрирование уравнений в методе сильной связи (МСС) адиабатических состояний. Основные уравнения этого метода имеются в большинстве учебников по теории атомных столкновений, но мы еще раз приведем их, поскольку при практической реализации МСС на ЭВМ для перезарядки многозарядных ионов становятся более очевидными узкие места метода. Кроме того, все модельные подходы к перезарядке в основе своей содержат МСС с последующими аналитическими аппроксимациями для энергетических термов, неадиабатических матричных элементов и решений системы нестационарных уравнений.

Предполагается, что тяжелые частицы движутся по заданной классической траектории $R = R(\rho, t)$ в выбранной фиксированной системе координат. Тогда трехчастичная задача сводится к решению нестационарного уравнения Шредингера для легкой частицы — электрона

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = H(\mathbf{r}, R(t)) \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (38)$$

При $t \rightarrow -\infty$ электрон находится в основном состоянии атома водорода

$$\Psi|_{t \rightarrow -\infty} = \tilde{\Phi}_{1s}^H(\mathbf{r}), \quad (39)$$

где $\tilde{\Phi}_{1s}^H$ — функция $1s$ -состояния атома водорода, учитывающая его движение в выбранной системе координат. Например, если атом водорода движется равномерно со скоростью v , то

$$\tilde{\Phi}_{1s}^H(\mathbf{r}) = \Phi_{1s}^H(\mathbf{r}) \exp \left[i(vr) + i \frac{v^2}{2} t \right], \quad (40)$$

где Φ_{1s}^H — функция $1s$ -состояния в кулоновском поле протона. При $t \rightarrow +\infty$ волновая функция имеет асимптотический вид:

$$\Psi|_{t \rightarrow +\infty} = \sum_k a_k \tilde{\Phi}_k^H + \sum_k b_k \tilde{\Phi}_k^Z + \Phi, \quad (41)$$

где $\tilde{\Phi}_k^H$, $\tilde{\Phi}_k^Z$ — волновые функции дискретного спектра электрона в движущихся атоме водорода и ионе Ze соответственно, а Φ — функция сплошного спектра. По коэффициентам b_k определяют сечение

перезарядки в k -е состояние иона Ze с помощью формулы (35), в которой

$$W_k = |b_k|^2 t \rightarrow +\infty. \quad (42)$$

Формулами (38)—(42) исчерпывается постановка задачи при классическом рассмотрении движения ядер в пренебрежении отношением массы электрона к массам ядер.

При малых скоростях разложение волновой функции удобно вести по адиабатическому базису. Для одноэлектронной перезарядки атома водорода на голом ядре адиабатический базис образуют решения задачи двух кулоновских центров, т. е. решение системы уравнений (17). Если искать Ψ в адиабатическом представлении

$$\Psi = (\Sigma + \int) C_k(t) \Phi_k \exp[-i \int \epsilon_k(R(t)) dt], \quad (43)$$

то для коэффициентов C_k возникает интегродифференциальная система уравнений

$$\dot{C}_k = \left(\Sigma + \int \right) (v_R Q_{kn} + \omega L_{kn}) C_n \exp \left[-i \int (\epsilon_n - \epsilon_k) dt \right]. \quad (44)$$

Здесь Q_{kn} , L_{kn} — неадиабатические матричные элементы радиальной и вращательной связи соответственно; v_R — радиальная скорость; ω — угловая скорость вращения в плоскости траекторий.

Для того чтобы волновая функция вида (43) удовлетворяла граничному условию (39), (40), применяют два подхода. Один из них состоит во введении так называемой функции включения $f(r, R)$ [45]. Если заменить Φ_k на $\Phi_k \exp[i(\mathbf{v}r)f(r, R)]$, то матричные элементы в системе (44) приобретут добавки и будут хорошо убывать при $t \rightarrow \pm\infty$. Рассмотрим функцию включения [44]

$$f(r, R) = \frac{R^2}{2(R^2 + m_p^{-2})} \left[\frac{3}{2} \eta - \frac{1}{2} \eta^3 + \frac{m_p - m_z}{m_p + m_z} \right], \quad (45)$$

где m_p , m_z — масса протона и иона соответственно; $\eta = (r_1 - r_2)/R$; r_1 , r_2 — расстояние электрона от протона и ядра иона Z соответственно. При $R \rightarrow \infty$ и $r_1 \ll R$ или $r_2 \ll R$ она имеет своим пределом $-\frac{m_z}{m_p + m_z}$ или $+\frac{m_p}{m_p + m_z}$ соответственно. Все адиабатические функции, имеющие своим пределом водородные состояния, приобретают галилеевский трансляционный фактор $\exp\left(\frac{i}{2} \mathbf{v}r\right)$, а все ионные состояния приобретают фактор $\exp\left(-\frac{i}{2} \mathbf{v}r\right)$. Фактически этот подход эквивалентен разложению по неортогональной системе функций.

Другой подход состоит в выделении из решений Ψ (41) коэффициентов b_k . Если поместить начало координат на протон, то при $t \rightarrow -\infty$ коэффициенты при функциях Φ_k , переходящих в функции атома водорода Φ_k^H , дадут заселенности водородных состояний. В ча-

стности, при $t \rightarrow -\infty$ $C_n = \delta_{0n}$. При $t \rightarrow +\infty$ следует спроектировать функцию Ψ на набор функций движущегося иона $\tilde{\Phi}_k^Z$, т. е.

$$b_k = \lim_{t \rightarrow +\infty} \langle \Psi | \tilde{\Phi}_k^Z \rangle. \quad (46)$$

При этом можно заметить, что проектирование в полном базисе эквивалентно переразложению адиабатического базиса по состояниям, диагонализующим матрицы мгновенного гамильтониана в системе уравнений МСС (44) при $t \rightarrow +\infty$.

Теоретически оба подхода равноправны.

При численной реализации МСС базис неизбежно приходится ограничивать. Точных рецептов, как это делать — нет. Разумно полагать, что при малых скоростях в области реакции система развивается по адиабатическим состояниям. Поэтому в первую очередь в базисе нужно учитывать состояния, для которых максимальны матричные элементы, связывающие первоначально заселенный водородный терм (или его адиабатическое продолжение) с ионными.

К настоящему времени выполнен ряд расчетов [46—50] сечений перезарядки МСС для столкновений атома водорода в основном состоянии с голыми ядрами элементов с $Z = 3, 4, 5, 6, 8, 26$.

Аналогичные расчеты были проведены А. И. Казанским, И. В. Комаровым. Для столкновения H^+C^{6+} базис состоял из пяти состояний

$$\begin{array}{ccccc} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ (1000); & (5040); & (4030); & (5031); & (4021); \end{array}$$

Числа в скобках обозначают параболические квантовые числа состояний в пределе объединенного атома ($R = 0$). Граничные условия удовлетворялись с помощью диагонализации. Для столкновения $H + O^{8+}$ базис содержал шесть состояний:

$$\begin{array}{cccccc} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ (4030); & (6050); & (5040); & (1000); & (5031); & (4021) \end{array}$$

Практическое выполнение расчетов показывает, что достаточно учитывать лишь $\sigma - \pi$ вращательную связь. Для столкновения $H + C^{6+}$ эта связь наиболее существенна в области квазипересечения $R \simeq 8$, где π -состояние сильно связано с обоими квазипересекающимися σ -состояниями. На важность такого механизма впервые указал Бейтс [31].

К аналогичным выводам о структуре ограниченного базиса, который необходимо учитывать, пришли независимо авторы других работ [48—51]. Наиболее подробно этот вопрос исследовали Уинтер и Хаттон [50] при расчете перезарядки $H + He^{++}$.

На рис. 2 приведены полные сечения перезарядки $H + C^{6+}$ в зависимости от скорости столкновения. Видно, что при $v \leq 0,3$ наши сечения слабо зависят от выбора системы координат и практически совпадают с результатами расчета Ваабена и Бригса [47], выполненного с помощью функции включения. Различие при $v > 0,3$ связано

с активным заселением $6h\sigma$ - и $5g\pi$ -состояний, которые Ваабен и Бригс не рассматривали.

На рис. 3 приведены полные сечения перезарядки $H + O^{8+}$. Ранее эта система рассчитывалась в работе Олсона и Салопа [48], а также Харела и Салина [46] в более узком базисе. Наши данные в разных центровках отличаются менее чем на 5%. При малых v имеется разумное согласие с данными французской группы [46]. Формулы (19), (20) и (37) дают для этих случаев следующие значения сечений перезарядки при $v = 0,4v_0$: для $H + C^{6+}$ — 185, 151 и 153 а. е. соответ-

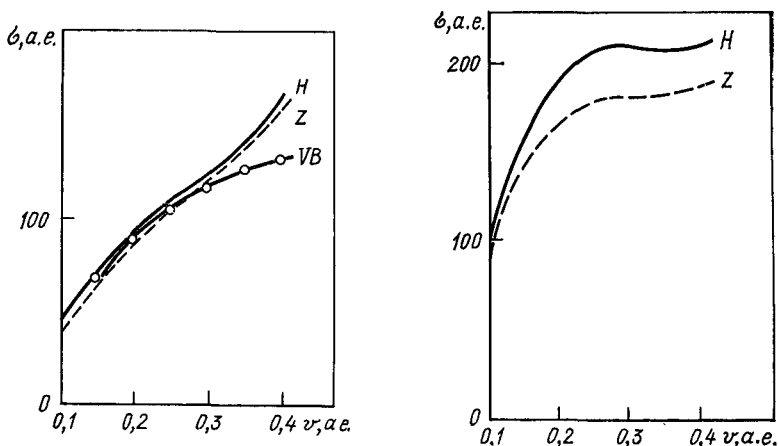


Рис. 2. Полное сечение перезарядки $H(1s) + C^{6+} \rightarrow H + C^{5+}$ как функция скорости столкновения v . Атомная единица сечения: $0,280 \cdot 10^{-16}$ см². Значки у кривых: H — центровка на протоне; Z — центровка на ионе; VB — результат Ваабена и Бригса [47]

Рис. 3. Полное сечение перезарядки $H(1s) + O^{8+} \rightarrow H + O^{7+}$.

Обозначения те же, что и на рис. 2

ственно, а для $H + O^{8+}$ — 253, 201 и 205 а. е. Из сравнения этих данных с сечениями, приведенными на рис. 2 и 3, видно, что формула (19) на 10—20% завышает результат, а формулы (20) и (37) более точны. Общим недостатком оценочных формул (19) и (20) является то, что при уменьшении скорости столкновения определяемые ими сечения либо слегка возрастают, либо остаются постоянными. Точные же сечения на рис. 2 и 3 уменьшаются при уменьшении v .

В табл. 2, 3 приводятся полные сечения перезарядки, полученные в разных центровках и доли заселения состояний ионов C^{5+} и O^{7+} с различными главными квантовыми числами.

Особый интерес для практики представляют вероятности W_l заселения состояний ионов по полному моменту l внутри данного мультиплета. Если ограничить базис σ -термами с нулевым радиальным квантовым числом, то распределение по l будет определяться квадратом модуля коэффициентов Клебша — Гордана, перерезла-

Таблица 2. Сечения (a_0^2) заселения состояний $C^{5+}(n)$ с различными главными квантовыми числами n при перезарядке $H+C^{6+}$ (H —центровка на протоне; Z —центровка на ионе Z)

$v, \text{ а. е.}$	$n=4$		$n=5$	
	Z	H	Z	H
0,1	37	42	0,2	1,6
0,15	62	66	0,8	3,3
0,2	81	85	2,3	5,0
0,25	95	100	9,4	7,5
0,3	104	100	17	16
0,35	108	107	28	33
0,4	114	110	44	54

Таблица 3. Сечения (a_0^2) заселения состояний $O^{7+}(n)$ с различными главными квантовыми числами n при перезарядке $H+O^{8+}$ (H —центровка на протоне; Z —центровка на ионе Z)

$v, \text{ а. е.}$	$n=4$		$n=5$		$n=6$	
	Z	H	Z	H	Z	H
0,1	0,1	0,1	85	97	0	0,1
0,15	0,1	0,1	138	156	0,2	0,1
0,2	0,3	0,4	165	185	0,7	1,2
0,25	0,7	1,6	177	198	1,8	6,3
0,3	1,6	4,9	174	195	4,3	8,8
0,35	1,9	9,1	175	185	7,6	11
0,4	3,0	17	172	166	12	27

Таблица 4. Относительные заселенности состояний с различными орбитальными числами l и главным квантовым числом $n=4$ (в %) при перезарядке $H+C^{6+}$ (H —центровка на протоне; Z —центровка на ионе Z)

$v, \text{ а. е.}$	$l=0$		$l=1$		$l=2$		$l=3$	
	Z	H	Z	H	Z	H	Z	H
0,1	20	20	42	42	30	30	8	8
0,15	20	21	42	42	30	30	8	7
0,2	20	21	42	43	30	29	8	7
0,25	19	22	41	43	31	29	9	6
0,3	19	22	41	43	31	28	9	7
0,35	18	22	41	43	32	28	9	7
0,4	18	22	41	43	32	28	9	7
$ C_l^\sigma ^2$ формула (36)	25		45		25		5	
$[C]^2$ [41]	8		20		26		46	

гающим параболическую водородподобную волновую функцию $(n, 0, n - 1, 0)$ по сферическим $(nl0)$, т. е. W_l будет определяться формулой (36). В табл. 4—7 приведены значения W_l для C^{5+} ($n = 4$ и 5) и O^{7+} ($n = 4$ и 5). Там же приведены значения W_l , даваемые формулой (36) и полученные в работах [41] методом, описанным в предыдущем параграфе. Вычисленные распределения с ростом скорости имеют тенденцию к расплыванию и смещению максимума в сторону больших l .

Таблица 5. То же, что и в табл. 4, но для $n=5$

$v, \text{ а. е.}$	$l=0$		$l=1$		$l=2$		$l=3$		$l=4$	
	Z	H	Z	H	Z	H	Z	H	Z	H
0,1	10	4	30	24	36	40	20	26	4	6
0,15	13	4	33	24	34	40	18	26	3	6
0,2	13	5	33	25	34	40	17	25	3	6
0,25	14	10	34	30	33	36	16	20	3	4
0,3	13	13	33	33	33	34	17	17	4	3
0,35	15	13	35	33	33	34	15	16	2	3
0,4	14	12	34	32	33	35	16	18	3	4
$ C_l^\sigma ^2$ формула (36)	20		40		29		10		1	
$[C]^2$ [41]	6		14		18		22		40	

Таблица 6. То же—для $H+O^{8+}$, $n=4$

$v, \text{ а. е.}$	$l=0$		$l=1$		$l=2$		$l=3$	
	Z	H	Z	H	Z	H	Z	H
0,1	25	25	45	45	25	25	5	5
0,15	25	25	45	45	25	25	5	5
0,2	17	13	40	37	33	32	10	13
0,25	18	13	40	37	32	37	9	13
0,3	19	15	41	38	31	35	9	12
0,35	17	12	40	37	33	38	10	13
0,4	16	9	40	36	34	41	10	14
$ C_l^\sigma ^2$ формула (36)	25		45		25		5	
$[C]^2$ [41]	7		20		26		47	

Таблица 7. То же — для $H + O^{8+}$, $n=5$

v , а. е.	$l=0$		$l=1$		$l=2$		$l=3$		$l=4$	
	Z	H	Z	H	Z	H	Z	H	Z	H
0,1	8	9	28	29	37	37	22	21	5	5
0,15	9	9	29	29	37	36	21	21	5	5
0,2	9	9	29	29	37	36	21	21	5	5
0,25	8	9	28	28	37	37	22	22	5	5
0,3	8	9	29	28	37	37	22	22	5	5
0,35	8	8	28	28	37	37	22	22	5	5
0,4	8	7	28	27	37	38	22	23	5	5
$ C_l^\sigma ^2$ формула (36)	20		40		29		10		1	
$[C_l]^2$ [41]	6		14		18		22		40	

Заключение

К настоящему времени вычисление характеристик перезарядки атома водорода на многозарядных ионах методом сильной связи является доступным и довольно надежным при $v \leq 0,3$ а. е. При больших скоростях число состояний, которые следует включать в базис, быстро растет. Численные результаты подтверждают аналитические оценки процесса. При $0,1 < v < 0,3$ перезарядка происходит по ландау-зинеровскому механизму, причем учет π -термов в окрестностях квазипересечений σ -состояний существенно увеличивает сечение перезарядки. С ростом скорости начинает проявляться механизм Зинера — Розена — Демкова.

Экспериментальные измерения сечений перезарядки атомов водорода на многозарядных ионах выполнены в работах [51—53]. Имеется всего одна экспериментальная точка [53] для столкновения $H + O^{8+}$ при скорости $6,2 \cdot 10^8$ см/с ($\sigma \approx 10^{-16}$ см²). Эта точка лежит уже в области больших скоростей ($v > v_0$), где следует применять иные методы расчетов, чем изложенные здесь.

А. И. Казанский и И. В. Комаров благодарны Н. Ф. Трусовой, любезно предоставившей результаты расчетов термов и матричных элементов, выполненных по программам работ [11, 12], и Е. А. Соловьеву за полезные обсуждения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Hogan J. T., Howe H. C. — J. Nucl. Mater., 1976, v. 63, p. 151.
2. Виноградов А. В., Собельман И. И. — Журн. эксперим. и теор. физ., 1973, т. 36, с. 1115.
3. Фирсов О. Б. — Там же, 1951, т. 21, с. 1001.
4. Чибисов М. И. — Там же, 1979, т. 76, с. 1898.
5. Чибисов М. И. Препринт ИАЭ-3233/2, 1980.
6. Думан Е. Л., Меньшиков Л. И. — Журн. эксперим. и теорет. физ., 1979, т. 76, с. 516.

7. Смирнов Б. М. — Атомные столкновения и элементарные процессы в плазме. М.: Атомиздат, 1968.
8. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
9. Комаров И. В., Пономарев Л. И., Славянов С. Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М.: Наука, 1976.
10. Комаров И. В., Соловьев Е. А. — Теорет. и мат. физ., 1979, т. 24, с. 56.
11. Трускова Н. Ф. — Сообщение ОИЯИ, P11-10207, 1976.
12. Трускова Н. Ф. — Сообщение ОИЯИ, P11-11218, 1978.
13. Комаров И. В., Трускова Н. Ф. — Сообщение ОИЯИ, P11-11445, 1978.
14. Olson R. E., Salor A. — Phys. Rev., 1976, v. A14, p. 579.
15. Смирнов Б. М., Чибисов М. И. — Журн. эксперим. и теорет. физ., 1965, т. 49, с. 841.
16. Чибисов М. И. — Письма ЖЭТФ, 1976, т. 24, с. 56.
17. Grozdanov T. P., Janev R. E. — Phys. Rev., 1978, v. A17, p. 880.
18. Думан Е. Л., Смирнов Б. М. — Физика плазмы, 1978, т. 5, с. 1161.
19. Bottcher C. — J. Phys., 1977, v. B10, p. 213.
20. Klöinger H., Müller A., Salzborn E. — J. Phys., 1975, v. B8, p. 230.
21. Müller A., Klöinger H., Salzborn E. — Phys. Lett., 1975, v. A55, p. 11.
22. Афросимов В. В. и др. — Письма ЖЭТФ, 1977, т. 26, с. 699.
23. Комаров И. В., Соловьев Е. А. — В кн.: Тезисы VII Всесоюзной конференции по электронно-атомным столкновениям. Ч. 2. Петрозаводск, 1978, с. 37.
24. Landau L. D. — Phys. Z. Sov., 1932, Bd 2, S. 41.
25. Zener C. — Proc. Roy. Soc., 1932, v. A137, p. 696.
26. Герштейн С. С. — Журн. эксперим. и теорет. физ., 1962, т. 43, с. 706.
27. Пресняков Л. П., Уланцев А. Д. — Квантовая электроника, 1974, № 11, с. 2377.
28. Salor A., Olson R. E. — Phys. Rev., 1976, v. A13, p. 1312.
29. Вайнштейн Л. А., Пресняков Л. П., Собельман И. И. — Журн. эксперим. и теорет. физ., 1962, т. 43, с. 518.
30. Никитин Е. Е., Уманский С. Я. — Неадиабатические переходы при медленных атомных столкновениях. М.: Атомиздат, 1979.
31. Bates D. R. — Proc. Roy. Soc., 1960, v. A257, p. 22.
32. Жданов В. П., Чибисов М. И. — Физика плазмы, 1976, т. 2, с. 851; Журн. техн. физ., 1978, т. 48, с. 912.
33. Герштейн С. С., Кривченков В. Д. — Журн. эксперим. и теорет. физ., 1960, т. 40, с. 1491.
34. Spitzer L. — Phys. Rev., 1940, v. 58, p. 348.
35. Чибисов М. И. — Оптика и спектроскопия, 1969, т. 27, с. 9.
36. Демков Ю. Н., Монозон В. С., Островский В. Н. — Журн. эксперим. и теорет. физ., 1969, т. 57, с. 1431.
37. Лисица В. С., Шолин Г. В. — Журн. эксперим. и теорет. физ., 1971, т. 61.
38. Демков Ю. Н., Островский В. Н., Соловьев Е. А. — Там же, 1974, т. 66.
39. Лисица В. С. — Успехи физ. наук, 1977, т. 122, с. 449.
40. Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Релятивистская квантовая теория. Ч. 1. М.: Наука, 1968.
41. Абрамов В. А., Барышников Ф. Ф., Лисица В. С. — Журн. эксперим. и теорет. физ., 1978, т. 74, с. 897; Письма ЖЭТФ, 1978; Препринт ИАЭ № 3121, 1979.
42. Ошеров В. И. — Журн. эксперим. и теорет. физ., 1965, т. 49, с. 1157.
43. Демков Ю. Н. — Докл. АН СССР, 1966, т. 166, с. 1076.
44. Демков Ю. Н., Ошеров В. И. — Журн. эксперим. и теорет. физ., 1967, т. 53.
45. Briggs J. C. — Rep. Progr. Phys., 1976, v. 39, p. 217.
46. Harel C., Salin A. — J. Phys., 1977, v. B10, p. 3511.
47. Vaaben J., Briggs J. S. — Ibid., 1977, v. B10, p. 521.
48. Salo A., Olson R. E. — Phys. Rev., 1979, v. A19, p. 1921.
49. Salo A., Olson R. E. — Phys. Lett., 1979, v. A71, p. 407.
50. Winter T. G., Hatton G. — Phys. Rev., 1980, v. A21, p. 793.
51. Crandall D. H., Phaneuf R. A., Meyer F. W. — Phys. Rev., 1979, v. A19.
52. Meyer F. W. e. a. — Phys. Rev., 1979, v. A19, p. 515.
53. Crandall D. H., Phaneuf R. A., Meyer F. W. — Ibid., 1980, v. A22, p. 379.

§ 1. Введение

Одним из основных свойств излучения является его способность более или менее свободно выходить из материальных систем (ниже рассматриваются плазменные системы) наружу. Благодаря этому свойству излучение плазмы играет тройную роль:

1) препятствует установлению термодинамического равновесия в плазме (начиная со слабых отклонений от равновесия и вплоть до коронального предела, см. с. 159 настоящего выпуска);

2) выносит из плазмы энергию (радиационные потери), см. с. 188;

3) выносит информацию о состоянии плазмы (что создает основу для ее спектроскопической диагностики).

При этом как для лабораторной, так и, особенно, для астрофизической плазмы достаточно распространена ситуация, когда выход излучения интересующих нас частот ω происходит в условиях существенной его реабсорбции («перепоглощения») в пределах объема системы, т. е. когда излучение более или менее сильно «заперто» в плазме. Анализ такой ситуации и является предметом данного обзора.

Фактическая роль реабсорбции излучения зависит не только от таких простейших параметров, как характерный размер системы a и плотность числа частиц, ответственных за поглощение фотонов частоты ω , но и (в частности, через температуру) от самого механизма испускания — поглощения. Ниже мы будем иметь дело с тремя основными механизмами излучения плазмы: А) линейчатое испускание — поглощение в атомах или ионах (обычно в *резонансной* линии); Б) излучательная рекомбинация электрона и обратный ей процесс фотоионизации; В) тормозное излучение электрона на ионе и обратное ему «тормозное поглощение» фотона электроном в поле иона. При этом, как мы сейчас увидим, на первый план выдвигается механизм А — не только потому, что для него, при прочих равных условиях, роль реабсорбции оказывается большей, чем для механизмов Б и В, но и в связи с тем, что сама физическая картина переноса излучения в случае А более сложна и интересна (именно по этой причине анализу переноса излучения в резонансной линии и уделено наибольшее место в данном обзоре).

Действительно, сопоставим наиболее «альтернативные» друг другу механизмы излучения А и В (механизм Б занимает, очевидно, некоторое промежуточное место). Коэффициент поглощения в центре резонансной линии $\omega = \omega_0$ равен, как известно, $\kappa(\omega_0) \equiv \kappa_0 \sim$

$\sim n_0 \pi \chi_0^2 \frac{\gamma}{\gamma + \Gamma} (n_0$ — плотность числа поглощающих атомов, $\chi_0 = c/\omega_0$, γ и Γ — естественная и «сторонняя» ширины линии), а коэффициент тормозного поглощения для плазмы с электронной температурой T равен [1]

$$\kappa_T(\omega) = \frac{32\pi^{5/2}}{3\sqrt{6}} \frac{e^6}{\hbar c m^{3/2}} \frac{Z^2 n_e n_i}{\omega^3 \sqrt{kT}}. \quad (1)$$

Для $n_e \sim n_i \sim n_0$, $\omega \sim \omega_0 \sim kT/\hbar$, $\Gamma \sim \gamma$ отношение $\kappa_0/\kappa_T \sim \frac{c^3 m^{3/2} (kT)^{3/2}}{e^6 Z^2 n}$, что для плазмы всегда много больше единицы (это сразу видно, если оценить полученное отношение с помощью атомных единиц: $m = e = 1$, $c = 137$, $kT \gtrsim 1$, $n \ll 1$)*.

Далее, существование в случае А дополнительного «резонансного» масштаба частоты Γ , малого по сравнению с масштабами ω_0 и kT/\hbar , само по себе предопределяет большую, в сравнении со случаями Б и В, сложность картины переноса излучения, которая к тому же оказывается качественно зависящей от наличия у линии крыльев и от крутизны их спада, см. § 2—7 (заметим, что в рассмотрении § 2—7 фигурирует, как правило, не сама величина Γ , а ее функция κ_0).

И, наконец, весьма существенное различие между механизмами А и В состоит в следующем. В случае В компонента плазмы, ответственная за процессы испускания и поглощения, а именно электроны, обычно представляет собой термически равновесную систему (т. е. заселенности уровней, отвечающих условию $E_2 - E_1 = \hbar\omega$, связаны распределением Максвелла), благодаря чему спонтанная излучательная способность единицы объема плазмы на единицу телесного угла $\eta(\omega)$ и эффективный (т. е. учитывающий индуцированное испускание) коэффициент поглощения $\kappa'(\omega) = \kappa(\omega) \left[1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) \right]$ оказываются связанными законом Кирхгофа $\eta(\omega)/\kappa'(\omega) = B_{\text{пл}}(\omega)$ ($B_{\text{пл}}$ — планковская интенсивность на единицу телесного угла), так что уравнение переноса излучения приобретает простой, по существу универсальный вид, влекущий за собой и простое решение задачи (§ 8). Можно сказать, что в этом случае перенос излучения происходит по заданному (термически равновесному) фону возбуждений. Если еще для общности учесть, что температура и плотность плазменной среды могут зависеть от координат, то это соответствует модели локального термодинамического равновесия (ЛТР).

Аналогичная «универсализация» уравнения переноса имеет место, конечно, и для механизмов излучения А и Б при термическом равновесии соответствующих компонент плазмы, а именно при бальмановском распределении атомов или ионов по уровням (опять-таки для $E_2 - E_1 = \hbar\omega$) в случае А и при распределении Саха по кратностям ионизации в случае Б. Однако в отличие от максвелловского

* Качественно этот результат ясен заранее, поскольку тормозные переходы электронов сильнее зависят от плотности и характеризуются меньшими ускорениями, чем дискретные переходы.

распределения электронов (случай В), легко поддерживаемого частыми (упругими) кулоновскими столкновениями, распределения Больцмана и Саха реализуются лишь при достаточно больших концентрациях электронов n_e , поскольку выражаемое этими распределениями равновесие «детально-обратных» столкновительных процессов возбуждения — девозбуждения и ионизации — рекомбинации требует подавления процессов радиационного девозбуждения и радиационной рекомбинации, слабее зависящих от n_e и соответственно смещающих равновесие в «корональную» сторону (с. 159). Приближенный закон подобия для соответствующей «критической» концентрации n_e^* можно извлечь из выражения (6) для параметра тушения β , входящего в критерий наступления ЛТР, $\beta \gg 1$. Для резонансного перехода $\Delta E = \hbar\omega_0$ и температур $kT \sim \Delta E$ указанный критерий сводится к требованию $n_e^* \gg n_e \propto (\Delta E)^{7/2}$; поэтому, например, при данном n_e перенос излучения в относительно длинноволновых линиях может происходить в режиме ЛТР, а в коротковолновых — в корональном режиме*.

Таким образом, при сравнимых значениях n_e перенос излучения в резонансной линии носит в общем случае более сложный характер, чем перенос в тормозном континууме, также и по следующей причине: здесь «фон возбуждений» не задается, а *формируется* (по меньшей мере отчасти) самим излучением. Соответственно и уравнение переноса оказывается существенно более сложным, содержащим интегральный член — функционал от профилей линий испускания $P(\omega)$ и поглощения $\kappa(\omega)$ (§ 2).

Мы примем, что не только $\kappa(\omega)$, но и $P(\omega)$ является заданной функцией ω , не зависящей от характера возбуждения атома (иона). Это допущение, причём без обязательной конкретизации $P(\omega)/\kappa(\omega) = \text{const}$, будем называть «моделью полного перераспределения по частоте в акте переизлучения». Оно позволит нам систематически использовать функционал

$$T(\rho) \equiv \int_0^{\infty} P(\omega) \exp[-\kappa(\omega)\rho] d\omega \quad (2)$$

— взвешенную (в силу предполагаемого условия нормировки $\int_0^{\infty} P(\omega) d\omega = 1$) вероятность прохождения фотоном расстояния ρ «прострельно», т. е. без единого акта поглощения — и построенную с его помощью «локальную» характеристику $\bar{T}(\mathbf{r})$ (27) вероятности «прострельного» вылета фотона за пределы системы. Вычленение таких, чисто фотонных характеристик задачи делает рассмотрение в достаточной мере инвариантным по отношению к геометрии системы и,

* Из сказанного ясно, что все три отмеченные особенности переноса излучения в линии по сравнению с переносом в континууме [дополнительный частотный масштаб Γ , большее значение $\kappa(\omega)$, более вероятное отклонение от ЛТР] обусловлены в конечном счете одной общей причиной — самим фактом дискретности перехода — и выражены тем ярче, чем сильнее выполнено условие этой дискретности — неравенство $\Gamma \ll \omega_0$.

главное, к механизму испускания — поглощения. Это позволит, в частности, на единой основе рассмотреть перенос излучения в резонансной линии и в континууме и ясно проследить физические особенности переноса в этих случаях в плане его сходства или отличия от обычной диффузии. Рассмотрение нестационарного аспекта проблемы (время выхода фотона за пределы системы, § 5) позволит попутно дать наглядную качественную трактовку указанных особенностей, а также определить наиболее прямым путем различные характерные длины задачи, в том числе «длину запираения излучения» (длину тушения), разграничивающую области объемного и поверхностного излучения плазменной системы конечных размеров (см. § 7). При этом значительное внимание будет уделено анализу физически наиболее интересного случая $\kappa_0 a \gg 1$, $\beta \ll 1$ (оптически толстая система в условиях, далеких от ЛТР).

Заметное место в обзоре уделено изложению некоторых приближенных методов решения уравнения переноса, а также вероятностной трактовки этой проблемы (§ 3, 4). На конкретных примерах рассмотрен относительно более простой вопрос о переносе излучения в условиях ЛТР (см. § 8). Наконец, в § 9 кратко обсуждаются границы применимости используемых теоретических моделей.

§ 2. Уравнение Бибермана — Холстейна

Для описания переноса излучения в общем случае неравновесной среды удобно использовать формализм, основанный на уравнении баланса плотности возбужденных атомов, полученном впервые Биберманом [2] и Холстейном [3]. Для простоты ниже будет использована двухуровневая модель, т. е. будут рассматриваться переходы только между двумя уровнями 0 и 1 атома или иона (для случая переноса в рекомбинационном континууме, который также может быть в принципе включен в рассматриваемую схему — переходы из основного состояния в континуум и обратно). Заметим, что двухуровневая модель нередко реализуется почти в чистом виде, если структура спектра такова, что первый возбужденный уровень расположен значительно ближе к основному уровню, чем к следующему возбужденному.

В предположении пространственной однородности плазмы (конкретно — ее параметров n_0 , n_e , T) уравнение баланса плотности числа возбужденных атомов $n_1(\mathbf{r}, t)$ с учетом процессов электронного и радиационного возбуждения — девозбуждения (в пренебрежении индуцированным испусканием) имеет вид:

$$\frac{\partial n_1}{\partial t} = n_0 n_e \langle v \sigma_{01} \rangle - n_1 n_e \langle v \sigma_{10} \rangle - \frac{n_1}{\tau} + \frac{1}{\tau} \int_V n_1(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{r}'. \quad (3)$$

Здесь V — объем системы; n_0 — плотность атомов на нижнем уровне; σ_{01} и σ_{10} — сечения возбуждения и девозбуждения электронным ударом; τ — среднее время жизни возбужденного состояния относительно спонтанного испускания; $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ — вероятность того, что фотон, испущенный в точке \mathbf{r}' , будет поглощен в единице объема вблизи

точки \mathbf{r} (эффектами запаздывания пренебрегается); угловые скобки означают усреднение по максвелловскому распределению электронных скоростей v .

Выясним связь между ядром $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ и функцией $T(\rho)$ (2), где $\rho \equiv \mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Введем функцию $K(\rho)$ такую, что $K(\rho)d\rho$ есть вероятность поглощения фотона в промежутке от ρ до $\rho + d\rho$. Примем, что спонтанное излучение изотропно. Тогда вероятность того, что фотон поглотится в элементе объема, определяемом телесным углом $d\Omega$ и сферами радиусов ρ и $\rho + d\rho$ (считая от точки испускания), есть, очевидно, $\frac{d\Omega}{4\pi} K(\rho)d\rho$. Учитывая, что $d\mathbf{r} = \rho^2 d\rho d\Omega$, имеем $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')d\mathbf{r} = \frac{1}{4\pi\rho^2} K(\rho)d\rho$. Из элементарных вероятностных соображений $K(\rho)d\rho = T(\rho) - T(\rho + d\rho) = -d\rho \frac{\partial T}{\partial \rho}$, откуда

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2} \frac{dT(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)}{d|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}. \quad (4)$$

Введем функцию $y(\mathbf{r}, t) = n_1(\mathbf{r}, t)/n_1^{\text{B}}$, где n_1^{B} — термически равновесное (больцмановское) значение плотности n_1 , удовлетворяющее равенству $n_0 n_e \langle v\sigma_{01} \rangle = n_1^{\text{B}} n_e \langle v\sigma_{10} \rangle$, а также параметр тушения $\beta \equiv n_e \langle v\sigma_{10} \rangle \tau$, выражающий отношение скоростей девозбуждения вследствие столкновений с электронами и спонтанного высвечивания. Тогда уравнение (3) принимает вид:

$$\tau \frac{\partial y(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \int_V G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') y(\mathbf{r}', t) d\mathbf{r}' - (1 + \beta) y(\mathbf{r}, t) + \beta. \quad (5)$$

Это уравнение и носит название уравнения Бибермана — Холстейна (БХ).

Поскольку $n_1^{\text{B}} = \frac{g_1}{g_0} n_0 \exp\left(-\frac{\Delta E}{kT}\right)$ ($\Delta E = E_1 - E_0$ — энергия перехода, g_1 и g_0 — статистические веса уровней), конкретный вид параметра β определяется, очевидно, видом сечения возбуждения σ_{01} . Наиболее простой вид β , достаточный для наших целей, получается при выборе σ_{01} в дипольном приближении типа Борна — Бете, в котором σ_{01} в основном пропорционально вероятности разрешенного радиационного перехода $1/\tau$ (см. с. 42 настоящего выпуска). Например, при выборе σ_{01} в простейшем виде $\sigma \propto (u - 1)/u^2$, где $u = \frac{E_e}{\Delta E}$ [4], это дает:

$$\beta = 2,7 \cdot 10^{-13} \frac{n_e}{(\Delta E)^{7/2}} \sqrt{x} [1 - xe^x \text{Ei}(x)], \quad (6)$$

где $x \equiv \Delta E/kT$; Ei — интегральная экспонента; n_e выражено в см^{-3} , ΔE — в эВ. Более детальные выражения для β можно получить с помощью сечений, рассмотренных на с. 33 (см. также [5]).

При получении уравнения БХ мы оперировали с вероятностными характеристиками и использовали предположение об изотропии излучения. Покажем теперь, опираясь на [6], что это уравнение можно вывести, используя уравнение переноса излучения в его обычной

форме. Уравнение баланса для энергии излучения частоты ω имеет вид:

$$\frac{dI_\omega}{ds} = -I_\omega(n_0 B_{01} \Phi_\omega - n_1 B_{10} \Psi_\omega) \frac{\hbar\omega}{4\pi} + n_1 A_{10} j_\omega \frac{\hbar\omega}{4\pi}. \quad (7)$$

Здесь I_ω — интенсивность излучения в единицу телесного угла; ds — элемент пути вдоль направления распространения излучения; n_0 и n_1 имеют прежний смысл; $A_{10} (=1/\tau)$, B_{10} , B_{01} — коэффициенты Эйнштейна для спонтанного излучения, индуцированного излучения и поглощения соответственно; j_ω , Ψ_ω , Φ_ω — соответствующие нормированные профили линии: $\int_0^\infty j_\omega d\omega = \int_0^\infty \Psi_\omega d\omega = \int_0^\infty \Phi_\omega d\omega = 1$. Вводя эффективный коэффициент поглощения

$$\kappa'_\omega = \frac{\hbar\omega}{4\pi} (n_0 B_{01} \Phi_\omega - n_1 B_{10} \Psi_\omega) \quad (8)$$

и так называемую функцию источника

$$S_\omega = \frac{n_1 A_{10} j_\omega}{n_0 B_{01} \Phi_\omega - n_1 B_{10} \Psi_\omega}, \quad (9)$$

приводим уравнение (7) к стандартному виду уравнения переноса:

$$\frac{dI_\omega}{ds} = -\kappa'_\omega (I_\omega - S_\omega). \quad (10)$$

В формализме теории переноса, основанном на уравнении БХ, обычно используется предположение об одинаковости всех профилей испускания и поглощения: $j_\omega = \Psi_\omega = \Phi_\omega$. Вопрос об области применимости этого предположения кратко обсуждается в § 9; здесь мы ограничимся констатацией того факта, что область эта весьма широка и охватывает большинство практически интересных случаев. Используя указанное предположение, получаем (ω_0 — центральная частота линии):

$$\kappa'_\omega = \frac{\hbar\omega}{4\pi} (n_0 B_{01} - n_1 B_{10}) \Phi_\omega \approx \frac{\hbar\omega_0}{4\pi} (n_0 B_{01} - n_1 B_{10}) \Phi_\omega; \quad (11)$$

$$S_\omega = \frac{n_1 A_{10}}{n_0 B_{01} - n_1 B_{10}} \equiv S, \quad (12)$$

т. е. функция источника в пределах спектральной линии не зависит от частоты.

Обратимся теперь к уравнению для заселенности n_1 :

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_1}{\partial t} = & -n_1 A_{10} + (n_0 B_{01} - n_1 B_{10}) \int \bar{I}_\omega \Phi_\omega d\omega + \\ & + n_0 n_e \langle v\sigma_{01} \rangle - n_1 n_e \langle v\sigma_{10} \rangle, \end{aligned} \quad (13)$$

где $\bar{I}_\omega = \frac{1}{4\pi} \int I_\omega d\Omega$ — интенсивность излучения, усредненная по направлениям. В стационарном случае с помощью (13), использованных

выше формул, которые содержат n_1^B , и известных соотношений между коэффициентами Эйнштейна *

$$\frac{A_{10}}{B_{10}} = \frac{\hbar\omega_0^3}{4\pi^3 c^2}, \quad \frac{B_{01}}{B_{10}} = \frac{g_1}{g_0} \quad (14)$$

функцию источника (12) нетрудно преобразовать к виду

$$S = \frac{1}{1+\beta'} \int \bar{I}_\omega \Phi_\omega d\omega + \frac{\beta'}{1+\beta'} B_{\text{пл}}(\omega_0), \quad (15)$$

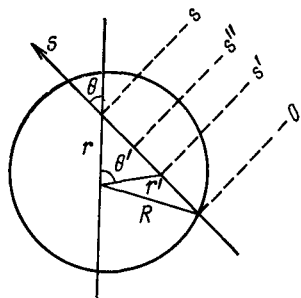


Рис. 1. Геометрия переноса излучения в плазменной среде радиусом R

где $\beta' = \beta [1 - \exp(-\frac{\hbar\omega_0}{kT})]$, $B_{\text{пл}}(\omega_0)$ — планковская интенсивность на единицу телесного угла:

$$B_{\text{пл}}(\omega_0) = \frac{\hbar\omega_0^3}{4\pi^3 c^2} \frac{1}{\exp(\hbar\omega_0/kT) - 1}. \quad (16)$$

Выражение (15) представляет собой обобщение функции Планка $B_{\text{пл}}(\omega_0)$ (предел ЛТР, $\beta = \infty$) на случай неравновесной плазмы ($\beta \neq \infty$).

Далее рассмотрим для определенности случай сферической геометрии, когда I_ω и S зависят только от расстояния r до центра симметрии и угла θ между направлением распространения и радиус-вектором (рис. 1); для случая изотропного рассеяния S зависит, более того, только от r . Уравнение переноса (10) принимает вид (штрих у κ_ω опускаем, поскольку мы ограничиваемся выводом уравнения БХ в пренебрежении индуцированным излучением, когда $\kappa'_\omega = \kappa_\omega$):

$$\frac{dI_\omega(r, \theta)}{ds} = -\kappa_\omega(r) [I_\omega(r, \theta) - S(r)]. \quad (17)$$

Формальное интегрирование уравнения (17) дает:

$$I_\omega(r, \theta) = I_\omega(0) \exp\left(-\int_0^s \kappa_\omega ds'\right) + \int_0^s \kappa_\omega S \exp\left(-\int_{s'}^s \kappa_\omega ds''\right) ds', \quad (18)$$

где $I_\omega(0)$ — интенсивность для данного направления в точке $s = 0$. Первое слагаемое в (18) описывает интенсивность в точке (r, θ) , связанную с падающим извне излучением и его поглощением от точки $s = 0$ до точки s , а второе — рождение фотонов и их поглощение на пути от s' до s ; вклад в $I_\omega(r)$, очевидно, вносят все фотоны, рожденные

* В рассматриваемом формализме их проще всего получить из уравнения (10), потребовав, чтобы оно тождественно удовлетворялось при *полном* термодинамическом равновесии, когда одновременно реализуются распределение Планка (16) для I_ω и распределение Больцмана для n_1/n_0 , входящего в S_ω (9).

на элементарных отрезках ds' . В отсутствие падающего излучения ($I_\omega(0) = 0$) получаем:

$$I_\omega(r, \theta) = \int_0^s \kappa_\omega S \exp\left(-\int_{s'}^s \kappa_\omega ds''\right) ds'. \quad (19)$$

Таким образом, зная S и κ_ω как функции r , можно найти все интегральные (по спектру и по объему) характеристики излучения. Знание $S(r)$ согласно (12) эквивалентно знанию $n_1(r)$ (в принятом ранее предположении, что $n_0 = \text{const}$). Покажем теперь, как уравнение (13) преобразуется к виду уравнения БХ.

Из (19), (12) и (8) нетрудно найти:

$$I_\omega(r, \theta) = \frac{\hbar\omega_0}{4\pi} \frac{1}{\tau} \Phi_\omega \int_0^{\rho_{\text{макс}}} n_1(r') \exp(-\kappa_\omega \rho) d\rho, \quad (20)$$

где $r' = r - \mathbf{u}\rho$, \mathbf{u} — орт направления (θ, ψ) . Отсюда для \bar{I}_ω , входящего в (13), получаем:

$$\bar{I}_\omega(r, \theta) = \frac{\hbar\omega_0}{4\pi} \frac{1}{\tau} \Phi_\omega \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\psi \int_0^\pi \sin\theta d\theta \int_0^{\rho_{\text{макс}}} n_1(r') \exp(-\kappa_\omega \rho) d\rho. \quad (21)$$

Справа стоит, очевидно, объемный интеграл по $dr' = \rho^2 \sin\theta d\theta d\psi d\rho$. Подставляя его в (13), находим:

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_1(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= n_0 n_e \langle v\sigma_{01} \rangle - n_1 n_e \langle v\sigma_{10} \rangle - \frac{n_1(\mathbf{r}, t)}{\tau} + \\ &+ \frac{1}{\tau} \iint n_1(r') \frac{\kappa_\omega \Phi_\omega}{4\pi\rho^2} \exp(-\kappa_\omega \rho) d\omega dr', \end{aligned} \quad (22)$$

что в силу (4) и принятого допущения $j_\omega = \Phi_\omega$ совпадает с уравнением БХ (3), (5).

§ 3. Некоторые решения уравнения Бибермана — Холстейна. Диффузионный и антидиффузионный перенос возбуждения

Уравнение БХ (5) в стационарном случае представляет собой неоднородное интегральное уравнение Фредгольма второго рода. Его удобно преобразовать к стандартному виду, введя параметр

$$\lambda = 1/(1 + \beta), \quad (23)$$

являющийся, очевидно, вероятностью переизлучения кванта атомом [так что $1 - \lambda$ — вероятность тушения (гибели) кванта].

С учетом (23) уравнение (5) запишется в виде

$$y(\mathbf{r}) = \lambda \int_V G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') y(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' + F(\mathbf{r}), \quad (24)$$

где мы ввели для общности неоднородность возбуждения атомов в среде $F(\mathbf{r})$; в случае однородного термического возбуждения $F(\mathbf{r}) = 1 - \lambda = \text{const}$.

Решение уравнения (24) можно выразить с помощью оператора резольвенты:

$$y(\mathbf{r}) = F(\mathbf{r}) + \lambda \int_V d\mathbf{r}' \Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \lambda) F(\mathbf{r}'). \quad (25)$$

Функция $\Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \lambda)$, называемая резольвентой, удовлетворяет уравнению

$$\Gamma(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \lambda) - \lambda \int_V d\mathbf{r}'' G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'') \Gamma(\mathbf{r}'', \mathbf{r}', \lambda) = G(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (26)$$

Физический смысл резольвенты состоит в том, что она совпадает с плотностью возбужденных атомов, возникающей при помещении в начало координат точечного источника света мощностью $\frac{1}{4\pi} P(\omega) \delta(\mathbf{r})$.

Интеграл от ядра $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ по объему системы [см. (4)]

$$\int_V G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{r}' = 1 - \frac{1}{4\pi} \int_{(4\pi)} T(\rho_{\Omega}^{\text{макс}}) d\Omega \equiv 1 - \bar{T}(\mathbf{r}) \quad (27)$$

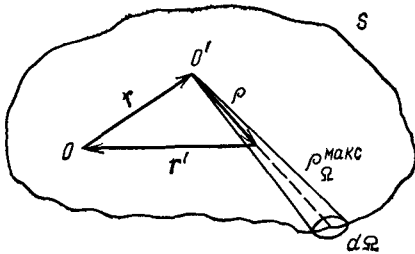


Рис. 2. Геометрические переменные для описания функции $\bar{T}(\mathbf{r})$ (27)

выражается через функцию $\bar{T}(\mathbf{r})$, определяющую вероятность прострельного вылета фотона из точки \mathbf{r} за пределы системы (рис. 2).

Регулярным методом решения уравнения (24) при $\lambda < 1$ является использование так называемого ряда Неймана, получаемого последовательной подстановкой неоднородности в интегральный член. Такая процедура, например, для $F(\mathbf{r}) = 1 - \lambda$ дает:

$$y(\mathbf{r}) = \beta \left\{ \lambda + \lambda^2 [1 - \bar{T}(\mathbf{r})] + \lambda^3 \int_V [1 - \bar{T}(\mathbf{r}')] G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d\mathbf{r}' + \dots \right\} \quad (28)$$

Ряд (28) легко суммируется в двух простых случаях: 1) $\beta \gg 1$ — сильное тушение возбуждения в среде и 2) $\kappa_0 a \ll 1$ — оптически тонкая среда. В обоих случаях второй и последующие члены в (28) не существенны (в первом — ввиду $\lambda \ll 1$, а во втором — ввиду $[1 - \bar{T}(\mathbf{r})] \ll 1$) и решение сводится к пространственно-однородному:

$$y \approx \beta / (1 + \beta). \quad (29)$$

Физический смысл решения (29) состоит в том, что либо возбужденные атомы тотчас испытывают тушение в той же точке пространства (первый случай), либо фотоны свободно уходят из среды, не успевая повторно ее возбудить (второй случай).

Более общий тип решения уравнения (24) можно получить для областей \mathbf{r} вдали от границ системы и источников возбуждения. Действительно, в достаточном удалении от границ оптически толстой системы решение должно приближаться к равновесному решению в бесконечной среде ($y = 1$). Поэтому следует ожидать, что функция $y(\mathbf{r})$ является здесь медленно меняющейся и ее можно вынести из-под интеграла в (24) в точке $\mathbf{r}' = \mathbf{r}$, что с учетом (27), (23) дает для случая однородного термического возбуждения [7]

$$y(\mathbf{r}) \approx \frac{\beta}{\beta + \bar{T}(\mathbf{r})} \equiv \tilde{y}(\mathbf{r}). \quad (30)$$

Решение (30) можно получить также с помощью ряда Неймана (28), используя медленность изменения функции $[1 - \bar{T}(\mathbf{r})]$ под интегралом (28), а также (27), с учетом чего ряд суммируется [8].

В силу (30) характер решения определяется конкуренцией двух процессов — тушения возбуждения (с вероятностью β) и прострельного вылета фотона за пределы системы [с вероятностью $\bar{T}(\mathbf{r})$]. Сравнение обеих вероятностей определяет (для $\beta \ll 1$) некоторую характерную длину Λ (T_{ac} — асимптотика функции (2) при большом ρ)

$$T_{ac}(\Lambda) = \beta, \quad (31)$$

называемую *длиной термализации*. Физический смысл Λ состоит в том, что на расстояниях от границы $\gtrsim \Lambda$ излучение приходит в равновесие со средой, а на еще больших глубинах возбуждение среды становится термически равновесным ($y \approx 1$) — «термализуется».

Решение (30) справедливо, как уже говорилось, вдали от поверхности системы. Для точек \mathbf{r}_s , лежащих на самой поверхности, ряд Неймана также допускает суммирование [8], что приводит к результату [9]

$$y(\mathbf{r}_s) = \sqrt{\beta/(1 + \beta)}. \quad (32)$$

Видно, что при $\beta \ll 1$ степень возбуждения атомов на поверхности в $(1/\sqrt{\beta})$ раз меньше термически равновесной. Это объясняется, очевидно, свободным выходом излучения с поверхности (ср. § 4).

Вернемся к обсуждению характера решения вдали от поверхности среды [10]. Выше при выводе (30) использовалось предположение о достаточной крутизне спада ядра $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ по сравнению с $y(\mathbf{r})$. Рассмотрим вопрос о том, как влияет вид ядра $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ на характер решения (24). Для этого удобно преобразовать (24) к виду

$$y(\mathbf{r}) [\beta + \bar{T}(\mathbf{r})] = -\frac{1}{4\pi} \int_V \frac{1}{\rho^2} \frac{dT}{d\rho} [y(\mathbf{r} + \rho) - y(\mathbf{r})] d\rho + F_1(\mathbf{r}). \quad (33)$$

Вид функции $T(\rho)$ (2) при фиксированном $\kappa_0 a$ определяется видом коэффициентов испускания $P(\omega)$ и поглощения $\kappa(\omega)$.

Важным параметром, характеризующим тип решения, является средний квадрат свободного пробега фотона, определяемый соотношением

$$\bar{l}^2 \equiv \left\langle \frac{1}{\kappa^2(\omega)} \right\rangle = \int_0^\infty \frac{P(\omega) d\omega}{\kappa^2(\omega)} = \int_0^\infty \rho T(\rho) d\rho. \quad (34)$$

Допустим, что значение \bar{l}^2 конечно. Простейшим примером может служить перенос в монохроматической линии: $P(\omega) = \delta(\omega - \omega_0)$, когда, согласно (2), $T(\rho) = \exp(-\kappa_0 \rho)$. Этот случай приближенно реализуется, если $P(\omega)$ изменяется достаточно быстро по сравнению с $\kappa(\omega)$, например, при переносе рекомбинационного излучения [11], для которого (в приближении Крамерса):

$$P(\omega) \propto \frac{1}{\omega} \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right); \quad \kappa(\omega) \propto 1/\omega^3, \quad (35)$$

так что $\bar{T}(\rho) \propto \exp(-\text{const } \rho^{1/4})$, $\sqrt{\bar{l}^2} \approx 1/\kappa_0$.

Поскольку при $\bar{l}^2 \neq \infty$ функция $T(\rho)$ достаточно быстро спадает с ростом ρ , член $\bar{T}(\rho)y(\rho)$ много меньше интегрального члена, в котором в рассматриваемом случае можно произвести разложение по степеням ρ фоккер-планковского типа функции $y(\rho + \rho)$. В результате получим дифференциальное уравнение диффузионного типа, имеющее для бесконечной среды следующий вид:

$$D\left(\Delta - \frac{1}{L^2}\right)y(\rho) + F_2(\rho) = 0, \quad (36)$$

где D и L — коэффициент диффузии и диффузионная длина, равные:

$$D = \frac{\bar{l}^2}{3\tau}; \quad L = \sqrt{\frac{\bar{l}^2(\beta+1)}{3\beta}}. \quad (37)$$

Таким образом, при $\bar{l}^2 \neq \infty$ перенос излучения носит характер обычной («истинной») диффузии.

Перейдем к случаю $\bar{l}^2 = \infty$, отвечающему сравнительно медленному спаду функции $T(\rho)$. Здесь фоккер-планковское разложение по степеням ρ в (33) для бесконечной среды приводит к значению $D = \infty$. Этот случай реализуется, в частности, для следующих классов спектров.

А. Пусть $P(\omega)$ изменяется медленнее, чем $\kappa(\omega)$. Тогда в (2) интегрально существенна область $\kappa(\omega)\rho \ll 1$, так что $T(\rho) \approx 1$, как и для оптически тонкой системы. Соответственно, например, для однородного возбуждения решение имеет вид (29), отвечающий свободному выходу фотонов из среды. Качественно процесс переноса здесь можно представить как прострельный выход фотонов в крыльях линии, где коэффициент поглощения уже мал, а коэффициент испускания $P(\omega)$ все еще почти постоянен. Ясно, что перенос возбуждения в этом случае носит «антидиффузионный» характер. Напомним, что вклад интегрального члена в перенос при этом мал.

Б. Пусть функции $P(\omega)$ и $\kappa(\omega)$ сравнимы по скорости изменения и имеют плавное распределение по частоте (протяженные крылья). Здесь наиболее важен случай $P(\omega)/\kappa(\omega) = \text{const}$, характерный для переноса резонансного излучения (см. § 2). Асимптотическое поведение $T(\rho)$ при $\kappa_0 \rho \gg 1$ для дисперсионного (лоренцовского) и доплеровского контуров при $P(\omega) \propto \kappa(\omega)$ дается формулами [3]

$$T_{\text{лор}}^{\text{ас}}(\rho) \approx (\pi \kappa_0 \rho)^{-1/2}; \quad T_{\text{доп}}^{\text{ас}}(\rho) \approx \frac{1}{\kappa_0 \rho \sqrt{\ln \kappa_0 \rho}}. \quad (38)$$

Для таких медленно спадающих $T(\rho)$ качественно справедливо приближенное решение $\tilde{y}(30)$: в этом случае интегральный член и член с $\bar{T}(\mathbf{r})$ в (33) являются величинами одного порядка, причем численно более существенным оказывается второй из них.

С физической точки зрения приближение $\tilde{y}(r)$ альтернативно диффузионному приближению (36), (37). Действительно, зависимость y от координат целиком определяется функцией $\tilde{T}(\mathbf{r})$, выражающей вероятность прострельного вылета фотона, тогда как в диффузионном приближении зависимость y от \mathbf{r} принципиально связана с многократным его переизлучением.

Итак, если функция $T(\rho)$ — быстро спадающая (монохроматическая линия, линия с «прямоугольным» профилем, рекомбинационный континуум и т. п.), так что средняя длина пробега фотона конечна, то перенос возбуждения носит диффузионный характер. Напротив, для медленно спадающих $T(\rho)$ (линии с протяженными крыльями) характер переноса возбуждения в основном антидиффузионный. Впрочем, как будет видно из § 5, при $P(\omega) \propto \kappa(\omega)$ последний случай никогда не реализуется в чистом виде, а имеет место, скорее, некоторая промежуточная (между диффузией и «антидиффузией») ситуация, характеризующаяся, в зависимости от конкретной формы линии, той или иной степенью недиффузионности переноса.

§ 4. Вероятностная трактовка переноса возбуждения. Характеристики переноса в полупространстве

Процесс радиационного переноса возбуждения во многом аналогичен процессу случайного блуждания частицы, испытывающей многократное рассеяние на случайно расположенных центрах. Действительно, траектория фотона в среде представляет собой ломаную линию, изломы которой возникают в случайных точках, отвечающих положению атомов, поглощающих и переизлучающих фотоны. Ядро интегрального уравнения переноса (24), $\lambda G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \equiv \Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, определяет вероятность прохождения фотона из точки \mathbf{r} в точку \mathbf{r}' без рассеяния. Поэтому уравнение переноса можно рассматривать как связь возбуждения в двух точках \mathbf{r} и \mathbf{r}' , определяемую вероятностью перехода $\Pi(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$:

$$n(\mathbf{r}) = \int_V \Pi(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) n(\mathbf{r}') d\mathbf{r}' + \delta(\mathbf{r}), \quad (39)$$

где $\delta(\mathbf{r})$ [конкретизация выбора $\tilde{F}(\mathbf{r})$ в (24)] учитывает наличие источника в начале координат.

Вероятностный подход к проблеме переноса позволяет установить важные соотношения между решениями в различных геометриях, в частности, в полном пространстве и полупространстве. Ниже мы следуем работе [12], где получен также ряд результатов для систем

с конкретной геометрией. Здесь мы продемонстрируем лишь общие принципы, лежащие в основе вероятностной трактовки.

Вероятность перехода $\Pi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ может быть положена в основу определения меры W траектории движения фотона. Пусть фотон движется по траектории \mathcal{P}_n , состоящей из отрезков $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n$. Вероятность $dW(\mathcal{P}_n)$

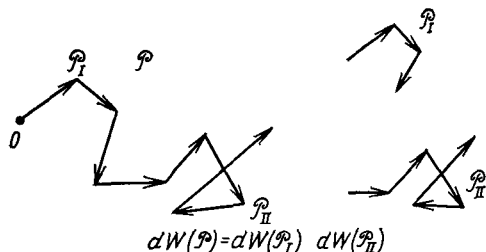


Рис. 3. Перенос начала траектории и точки разбиения в начало координат

прохождения траектории \mathcal{P}_n в силу «марковости» процесса миграции фотона равна произведению вероятностей прохождения на каждом из отрезков:

$$dW(\mathcal{P}_n) = \prod_{i=2}^n \Pi(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i-1}|) d\mathbf{r}_i = \lambda^{n-1} \prod_{i=2}^n G(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_{i-1}|) d\mathbf{r}_i. \quad (40)$$

Вычисляемые величины связаны, как правило, с процессом суммирования (интегрирования) по траекториям, определяемым следующим образом:

$$\begin{aligned} \sum_{\{\mathcal{P}_n\}} dW(\mathcal{P}_n) &= \int \dots \int d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_n \Pi(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|) \dots \\ &\dots \Pi(|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n-1}|) = \lambda^{n-1} \int \dots \int d\mathbf{r}_2 \dots \\ &\dots d\mathbf{r}_n G(|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1|) \dots G(|\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n-1}|) \end{aligned} \quad (41)$$

Мера $dW(\mathcal{P})$ инвариантна относительно перестановки различных звеньев траектории. В силу марковости процесса рассеяния при разбиении пути \mathcal{P} на два участка \mathcal{P}_I и \mathcal{P}_{II} имеем:

$$dW(\mathcal{P}) = dW(\mathcal{P}_I) dW(\mathcal{P}_{II}), \quad (42)$$

причем начало траектории и точку разбиения можно перенести в начало координат (рис. 3).

Решение уравнения (39) можно записать в виде суммы (интеграла) по траекториям:

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{\{\mathcal{P}\}} \delta[\mathbf{r} - \mathbf{r}(\mathcal{P})] dW(\mathcal{P}). \quad (43)$$

Действительно, умножая обе части (43) на $\lambda G(\mathbf{r}_0, \mathbf{r})$, интегрируя по $d\mathbf{r}$ и используя свойства (41), (42), убеждаемся, что (43) удовлетворяет (39).

Покажем, как с помощью метода интегралов по траекториям можно получить решение уравнения (39) в полном пространстве. Для этого представим δ -функцию в (43) в виде фурье-разложения:

$$\delta[\mathbf{r} - \mathbf{r}(\mathcal{P})] = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{p} \exp\{-i\mathbf{p}[\mathbf{r} - \mathbf{r}(\mathcal{P})]\}. \quad (44)$$

Удобство такого разложения связано с тем, что любая траектория \mathcal{P}_n , состоящая из n изломов, удовлетворяет тождеству

$$\mathbf{r}(\mathcal{P}_n) \equiv \mathbf{r}_n = (\mathbf{r}_n - \mathbf{r}_{n-1}) + (\mathbf{r}_{n-1} - \mathbf{r}_{n-2}) + \dots + (\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1), \quad (45)$$

с учетом которого усредняемая экспонента $\exp[i\mathbf{p}\mathbf{r}(\mathcal{P}_n)]$ распадается, как и сама мера $dW(\mathcal{P}_n)$, на произведение n независимых множителей, интегрирование которых приводит к одинаковым интегралам от ядра $G(\mathbf{r})$:

$$\begin{aligned} \sum_{\{\mathcal{P}_n\}} \exp[i\mathbf{p}\mathbf{r}(\mathcal{P})] dW(\mathcal{P}) &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{\{\mathcal{P}_n\}} \exp[i\mathbf{p}\mathbf{r}(\mathcal{P}_n)] dW(\mathcal{P}_n) = \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \left[\lambda \int d\mathbf{r} \exp(i\mathbf{p}\mathbf{r}) G(\mathbf{r}) \right]^{n-1} = [1 - \lambda G(\mathbf{p})]^{-1}. \end{aligned} \quad (46)$$

Формула (46) определяет в соответствии с (43), (44) фурье-образ $n(\mathbf{p})$ функции $n(\mathbf{r})$ в полном пространстве:

$$n(\mathbf{p}) = [1 - \lambda G(\mathbf{p})]^{-1}. \quad (47)$$

Решение (47) может быть, конечно, получено и прямым фурье-преобразованием уравнения (39). Изложенный способ приведен лишь для иллюстрации вероятностных методов, которые, хотя и более сложны в данном простом случае, в других, более сложных случаях позволяют сравнительно просто получить важные соотношения между решениями.

Найдем, например, среднее число N актов рассеяния фотона в полном пространстве и полупространстве. Вероятность фотону испытать не менее n актов рассеяния равна:

$$W_n = \sum_{\{\mathcal{P}_n\}} dW(\mathcal{P}_n), \quad n \geq 2, \quad W_1 = 1. \quad (48)$$

Тогда, если $q_n = W_n - W_{n+1}$ — вероятность испытать ровно n актов рассеяния, среднее число актов рассеяния N , очевидно, равно:

$$N = \sum_{n=1}^{\infty} n q_n = \sum_{n=1}^{\infty} W_n = \sum_{\mathcal{P}} dW(\mathcal{P}). \quad (49)$$

В случае бесконечной среды имеем $W_n = \lambda^{n-1}$, так что $N_{\infty} = (1 - \lambda)^{-1}$, т. е. среднее число актов рассеяния фотона обратно пропорционально вероятности его тушения в среде.

Для полубесконечной среды среднее число $N_{1/2}$ актов рассеяния фотона, начинающего свой путь с поверхности, получим с помощью свойства меры (42). Для этого на каждой траектории \mathcal{P} фотона в пол-

ном пространстве отыщем крайнюю левую точку, которая делит траекторию на два участка \mathcal{P}_I и \mathcal{P}_{II} . Совмещая все левые точки в начале координат, получаем соответствие между траекториями в полном пространстве и в полупространстве. Используя свойство меры (42), находим:

$$\begin{aligned} N_\infty &= \sum_{\{\mathcal{P}\}} dW(\mathcal{P}) = \sum_{\{\mathcal{P}_I\}} \sum_{\{\mathcal{P}_{II}\}} dW(\mathcal{P}_I) dW(\mathcal{P}_{II}) = \\ &= \sum_{\{\mathcal{P}_I\}} dW(\mathcal{P}_I) \sum_{\{\mathcal{P}_{II}\}} dW(\mathcal{P}_{II}) = N_{1/2}^2, \end{aligned} \quad (50)$$

откуда [ср. (32)]

$$N_{1/2} = \sqrt{N_\infty} = (1 - \lambda)^{-1/2}. \quad (51)$$

Как и следовало ожидать, среднее число актов рассеяния фотона в полупространстве оказывается меньшим, чем в полном пространстве, поскольку фотон имеет возможность вылететь из среды через ее границу.

С помощью аналогичных рассуждений находится связь между решениями уравнения (39) в полном пространстве $n_0(\mathbf{r})$ и полупространстве с точечным источником на поверхности $n_{1/2}(\mathbf{r})$. Действительно, согласно (43) функция $n(\mathbf{r})$ определяется суммой по всем траекториям, оканчивающимся в точке \mathbf{r} . Пусть точка \mathbf{g} лежит справа от границы полупространства. Тогда фотон может попасть в эту точку двумя путями: либо блуждая только в правом полупространстве [вероятность $n_{1/2}(\mathbf{r})$], либо предварительно заходя в левую часть пространства. Допустим, что фотон заходит в левую часть пространства на расстояние $\boldsymbol{\tau}$, так что крайняя левая точка траектории $\boldsymbol{\tau}$ делит полную траекторию на две части \mathcal{P}_I и \mathcal{P}_{II} . Разбивая, как и при выводе (50), полную сумму по траекториям на сумму по траекториям, оканчивающимся в точке $\boldsymbol{\tau}$, и сумму от точки $\boldsymbol{\tau}$ до точки $\boldsymbol{\tau} + \mathbf{g}$, получим, очевидно, величину $n_{1/2}(\boldsymbol{\tau})n_{1/2}(\boldsymbol{\tau} + \mathbf{g})$. Полная вероятность попасть в точку \mathbf{g} получается интегрированием по всем значениям $\boldsymbol{\tau}$ в полупространстве:

$$n_0(\mathbf{r}) = n_{1/2}(\mathbf{r}) + \int_{\pm} n_{1/2}(\boldsymbol{\tau}) n_{1/2}(\boldsymbol{\tau} + \mathbf{r}) d\boldsymbol{\tau}, \quad (52)$$

где интеграл берется по правой половине пространства.

Формула (52) устанавливает искомую связь между решениями в полном пространстве и в полупространстве.

Воспользуемся аналогичными рассуждениями для установления связи между резольвентами интегрального уравнения (24) для полупространства в случаях, когда источник расположен на поверхности, $\Gamma(x, 0) = \Phi(x)$, и на глубине x' , $\Gamma(x, x')$. Для этого заметим, что резольвента $\Gamma_{1/2}(x, x')$ простым образом связана с функцией $n_{1/2}(x, x')$, удовлетворяющей уравнению

$$n_{1/2}(x, x') = \lambda \int_0^\infty G(x-t) n_{1/2}(t, x') dt + \delta(x-x'). \quad (53)$$

Функция $n_{1/2}(x, x')$ называется функцией Грина интегрального уравнения (24) и, как легко убедиться простой подстановкой (например, в ряд Неймана), связана с $\Gamma_{1/2}(x, x')$ соотношением

$$n_{1/2}(x, x') = \Gamma_{1/2}(x, x') \dagger \delta(x - x'). \quad (54)$$

Поскольку для функции $n_{1/2}(x, x')$ существуют соотношения типа (52), то аналогичные соотношения справедливы и для $\Gamma_{1/2}(x, x')$. Так, повторяя рассуждения, приведшие к формуле (52) (см. [12]), приходим к искомой связи * функций $\Gamma_{1/2}(x, x')$ и $\Gamma_{1/2}(x, 0) \equiv \Phi_{1/2}(x)$:

$$\Gamma_{1/2}(x, x') = \Phi_{1/2}(|x - x'|) + \int_0^x \Phi_{1/2}(t) \Phi_{1/2}(x' - x + t) dt, \quad (x > x'). \quad (55)$$

При достаточном удалении обеих точек x и x' от границы среды резольвента $\Gamma_{1/2}(x, x')$ должна мало отличаться от решения $\Phi(x - x')$ в полном пространстве. Полагая в (55) $x, x' \rightarrow \infty$, получаем соотношение

$$\Phi(x - x') = \Phi_{1/2}(x - x') + \int_0^\infty \Phi_{1/2}(t) \Phi_{1/2}(x' - x + t) dt, \quad (56)$$

аналогичное по смыслу формуле (52).

Из (56) следует важное соотношение

$$\int_0^\infty \Phi_{1/2}(x) dx = \sqrt{1 - \lambda} - 1. \quad (57)$$

Оно получается интегрированием (56) по $x - x'$ от 0 до ∞ с учетом свойства $\int_0^\infty \Phi(t) dt = \lambda(1 - \lambda)^{-1}$, следующего из общих уравнений (39), (54).

Рассмотрим более подробно характер решения уравнения БХ в полупространстве с постоянным и однородным источником возбуждения $F = F_0 = \text{const}$:

$$y(x, \lambda) = \lambda \int_0^\infty G(|x - x'|) y(x', \lambda) dx' + F_0. \quad (58)$$

Покажем, следуя [9], что решение уравнения (58) имеет вид:

$$y(x, \lambda) = y(0, \lambda) S(\lambda, x); \quad S(\lambda, x) = 1 + \int_0^x \Phi_{1/2}(x') dx'. \quad (59)$$

* Эта связь может быть установлена и непосредственным преобразованием интегрального уравнения, см. [9, § 5.1].

Действительно, дифференцируя (58) по x , имеем*:

$$\frac{dy}{dx} = \lambda \int_0^{\infty} G(|x-x'|) \frac{dy(x', \lambda)}{dx'} dx' + y(0, \lambda) \lambda G(x). \quad (60)$$

Отсюда видно, что уравнение для производной $\frac{dy(x, \lambda)}{dx}$ лишь множителем $y(0, \lambda)$ отличается от уравнения, определяющего резольвенту $\Phi_{1/2}(x)$, так что

$$\frac{dy(x, \lambda)}{dx} = y(0, \lambda) \Phi_{1/2}(x), \quad (61)$$

откуда и следует (59).

Из (59) с учетом (57) сразу следует соотношение между решениями на поверхности $y(0, \lambda)$ и в глубине $y(\infty, \lambda)$ среды:

$$y(0, \lambda) = \sqrt{1-\lambda} y(\infty, \lambda). \quad (62)$$

Таким образом, как уже отмечалось в § 3, степень возбуждения вблизи поверхности оказывается в $(1/\sqrt{1-\lambda})$ раз меньше, чем внутри среды.

Величина $y(\infty, \lambda)$, отвечающая удалению в глубь среды, должна совпадать с решением (58) в бесконечной среде. Это последнее получается, очевидно, из (58) при $x \rightarrow \infty$ путем вынесения $y(x', \lambda)$ из-под интеграла в точке $x' \approx x$ (см. § 3). Это дает

$$y(\infty, \lambda) = F_0/(1-\lambda), \quad (63)$$

что после подстановки в (62) приводит к

$$y(0, \lambda) = \frac{F_0}{\sqrt{1-\lambda}}. \quad (64)$$

Таким образом, общее решение уравнения (58) имеет вид

$$y(x, \lambda) = \frac{F_0}{\sqrt{1-\lambda}} S(\lambda, x). \quad (65)$$

Как видно, это решение формально теряет смысл при $\lambda = 1$ (предел так называемого чистого рассеяния). Можно, однако, определить решение и в этом случае, если выбрать $F_0 = \sqrt{1-\lambda}$. Тогда, переходя в (65) к пределу $\lambda = 1$, получим для $S(0, x) \equiv \tilde{S}(x)$ однородное интегральное уравнение

$$\tilde{S}(x) = \int_0^{\infty} G(|x-x'|) \tilde{S}(x') dx' \quad (66)$$

с граничным условием $\tilde{S}(0) = 1$, следующим из (59).

* Дифференцирование (58) требует разбиения интегрального члена на две области в соответствии с определением модуля $|x-x'|$ и последующей заменой переменных, см. [9, § 5.1].

Задача о решении уравнения (66) называется проблемой Милна. Нетрудно убедиться [9], что функция $\tilde{S}(x)$ растет при $x \rightarrow \infty$ степенным образом.

Вернемся теперь к случаю однородного термического возбуждения атомов в плазме, когда $F(r) = F_0 = 1 - \lambda$. Как ясно из § 1, 3, основной интерес здесь представляет случай $(1 - \lambda) \ll 1$, отвечающий сильному отклонению от термодинамического равновесия. Из § 3 видно, что на расстояниях x от поверхности, много больших длины

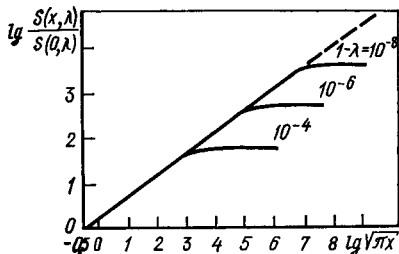


Рис. 4. Спад степени возбуждения к границе полупространства при слабом тушении

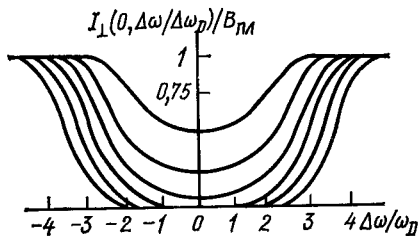


Рис. 5. Спектральные распределения интенсивности излучения (в долях планковской), выходящего из полупространства, при слабом тушении

термализации Λ , решение $y(x \gg \Lambda, \lambda)$ должно стремиться к равновесному: $y \rightarrow 1$. При $x \ll \Lambda$ согласно (65) имеем:

$$y(x, \lambda) \approx \sqrt{1 - \lambda} S(\lambda = 1, x) = \sqrt{1 - \lambda} \tilde{S}(x).$$

Оба эти предельных случая можно описать единой интерполяционной формулой [9]

$$y(x) \approx \frac{\sqrt{1 - \lambda} \tilde{S}(x)}{\sqrt{1 + (1 - \lambda) \tilde{S}^2(x)}},$$

совпадающей с точным численным решением в пределах нескольких процентов.

График функции $y(x)$ в зависимости от глубины x для ряда значений параметра $(1 - \lambda)$ при доплеровском механизме уширения приведен на рис. 4. Видно, что степень возбуждения быстро спадает при приближении к границе среды. Таким образом, при слабом тушении даже в среде с однородной плотностью термического возбуждения распределение возбужденных атомов оказывается существенно неоднородным. Вследствие этого интенсивность излучения, выходящего из полубесконечной среды, должна отличаться от планковской. Распределение интенсивности $I_{\perp}(x=0, \Delta\omega)$, получаемое подстановкой $y(x)$ в общие формулы для интенсивности [9], для ряда значений $1 - \lambda$ приведено на рис. 5. Считается, что контур линии — доплеровский, а излучение выходит по нормали к границе.

Провал при малых $\Delta\omega$ обусловлен тем, что выходящая интенсивность в этой области определяется (в силу большого коэффициента поглощения) лишь узким слоем атомов, прилегающих к поверхности

среды на расстояниях, меньших Λ ; поскольку, как видно из рис. 4, при $x \ll \Lambda$ степень возбуждения атомов гораздо меньше равновесной, излучаемая ими интенсивность меньше ее планковского значения. Здесь ярко проявляется взаимосвязь спектральных характеристик излучения с интегральными по спектру характеристиками, такими как степень возбуждения, длина термализации Λ и т. д.

Отметим, что степень возбуждения вблизи границы оптически толстой плазмы со слабым тушением оказывается пропорциональной согласно (32) корню из электронной плотности: $n_1 \sim \sqrt{1 - \lambda} \sim \sqrt{\beta} \sim \sqrt{n_e}$, в отличие, например, от соответствующего случая оптически тонкой плазмы, находящейся в корональном равновесии ($n_1 \sim n_e$).

Изложенное выше дает, конечно, лишь общее представление о проблемах теории переноса резонансного излучения в стационарном случае. Детальное изложение этой теории можно найти, в частности, в монографиях [9, 13, а также в 49]. Перейдем к краткому обсуждению нестационарных решений уравнения БХ.

§ 5. Время миграции резонансного фотона на заданное расстояние. Элементарная трактовка недиффузионного переноса излучения

Нестационарный аспект радиационного переноса возбуждения был впервые проанализирован Холстейном [3], который смог на этой основе объяснить наблюдаемую на опыте временную «затяжку» процесса высвечивания плоского слоя газа достаточно большой оптической толщины. Объяснение состоит, очевидно, в увеличении эффективного «времени жизни» резонансного фотона в оптически толстой системе вследствие его многократного поглощения и переизлучения атомами среды. Холстейн искал решение нестационарного уравнения (5) в виде разложения по собственным функциям соответствующего интегрального оператора. Отвечающие им собственные значения λ_i определяют характерные времена распада, так что по прошествии достаточно большого времени основную роль в решении играет, очевидно, наименьшее из них $\lambda_{\text{мин}}$; последнее находилось в [3] вариационным методом Ритца.

Мы не будем излагать трактовку [3], а остановимся на несколько ином подходе, основанном на работе Векленко [14]*. Именно, рассмотрим задачу о среднем времени $\bar{t}(r)$ выхода фотона на расстояние, большее или равное заданному r от точечного источника в бесконечной среде. При $\beta = 0$, т. е. в отсутствие тушения, имеем:

$$\bar{t}(r) = \int_0^{\infty} \int_0^r 4\pi r_1^2 f(r_1, t) |_{\beta=0} dr_1 dt, \quad (67)$$

* В результативном плане оба подхода весьма близки: достаточно «на глаз» идентифицировать характерные длины в обеих постановках задачи (система конечных размеров и бесконечная среда) — и окончательные формулы для характерных времен будут лишь незначительно различаться в численных коэффициентах [14].

где $f(\mathbf{r}, t)$ — функция Грина уравнения БХ для бесконечной среды, т. е. точное решение уравнения [ср. (5)]

$$\tau \frac{\partial f(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \int G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') f(\mathbf{r}', t) - (1 + \beta) f(\mathbf{r}, t) \quad (68)$$

при начальном условии: $f(\mathbf{r}, t) = \delta(\mathbf{r})$ при $t = 0$. Величина $f(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r}$ есть вероятность нахождения возбуждения в момент t в окрестности точки \mathbf{r} , если при $t = 0$ в пространстве имелся лишь один возбужденный атом, расположенный в точке $\mathbf{r} = 0$.

Уравнение (68) было решено в [14] с помощью преобразований Фурье и Амбарцумяна (преобразование Лапласа по координате). Результат имеет (после небольшого тождественного упрощения) вид

$$f(\mathbf{r}, t) = f(r, t) = - \frac{\exp \left[-(1 + \beta) \frac{t}{\tau} \right]}{4\pi^2 r} \times \\ \times \frac{\partial}{\partial r} \left[\int_{-\infty}^{+\infty} \exp \left[-ipr + \frac{t}{\tau} I(p) \right] dp \right], \quad (69)$$

где

$$I(p) = \frac{1}{p} \int_0^{\infty} P(\omega) \kappa(\omega) \operatorname{arctg} \frac{p}{\kappa(\omega)} d\omega. \quad (70)$$

В [14] получены асимптотики решения (69) для трех конкретных форм линии $P(\omega) \propto \kappa(\omega)$: монохроматической, доплеровской и дисперсионной (лоренцовской). Указано также, что из (69) получается решение *стационарной* задачи с точечным источником возбужденных атомов, действующим неограниченно долго [уравнение вида (68), в котором левая часть равна нулю, а в правой добавлена $\delta(\mathbf{r})$]. Это решение дается интегралом $\int_0^{\infty} f(r, t) dt$ от решения (69).

Как показано в [8], выражение $I(p)$ (70) можно преобразовать к виду функционала от $T(p)$ (2):

$$I(p) = 1 + \int_0^{\infty} T \left(\frac{x}{|p|} \right) \frac{d}{dx} \left(\frac{\sin x}{x} \right) dx, \quad (71)$$

что позволяет получить соответствующее общее выражение и для $\bar{t}(r)$:

$$\bar{t}(r) = \frac{2\tau \sqrt{r}}{\pi} \int_0^{\infty} \frac{J_{3/2}(y) dy}{\int_0^{\infty} T(\xi) J_{3/2} \left(\frac{y\xi}{r} \right) \frac{d\xi}{\sqrt{\xi}}}, \quad (72)$$

где $J_{3/2}$ — функция Бесселя. Формула (72) справедлива для всех r . Конкретный вид $\bar{t}(r)$ определяется структурой знаменателя в (72),

причем всегда $y_{\text{эф}} \sim 1$. Обсудим формулу (72) для наиболее интересного случая $\kappa_0 r \gg 1$.

Если интеграл $\int_0^{\infty} \xi T(\xi) d\xi = \bar{t}^2$ (34) сходится, то $J_{3/2}$ можно разложить в ряд по ξ , и получается диффузионный результат:

$$\bar{t}_{\text{диф}}(r) = \tau \frac{3r^2}{2\bar{t}^2} \gg \tau. \quad (73)$$

Если же \bar{t}^2 расходится, то в $J_{3/2}$ существенны значения аргумента порядка 1, так что $T(\xi)$ можно заменить его асимптотикой $T_{\text{ас}}(\xi)$. Тогда для лоренцовского и доплеровского профилей $P(\omega) \propto \kappa(\omega)$ получаем в согласии с [14]:

$$\bar{t}_{\text{лор}}(r) = 1,69\tau \sqrt{\kappa_0 r} \gg \tau; \quad \bar{t}_{\text{доп}}(r) = 1,44\tau\kappa_0 r \sqrt{\ln \kappa_0 r} \gg \tau. \quad (74)$$

Заметим, что обе формулы (74) можно представить с учетом (38) в виде ($C \approx 1$; $C_{\text{лор}} = 0,96$; $C_{\text{доп}} = 0,82$)

$$\bar{t}(r) = C \frac{\tau}{T_{\text{ас}}(r)} \gg \tau. \quad (75)$$

Физический смысл (75) состоит в том, что перенос резонансного излучения в линии с протяженными крыльями носит в значительной мере (или даже в основном, см. ниже) антидиффузионный характер.

Все формулы (73)—(75) выражают факт временной задержки миграции фотона в результате его многократных поглощений — переизлучений с «застреванием» в атоме всякий раз на время τ ; эффективное число таких актов переизлучения $N_{\text{эф}} \equiv \bar{t}/\tau \gg 1$. Однако конкретный вид функции $\bar{t}(r)$ [или $N_{\text{эф}}(r)$] существенно зависит от формы линии. В этом в полном соответствии с относительной крутизной спада $T_{\text{ас}}(\rho)$ (38) [ср. еще «монохроматическое» $T(\rho) = \exp(-\kappa_0 \rho)$, а также (75)] проявляется своего рода «иерархия недиффузионности» (ИНД) переноса, отвечающая возрастанию роли крыльев линии в ряду профилей: монохроматический — доплеровский — лоренцовский.

В сущности, вид зависимости $\bar{t}(r)$ отражает результат конкуренции между двумя альтернативными механизмами выхода фотона на расстояние r , качественно сопоставленными в [15] — обычной диффузией типа (73) в ядре линии и «прострельным» вылетом сразу на это расстояние в крыле линии. В частности, в промежуточном, доплеровском случае оба механизма в некотором смысле уравниваются друг друга: с точностью до слабо меняющегося множителя $\sqrt{\ln \kappa_0 r}$ здесь имеет место зависимость $\bar{t}_{\text{доп}} \sim \tau\kappa_0 r$, т. е. фактическая картина пространственной миграции фотона, сопровождающейся перераспределением его частоты, в среднем эквивалентна, грубо говоря, его *равномерному* перемещению по *растянутому*, чисто радиальному пути с неизменной (центральной) частотой.

Описанная картина миграции фотона для различных контуров линии позволяет качественно понять соответствующие законы распространения волны возбуждения, вызванной световой вспышкой

в оптически плотном газе [16]. Действительно, строгое решение нестационарного уравнения БХ, проведенное в [16], дает следующие законы движения фронта волны возбуждения: $r \propto \sqrt{t}$ — монохроматическая линия, $r \propto t/\sqrt{\ln t}$ — доплеровский профиль, $r \propto t^2$ — лоренцовский профиль. Такой переход от диффузионного распространения волны возбуждения через почти равномерное к равноускоренному находится в очевидном соответствии с зависимостями (73), (74).

Выясним теперь вопрос об относительном вкладе диффузионного и антидиффузионного (прострельного) механизмов в эффективную вероятность ухода фотона (в единицу времени) на расстояние r , $1/\bar{t}(r)$. Для диффузии ($\bar{t}^2 \neq \infty$) ответ на этот вопрос тривиален, поэтому ограничимся случаем недиффузионного переноса. Это позволит нам, кстати, дать элементарный и весьма наглядный приближенный вывод формул (74).

Исходим из формулы (72), вводя, для удобства рассмотрения, вместо подынтегрального знаменателя следующую линейную комбинацию [используем (2) и выполняем несложные преобразования]:

$$\chi(\alpha) \equiv \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\alpha^2} \frac{d}{d\alpha} \left[\alpha^{3/2} \int_0^{\infty} T(\xi) J_{3/2}(\alpha\xi) \frac{d\xi}{\sqrt{\xi}} \right] = \int_0^{\infty} \frac{P(\omega) d\omega}{\kappa^2(\omega) + \alpha^2}, \quad (76)$$

Из вида $\chi(\alpha)$ естественно вытекает возможность его аппроксимации суммой диффузионного и антидиффузионного слагаемых:

$$\chi(\alpha) \approx \int_{\text{Ядро}} \frac{P(\omega) d\omega}{\kappa^2(\omega)} + \frac{1}{\alpha^2} \int_{\text{Крылья}} P(\omega) d\omega \equiv \chi_{\text{диф}}(\alpha) + \chi_{\text{антидиф}}(\alpha). \quad (77)$$

Диффузионный характер первого члена очевиден [ср. (34)]. Второй член отвечает модели прострельного выхода фотонов в крыльях линии, использованной в [15, 17]. В силу (72) и (76) аналогичные члены входят в качестве слагаемых и в полную вероятность ухода $1/\bar{t}$. Разграничение «ядра» и «крыльев» линии определяется здесь условием $\kappa(\omega) = \alpha$, т. е. $\kappa(\omega)r = y \approx 1$.

Вычисление дает (с учетом $\kappa_0 r \gg 1$) для лоренцовского профиля $P(\omega) \propto \kappa(\omega)$: $\chi_{\text{антидиф}} = 3\chi_{\text{диф}}$, а для доплеровского — $\chi_{\text{антидиф}} = \chi_{\text{диф}}$. Отсюда ясно, что при переносе излучения в резонансной линии с протяженными крыльями не реализуется в чистом виде не только диффузионный (это хорошо известно), но и антидиффузионный случай, и по порядку величины вероятность выхода фотона может быть оценена по формулам для любого из этих двух механизмов (с должным разграничением ядра линии и ее крыльев), что мы и выражаем с помощью непрядельного, обобщающего понятия «недиффузионный перенос». Вместе с тем существенное различие найденных пропорций

(1:3 и 1:1) дополнительно иллюстрирует отмеченную выше ИНД и, в частности, позволяет качественно объяснить то (отмеченное в [18]) обстоятельство, что антидиффузионное приближение \tilde{y} (30) даже вне формальных пределов его применимости может давать сравнительно малую погрешность (примерно 10—20%) для слабо спадающих контуров линии типа лоренцовского, но всего лишь правильный порядок величины — для доплеровского контура*.

Покажем теперь, как, опираясь на естественное обобщение диффузионного результата (73) и используя физически прозрачную аппроксимацию типа (77), можно получить результаты (74) не из точной формулы (72), а элементарным путем [10]. Для этого положим

$$\frac{1}{\bar{I}(r)} = \frac{1}{\tau} \frac{2I_{\text{эф}}^2(r)}{3r^2}, \quad (78)$$

где $I_{\text{эф}}^2(r)$ — эффективный квадрат пробега для сферы радиуса r , т. е. величина $1/\kappa^2(\omega)$, взвешенная по спектру с учетом того, что для всех прострельных фотонов пробег не превосходит r :

$$I_{\text{эф}}^2(r) = 2 \left[\int_{\omega_0}^{\omega_{\text{ГР}}(r)} \frac{P(\omega)}{\kappa^2(\omega)} d\omega + r^2 \int_{\omega_{\text{ГР}}(r)}^{\infty} P(\omega) d\omega \right]. \quad (79)$$

Здесь $\omega_{\text{ГР}}$ — частота, разграничивающая крыло линии и ее ядро, определенная условием $\kappa(\omega_{\text{ГР}})r = 1$. Вычисление (при $\kappa_0 r \gg 1$) приводит для \bar{I} к формулам вида (74) с коэффициентами 1,77 и 1,33 соответственно. Таким образом, изложенный наглядный вывод обеспечивает хорошую точность. Отношение слагаемых в (79) равно, как и в (77), 1 : 3 и 1 : 1 соответственно для лоренцовского и доплеровского профилей.

Формулы вида (73)—(75) можно использовать и для оценок времени высвечивания систем *конечных* размеров a при слабом тушении ($\beta \ll 1$), причем, как видно из уже упоминавшегося сравнения [3] и [14], с хорошей точностью. Величину $\bar{I}(a) \sim \tau/T_{\text{ac}}(a)$ часто называют $\tau_{\text{эф}}$, а метод приближенного решения уравнения БХ, приводящий к структуре $\tilde{y}(r)$ (30), содержащей $\bar{I}(r)$ — методом $\tau_{\text{эф}}$. Соответственно величину $\frac{1}{\bar{I}(a)} \sim T_{\text{ac}}(a)/\tau = T_{\text{ac}}(a)A_{10} \equiv A_{\text{эф}}$ — называют *эффективной вероятностью испускания* фотона атомом, рассматривая ее как обобщение коэффициента Эйнштейна A_{10} на случай оптически толстой системы и используя в этом качестве для упрощенной трактовки соответствующих задач путем их формального сведения к оптически тонкому случаю.

Не следует, однако (как это нередко делается), переоценивать «универсальность» $A_{\text{эф}}$ в том смысле, что могут существовать и дру-

* В свете сказанного вполне естественно, что в диффузионном случае (в частности, для монохроматической линии) приближение y может не выполняться даже и по порядку величины [11].

гие удобные временные характеристики задачи, в общем случае существенно отличающиеся от $A_{\text{эф}}$ (даже отвлекаясь от возможного несоблюдения использованного при выводе $A_{\text{эф}}$ ограничения $\beta = 0$). Например, согласно (82) поток «резонансных» фотонов, выходящих из ограниченной системы, $N = \frac{1}{\tau} \int_V n_1(\mathbf{r}) \bar{T}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$, что подсказывает удобную (и к тому же измеримую на опыте) эффективную вероятность испускания

$$A'_{\text{эф}} \equiv \frac{N}{\int_V n_1(\mathbf{r}) d\mathbf{r}} = \frac{1}{\tau} \frac{\int_V n_1(\mathbf{r}) \bar{T}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}}{\int_V n_1(\mathbf{r}) d\mathbf{r}} \equiv \frac{1}{\tau} \bar{\bar{T}}, \quad (80)$$

где вторая черта означает усреднение $\bar{T}(\mathbf{r})$ (27) еще и по объему системы [с весом $n_1(\mathbf{r})$]. Как показано в [19] [см. также (86) и (94)], в общем случае $A'_{\text{эф}} \gg A_{\text{эф}}$ даже по порядку величины, поскольку $\bar{\bar{T}} \neq T_{\text{ac}}(a)$. В диффузионном случае $A'_{\text{эф}}/A_{\text{эф}} \sim \kappa_0 a \gg 1$, в доплеровском $A'_{\text{эф}}/A_{\text{эф}} \sim \ln \kappa_0 a \gg 1$ и только в лоренцовском $A'_{\text{эф}}/A_{\text{эф}} \sim 1$. Здесь опять видна отмеченная выше ИНД, притом в прозрачной форме: ведь $\bar{\bar{T}}$, очевидно, и должно быть тем ближе к $T_{\text{ac}}(a)$, чем более полого функция $T(\rho)$ [см. (38)], т. е. чем дальше мы от диффузионного случая.

§ 6. Излучение конечного объема неравновесной плазмы в резонансной линии

Для ряда задач физики плазмы существен вопрос об интегральных радиационных потерях системы конечного объема V в данной резонансной линии. В решении этого вопроса наиболее удобно исходить из непосредственного вычисления «мгновенного» потока фотонов данной частоты ω , выходящих за пределы системы. Указанный поток, очевидно, равен [20]

$$Q(\omega) d\omega = P(\omega) d\omega \int_V dr' \frac{n_1(\mathbf{r}')}{\tau} \times \left\{ 1 - \int_V dr \exp[-\kappa(\omega)|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|] \frac{\kappa(\omega)}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2} \right\}, \quad (81)$$

где $n_1(\mathbf{r}) = n_1^{\text{B}} y(\mathbf{r})$, $y(\mathbf{r})$ — решение уравнения БХ (5).

Для интегрального потока выходящих фотонов, используя (4), (2), (27), находим [21]:

$$N \equiv \int_0^{\infty} Q(\omega) d\omega = \frac{n_1^{\text{B}}}{\tau} \int_V y(\mathbf{r}) \bar{T}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (82)$$

В стационарном случае с помощью (5) получаем еще одно выражение для N :

$$N = \beta \frac{n_1^B}{\tau} \int_V [1 - y(r)] dr = n_0 n_e \langle v \sigma_{01} \rangle \int_V [1 - y(r)] dr. \quad (83)$$

Комбинируя (82) и (83), находим также [10]

$$N = \frac{\beta}{\beta + 1} \frac{n_1^B}{\tau} \int_V \{1 - [1 - \bar{T}(r)] y(r)\} dr. \quad (84)$$

Наконец, интегрируя уравнение БХ (5) для стационарного случая, с учетом (27), получаем полезное соотношение [21]

$$\int_V [\beta + \bar{T}(r)] y(r) dr = \beta V. \quad (85)$$

С помощью формул такой же структуры можно описать и выход рекомбинационного излучения; соответствующие очевидные замены обсуждены в [8].

Полученные выражения для потока вместе с уравнением БХ (5) дают полное (разумеется, пока чисто формальное) решение задачи. Оказывается, однако, что даже беглое рассмотрение их позволяет понять многое, не вводя конкретных предположений о геометрии системы и о форме линий испускания и поглощения (последнее — благодаря тому, что вся информация о $P(\omega)$ и $\kappa(\omega)$ сосредоточена в функции $T(\rho)$). Более того, поскольку в выражениях для N функция $y(r)$ входит только под интегралом, ряд приближенных результатов можно получить, не прибегая к сколько-нибудь точному решению самого уравнения (5).

Исследуем зависимость потока N от размеров системы. Выражения (82), (83) допускают (в областях, взаимно не альтернативных) упрощение двух типов:

А. Объемное излучение. Как видно из (83), в случае пространственной однородности величины $[1 - y(r)]$ имеем $N \propto V$, т. е. излучение выходит из всего объема. Такая ситуация реализуется при выполнении хотя бы одного из двух условий $T(a) \approx 1$ и $\beta \ll T(a)$, где a — характерный размер системы. Эти условия непосредственно вытекают из соотношения (85). Так, для оптически тонкой системы ($T(a) \approx 1$) из (85) и (82) находим: $N \approx (\beta/\beta + 1) n_1^B V/\tau$, а для системы произвольной оптической толщины при $\beta \ll T(a)$: $N \approx n_0 n_e \langle v \sigma_{01} \rangle V$. Следовательно, даже оптически толстая плазма ($T(a) \ll 1$) при достаточно малом β излучает как оптически тонкий излучатель. Физический смысл этого результата крайне прост: неравенство $\beta \ll T(a)$, т. е. $n_e \langle v \sigma_{10} \rangle \tau / T(a) \ll 1$, выражает малость числа тушащих столкновений за время $\bar{t}(a)$ (75) жизни возбуждения в системе. Благодаря этой малости почти каждый фотон, рожденный внутри объема в результате «первичного» (электронного) возбуждения, со временем выходит за пределы системы, что и отвечает объемному характеру ее

излучения. Соответственно причиной более обычного *поверхностного* характера излучения оптически толстых систем является не само по себе сильное поглощение фотонов внутри объема, а достаточно интенсивное *тушение* возбуждений в преобладающей части объема (подробнее см. § 7).

Отметим в этой связи, что и в случае оптически тонкой системы именно сильное тушение обуславливает (благодаря множителю $\beta/(\beta + 1)$ «насыщение» потока выходящих фотонов при переходе от коронального предела $\beta \ll 1$ (см. с. 159 настоящего выпуска) к больцмановскому $\beta \gg 1$, вследствие чего реальный «больцмановский» поток $N_B = \frac{n_1^B}{\tau} V$ оказывается в β раз меньше коронального значения $N_{\text{кор}} = n_0 n_e \langle v \sigma_{01} \rangle V = \frac{\beta n_1^B}{\tau} V$, отвечающего полному числу первичных (непотушенных) возбуждений.

Отметим еще, что весьма полезный критерий объемного характера излучения, по существу охватывающий оба рассмотренных ранее, вытекает из (84): $\{[1 - \bar{T}(r)]y(r)\}_{\text{эф}} \ll 1$.

Б. Излучение при однородном источнике. Как видно из (5), интегральный член относительно мал [и, следовательно, решение пространственно однородно: $y \approx \beta/(\beta + 1)$] в двух случаях: $\beta \gg 1$ и $T(a) \approx 1$ (в несколько иной связи это уже отмечалось в § 3). Тогда (82) можно преобразовать к виду

$$N \approx \frac{\beta}{\beta + 1} \frac{n_1^B}{\tau} \frac{1}{4\pi} \oint dS \int_{(2\pi)} d\Omega \cos \theta \int_0^{l_\Omega} T(x) dx =$$

$$= \frac{\beta}{\beta + 1} \frac{n_1^B}{\tau} \frac{1}{4\pi} \oint dS \int_{(2\pi)} d\Omega \cos \theta \int_0^\infty \frac{P(\omega)}{\kappa(\omega)} [1 - \exp[-\kappa(\omega) l_\Omega]] d\omega, \quad (86)$$

где dS — элемент поверхности системы; $d\Omega$ — элемент «выходящего» телесного угла с вершиной в dS ; θ — угол между нормалью к dS и лучом Ω ; l_Ω — размер системы вдоль луча Ω .

В пределе $\kappa_0 a \ll 1$ (86) сводится, очевидно, к результату для объемного излучения (см. п. А). В противоположном пределе $\kappa_0 a \gg 1$ (однако пока $\kappa_0 a$ все же не слишком велико, см. ниже) (86) можно упростить, используя отмеченную в § 2 приближенную независимость функций источника от частоты. А именно, с помощью (11), (14) находим:

$$\frac{P(\omega)}{\kappa(\omega)} \approx \frac{g_0}{g_1} \frac{\tau}{n_0} \frac{\omega_0^2}{\pi^2 c^2}, \quad (87)$$

после чего (86) приводится к «поверхностному» (планковскому) виду (в этом случае использованная пространственная однородность y совместима только с $\beta \gg 1$, что мы и учтем):

$$N \approx \frac{B_{\text{пл}}(\omega_0)}{\hbar \omega_0} \oint dS \int_{(2\pi)} d\Omega \cos \theta \Delta \omega_{\text{эРВ}}(l_\Omega), \quad (88)$$

где $\Delta\omega_{\text{эKB}}(l) \equiv \int_0^{\infty} [1 - \exp(-\kappa(\omega)l)] d\omega$ — «эквивалентная ширина» линии. Для линии с протяженными крыльями $\Delta\omega_{\text{эKB}}$ растет с ростом $a(\propto\sqrt{a}$ для лоренцовского и $\propto\sqrt{\ln \kappa_0 a}$ для доплеровского контура), так что с ростом размеров системы поток фотонов N возрастает быстрее, чем просто пропорционально ее поверхности. При этом, пока $\Delta\omega_{\text{эKB}}(a) \ll kT/\hbar \ll \omega_0$, полная излучаемая системой мощность $\mathcal{E} \approx \hbar\omega_0 N$. При $a \rightarrow \infty$ указанное неравенство нарушается, и приведенное рассмотрение необходимо обобщить, используя вместо (87) заведомо применимый в этой области закон Кирхгофа [ср. § 7, п. А и (106)]. Тогда для \mathcal{E} получаем в пределе stefan-больцмановское значение: $\mathcal{E} = \sigma T^4 S$.

Для данного $T(a) \ll 1$ формула (88) может оказаться приближенно справедливой и при выполнении более мягкого, чем $\beta \gg 1$, условия, а именно при $\beta \gg T(a)$ — в этом случае даже значительная неоднородность (спад к поверхности) решения $y(r)$, имеющая место при $\beta \ll 1$, интегрально малосущественна в (82).

Конкретные примеры поверхностного излучения плазменных систем будут рассмотрены в § 8. Здесь отметим, что и рассмотренный в п. А случай объемного излучения оптически толстой системы, хотя он и довольно «экзотичен» для лабораторных плазм (в отличие от астрофизических, где он может легко реализоваться благодаря малым n_e и огромным a), все же может встретиться на практике, например в излучении резонансной линии Ly_α нейтрального водорода в достаточно крупной плазменной системе. Действительно, задавшись значениями $n_0 \approx 10^{13} \text{ см}^{-3}$, $T \approx 2 \text{ эВ}$, $a \approx 150 \text{ см}$, характерными для начальной стадии разряда в токамаке следующего поколения, получаем $\beta \sim 10^{-4}$ и (при доплеровском механизме уширения рассматриваемой линии) $T(a) \approx 0,3$, так что $\beta \ll T(a) < 1$, что и требовалось.

§ 7. Характерные длины в проблеме переноса излучения

При рассмотрении переноса резонансного излучения естественно возникает вопрос о характерной длине задачи, аналогичной, скажем, средней длине свободного пробега в физике газов. Ответ на этот вопрос наиболее прост при сильном тушении ($\beta \gg 1$), когда такой характерной длиной является $1/\kappa_0 \equiv l_s$ — средняя длина пробега «центрального» фотона до рассеяния (в данном случае — и до «истинного поглощения», т. е. тушения). При слабом же тушении ($\beta \ll 1$), особенно в случае недиффузионного переноса, картина усложняется, и в задаче возникает несколько различных характерных длин [10].

А. Коснемся вначале длин, возникающих при вычислении \bar{l}^2 (34). При истинной диффузии $\bar{l}^2 = 1/\kappa_0^2 \neq \infty$. При недиффузионном переносе $\bar{l}^2 = \infty$. Этот результат имеет, однако, формальный характер и по существу означает лишь, что $\bar{l}^2 \gg 1/\kappa_0^2$. Дело в том, что и сама формула (34) и допущение $P(\omega)/\kappa(\omega) = \text{const}$, приводящее к $\bar{l}^2 = \infty$, являются переупрощениями, и отказ от них приводит к конечному

значению \bar{l}^2 *. В [10] отмечены два основания для обсуждаемого физического уточнения:

1. Для системы конечных размеров a разумный физический смысл имеет не сама величина \bar{l}^2 (34), а ее обобщение $l_{\text{эф}}^2$ (79). В частности,

$$(l_{\text{эф}}^2)_{\text{лор}} = \frac{8}{3\pi} (\kappa_0 a)^{3/2} \frac{1}{\kappa_0^2} \gg \frac{1}{\kappa_0^2}; \quad (l_{\text{эф}}^2)_{\text{доп}} = \frac{2\kappa_0 a}{\sqrt{\pi} \Gamma \pi \kappa_0 a} \frac{1}{\kappa_0^2} \gg \frac{1}{\kappa_0^2}. \quad (89)$$

Величина $l_{\text{эф}}^2$, конечно, не является строгой (локальной) характеристикой недиффузионного переноса (таковой у него просто нет), но позволяет, тем не менее, как видно из § 5, удовлетворительно описать его основные черты путем несложного расширения понятий теории обычной диффузии.

2. При достаточно большом $\kappa_0 a$ [в частности, для бесконечной среды, когда (89) бесконечно] интервал существенных частот настолько расширяется, что нарушается исходное (нередко молчаливое) предположение о наличии в задаче двух сильно различающихся шкал частоты — «тонкой» ($\sim \Gamma$), характеризующей изменение $\kappa(\omega)$ и $P(\omega)$ в пределах спектральной линии, и «грубой» ($\sim kT/\hbar$), характеризующей изменение планковского множителя в законе Кирхгофа. Если это учесть, то вместо обычного $P(\omega) = \text{const} \kappa(\omega)$ нужно использовать в (34) соотношение $P(\omega) = \text{const} \omega^2 \exp(-\hbar\omega/kT) \kappa(\omega)$, что приводит к конечному значению \bar{l}^2 ; например, в пределе $\hbar\omega_0/kT \gg 1$, $\sqrt{(\bar{l}^2)_{\text{лор}}} \sim l_S \left(\frac{\omega_0}{\Gamma}\right)^2 \gg l_s$ (подробнее см [10]).

Б. Рассмотрим теперь другие, более существенные характерные длины — прежде всего ту из них, сравнение которой с размерами системы a определяет, является ли ее излучение объемным или поверхностным (см. § 6); назовем ее «длиной запираения» излучения $l_{\text{зап}}$. Она определяется, очевидно, из условия, что при $a = l_{\text{зап}}$ должно выполняться равенство $N_{\text{об}} = N_{\text{пов}}$, где $N_{\text{об}}$ и $N_{\text{пов}}$ — предельные выражения «объемного» и «поверхностного» потоков, описывающие реальный поток N при $a \ll l_{\text{зап}}$ и $a \gg l_{\text{зап}}$ соответственно. Для $N_{\text{об}}$ имеем (см. § 6):

$$N_{\text{об}} = \frac{\beta}{\beta+1} \frac{n_i^{\text{Б}}}{\tau} V \sim \frac{\beta}{\beta+1} \frac{n_i^{\text{Б}}}{\tau} a^3. \quad (90)$$

Для $N_{\text{пов}}$ будем исходить из точного выражения (82), переходя в нем к пределу $a \rightarrow \infty$. При этом аналитическая структура результата будет различной в зависимости от характера переноса возбуждения. Так, в случае истинной диффузии, в пределе $a \gg L$ (L — диффузионная длина), вследствие крутого спада функции $T(\mathbf{r})$ от поверхности системы (в слое толщиной $\sim 1/\kappa_0 a$) в интеграле (82) существен-

* Сказанное, разумеется, тем более относится к случаям, когда происходит выход за рамки самой исходной модели, например, если постановка задачи о переносе резонансного излучения обобщается с учетом запаздывания [22].

ны лишь значения $\Gamma \approx \Gamma_s$, так что с учетом (32)

$$N_{\text{пов}}^{\text{диф}} \approx \frac{n_1^B}{\tau} \sqrt{\frac{\beta}{\beta+1}} \int_V \bar{\Gamma}(r) dr \sim \frac{n_1^B}{\tau} \sqrt{\frac{\beta}{\beta+1}} a^2 \frac{1}{\kappa_0}. \quad (91)$$

Приравнявая (90) к (91) при $a = l_{\text{зап}}^{\text{диф}}$, находим:

$$l_{\text{зап}}^{\text{диф}} \sim \frac{1}{\kappa_0} \sqrt{\frac{\beta+1}{\beta}}, \quad (92)$$

что совпадает с диффузионной длиной L (37).

В случае недиффузионного переноса $\bar{\Gamma}(r)$ спадает от поверхности медленно, так что в пределе больших a в (82) существенны достаточно глубоко лежащие значения r , где $y \approx \tilde{y}$ (30), откуда

$$N_{\text{пов}}^{\text{недиф}} \approx \frac{n_1^B}{\tau} \beta \int_V \frac{\bar{\Gamma}(r)}{\beta + \bar{\Gamma}(r)} dr, \quad (93)$$

В рассматриваемом пределе $\bar{\Gamma}_{\text{эф}} \ll \beta$, так что (93) сводится к планковскому потоку (88), но здесь нам удобнее использовать соотношение из [19] (для $\kappa_0 a \gg 1$):

$$\int_V \bar{\Gamma}(r) dr = C T_{\text{ac}}(a) V, \quad (94)$$

где для лоренцовского контура $C \sim 1$, а для доплеровского $C \sim \ln \kappa_0 a$.

[Численное значение C зависит еще и от геометрии системы. Подчеркнем, что для истинной диффузии формула типа (94) вообще не имеет места, ср. (80) и далее.] Отсюда

$$N_{\text{пов}}^{\text{недиф}} \approx \frac{n_1^B}{\tau} C T_{\text{ac}}(a) V \sim \frac{n_1^B}{\tau} C T_{\text{ac}}(a) a^3. \quad (95)$$

Подставляя C и (38), находим, в частности (ср. § 6),

$$N_{\text{пов}}^{\text{лор}} \sim \frac{n_1^B}{\tau} \frac{a^{5/2}}{\kappa_0^{1/2}}; \quad N_{\text{пов}}^{\text{доп}} \sim \frac{n_1^B}{\tau} \frac{a^2}{\kappa_0} \sqrt{\ln \kappa_0 a}. \quad (96)$$

Приравнявая (90) к (95) при $a = l_{\text{зап}}^{\text{недиф}}$, получаем:

$$T_{\text{ac}}(l_{\text{зап}}^{\text{недиф}}) \sim \frac{\beta}{\beta+1}. \quad (97)$$

При $\beta \gg 1$ длина $l_{\text{зап}}^{\text{недиф}}$ переходит в $1/\kappa_0$, а при $\beta \ll 1$ — в длину термализации Λ (31).

Заметим, что первая из формул (96) справедлива при всех β , тогда как вторая — только при $\beta \gg 1$; при $\beta \ll 1$ ее необходимо модифицировать заменой $\ln \kappa_0 a$ на $\ln(a/\Lambda)$.

Обе разновидности длины запираания (92) и (97) можно интерпретировать единым образом, не зависящим от характера переноса излучения. Нетрудно сообразить (см. § 6), что в обоих случаях длина запираания имеет смысл некоторой эффективной длины тушения

$l_{\text{туш}}$. Для $\beta \gg 1$ это очевидно, здесь $l_{\text{туш}} \approx 1/\kappa_0$. Для $\beta \ll 1$ $l_{\text{туш}}$ естественно определить как такое миграционное смещение возбуждения, за время которого происходит одно тушащее столкновение:

$$\bar{l}(l_{\text{туш}}) = \frac{1}{n_e \langle v \sigma_{10} \rangle} = \frac{\tau}{\beta}, \quad (98)$$

Для \bar{l} можно воспользоваться формулой (72) или, что вполне достаточно для наших целей, ее упрощенной версией (78), (79). Это дает (если, кроме того, очевидным образом распространить результат на отмеченную ранее область $\beta \gtrsim 1$): $l_{\text{туш}} = 1/\kappa(\omega_{\text{гр}})$, где граничная частота $\omega_{\text{гр}}$ есть решение уравнения

$$\kappa^2(\omega_{\text{гр}}) \int_{\omega_0}^{\omega_{\text{гр}}} \frac{P(\omega)}{\kappa^2(\omega)} d\omega = \frac{1}{2} \frac{\beta}{\beta+1}, \quad (99)$$

Легко убедиться, что в частных случаях истинной диффузии и недиффузионного переноса определенная этим способом длина тушения $l_{\text{туш}}$ действительно переходит в длины запираения L (37) (диффузионная длина) и Λ (31) (длина термализации — при $\beta \ll 1$) соответственно.

Отметим еще, что в последнем случае, при $P(\omega) \propto \kappa(\omega)$, уравнение (99) приобретает весьма наглядную структуру:

$$\int_{\omega_{\text{гр}}}^{\infty} \kappa P(\omega) d\omega = \frac{1}{2} \frac{\beta}{\beta+1} \quad (100)$$

(множитель $1/2$ отвечает «правой» половине профиля, предполагаемого симметричным относительно ω_0 ; такое же уравнение относится к частотам $\omega \leq \omega'_{\text{гр}} = 2\omega_0 - \omega_{\text{гр}}$ в его «левой» половине).

С помощью (100) и (92) нетрудно построить приближенную формулу, обобщающую выражения $l_{\text{туш}}$ для типичных профилей линии (см. [21]):

$$l_{\text{туш}} \approx \left(\frac{\beta+1}{\beta} \right)^{\nu} \frac{1}{\kappa_0}, \quad (101)$$

где $\nu = 1/2$, $\nu \approx 1$ и $\nu = 2$ соответственно для диффузионного, доплеровского и лоренцовского случаев.

Кривая $a = l_{\text{туш}}(\beta)$ (или, что то же, $a = l_{\text{зап}}(\beta)$) представлена схематически на рис. 6. Она разграничивает области объемного и поверхностного излучения, а в области $\kappa_0 a \gg 1$, $\beta \ll 1$ (оптически толстая система со слабым тушением) — еще и подобласти так называемого чистого рассеяния и полубесконечной среды (по астрофизической терминологии). В указанной области с ней сливается кривая $\Gamma(a) = \beta$, разграничивающая области равновесного (больцмановского) и сильно неравновесного (коронального) возбуждения.

Излучение любой системы можно трактовать как объемное излучение типа (90) (выход из системы «непотушенных» возбуждений).

При этом для $a \ll l_{\text{туш}}$ роль V играет полный объем системы, а для $a \gg l_{\text{туш}}$ — объем некоторого ее наружного слоя. Толщина δ этого слоя существенно различна (при заданных χ_0 и β) для случаев истинной диффузии и недиффузионного переноса, что и отражается в различии соответствующих выражений (91) и (95), (96) для «поверхностного» потока. В первом случае δ постоянна ($\delta_{\text{диф}} \sim L = l_{\text{туш}}$), тогда как во втором (как это уже отмечалось в § 6 в связи с эквивалентной шириной линии) δ зависит от размеров системы:

$$\delta_{\text{лор}} \sim \frac{1}{\beta} \sqrt{\frac{a}{\chi_0}}, \quad \delta_{\text{доп}} \sim \frac{1}{\chi_0 \beta} \sqrt{\ln \frac{a}{\Lambda}}, \quad (102)$$

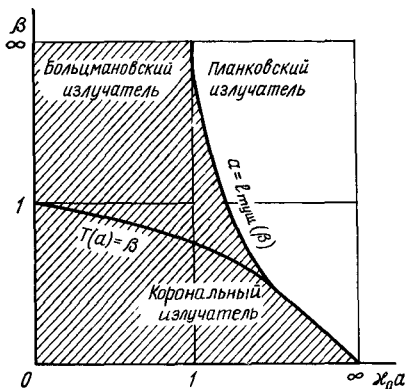


Рис. 6. Разграничение областей параметров плазменной системы, отвечающих различным типам излучения:

Незаштрихованная — поверхностное излучение; заштрихованная — объемное

$\beta \ll 1$ и недиффузионном переносе значение $l_{\text{туш}} = \Lambda$ определяется уходом фотонов в крыльях линии, так что (для заданных l_s и β) $l_{\text{туш}} \gg l_s/\sqrt{\beta}$, причем этот конкурирующий эффект «распрямления» («даже «растяжения») может скомпенсировать или даже пересилить эффект случайного блуждания. Так, с помощью (101) находим:

$$l_{\text{туш}}^{\text{доп}} \sim l_s/\beta \sim l_c; \quad l_{\text{туш}}^{\text{лор}} \sim l_s/\beta^2 \gg l_c. \quad (104)$$

Здесь, как и неоднократно ранее [крутизна спада $T_{\text{ac}}(\rho)$ (38), рост эквивалентной ширины $\Delta\omega_{\text{эвк}}(a)$ или, что то же, «эффективной излучающей глубины» $\delta(a)$ (102), относительный вклад ядра и крыльев линии в вероятность выхода фотона (78), отношение $A'_{\text{эф}}$ (80) к $A_{\text{эф}}$], проявляется отмеченная в § 5 «иерархия недиффузионности» переноса излучения: последовательность длин тушения (104) вместе с $l_{\text{туш}}^{\text{диф}} \ll l_c$ является качественным аналогом последовательности времен миграции (73), (74).

т. е. (в силу $a \gg \Lambda$) $a \gg \delta_{\text{недиф}} \gg \Lambda = l_{\text{туш}}$ (роль прострельного ухода фотонов в крыльях линии!).

Наконец, сравним длину тушения $l_{\text{туш}}$ с пробегом до тушения в центре линии, равным

$$l_c = \frac{\beta+1}{\beta} l_s. \quad (103)$$

При $\beta \gg 1$ $l_{\text{туш}} \approx l_s \approx l_c$. При $\beta \ll 1$ и истинной диффузии $l_{\text{туш}}^{\text{диф}} = L \sim l_s/\sqrt{\beta} \sim \sqrt{l_c l_s} \ll l_c$. Это соотношение, хорошо известное из теории диффузии нейтронов [23], имеет наглядный геометрический смысл: эффективное смещение возбуждения при случайном блуждании много меньше фактического пути его миграции. При

§ 8. Радиационные потери термически равновесных плазменных систем

Основываясь на результатах § 2, 6, рассмотрим вопрос об излучении конечного объема плазмы, находящейся (по отношению к интересующему нас спектральному интервалу, см. § 1) в состоянии ЛТР, не ограничиваясь, однако, случаем переноса в линии. Такое обобщение выполнить нетрудно, если сообразить, что от использованного в § 2, 6 ограничения $\omega \approx \omega_0$ [см. (11), (14), (15) и т. д.] легко освободиться без какого-либо усложнения примененного там формализма. Последний в интересующем нас пределе $\beta = \infty$ описывает, в сущности, перенос излучения [см. (10)] в среде с *гиббсовым* распределением компонент вещества, ответственных за испускание — поглощение излучения данной частоты ω^* . Для не охваченного в явном виде рассмотрением § 2 случая переноса *тормозного* излучения (ТИ) в плазме с максвелловским распределением электронов этот формализм изложен в [24] (см. также сноску на стр. 120). Также и структура результата (86) в действительности не связана с двухуровневой моделью в ее буквальном смысле, а относится ко всему классу задач с «переизлучением, сопровождающимся полным перераспределением по частоте» [см. (2)]. Более того, применимость последней модели к переносу в континууме заведомо не хуже, чем к переносу в линии, поскольку вследствие большой частоты межэлектронных столкновений здесь полностью отсутствует корреляция между двумя этапами «акта переизлучения» (например, тормозным поглощением и тормозным излучением) [25].

Учитывая сказанное, переходя в (15) к пределу $\beta' = \infty$ и интегрируя уравнение (10) для термически однородной плазменной системы, находим спектральную плотность излучаемой ею мощности [ср. (88)]:

$$\frac{d\mathcal{E}(\omega)}{d\omega} = B_{\text{пл}}(\omega) \oint dS \int_{(2\pi)} d\Omega \cos \theta [1 - \exp(-\kappa'(\omega) l_{\Omega})]. \quad (105)$$

В пределе $a \rightarrow 0$ (a — характерный размер системы) левая часть (105) есть, по определению, $4\pi V\eta(\omega)$, где $\eta(\omega)$ — спонтанная излучательная способность единицы объема в единицу телесного угла, а правая часть переходит, как нетрудно убедиться, в $4\pi V\kappa'(\omega)B_{\text{пл}}(\omega)$. Отсюда следует закон Кирхгофа:

$$\frac{\eta(\omega)}{\kappa'(\omega)} = B_{\text{пл}}(\omega). \quad (106)$$

Полная мощность радиационных потерь (РП) системы равна $\int_0^{\infty} \frac{d\mathcal{E}(\omega)}{d\omega} d\omega$. Мы ограничимся случаем плоскопараллельного слоя термически однородной плазмы толщиной a и вычислим интенсивность

* Подчеркнем, что речь идет, таким образом, лишь о термодинамическом равновесии вещества «самого по себе», тогда как степень равновесия вещества с излучением произвольна.

излучения I_{\perp} в единицу телесного угла вдоль нормали к границе слоя (в одну сторону); ясно, что именно эта величина наиболее удобна для качественных оценок в случаях более сложной геометрии. Из (105) находим:

$$I_{\perp}(a) = \int_0^{\infty} B_{\text{пл}}(\omega) [1 - \exp(-a\kappa'(\omega))] d\omega \equiv \int_0^{\infty} I_{\perp\omega}(a) d\omega. \quad (107)$$

Спектральная интенсивность $I_{\perp\omega}(a)$ выходящего излучения, очевидно, всюду меньше как планковской интенсивности $B_{\text{пл}}(\omega)$, так и величины $B_{\text{пл}}(\omega)\kappa'(\omega)a = \eta(\omega)a$ — интенсивности объемного излучения. То же относится и к интегралу $\int I_{\perp\omega}(a)d\omega$ по любому интервалу ω , и, в частности, к полной интенсивности (107), которая меньше как степен-вольмановского ($\sim \sigma T^4$), так и объемного ($a \int_0^{\infty} \eta(\omega)d\omega$) значения. Это дает безошибочный «феноменологический» (т. е. не требующий знания $\kappa'(\omega)$) способ оценки сверху для полных РП: реальные потери *меньше наименьшего из двух* вышеуказанных предельных значений. В случае переноса в континууме, когда единственным характерным частотным масштабом является kT/\hbar (см. ниже п. А), такая оценка всегда обеспечивает неплохую точность. Последнюю можно, впрочем, еще повысить, если в духе (77) или (79) аппроксимировать (107) следующей границей сверху:

$$I_{\perp}(a) \approx \int_0^{\omega_{\text{rp}}} B_{\text{пл}}(\omega) d\omega + a \int_{\omega_{\text{rp}}}^{\infty} \eta(\omega) d\omega, \quad (108)$$

где $\kappa'(\omega_{\text{rp}})a = 1$.

В случае РП в линиях, когда существуют дополнительные «тонкие» частотные масштабы $\Gamma_1, \Gamma_2 \dots$ (см. п. Б), граница сверху, извлекаемая из сопоставления σT^4 с $a \int_0^{\infty} \eta(\omega)d\omega$, оказывается, как правило, слишком далекой и потому бесполезной, так что только аппроксимация типа (108), основанная на должном разбиении полного спектра на участки $\kappa'(\omega)a \geq 1$ («запертые» частоты, планковское «насыщение») и $\kappa'(\omega)a \leq 1$ («незапертые» частоты), может дать приемлемое приближение к результату численного расчета (107).

Рассмотрим два конкретных примера.

А. Радиационные потери в тормозном континууме [24]. Применим (107) к тормозному механизму испускания — поглощения в водородоподобной плазме с плотностью ионов n_i и электронов $n_e = Zn_i$ (Z — заряд иона). Величину $\eta(\omega)$ найдем в приближении Крамерса [см. формулу (12) на с. 63 настоящего выпуска], проводя усреднение по максвелловскому распределению электронных энергий от $\hbar\omega$ до ∞ :

$$\eta(\omega) = \frac{1}{4\pi} n_e n_i \left\langle v \frac{d\kappa}{d\omega} \right\rangle = \frac{8}{3\sqrt{6\pi}} \frac{e^6}{c^3 m^{3/2}} \times \\ \times Z^3 n_i^2 (kT)^{-1/2} \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right). \quad (109)$$

С помощью (106), (16) и (109) приводим (107) к виду

$$I_{\perp}(a) = \frac{(kT)^4}{4\pi^3 c^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} \left[1 - \exp\left(-\alpha \frac{1 - \exp(-x)}{x^3}\right) \right] \frac{x^3 dx}{\exp(x) - 1}, \quad (110)$$

где введен безразмерный «параметр черноты» слоя:

$$\alpha = \frac{32\pi^{5/2}}{3\sqrt{6}} \frac{\hbar^2 e^6}{cm^{3/2}} Z^3 n_i^2 (kT)^{-7/2} a = 2,03 \cdot 10^{-37} Z^3 \frac{n_i^2 a}{T^{7/2}} \quad (111)$$

(n_i — в cm^{-3} , a — в см, T — в эВ).

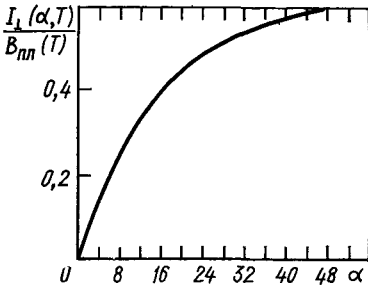


Рис. 7. Отношение интенсивности тормозного излучения слоя плазмы к интенсивности излучения черного тела той же температуры как функция «параметра черноты» слоя

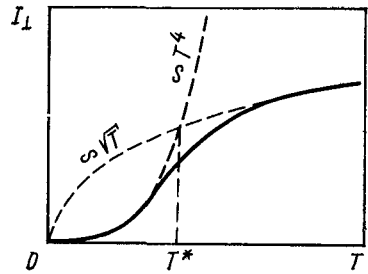


Рис. 8. Температурная зависимость тормозных радиационных потерь плазменного слоя данной толщины и плотности:

асимптоты — объемное тормозное излучение ($I \propto \sqrt{T}$) и излучение черного тела ($I \propto T^4$)

Отношение интенсивности тормозных РП слоя к соответствующей интенсивности излучения черного тела $B(T) = \frac{\pi}{60} \frac{(kT)^4}{c^2 \hbar^3}$, как функция α , представлено на рис. 7. При $\alpha \rightarrow 0$ это отношение стремится к $\frac{15\alpha}{\pi^4}$ (объемное излучение) при $\alpha \rightarrow \infty$ — к единице (излучение черного тела); в широком диапазоне $0,1 \leq \alpha \leq 100$, охватывающем практически всю промежуточную область «частичной реабсорбции», оно хорошо аппроксимируется зависимостью $\sqrt{\alpha}/10$ [26]. В частности, при $\alpha \approx 25$ имеем $I_{\perp}(a) = \frac{1}{2} B(T)$, что дает для «получерной» толщины слоя $a_{1/2}$:

$$a_{1/2} \approx 25 \frac{a}{\alpha} = 1,23 \cdot 10^{38} Z^{-3} n_i^{-2} T^{7/2} \quad (112)$$

(единицы измерения указаны выше).

Полная интенсивность $I(a)$ РП слоя получается интегрированием по полусфере выражения (110), в котором a заменено на $a/\cos \theta$ — путь, проходимый лучом в плазме. Приведем результаты для проти-

воположных пределов (σ — постоянная Стефана — Больцмана):

$$I(a) \approx \sigma T^4 \left[1 - \frac{15}{2\pi^{7/2}} (3\alpha)^{7/8} \exp\left(-\frac{4}{3}(3\alpha)^{1/4}\right) \right], \quad (3\alpha)^{1/4} \gg 3; \quad (113)$$

$$I(a) \approx \sigma T^4 \frac{30\alpha}{\pi^4} \left(\ln \frac{1}{\alpha} + 1,58 \right), \quad \alpha \ll 1. \quad (114)$$

Из (113) видно, что интегрально излучение запирается заметно медленнее, чем любая его монохроматическая «линия» [как $1 - \exp(-x^{1/4})$ вместо $1 - \exp(-x)$], что обусловлено сильной зависимостью $\kappa(\omega) \propto \omega^{-3}$. Второй член в (113) описывает поправку на «прострельный» выход ТИ из слоя и потому имеет ту же структуру, что и функция $T(\rho)$ (2) для переноса в *рекомбинационном* континууме, характеризующемся такой же зависимостью $\kappa(\omega)$ (см. [11], а также (35) и далее). Сказанное, разумеется, подтверждает отмеченную ранее плодотворность использования функции $T(\rho)$ для описания переноса излучения не только в линии, но и в континууме.

Из (114) видно, что РП оптически тонкого (для большинства направлений) слоя не просто пропорциональны его объему $V \propto a$, а содержат еще $\ln(1/\alpha)$, отражающий тот факт, что для достаточно «косых» лучей слой оказывается оптически толстым.

Обсудим теперь зависимость интенсивности I_{\perp} от температуры T при заданной толщине слоя (а также n_i и Z) (рис. 8). Эта зависимость наглядно иллюстрирует разграничение областей поверхностных и объемных РП за счет тормозного излучения. В качестве «переходного» значения $T = T^*$ выберем то, которое отвечает пересечению обеих асимптот I_{\perp} (110), а именно, $B(T) \propto T^4$ и $\frac{15}{\pi^4} \alpha B(T) \propto \sqrt{T}$. Это дает [ср. (112)]:

$$\alpha(T^*) = \frac{\pi^4}{15} = 6,45; \quad \frac{I_{\perp}}{B(T)} \Big|_{T=T^*} \approx \frac{1}{4}; \quad (115)$$

$$T^* = 1,93 \cdot 10^{-11} Z^{6/7} n_i^{4/7} a^{2/7} \quad (116)$$

(единицы измерения — те же, что и выше).

Формула (116) в сочетании с рис. 8 удобна для качественных оценок. Так, для большинства подходов к проблеме УТС $Z_{\text{эф}} \approx 1$, $a^{2/7}$ (см) ~ 1 (причем от токамака до лазерного УТС $a^{2/7}$ варьирует в пределах всего лишь одного порядка), так что T^* (эВ) $\sim 2 \cdot 10^{-11} n_i^{4/7}$. Для систем с магнитным удержанием (скажем, $n_i \sim 10^{14} \text{ см}^{-3}$) получаем $T^* \sim 2 \cdot 10^{-3}$ эВ, а так как типичная термоядерная температура $T_{\text{т.л}} \sim 10^4$ эВ, то ТИ разреженной термоядерной плазмы является чисто объемным и соответствующие РП в $\left(\frac{T}{T^*}\right)^{7/2} \approx \frac{a_{1/2}}{4a}$ раз, т. е. на много порядков, меньше «чернотельных» (что, кстати, и является одним из решающих благоприятных условий принципиальной осуществимости этого подхода к УТС). Однако для некоторых систем с инерционным удержанием, например для лазерного УТС, представляют интерес плотности n_i вплоть до 10^{27} см^{-3} , которым отвечает $T^* \sim$

$\sim 6 \cdot 10^4 \text{ эВ} > T_{\text{т.д}}$, так что здесь эффект запираия ТИ в плазме уже существует.

Из рис. 8 ясно также, что *любое* качественное изменение режима РП в ходе некоторого процесса нагрева или охлаждения плазмы приводит к их *уменьшению* (по меньшей мере относительно). Так, отмеченное выше условие осуществимости УТС связано в сущности с «отпиранием» ТИ по мере разогрева плазмы (переход с ветви $\propto T^4$ на ветвь $\propto \sqrt{T}$). Обратный процесс — запираение излучения (переход с ветви \sqrt{T} на ветвь T^4) — существует для физики так называемого «радиационного коллапса» плазменного фокуса [27, 28].

Обобщение проведенного рассмотрения на случай переноса излучения также и в *рекомбинационном* континууме дано в [26]. Оказывается, что в приближении «среднего иона» [1] учет рекомбинационного излучения сводится эффективно к увеличению параметра черноты α (111) во всех приведенных выше формулах в 6—7 раз.

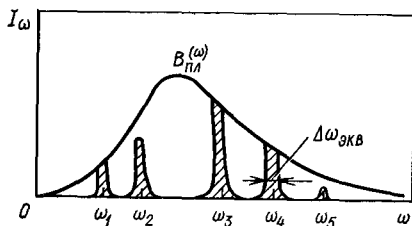


Рис. 9. Запертые и незапертые спектральные линии

Б. Радиационные потери в линиях. Применим теперь (107) к линейчатому излучению (рис. 9). Интенсивность (107) определяется, очевидно, суммой заштрихованных площадей. При этом интенсивности в незапертых линиях (ω_2, ω_5) равны $aJ_0 \equiv a \int \eta(\omega) d\omega$, ширины этих линий на рис. 9 — это обычные ширины линий испускания (доплеровская, ударная и т. д.). Интенсивности же в «запертых» линиях ($\omega_1, \omega_3, \omega_4 \dots$), *спектральные* интенсивности которых ограничены планковской кривой $B_{\text{пл}}(\omega)$, определяются, помимо $B_{\text{пл}}(\omega)$, эквивалентными ширинами $(\Delta\omega)_{\text{экрв}}$ [см. (88)], зависящими от соответствующих оптических толщин слоя. Очевидно, что $(\Delta\omega)_{\text{экрв}}$ по порядку величины равна ширине того участка спектра (вблизи центра данной линии), на котором $\kappa'(\omega)a \geq 1$.

Оценим поток излучения в изолированной линии неводородоподобного атома или иона для холодной плазмы с параметрами $T_e \leq 10 \text{ эВ}$, $n_e \approx 10^{14} \div 10^{16} \text{ см}^{-3}$. При сильной реабсорбции $(\Delta\omega)_{\text{экрв}}$ определяется формой крыльев линии поглощения, где преобладает ударное уширение вследствие квадратичного штарк-эффекта в полях заряженных частиц. В этом случае имеем:

$$\kappa'(\omega) = \frac{\kappa_0}{1 + \left(\frac{\omega - \omega_0}{\Gamma/2}\right)^2} \left[1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{kT}\right) \right], \quad (117)$$

Здесь (в обозначениях § 1, 2) $\kappa_0 \approx 2\pi\lambda_0^2 \frac{\gamma}{\Gamma} \frac{g_1}{g_0} n_0$, Γ — ударная ширина, равная [5]

$$\Gamma = 11,4 n_e C_4^{2/3} \bar{v}_e^{-1/3}, \quad (118)$$

где C_4 — постоянная квадратичного штарк-эффекта для данной линии; n_e , \bar{v}_e — концентрация и тепловая скорость электронов.

Подставляя (117) в (107) и вычисляя интеграл для достаточно большого $\kappa_0 a$, когда $(\Delta\omega)_{\text{ДВБ}} \gg \Gamma$ (но все еще $(\Delta\omega)_{\text{ДВБ}} \ll kT/\hbar$, $(\Delta\omega)_{\text{ДВБ}} \ll \omega_0$), получаем (ср. (88))*:

$$I_{\perp}(a) \approx B_{\text{пл}}(\omega_0)(\Delta\omega)_{\text{ДВБ}}^{\text{доп}} = B_{\text{пл}}(\omega_0)\Gamma \left[\pi\kappa_0 a \left(1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega_0}{kT}\right) \right) \right]^{1/2}. \quad (119)$$

Подставляя (16), κ_0 и (118) и интегрируя по полусфере, находим окончательно полную интенсивность РП в линии

$$I(a) = \pi I_{\perp}(a) \approx 0,38 \frac{\hbar\omega_0^2}{c \left[\exp\left(\frac{\hbar\omega_0}{kT}\right) - 1 \right]} C_4^{1/3} \bar{v}_e^{-1/6} \times \\ \times \left[\gamma \frac{g_i}{g_0} n_e n_0 a \left(1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega_0}{kT}\right) \right) \right]^{1/2} \frac{\text{эрг}}{\text{см}^2 \cdot \text{с}}. \quad (120)$$

При наличии ряда запертых линий РП будут определяться суммой выражений вида (120). Подчеркнем, однако, что вклад запертых линий в полные потери (107) не обязательно превышает вклад незапертых линий — например в том случае, когда последние расположены под средней частью планковской кривой, а первые сильно усечены ее крыльями (такую ситуацию легко представить с помощью рис. 9). Сумма величин типа (120) сложным образом зависит от параметров плазмы и конкретной структуры спектра. Не входя в детали, отметим лишь, что, например, величины γ , C_4 , n_0 сильно меняются от линии к линии, так что вклады отдельных линий даже с близкими частотами могут сильно различаться между собой.

Интересно отметить, что в принципиально возможном случае, когда для некоторой линии одновременно выполняются условия близости ω_0 к планковскому максимуму, большой вероятности перехода (γ), сильного штарк-эффекта (C_4) и сильной реабсорбции (n_0) (параметры T , n_e , a предполагаются заданными условиями эксперимента), уже одна эта линия согласно (120) может обусловить большие РП энергии плазмы. Пусть, например, имеется плазменный цилиндр диаметром $d = 5$ см и длиной $L \gg d$ с $T = 3$ эВ, $n_e = 5 \cdot 10^{15}$ см $^{-3}$. Пусть далее существует линия с $\hbar\omega_0 = 6$ эВ, $\gamma = 5 \cdot 10^8$ с $^{-1}$, $C_4 = 10^{-12}$ см 4 ·с $^{-1}$, $n_0 = 10^{15}$ см $^{-3}$, $g_i/g_0 = 2$. Цилиндричность системы приближенно учтем подстановкой в (120) $a = d/2$. Мощность РП с единицы длины цилиндра (в основном — с его боковой поверхности, излучение с торцов в $\sqrt{L/d}$ раз меньше) равна: $Q_{\text{рад}} = \pi d I(d/2) \approx 70$ кВт/см. При $L = 100$ см и вкладываемой в плазму мощности $W = 20$ МВт (реальный физический пример) эти потери составят ≈ 7 МВт, т. е.

* Для доплеровского контура линии поглощения имеем: $(\Delta\omega)_{\text{ДВБ}}^{\text{доп}} = \Gamma_{\text{доп}} \times \times \{ \ln [\kappa_0 a (1 - \exp(-\hbar\omega_0/kT))] \}^{1/2}$, где κ_0 определяется прежним выражением с заменой Γ на $\Gamma_{\text{доп}}$. График зависимости $(\Delta\omega)_{\text{ДВБ}}$ от $n_0 a$ иногда называют кривой роста. Для случая одновременного учета доплеровского и лоренцевского механизмов уширения кривые роста можно найти в [29].

35% W . Напомним, что они обусловлены излучением всего лишь в одной спектральной линии!*

Разумеется, обычно имеет место более или менее сильное «расгласование» перечисленных выше сомножителей в (120), так что РП в каждой отдельной линии оказываются значительно меньше. В то же время довольно велико может быть само число существенных линий. Поэтому надежная теоретическая оценка радиационных потерь даже в состоянии ЛТР, как правило, требует детальных численных расчетов, учитывающих конкретную структуру спектра, заселенности и времена жизни различных состояний и степень реабсорбции излучения с учетом реальных механизмов уширения линий (см., например [30]).

§ 9. Заключение

Проведенное выше рассмотрение охватывает лишь ограниченную, относительно простую часть чрезвычайно обширного круга вопросов теории переноса излучения. Анализировались в основном те аспекты теории, которые важны для физики запыряния излучения в ситуации, более или менее типичной для проблемы УТС — термически неоднородной плазменной системы, оторванной от стенок разрядной камеры*². Главный упор делался на качественные зависимости от небольшого числа основных параметров, на единую трактовку переноса в линиях и континууме, не зависящую от конкретных (но заданных) спектральных характеристик испускания — поглощения и т. п.

Между тем литература по теории переноса излучения (хотя бы только в плазме) огромна — по одной лишь «традиционной» (астрофизической) теории переноса опубликовано свыше десятка монографий. И это неудивительно — ведь даже упрощенный анализ § 1—8 выявляет достаточно богатую картину взаимовлияния излучения и вещества в процессах переноса.

Для беглой характеристики аспектов теории, оставшихся вне нашего поля зрения, уместно перечислить их как соответствующие *обобщения* принятой выше постановки задачи, отсылая читателя к основной литературе.

1. Термическая неоднородность плазмы, т. е. зависимость параметров T , n_a , n_0 и др. от координат (часто и от времени). Она имеет место при резко неоднородном распределении источников или стоков энергии (звезды, взрыв, системы в прямом контакте со стенкой камеры и т. п.). Для условий ЛТР соответствующее обобщение теории переноса с исчерпывающей ясностью изложено в [1, 32]; для неравновесных условий оно дано в [33—35] (тем самым установлены и критерии ЛТР). Спектральный аспект вопроса детально проанализирован в [36].

* Заметим, что попытки оценить $Q_{\text{рад}}$ для данного случая в приближении оптически тонкого или, наоборот, черного тела привели бы (особенно во втором случае) к совершенно ошибочным, несуразно большим значениям РП.

*² Реалистичность такой упрощенной постановки задачи в рамках общей теории переноса, по существу, продемонстрирована в [31].

2. Неполное перераспределение по частоте в акте переизлучения.

Использованная нами модель полного перераспределения (ПП) [см. (2), в частности для переноса в линии — $P(\omega) \propto \kappa(\omega)$] справедлива тогда, когда переизлучающий атом успевае́т «забыть» о деталях своего (предшествующего) радиационного возбуждения. Это обычно выполняется, если достаточно заметно уширение линий окружающими частицами; поскольку при этом речь идет о «перемешивании» состояний внутри данного атомного уровня, соответствующие требования к плотности типа $n \gg n^*$ (см. § 1) во всяком случае значительно мягче, чем для неупругих процессов, ответственных за установление ЛТР. Некоторые другие факторы, также благоприятствующие ПП, упомянуты в [6]. В частности, анализ реального (точно решаемого) перераспределения для доплеровского механизма уширения [13, 36] показывает, что результативно оно близко именно к ПП. Однако при переносе излучения в резонансных *рентгеновских* линиях (в межзвездной среде), когда становится достаточно большой естественная ширина линий ($\propto Z^4$), а штарковская и доплеровская ширины изменяются соответственно как Z^{-1} и Z , переизлучающий атом уже не успевае́т «забыть» о деталях радиационного возбуждения, так что модель ПП может полностью нарушаться [37].

3. **Выход за рамки геометрической оптики.** Наше рассмотрение базировалось на картине распространения фотонов по «лучам». Это — приближение геометрической оптики, выполняющееся лишь при условии малости изменения параметров плазмы на длине волны излучения. Поэтому для достаточно длинных волн становится необходимой последовательная *электродинамическая* трактовка переноса излучения [38]. В практическом плане это обобщение малосущественно, так как условие применимости геометрической оптики обычно выполняется с большим запасом.

4. **Коллективные и многочастичные эффекты.** При нарушении условия $\omega \gg \omega_p$, где ω_p — электронная плазменная частота, становится необходимым и практически важным учет коллективных, плазменных эффектов в излучении [38].

В этой связи упомянем еще один (также «длинноволновый») эффект многочастичной природы — нарушение условия $\lambda_0 \ll n^{-1/3}$, в принципе приводящее к взаимодействию излучающих атомов через их общее радиационное поле [39, 36]. Истинная роль этого эффекта до настоящего времени строго не выяснена, однако складывается общее впечатление о его малосущественности. Действительно, большинство типичных случаев переноса оптического излучения в лабораторной плазме (не говоря уже о переносе циклотронного излучения, см. ниже) отвечает именно нетривиальному случаю $\lambda_0 \gg n^{-1/3}$; в то же время игнорирование этого обстоятельства практиками во всех теоретических работах не приводит ни к каким осложнениям типа расхождения с экспериментом. Более того, в [40, 50] приведен ряд теоретических соображений в пользу того, что переход от одночастичного случая $n\lambda^3 \ll 1$ к многочастичному $n\lambda^3 \gtrsim 1$ не приводит к существенному изменению формул переноса излучения.

5. Анизотропия излучения. В магнитоактивной плазме при необходимости учета поляризации и в ряде других случаев нарушается сделанное выше допущение об изотропии излучения*. Указанному кругу вопросов посвящена монография [42].

6. Квантовомеханическое обобщение. Обобщение уравнения Бибермана — Холстейна на квантовый случай (а тем самым и строгое «микроскопическое» обоснование этого феноменологического уравнения) дано в [22, 43, 44].

7. Эффекты индуцированного излучения. Выше мы часто принимали $kT \ll \hbar\omega_0$, что позволяло пренебрегать индуцированным испусканием. Если освободиться от этого ограничения в рамках линейной теории переноса, то результаты изменятся не сильно — ведь распределения Планка и Вина довольно близки друг к другу. Новый, нелинейный подход к этой проблеме развит в [45, 46].

8. Органическое объединение теории переноса излучения с газодинамикой и кинетической теорией газов. Это направление, открытое книгой [1], развито, в частности, в [35] (кинетическое уравнение для фотонов, исследование области применимости модели ЛТР и др.), [31] (равновесие и устойчивость сильноточных излучающих разрядов) и [47] (релятивистское обобщение теории).

И наконец, упомянем монографию [48], в которой трактовка переноса излучения в резонансной линии последовательно включена в общую схему квантовой кинетики электромагнитных процессов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Зельдович Я. Б., Райзер Ю. П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
2. Биберман Л. М. К теории диффузии резонансного излучения. — Журн. эксперим. и теорет. физ., 1947, т. 17, с. 416.
3. Holstein T. Imprisonment of Resonance Radiation in Gases. — Phys. Rev., 1947, v. 72, № 12, p. 1212; 1951, v. 82, № 12, p. 1159.
4. Аллен К. У. Астрофизические величины: Пер. с англ. М.: Изд-во иностр. лит., 1960.
5. Вайнштейн Л. А., Собельман И. И., Юков Е. А. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. М.: Наука, 1979.
6. Superman S., Engelmann F., Oxenius J. Nonthermal Impurity Radiation From a Spherical Plasma. — Phys. Fluids, 1963, v. 6, № 1, p. 108.
7. Биберман Л. М. Приближенный способ учета диффузии резонансного излучения. — Докл. АН СССР. Сер. физ., 1948, т. 9, № 4, с. 659.
8. Коган В. И. Радиационные процессы в неполностью ионизованной плазме. — In.: A Survey of Phenomena in Ionized Gases (Invited Papers). Int. Atom. En. Agency, Vienna, 1968, p. 583.
9. Иванов В. В. Перенос излучения и спектры небесных тел. М.: Наука, 1969.
10. Коган В. И., Абрамов В. А., Васильев А. П. О переносе излучения в плазме. — J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer, 1968, v. 8, p. 1833.
11. Васильев А. П., Коган В. И. К теории переноса излучения в плазме. — Докл. АН СССР, 1966, т. 170, № 5, с. 1044.
12. Абрамов Ю. Ю., Дыхне А. М., Напартович А. П. Стационарные задачи теории радиационного переноса возбуждения. Препринт ИАЭ-1804, М.: 1969.

* Соответствующее обобщение теории необходимо, в частности, в важной проблеме учета реабсорбции циклотронного излучения термоядерной плазмы [41, 38].

13. **Соболев В. В.** Перенос лучистой энергии в атмосферах звезд и планет. М., ГИТТЛ, 1956.
14. **Векленко Б. А.** О функции Грина уравнения диффузии резонансного излучения. — Журн. эксперим. и теорет. физ., 1959, т. 36, № 1, с. 204.
15. **Брагинский С. И., Будкер Г. И.** Физические явления в процессе разгорания разряда при неполюной ионизации. — В сб.: Физика плазмы и проблема управляемых термоядерных реакций/ Под ред. М. А. Леонтовича. Т. 1. М.: Изд-во АН СССР, 1958, с. 186.
16. **Абрамов Ю. Ю., Напартович А. П.** Волна возбуждения, вызванная световой вспышкой. — Астрофизика (АН Арм. ССР), 1968, т. 4, № 2, с. 195.
17. **Hearn A. G.** Radiative Transfer of Doppler Broadened Resonance Lines. — Proc. Phys. Soc., 1963, v. 81, № 4, p. 648.
18. **Напартович А. П.** О методе $\tau_{\text{эф}}$ в теории переноса излучения. — Теплофизика высоких температур, 1971, т. 9, № 1, с. 26.
19. **Абрамов В. А., Коган В. И.** Об одном методе определения эффективной вероятности испускания фотонов атомами. — Оптика и спектроскопия, 1967, т. 23, № 6, с. 851.
20. **Post R.** Impurity Radiation From Hot Plasmas. — In: Symposium of Plasma Dynamics, Clauser (Ed.), 1960, p. 30.
21. **Абрамов В. А., Коган В. И.** Об излучении конечного объема неравновесной плазмы. — Докл. АН СССР, 1965, т. 164, № 5, с. 1008.
22. **Ермаченко В. М.** Диффузия излучения в резонансной среде. — Журн. эксперим. и теорет. физ., 1966, т. 51, № 6, с. 1833.
23. **Дэвисон Б.** Теория переноса нейтронов. М.: Атомиздат, 1960.
24. **Бабиков В. В., Коган В. И.** Лучистая теплоотдача плотной высокотемпературной плазмы. — В сб.: Физика плазмы и проблема управляемых термоядерных реакций/ Под ред. М. А. Леонтовича. Т. 3. М.: Изд-во АН СССР, 1958, с. 86.
25. **Биберман Л. М., Воробьев В. С., Лагарьков А. Н.** Перенос излучения в ионизационном континууме. — Оптика и спектроскопия, 1965, т. 19, № 3, с. 326.
26. **Жидков А. Г., Марченко В. С.** Простые модели вынужденного разлета плазмы. Препринт ИАЭ-3389/6. М.: 1981.
27. **Shearer J. W.** Contraction of Z-Pinches Activated by Radiation Losses. — Phys. Fluids, 1976, v. 19, № 9, p. 1426.
28. **Вихрев В. В., Гуреев К. Г.** Динамика сильноизлучающей плазмы в нецилиндрическом Z-пинче. — Журн. техн. физ., 1978, т. 48, № 11, с. 2264.
29. **Методы исследования плазмы:** Пер. с англ./ Под ред. В. Лохте-Хольгрена. М.: Мир, 1971.
30. **Биберман Л. М., Воробьев В. С., Норман Г. Э.** Энергия, излучаемая равновесной плазмой в спектральных линиях. — Оптика и спектроскопия, 1963, т. 14, № 3, с. 330.
31. **Александров А. Ф., Рухадзе А. А.** Физика сильноточных электроразрядных источников света. М.: Атомиздат, 1976.
32. **Франк-Каменецкий Д. А.** Физические процессы внутри звезд. М.: Физматгиз, 1959.
33. **Лагарьков А. Н.** Об условиях применимости приближения локального термодинамического равновесия. — Теплофизика высоких температур, 1966, т. 4, № 3, с. 305.
34. **Дыхне А. М., Напартович А. П.** Перенос резонансного излучения в неоднородной плазме. Препринт ИАЭ-2026. М.: 1970.
35. **Сэмпсон Д.** Уравнения переноса энергии и количества движения в газах с учетом излучения: Пер. с англ. М.: Мир, 1969.
36. **Преображенский Н. Г.** Спектроскопия оптически плотной плазмы. Новосибирск: Наука, 1971.
37. **Баско М. М.** Перераспределение по частоте и диффузия излучения в резонансных рентгеновских линиях. — Журн. эксперим. и теорет. физ., 1978, т. 75, № 4, (10), с. 1278.
38. **Бекефи Дж.** Радиационные процессы в плазме: Пер. с англ. М., Мир, 1971.
39. **Алексеев В. А., Виноградов А. В., Собыльман И. И.** О макроскопическом подходе к эффектам радиационного взаимодействия атомов и молекул. — Успехи физ. наук, 1970, т. 102, № 1, с. 43.

40. Лозанский Э. Д., Фирсов О. Б. Теория искры. М.: Атомиздат, 1975.
41. Трубииков Б. А., Бажанова А. Е. Магнитное излучение слоя плазмы. — В кн.: Физика плазмы и проблема управляемых термоядерных реакций/ Под ред. М. А. Леонтовича. Т. 3. М.: Изд-во АН СССР, 1958, с. 121.
42. Долгинов А. З., Гнедин Ю. Н., Силантьев Н. А. Распространение и поляризация излучения в космической среде. М.: Наука, 1979.
43. Дьяконов М. И., Перель В. И. Релаксация когерентности при диффузии резонансного излучения. — Журн. эксперим. и теорет. физ., 1964, т. 47, № 4 (10), с. 1483.
44. Вдовин Ю. А., Ермаченко В. М. Распространение излучения в резонансной среде. — Журн. эксперим. и теорет. физ., 1968, т. 54, № 1, с. 148.
45. Амбарцумян В. А. О некоторых нелинейных задачах теории переноса излучения. — В кн.: Теория звездных спектров/ Под ред. В. В. Соболева. М.: Наука, 1966, с. 91.
46. Абрамов Ю. Ю., Дыхне А. М., Напартович А. П. О переносе резонансного излучения большой интенсивности. — Журн. эксперим. и теорет. физ., 1967, т. 52, № 2, с. 536.
47. Имшенник В. С., Морозов Ю. И. Радиационная релятивистская газодинамика высокотемпературных явлений. М.: Атомиздат, 1981.
48. Климонтович Ю. Л. Кинетическая теория электромагнитных процессов. М.: Наука, 1980.
49. Trigt C. van. Analytically Solvable Problems in Radiative Transfer.—Phys. Rev., 1969, v. 181, № 1, p. 97, 1971, v. 4A, № 3, p. 1303.
50. Биберман Л. М. Перенос излучения в спектральных линиях.— В кн.: Низкотемпературная плазма. М.: Мир, 1967, с. 90.

КИНЕТИКА ИЗЛУЧЕНИЯ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ В ТЕРМОЯДЕРНОЙ ПЛАЗМЕ

В. И. Гервидс, А. Г. Жидков, В. С. Марченко, С. И. Яковленко

Введение

Этот обзор посвящен вопросам кинетики излучения примесных ионов в высокотемпературной, сравнительно разреженной плазме. Как известно, проблема примесей в современных термоядерных установках обусловлена в первую очередь следующими общими причинами. Во-первых, многозарядные ионы вызывают значительно большие излучательные потери в расчете на одну частицу, чем однозарядные ионы компонент ядерного топлива. Отсюда следует необходимость обеспечить малое содержание примесей. Во-вторых, традиционные системы с магнитной термонизоляцией характеризуются сравнительно низкими концентрациями самого ядерного топлива ($\ll 10^{-2}$ мм рт. ст.) в довольно большом объеме (около 10 м³). Обеспечить же малое содержание ($\ll 10^{-2}$ мм рт. ст.) паров практически любого элемента в большой установке, где горячая (около 10 — 20 кэВ) плазма соседствует с твердыми телами, крайне сложно.

В настоящее время по мере преодоления ряда трудностей, связанных с необходимостью подавления неустойчивостей и обеспечения нагрева плазмы до килвольтных температур, проблема примесей выступает на первый план. Поэтому исследования в этой области заметно активизировались, появилось много теоретических и экспериментальных работ. Тем не менее не все аспекты поведения примесных ионов в плазме представляются вполне ясными. Последовательное теоретическое рассмотрение должно было бы учитывать взаимосвязь параметров (параметры плазмы определяют излучательные потери, а излучательные потери влияют на температуру плазмы). Однако полных моделей, позволяющих достаточно точно рассчитать все параметры плазмы даже без примесей, сейчас, по-видимому, нет. Поэтому практически все теоретические рассуждения ограничиваются лишь выявлением связи характеристик излучения с параметрами плазмы (последние должны задаваться из эксперимента). Конкретной целью анализа обычно является или расчет интенсивностей свечения отдельных линий (для задач диагностики) или расчет энергетических потерь (для определения требований к чистоте плазмы).

Обзоры традиционных методов расчета ионизационного состояния горячей плазмы и кинетики заселения ионных уровней даны, например, в [1, 2]. Эти методы основаны на корональном приближении. Последнее время большое внимание уделяется исследованию отклонений от коронального равновесия, обусловленных многообразными

конкретными причинами (диффузия, нестационарность, перезарядка на инжектированных нейтральных атомах, наличие прочных метастабильных состояний, немаксвелловость распределения электронов и т. п.). Появилось также много данных по кинетике излучения конкретных ионов. Этот обзор представляет попытку систематизировать накопившиеся результаты.

§ 1. Ионизационное состояние примеси и кинетика заселения уровней

В этом параграфе кратко рассматриваются модели общего характера, описывающие заселенности возбужденных уровней и распределение ионов по кратности ионизации, как функции параметров плазмы (п. 1.1). Приводятся некоторые результаты из последних численных расчетов (п. 1.2), уделено существенное внимание рассмотрению отклонений от стационарного коронального равновесия (п. 1.2, 1.3).

1.1. Кинетические модели заселения уровней. Квазистационарное приближение [16]. Как правило, заселенности возбужденных состояний атомов и ионов релаксируют за более короткие времена, чем изменяются заселенности их основных состояний. Это позволяет считать, что заселенности N_m^k возбужденных состояний каждого иона $X^k(m)$ (m — номер возбужденного состояния, $m = 1$ — основное состояние, k — кратность или заряд иона, X — символ химического элемента) успевают следить за изменениями N_1^k и, тем более, за изменениями концентрации электронов N_e и их температурой T_e , т. е. справедливы следующие квазистационарные уравнения баланса:

$$\frac{dN_m^k}{dt} = 0 = \sum_{m'=2}^{m_1^k} K_{mm'}^k N_{m'}^k + D_m^k, \quad \begin{matrix} m, m' = 2, 3, \dots, m_1^k \\ k = 0, 1, \dots, Z-1. \end{matrix} \quad (1)$$

Здесь m_1^k — последнее учитываемое дискретное состояние; Z — атомный номер рассматриваемого элемента X ; $K_{mm'}^k$ — матрица скоростей переходов (кинетическая или релаксационная матрица). Недиagonальные элементы $K_{mm'}^k$ дают вероятности переходов в единицу времени (с^{-1}) из m' в m ; диагональные элементы K_{mm}^k отрицательны, их модули $K_m^k = |K_{mm}^k|$ дают полную вероятность ухода из состояния m . Величина D_m^k дает скорость ($\text{см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$) появления ионов $X^k(m)$ за счет переходов из состояний, не учитываемых системой (1), т. е. из основного состояния $m = 1$ и из континуума $m = i$. При выполнении условий квазистационарности [3, 4]

$$\tau_m^k = (K_m^k)^{-1} \ll \tau_1^k = \left| \frac{1}{N_1^k} \frac{dN_1^k}{dt} \right|^{-1}, \quad (m \geq 2) \quad (2)$$

заселенности возбужденных состояний малы $N_m^k \ll N_1^k$ ($m \geq 2$). Эти условия могут нарушаться только для низколежащих метастабильных уровней (см. ниже).

Ударно-излучательная модель [1—8] состоит в том, что кинетическая матрица $K_{mm'}$ учитывает только спонтанные излучательные переходы и столкновения с электронами*. При этом

$$\left. \begin{aligned} K_{mm'} &= A_{mm'} + V_{mm'} N_e, \quad m' \neq m \quad (m' \rightarrow m); \\ -K_{mm} &\equiv K_m = \sum_{\substack{m=i \\ m' \neq m \\ m'=1}}^{m=i} K_{m' m} \equiv A_m + V_m N_e. \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

Здесь $A_{mm'}$ — вероятность (с^{-1}) радиационного перехода $m' \rightarrow m$; $V_{mm'} = \langle \sigma_{mm'} V_e \rangle$ — скорость ($\text{см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$) столкновительного перехода $m' \rightarrow m$; $A_m = \sum_{m' < m} A_{m' m}$, $V_m = \sum_{\substack{m'=i \\ m' \neq m}}^{m=i} V_{m' m}$. Сведения о характеристиках переходов приведены в приложении.

Для скорости прихода на уровень m из континуума и из основного состояния далее будем использовать выражение

$$D_m^k = V_{m1}^k N_e N_1^k + R_{mi}^{k+1} N_e N_1^{k+1} + C_{mi}^{k+1} N_0 N_1^{k+1}. \quad (4)$$

Здесь R_{mi}^{k+1} — суммарная скорость всех видов рекомбинационного прилипания свободного электрона на уровень m иона k при столкновении электрона с ионом заряда $k+1$; $C_{mi}^{k+1} = \langle \sigma_m^{k+1} v \rangle$ — скорость ($\text{см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$) перезарядки ионов $k+1$ на нейтральных атомах, которые инжектируются в плазму некоторых установок для ее нагрева; N_0 концентрация нейтральных атомов. Из выражений (4) и уравнений (1) ясно, что заселенности уровней могут быть представлены в виде суммы [6]

$$N_m^k = q_m^k N_1^k + \alpha_m^{k+1} N_1^{k+1} + \zeta_m^{k+1} N_1^{k+1} N_0 / N_e, \quad (5)$$

где q_m^k , α_m^{k+1} , ζ_m^{k+1} — безразмерные коэффициенты, характеризующие заселение $X^k(m)$ из основного состояния иона k или $k+1$ за счет процессов *2 возбуждения, рекомбинации и перезарядки соответственно.

Из (1), (4) можно получить следующие локальные уравнения баланса для основных состояний ионов:

$$\frac{dN_1^k}{dt} = (\alpha^{k+1} N_e + \zeta^{k+1} N_0) N_1^{k+1} + S^{k-1} N_e N_1^{k-1} - \left(S^k + \alpha^k + \zeta^k \frac{N_0}{N_e} \right) N_e N_1^k, \quad (6)$$

где α^k , ζ^k , S^k — полные скорости ($\text{см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$) процессов (соответственно) рекомбинации, перезарядки и ионизации иона k . Эти скорости выражаются через величины q_m^k , ζ_m^k , α_m^k (подробнее см. [6]). Ввиду медленности релаксации основных состояний ионов за счет процессов иони-

* В [8] учтена также реабсорбция излучения.

*2 Отметим, что под процессом здесь всюду понимается совокупность элементарных актов, переводящих ион из одного состояния в другое, а под элементарным актом — переход в результате одного столкновения или распада.

зации и рекомбинации в выражении (6) часто необходимо учитывать члены, связанные с пространственным переносом примеси (см. п. 1.2).

В стационарном пределе $N_e t \gg N_e \tau_{\infty} \gg 10^{12} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}$ [9], где τ_{∞} — время достижения стационарной глубины обдирки (см. п. 1.2), уравнения (6) существенно упрощаются. Полагая $dN_1^k/dt = 0$, с учетом равенства $\alpha^z N_e + \zeta^z N_0 = S^{z-1} N_e N^{z-1}$ из (6) получаем:

$$(\alpha^{k+1} N_e + \zeta^{k+1} N_0) N_1^{k+1} = S^k N_e N_1^k. \quad (7)$$

Корональная модель [1—2, 5—13]. В традиционной термоядерной плазме (как и в астрофизической) можно обычно пренебречь столкновительными переходами между возбужденными уровнями по сравнению с излучательными переходами, т. е., как правило, справедливо условие

$$N_e \ll A_m^k / V_m^k, \quad m = 2, 3, \dots, m_1^k. \quad (8)$$

Для неметастабильных уровней условие (8) может нарушаться только в случае больших главных квантовых чисел n [5]

$$n > n^* \approx 200 (T_e/k^2)^{1/21} \frac{k}{N_e^{1/7}} \approx \frac{200k}{N_e^{1/7}}. \quad (9)$$

(Здесь и ниже в формулах с числовыми коэффициентами температура, энергия ионизации и энергия переходов измеряются в килоэлектрон-вольтах, мощность — в ваттах, остальные величины, если не оговорено иное, в СГС). При обычных для токамаков параметрах $k \gtrsim 10$, $N_e \leq 10^{14} \text{ см}^{-3}$ имеем $n^* \gtrsim 20$. Даже при $n^* = 5$, $k = 4$ из (9) имеем мягкое ограничение $N_e < 3 \cdot 10^{15} \text{ см}^{-3}$ (ср. [1, 2]).

Анализ заселения возбужденных уровней в корональном приближении резко упрощается по сравнению с ударно-излучательной моделью. Кинетическая матрица $K_{mm'} = A_{mm'}$ становится треугольной и не зависящей от параметров плазмы. Решение системы (1) в этом случае удобно записать с помощью обратной матрицы $a_{mm'}$:

$$N_m^k = \sum_{m' \geq m} a_{mm'} N_{m'}, \quad (10)$$

которая также треугольна. Ее элементы $a_{mm'}$ представляют собой вероятности переходов $m' \rightarrow m$ в результате нескольких актов излучения (излучательного каскада). Матрица $a_{nn'}$ для водородоподобных ионов вычислена Ситоном [14] (см. также [5]) в предположении, что заселенности подуровней nl , nl' пропорциональны их статистическим весам.

Из треугольности прямой и обратной матриц $A_{mm'}$, $a_{mm'}$ следует, что заселенности нижних уровней не влияют на заселенности вышележащих. Обычно нет необходимости учитывать и состояния, лежащие существенно выше рассматриваемого, ввиду падения V_{m_1} с ростом m . Следовательно, число учитываемых уровней m_1 , как правило, невелико (см. § 2).

Выражения для скоростей процессов фоторекомбинации, перезарядки и ионизации в корональном приближении имеют вид

$$\alpha^{k+1} = \sum_{m=1}^{m_1} R_{m1}^{k+1}, \quad \zeta^{k+1} = \sum_{m=1}^{m_1} C_{m1}^{k+1}, \quad S^k = V_{i1}^k. \quad (11)$$

Заселенность метастабильного уровня. В плазме токамаков встречаются ситуации, когда условие корональности (8) нарушается для некоторого метастабильного уровня m_0 . Его относительная заселенность $q_{m_0} = N_{m_0}/N_1$ в предположении, что все остальные состояния «корональны», может быть найдена из уравнений баланса

$$V_{m_0 1} N_e + \sum_{m>m_0} A_{m_0 m} q_m = q_{m_0} (N_e V_{m_0} + A_{m_0}), \quad (12a)$$

$$N_e (V_{m_1} + V_{m m_0} q_{m_0}) = q_m A_m, \quad m \neq m_0. \quad (12b)$$

В (12b) учитывается заселение корональных уровней $m \neq m_0$ лишь из состояний $m = 1, m = m_0$. Решая (12a), получаем:

$$q_{m_0} = N_e \left(V_{m_0 1} + \sum_{m>m_0} \frac{V_{m_1} A_{m_0 m}}{A_m} \right) \left/ \left(A_{m_0} + N_e V_{m_0} - \sum_{m>m_0} \frac{A_{m_0 m}}{A_m} V_{m m_0} \right) \right. \quad (13)$$

Конкретные примеры расчета q_{m_0} для He, Be, В-подобных ионов приведены в § 2.

Скорость ионизации с учетом метастабильного уровня записывается в виде

$$S^k = (V_{i1}^k + V_{i m_0}^k q_{m_0}) / (1 + q_{m_0}). \quad (14)$$

Формулы (13), (14) сравнительно просто обобщаются на случай нескольких метастабильных уровней. Условие квазистационарности (2) обычно выполняется и для метастабильных уровней. Так, например, для ионов СИИ и ОV при $5 \leq T_e \leq 400$ эВ имеем $\tau_m^{-1} = A_m + V_m N_e \approx (10^{-8} \div 10^{-9}) N_e$, что даже при $N_e \sim 10^{13} \text{ см}^{-3}$ дает $\tau_m \approx 10^{-3} \div 10^{-4}$ с. В современных токамаках характерные времена изменения T_e и N_e значительно больше.

1.2. Ионизационное состояние примеси. Корональное равновесие. Стационарное распределение ионов по кратностям в корональном приближении может быть найдено в общем случае. Так, в отсутствие нейтральных атомов систему уравнений (7) можно записать в виде

$$\alpha^{k+1} y_{k+1} = S^k y_k, \quad y_k = N_1^k \left/ \sum_{k'=0}^Z N_1^{k'} \right., \quad k = 0, 1, \dots, Z-1 \quad (15)$$

и просто решить, выражая одну относительную заселенность y_k через другую. В численных расчетах при этом удобно начинать прогонку не с голых ядер или с нейтральных атомов, а с одного из наиболее

представленных ионов, имеющего кратность k_0 (см. ниже). Соответствующее решение уравнений (11) имеет вид [9]

$$y_{k_0} = \left[\sum_{k=0}^{k_0-1} \left(\prod_{m=0}^{k_0-k-1} \chi_{k_0-m} \right) + 1 + \sum_{k=k_0+1}^Z \left(\prod_{m=1}^{k-k_0} \chi_{k_0+m}^{-1} \right) \right]^{-1}; \quad (16a)$$

$$y_k = \left(\prod_{m=1}^{k-k_0} \chi_{k_0+m}^{-1} \right) y_{k_0}, \quad k \geq k_0 + 1; \quad (16б)$$

$$y_k = \left(\prod_{m=0}^{k_0-k-1} \chi_{k_0-m} \right) y_{k_0}, \quad k \leq k_0 - 1, \quad (16в)$$

где $\chi_k = \alpha^k / S^{k-1}$, $k = 1, 2, \dots, Z$, где α^k и S^k даются формулами (11).

По мере увеличения температуры ионизационное равновесие сдвигается в сторону уменьшения отношения I_{k_0}/T_e , где I_{k_0} — энергия ионизации внешней оболочки наиболее представленного иона с зарядом k_0 [9]. Чтобы показать это, оценим k_0 из соотношения

$$\chi_{k_0+1} = \alpha^{k_0+1} / S^{k_0} \approx 1; \quad (17)$$

для других k это отношение либо много больше, либо много меньше единицы.

Используя для α^{k_0+1} и S^{k_0} выражения (П.1), (П.2) из приложения [пренебрегая диэлектронной рекомбинацией (ДР)], получаем оценку

$$I_{k_0}/T_e \approx \left(\frac{2n_0 \xi_{n_0}}{\mu_{n_0}} \right)^{1/3} (10/T_e)^{2/3}, \quad (18)$$

где n_0 — главное квантовое число оболочки; ξ_0 — число электронов; μ_0 — число вакансий в оболочке n_0 . Из (18) видно, что отношение I_{k_0}/T_e убывает с ростом T_e пропорционально $T_e^{-2/3}$. Монотонность этого убывания нарушается при проходе замкнутых оболочек, где ξ_0 и μ_0 резко изменяются, средняя же скорость убывания иллюстрируется следующими численными примерами: $(I_{k_0}/T_e) \approx 5 \div 10$ при $T_e = 10^2$ эВ; $(I_{k_0}/T_e) \approx 2 \div 4$ при $T_e = 1$ кэВ, $(I_{k_0}/T_e) \approx 0,2 \div 1$, при $T_e = 10$ кэВ.

В рамках корональной модели относительные концентрации ионов y_k не зависят от плотности плазмы. Корональное равновесие становится несправедливым с ростом N_e , когда увеличивается вклад каскадной ионизации, т. е. возбуждения уровней $n > n^*$ (9) или метастабильных уровней с последующей ионизацией. Таким образом, рост N_e приводит к повышению кратности наиболее представленного иона k_0 , пока не становится существенной ударно-излучательная рекомбинация ($n^* \sim T_e$).

Изложим теперь некоторые результаты конкретных расчетов [9, 15—17] ионизационного состояния типичных (для токамаков) примесей. В современных расчетах ионизационного баланса по формулам (16) используются: скорости ионизации S^k с учетом ионизации внутренних оболочек; скорости рекомбинации R^k , включающие как фото-рекомбинацию с учетом захвата в возбужденные состояния иона k , так и ДР, скорость которой зависит, вообще говоря, от электронной плотности.

Зависимость скорости ДР α_D^k от плотности возникает тогда, когда электрон прилипает на высоковозбужденный уровень $n \geq n^*$ (9). Зависимость α_D^k от N_e весьма слабая ($\propto N_e^{1/7}$ при возбуждении переходов с $\Delta n = 0$ во внутренних оболочках и $\propto N_e^{2/7}$ при $\Delta n = 1$). Поэтому ионизационное равновесие и в этом случае можно считать как бы корональным, т. е. не меняющимся с изменением N_e . Однако сам по себе учет ионизации высоковозбужденных уровней приводит

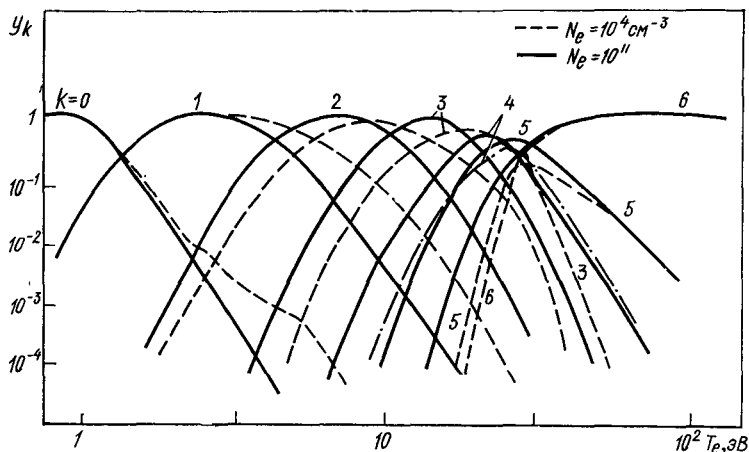


Рис. 1. Ионизационное состояние (y_k — относительные концентрации ионов) кислорода при малой (пунктирные кривые) и сравнительно большой (сплошные) плотности электронов [15]. Рисунок иллюстрирует влияние зависимости скорости ДР от N_e на ионизационное состояние. Цифры над кривыми соответствуют кратности иона k

к существенно иным значениям α_D^k , например при $\Delta n = 0$ уже для $N_e = 10^{12} \div 10^{14} \text{ см}^{-3}$, чем в случае $N_e = 0$, что заметно сказывается на распределении ионов по кратностям ионизации (рис. 1).

Влияние ДР на ионизационный баланс существенно при низких температурах, когда в плазме присутствуют многоэлектронные ионы. Если примесь ионизована до водородоподобных ионов, то ДР можно пренебречь. Для С и О это соответствует $T_e \gtrsim 0,5 \text{ кэВ}$, для Fe и Mo — $T_e \gtrsim 10 \text{ кэВ}$.

На рис. 2 представлены распределения $\langle k \rangle$ ионов С, О, Fe, Mo, W — примесей по данным работ [16—18]. Расчеты показывают, что отношение I_{k_0}/T_e действительно уменьшается с ростом T_e в соответствии с оценкой (18). Наиболее широкие интервалы температур занимают ионы с заполненными электронными оболочками (на рисунках эти интервалы представлены ступеньками). Это обусловлено резким увеличением энергии ионизации при переходе от щелочноподобной к заполненной оболочке, так что для полной ионизации инертноподобных ионов требуется значительно большая температура, чем та, при которой они появляются (см. также рис. 8).

В настоящее время скорости ионизации и рекомбинации известны с ограниченной точностью. Из (18), (19) видно, что погрешность отношения α^{k+1}/S^k приводит к такой же погрешности в определении величин y_{h_0} , $x^{k_0} = I_{h_0}/T_e$. Для ионов с близкими потенциалами ионизации поэтому сложно прогнозировать наличие того или иного иона, что следует иметь в виду в задачах диагностики. Этот вывод сделан в работе [18] на основе численного исследования изменения сред-

него заряда $\langle k \rangle = \frac{\sum_{k=0}^z ky_h}{\sum_{k=0}^z y_h}$ при вариации скоростей ионизации и рекомбинации. Анализ влияния выбора приближений для этих величин на ионизационное состояние и радиационные потери проведен в [19].

Отметим два факта, которые, в принципе, могут заметно влиять на ионизационный баланс, но обычно в расчетах не учитываются или учитываются редко. Это ионизация через метастабильный уровень и через АИ состояния.

У легких примесей метастабильные уровни сильно заселены (из-за малости A_m) и могут оказывать заметное влияние на скорость ионизации (рис. 3). Например для бериллийподобных ионов СIII, OV заселенности метастабильных уровней $m_0 = 2s2p(^3P_{0,1,2})$ оказываются одного порядка с заселенностью основного состояния $q_{m_0} \sim 1$ в широком диапазоне N_e и T_e (см. § 2). Вычисляя скорости ионизации из основного $1 = 2s^2$ и метастабильного m_0 состояний по формуле (П.1), получаем $\frac{V_{i1}}{V_{im_0}} = 0,3 \div 0,7$ при $5 \leq T_e \leq 100$ эВ и $N_e = 10^{12} \div 10^{14}$ см⁻³. С ростом заряда ионов быстро растут вероятности запрещенных радиационных переходов, поэтому для тяжелых примесей $q_{m_0} \ll 1$ и ступенчатая ионизация через метастабильный уровень менее существенна.

Для ионов с большим числом электронов во внутренней оболочке (по сравнению с внешней) заметный, а иногда и определяющий вклад в скорость ионизации может вносить ионизация через АИ состояния. Например ионизация натрийподобного иона железа Fe^{+15} ($2p^63s$) посредством возбуждения p -электронов оказывается в 4—5 раз более эффективной, чем прямая ионизация s -электронов (см. статью В. А. Ба-

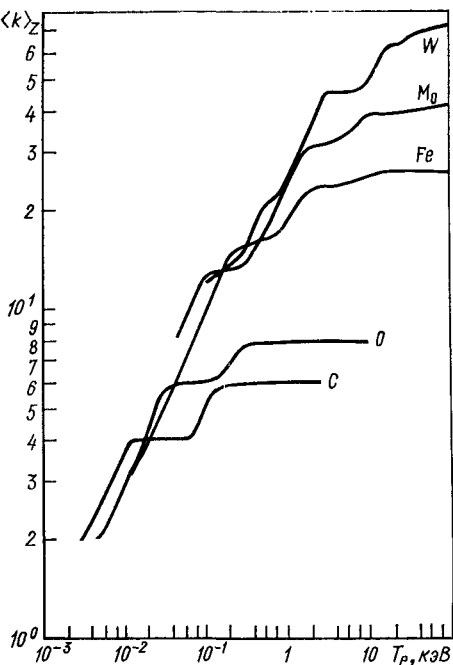


Рис. 2. Зависимость среднего заряда $\langle k \rangle$ примесных ионов от температуры электронов [16—18]

зылева, М. И. Чибисова в настоящем сборнике). Следовательно, неоподобные ионы должны появляться при меньших температурах, чем это следует из расчетов, не учитывающих АИ (см. например, рис. 8, в).

Нестационарная корональная модель [21,23]. Задача отыскания нестационарного распределения ионов по кратностям ионизации возникает в случае, когда характерное время изменения температуры электронов τ_{Te} сравнимо с временем достижения стационарной глубины обдирки τ_{∞} (см. ниже). Это происходит на стадии нагрева плазмы или когда существует достаточно мощный

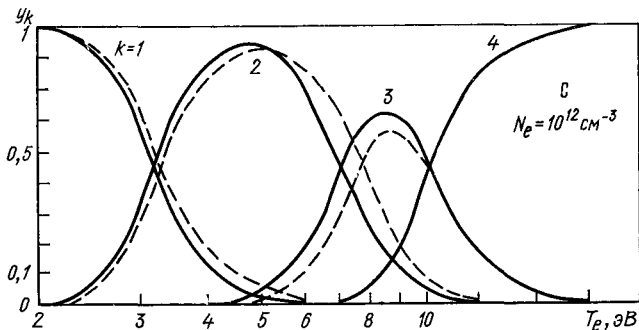


Рис. 3. Результаты расчета с учетом (пунктирные кривые) и без учета (сплошные) ионизации с метастабильного уровня [20]. Учет ионизации метастабильных состояний повышает средний заряд $\langle k \rangle_z$

нестационарный поток атомов примеси в плазму извне. Ясно, что в нестационарных условиях степень ионизации примеси ниже, чем при равновесии, поскольку примесь просто не успевает ионизоваться.

Нестационарная система уравнений (6) может быть записана в виде [(ср. 15)]

$$\begin{aligned} \frac{dy_k}{dt} &= y_{k-1} S^{k-1} - y_k (S^k + \alpha^k) + y_{k+1} \alpha^{k+1} + \\ &+ \varphi_0(t) \delta_{k0}, \quad k = 0, 1, 2, \dots, Z-1 \\ y_k(0) &= y_k^0. \end{aligned} \quad (19)$$

Функция $\varphi_0(t)$ характеризует поступление атомов примеси в плазму.

В работах [21, 23] система уравнений (19) использовалась для расчета нестационарного распределения ионов по k и определения времени τ_{∞} достижения стационарного распределения. Рассматривались два случая: а) $y_k(0) = \delta_{k0}$, $\varphi_0(t) = 0$; б) $y_k(0) = 0$, $\varphi_0(t) = \text{const}$. Первый случай (рис.4) моделирует мгновенный ввод атомов примеси в плазму, второй соответствует линейному росту полной концентрации примеси. Температура и концентрация электронов плазмы полагаются постоянными.

На основе аналитического рассмотрения кинетики трех соседних ионов ($k-1, k, k+1$) было найдено [21] время, необходимое для пе-

перехода ионов кратности k ($y_k \approx 1$) в зарядовое состояние $k+1$ ($y_{k+1} \approx 1$)

$$\tau_{k, k+1} \approx N_e^{-1} (S^k + \alpha^{k+1}) \ln \frac{2S^k}{S^k - \alpha^{k+1}}; \quad (20)$$

при этом время достижения равновесного распределения оценивалось по формуле $\tau_\infty = \sum_{k=0}^{k_0} \tau_{k, k+1}$, где k_0 — заряд наиболее представленного иона при данной T_e в стационарном случае.

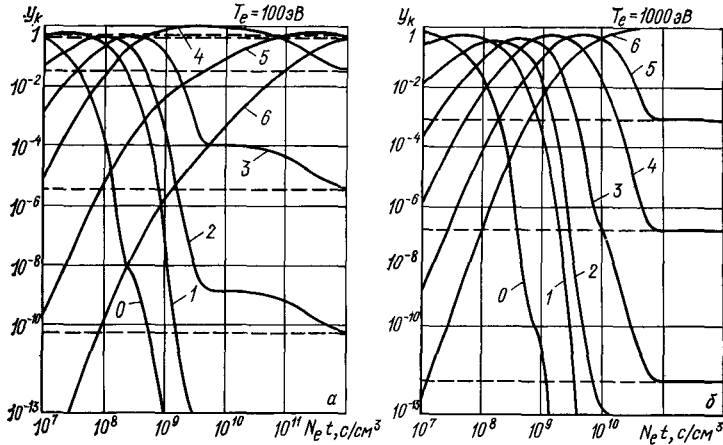


Рис. 4. Зависимость от времени относительных концентраций углерода [21]: Пунктир — стационарные концентрации (случай мгновенного подъема температуры)

Логарифмическая особенность в (20) при $S^k \rightarrow \alpha^{k+1}$ является следствием учета лишь трех последовательных ионов, когда система (19) [при $\varphi_0(t) \equiv 0$] легко решается аналитически. Эта особенность соответствует обнаруженному с помощью численных расчетов [21] факту возникновения при $S^k \approx \alpha^{k+1}$ «псевдостационарных» состояний, когда зарядовое распределение ионов практически не меняется в течение заметного времени (см. область $N_e t \approx 10^{10} \div 10^{11}$ см⁻³·с на рис. 4, а). Таким образом, использование вместо (20) обычной оценки $\tau_\infty \approx 1/S^{k_0}$ может дать заниженный результат.

Учет диффузии в ионизационном балансе. Ряд экспериментов (см., например, [23—26]) указывает на значительное влияние процессов переноса на ионизационный баланс примеси. Численное исследование этого влияния проводилось в основном для легких примесей [23, 25, 27, 28].

Нестационарную систему уравнений ионизационного баланса с учетом пространственного переноса ионов можно записать в виде [23]

$$\frac{dN^k}{dt} = -\text{div } \mathbf{j}_k + S^{k-1} N^{k-1} N_e - (S^k + \alpha^k) N^k N_e + S^{k+1} N^{k+1} N_e, \quad k=0, 1, 2, \dots, Z-1 \quad (21)$$

где \mathbf{j}_k — плотность потока ионов.

Рассмотрим сначала качественно, при каких условиях влияние переноса становится существенным. Положим пока $dN^k/dt = 0$. Изменение N^k за счет переноса можно оценить по формуле $\text{div } \mathbf{j}_k \sim \sim N_k/\tau_{\text{диф}}^k$, где $\tau_{\text{диф}}^k$ — диффузионное время жизни, для которого будем использовать размерностную оценку

$$\tau_{\text{диф}}^k \sim a_k^2/D_{\perp}. \quad (22)$$

Здесь D_{\perp} — коэффициент диффузии поперек магнитного поля, a_k — характерный размер области, занимаемой ионами k . Экспериментальные значения коэффициента диффузии, измеренные на установках Т-10 [26] и PLT [28], лежат в пределах от 10^3 до 10^4 $\text{см}^2 \cdot \text{с}^{-1}$ и несколько возрастают от центра шнура к его границе. Положим $D_{\perp} \approx \approx 5 \cdot 10^3$ $\text{см}^2/\text{с}$ и будем считать D_{\perp} не зависящим от заряда иона k , как это имеет место в простых аналитических теориях [29]. Оценивая скорость фоторекомбинации по формуле (П.2) при $T_e \sim I_k$ (в области свечения иона k) имеем $\tau_{\text{рек}}^k = (N_e \alpha_{\text{рек}}^k)^{-1} \approx (N_e 10^{-14} \sqrt{I_k})^{-1}$. Сравнивая диффузионные и рекомбинационные времена, получаем:

$$\tau_{\text{диф}}^k/\tau_{\text{рек}}^k \approx 10^{-18} a_k^2 N_e \sqrt{I_k}. \quad (23)$$

Эти времена сравнимы, например, при $a_k \approx 10$ см, $N_e \approx 10^{13}$ см^{-3} , $I_k \approx 400$ эВ. В этой оценке время рекомбинации, вообще говоря, занижено, поскольку не учтена ДР. В то же время ясно, что влияние диффузии должно существенно расти по мере приближения к границе плазмы, где падают N_e и I_k . При этом для ионов с небольшим потенциалом ионизации рекомбинацией можно пренебречь и равновесие устанавливается между диффузией и ионизацией, так что характерный размер a_k области, занимаемой ионом k , следует из условия $\tau_{\text{диф}}^k \sim \tau_{\text{ион}}^k$, которое с учетом (22) дает $a_k \sim \sqrt{D_{\perp} \tau_{\text{ион}}^k}$.

Приведенные выше качественные соображения подтверждаются численными расчетами на основе системы уравнений (21), в которой распределения параметров плазмы N_e , T_e считались заданными из эксперимента, а граничные условия на поток примеси выбирались так, чтобы установившееся распределение ионов поперек шнура соответствовало наблюдаемому [28]. На рис. 5 представлено распределение примесных ионов С и О и экспериментальное распределение N_e и T_e по малому радиусу установки PLT. Из рис. 5 видно, что распределение ионов близко к корональному в центральных областях $r < 30$ см и сильно отличается от коронального при $r > 30$ см, где ионы низкой кратности расположены в области температур значительно больше равновесной. Концентрация ядер примеси в области низких температур превышает равновесную, что объясняется диффузионным выносом ядер на периферию. Отметим, что водородоподобный ион в данном случае нигде не является наиболее представленным.

1.3. Влияние внешних источников неравновесности на ионизационный баланс. Постоянное электрическое поле [30, 31]. Наличие даже слабого электрического поля в замкнутых плазменных конфигурациях приводит к тому, что часть быстрых электронов непрерывно ускоряется («убегающие» электроны [32]),

так что хвост функции распределения имеет существенно немаквелловский вид. Появление быстрых электронов приводит к увеличению скорости ионизации, в особенности для оболочек с большими значениями $x_n^k = I_n^k/T_e$, где n — главное квантовое число. Усредненные

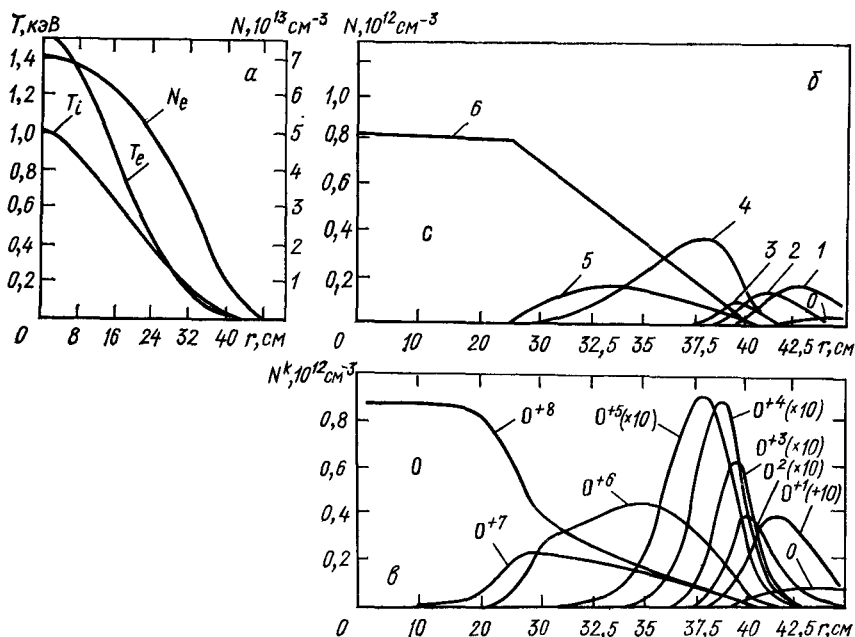


Рис. 5. Распределение параметров плазмы по малому радиусу установки PLT согласно данным работы [28]:

a — N_e , T_e , T_i (ионная температура) — аппроксимация экспериментальных данных; b и c — концентрации ионов различной кратности соответственно для углерода и кислорода (расчет с учетом аномального переноса $D=4 \cdot 10^8 \text{ см}^2 \cdot \text{с}^{-1}$)

по модельной немаквелловской функции распределения сечения ионизации можно записать в виде [30]

$$S_f^k(x_n^k, \alpha) = S_{f_0}^k(x_n^k) \eta(x_n^k, \alpha), \quad (24)$$

где S_f^k , $S_{f_0}^k$ — скорость ионизации иона k соответственно для немаквелловского f и максвелловского f_0 распределений электронов; величина $\eta(x_n^k, \alpha)$ характеризует увеличение скорости для n -й оболочки иона; $\alpha = E/E_{кр}$ — нормированная напряженность электрического поля; $E_{кр} = 4 \text{ пэ}^3 N_e \Lambda / T_e \approx 3,6 \cdot 10^{-15} N_e T_e^{-1}$ — критическое поле (В/см), при котором начинает ускоряться основная масса электронов [32]; Λ — кулоновский логарифм.

Зависимости η_n от x_n^k при различных α [30] представлены на рис. 6. Видно, что $\eta_n \approx 2$ при $E_{кр}/E \approx 5 I_n^k / T_e$. При реальных для токамаков значениях $E_{кр}/E \sim 10$ эффект увеличения скорости ионизации существен уже при $I_n^k / T_e \gg 2$, что для $T_e \approx 1$ кэВ соответствует наиболее представленным ионам [см. (18) и последующий текст]. Анало-

гичное увеличение имеет место для скоростей возбуждения, что важно для диагностики. Отметим, что наличие убегающих электронов приводит к существенному возрастанию вклада внутренних оболочек в скорость ионизации. Существенным может оказаться увеличение скорости ионизации с возбуждением.

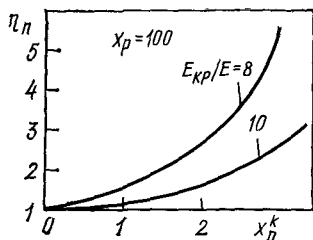


Рис. 6. Зависимость коэффициента увеличения η_n скорости ионизации n -й оболочки от отношения $x_n^k = I_n^k / T_e$

Рассмотрим тот же пример с натрийподобным ионом Fe^{+15} , что и в п. 1.2. При $T_e \approx 200 \div 400$ эВ имеем $x_n = \Delta E / T_e \approx 2 \div 4$ для возбуждения АИ состояний одного из $2p^6$ -электронов (ΔE — порог возбуждения). Для $\alpha = 0,1$ коэффициент η_{2p} для внутренней оболочки составляет $\eta_{2p} \approx 1,5 \div 4$, тогда как увеличение скорости ионизации из внешней оболочки $3s$ составляет всего лишь $\eta_{3s} \approx 1,2 \div 1,5$.

Расчеты ионизационного баланса примесей с учетом убегающих электронов иллюстрирует рис. 7 [31]. Немонотонность зависимости $\langle k \rangle$ от T_e обусловлена тенденцией к уменьшению $x^{\langle k \rangle} = I^{\langle k \rangle} / T_e$ с ростом T_e , при этом согласно рис. 6 снижается влияние убегающих электронов.

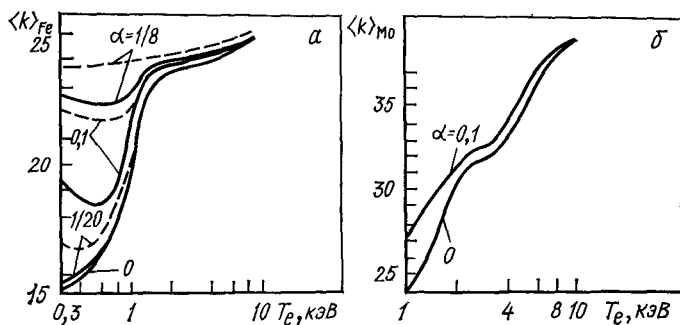


Рис. 7. Зависимость среднего заряда ионов примеси $\langle k \rangle_z$ от T_e при разных $\alpha = E / E_{KP}$:

а — для железа; б — для молибдена. Сплошные кривые соответствуют граничной энергии ускоренных электронов 100 кэВ, пунктирные — 500 кэВ.

Можно показать [30], что с увеличением размеров установки параметр E_{KP} / E должен расти:

$$E_{KP} / E \approx 3,6 \cdot 10^{-6} \sqrt{N_e \beta_0} R q, \quad (25)$$

где $\beta_0 = 8\pi N_e T_e / H_0^2 \ll 1$ — отношение давления плазмы к магнитному давлению; $q = a H_0 / H_\phi R \approx 3$ — запас устойчивости; R , a — большой и малый радиусы тора. Поэтому в проектируемых токамаках роль убегающих электронов не будет, по-видимому, столь существенной.

Перезарядка на быстрых нейтральных атомах [33—36]. Перезарядка на нейтралах является как бы дополнительным механизмом рекомбинации примесных ионов. Несмотря на малые потоки нейтральных атомов этот механизм оказывается существенным из-за больших сечений перезарядки.

Стационарную систему ионизационного баланса примеси, учитывая перезарядку (7), запишем в виде [33]

$$(\alpha^{k+1} + \xi_5^{rk+1}) y_{h+1} = y_h S^k, \quad (26)$$

где $\xi = N_0/N_e$ — относительная концентрация нейтральных атомов. Далее в (26) будем учитывать лишь быстрые нейтральные атомы, инжектируемые в плазму, концентрацию которых оценим, исходя из следующих уравнений баланса [33, 36]:

$$\frac{dN_0}{dt} = G_0 - N_0/\tau_0, \quad \tau_0 = [(S_{0e} + S_{0p} + C_{0p}) N_e]^{-1}; \quad (27a)$$

$$\frac{dN_T}{dt} = (C_{0p} N_0 - S_{eT} N_T) N_e. \quad (27b)$$

Здесь N_0, N_T — концентрации соответственно быстрых и тепловых нейтральных атомов, возникающих в результате перезарядки на протонах; G_0 — эффективное число быстрых нейтральных атомов; S_{0e}, S_{0p}, S_{eT} — скорости ионизации быстрых и тепловых нейтральных атомов электронами и протонами плазмы; C_{0p} — скорость перезарядки быстрых нейтральных атомов на протонах.

Для пучка быстрых нейтральных атомов, полностью задерживающегося в плазме в случае, когда его поперечное сечение совпадает с поперечным сечением шнура из (27), имеем [33]:

$$\bar{\xi} \simeq j/2\pi R (S_{e0} + S_{p0} + C_{p0}) N_e^2. \quad (28)$$

где $\bar{\xi} = \overline{N_0/N_e}$ — среднее значение по объему плазмы.

Отметим, что зависимость $\bar{\xi} \propto N_e^{-2}$ была обнаружена [35] и на основе численного рассмотрения движения нейтральных частиц в плазме.

Если пучок нейтральных атомов проходит плазму практически не ионизуясь, то в области воздействия пучка на плазму можно положить $N_0 = j/v_0$, где v_0 — скорость инжектируемых нейтральных атомов. Такая оценка использована в [34]. Ориентируясь на задачи, связанные с нагревом плазмы, будем далее исходить из (27), (28).

Взяв для примера энергию нейтралов $E_0 = 40$ кэВ, мощность, инжектируемую в плазму $W = 2$ МВт при поперечном сечении $S = 500$ см² (это соответствует $j = 3 \cdot 10^{17}$ см⁻², $v_0 = 2 \cdot 10^8$ см/с) при $R = 2 \cdot 10^2$ см, $S_{0e} + S_{0p} + C_{0p} \simeq 10^{-7}$ см³/с (параметры соответствуют установке PLT [37]) для средней концентрации нейтральных атомов получим $\xi \approx 3 \cdot 10^{21}/N_e^2$, что при концентрациях электронов $N_e = 10^{13} \div 10^{14}$ составляет величину $\bar{\xi} = 3 \cdot 10^{-5} \div 3 \cdot 10^{-7}$. В то же время концентрация нейтралов $\xi \approx \alpha^k/\sigma_{k0}v_0$ ($\sigma_{k0} \approx 10^{-15}$ к при $v_0 = 2 \cdot 10^8$ см·с⁻¹ [38] — сечение перезарядки), при которой скорости рекомбинации за счет перезарядки становится существенной; $\xi \approx$

$\approx 10^{-7} \div 10^{-5}$ для наиболее представленных ионов в области температур $T_e \approx 1 \div 10$ кэВ ($\alpha^{k_0} \approx 3 \cdot 10^{-13} \div 10^{-12}$ см³·с⁻¹, $k_0 \approx 5 \div 10$).

Эффект влияния перезарядки на зарядовое состояние примесей С, О, Fe, Мо показан на рис. 8. Область, где наиболее представлен водородоподобный ион, сдвигается от температур $T_e \approx 80$ эВ для угле-

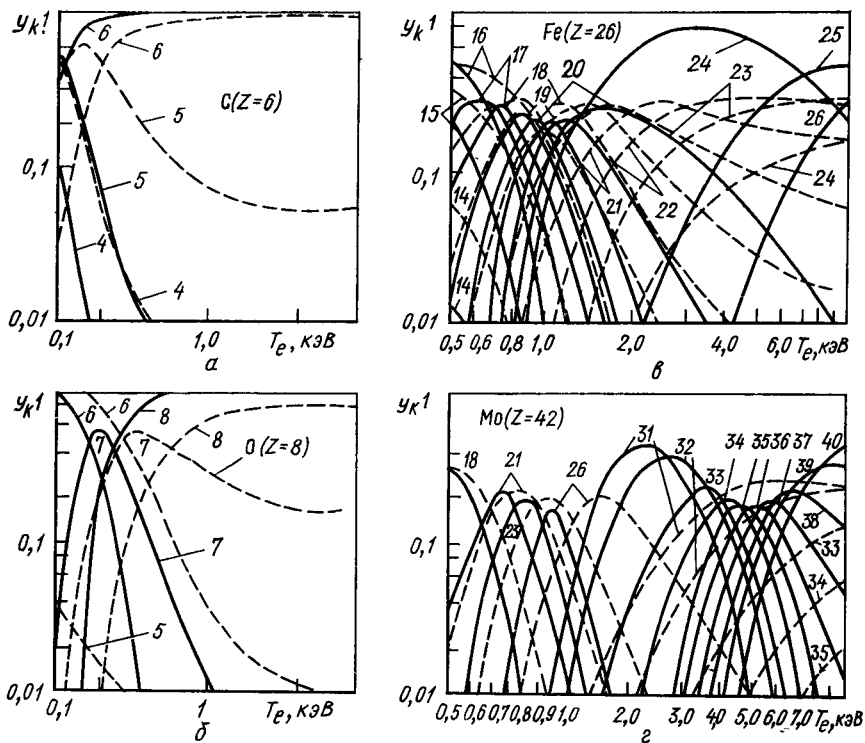


Рис. 8. Распределение ионов по кратности при $\xi=0$ (сплошные кривые) и при $\xi=10^{-5}$ (пунктир):

a — ионы углерода; *b* — ионы кислорода; *в* — ионы железа; *г* — ионы молибдена. Числа над кривыми соответствуют кратности иона

рода и $T_e \approx 200$ эВ для кислорода в область $T_e \approx 200$ эВ и $T_e \approx 400$ эВ при $\xi \approx 10^{-5}$. Для примесей Fe и Мо в области $T_e \approx 4 \div 7$ кэВ при $\xi = 10^{-5}$ наиболее представленными являются ионы Fe^{+22} и Mo^{+31} , тогда как при $\xi = 0$ — ионы Fe^{+24} и Mo^{+36} .

В заключение отметим, что тепловые нейтральные атомы также могут вносить заметный вклад в перезарядку. Это имеет место при достаточно большом радиусе инжектируемого пучка, когда выход нейтральных частиц из плазмы затруднен перезарядкой на протонах, и при больших температурах плазмы, когда сечения перезарядки тепловых нейтральных атомов на ионах примеси не малы.

§ 2. Спектроскопическая диагностика примесных ионов

В этом параграфе рассмотрены некоторые возможности пассивной диагностики примесных ионов. Речь идет о попытках восстановить концентрацию иона по локальной плотности излучения его отдельных линий. При этом, если знать экспериментальное распределение ионов по радиусу, то можно в принципе получить некоторую информацию о явлениях переноса.

Вопросы экспериментального определения локальных характеристик излучения здесь не анализируются. Рассмотрены лишь теоретические схемы, позволяющие связать характеристики излучения конкретных ионов с параметрами плазмы и заселенностью основного состояния или континуума (п. 2.1), а также модели оценки характеристик переноса по пространственно-временной картине излучения (п. 2.2).

2.1. Локальные характеристики. Модели расчета функций возбуждения. Общие вопросы. Пусть в результате обработки экспериментальных данных с необходимой точностью известна плотность энергии $U_{mm'}^k$ (Вт/см²) излучения иона X^k на переходе $m \rightarrow m'$. Реабсорбцией излучения можно пренебречь. Тогда

$$U_{mm'}^k = E_{mm'}^k N_m^k A_{m'm}^k \quad (29)$$

где $E_{mm'}^k = \hbar \omega_{mm'}^k$ — энергия излучательного перехода. Исходя из (5) и считая, что нейтральные частицы отсутствуют ($N_n = 0$), запишем (29) в виде

$$u_m^k = N_e (N_1^k \tilde{q}_m^k + N_1^{k+1} \tilde{\alpha}_m^{k+1}), \quad (30)$$

где $u_m^k = U_{mm'}/\Delta E_{mm'}$ — плотность фотонов, излучаемых на переходе $m \rightarrow m'$; $\tilde{q}_m^k(N_e, T_e) = A_{m'm}^k q_m^k / N_e$; $\tilde{\alpha}_m^k(N_e, T_e) = A_{m'm}^k \tilde{\alpha}_m^k / N_e$ — несколько иначе нормированные функции возбуждения и рекомбинации (q_m^k и α_m^k).

Выражение (30) связывает локальные плотности излучения с концентрациями ионов. Обычно рекомбинационным членом в (30) можно пренебречь, так что концентрация иона k в принципе просто восстанавливается по одной линии: $N_1^k = u_m^k / N_e \tilde{q}_m^k$. Основные трудности состоят в следующем (подробнее см. [6]):

а) необходимо измерять абсолютные значения u_m^k как функции точки пространства;

б) необходимо использовать достаточно надежные сведения о скоростях переходов и о функции распределения электронов для вычисления \tilde{q}_m^k .

Кроме того, следует, вообще говоря, одновременно измерять N_e и T_e . Впрочем, надежность анализа может существенно повыситься, если измеряется несколько линий.

Ниже приводятся результаты расчетов \tilde{q}_m^k для различных ионов (подробнее см. [6]) и кратко обсуждается возможность диагностики N_e и T_e по относительной интенсивности линий некоторых ионов.

Водородоподобные ионы [6, 39—41]. Рассмотрим плазму низкой плотности, когда заселенности подуровней ns и np (в отличие от [39]) нельзя считать пропорциональными статистическим весам. Выделим следующие группы уровней: 0 — $1s_{1/2}$; 1 — $2s_{1/2}$; 2 — $2p_{1/2}$, $2p_{3/2}$; 3 — $3s_{1/2}$; 4 — $3p_{1/2}$, $3p_{3/2}$ и т. д. Иначе говоря, пренебрежем расщеплением по j и будем считать, что состояния $np_{1/2}$, $np_{3/2}$ заселяются пропорционально статистическим весам. Наличие метастабильности $2s_{1/2}$ может исказить эту картину [40, 41] (для $Z = 12 \div 16$, $N_e \approx 10^{13} \div 10^{15} \text{ см}^{-3}$).

Решение уравнений баланса типа (1), учитывающее радиационные переходы и один столкновительный переход из состояния 1 в 2 (т. е. из $2s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2, 3/2}$), приводит к следующим выражениям для интенсивностей свечения u_i (фотон $\cdot \text{см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$) линий Ly_α и Ly_β :

$$\left. \begin{aligned} u_2 &= D_2 + D_1 / (1 + N_{\text{мин}} / N_e), \quad N_{\text{мин}} = A_1 / V_{01}^k; \\ u_4 &= D_4 A_{04} / A_4, \end{aligned} \right\} \quad (31)$$

где D_1 , D_2 и D_4 ($\text{см}^{-3} \cdot \text{с}^{-1}$) — потоки ионов соответственно на уровни $2s_{1/2}$, $2p_{1/2, 3/2}$ и $3p_{1/2, 3/2}$ за счет фоторекомбинации из ядер R_m^z ($\text{см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$) на данный уровень m , возбуждения из основного состояния V_{m0}^k ($\text{см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$) и радиационных каскадов из более высоких состояний $A_i = \sum_{m < i} A_{mi}$. Если пренебречь радиационными каскадами (их вклад $\leq 30\%$ для $n = 3$), то потоки на возбужденные уровни имеют простой вид: $D_m = N_e N_0^k (V_{m0}^k + \xi R_m^z)$, где $Z = k + 1$ — заряд ядра; $\xi = = NZ / N^k$. Распределение величины ξ (r) определяется реальным ионизационным распределением ионов, на которое оказывают влияние диффузия, нестационарность и другие процессы (см. § 1). Поэтому заранее трудно оценить роль рекомбинационного заселения уровней. Для определения характера заселения уровней (т. е. преимущественное возбуждение $\xi \rightarrow 0$ или преимущественная рекомбинация $\xi \rightarrow \infty$) в работе [6] предложено исследовать отношение $\kappa(T_e, \xi) = u_2 / u_4$ интенсивностей свечения линий Ly_α и Ly_β . Конкретный расчет (рис. 9) показал, что предельные случаи $\kappa(T_e, \xi = 0)$ и $\kappa(T_e, \xi = \infty)$ сильно отличаются друг от друга, что позволяет экспериментально разделять области, где свечение линий Ly_α и Ly_β обусловлено возбуждением водородоподобных ионов или, наоборот, рекомбинацией ядер.

Слабая зависимость функции κ от температуры при $\xi = \infty$ связана с тем, что константы скорости фоторекомбинации на оба уровня одинаково зависят от температуры, тогда как в противоположном случае зависимость экспоненциальная $\propto \exp(\Delta E / T_e)$, где ΔE — разность энергий возбуждения.

Заметим, что вынос ядер на периферию разряда должен приводить к реализации режима преимущественной рекомбинации (в свечении линий Ly_α , Ly_β) не только в центре шнура, где $\xi \rightarrow \infty$, но и в области низких температур, где скорость возбуждения этих линий экспоненциально падает, а скорость фоторекомбинации пропорциональна $T_e^{-3/2}$, тогда как в этой области $\xi \approx 1$ (см. рис. 5). Таким образом, учет фоторекомбинации может быть важен при проведении диагностики.

Вклад в свечение исследуемых переходов Ly_α и Ly_β дают также сателлиты этого перехода при ДР водородоподобных ионов. Оценки показывают, что в области низких температур $T_e/Z^2 Ry < 0,3$, их вклад может быть довольно велик.

Инжектированные и, вообще говоря, тепловые нейтральные частицы за счет перезарядки могут приводить к перераспределению за-

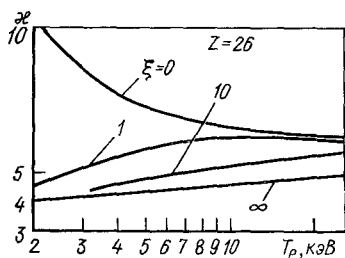
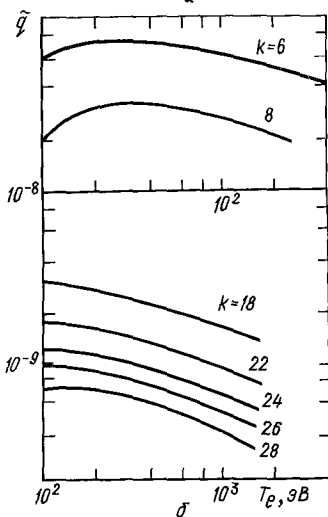
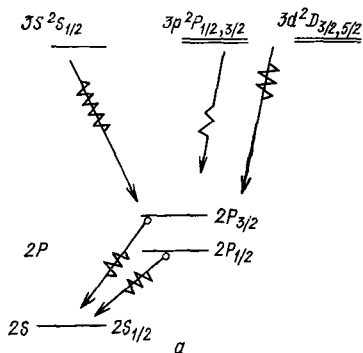


Рис. 9. Водородоподобный ион железа. Зависимость отношения интенсивностей линий Ly_α и Ly_β от T_e при различных отношениях $\xi = N^z/N^{z-1}$

Рис. 10. Литийподобные ионы:

a — схема уровней; *b* — функции возбуждения резонансного перехода



селенности подуровней nl [43, 44]. На эффекте перезарядки возможно определение концентрации примеси с помощью инжекции диагностического пучка нейтральных атомов.

Л и т и й п о д о б н ы е и о н ы [6, 42]. Литийподобные ионы (рис. 10, *a*) не имеют метастабильных уровней и поэтому для них анализ кинетики особенно прост. Корональное условие (8) выполняется здесь для всех состояний при $N_e/(k+1)^2 < < 3 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$.

Диагностику удобно проводить по свечению резонансных линий перехода $2s - 2p$. Кроме прямого возбуждения из основного состояния вклад в интенсивность свечения резонансных переходов могут дать радиационные каскады из состояний $3s$ и $3d$. Как показывают оценки, в области температур $I_h/5 < T_e < 2I_h$ (I_h — потенциал ионизации, другие температуры обычно не представляют интереса для плазмы токамаков) вклад радиационных каскадов не превосходит 10%. Интенсивность сателлитов также не дает большого вклада в свечение резонансных линий, поскольку скорости ДР литийподобных ионов за счет перехода $2p - 2s$ оказываются более чем на порядок меньше скорости прямого возбуждения этого перехода в рассматриваемой области температур.

Таким образом, функция возбуждения резонансного перехода $2s - 2p$ практически совпадает с константой скорости возбуждения этого перехода. Соответствующие графики для ионов CV, OVI, ArXVI, TiXX, CrXXII, FeXXIV представлены на рис. 10, б.

Проверить наличие режима возбуждения для переходов $2s - 2p$ и $2s - 3p$ -литийподобных ионов можно с помощью измерения отно-

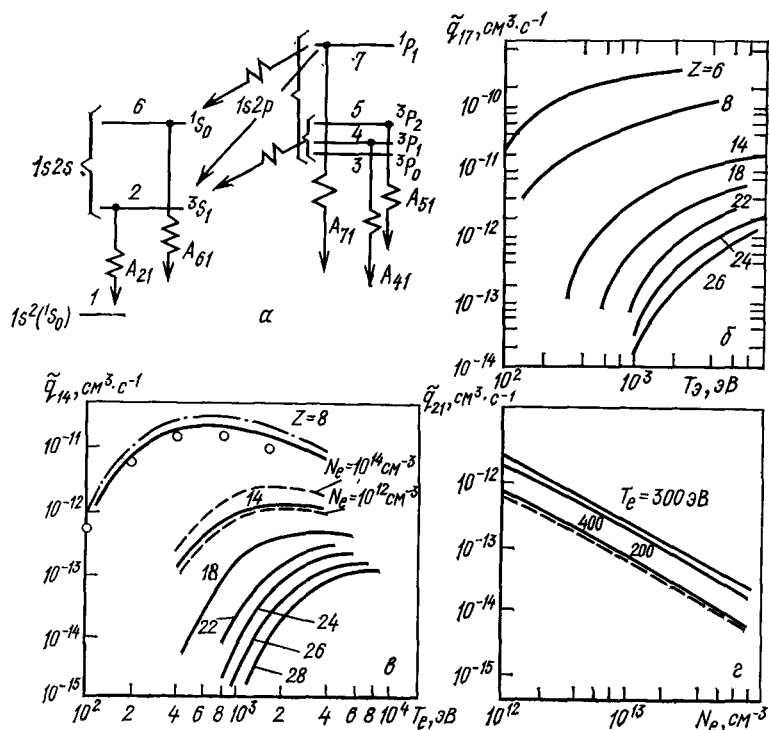


Рис. 11. Гелийподобные ионы:

а — схема уровней; б — функции возбуждения резонансного перехода; в — зависимость функции возбуждения \tilde{q}_{11} перехода $1s^2 - 1s2p^3P_1$ от T_e при $N_e \sim 10^{13} \text{ см}^{-3}$. Для иона $Z=14$ пунктирные кривые соответствуют концентрациям электронов, указанных на рисунке; для иона $Z=8$ — — — учет каскадного заселения из состояний $n > 2$; \odot — расчет с использованием данных [5]; г — зависимость функции возбуждения перехода $1S_0 - ^3S_1$, иона OVII от N_e . Пунктир соответствует аналитическому расчету \tilde{q}_{21}^k по формуле (9.3) работы [6] при $T_e = 200 \text{ эВ}$.

шения интенсивностей свечения линий $\chi(T_e, \xi) = u(2s - 2p)/u(2s - 3p)$ и сравнения его с расчетным [6] ($\xi = N_{h+1}/N_h$, k — заряд литийподобного иона).

Гелийподобные ионы [6, 45—47]. Особенность рассмотрения кинетики состоит в том, что уровень $2s(^3S_1)$ является метастабильным (рис. 11, а), причем в силу того, что энергия перехода с этого уровня в более высокие состояния значительно меньше энергии перехода из основного состояния (примерно 3% для иона CV), столкновительное заселение уровней $^3P(1s2p)$ из метастабильного состояния может быть сравнимо с заселением из основного состояния.

Кинетические уравнения ударно-излучательной модели для возбужденных уровней ряда гелийподобных ионов решались численно в работах [45—47]. Аналогичный анализ для гелийподобных ионов типичных примесей С, О, S, Ag, Ti, Cr, Fe, Ni в диапазоне плотностей $10^{12} < N_e < 10^{14}$ см⁻³ проведен в [6, 27]. Диагностику обычно ведут по наиболее ярким линиям $2p^1P - 1s^2^1S$, $2p^3P_1 - 1s^2^1S$ (рентгеновская область) и $2p^3P \rightarrow 2s^3S_1$ (для CV — ультрафиолетовая область).

Функции возбуждения синглетных (рис. 11, б) переходов оказались слабо зависящими от плотности электронов. Это означает, что для этих уровней справедливо простое корональное приближение и функция возбуждения перехода $1s^2^1S_0 - 1s2p^1P_1$ определяется скоростью возбуждения из основного состояния, т. е. $q_{71} \approx V_{71}$ (нумерация уровней соответствует рис. 11, а). При плотности $N_e \sim 10^{14}$ см⁻³ уровень $1s2s^1S$ начинает распадаться за счет столкновительного перехода на уровень 1P_1 с последующим распадом в основное состояние, что вызывает незначительный рост q_{71} . Этот эффект имеет место для ионов CV, OVII, для остальных рассмотренных ионов корональное приближение для уровней 6 и 7 (т. е. 1S_0 и 1P_1) справедливо с большой точностью.

Рассмотрим теперь функции возбуждения триплетных переходов легких примесей С и О. Используя формулу (13) для относительной заселенности метастабильного состояния $1s2s^3S_1$ после упрощений получим $q_2 \approx (V_{21} + V_{31} + V_{51}) / (A_{12}N_e^{-1} + V_{42})$. В интересующем нас диапазоне N_e и T_e $N_e > 10^{12} \gg A_{12}/V_{42}$ (при $T_e \approx 200$ эВ, $A_{12}/V_{24} \approx 10^{11}$ см⁻³) q_2 меняется слабо и составляет около 10^{-3} для иона OVII и $\sim 10^{-2}$ для иона CV. Функция возбуждения перехода $1s^2 - 1s2s^3S_1$ иона OVII $q_{21} = q_2 A_{12} / N_e = (V_{21} + V_{31} + V_{51}) A_{12} / (A_{12} + N_e V_{42})$ резко падает при $N_e > A_{12} / V_{42} \approx 10^{11} \div 10^{12}$ (рис. 11, в). Это связано с тем, что распад метастабильного состояния $1s2s^3S_1$ обусловлен в основном столкновительным переходом ($2 \rightarrow 4$) в $1s2p^3P_1$, скорость которого растет с N_e . Учитывая, что при $N_e \leq 10^{14}$ см⁻³ для всех состояний $1s2p^3P$ справедливо корональное приближение и, кроме того, что уровни $^3P_{0,2}$ радиационно распадаются преимущественно в метастабильное, а 3P_1 в основное состояние, функция возбуждения перехода $1s^2 - 1s2p^3P_1$ для легких примесей С и О имеет вид $q_{41} = V_{41} + V_{21} + V_{31} + V_{51}$. Эти же соображения поясняют выписанные ранее формулы для q_2 и q_{21} .

Для ионов с зарядом ядра $Z \geq 18$ при $N_e \leq 10^{14}$ см⁻³ корональное приближение выполнено уже и для уровня $1s2s^3S_1$, тогда $q_{21} = V_{21} + V_{31} + V_{51}$, $q_{41} = V_{41}$.

Заметим, что в рассматриваемых предельных случаях q_{41} слабо зависит от концентрации электронов N_e в диапазоне $10^{12} < N_e < 10^{14}$ см⁻³. Промежуточный случай имеет место для $Z = 14$, здесь зависимость q_{41} от N_e наиболее сильная как раз в области $N_e \sim 10^{14}$ см⁻³ (рис. 11).

Для ионов CV и OVII, как было видно ранее, все триплетные уровни $n = 2$ распадаются через переход ($1s2p^3P_1 - 1s^2^1S_0$) при $N_e \gg$

$\geq 10^{12}$ см³. То же можно сказать и о более высоких триплетных состояниях с $n > 2$. В этом случае вклад радиационных каскадов в функцию возбуждения \tilde{q}_{41} оказывается заметным и составляет примерно 30—40% (рис. 11). Однако при $Z > 18$ роль каскадов в возбуждении перехода $4 \rightarrow 1$ значительно уменьшается, так как триплетные уровни начинают распадаться не только через состояние $1s2p^3P_1$, но и через другие триплетные термы (корональная модель).

Оценки показывают, что для $Z > 18$ в подпороговой области (т. е. $T_e \leq \Delta E/3$) интенсивность диэлектронных спутников может оказаться не малой по сравнению с интенсивностью свечения резонансной линии [48, 62].

Рассмотрение рекомбинационного заселения возбужденных уровней иона OVII проведено в работе [49]. Показана возможность одновременного определения T_e и $\xi = N_{O7+}/N_{O6+}$ по двум отношениям интенсивностей $\kappa_1 = u(2^3P_1 \rightarrow 1^1S_0)/u(2^1P_1 - 1^1S_0)$ и $\kappa_2 = u(3^1P_1 - 1^1S_0)/u(2^1P_1 - 1^1S_0)$. Отношение κ_1 интеркомбинационной линии к синглетной хорошо чувствует изменение ξ , так как наличие рекомбинации, в основном диэлектронной, из водородоподобного иона дает существенный вклад в интенсивность свечения с триплетных уровней, которые плохо распадаются в основное состояние, и поэтому эффективно заселяет состояние 2^3P_1 . Отношение κ_2 можно использовать для одновременного определения T_e .

Бериллий- и борподобные ионы. Кинетика возбужденных уровней этих ионов рассматривалась в работах [50—53]. Основные трудности вычисления функций возбуждения связаны с наличием низколежащих метастабильных уровней [$2s2p^3P$ (рис. 12, а) и $2s2p^2^4P$ (рис. 12, в) для бериллий- и борподобных ионов соответственно], заселенности которых могут быть сравнимы с заселенностью основных состояний, и возбуждение с метастабильных уровней дает существенный вклад в интенсивности свечения линий, начинающихся с уровней, имеющих такое же значение спина. Таким образом, для вычисления спектральных интенсивностей линий таких ионов надо определить относительную заселенность метастабильного уровня $q_2 = N_2/N_1$ по формуле (13).

Рассмотрим особенности кинетики бериллийподобных ионов. Ограничим рассмотрение диапазоном концентраций плазмы, при которых происходит перемешивание электронами и протонами внутри состояний $2s2p^3P_J$. Это заведомо имеет место при $N_e > 10^{11}$ см⁻³ для бериллийподобных ионов легких примесей, так как вероятность распада $2s2p^3P_2 \rightarrow 2s^2^1S_0$ оказывается для OV около $2,13 \cdot 10^{-2}$ с⁻¹ (рис. 12, б). Следовательно, все $2s2p^3P_J$ -уровни можно рассматривать как одно состояние с вероятностью радиационного распада A_{12} , определяемой наиболее сильным переходом $2s2p^3P_1 \rightarrow 2s^2^1S_0$. В то же время при $N_e \leq 10^{14}$ см⁻³ все неметастабильные уровни ($m > 2$) находятся в корональных условиях. Расщепление по j для неметастабильных уровней также не учитываем, так как скорости их заселения пропорциональны статистическим весам ($2j + 1$), а вероятности радиационного распада одинаковы для всех j -подуровней и их засе-

ление пропорционально статистическому весу и для корональной модели.

При расчете заселенности метастабильного уровня для ионов CIII, OV по формуле (13) следует учитывать, что любой интеркомбинационный столкновительный переход приводит к распаду метастабильного или основного состояния, так как последующие радиационные кас-

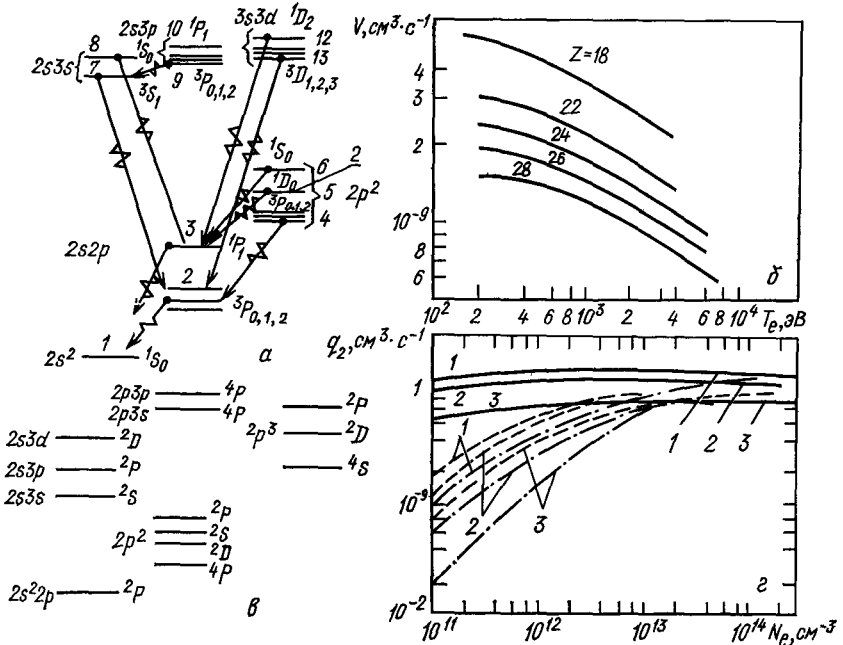


Рис. 12. Бериллийподобные и борподобные ионы:

а — схема уровней бериллийподобного иона; б — функции возбуждения перехода $2s^2 \ ^1S_0 - 2s2p^1P_1$ в бериллийподобном ионе; в — схема уровней борподобного иона; г — относительные заселенности в бериллий- и борподобных ионах CIII, OV ($2p^3P$), OIV (4P_3). Сплошные линии — ион CIII: 1 — $T_e=10$ эВ; 2 — $T_e=40$ эВ; 3 — $T_e=160$ эВ; пунктирные линии OIV: 1 — $T_e=20$ эВ; 2 — $T_e=50$ эВ; 3 — $T_e=100$ эВ; штрихпунктирные линии — ион OV. 1 — $T_e=20$ эВ; 2 — $T_e=80$ эВ; 3 — $T_e=320$ эВ

кады протекают уже без изменения спина; соответственно возбуждение без изменения спина не может менять заселение исходного основного или метастабильного состояния. На рис. 12, г представлены графики относительной заселенности метастабильного состояния $q_2(N_e)$ для ионов CIII и OV. В области $N_e \approx 10^{12} \text{ см}^{-3}$ q_2 выходит на равновесное значение и перестает зависеть от N_e . В некоторых ситуациях это равновесное значение может быть небольшим и формироваться под влиянием актов ионизации бор- и бериллийподобных ионов и диффузии (подробнее см. [6, 54]).

Значительно более простую модель диагностики получим для ионов с $Z > 18$ (AgXV, TiXIX), где $q_2 \ll 1$, так как справедливо корональное приближение и уровня 2. Для резонансного перехода $2s^2 \ ^1S_0 - 2s2p^1P_1$ функции возбуждения представлены на рис. 2.12, б

(здесь $\tilde{q}_{31} = V_{31}$). Знание значений $q_2(N_e)$ позволяет просто вычислить функцию возбуждения перехода $2s3p^3P - 2s3s^3S$, также интересного для диагностики.

Рассмотрение кинетики возбужденных уровней борподобного иона более сложно [51, 52]. Во-первых, увеличение числа валентных электронов приводит к увеличению количества термов, которые необходимо учитывать в уравнениях баланса. Во-вторых, поведение метастабильного уровня $2s2p^2^4P_J$ имеет особенности при низких плотностях электронов $N_e < 10^{12} \text{ см}^{-3}$. Например, для иона OIV при плотностях $N_e \sim 10^{11} \text{ см}^{-3}$ уровень $^4P_{3/2}$ распадается через переход $^4P_{1/2} \rightarrow ^2P_{3/2, 1/2}$, тогда как уровень $^4P_{5/2}$ распадается в основное состояние непосредственно (уровни $^2P_{1/2}$ и $^2P_{3/2}$ основного состояния обычно перемешаны, так как, например, для иона OIV вероятность радиационного распада $^2P_{3/2} - ^2P_{1/2}$ оказывается около $5,3 \cdot 10^{-4}$ [51]). При плотностях $N_e \gtrsim 10^{12} \text{ см}^{-3}$ уровни 4P_J ионов CII, OIV распределены согласно статистическим весам. Корональные уровни борподобных ионов, так же как и для бериллийподобных ионов, распределены по j согласно статистическим весам.

На рис. 12, z представлен график изменения заселенности метастабильного уровня $2s2p^2^4P$ иона OIV с ростом концентрации электронов. При плотности $N_e \geq 10^{13} \text{ см}^{-3}$ основное и метастабильное состояния заселяются примерно одинаково.

Заселенность метастабильного состояния можно определить экспериментально по отношению интенсивностей свечения двух линий: $2s2p3p^4P \rightarrow 2s2p3s^4P$ и $2s^23p^2P \rightarrow 2s^23s^2S$, которые пропорциональны заселенности метастабильного уровня, если $q_2 \approx 1$.

Кинетика более сложных углерод- и кислородподобных ионов обсуждалась в работах [55, 56].

Неон-, натрий-, магний-, алюминийподобные ионы. Интерес к таким ионам в плазме современных токамаков вызван в основном наличием примесей группы железа (Fe, Cr, Ti, Ni). В качестве иллюстрации будем рассматривать кинетику ионов FeXIV, FeXV, FeXVI и FeXVII.

Для натрийподобных ионов, так же как и для литийподобных ионов, метастабильные уровни отсутствуют. Это существенно упрощает вычисление функций возбуждения. Для резонансного перехода $3p \rightarrow 3s$ функция возбуждения (рис. 13) совпадает со скоростью возбуждения этого перехода, причем, как показывают оценки, вклад радиационных каскадов $3d \rightarrow 3p$ и $3s \rightarrow 3p$ не превышает 10%.

Вычисление спектральных интенсивностей иона FeXV (магнийподобный ион) проведено в работе [57]. В рассмотрении учитывались девять состояний, принадлежащих конфигурациям $3s^2$, $3s3p$, $3s3d$. При плотностях электронов $N_e > 10^{11} \text{ см}^{-3}$ уровни $3s3p^3P_{0,2}$ распадаются через переход $3s3p^3P_{\perp} - 3s^2^1S_0$, как и в случае бериллийподобных ионов. Функция возбуждения резонансного перехода (рис. 13), как и следовало ожидать, определяется прямым возбуждением этого перехода. Вклад радиационных каскадов также невелик, не более 10%.

Наиболее подробный анализ кинетики возбужденных уровней алюминийподобного иона железа FeXIV проведен в работе [58]. Пример-

ная схема 15 уровней этого иона изображена на рис. 13, б. Вероятность интеркомбинационного перехода $3s3p^2\ ^4P - 3s^23p^2\ ^2P\ A_{12} \approx 2,6 \cdot 10^7\ \text{с}^{-1}$ и при плотностях $N_e \lesssim 10^{14}\ \text{см}^{-3}$ все уровни находятся в корональных условиях. При плотностях $N_e > 10^{11}\ \text{см}^{-3}$ уровни $3s^23p^2\ ^2P_J$ перемешаны (вероятность радиационного распада $^2P_{3/2}$ для FeXIV порядка $64\ \text{с}^{-1}$) и поэтому основное состояние можно считать

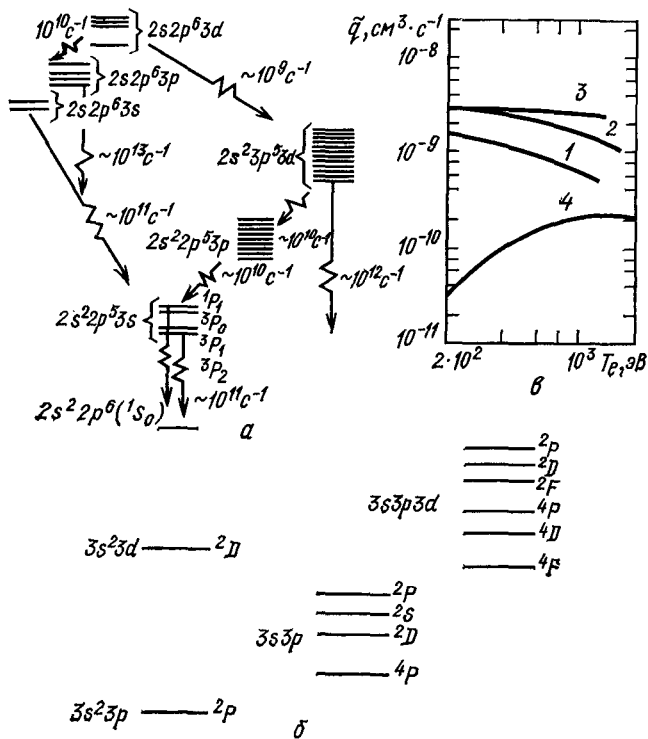


Рис. 13. Многоэлектронные ионы: а — схема уровней неонподобного иона; б — схема уровней алюминийподобного иона; в — функции возбуждения резонансных переходов:

1 — $3p-3s$ для Fe XVI; 2 — $3p-3s$ для Fe XV; 3 — $3d-3p$ для Fe XIV; 4 — $3s-2p$ для Fe XVII

одним уровнем. Функция возбуждения резонансного перехода $3s^23d^2D \rightarrow 3s^23p^2P$ (рис. 13, в) практически совпадает с его скоростью возбуждения, так как вклад радиационных каскадов менее 20%.

Влияние радиационных каскадных переходов в наиболее явном виде проявляется для неонподобных ионов [59]. Условная схема распадов возбужденных уровней неонподобного иона изображена на рис. 13, а. Наиболее яркие линии иона FeXVII, по которым удобно вести диагностику, соответствуют переходам $2p^53s^1P_{1/2} - 2p^6\ ^1S_0$ (16,77 Å) и $2p^53s^3P_{1/2} \rightarrow 2p^6\ ^1S_0$ (17,04 и 17,09 Å). Вычисления [6, 59] показывают, что для этих переходов основной вклад в интенсивности

свечения дает не прямое возбуждение $2p^6 \rightarrow 2p^53s$, а каскадные процессы типа $2p^6 \rightarrow 2p^63p$ и $2s^22p^6 \rightarrow 2s2p^63s \rightarrow 2s^22p^53s$, для свечения линий $2p^53d \rightarrow 2p^6$ существенны каскады с $2s2p^53d$ -состояний. Суммарная функция возбуждения перехода ($2p^6 - 2p^53s$) изображена на рис. 13. Отношение интенсивностей свечения линий $u_1 (16,77)/u_2 (17,04; 17,09) \approx 0,75$ слабо зависит от температуры.

О диагностике параметров плазмы. Определение N_e и T_e по интенсивности свечения ионных линий интересно тем, что указанные параметры измеряются для тех же временных и пространственных промежутков, в которых производится диагностика примесных ионов. Кроме того, этот способ диагностики может быть полезен в области низких N_e на периферии разряда, где традиционные методы (см., например [60]) обычно не работают.

Диагностику температуры можно проводить по отношению интенсивности линий, возбуждаемых электроном из одного состояния, за счет дипольного и интеркомбинационного переходов. При большой энергии электронов ($T_e \gtrsim 5\Delta E$, где ΔE — энергия перехода) отношение скоростей дипольного и интеркомбинационного возбуждения пропорционально T_e , что и позволяет вести диагностику. Поскольку для наиболее представленного иона отношение $T_e/\Delta E$ невелико, то следует рассматривать линии, возбуждаемые из метастабильного состояния. Так, в работе [27] были проведены измерения T_e по отношению интенсивностей переходов $2p^2^1D - 2s2p^1P$ и $2s3p^3P \rightarrow 2s3s^3S$ бериллийподобного иона СIII, у которого заселение верхнего уровня происходит из состояния $2s2p^3P$ (см. выше).

Определение N_e по свечению примесных ионов также возможно лишь при отклонении заселенностей уровней от корональной модели. При этом можно использовать отношение интенсивностей разрешенного и интеркомбинационного переходов, например $1s2s^3S \rightarrow 1s^2^1S$ и $1s2p \rightarrow 1s^2^1S$ для гелийподобного иона (см. рис. 11, а).

В заключение отметим, что при рассмотрении конкретных задач диагностики следует учитывать возможность наличия немаксвелловской функции распределения электронов (см. п. 1.3). Неучет убегающих электронов может привести к погрешности в определении концентрации иона, сравнимой с измеряемой величиной, при $E_{\text{вп}}/E \leq 5\Delta E/T_e$ (рис. 14). Например, при $N_e = 10^{13} \text{ см}^{-3}$, $T_e \approx 1 \text{ кэВ}$, $\bar{E} = 5 \cdot 10^3 \text{ В/см}$ получим ограничение на энергию возбуждения излучаемого перехода $\Delta E < 1 \text{ кэВ}$. Немаксвелловость может также сильно повлиять на отношение интенсивностей свечения резонансной линии к интеркомбинационной, что связано с существенно разной зависимостью от энергии электронов сечений обменных ($\sigma \propto \varepsilon^{-3}$) и резонансных ($\sigma \propto \varepsilon^{-1}$) переходов.

2.2. Пространственно-временная картина линейчатого излучения. Основные параметры плазмы, определяющие поведение примесей, — температура T_e и концентрация электронов N_e в реальных условиях зависят как от времени t , так и от расстояния до оси плазменного шнура r (обычно предполагается наличие осевой симметрии). Как показывают измерения, эти зависимости (см. ниже) имеют вид практически одинаковый для всех установок типа Токамак и режимов

разряда в них. По этой причине представляет интерес анализ влияния неоднородности и нестационарности N_e и T_e на реальную пространственно-временную картину линейчатого излучения примесей. Результаты такого анализа позволяют предложить ряд простых способов оценки по результатам спектральных измерений основных характеристик диффузии примеси и ее поступления в плазму [23, 25, 61].

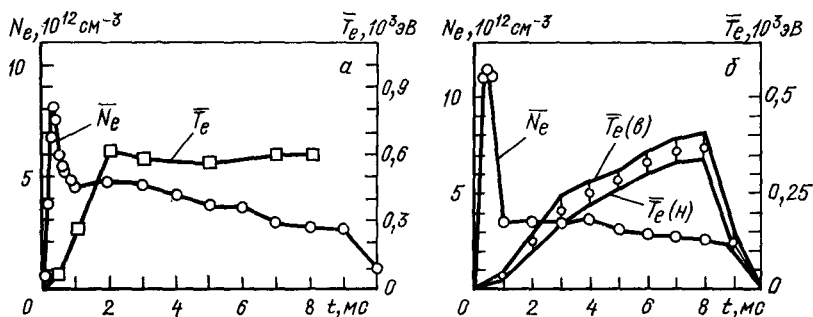


Рис. 14. Экспериментальные зависимости средних по сечению температуры и плотности электронов от времени:

a — первый режим (P1), $\bar{N}_e = 3,7 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$, $\bar{T}_e = 530 \text{ эВ}$; b — второй режим (P2), $\bar{N}_e = 3,3 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-3}$, $\bar{T}_e = 206 \text{ эВ}$ [23]

Временные зависимости для средних величин. Экспериментальные зависимости $N_e(r, t)$ и $T_e(r, t)$ обычно аппроксимируются функциями вида

$$N_e(r, t) = A(\alpha, \beta) \bar{N}_e(t) [1 - (r/a)^\alpha]^\beta. \quad (32)$$

Здесь a — радиус плазменного шнура; $\bar{N}_e(t) = \frac{1}{\pi a^2} \int_0^a N_e(\xi, t) 2\pi \xi d\xi$ —

среднее по сечению значение N_e ; $A(\alpha, \beta) = [2 \int_0^1 (1 - \xi^\alpha)^\beta \xi d\xi]^{-1}$ —

нормировочный коэффициент. Введем также среднее по сечению и за

время разряда τ значение N_e : $\bar{N}_e = \frac{1}{\tau} \int_0^\tau \bar{N}_e(t) dt$. Отметим, что аппрок-

симация (32) предполагает, что форма ($\alpha, \beta = \text{const}$) распределения N_e по радиусу во времени не меняется. Аппроксимации $T_e(r, t)$ аналогичны (32), но, вообще говоря, со своими α и β .

Ниже для выяснения влияния скорости нарастания N_e и T_e и их неоднородности на концентрацию и интенсивность излучения примесных ионов сравниваются результаты расчета этих величин при следующих различных предположениях относительно $N_e(r, t)$ и $T_e(r, t)$: 1) $N_e(r, t) = \bar{N}_e \theta(t)$, $T_e(r, t) = \bar{T}_e \theta(t)$, $\theta(t)$ — единичная функция [$\theta(t \leq 0) \equiv 0$, $\theta(t > 0) = 1$, модель мгновенного нарастания]; 2) N_e и T_e зависят от времени, но однородны, $N_e(r, t) = \bar{N}_e(t)$,

$T_e(r, t) = \bar{T}_e(t)$; 3) N_e и T_e зависят от времени и неоднородны, $N_e(r, t) = 2\bar{N}_e(t) (1 - r^2/a^2)$, $T_e(r, t) = 2\bar{T}_e(t) (1 - r^2/a^2)$. Для конкретности в качестве $\bar{N}_e(t)$ и $\bar{T}_e(t)$ взяты экспериментальные зависимости (рис. 14), полученные на установке ТМ-3 при двух характерных режимах разряда [23]. В первом режиме (Р1, рис. 14, а) N_e и T_e практически не менялись во времени, за исключением лишь первых 2 мс, что позволяет выявить роль начальной стадии разряда. Во втором режиме (Р2, рис. 14, б) средняя за время разряда температура примерно в два раза ниже, чем в Р1, что создает более благоприятные условия для обнаружения диффузии примесных ионов благодаря уменьшению времени ионизации.

Диффузию и поступление примеси в плазму на этом этапе можно не рассматривать (см. ниже), поэтому для нахождения зависимостей $N_k(r, t)$ (N_k — концентрация иона с зарядом k) численно интегрировалась система уравнений (19) без диффузионного члена $\text{div } \mathbf{j}_k$ при начальном условии $N_0(r, t = 0) = N_{00} = \text{const}$. Отметим, что в этом

случае, поскольку $\sum_{k=0}^Z \partial N_k / \partial t \equiv 0$, распределение суммарной концентрации примеси $N^* = \sum_{k=0}^Z N_k$ по сечению плазменного шнура стационарно и однородно ($N^* \equiv N_{00}$), т. е. такой расчет показывает перераспределение примесных ионов по сечению и соответствующие изменения средних по сечению величин именно в результате неоднородности распределений N_e и T_e .

Изменение временного хода средней по сечению интенсивности линии 2271 Å (переход $2p^3P - 2s^3S$) иона CV демонстрирует рис. 15, а [23]. Отметим, что дополнительный учет неоднородности N_e и T_e лишь незначительно смещает максимумы $\bar{Q}_{4,2p-2s}$ в сторону меньших времен (сравним кривые 2 и 3 рис. 15, а, б), что объясняется конкуренцией двух факторов: при неоднородном распределении N_e и T_e достижение максимума концентрации и интенсивности излучения происходит быстрее в областях с N_e и T_e , больше средних по сечению, и медленнее в областях, где они меньше этих средних. Затяжка существования иона CV в периферийной области существенно увеличивает среднюю по сечению концентрацию CV при «больших» временах ($t \geq 2$ мс для Р1, рис. 15, б), но ввиду малости температуры в периферийной области значительно меньше сказывается на средней по сечению интенсивности излучения (рис. 15, а).

Из рис. 15, а, б видно также, что экспериментально наблюдаемый спад интенсивности линий ионов СИ и CV существенно медленнее расчетного. Это объясняется тем, что приведенные на рис. 15 расчетные кривые не учитывают поступления примеси в плазму в процессе разряда и ее диффузии. Приблизительное совпадение максимумов экспериментальных и расчетных кривых типа 3 на рис. 15, а, б имеет место потому, что при столь малых временах ($t \leq 2$ мс) поступление примеси и ее диффузия еще не успевают заметно проявиться, так что поведение примеси определяется в основном процессами ионизации

и рекомбинации и, следовательно, видом зависимостей $N_e(r, t)$ и $T_e(r, t)$. Отметим, что расчет с использованием $N_e(r, t)$ и $T_e(r, t)$, близких к действительным, способен передать и «тонкую структуру» временного хода интенсивности излучения в линии. Так, на рис. 15, в расчетные кривые показывают наблюдавшееся экспериментально замедление спада интенсивности излучения при $t \approx 1$ мс, связанное с резким скачком скорости изменения N_e при $t \approx 1$ мс (см. рис. 14, б).

Оценка поступления примесей. Можно показать, что именно поступление примеси в плазму и ее диффузия ответствен-

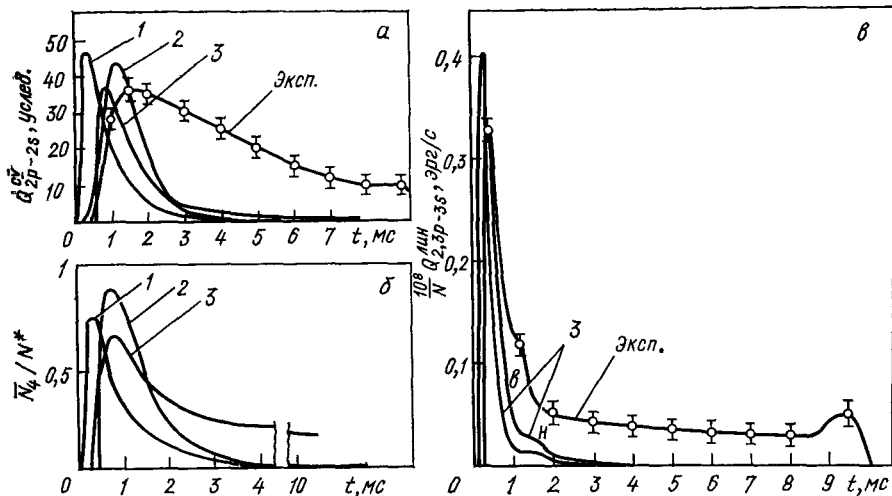


Рис. 15. Зависимость от времени интенсивности триплета (2271 Å) иона CV (а), средней по сечению относительной концентрации CV (б), интенсивности триплета $3p^3P-3s^3S$ (4647 Å) иона CIII (в); P1 — для а и б, P2 — для в:

1 — $N_e = \bar{N}_e$, $T_e = \bar{T}_e$; 2 — $N_e = \bar{N}_e(t)$, $T_e = \bar{T}_e(t)$; 3 — $N_e = 2\bar{N}_e(t)(1-r^2/a^2)$, $T_e = 2\bar{T}_e(t)(1-r^2/a^2)$; эксп. — экспериментальная кривая. Расчетные кривые нормированы путем выравнивания высоты максимумов кривых 3 и экспериментальной [23]

ны за пониженную по сравнению с расчетной (рис. 15, а, в) скорость спада средней по сечению интенсивности излучения примесных ионов. Для этого, полагая, что векторы \mathbf{j}_k имеют только радиальную составляющую, направленную к оси шнура, и зависят только от r , усредним уравнения (21) с соответствующим начальным условием по сечению шнура. В результате получим [23]

$$\frac{d\bar{N}_k}{dt} = \sum_{l=0}^z p_{kl} [N_e(\xi_l(t), t), T_e(\xi_l(t), t)] \bar{N}_l(t) + \frac{2}{a} j_0(t) \delta_{k,0}; \quad (33)$$

$$\bar{N}_k(0) = \bar{N}_{00} \delta_{k,0}, \quad (34)$$

где $0 \leq \xi_k(t) \leq a$; $\xi_k(t)$ определяется видом зависимости от r и t величин N_e , T_e , N_k ; $\sum_{l=0}^z p_{kl} N_l$ — сокращенная запись правой части (21).

Решение системы (33), (34) можно записать в виде [23]

$$\bar{N}_k(t) = \int_0^t y_k(t, t_0) \frac{2}{a} j_0(t_0) dt_0 + \bar{N}_{00} y_k(t, 0). \quad (35)$$

Здесь $y_k(t, t_0) = N_k(t, t_0)/N^*$ — решение уравнений (33) при $j_0 = 0$ и начальном условии $y_k(t, t_0) = \delta_{k,0}$.

Диффузия примесных ионов, определяющая вместе с остальными факторами вид распределений $N_k(r, t)$, неявно входит в (35) через $\xi_k(t)$. Формула (35) показывает характер зависимости временного хода средних по сечению концентраций примесных ионов от скорости поступления в плазму нейтральных атомов примеси $j_0(t)$. При больших временах, когда второе слагаемое в (35) мало, т. е. начальная «порция» (\bar{N}_{00}) примеси уже не дает вклада в \bar{N}_k , она полностью определяется притоком примеси $j_0(t)$.

Связь, даваемая (35), в принципе позволяет сравнительно строго решить и обратную задачу: найти $j_0(t)$ по экспериментально определенному из интенсивности линейчатого излучения $\bar{N}_k(t)$ и рассчитанным $y_k(t, t_0)$. При этом $\bar{N}_k(t)$ позволяют вычислить ξ_k , а y_k находятся из решения однородной системы начиная с момента времени $t = t_0$, где начальные условия имеют вид $y_{k-1} = 1$, $y_k = y_{k+1} = 0$. Восстановить $j_0(t)$ из (35) можно, например, с помощью преобразования Лапласа.

Для грубой оценки притока примеси в плазму за время t от начала разряда можно положить $p_{ki}(N_e, T_e) = p_{ki}(\bar{N}_e, \bar{T}_e) = \text{const}$ и $j_0 = \text{const}$, тогда из (35) получаем [23]

$$\bar{N}^*(t)/\bar{N}^*(t_m) \approx \bar{Q}_{k, \alpha\beta}(t) \left[\bar{Q}_{k, \alpha\beta}^{\text{макс}} \frac{1}{t} \int_0^t y_k(t') dt' \right]^{-1}. \quad (36)$$

Здесь $\bar{Q}_{k, \alpha\beta}(t)$ — средняя по сечению интенсивность линии $\alpha \rightarrow \beta$ иона k в момент времени t ; $\bar{Q}_{\alpha, \beta}^{\text{макс}}$ — максимальное значение интенсивности этой линии; t_m — момент времени, соответствующий максимуму; $y_k(t)$ — относительная концентрация иона k , рассчитанная без учета поступления примеси и ее диффузии при постоянных и однородных N_e и T_e [21, 22], равных \bar{N}_e и \bar{T}_e . С помощью (36) для первого режима разряда получается $\bar{N}_e(8 \text{ мс})/\bar{N}_e(0) \approx 3$, а для второго, $\bar{N}_e(8 \text{ мс})/\bar{N}_e(0) \approx 2 \div 2.5$. Подчеркнем, что оценочная формула (36) предполагает $j_0 = \text{const}$ и поэтому годится лишь для не слишком больших времен, когда еще не установился баланс между поступлением и уходом примеси из плазмы.

Для определения j_0 можно также использовать метод подбора [28, 63]. Например, в [63] j_0 определялось сравнением экспериментального и расчетного (при заданном j_0) среднего заряда плазмы.

Радиальные распределения и диффузия
Рассмотрим на примере углерода эволюцию во времени радиальных распределений концентраций и интенсивностей линейчатого излучения отдельных ионов легкой примеси.

Расчетная [23] (без учета диффузии и поступления) зависимость $N_{CV}(r, t)$ для P2 показана на рис. 16. Результаты такого же расчета $Q_{2,3p-3s}(r, t)$ и $Q_{4,2p-2s}(r, t)$ сравниваются с соответствующими экспериментальными данными для P2 на рис. 17.

Отметим, что возникновение максимума концентрации примесного иона в центре сечения шнура и перемещение этого максимума со временем к периферии (рис. 16, 17) будут, очевидно, наблюдаться (при

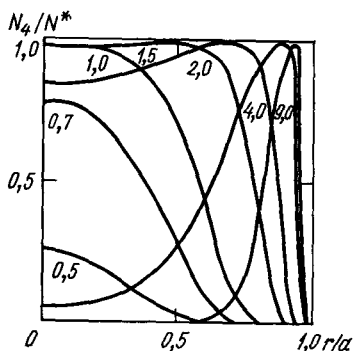


Рис. 16. Расчетное [23] пространственно-временное распределение относительной концентрации иона CV для P2. Цифры у кривых — время в мс.

неучете диффузии) для любого «куполообразного» распределения N_e и T_e , когда у оси шнура $N_e > \bar{N}_e$, $T_e > \bar{T}_e$, а на его периферии $N_e < \bar{N}_e$, $T_e < \bar{T}_e$. При этом большее значение имеет вид распределения концентрации электронов, входящей в уравнения линейно. Вариация вида распределения T_e (от параболического до плоского) лишь несущественно влияет на вид распределений концентрации и интенсивности излучения, сохраняя их основные черты — быстрое

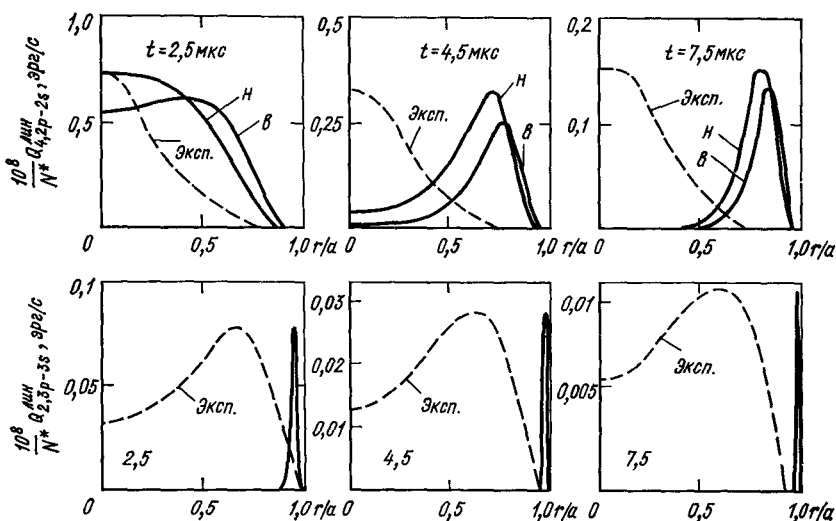


Рис. 17. Радиальные зависимости в различные моменты времени интенсивности триплета $2p^3P-2s^3S$ иона CV (верхний ряд) и интенсивности триплета $3p^3P-3s^3S$ иона CIII (нижний ряд). Экспериментальные кривые нормированы по максимумам расчетных кривых для нижней температурной кривой (н). Расчет произведен без учета диффузии и притока примеси [23]. Режим 2

«прогорание» в центре сечения и перемещение максимума на периферию. То же относится и к вариации \bar{T}_e в пределах погрешности ее экспериментального определения (см. пары расчетных кривых на рис. 17). Таким образом, резкое отличие экспериментальных и расчетных кривых (рис. 17) невозможно объяснить ни неточным знанием зависимости $T_e(r)$, ни погрешностью экспериментального определения \bar{T}_e .

В связи с обсуждением возможности объяснения вида экспериментальных распределений только неучетом в расчете *поступления* примеси отметим дополнительно следующее: если диффузии примеси нет, то ее поступление можно учесть, введя в уравнение для N_0 локальную скорость поступления $\dot{N}_0(r)$. В этом случае расстояние до оси шнура r входит в уравнения в качестве параметра и формулу (35) можно написать уже не только для средних по сечению концентраций, но и для их локальных значений:

$$N_k(r, t) = \int_0^t y_k(r, t, t_0) \dot{N}_0(r, t_0) dt_0 + N_{00}(r) y_k(r, t, 0). \quad (37)$$

Из (37) ясно, что в отсутствие диффузии поступление нейтральной примеси в плазму может влиять на вид распределения примесных ионов лишь в той области сечения плазменного шнура, где действует источник нейтральных атомов, т. е. лишь на тех расстояниях от границы шнура, на которые способны проникнуть в плазму, не ионизовавшись, нейтральные атомы примеси, летящие в нее извне. В токамаках эти расстояния составляют, как известно [29], лишь незначительную долю радиуса шнура. При имеющем место в действительности одновременном действии диффузии и поступления примеси в плазму последнее влияет на вид распределений ионов на всех расстояниях вплоть до оси шнура.

В отсутствие диффузии и поступления примеси максимум концентрации и интенсивности излучения иона k , перемещаясь с течением времени к периферии, должен в конце концов остановиться, как показывают расчеты, на расстояниях, на которых $T_e \sim (1/4 \div 1/3) \Delta E_k^{\text{ион}}$, так как при таких T_e наступает равновесие процессов ионизации и рекомбинации. В действительности этого, как правило, не наблюдается. Максимумы N_k и $Q_{k,\alpha\beta}$ тех ионов, которые диффундируют к оси*, устанавливаются на заметно меньших расстояниях, где $T_e \sim \Delta E_k^{\text{ион}}$. Это объясняется тем, что при наличии диффузии к оси устанавливается приблизительное равновесие между скоростью ионизации и скоростью поступления иона в данное место за счет диффузионного потока (см. рис. 17).

Вычисление локальных величин $\mathbf{j}_k(r, t)$ и соответствующих скоростей диффузии $\mathbf{v}_k = \mathbf{j}_k/N_k$ по экспериментально определяемым зависимостям $N_e(r, t)$, $T_e(r, t)$ и $Q_{k-1}(r, t)$, $Q_k(r, t)$, $Q_{k+1}(r, t)$ производится

* Концентрация примесей у оси шнура впервые наблюдалась в экспериментах на токамаке Т-4, где измерения проводились в мягкой рентгеновской области [78].

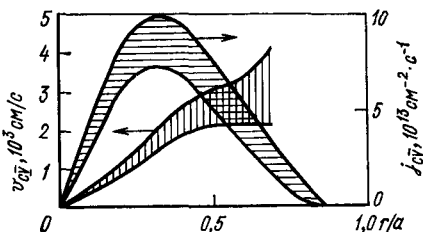
с помощью уравнения (21). Интегрируя его по r , для радиальной составляющей j_k получаем [25]:

$$j_k^r(r, t) = \frac{1}{r} \int_0^r \left(\frac{\partial N_k}{\partial t} - \sum_{l=0}^Z p_{kl} N_e \right) r' dr' \quad (38)$$

($j_k^r > 0$ соответствует диффузии к оси шнура).

Результаты вычислений по формуле (38) для иона CV [25] представлены на рис. 18. Вычисленное по данным рис. 18 время диффузии иона CV $\tau_4^{\text{диф}} \sim r/v_4^{\text{диф}}$ оказывается в рассматриваемом режиме разряда примерно равным его времени ионизации (порядка 1 мс). Для иона

Рис. 18. Плотность диффузионного потока (масштаб справа) и скорость диффузии (масштаб слева) иона CV для $t=4,5$ мс. [25]. В обоих случаях верхняя граница соответствует параболическому распределению T_e , нижняя граница — однородному распределению T_e . Режим 2



CV диффузионное время примерно на порядок больше ионизационного времени, чем и объясняется относительно меньшее влияние диффузии на вид $Q_2(r, t)$.

Изложенный способ [25] обнаружения диффузии примесных ионов и оценки ее скорости не связан с предположениями о каких-либо конкретных механизмах диффузии. Это обстоятельство, очевидно, открывает принципиальную возможность выбора между различными механизмами диффузии путем сравнения результатов применения данного способа с соответствующими расчетными зависимостями.

Подчеркнем, что формула (38) является точной в том смысле, что она есть прямое следствие уравнения непрерывности (21). Однако ввиду того, что в правой части (38) стоит разность, надежность полученных с ее помощью результатов весьма сильно зависит от точности измерений и точности знания скоростей процессов ионизации и рекомбинации (см. также [6]). Очевидно, что при примерном равенстве всех слагаемых справа в (38) возможна ошибка в знаке j_k^r , т. е. в направлении диффузионного потока иона. Избежать этого можно с помощью сравнительного анализа расчетных (без диффузии) и экспериментальных распределений $N_k(r, t)$, аналогичного проведенному выше. Кроме того, положение, как правило, облегчается тем, что в окрестности максимума (по r) $N_k(r, t)$ справа в (38) основную роль играет член, соответствующий ионизации иона k .

В заключение укажем на еще одну возможность, предоставляемую расчетом, использующим близкие к действительным зависимости $N_e(r, t)$ и $T_e(r, t)$, но без учета диффузии и поступления примеси. Для легких примесей рассчитанные таким образом средние по сечению интенсивности спектральных линий при малых временах, когда диффузия и поступление еще не успели проявить себя, достаточно хорошо

(см., например, рис. 15, а, в) совпадают с экспериментальными. Поэтому, нормируя расчетные кривые $\bar{Q}_{h,\alpha\beta}$ по максимумам экспериментальных кривых, можно получить достаточно точное значение суммарной концентрации примеси \bar{N}^* для момента времени, соответствующего максимуму. Если такая процедура проведена для нескольких ионов (например СИ и CV), то получается зависимость \bar{N}^* от времени, позволяющая оценить плотность потока примеси в плазму на начальной стадии разряда $j_0 \approx \frac{\alpha}{2} \frac{\bar{N}^*}{\Delta t}$ [23].

§ 3. Излучение примеси и баланс энергии

В этом разделе рассмотрены энергетические аспекты, связанные с излучением примесей. Представлена информация об удельных энергетических потерях (в расчете на один электрон и одну частицу примеси) — (п. 3.1). Рассматриваются требования к чистоте плазмы, обусловленные критерием положительности баланса энергии термоядерной электростанции (п. 3.2). Приведены данные по летальным концентрациям примесей (концентрациям, при которых положительный энергобаланс уже невозможен).

3.1. Излучательные потери на многозарядных ионах. Суммарная мощность излучательных потерь $Q_{\text{сум}}^Z$ на примесных ионах Z из единицы объема плазмы складывается из линейчатого $Q_{\text{лин}}^Z$, фоторекомбинационного $Q_{\text{фот}}^Z$ и тормозного $Q_{\text{торм}}^Z$ излучения, а также излучения, сопровождающего диэлектронную рекомбинацию $Q_{\text{д.рек}}^Z$ и перезарядку $Q_{\text{пер}}^Z$. Удобно пользоваться удельными величинами $\tilde{Q}_Z = Q_Z/N_e N_Z$, нормированными на одну пару: примесный атом — электрон. Выражения для $Q_{\text{лин}}^Z$, $Q_{\text{фот}}^Z$, $Q_{\text{торм}}^Z$ и $Q_{\text{пер}}^Z$ через энергии и скорости переходов, а также через заселенности уровней, приведены в приложении.

Стационарная корональная модель [9, 16—18, 65—73]. Наиболее подробные расчеты излучательных потерь в рамках стационарной корональной модели (когда $\tilde{Q}_{\text{сум}}^Z$ зависит только от T_e) проведены в работе [18], где представлены данные для 47 элементов с $2 \leq Z \leq 92$ в интервале температур $2 \cdot 10^{-3} < T_e < 10^2$ кэВ. Результаты сведены в таблицы коэффициентов для полиномиальных аппроксимаций величин $\tilde{Q}_{\text{сум}}^Z(T_e)$ радиационных потерь; $\langle k \rangle_{Z,T}$ — среднего заряда иона и $\langle k^2 \rangle_{Z,T}$ — среднего квадрата заряда иона. Рисунок 19 иллюстрирует зависимость $\tilde{Q}_{\text{сум}}^Z$ от T_e для практически наиболее интересных примесей С, О, Fe, Мо, W. Обсудим качественные особенности этих зависимостей.

Максимумы $\tilde{Q}_{\text{сум}}^Z(T)$ возникают при температурах, для которых наиболее представленными ионами являются щелочноподобные и близкие к ним. При продвижении в область высоких температур — это Mg-, Na-, а затем Be-, Li-подобные ионы. В максимумах основной вклад дают (несмотря на малую величину ΔE) переходы с $\Delta n = 0$,

поскольку для них велики сечения возбуждения. Минимумам соответствуют наиболее представленные ионы с электронной оболочкой благородного газа (Ne, Ne и т. д.). Энергии возбуждения этих ионов аномально велики и поэтому при температуре, соответствующей их появлению (см. рис. 2), скорости возбуждения малы. С повышением T_e в областях между минимумами и максимумами основной вклад вносят переходы с $\Delta n = 1$, для которых зависимость от Z и T_e имеет вид

$$\tilde{Q}_{\text{лин}}^Z (\Delta n = 1) \propto Z^6 / T_e^{3/2} \text{ [9; 68].}$$

Приведем некоторые простые формулы. Когда обдирка примеси оказывается практически полной, $Q_{\text{сум}}^Z(T_e)$ хорошо аппроксимируется трехчленной формулой [68]

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_{\text{сум}} = & 1,5 \cdot 10^{-25} Z^2 T^{-1/2} + \\ & + 6 \cdot 10^{-24} Z^4 T^{-1/2} + \\ & + 8 \cdot 10^{-23} Z^6 T^{-3/2} \text{ эрг} \cdot \text{см}^3/\text{с}, \end{aligned} \quad (39)$$

учитывающей соответственно тормозное, рекомбинационное излучение в приближении голого ядра и линейчатое излучение в приближении $T_e \gg Z^2 R_y$, когда уже мало и водородоподобных ионов. Двухчленная формула [65]

$$\begin{aligned} \tilde{Q}_{\text{сум}} = & 1,5 \cdot 10^{-25} Z^2 T^{-1/2} + \\ & 5 \cdot 10^{-24} Z^4 T^{-1/2} \text{ эрг} \cdot \text{см}^3/\text{с} \end{aligned} \quad (40)$$

соответствует приближению 100%-ной обдирки, однако она дает порядковую точность вплоть до $Z = 60$ (при $T_e = 10$ кэВ), что объясняется частичной компенсацией неучета $Q_{\text{лин}}$ и завышения $Q_{\text{рек}}$ [в формулах (39) и (40) T — в эВ].

Слабая зависимость $Q_{\text{сум}}$ от T_e позволяет при грубых оценках игнорировать эту зависимость, используя среднее по интервалу $10 \leq T_e \leq 40$ кэВ значение $\langle Q_{\text{сум}}^Z \rangle$ [9]. Отклонение $\langle Q_{\text{сум}}^Z \rangle$ от $Q_{\text{сум}}^Z(T)$ не превышает 30%. Зависимость $\langle Q_{\text{сум}}^Z \rangle$ с погрешностью (5—10)% аппроксимируется подгоночной формулой

$$\langle Q_{\text{сум}}^Z \rangle = 10^{-27} \frac{0,66 (Z/10)^4}{1 + 0,85 (Z/10)^2}. \quad (41)$$

Приведем также простое выражение для $Q_{\text{лин}}^{\text{лин}}(T_e)$ в случае преобладания переходов с $\Delta n = 0$, $n_0 = 2$ [9]:

$$\tilde{Q}_{\text{лин}} = 10^{-24} (\ln T_e / \Delta E) / (Z \sqrt{T_e}) \quad (42)$$

[в (41) и (42) Q — в $\text{Вт} \cdot \text{см}^3$]. Сравнение различных результатов иллюстрирует рис. 20.

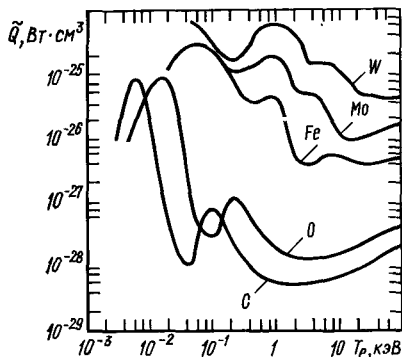


Рис. 19. Суммарные радиационные потери на типичных примесях [18]

Влияние плотности электронов [8, 21, 60]. На рис. 21 показана зависимость $\bar{Q}_Z^{\text{сум}}$ от T_e для различных элементов, рассчитанная на основе ударно-излучательной модели (см. п. 1.1) при $N_e = 10^{16} \text{ см}^{-3}$ [8, 21]. Пунктиром показан расчет на основе ко-

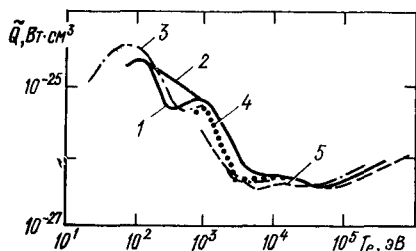


Рис. 20. Радиационные потери на железе. Сравнение разных расчетов (из работы [72]):

1 — [72] с учетом автоионизации; 2 — [72] без учета автоионизации; 3 — [18]; 4 — [17]; 5 — [80]

рональной модели. Меньшая величина потерь для ударно-излучательной модели обусловлена тем, что ступенчатая ионизация приводит к увеличению среднего заряда примесных ионов. Отметим, что наличие метастабильных уровней также может уменьшить радиационные

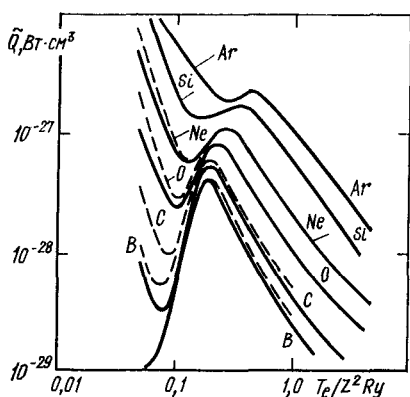


Рис. 21. Радиационные потери на линейчатом излучении для ${}^5\text{B}$, ${}^6\text{C}$, ${}^8\text{O}$, ${}^{10}\text{Ne}$, ${}^{18}\text{Ar}$ в рамках ударно-излучательной модели (сплошные кривые, $N_e = 10^{16} \text{ см}^{-3}$) и в корональном пределе (пунктирные кривые, $N_e \rightarrow 0$) [21]

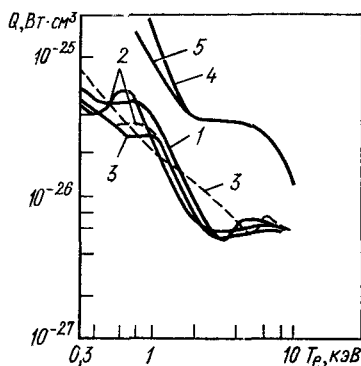


Рис. 22. Радиационные потери на примесях железа и молибдена при учете убегающих электронов [31]:

1 — Fe, $\alpha = E/E_{\text{кр}} = 0$; 2 — Fe, $\alpha = 0,1$; 3 — Fe, $\alpha = 1/20$; 4 — Mo, $\alpha = 0$; 5 — Mo, $\alpha = 0,1$. Сплошные кривые соответствуют граничной энергии ускоренных электронов 100 кэВ, пунктирные — 500 кэВ

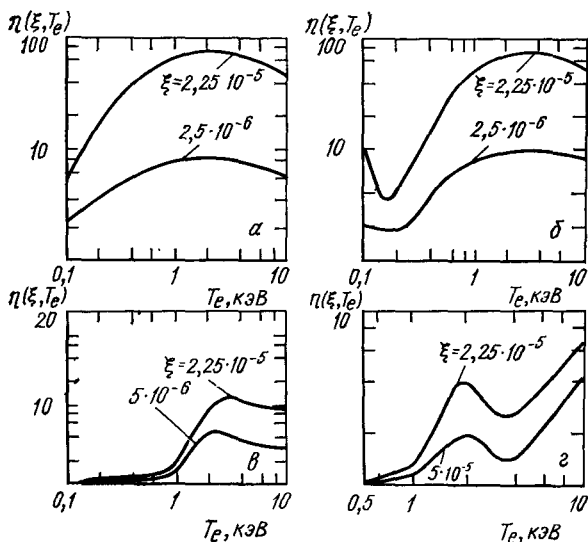
потери на легких примесях, поскольку в этом случае заметную роль может играть ступенчатая ионизация с этих уровней (см. п. 1.2).

Влияние убегающих электронов [30, 31]. Наличие убегающих электронов приводит, с одной стороны, к увеличению среднего заряда примесного иона $\langle k \rangle > Z$, с другой стороны — к увеличению скорости возбуждения как переходов с $\Delta n = 1$, так и внутренних электронных оболочек. Эти эффекты в значительной мере компенсируют друг друга, мало меняя $Q_{\text{сум}}$. В отличие от этого спектр

излучательных потерь с появлением убегающих электронов меняется заметно, смещаясь в коротковолновую область. Зависимость $Q_{\text{сум}}$ от T_e при различных значениях параметра $\alpha = E/E_{\text{кр}}$ (см. п. 1.3) показана на рис. 22.

Влияние инжектированных нейтральных атомов [33—36]. Увеличение радиационных потерь при введении в плазму пучка нейтральных атомов обусловлено следующими двумя обстоятельствами. Во-первых, в результате перезарядки иона примеси на нейтральном атоме образуется возбужденный ион, который затем

Рис. 23. Зависимость коэффициента увеличения радиационных потерь η от T_e для углерода (а); кислорода (б); железа (в); молибдена (г)



высвечивается. Во-вторых, акты перезарядки приводят к тому, что возрастает концентрация ионов низкой кратности (см. п. 1.3), которые излучают более активно. Излучательные потери на пару ион — электрон зависят в этом случае не только от T_e , но и от $\xi = N_0/N_e \propto j/N_e^2$ (см. п. 1.3). В работе [33] введен параметр $\eta_Z(\xi, T_e) = Q_{\text{сум}}(\xi, T_e)/Q_{\text{сум}}(0, T_e)$, характеризующий увеличение радиационных потерь за счет перезарядки. На рис. 23 приводятся зависимости η_Z от T_e для разных ξ . Расчеты показали, что при $1 \leq T_e \leq 10$ кэВ для примесей С, О, Fe, Мо зависимость η_Z от T_e линейна. При линейной зависимости среднее значение $\bar{\eta}(\xi, T_e)$ по магнитной поверхности плазмы (вдоль которой преимущественно перемещаются ионы) равно $\eta(\bar{\xi}_e, T_e)$ (т. е. его функции от среднего значения $\bar{\xi}$) как в случае бесконечно медленного, так и бесконечно быстрого перемешивания вдоль магнитной поверхности [36]. Это позволяет непосредственно использовать результаты расчетов $\eta(\bar{\xi}, T_e)$ для определения интегральных радиационных потерь из установки.

Увеличение радиационных потерь за счет перезарядки наиболее существенно для легких примесей, поскольку тяжелые примеси и без перезарядки приводят к появлению многоэлектронных ионов,

которые активно излучают. Отметим, что для голых ядер примесей С и О, как следует из расчетов [36], можно использовать оценку $\eta_Z \approx 4 \cdot 10^6 \xi$.

Нестационарная плазма [21—23]. Когда температура электронов нарастает быстро, так что ионизационное состояние не успевает релаксировать к стационарному значению (см. п. 2.1), то в плазме присутствуют многоэлектронные, наиболее эффективно излучающие ионы, которых может практически не быть в стационарном

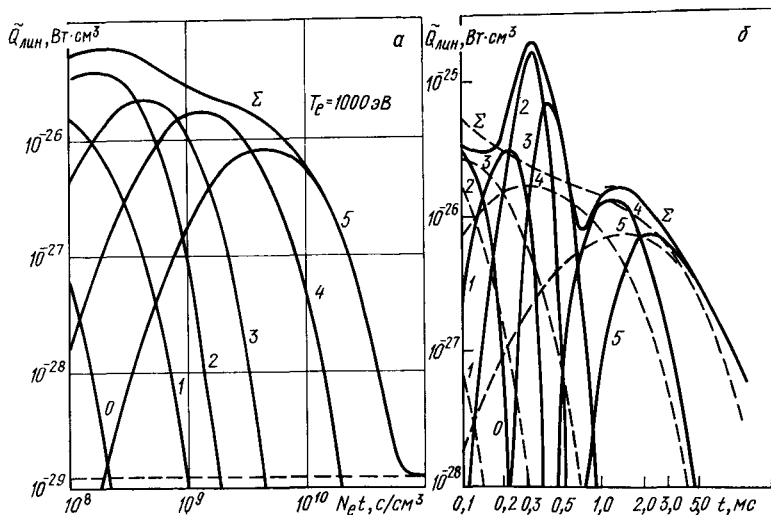


Рис. 24. Расчетная зависимость полных интенсивностей линейчатого излучения различных ионов углерода от времени (цифры у кривых — заряды ионов) и их суммы (верхние кривые, помеченные буквой Σ); рис. а и пунктир на рис. б — мгновенный подъем температуры до 1 и 0,6 кэВ соответственно, N_e и T_e однородны; сплошные кривые на рис. б — для переменных, но однородных $N_e(t)$ и $T_e(t)$ режима 1 (0 режимах см. п. 2.2) [21, 23]

пределе. В этой ситуации мощность линейчатого излучения может на два-три порядка превышать стационарный уровень при данной температуре (см. рис. 24, а, где показана зависимость $\tilde{Q}_{\text{лин}}(t)$ для углерода при мгновенном подъеме температуры от 0 до 1 кэВ [21]). Положив для примера $N_e = 10^{13} \text{ см}^{-3}$ и $t = 10^{-1} \text{ с}$, получим, что нестационарные потери $\int_0^t Q_{\text{лин}} dt$ (по данным рис. 24, а) примерно в 1,5 раза превышают потери $Q_{\text{лин}}(t \rightarrow \infty)t$. Если взять $t = \tau_{\infty} = 10^{-2} \text{ с}$ (τ_{∞} — время обдирки ионов, см. п. 1.2), это превышение приблизительно равно 5.

Результаты расчетов $\tilde{Q}_{\text{лин}}(t)$ на углероде для P1 (см. п. 2.2) [23] представлены на рис. 24, б. Учет постепенности нарастания T_e существенно меняет положения максимумов полных интенсивностей излучения всех ионов от CI до CV. На положении максимума интен-

сивности излучения иона CVI это сказывается в меньшей степени ввиду того, что этот ион «появляется» позже других и лишь частично «захватывает» участок нарастания температуры. Изменение положения и величины максимумов $\tilde{Q}_{\text{лин}}^k$ приводит к заметной немонотонности суммарной мощности линейчатого излучения $\tilde{Q}_{\text{лин}}^Z = \sum_{k=0}^Z \tilde{Q}_{\text{лин}}^k$, не меняя, однако, существенным образом полной величины нестационарных «линейчатых» радиационных потерь на углероде за все время разряда.

3.2. Критерий положительности энергобаланса с учетом излучения примесей. В настоящее время имеется два подхода к определению критерия положительности энергобаланса. Один подход (см., например, [9, 34, 73—75]) основан на рассмотрении локального уравнения энергобаланса для плазмы. При этом из требования возрастания локальной энергии можно получить ограничение снизу на произведение $N\tau_E$, где τ_E — так называемое энергетическое время жизни плазмы. Второй подход (см., например, [76, 36]) состоит в рассмотрении энергетического цикла электростанции, в ходе которого выделяющаяся энергия ядерного топлива расходуется как на поддержание термоядерных реакций, так и на получение полезной энергии. При этом из требования достаточности выделяющейся энергии для поддержания термоядерных реакций также следует ограничение снизу на $N\tau_E$.

Локальный подход, вообще говоря, не характеризует возможности создания термоядерной электростанции. В частности, он не учитывает необходимости покрытия энергетических расходов на дополнительные методы нагрева (см. [36] и ниже). Поэтому далее мы будем исходить из рассмотрения энергетического цикла. Результаты расчетов по формулам локального рассмотрения [9, 34, 75] также будут использованы. Дело в том, что если придать в этих формулах некоторым параметрам другой физический смысл и ограничить их область изменения (см. ниже), то условие на $N\tau_E$ для локального подхода совпадет с аналогичным критерием для энергетического цикла электростанции.

Б а л а н с э н е р г и и. Итак, рассмотрим баланс энергии реактора, действующего циклически: нагрев плазмы — стационарная фаза — охлаждение плазмы. Закон сохранения энергии запишем в виде

$$W_{\text{доп. нагр}} + \eta_c W_{\text{синт}} = E_{\text{внутр}} + E_{\text{изл.}} \quad (43)$$

Здесь $W_{\text{доп. нагр}}$ — энергия, полученная плазмой от внешних нагревателей — пучка нейтралов, источника СВЧ-излучения и т. п.; $\eta_c W_{\text{синт}}$ — термализуемая в плазме часть энергии синтеза; $E_{\text{внутр}}$ — внутренняя энергия плазмы; $E_{\text{изл.}}$ — энергия, потерянная плазмой в виде излучения.

Для получения критерия положительности энергобаланса свяжем $W_{\text{доп. нагр}}$ с энергией $W_{\text{цикл}}$, которая может быть получена от самой плазмы за цикл действия реактора:

$$W_{\text{цикл}} = E_{\text{внутр}} + E_{\text{изл.}} + (1 - \eta_c) W_{\text{синт.}} \quad (44)$$

Если $\eta_T W_{\text{цикл}}$ — та часть энергии плазмы, которая может быть утилизирована (η_T в частности включает КПД тепловой машины), $(1 - \varepsilon) \eta_T W_{\text{цикл}}$ — энергия, отданная потребителю и η_H — КПД «нагревателей», то [36]

$$W_{\text{доп, нагр}} = \eta_H \varepsilon \eta_T W_{\text{цикл}}. \quad (45)$$

Баланс энергии является положительным (есть, что отдать потребителю), если равенства (43) и (45) выполнены уже при $\varepsilon < 1$, т. е.

$$\varepsilon \eta_T \eta_H W_{\text{цикл}} + \eta_C W_{\text{синт}} \geq E_{\text{внутр}} + E_{\text{изл}}. \quad (46)$$

Используя (44), соотношение (46) можно переписать в виде

$$X W_{\text{синт}} \geq E_{\text{внутр}} + E_{\text{изл}}; \quad (47)$$

$$X = [\varepsilon \eta_T \eta_H / (1 - \varepsilon \eta_T \eta_H) + \eta_C]. \quad (48)$$

Величина X определяет суммарную долю энергии термоядерного синтеза, расходуемую на нагрев плазмы и компенсацию потерь энергии на излучение. Назовем ее коэффициентом возврата энергии (КВЭ), полученной от термоядерных реакций. Использование специального названия для X представляется оправданным, так как все введенные КПД сгруппировались в виде универсальной комбинации X . Отметим, что нахождение принципиальных термодинамических ограничений на величины $\varepsilon \eta_T \eta_H$ и X представляет собой отдельную интересную задачу.

Рассмотрим DT-реактор: N_D , N_T , N_e и N_Z — концентрации дейтерия, трития, электронов и примеси с атомным номером Z ; $\langle v \sigma_{\text{DT}} \rangle$ — скорость DT-реакции; $E_F = 17,6$ МэВ — энергия, выделяющаяся за один акт DT-реакции; $E_\alpha = \frac{1}{5} E_F \approx 3,5$ МэВ; $E_n = \frac{4}{5} E_F \approx 14,1$ МэВ энергии α -частиц и нейтронов; τ_E — энергетическое время удержания плазмы.

Предполагая, что плазма однородна, все ее компоненты имеют одинаковую температуру T , $N_D = N_T = N/2$, в расчете на единицу объема получаем:

$$W_{\text{синт}} \equiv P_{\text{синт}} \tau_E = \frac{1}{4} N^2 \langle v \sigma_{\text{DT}} \rangle E_F \tau_E; \quad (48a)$$

$$E_{\text{внутр}} = \frac{3}{2} NT \left(2 + \sum_Z \langle k \rangle_Z f_Z + \sum_Z \tilde{f}_Z \right); \quad (49)$$

$$E_{\text{изл}} = Q_{\text{изл}} \tau_E = N^2 \tau_E \left(1 + \sum_Z \langle k \rangle_Z f_Z \right) \left(\tilde{Q}_1 + \sum_Z \tilde{Q}_Z f_Z \right). \quad (50)$$

Здесь $\langle k \rangle_Z = \sum_{k=0}^Z k N_k / N_Z$ — средний заряд ионов примеси с атомным номером Z ; $f_Z = N_Z / N$ — ее относительная концентрация; \tilde{Q}_1 и \tilde{Q}_Z — удельные излучательные потери на компонентах топлива и на примесных ионах соответственно. Относительную концентрацию примеси

можно определить «по отношению к электронам», т. е. вместо f_Z использовать $C_Z = N_Z/N_e$. Между C_Z и f_Z имеется простая связь [34]:

$$C_Z = \frac{f_Z}{1 + \sum_Z \langle k \rangle_Z f_Z}; \quad f_Z = \frac{C_Z}{1 - \sum_Z \langle k \rangle_Z C_Z}. \quad (51)$$

Искомый критерий положительного энергобаланса, используя (48) — (50), можно представить в виде (ср. [36, 77])

$$N\tau_E \geq \frac{\frac{2}{3} T \left(2 + \sum_Z \langle k \rangle_Z f_Z + \sum_Z f_Z \right)}{X \langle \sigma v_{DT} \rangle E_F/4 - \left(1 + \sum_Z \langle k \rangle_Z f_Z \right) \left(\bar{Q}_H + \sum_Z \bar{Q}_Z f_Z \right)}. \quad (52)$$

Прежде чем анализировать это выражение, обсудим кратко другой подход к нахождению критерия положительного энергобаланса.

Если исходить из требования роста внутренней энергии плазмы

$$\frac{dE_{\text{вн}}}{dt} = \eta_c P_{\text{синт}} + P_{\text{доп.нагр}} - Q_{\text{изл}} - E_{\text{вн}}/\tau_E \geq 0 \quad (53)$$

($P_{\text{синт}} = W_{\text{синт}}/\tau_E$; $P_{\text{доп.нагр}} = W_{\text{доп.нагр}}/\tau_E$ — мощности, выделяемые в единице объема плазмы), то условию (53) можно придать вид, формально совпадающий с (52). Однако вместо X в этом «локальном» критерии будет фигурировать величина

$$X_{\text{лок}} = \eta_c + P_{\text{доп.нагр}}/P_{\text{синт}}, \quad (54)$$

уже не имеющая смысла коэффициента возврата энергии в плазму. Разумеется, критерий, в котором фигурирует (54), без дополнительных условий, ограничивающих значения $X_{\text{лок}}$, не может быть использован для оценки возможности создания термоядерной электростанции. Поэтому далее будем исходить из (52), где X дается формулой (48).

Известный критерий Лоусона [76] получается из (52) при следующих предположениях: 1) примесей в плазме нет, т. е. все $f_Z = 0$; 2) продукты ядерного синтеза (как нейтроны, так и α -частицы) выходят из плазмы, т. е. $\eta_c = 0$; 3) доля утилизируемой энергии плазмы $\eta_T = 1/3$; 4) КПД устройств нагрева плазмы $\eta_H = 1$; 5) наконец, реактор работает как «демонстрационный», расходуя всю утилизованную энергию на разогрев и поддержание плазмы в горячем состоянии, т. е. $\varepsilon = 1$. КВЭ при этом составляет $X_{\text{л}} = \frac{1}{2}$ и (52) приобретает следующий вид (в отсутствие примесей $N = n_D + n_T = N_e$):

$$N_e \tau_E \geq \frac{3T}{\frac{1}{8} \langle \sigma v_{DT} \rangle_{FF} - \bar{Q}_I^{\text{орм}}}. \quad (55)$$

Зависимость от температуры правой части (55) показана на рис. 25 (кривая 1). Для табуляции использованы данные [78] о скорости DT-реакции и борновское выражение [79] для $\bar{Q}_H^{\text{орм}}$. Виден минимум

при $T \approx 22$ кэВ, значение в минимуме $0,65 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}$. По более ранним данным [76], минимум приходится на $T \approx 13$ кэВ, значение в минимуме приблизительно равно $10^{14} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}$. Поскольку различие (0,65 вместо 1) несущественно, в качестве условия положительности энергобаланса приведем общепринятый критерий Лоусона

$$N_e \tau_E > 10^{14} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}. \quad (56)$$

Лоусон ввел также величину

$$R = \frac{1}{4} \langle v \sigma_{DT} \rangle E_F N_e^2 \tau_E / (3NT + \tilde{Q}_1^{\text{торм}} N_e^2 \tau_E),$$

которая характеризует (правда, весьма оптимистично) энергетический выигрыш в результате термоядерного цикла. С помощью R критерий (55) записывается в виде $R > 2$. Отметим следующее обстоятельство: даже при $N_e \tau_E \rightarrow \infty$ значение R не слишком велико:

$$\begin{aligned} R_\infty(T) &\equiv R(N_e \tau_E \rightarrow \infty) = \\ &= \frac{1}{4} \frac{\langle \sigma_{DT} v \rangle E_F}{\tilde{Q}_n^{\text{торм}}} \lesssim 10^2. \end{aligned}$$

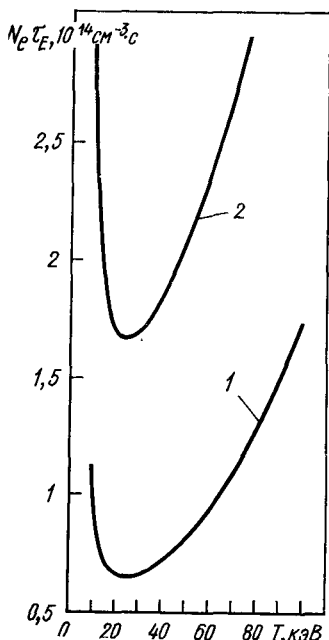


Рис. 25. Зависимость параметра $N_e \tau_E$ от температуры:

1 — по формуле (55), $X=1/2$; 2 — по формуле (61), $X=1/5$. Использованы данные [78, 79]

Этот факт указывает, в частности, на плохое качество термоядерного топлива, которое для получения энергии $E_F = 17,6$ МэВ в одном акте синтеза требует, чтобы энергия относительного движения частиц составляла $E_{кин} \approx 0,1$ МэВ.

Структура коэффициента возврата X показывает, что возможны два режима работы реактора. Если

$$\frac{\epsilon \eta_T \eta_n}{1 - \epsilon \eta_T \eta_n} \gg \eta_c, \quad \text{т. е. } \epsilon \eta_T \eta_n \gg \frac{\eta_c}{1 + \eta_c}, \quad (57)$$

то преобладающую роль в разогреве плазмы и поддержании ее температуры постоянной играют дополнительные источники нагрева. При выполнении неравенств, противоположных (57), основную роль играет саморазогрев плазмы за счет термализации энергии синтеза.

Самоподдерживающийся режим имеет место при

$$\frac{\epsilon \eta_T \eta_n}{1 - \epsilon \eta_T \eta_n} \ll \eta_c, \quad \text{т. е. } \epsilon \eta_T \eta_n \ll \frac{\eta_c}{1 + \eta_c}. \quad (58)$$

Для сравнения указанных режимов конкретизируем η_c . Поскольку нейтроны с энергией $E_n \approx 14,1$ МэВ практически свободно поки-

дают плазму, коэффициент η_c можно представить в виде

$$\eta_c = \frac{E_\alpha}{E_F} \eta_\alpha = 0,2 \eta_\alpha \leq 0,2, \quad (59)$$

где η_α — доля α -частиц, задержанных в плазме. Уход α -частиц из плазмы опасен не столько из-за потери энергии (уменьшается X), а главным образом из-за увеличенного поступления в плазму примесей, вызванного бомбардировкой α -частицами стенок. Поэтому, скорее всего, следует ориентироваться на значения η_α , близкие к единице, т. е. $\eta_c \approx 0,2$. Тогда видно, что режим (57), при котором основную роль играет дополнительный подогрев плазмы, вряд ли осуществим, так как требует выполнения крайне жестких требований к КПД утилизации энергии и ввода ее в плазму. Даже при $\varepsilon = 1$ ($\eta_c = 0,2$) получаем

$$\eta_T \eta_n > 0,17. \quad (60)$$

С этой точки зрения очевидна условность критерия Лоусона (56), который предполагает $\varepsilon \eta_T \eta_n = 1/3$.

При самоподдерживающемся режиме (58) случай $\eta_\alpha = 1$, очевидно, является оптимальным, ограничений на КПД по существу нет, они могут быть «плохими» ($\varepsilon \eta_T \eta_n \leq 0,17$), но имеет место проигрыш в коэффициенте возврата X , который принимает наименьшее возможное при этом значение $X = 0,2$ (в «пограничном» для двух режимов случае $X = 0,4$).

В отсутствие примесей критерий положительности энергобаланса при самоподдерживающемся режиме имеет вид

$$N_e \tau_E \geq \frac{3T}{\frac{1}{20} \eta_\alpha \langle v \sigma_{DT} \rangle E_F - \tilde{Q}_1^{\text{топм}}}. \quad (61)$$

Зависимость правой части (61) от температуры показывает кривая 2 на рис. 25. Взяв значение $T \approx 22$ кэВ, соответствующее минимуму получаем

$$N_e \tau_E \geq 1,7 \cdot 10^{14} \text{ см}^{-3} \cdot \text{с}, \quad (62)$$

что несколько хуже, чем в критерии Лоусона, так как $X_L = 1/2$, а в данном случае $X = 1/5$.

Отметим, что саморазогрев возможен, разумеется, лишь при достаточно больших η_α . Однако соответствующее условие

$$\eta_\alpha > 20 q_1^{\text{топм}} / \langle v \sigma_{DT} \rangle E_F = \frac{E_F / E_\alpha}{R_\infty(T)} \quad (63)$$

довольно мягкое, например, при $T = 15$ кэВ (63) дает $\eta_\alpha \gtrsim 0,1$.

Л е т а л ь н ы е к о н ц е н т р а ц и и. Прделанный выше анализ предполагал отсутствие в плазме примесей, что практически нереально. Как уже отмечалось (п. 3.1), удельная интенсивность излучения даже легкой примеси (например С) на порядки величины пре-

вышает интенсивность излучения дейтерия или трития. Это приводит к тому, что даже весьма небольшие относительные концентрации примесей существенно ужесточают критерий положительности энергобаланса. Рассмотренные в п. 3.1 отклонения от стационарного коронального равновесия (нестационарность, инжекция нейтральных атомов, диффузия и т. п.) обычно повышают излучательные потери и приводят к увеличению требований к чистоте плазмы.

Для характеристики требований к чистоте плазмы обычно используют понятия предельно допустимой и летальной концентрации при-

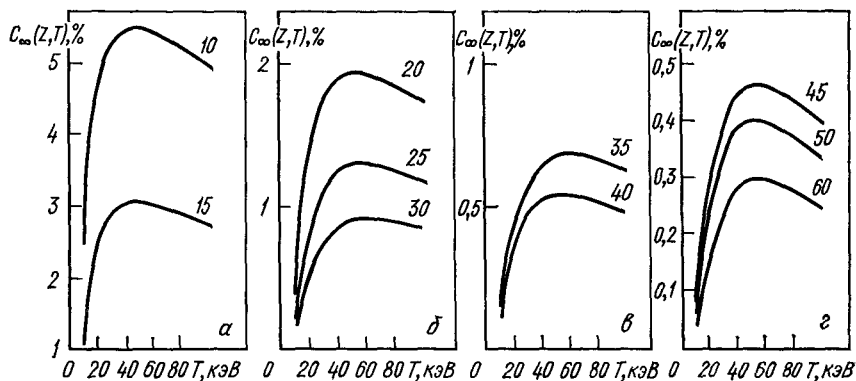


Рис. 26. Зависимость летальных концентраций от температуры, $X=0,2$ [9]. Цифры над кривыми соответствуют атомному номеру примеси

меси. Предельно допустимой $C_{\infty}(X, Z, T)$ называют такую концентрацию примеси, при которой положительный энергобаланс невозможен, а летальной $C_{\text{лет}}(X, Z)$ (она введена в [9]) — ее максимальное значение:

$$C_{\text{лет}}(X, Z) = \max_{(T)} C_{\infty}(X, Z, T). \quad (64)$$

Далее мы будем называть C_{∞} летальной, а $C_{\text{лет}}$ абсолютно летальной концентрацией. По определению C_{∞} обращает в нуль знаменатель в правой части критерия (52).

Зависимость летальных концентраций $C(0,2; Z, T)$ для самоподдерживающего режима ($X = 0,2$) показана на рис. 26 [9]. Результаты расчета абсолютной летальной концентрации $C_{\text{лет}}(0,2; Z)$ с хорошей точностью аппроксимируются простой формулой

$$C_{\text{лет}}(0,2; Z) \approx 2,75Z^{-1,67}. \quad (65)$$

Зависимость величины C_{∞} от X для типичных примесей С, Ti, Fe, Mo, W представлена на рис. 27. Эти данные [75] получены с использованием интенсивности излучения примесей, рассчитанной по корональной модели (см. пп. 1.1, 3.1), и пригодной для непучкового нагрева или пучка с не слишком большой силой тока, когда [36] $\xi = N_{\text{H}}/N_e \leq 10^{-6}$ (см. п. 3.1).

Летальные концентрации C_{∞} для C, Fe и Mo в функции от $\xi = N_H/N_e$, рассчитанные с учетом увеличения радиационных потерь, вызванного пучком, показаны на рис. 28. Видна сильная зависимость C_{∞} от ξ , приводящая к тому, что, например, концентрация железа

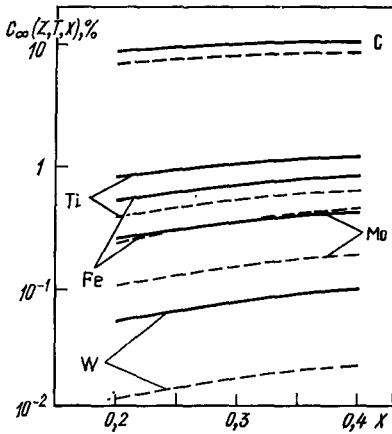


Рис. 27. Зависимость летальной концентрации C_{∞} от коэффициента возврата X при $T=10$ кэВ (пунктир) и $T=15$ кэВ (сплошные кривые)

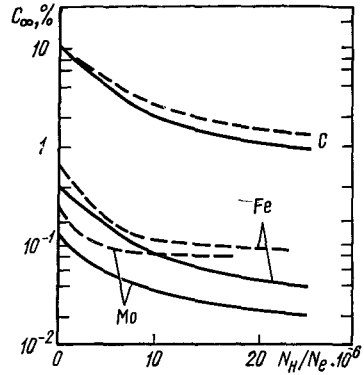


Рис. 28. Зависимость летальных концентраций от величины $(N_H/N_e) \cdot 10^{-8}$: сплошные кривые — $X=0,45$ [36]; пунктир — $X=0,67$ [34]

в $0,19\%$ при $N_H/N_e = 2,8 \cdot 10^{-6}$ оказывается столь же опасной, как и большая концентрация ($0,29\%$) молибдена при $N_H/N_e = 0$, причем при весьма высоком (практически максимально возможном) $X = 0,67$.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Ниже приведены для справок наиболее простые и универсальные выражения для скоростей элементарных актов и связанных с ними величин. Эти формулы часто используются в практических расчетах ионизационного состояния и излучения примесей в горячей плазме. Анализ методов получения и точности приведенных аппроксимаций выходит за рамки данной работы (см. специальные статьи настоящего сборника). Ориентировочно укажем, что в большинстве случаев погрешность этих формул, по-видимому, не превышает фактора $1,5-2$.

Используются следующие обозначения: k — кратность (заряд) иона; I_k^i — энергия ионизации i -й оболочки иона k ; I_k^n — энергия ионизации уровня с главным квантовым числом n иона k ; E_k^{ij} — энергия и f_k^{ij} — сила осциллятора для поглощения перехода $i \rightarrow j$ иона k ; ξ_k^i — число эквивалентных электронов и μ_k^i — число свободных мест в i -й оболочке иона k ; $E_1(x) = \int_x^{\infty} (e^{-t}/t) dt$ — интегральная экспонента; $Ry = 0,0136$ кэВ; $y_k = N_1^k/N_Z$ — относительная концентрация иона k , $N_Z = \sum_{k=0}^Z N_1^k$.

Все энергии и температура измеряются в килоэлектронвольтах, скорости процессов — в $\text{см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$; удельные мощности излучения — в $\text{Вт} \cdot \text{см}^3$.

Ионизация электронным ударом ($X_k^i = I_k^i/T_e$) [81]:

$$\langle \nu_{k}^{\text{ион}} \rangle = 8,47 \cdot 10^{-11} T_e^{-3/2} \sum_i \xi_i^i E_1(x_k^i) x_k^i. \quad (\text{П.1})$$

Фоторекомбинация с учетом захвата на возбужденные уровни [80]:

$$\langle \nu_{k}^{\text{рек}} \rangle = 5,2 \cdot 10^{-14} n_0 \sqrt{I_{k-1}^{n_0}/Ry} x_{n_0}^{3/2} e^{x_{n_0}} E_1(x_{n_0}) \times \\ \times \left\{ \frac{\mu_k^{n_0}}{2n_0^2} + \sum_{n=n_0+1}^{\infty} \frac{n_0^3 \exp(x_n)}{n^3 \exp(x_{n_0})} \frac{E_1(x_n)}{E_1(x_{n_0})} \right\}, \quad (\text{П.2})$$

где n_0 — главное квантовое число наружной оболочки рекомбинирующего иона; $x_{n_0} = I_{k-1}^{n_0}/T_e$; $x_n = I_{k-1}^n/T_e$; предполагается, что при $n > n_0$ $\mu_k^n = 2n^2$.

Диэлектронная рекомбинация [82] с поправкой [18, 71]:

$$\alpha_{k,i}^d = \sum_j \alpha_{k,ij}^d = 7,59 \cdot 10^{-14} \frac{B(k) D(k, T_e)}{T_e^{3/2}} \times \\ \times \sum_i f_{k-1}^{ij} A(y) \exp\left(-\frac{E_{k-1}^{ij}}{aT_e}\right). \quad (\text{П.3})$$

Здесь i — начальное состояние рекомбинирующего иона; $a = 1 + 0,015k^3 / (k+1)^2$; $B(k) = (k+1)^2 \sqrt{k(k+1)/(k^2+13,4)}$; $y = E_{k-1}^{ij}/Ry (k+1)$.

Величины A и D зависят от характера перехода. Для $\Delta n = 0$ они имеют вид [18]

$$A(y) = \sqrt{y}/(1 + 0,105y + 0,015y^2); \quad (\text{П.4})$$

$$D = (n_i/200)/(1 + n_i/200), \quad (\text{П.4}')$$

где $n_i^7 = 4,77 \cdot 10^{18} k^6 \sqrt{T_e}/N_e$.

Для переходов с $\Delta n = 1$

$$A(y) = 0,5 \sqrt{y}/(1 + 0,21y + 0,03y^2); \quad (\text{П.5})$$

$$D = \frac{0,0015 [(k+1) n_i]^2}{1 + 0,0015 [(k+1) n_i]^2}. \quad (\text{П.6})$$

Возбуждение электронным ударом [5]

$$\langle \sigma_{k,ij}^{\text{ex}} v \rangle = 5 \cdot 10^{-10} \frac{j_k^{ij}}{\sqrt{T_e} E_k^{ij}} E_1(x_k^{ij}) g_{ij}. \quad (\text{П.7})$$

Здесь $x_k^{ij} = E_k^{ij}/T_e$; g_{ij} — гаунт-фактор; грубо $g_{ij} \approx 0,2$, более точные выражения приведены в [5, 18].

Скорость перезарядки монохроматического пучка атомов водорода со скоростью v ($v_0 = e^2/h = 2,18 \cdot 10^8$ см/с) на ионах примеси с зарядом k [38]

$$\nu \sigma^{\text{пер}} = 2,88 \cdot 10^{-8} k \frac{v}{v_0} \ln \left[\frac{23 \sqrt{k}}{v/v_0} \ln \left(\frac{23 \sqrt{k}}{v/v_0} \right) \right], \quad (\text{П.8})$$

или приближенно для $v \approx v_0$ и $k \geq 10$

$$\nu \sigma^{\text{пер}} \approx 1,57 \cdot 10^{-8} k (v/v_0). \quad (\text{П.9})$$

Интенсивность линейчатого излучения за счет возбуждения электронным ударом из основного состояния ($m = 1$)

$$\frac{Q^{\text{лин}}}{N_e N^*} = 1,6 \cdot 10^{-16} \sum_k y_k \sum_i \Delta E_k^{1i} \langle \nu \sigma_{k,1j}^{\text{ex}} \rangle. \quad (\text{П.10})$$

Интенсивность фоторекомбинационного излучения с учетом захвата в возбужденные состояния [см. (П.2)] [80]

$$\frac{Q^{\text{рек}}}{N_e N^*} = 6,64 \cdot 10^{-33} \frac{1}{\sqrt{T_e}} \sum_k y_k \frac{\mu_k^{n_0}}{n_0} (I_k^{n_0}/Ry)^2 A;$$

$$A = 1 + \frac{2n_0^5}{\mu_k^{n_0}} \left[\left(\zeta(3) - \sum_n^{n_0} n^{-3} \right) + \right.$$

$$\left. + X_{n_0} \left[\sum_{n=n_0+1}^{\infty} n^{-3} \left(1 - \frac{n_0^2}{n^2} \right) e^{x_n} E_1(x_n) \right] \right], \quad (\text{П.11})$$

где $\zeta(3) = 1,202 \dots$; $\zeta(x)$ — дзета-функция Римана.

Интенсивность излучения, сопровождающего диэлектронную рекомбинацию [18],

$$\tilde{Q} = \frac{Q^{\text{д. рек}}}{N_e N_Z^*} = 1,6 \cdot 10^{-16} \sum_k y_k \sum_j (I_{k-1}^{n_0} + E_{k-1}^{n_0}) \alpha_{k, n_0 j}^d. \quad (\text{П.12})$$

В (П.12) учтено, что электрон захватывается на высоковозбужденные состояния, близкие к континууму.

Интенсивность излучения, сопровождающего перезарядку [36], при использовании (П.9)

$$\tilde{Q} = \frac{Q^{\text{п}}}{N_e N_Z^*} = 1,6 \cdot 10^{-16} \frac{N_H}{N_e} \sum_k \sigma_k^{\text{пер}} (I_{k-1}^{n_0} - Ry) y_k, \quad (\text{П.13})$$

где N_H — концентрация нейтральных атомов.

Интенсивность тормозного излучения [79] с учетом гаунт-фактора G_1 [83] равна

$$\tilde{Q} = \frac{Q^{\text{торм}}}{N_e N^*} = 4,87 \cdot 10^{-31} \sqrt{T_e} \sum_k k^2 y_k G_1 (T_e/k^2). \quad (\text{П.14})$$

Отметим, что G_1 в максимуме равен 1,433 и в широком интервале $1,2 \leq T_e/k^2 \leq 300$ превышает 1,3, что нередко не учитывается.

Суммарная интенсивность радиационных потерь очевидно равна

$$Q^{\text{сумм}} = Q^{\text{лин}} + Q^{\text{рек}} + Q^{\text{ДР}} + Q^{\text{пер}} + Q^{\text{торм}}. \quad (\text{П.15})$$

В нижеследующей таблице приведены ссылки на работы, содержащие полезную информацию о некоторых атомных характеристиках, сечениях и скоростях ряда элементарных актов.

Изоэлектронная серия	Энергии уровней и переходов	Вероятности радиационных переходов и силы осцилляторов	Скорости ударного возбуждения, силы столкновения
He	[84—90]	[88, 89, 91]	[92—94]
Li	[90, 95]	[91, 96]	[5, 92, 96—100]
Be	[90, 101]	[50, 91, 102, 103]	[53, 93, 94, 102, 103—134]
B	[90, 91]	[53, 91, 104]	[5, 53, 100, 104]
Ne	[56]	[56]	[92—94, 105, 106]
Na	[90, 107]	[91, 107]	[107, 57]
Mg	[57, 107, 108]	[57, 108]	[107, 57]
Al	[58, 107]	[58, 108]	[58, 109]

Некоторые данные по энергиям, вероятностям радиационных переходов и скоростям возбуждения для He-, Li-, Be-, Ne-, Na-подобных ионов можно найти в работе [6].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Макуртгер Р. — В кн.: Диагностика плазмы/ Под ред. Р. Хаддлстоуна и С. Леонарда. М.: Мир, 1967.
2. Грим Г. Спектроскопия плазмы: Пер. с англ. М.: Атомиздат, 1969.
3. Бейтс Д., Далгарно А. — В кн.: Атомные и молекулярные процессы. Под ред. Д. Бейтса: Пер. с англ. М.: Мир, 1964, с. 224.
4. Гудзенко Л. И., Яковленко С. И. Плазменные лазеры. М.: Атомиздат, 1978.
5. Вайнштейн Л. А., Собельман И. И., Юков Е. А. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. М.: Наука, 1979.
6. Марченко В. С., Яковленко С. И. Препринт ИАЭ-3147. М.: 1979; В кн.: Спектроскопия многозарядных ионов. Научн. совет по спектроскопии АН СССР. М.: 1980, с. 230.
7. Абрамов В. А., Кузнецов Э. И., Коган В. И. — Атомная энергия, 1969, т. 26, с. 516; 1972, т. 33, с. 845.
8. Galushkin Yu. I., Kogan V. I. — Nucl. Fusion, 1971, v. 11, p. 597.
9. Гервидс В. И., Коган В. И. Препринт ИАЭ-2722. М.: 1976; Письма в ЖЭТФ, 1975, т. 21, с. 329.
10. Elwert G. — Z. Naturforsch., 1952, Bd 7A, S. 432.
11. Woley R. R., Stibs D. W. N. The Outer Layers of a Star. Lond., N.-Y., 1953.
12. Абрамов В. А. — Оптика и спектроскопия, 1965, т. 18, с. 974.
13. Fujimoto T. — J. Phys. Soc. Japan, 1973, v. 34, p. 216.
14. Seaton M. J. — Mon. Not. Roy. Astr. Soc., 1959, v. 119, p. 90.
15. Burgess A., Summers H. P. — Astrophys. J., 1969, v. 157, p. 1007.
16. Drawin H. W. Atomic and Molecular Data for Fusion, Report IAEA—199, 1977, p. 202.
17. Breton C., De Micherlis C., Mattioly M. — Report EUR—CEA—FC—853, 1976; Nucl. Fus., 1976, v. 16, p. 891.
18. Post D. E. e. a. Atomic Data and Nucl. Data Tables, 1977, v. 20, p. 397.
19. Гонтис Н., Лисица В. С., Нашленас Э. Препринт ИАЭ—3353. М.: 1980.
20. Nussbaum H., Storey P. J. — Astron. Astrophys., 1975, v. 44, p. 321.
21. Galushkin Yu. I., Gervids V. I., Kogan V. I. IV Int. Conf. on Plasma Phys. and Contr. Nucl. Fus. Research, Madison, 1971, v. 2, p. 407; Nucl. Fus. Suppl., 1972, p. 193.
22. Днестровский Ю. Н. и др. Препринт ИАЭ—2678. М.: 1976.
23. Гервидс В. И., Крупин В. А. — Физика плазмы, 1975, т. 1, с. 357.
24. Stodek W. — In: Proc. 5-th Europ. Conf. on Contr. Fus. and Plasma Phys., Grenoble, 1972, v. 2, p. 1.
25. Гервидс В. И., Крупин В. А. — Письма в ЖЭТФ, 1973, т. 18, с. 106.
26. Berliso V. A. e. a. Report IAEA—CN—38/A—2, Brussel, 1979.
27. Гегечкори Н. М., Жидков А. Г., Пименов А. Б. Препринт ИАЭ-3255. М.: 1981.
28. Hawryluk R. J., Suckewer S., Hishman S. P. — Nucl. Fus., 1974, v. 14, p. 517.
29. Арцимович Л. А. Атомная физика и физика плазмы. Избр. тр. М.: Наука, 1978.
30. Марченко В. С., Яковленко С. И. — Физика плазмы, 1979, т. 5, с. 590.
31. Жидков А. Г., Марченко В. С. — Там же, 1980, т. 6, с. 1530.
32. Dreicer H. — Phys. Rev., 1960, v. 117, p. 329.
33. Крупин В. А., Марченко В. С., Яковленко С. И. — Письма в ЖЭТФ, 1979, т. 29, с. 353.
34. Абрамов В. А. и др. — Там же, с. 550.
35. Hulse R. A., Post D. E., Mikkelsen D. R. Report EV—76—C—02—3073, Plasma Phys., Lab., Princeton University, 1979.
36. Жидков А. Г., Марченко В. С., Яковленко С. И. Препринт ИАЭ-3278, М.: 1980, Физика плазмы, 1981, т. 2, с. 123.
37. Eubank H. e. a. Report IAEA—CN—37—C3, VII Int. Conf. on Plasma Phys. And Contr. Nucl. Fus. Research, Innsbruck, 1978.
38. Чибисов М. И. Препринт ИАЭ-3233. М.: 1980.
39. Bates D. R., Kingston A. E., McWhirter R. W. P. — Proc. Roy. Soc. A, 1967, v. 267, p. 297.
40. Hutcheon R. J., McWhirter R. W. P. — J. Phys., 1973, v. B6, p. 2668.

85. Sugar J., Corliss C. — J. Chem. Phys. Ref. Data, 1977, v. 6, p. 317.
86. Jounger S. M. e. a. — J. Chem. Phys. Ref. Data, 1978, v. 7, p. 495.
87. Reader J. F., Sugar J. — Ibid., 1975, v. 4, p. 353.
88. Lin C. D., Johnson W. R. — Phys. Rev., 1977, v. A15, p. 154.
89. Johnson W. R., Lin C. D. — Phys. Rev., 1976, v. A14, p. 565.
90. Selected Tables of Atomic Spectra, Nat. Bureau of Stand., U. S., 1970, NSRDS NBS 3, Sect. 3.
91. Wiese W. L., Smith M. W., Glennon B. M. Atomic Transition Probabilities, 1966, v. 1; 1969, v. 2.
92. Magge N. H. e. a. LASL Report, LA-6691, 1977.
93. Базылев В. А., Чибисов М. И. Препринт ИАЭ-3152. М.: 1979.
94. Виноградов А. В., Скобелев И. Ю., Юков Е. А. — Квантовая электроника, 1975, т. 2, № 6, с. 1165.
95. Martin G. A., Wiese W. L. — J. Phys. Chem. Ref. Data, 1976, v. 5, p. 537.
96. Flower D. R., Nussbaumer H. — Astron. Astrophys., 1975, v. 39, p. 296.
97. Davis J., Kepple P. C., Blaha M. — J. Quant. Spectros. Radiation Transfer, 1976, v. 16, p. 1043.
98. Lloyd Armstrong, Fielder W. R., Lin D. L. — Phys. Rev. A, 1976, v. 14, № 3, p. 1114.
99. Gau J. N., Henry R. J. W. — Phys. Rev., 1977, v. A16, № 3, p. 986.
100. Sampson D. M., Parks A. D. — Astrophys. J. Suppl., 1974, v. 263, p. 323.
101. Fawcett B. C. — Atom. Data and Nucl. Data Tables, 1975, v. 16, p. 135.
102. Nussbaumer H., Storey P. J. — J. Phys. B, 1979, v. 12, p. 1647.
103. Hibbert A. — J. Phys. B, 1980, v. 13, p. 1721.
104. Class R. — J. Phys. B, 1980, v. 13, p. 15.
105. Bely O., Bely F. — Solar Physics, 1967, v. 2, p. 285.
106. Flower D. R. — J. Phys. B, 1971, v. 4, p. 697.
107. Flower D. R., Nussbaumer H. — Astron. Astrophys., 1975, v. 42, p. 265.
108. Smith M. W., Wiese W. L. Atomic Transition Prob. for Forbidden Lines of the Iron Group Elements. — J. Phys. Chem. Ref. Data, 1973, v. 2, № 1.
109. Mason H. E. — Monthly Notices Roy. Astron. Soc., 1975, v. 170, p. 651.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АТОМНЫХ ЧАСТИЦ С ТВЕРДЫМ ТЕЛОМ

Ю. В. Мартыненко, А. И. Рязанов, О. Б. Фирсов,
Ю. Н. Явлинский

§ 1. Введение

Взаимодействие плазмы современных и будущих термоядерных установок с поверхностью твердого тела можно классифицировать по следующим видам элементарного воздействия*:

- 1) бомбардировка атомными частицами, ионами или быстрыми нейтральными атомами, образующимися в результате перезарядки;
- 2) бомбардировка электронами;
- 3) воздействие электромагнитного излучения;
- 4) облучение нейтронами.

Рассмотрим эти виды воздействия на примере реактора-токамака. Первая стенка представляет собой обращенную к плазме металлическую поверхность, охлаждаемую теплоотводом, или экран, работающий в режиме охлаждения за счет излучения. Предполагается, что электроны и ионы плазмы не могут уходить на стенку поперек магнитного поля. Поэтому первая стенка подвержена бомбардировке нейтральными перезарядными атомами дейтерия и трития, потоки которых, например, для реактора-токамака «Интор» [1] оцениваются примерно 10^{16} — 10^{17} атом/(см²·с), а их энергия определяется температурой плазмы в приповерхностном слое и составляет несколько сот электрон-вольт.

Основная мощность выносится из плазмы на стенку излучением, которое, как ожидается, будет составлять 10—50 Вт/см². Такие элементы токамака, как диафрагма или дивертор, доступны для заряженных частиц, движущихся вдоль магнитного поля, и подвергаются бомбардировке электронами, ионами изотопов водорода, а также ионами имеющихся примесей. Потоки ионов на приемные пластины дивертора могут достигать значений порядка 10^{18} см⁻²·с⁻¹, а энергия — несколько килоэлектрон-вольт [1].

Элементы конструкции реактора облучаются нейтронами, которые в основном ответственны за объемные радиационные повреждения. Однако воздействие нейтронов на поверхность материала мало по сравнению с повреждениями, вызываемыми атомными частицами. Коэффициент распыления нейтронами не превышает 10^{-4} атом/нейтр.

* Поверхности твердых тел в реакторах могут быть подвержены воздействию срывов разряда и униполярных дуг. Но эти процессы мы не относим к элементарным видам взаимодействия плазмы с твердым телом и не рассматриваем.

[2], что значительно меньше, чем распыление ионами. Изменение химического состава в результате ядерных реакций вблизи поверхности также мало по сравнению с изменениями, вызываемыми атомными частицами. Поскольку при изучении взаимодействия плазмы с твердым телом важны именно поверхностные эффекты, то мы не будем касаться вопросов, связанных с облучением нейтронами.

Воздействие электронов и фотонов на облучаемые поверхности в основном сводится к нагреву. В отличие от современных установок с малой тепловой нагрузкой в будущих термоядерных реакторах первая стенка (за исключением экранов), элементы дивертора или диафрагмы должны будут охлаждаться теплоотводом. Возникающий при этом температурный градиент создает термическое напряжение, которое накладывает ограничение на максимально возможную толщину материала, через который отводится тепловой поток. Это ограничение оказывается еще более жестким вследствие циклического характера выделения тепла, а заданная толщина материала диктует максимально допустимые скорости эрозии поверхности.

При облучении электронами и фотонами происходит также десорбция адсорбированных на поверхности примесей, таких, как кислород, азот, углерод. К настоящему времени экспериментаторы имеют достаточно эффективные методы предварительной очистки поверхности, и сейчас представляется, что проблема десорбции не будет особенно актуальной, поэтому мы не будем ее рассматривать.

Следует упомянуть также вторичную электронную эмиссию, которая может играть некоторую роль в балансе заряда и в установлении потенциала плазмы в приповерхностных областях. Теория вторичной электронной эмиссии развита уже давно, вошла во многие монографии и поэтому не рассматривается.

В дальнейшем все атомные частицы, в том числе быстрые перезарядные атомы, мы будем называть ионами, поскольку большинство процессов не зависят или слабо зависят от зарядового состояния бомбардирующей частицы.

Перечислим теперь процессы, которые происходят при бомбардировке поверхности твердого тела ионами:

- 1) отражение ионов от поверхности;
- 2) десорбция примесей с поверхности при ионном ударе;
- 3) внедрение ионов и выделение газов дейтерия, трития, гелия;
- 4) распыление;
- 5) блистеринг;
- 6) изменение приповерхностного слоя, подверженного ионному облучению (изменение химического и фазового состава);
- 7) химические процессы на поверхности и химическая эрозия поверхности;
- 8) неупругие процессы при взаимодействии ионов с поверхностью (изменение зарядового состояния, ионно-электронная и фотонная эмиссия).

Для термоядерных установок наибольшее значение имеют процессы, определяющие эрозию поверхности и обмен газов между поверхностью твердого тела и плазмой.

Эрозия поверхности, во-первых, определяет ресурс работы данной детали конструкции, что особенно важно для будущих термоядерных реакторов, а во-вторых, является источником примесей, которые увеличивают излучение плазмы (см. статью «Кинетика излучения многозарядных ионов в термоядерной плазме») и приводят к ее охлаждению.

Поведение дейтерия, трития и гелия при внедрении в поверхность стенки термоядерной установки важно по ряду причин.

Во-первых, атомы дейтерия и трития, отражаясь от поверхности в виде быстрых нейтральных атомов или выделяясь из стенки в результате последующей термодиффузии, могут с большой вероятностью перезарядиться при столкновении с ионами D^+ и T^+ в плазме и образовать медленный ион и быстрый нейтральный атом, который бомбардирует поверхность. Таким образом, обмен дейтерия и трития между стенкой и плазмой определяет потоки нейтральных атомов, бомбардирующих первую стенку, и тем самым скорость эрозии, а кроме того, приводит к охлаждению плазмы. Возврат дейтерия и трития со стенки в плазму (рециклинг) необходимо также учитывать при расчете подачи дейтерия и трития в установку во время импульса разряда.

Во-вторых, скапливаясь в материале стенки атомы газов существенно изменяют свойства материала и в особенности его приповерхностного слоя. Концентрация атомов водорода и гелия может достигать порядка 1 в атомных долях. При этом происходит либо охрупчивание материала (например, титана при насыщении водородом), либо блистеринг и отшелушивание поверхностного слоя. Это приводит опять-таки к эрозии поверхности и к ухудшению механических свойств конструкции вследствие объемного охрупчивания.

В-третьих, утечка трития из установки через стенку весьма нежелательна ввиду его высокой стоимости и сложности выделения из теплоносителя, а также его высокой радиоактивности. По этим же причинам следует уменьшить количество трития, «захороненного» в самой стенке.

Эрозия поверхности определяется распылением, блистерингом, химической эрозией и отчасти изменением свойств поверхностного слоя при ионной бомбардировке.

Распылению посвящен § 5, поэтому мы сейчас не останавливаемся на его обсуждении, а отметим лишь, что по современным представлениям распыление — основная причина эрозии первой стенки и дивертора.

Блистеринг — это появление пузырей на поверхности в результате образования плохорастворимых газов. При увеличении дозы облучения крышки пузырей отрываются, и на открывшейся поверхности при дальнейшем облучении возможно образование новых блистеров. Но поскольку от поколения к поколению размеры блистеров уменьшаются, то возможно образование лишь конечного числа поколений. Число поколений растет с ростом энергии ионов. Помимо образования блистеров определенной формы (чаще всего круглой) и размеров, зависящих от энергии внедряемых ионов, при определенных условиях наблюдается отшелушивание кусков поверхностного слоя неопределенной формы и значительно больших размеров, чем блистеры.

Число поколений отшелушенных слоев также значительно больше, чем число поколений блистеров. Скорость эрозии материала максимальна при отшелушивании. Важным параметром, определяющим вид эрозии поверхности при внедрении газовых ионов, является температура материала во время облучения. При увеличении температуры характер эрозии меняется следующим образом: при $T < T_1 \approx (0,1 \div 0,2) T_{\text{пл}}$ ($T_{\text{пл}}$ — температура плавления) наблюдается блистеринг, при $T_1 < T < T_2 \approx (0,4 \div 0,45) T_{\text{пл}}$ происходит отшелушивание, при $T_2 < T < T_3 \approx (0,5 \div 0,6) T_{\text{пл}}$ образуются блистеры, размеры которых уменьшаются с ростом T , и при $T > T_3$ образуется пористая поверхность, не подверженная блистерингу или отшелушиванию.

Теория блистеринга [3] рассматривает вторичные процессы в поверхностном слое мишени, происходящие после остановки ионов, такие, как диффузия внедренных атомов, вакансий и междоузельных атомов, образование пузырьков газа с большим давлением. Затем делается переход от микроскопической картины к макроскопической теории прочности, которая позволяет определить глубину трещины, отделяющей поверхностный слой, и механизмы, приводящие к образованию блистеров и отшелушиванию. В настоящее время найдены способы уменьшения блистеринга и показано, что эрозия за счет блистеринга и отшелушивания в термоядерных реакторах будет меньше, чем за счет распыления.

Химическая эрозия поверхности — процесс сугубо индивидуальный для каждого материала и бомбардирующего иона. В частности, при облучении материалов, содержащих углерод, ионами водорода образуются летучие углеводороды. Это явление объяснялось на основе кинетики химических реакций, происходящих на поверхности, и было показано, что существенная химическая эрозия происходит лишь в некотором температурном интервале (вблизи 500°C) [4].

Внедрению бомбардирующих ионов посвящен § 3. Там рассмотрены методы расчета распределения внедренных ионов и энергии, переданной ионами атомам, которая определяет количество радиационных дефектов. Эти вопросы являются исходными при изучении многих явлений, таких, как блистеринг, поведение газов в материале, изменение свойств поверхностного слоя, выделение газа. Во всех этих процессах важную роль играют распределения по глубине оставившихся атомов и радиационных дефектов.

Поведение газов в материале и их выделение определяются также многими вторичными процессами: диффузией атомов газов и дефектов, образованием и распадом подвижных и неподвижных комплексов внедренных ионов и дефектов, а также растворимостью газа в материале. Анализ этих процессов осложняется зависимостью коэффициентов диффузии от глубины, дозы облучения, энергии и плотности тока ионов вследствие радиационно стимулированной диффузии. Понятно, что теоретические исследования поведения газов в материале основываются на моделях, содержащих большее число параметров, и позволяют в лучшем случае объяснить наблюдаемые закономерности.

В настоящее время известно, что при малых дозах число внедренных ионов водорода определяется только коэффициентом отражения, а при увеличении дозы выходит на насыщение. Это происходит, когда слой, приблизительно равный глубине проникновения ионов, насыщается водородом или гелием до концентраций порядка 1 в атомных долях. Облучение гелием металлов, плохо растворяющих водород (например, нержавеющей сталь, молибден, вольфрам, алюминий) вызывает появление блистеров или отшелушивание, что приводит к выходу газа наружу. Критические дозы образования гелиевого блистеринга или отшелушивания составляют $10^{17} \div 10^{18} \text{ см}^{-2}$, увеличиваясь с ростом энергии ионов. Критические дозы водородного блистеринга приблизительно на порядок больше. При хорошей растворимости водорода (Ti, V) насыщение наступает при дозах порядка $10^{19} - 10^{20} \text{ см}^{-2}$.

При малых энергиях ($\leq 200-400 \text{ эВ}$) ионы водорода не создают смещенные атомы внутри мишени и не образуют радиационных дефектов. Это приводит к тому, что атомы водорода не захватываются радиационными дефектами — ловушками, могут диффундировать в глубь мишени и насыщения внедренными атомами не происходит. В то же время даже при малых дозах водород может выделяться из плохорастворяющей мишени вследствие диффузии.

Как уже отмечалось, коэффициент отражения определяет количество внедренных ионов в мишень при малых дозах. При больших дозах, когда идет обратное выделение газа из стенки с тепловыми скоростями, коэффициент отражения определяет высокоэнергичную часть атомов газа, поступающих со стенки обратно в плазму. Энергия атомов D и T определяет кинетику плазмы в приповерхностном слое и, в частности, вероятность перезарядки. Другим важным параметром является зарядовое состояние частиц, покидающих стенку. Действительно, если нейтральные атомы D и T могут проникнуть в плазму и перезарядиться, то заряженные частицы оказываются замагничены и могут быть отведены в дивертор. Для кинетики приповерхностного слоя, а также для разработки инжекторов представляет интерес и доля частиц, отражаемых от стенки в виде отрицательных ионов, которые для водорода являются основной составляющей отраженных частиц при малых энергиях.

С точки зрения кинетики приповерхностного слоя плазмы, возврата распыленных атомов на стенку и самораспыления, по-видимому, представляет интерес и зарядовое состояние распыляемых частиц.

Даже такое краткое и неполное введение показывает, сколь широк круг проблем, представляющих интерес при изучении взаимодействия плазмы с поверхностью. Поэтому авторы руководствовались следующими принципами при отборе материала. Во-первых, рассматривались наиболее важные, с практической точки зрения, проблемы. Во-вторых, предпочтение отдавалось первичным процессам, происходящим при движении иона в твердом теле до его остановки. В-третьих, основное внимание уделялось теоретически наиболее развитым проблемам.

§ 2. Потери энергии быстрых частиц в твердом теле

Для изучения взаимодействия плазмы с металлической поверхностью необходимо иметь информацию о законах рассеяния ионов на атомах твердого тела. При столкновениях с атомами ионы плазмы, рассеиваясь на угол θ в лабораторной системе координат, передают атому энергию

$$T = \frac{2M_i M_a}{(M_i + M_a)^2} E (1 - \cos \alpha), \quad (1)$$

где E — энергия иона; M_i и M_a — масса иона и атома соответственно; α — угол рассеяния в системе центра инерции, причем

$$\operatorname{tg} \theta = \frac{M_a \sin \alpha}{M_i + M_a \cos \alpha}. \quad (2)$$

Учитывая, что дифференциальное сечение рассеяния при $E \simeq 1 \div 10$ кэВ быстро убывает с ростом α , можно считать $\theta \ll 1$, $\alpha \ll 1$ и

$$\theta \approx \frac{M_a}{M_i + M_a} \alpha; \quad (3)$$

$$T \approx \frac{M_i}{M_a} E \theta^2. \quad (4)$$

Если материал мишени состоит из одного сорта атомов или мало отличающихся по массе, то из плазмы будут лететь на стенку либо ионы распыленных атомов, т. е. $M_i \approx M_a$ и $\operatorname{tg} \theta = \operatorname{tg} \frac{\alpha}{2}$ ($\theta = \alpha/2$), и передаваемая энергия $T = E \sin^2 \theta$, либо ионы плазмы (дейтерия, трития или гелия), которые будут падать на много «легче» атомов стенки, т. е. $M_i \ll M_a$. В этом случае $\theta \approx \alpha$.

Для определения дифференциального сечения рассеяния на угол α в системе центра инерции необходимо знание потенциала взаимодействия атомов или атома и иона, что при киловольтных энергиях одно-двух зарядного иона практически безразлично. Потенциал упругого взаимодействия атомов был рассчитан на основе теории Томаса — Ферми [5]. В [5] было показано, что уравнение Томаса — Ферми получается при варьировании двух различных гамильтонианов, причем точное значение энергии получается как минимум одного гамильтониана и как максимум другого. Это позволяет знать точность при приближенном расчете этих гамильтонианов для многих ядер и в данном случае для двух. Такой расчет был сделан в [6]; в первый гамильтониан подставлялась плотность как сумма плотностей отдельных атомов, а во второй — потенциал как сумма потенциалов отдельных атомов. Полученные потенциалы взаимодействия атомов оказались не сильно отличающимися (в пределах 5%), и средний потенциал был аппроксимирован выражением

$$U(R) = \frac{Z_a Z_b}{R} \chi_{\text{TF}}(R; \psi). \quad (5)$$

Здесь Z_a и Z_b — заряды ядер взаимодействующих атомов; R — межъядерное расстояние — все в атомных единицах ($\hbar = m_e = e = 1$);

χ_{TF} — функция экранирования Томаса — Ферми. При $R\psi \approx 10$ наибольшую точность ($\approx 10\%$) дает

$$\psi = 1,13 (Z_a^{1/2} + Z_b^{1/2})^{2/3}. \quad (6a)$$

Если главную роль в задаче играют расстояния $R\psi \approx 1$, то лучшее значение ψ , предложенное Н. Бором для потенциала $U = \frac{Z_a Z_b}{R} \exp(-R\psi)$, равно

$$\psi = 1,13 (Z_a^{2/3} + Z_b^{2/3})^{1/2}, \quad (6b)$$

а при совсем малых расстояниях $R\psi \ll 1$

$$\psi = 1,13 \cdot \frac{3}{7} \frac{(Z_a + Z_b)^{7/3} - Z_a^{7/3} - Z_b^{7/3}}{Z_a Z_b}. \quad (6в)$$

Формула (6a) дает наиболее быстрое убывание U с увеличением R . При $Z_b \ll Z_a$ все формулы дают практически одно значение для ψ , а именно $1,13Z_a^{1/3}$. При $Z_a = Z_b$ значения ψ , вычисленные по формуле (6a), больше ψ , вычисленных по формуле (6в) примерно на 20%; ψ по формуле (6б) имеет промежуточное значение.

Существенное преимущество потенциала (5) — его универсальность. Все расчеты, проведенные с этим потенциалом, связаны между собой масштабным преобразованием. Дифференциальное сечение рассеяния иона (i) на атоме (a) можно представить в виде

$$\sigma(E, \theta) = \frac{1}{\psi^2} f\left(\frac{E}{Z_i Z_a \psi}, \theta\right). \quad (7)$$

Это позволяет ввести безразмерную энергию

$$\varepsilon = \frac{E a_0}{1,13 Z_i Z_a \sqrt{Z_i^{2/3} + Z_a^{2/3}}} \frac{M_a}{e^2 M_i + M_a}, \quad (8)$$

где $a_0 = \hbar^2/mc^2$ — боровский радиус; E — энергия иона в лабораторной системе координат в обычных единицах (в отличие от предыдущих формул, где использовались атомные единицы).

Расчетные по потенциалу (5) сечения подробно проверялись в группах Н. Ф. Федоренко и Т. Эверхарда. С помощью решения обратной задачи по измеренным дифференциальным сечениям определялся потенциал рассеяния. Полученные экспериментальные потенциалы хорошо согласуются с (5) при $R\psi \ll 10$, в то время как экспоненциальное экранирование по Бору дает сильно заниженный потенциал. Однако при $R\psi \gtrsim 10$ потенциал (5) убывает медленнее экспериментально полученных.

Лучший результат дает расчет потенциала по теории Томаса — Ферми — Дирака [7]

Однако формула для соответствующей функции экранирования не была получена, поскольку при $R > 3$ статистическая теория неприменима; существенную роль играют внешние электронные оболочки и каждая пара атомов требует отдельного расчета.

В последнее время удалось получить простую формулу, аппроксимирующую потенциал Томаса — Ферми — Дирака, применимую в области, где электростатический потенциал $\varphi(r) > 0,5$ (теория Томаса — Ферми справедлива для потенциала $\varphi(r) > 10$). Функция экранирования имеет вид

$$\chi(x) = \text{sh}^2 1,8\beta/\text{sh}^2\beta(1,8 + x), \quad (9)$$

где томас-фермиевская переменная $x = 1,13Z^{1/3}r$ (r — расстояние от ядра); $\beta = 0,4Z^{-1/3}$; Z — заряд ядра.

Если в потенциале (5) использовать функцию экранирования (9) с $x = R\psi$, то таким потенциалом можно описать взаимодействие атомов до больших расстояний.

Однако для многих практических расчетов функцию экранирования удобно аппроксимировать степенной функцией. Тогда потенциал (5) имеет вид $U \sim R^{-1/m}$ ($0 < m < 1$) и сечение передачи энергии T при энергии налетающей частицы E хорошо описывается формулой

$$d\sigma(E, T) = \begin{cases} C_m E^{-m} T^{-1-m} dT, & 0 < T < T_m; \\ 0 & T > T_m, \end{cases} \quad (10)$$

$$\text{где } T_m = \frac{4M_i M_a}{(M_i + M_a)^2} E.$$

Константы C_m были подобраны в работе [8]; там же указаны границы применимости аппроксимации с разными m :

$$C_m = \frac{\pi}{2} \lambda_m a^2 \left(\frac{M_i}{M_a}\right)^m \left(\frac{2Z_i Z_a e^2}{a}\right)^{2m}, \quad m > \frac{1}{4};$$

$$C_m = \frac{\pi}{2} \lambda_m a'^2 \left(\frac{M_i}{M_a}\right)^2 (2A)^{2m}, \quad m < \frac{1}{4}, \quad (11)$$

где $a = 0,8853 a_0 (Z_1^{2/3} + Z_2^{2/3})$ (a_0 — боровский радиус); $\lambda_{1/2} = 0,327$; $\lambda_{1/3} = 1,309$; $a' = \text{const} = 0,219 \text{ \AA}$; $A = 52 (Z_i Z_a)^{3/4} \text{ эВ}$; $\lambda_0 = 24$. Случай $m < 1/4$ и в особенности $m \rightarrow 0$ соответствует аппроксимации потенциала Борна — Майера [9].

Отметим также, что большой справочный материал по потенциалам взаимодействия атомных частиц дан в [10].

Рассмотрим теперь вопрос о потерях энергии ионами при движении их в твердом теле. Потери энергии ионами складываются из потерь $(dE/dx)_n = NS_n$ при упругих столкновениях с атомами твердого тела и «неупругих» потерь $(dE/dx)_e = NS_e$, т. е. потерь на возбуждение электронов.

В общем случае вопрос о неупругих потерях энергии нельзя считать решенным до конца. Проблема осложняется также тем, что заряд частицы, движущейся в твердом теле, зависит от ее скорости. Ниже будут рассмотрены в основном потери энергии, усредненные по прицельным параметрам столкновений частицы с атомами мишени, что оправдано для частиц, не ориентированных специально относительно кристаллографических осей. Потери энергии каналированных частиц требуют специального изучения [11].

Удовлетворительные теории для неупругих потерь энергии существуют при скоростях движения частицы $v \ll v_0$ ($v_0 = Ze^2/\hbar$ — боровская скорость) и при $v \gg v_0$.

В последнем случае существует формула Бете — Блоха для потерь энергии на единицу пути

$$S_e = \frac{2\pi Z_i^2 Z_a e^4}{mv^2} \ln \frac{2mv^2}{Z_a I} = \frac{M}{m} \frac{\pi Z_i^2 Z_a e^4}{E} \ln \frac{4m}{M} \frac{E}{Z_a I}, \quad (12)$$

где Z_i — заряд иона; Z_a — атомный номер вещества; $I \approx 10$ эВ. Формула (12) справедлива для $E \gg \frac{M_i}{m} Z_a I$, когда скорость частицы много больше скорости любого из электронов в атоме.

При скоростях протонов, меньших боровской, а также скорости электронов на поверхности Ферми u_F неупругие потери энергии обусловлены поляризацией электронного газа металла. Электрический заряд, движущийся в среде, создает электромагнитное поле, которое в свою очередь влияет на его движение. Сила торможения, возникающая при таком взаимодействии (называемая силой лучистого трения), определяется диэлектрической проницаемостью среды. При движении заряженной частицы в металле ее энергия расходуется на возбуждение продольных ленгмюровских волн (эффект Черенкова).

Вычисление торможения с использованием диэлектрической проницаемости электронного газа металла [12] было проведено в ряде работ [13—17]. Задача сводится к вычислению интеграла

$$-\frac{dE}{dx} = \frac{1}{v} \frac{e^2}{\pi^2} \operatorname{Re} i \int dk \frac{\mathbf{k}\mathbf{v}}{k^2 \epsilon'(\mathbf{k}, \mathbf{k}\mathbf{v})}, \quad (13)$$

где ϵ' — продольная диэлектрическая проницаемость, полученная в приближении самосогласованного поля. При малых скоростях, когда $v \ll u_F$, сила торможения пропорциональна скорости:

$$-\frac{dE}{dx} = v \frac{2m^2 e^4}{3\pi\hbar^3} g(\beta); \quad g(\beta) = \ln \frac{\beta + \pi}{\beta} + \frac{\beta}{\pi + \beta} - 1, \quad \beta = \frac{e^2}{\hbar u_F}; \quad (14)$$

$g(\beta)$ получена в «полуклассическом» пределе. Более детальный расчет, проведенный в [16, 17], показал, что сила торможения удовлетворительно согласуется с экспериментальными данными также и при $v \approx u_F$, где поляризационные потери становятся сравнимы с потерями, описываемыми формулой Бете — Блоха.

Поляризационные потери энергии можно вычислить также исходя из картины парных столкновений движущегося иона с электроном ферми-газа:

$$-\frac{dE}{dx} = \int dp d\Omega \Delta(M_i v)_x u \frac{d\sigma(u, \alpha)}{d\Omega} f(p) [1 - f(p')], \quad (15)$$

где $\Delta(M_i v)_x$ — проекция изменения импульса иона при столкновении с электроном на направление движения иона; $u = v - p/m^*$ (p и m^* — импульс и эффективная масса электрона); $f(p)$ — функция распределения электронов; p' — импульс электрона после столкновения; α — угол рассеяния в системе центра инерции.

Интеграл (15) зависит, хотя и не сильно, от вида сечения $\frac{d\sigma}{d\Omega}(u, \alpha)$. Формула (14) в пределе $\beta \gg 1$

$$-\frac{dE}{dx} = v \frac{\pi}{3} \frac{p_F^2}{\hbar}. \quad (16)$$

получается при $d\sigma(u, \alpha)/d\Omega$, соответствующем экранированному кулоновскому потенциалу рассеяния с малым радиусом Дебая.

Для тяжелых ионов Линдхард и Шарфф [18] дали следующую формулу, вывод которой все еще не опубликован:

$$-\frac{dE}{dx} = 8\pi a_0 \xi [Z_i Z_a e^2 N / (Z_i^{2/3} + Z_a^{2/3})^{3/2}] \frac{v}{v_0}, \quad (17)$$

где $\xi = 1 \div 2$ и меняется как $Z_i^{1/6}$; a_0 и v_0 — боровский радиус и боровская скорость.

Другая формула, имеющая широкое применение, получена в [19] на основе представления об обмене электронами сталкивающихся атомов. Считается, что электрон, переходя через плоскость, разделяющую расстояние между ядрами пополам, в среднем переносит импульс, соответствующий разности скоростей ядер. Скорость обмена электронами при данном расстоянии между ядрами рассчитывалась по теории Томаса — Ферми. Согласно этой теории

$$-\frac{dE}{dx} = 7,15 N a_0 \hbar (Z_i + Z_a) v. \quad (18)$$

Для легких ионов эта формула имеет ограниченную применимость в связи с использованием теории Томаса — Ферми при ее выводе. Кроме того, требуется, чтобы Z_i и Z_a различались не более чем в четыре раза. Если эти условия соблюдаются, то формулы (17) и (18) дают значения, отличающиеся не более чем на 30%.

Экспериментально наблюдаемые потери энергии колеблются около значений, даваемых (18) с изменением Z_i и Z_a , что связано с влиянием внешних электронных оболочек. В аморфных мишенях эти колебания могут достигать 50%.

Имеется ряд попыток улучшить теорию [19]. В работе [20] результат распространен на большие отношения Z_a/Z_i и учтена кривизна траекторий сталкивающихся ионов. Периодическая зависимость $-dE/dx$ от Z_i и Z_a была учтена в рамках той же идеологии, но с использованием электронной плотности, вычисленной по методу Хартри — Фока [21] или по Слэтеру [22].

Естественно, что результаты уже не могут быть выражены простыми формулами.

Поскольку потери энергии носят статистический характер, то для характеристики неупругого торможения вводится электронный страглинг, т. е. разброс потерь энергии при столкновении с электронами, который характеризуется величиной Ω_e^2 , определяемой из соотношения

$$\frac{\overline{dE^2}}{dx} = N \Omega_e^2. \quad (19)$$

При малых скоростях ионов $(v/v_a)^2 \leq 3Z_a$

$$\Omega_e^2 = \frac{m}{M} S_e(E) E, \quad (20)$$

а при больших скоростях $(v/v_0)^2 \geq 3Z_a$

$$\Omega_e^2 = 4\pi Z_1^2 Z_2 e^4. \quad (21)$$

Электронный страглинг становится существенным для определения разброса пробегов ионов лишь для легких ионов и больших энергий. В случае же тяжелых ионов, малых и средних энергий основную роль в распределении ионов по глубине проникновения играют столкновения с атомами мишени, которые, как мы увидим дальше, описываются в кинетическом уравнении с помощью интеграла столкновений.

Однако для определения полного среднего пробега иона вводятся средние потери энергии при упругих столкновениях

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_n = N S_n = N \int_0^{T_{\max}} T \frac{d\sigma(E, T)}{dT} dT, \quad (22)$$

где $T_{\max} = \frac{4M_i M_a}{(M_i + M_a)^2} E$. Тормозная способность S_n выражается через тормозное сечение σ_n :

$$S_n = \sigma_n \frac{2M_i M_a}{(M_i + M_a)^2} E; \quad \sigma_n = \int (1 - \cos \alpha) \frac{d\sigma}{d\alpha} \sin \alpha d\alpha d\varphi. \quad (23)$$

Как указывалось выше, для потенциала (5) тормозное сечение является функцией только одной переменной — безразмерной энергии ϵ , которая определена формулой (8). Поэтому S_n можно выразить в виде

$$S_n = 4\pi E_1 a^2 \frac{M_i M_a}{(M_i + M_a)^2} \tilde{S}(\epsilon), \quad (24)$$

где $E_1 = E/\epsilon$; $a = 0,88a_0/\sqrt{Z_i^2/1^3 + Z_a^2/1^3}$, а $\tilde{S}(\epsilon)$ — универсальная функция, которая хорошо аппроксимируется [10] выражением

$$\tilde{S}(\epsilon) = 1,07\epsilon^{1/3} (1 + 1,53\epsilon^{1/2} + 0,47\epsilon^{4/3}). \quad (25)$$

Зная полные потери энергии иона $\frac{dE}{dx} = \left(\frac{dE}{dx}\right)_n + \left(\frac{dE}{dx}\right)_e$, можно вычислить пробег (криволинейный) иона R_0 до его остановки в мишени:

$$R_0 = \int_E^0 \frac{dE}{(dE/dx)}. \quad (26)$$

§ 3. Распределение внедренных ионов и дефектов по глубине проникновения

Для изучения взаимодействия атомных частиц с твердым телом важно знать распределение ионов по глубине проникновения или, как его называют, профиль частиц внедренных в мишень. Этому вопросу посвящено много работ [23—27]. Нас, однако, интересуют про-

фили ионов, внедряемых в поликристаллы, и поэтому каналирование не играет существенной роли в формировании профиля внедренных ионов. В этом случае используется хаотическая или газовая модель твердого тела.

Для определения профилей внедренных частиц обычно вводят функцию распределения ионов по их пробегам $p(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E)$.

Величина $p(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E)d\mathbf{r}$ определяет вероятность того, что ион, падающий в направлении \mathbf{n} на поверхность твердого тела и имеющий энергию E , остановится вблизи точки \mathbf{r} в элементе объема $(d\mathbf{r})$. При движении в твердом теле ион теряет свою энергию благодаря упругому рассеянию на его атомах и в результате передачи части своей энергии электронной подсистеме твердого тела. Функция $p(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E)$ удовлетворяет кинетическому уравнению, которое с учетом азимутальной симметрии упругого рассеяния удобно записать в сферической системе координат r, θ, φ :

$$\eta \frac{\partial p(r, \eta, E)}{\partial r} + \frac{1-\eta^2}{r} \frac{\partial p}{\partial \eta} = N \int d\sigma_n' [p(r, \eta', E - T_n) - p(r, \eta, E)] - S_e N \frac{\partial p}{\partial E} + \frac{1}{2} N \Omega_e^2(E) \frac{\partial^2 p(r, \eta, E)}{\partial E^2}, \quad (27)$$

$$\text{где } d\sigma_n = d\sigma_n(E, T) \delta \left(n n' - \sqrt{\frac{E-T}{E}} \frac{M_i + M_a}{2M_i} - \frac{M_a - M_i}{2M_i} \sqrt{\frac{E}{E-T}} \right) \frac{d\Omega}{4\pi}; \quad \eta = \cos \theta.$$

Левая часть уравнения описывает изменение $p(r, \eta, E)$ в пространстве; интеграл справа определяет изменение $p(r, \eta, E)$ в результате упругих столкновений, а последние два члена справа — торможение вследствие возбуждения электронов и страглинг электронного торможения соответственно, которые определены в § 2.

Обычно решение уравнения (27) ищут в виде разложения по полиномам Лежандра [28]

$$p(r, \eta, E) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) p_l(r, E) P_l(\eta). \quad (28)$$

Подставив (28) в (27), можно получить следующее уравнение для коэффициентов разложения $p_l(r, E)$:

$$\begin{aligned} (l+1) \frac{\partial p_{l+1}}{\partial r} + l \frac{\partial p_{l-1}}{\partial r} + (l+1)(l+2) \frac{p_{l+1}}{2} - l(l-1) \frac{p_{l-1}}{r} = \\ = N(2l+1) \int d\sigma_n \{p_l(r, E - T_n) P_l(\eta) - p_l(r, E)\} - N S_e \frac{d p_l}{d E} + \\ + \frac{1}{2} N \Omega_e^2 \frac{\partial^2 p_l}{\partial E^2}, \end{aligned} \quad (29)$$

$$\text{где } \eta = \cos \theta = \sqrt{\frac{E-T_n}{E}} \frac{M_i + M_a}{2M_i} + \sqrt{\frac{E}{E-T_n}} \frac{M_i - M_a}{2M_i},$$

θ — угол рассеяния иона в лабораторной системе координат.

Затем вычисляются моменты функции $p_l(r, E)$, которые определяются следующим образом:

$$p_l^n(E) = 4\pi \int_0^{\infty} p_l(r, E) r^{n+2} dr \quad (30)$$

и удовлетворяют уравнению

$$\begin{aligned} (l+1)(l-n)p_{l+1}^{n-1}(E) - l(l+n+1)p_{l-1}^{n-1}(E) = \\ = (2l+1)N \int d\sigma_n [p_l^n(E - T_n) P_l(\eta) - P_l^n(E)] - \\ - NS_e(E) \frac{dp_l^n(E)}{dE} + \frac{1}{2} N\Omega_e^2(E) \frac{d^2 p_l^n(E)}{dE^2}. \end{aligned} \quad (31)$$

Зная моменты $p_l^n(E)$, можно определить характеристики распределения ионов по глубине.

Средняя глубина проникновения

$$\langle x \rangle = R_p \mu = p_1^1 \mu, \quad (32)$$

где $\mu = \cos \theta_0$ (θ_0 — угол падения ионов на мишень, отсчитываемый от нормали к поверхности); R_p — средняя проекция пробега иона на направление его первоначального движения, называемая проективным пробегом.

Средний квадрат глубины проникновения

$$\langle x^2 \rangle = \mu^2 \frac{p_0^2 - 2p_2^2}{3} + (1 - \mu^2) \frac{p_0^2 - p_2^2}{3}, \quad (33)$$

который характеризует степень «размытия» профиля

$$\langle x^3 \rangle = \mu^3 \frac{3p_1^3 + 2p_3^2}{5} + 3\mu(1 - \mu^2) \frac{p_1^3 - p_3^2}{5}, \quad (34)$$

который характеризует асимметрию распределения ионов по глубине x . Соответствующие формулы могут быть найдены и для более высоких степеней $\langle x^n \rangle$. Аналогичным образом можно найти моменты распределения в направлении y , перпендикулярном пучку ионов. Так, для нормально падающего пучка, когда вектор n совпадает с направлением y ,

$$\langle y \rangle = 0, \quad \langle y^2 \rangle = \frac{1}{3} (p_0^2 - p_2^2), \quad \langle y^3 \rangle = 0. \quad (35)$$

Смещенный третий момент

$$\langle xy^2 \rangle = \frac{1}{5} (p_1^3 - p_3^2) \quad (36)$$

позволяет определить распределение ионов в направлении, не совпадающем с x и y .

Нахождение бесконечного числа моментов эквивалентно точному определению функции распределения. Зная конечное число моментов, можно найти приближенно $p(r, E)$ в виде некоторой функции,

параметры которой выражаются через соответствующие моменты распределения.

Наиболее простым из обычно используемых распределений является гауссово [23, 28]

$$p(x) = \frac{D}{\sqrt{2\pi \langle \Delta x^2 \rangle}} \exp \left[-\frac{(x - \langle x \rangle)^2}{2 \langle \Delta x^2 \rangle} \right], \quad (37)$$

где D — полная доза ионов на единицу поверхности; $\langle \Delta x^2 \rangle = \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle$.

Однако в ряде случаев распределение ионов по глубине оказывается асимметричным по x и для его описания приходится использовать более сложные функции, например распределения Эджевора [29] или Пирсона [26]

Распределение Эджевора имеет вид

$$p(x) = \frac{D}{\sqrt{\langle \Delta x^2 \rangle}} \left[\Phi_0(\xi) - \frac{1}{6} \frac{\langle \Delta x^3 \rangle}{\langle \Delta x^2 \rangle^{3/2}} \Phi_0'''(\xi) \right];$$

$$\Phi_0 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp \left(-\frac{1}{2} \xi^2 \right), \quad (38)$$

$$\xi = \frac{x - \langle x \rangle}{\sqrt{\langle \Delta x^2 \rangle}}.$$

Аналитические решения для моментов распределения $p(r, \eta, E)$ удается найти лишь в некоторых частных случаях.

Если рассеяние ионов в мишени сопровождается малыми сбросами энергии в отдельных столкновениях $T_n \ll E$, можно получить аналитические выражения для проективного пробега иона R_p в зависимости от его энергии. Разложение уравнения (31) по T_n/E в линейном приближении дает

$$R_p(E) = \int_0^E \frac{dE'}{NS(E')} \exp \left\{ \int_E^{E'} \frac{dE''}{\lambda(E'') NS(E'')} \right\}, \quad (39)$$

где $\lambda^{-1}(E) = N \int d\sigma_n (1 - \cos \alpha)$ — средний свободный пробег иона.

При малых углах рассеяния ионов $\alpha \ll 1$, $\cos \alpha \approx 1 - \frac{M_a}{M_i} \frac{T_m}{E}$, $\frac{M_a}{M_i} \frac{T_m}{E} \ll 1$, средний проективный пробег иона равен полному пробегу (26). Все моменты могут быть найдены [28] также, когда $S_e = \Omega_e^2 = 0$, а сечение упругого рассеяния определяется степенным потенциалом (10). В этом случае

$$\left. \begin{aligned} p_0^0 &= 1; & p_1^1 &= \frac{AE^{2m}}{NC_m}; & p_0^2 &= \frac{B}{(NC_m)^2} E^{4m}; \\ p_2^2 &= \frac{D}{(NC_m)^2} E^{4m}; & p_1^3 &= \frac{G}{(NC_m)^3} E^{6m}; & p_3^3 &= \frac{H}{(NC_m)^3} E^{6m}, \end{aligned} \right\} \quad (40)$$

где коэффициенты A, B, D, G, H выражаются через бета-функции при $M_i = M_a$ и через неполные бета-функции при $M_i \neq M_a$.

Параметры распределения внедренных ионов, найденные из формул (40), существенно зависят от соотношения масс M_i/M_a . Так, для легких ионов, $M_i \ll M_a$, ширины распределения $\sqrt{\langle \Delta x^2 \rangle}$ и $\sqrt{\langle \Delta y^2 \rangle}$ больше средней глубины проникновения $\langle x \rangle$, причем $\sqrt{\langle \Delta x^2 \rangle} \approx \sqrt{\langle y^2 \rangle}$, в то время как для тяжелых ионов, $M_i \gg M_a$, ширины $\sqrt{\langle \Delta x^2 \rangle}$ и $\sqrt{\langle y^2 \rangle}$ меньше глубины проникновения $\langle x \rangle$, $\sqrt{\langle \Delta x^2 \rangle} > \sqrt{\langle y^2 \rangle}$, т. е. распределение сигарообразно вытянуто вдоль первоначального направления движения иона.

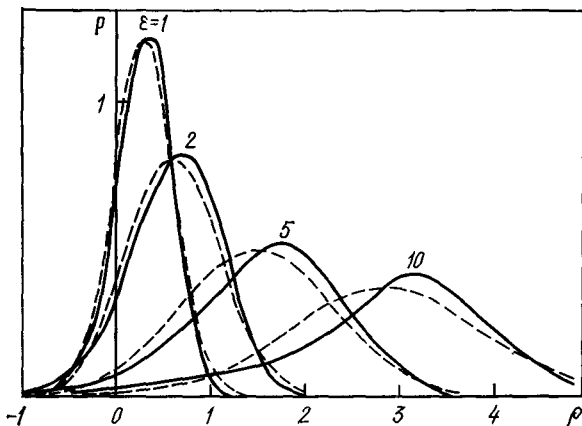


Рис. 1. Профили распределения остановившихся протонов в тяжелой мишени, рассчитанные методом моментов [29] для различных значений безразмерной энергии ϵ . Глубина выражена в безразмерных единицах $\rho = xN \frac{\pi a_0^2}{(Z_i^{2/3} + Z_a^{2/3})^{3/2}} \times \frac{4M_i M_a}{(M_i + M_a)^2}$;

пунктир — распределение Гаусса; сплошные — распределение Эджеворда

Однако расчеты, выполненные при $S_e = 0$, годны лишь для качественных оценок. В общем виде уравнение (31) для моментов $p_i^n(E)$ может быть получено численными методами [26, 29]. На рис. 1 представлены профили протонов, внедренных при разных значениях энергии, рассчитанные в работе [29] с использованием потенциала (10) и неупругими потерями S_e , определенными (17). Видно, что асимметрия распределения сильнее проявляется при больших энергиях. Расчеты [26] показали, что учет страглинга электронного торможения приводит к уменьшению асимметрии профиля, но влияние страглинга уменьшается с увеличением отношения масс M_a/M_i .

При выводе уравнения (27) для функции распределения $p(r, E)$ или уравнения (31) для моментов $p_i^n(E)$ сделаны следующие предположения.

1. Среда, в которой движется ион, считается неупорядоченной, т. е. не учитывается кристаллическая структура мишени.

2. Движение иона рассматривается в бесконечной среде, а граница мишени учитывается только заданием параметров входящего

пучки в плоскости $x=0$. Поэтому частицы могут несколько раз пересекать поверхность мишени, что, конечно, не соответствует реальности.

3. Неупругие потери энергии на электронах считаются постоянными и не зависящими от положения иона относительно атомов мишени, что, как указывалось в § 2, применимо для неупорядоченной среды.

4. Пренебрегается энергией связи атомов в твердом теле, что оправдано лишь при больших энергиях ионов.

5. В основе вывода уравнения (27) лежит статистический подход, требующий большого числа столкновений, что также не применимо для малых энергий ионов.

Ограничения 2 и отчасти 4 были сняты в работе [25, 27], где был использован метод численного интегрирования уравнения Больцмана, известный в теории переноса нейтронов [30]. Распределение движущихся ионов в твердом теле описывается [31, 33] с помощью функции распределения $f(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E)$, которая характеризует число движущихся атомов в точке \mathbf{r} , имеющих направление движения \mathbf{n} и энергию E . Функция $f(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E)$ нормирована следующим образом:

$$\int f(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E) d\mathbf{r} d\mathbf{n} dE = N_0, \quad (41)$$

где N_0 — полное число движущихся частиц в единице объема.

Удобно ввести плотность потока движущихся атомов $\Phi(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E) = \nu f(\mathbf{r}, \mathbf{n}, E)$, которая удовлетворяет уравнению

$$\begin{aligned} & \mu \frac{\partial}{\partial x} \Phi(x, \mathbf{n}, E) + \frac{\partial}{\partial E} S_e(E) \Phi(x, \mathbf{n}, E) = \\ & = N \int d\sigma(E' \rightarrow E, \mathbf{n}' \rightarrow \mathbf{n}) \Phi(x, \mathbf{n}, E') - N(x) \int d\sigma(\mathbf{n} \rightarrow \mathbf{n}', E \rightarrow E') \times \\ & \quad \times \Phi(x, \mathbf{n}, E) + \Phi_0 \delta(x) \delta(\mu - \mu_0) \delta(E - E_0). \end{aligned} \quad (42)$$

Здесь μ — косинус угла между направлением движения ионов и осью x ; $\mu_0 = \cos \varphi_0$ (φ_0 — угол падения); Φ_0 — характеризует плотность потока частиц, падающих на поверхность мишени.

Для решения кинетического уравнения (42) использовано многогрупповое приближение [30].

Суть этого метода состоит в том, что интервал энергии разбивается на группы, внутри каждой из которых производится интегрирование по энергии. В результате получается следующая система групповых уравнений:

$$\begin{aligned} & \mu \frac{\partial}{\partial x} \Phi^q(x, n) + N(x) Q^q \Phi^q(x, n) = -S_e(E_{q-1}) \Phi(x, n, E_{q-1}) + \\ & + S_e(E_q) \Phi(x, n, E_q) + N(x) \sum_{i > i_{\text{мин}}} \int dn' \Phi^i(x, n') W^{i \rightarrow q}(n, n') + \\ & + \Phi_0 \delta(x) \delta(n e_x - \mu_0) \delta_{1q}. \end{aligned} \quad (43)$$

Здесь q указывает номер группы, причем энергия иона находится в интервале $E_q < E < E_{q-1}$:

$$\left. \begin{aligned} \Phi^q(x, n) &= \int_{E_q}^{E_{q-1}} \Phi(x, n, E) dx; \quad Q^q = \int_{E_q}^{E_{q-1}} dE' \int_{E' (1-\alpha)}^{E'} d\sigma(E' \rightarrow E); \\ W^{i \rightarrow q}(nn') &= \int_{E_i}^{E_{i-1}} dE' \int_{E_q}^{E_{q-1}} d\sigma(E' \rightarrow E) \delta(nn' - \eta); \quad \alpha = \frac{4M_i M_a}{(M_i + M_a)^2}. \end{aligned} \right\} (44)$$

Поскольку в (43) включено электронное торможение, необходимо использовать достаточно большое число групп. В то же время малая относительная ширина групп приводит к тому, что, не нарушая физическую картину явления, можно положить $W^{i \rightarrow i}(n, n') = 0$.

Такое приближение означает то, что в процессе торможения ионов не учитываются столкновения, в результате которых атому решетки передается малая доля энергии, а движущийся ион остается в той же энергетической группе. Этим некоторым образом снимается ограничение 4.

С учетом сделанных предположений групповое уравнение (43) примет вид

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \Phi^q(x, n) + \left\{ -\frac{S_e(E_q)}{E_{q-1} - E_q} + N(x) Q^q \right\} \Phi^q(x, n) = F^q(x, n), \quad (45)$$

где $F^q(x, n)$ — источник частиц для q -й группы,

$$\begin{aligned} F^q(x, n) &= -\frac{S_e(E_{q-1})}{E_{q-1} - E} + N(x) \sum_{i > i_{\text{мин}}} \int dn' \Phi^i(x, n') W^{i \rightarrow q}(n, n') + \\ &+ \Phi_0 \delta(x) \delta(n e_x - \mu_0) \delta_{1q}. \end{aligned} \quad (46)$$

Таким образом, решение кинетического уравнения (42) сведено к решению системы обыкновенных дифференциальных уравнений, записанных для каждой энергетической группы. В этой системе уравнений источник частиц F^q является функцией решения уравнения в группах с меньшими номерами. Система уравнений допускает последовательное решение ее в порядке возрастания номеров групп.

В качестве граничного условия для группового потока на поверхности мишени используется следующее условие:

$$\Phi^q(x, n)|_{x=0} = 0, \quad nn_0 > 0,$$

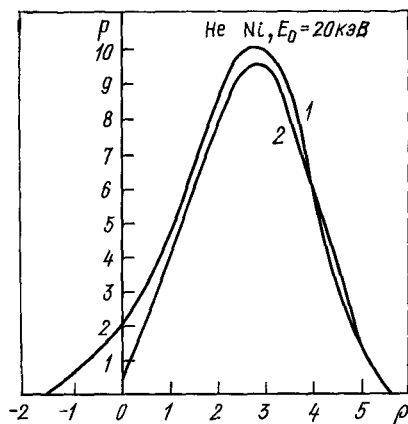
где n_0 — внешняя нормаль к поверхности мишени. При этом правильно учитывается наличие реальной поверхности.

Критерием остановки движущихся ионов в твердом теле является достижение ими некоторой энергии ($\sim E_d$, E_d — пороговая энергия, необходимая для необратимого смещения атома в решетке), начиная с которой ионы не образуют новых точечных дефектов.

Профиль остановившихся ионов в плоской мишени определяется с помощью следующего выражения:

$$\rho(x) = \int dE \int_{T>E-E_d} dn \int d\sigma(E, T) \Phi(x, n, E) - S_e(E_d) \int \Phi(x, n, E_d) dn. \quad (47)$$

Приведем некоторые результаты расчета профилей залегания в различных однокомпонентных мишенях. На рис. 2 представлены профили залегания α -частиц, падающих нормально на никелевую мишень и имеющих энергию $E = 20$ кэВ.



Кривая 2 на этом рисунке соответствует результатам расчета для источника, находящегося на поверхности мишени, занимающей полупространство $x > 0$, а кривая 1 — источнику, находящемуся в глубине мишени, занимающей все пространство. Из этого рисунка видно, что кривые существенно различаются вблизи плоскости источника ($x = 0$). Это показывает роль граничных условий в расчете профиля остановившихся ионов.

Рис. 2. Профили распределения остановившихся α -частиц, падающих на никелевую мишень с энергией 20 кэВ:

1 — соответствует расчету для безграничной среды; 2 — расчету для мишени с реальной границей при $x = \rho = 0$ [27]

Отметим также, что и метод моментов, и метод работы [25, 27] позволяют рассматривать проникновение ионов в многокомпонентные мишени, т. е. мишени, состоящие из нескольких сортов атомов. Для этого нужно в кинетических уравнениях просуммировать интеграль-

ные члены, соответствующие рассеянию на каждом сорте атомов.

В процессах взаимодействия атомных частиц с твердым телом важную роль играют радиационные дефекты. Они определяют и процессы, приводящие к эрозии поверхности (распыление и блистеринг), и процессы захвата и реэмиссии газа, ответственные за обмен атомами D, T и He между стенкой и плазмой. В основном* дефекты образуются при упругих столкновениях ионов и смещенных атомов с другими атомами, в результате которых неподвижные атомы получают энергию E_d , необходимую для необратимого смещения из узла кристаллической решетки. (Энергия E_d обычно составляет 25 эВ.) При этом образуется пара Френкеля — вакансия и междоузельный смещенный атом. Это — точечные дефекты. В результате вторичных процессов, таких, как диффузия, объединение точечных дефектов в кластеры, образуются более сложные дефекты: петли дислокаций, вакансионные

* За исключением явления «кулоновского взрыва», которое может происходить при облучении поверхности многозарядными ионами, см. § 5.

поры или — в присутствии газа — газовые пузырьки. Но здесь вторичные процессы не рассматриваются.

При достаточной энергии иона точечные дефекты образуются в основном в результате каскада атомных столкновений: ион смещает первичный атом, который производит следующее смещение и так далее.

Как следует из сказанного, процесс образования точечных дефектов определяется лишь энергией, затраченной на упругие столкновения в каскаде. Поэтому нас в первую очередь интересует, какая доля полной энергии E в каскаде идет на упругие столкновения E^* .

Во-вторых, необходимо определить количество точечных дефектов, образующихся в каскаде с энергией E^* .

И, в-третьих, нас интересует пространственное распределение дефектов, создаваемых ионом, или распределение энергии, затраченной на упругие столкновения.

Уравнение для величины E^* , зависящей от полной энергии, имеет вид

$$N \int d\sigma_n(E, T) E^*(E) = N \int d\sigma_n(E, T) [E^*(E - T) + E^*(T)] - NS_e \frac{dE^*}{dE}. \quad (48)$$

Энергия, выделяющаяся при упругих столкновениях на длине свободного пробега иона, во-первых, идет на передачу энергии каждой из сталкивающихся частиц, а, во-вторых, уменьшается вследствие уменьшения полной энергии E , обусловленного неупругими потерями.

В случае легких ионов с энергией ≥ 1 кэВ, когда $T \ll E$ и $E^*(E) \approx E^*(E - T)$, а для смещенных ими атомов $E^*(T) \approx T$, уравнение (48) сводится к простому уравнению [29]

$$\frac{dE^*}{dE} = \frac{S_n(E)}{S_e(E)},$$

Приближенное решение уравнения (48) в общем случае было найдено Робинзоном [31]:

$$E^* = E [1 + k_e g(\varepsilon)]^{-1}, \quad (49)$$

где ε — безразмерная энергия, определенная (8); k_e — константа, определяющая электронную тормозную способность $S_e = k_e \varepsilon^{1/2}$; функция $g(\varepsilon)$ приближенно равна

$$g(\varepsilon) = \varepsilon + 0,40244\varepsilon^{3/4} + 3,4008\varepsilon^{1/6}.$$

Число смещенных атомов $\nu(E^*)$ определяется уравнением

$$\int d\sigma(E^*, T) [\nu(E^*) - \nu(E^* - T) - \nu(T)] = 0 \quad (50)$$

и должно удовлетворять граничным условиям

$$\nu = \begin{cases} 0 & \text{при } E^* < E_d; \\ 1 & \text{при } E_d < E^* < 2E_d, \end{cases} \quad (51)$$

где E_d — энергия смещения, которая, как предполагается в большинстве расчетов, не зависит от направления.

Решение (50) было впервые найдено [31] для потенциала взаимодействия твердых сфер диаметром $2R$, когда $d\sigma = \pi R^2 dT/E$ и $\nu(E^*)$ имеет простой вид

$$\nu(E^*) = \frac{E^*}{2E_d}, \quad E^* > 2E_d. \quad (52)$$

В дальнейшем в работе [32] для степенного потенциала с сечением (10) и в работе [33], основанной на построении модельной индикатрисы рассеяния, допускающем рассмотрение произвольного потенциала, было показано, что

$$\nu(E^*) = \xi \frac{E^*}{2E_d} \quad \text{при } E^* > 2E_d, \quad (53)$$

где $\xi \leq 1$, причем хотя ξ и зависит от потенциала рассеяния, но эта зависимость слабая и ξ близко к значению, данному в [40]: $\xi = \frac{12 \ln 2}{\pi^2} \approx 0,84$. В табл. 1 приведена зависимость ξ от показателя степени m в потенциале (10). Практически ξ можно считать постоянной в пределах точности, с которой определена функция E^* . Большую неопределенность дают расчеты упомянутых выше вторичных процессов, в результате которых значительная часть точечных дефектов отжигается и лишь небольшая часть идет на образование устойчивых дефектов типа дислокационных петель, вакансионных пор и газовых пузырей.

Таблица 1. Зависимость ξ от вида потенциала

$n = 1/m$	2	2,5	3	3,5	4
ξ	0,590	0,660	0,702	0,730	0,750

Для определения пространственного распределения энергии, выделенной при упругих столкновениях, вводится функция распределения $F_D(\mathbf{r}, \mathbf{v})$, такая, что величина $F_D(\mathbf{r}, \mathbf{v})d\mathbf{r}$ представляет собой количество энергии, выделенной в упругих столкновениях в элементе объема $(\mathbf{r}, d\mathbf{r})$, если первичная частица, порождающая каскад, начинает свое движение в точке $\mathbf{r} = 0$ со скоростью \mathbf{v} . Предполагается, что все атомы отдачи замедляются до энергии ниже определенного предела, который значительно меньше начальной энергии и поэтому чаще всего полагается равным нулю. Это справедливо, однако, лишь для каскадов с энергией $E^* > E_d$. Тогда при тех же предположениях, при которых получено уравнение для функции распределения внедренных ионов $p(\mathbf{r}, E, n)$, можно написать кинетическое уравнение для $F_D(\mathbf{r}, \mathbf{v})$. Если налетающий ион идентичен атомам мишени, то кинетическое уравнение имеет вид

$$-\frac{\mathbf{v}}{v} \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} F_D(\mathbf{r}, \mathbf{v}) = N \int d\sigma [F_D(\mathbf{r}, \mathbf{v}) - F_D(\mathbf{r}, \mathbf{v}') - F_D(\mathbf{r}, \mathbf{v}'')] + N S_e \frac{\partial F_D}{\partial E}, \quad (54)$$

Когда налетающий ион имеет массу M_i и заряд Z_i , отличающиеся от массы M_a и заряда Z_a атомов мишени, нужно ввести две функции: $F_{Da}(r, v)$ — для атомов мишени и для ионов $F_{Di}(r, v)$. Функция F_{Da} удовлетворяет уравнению (54), а $F_{Di}(r, v)$ — уравнению

$$-\frac{v}{v} \frac{\partial F_{Di}}{\partial r} = N \int d\sigma [F_{Di}(v) - F_{Di}(v') - F_{Da}(v'')] + NS_e \frac{\partial F_{Di}}{\partial E}. \quad (55)$$

Функции F_{Di} и F_{Da} нормированы так, что

$$\int dr (F_{Di} + F_{Da}) = E^*. \quad (56)$$

Таким образом, получается система уравнений (54) и (55). Для мишени, состоящей из атомов k различных сортов, вводятся функции распределения плотности кинетической энергии атомов каждого сорта и задача сводится к решению аналогичной системы из $(k + 1)$ уравнений.

Решение уравнений (54) и (55) ищется [28] так же, как и решение уравнения (27) для функции распределения остановившихся ионов. Функции $F_D(r, v)$ разлагаются по полиномам Лежандра, рассматриваются моменты распределения, удовлетворяющие соответствующим интегральным уравнениям, зацепляющим n -й и $(n - 1)$ -й моменты.

Так, например, для уравнения (54) в случае однородного моноэнергетического потока ионов уравнения для соответствующих моментов F_l^n имеют вид

$$\begin{aligned} n! \frac{\partial}{\partial x} F_{l-1}^{n-1}(x, E) + n(l+1) \frac{\partial}{\partial x} F_{l+1}^n(x, E) = \\ = (2l+1) NS_e \frac{\partial F_l^n}{\partial x} + (2l+1) N \int d\sigma_n [F_l^n - P_l(\cos \theta') F_l^n(E-T) - \\ - P_l(\cos \theta'') F_l(T)], \end{aligned} \quad (57)$$

причем условие нормировки дает $F_l^0 = \delta_{l0} E^*$. Другие моменты в аналитическом виде найдены лишь при $S_e = 0$ и для степенного потенциала рассеяния.

При этом

$$\left. \begin{aligned} F_0^0 = E; \quad F_1^1 = \frac{A_D}{NC_m} E^{1+2m}; \quad F_0^2 = \frac{B_D}{(NC_m)^2} E^{1+4m}; \\ F_2^2 = \frac{D_D}{(NC_m)^2} E^{1+4m}; \quad F_1^3 = \frac{G_D}{(NC_m)^3} E^{1+6m}; \\ F_3^3 = \frac{H_D}{(NC_m)^3} E^{1+6m}, \end{aligned} \right\} \quad (58)$$

где коэффициенты $A_D, B_D \dots$ выражаются через неполные бета-функции. Зная моменты F_n^l и воспользовавшись (32)—(36), можно найти

* Для отличия от распределения $p(r, E)$ все величины, характеризующие распределение $F_D(r, E)$, мы отмечаем индексом D , что означает «дефекты».

среднюю глубину залегания дефектов $\langle x \rangle_D$ и ширины распределения дефектов $\sqrt{\langle \Delta x^2 \rangle_D}$ и $\sqrt{\langle y^2 \rangle_D}$, а также построить приближенную функцию распределения, например в виде гауссова распределения (37) или распределения Эджевора (38).

Интересно сравнить распределение остановившихся ионов $p(r, E)$ и распределение выделенной энергии $F_D(r, E)$. Средняя глубина проникновения ионов $\langle x \rangle$ оказывается больше, чем средняя глубина залегания дефектов, причем это различие тем больше,

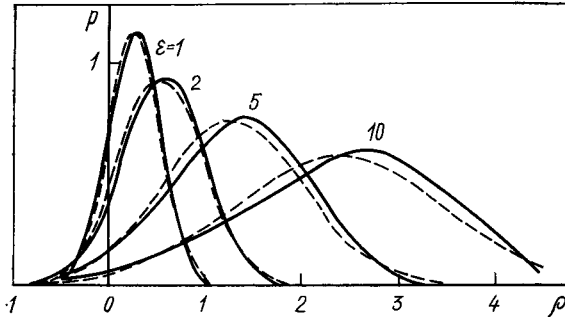


Рис. 3. Профили распределения энергии, выделенной при упругих столкновениях в случае протонов, бомбардирующих тяжелую мишень [29], для различных значений безразмерной энергии ϵ :
пунктир — распределение Гаусса;
сплошные — распределение Эджевора

чем больше отношение масс M_i/M_a . Это связано с тем, что в конце пробега ион, имея еще энергию, достаточную для движения, уже не создает дефектов.

Ширины распределения дефектов $\sqrt{\langle \Delta x^2 \rangle_D}$ и $\sqrt{\langle y^2 \rangle_D}$ для легких ионов ($M_i \ll M_a$) меньше в 1,5 раза, чем ширины распределения внедренных ионов $\sqrt{\langle \Delta x^2 \rangle}$ и $\sqrt{\langle y^2 \rangle}$, для равных масс $M_i \approx M_a$; $\sqrt{\langle \Delta x^2 \rangle_D} \approx \sqrt{\langle \Delta x^2 \rangle}$ и $\sqrt{\langle y^2 \rangle_D} \approx \sqrt{\langle y^2 \rangle}$, а для тяжелых ионов ($M_i \gg M_a$) $\sqrt{\langle \Delta x^2 \rangle_D} > \sqrt{\langle \Delta x^2 \rangle}$, $\sqrt{\langle y^2 \rangle_D} > \sqrt{\langle y^2 \rangle}$.

Однако приведенные результаты для случая $S_e = 0$ и степенного потенциала носят качественный характер. В более реальных случаях с $S_e \propto E^{1/2}$ уравнения для моментов решались численными методами [35] (рис. 3).

Когда размер каскада, создаваемого первичным атомом отдачи, много меньше длины свободного пробега иона, возможен другой метод расчета распределения энергии, выделенной при упругих столкновениях.

Этот случай реализуется для легких ионов, когда дефекты оказываются локализованными вблизи трека иона и задача сводится к нахождению плотности потока $\Phi(x, n, E)$ [41] [см. (42)].

Распределение энергии, выделенной при упругих столкновениях, получается из интеграла

$$F(x) = \int dE \int dn \int d\sigma(E, T) E^*(T) \Phi(x, n, E) \quad (59)$$

Описанный выше метод расчета $\Phi(x, n, E)$ позволяет правильно учесть наличие границы и отчасти энергию связи атомов мишени. Таким образом, удастся точнее рассчитать также и распределение дефектов, создаваемых легкими ионами.

На рис. 4 приведены для сравнения результаты расчетов профилей дефектов, выполненные методом моментов [35] (кривая 1) и с помощью численного интегрирования кинетического уравнения для функции $\Phi(x, n, E)$ (кривая 2). Расчеты проведены для железной мишени, облучаемой ионами азота с энергией 100 кэВ.

Напомним, что в силу (53) распределение дефектов совпадает с распределением энергии, выделенной при упругих столкновениях в каскаде. Однако описанный выше метод дает нам распределение дефектов, усредненное по многим каскадам. Размеры каждого единичного каскада оказываются меньше, чем размеры распределения, усредненного по многим каскадам. Если обозначить средние квадратичные размеры единичного каскада $\langle \Delta x^2 \rangle_1$ и $\langle y^2 \rangle_1$, то отношения $\delta_x = \langle \Delta x^2 \rangle_1 / \langle \Delta x^2 \rangle_D$ и $\delta_y = \langle y^2 \rangle_1 / \langle y^2 \rangle_D$ согласно оценкам

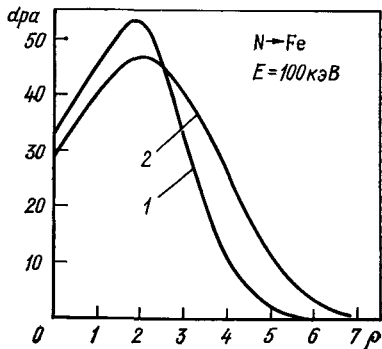


Рис. 4. Профили распределения дефектов, созданных ионами азота с энергией 100 кэВ в железе:

1 — соответствует расчету для безграничной среды; 2 — расчету для мишени с реальной границей [27]. Число дефектов выражено в смещениях на этом, dpa (displacement per atom), а глубина в безразмерных единицах ρ

[28] приблизительно равны между собой и меняются в зависимости от отношения масс M_i/M_a от $\delta_x \approx \delta_y \approx 0,9$ при $M_i/M_a = 10$ до $\delta_x \approx \delta_y \approx 0,275$ при $M_i/M_a = 0,1$. Малые относительные размеры единичных каскадов, создаваемых легкими ионами, обусловлены тем, что длина пробега смещенных ими атомов значительно меньше длины пробега ионов, а ионы сильно рассеиваются на атомах мишени и повторяемость конфигураций каскада мала.

Таким образом, в настоящее время существуют вполне удовлетворительные способы расчета распределения внедренных ионов и дефектов. Составлены таблицы основных величин, характеризующих эти распределения [26]. В то же время теория распределения внедренных ионов и дефектов имеет ряд ограничений, которые мы обсудим подробнее в параграфах, посвященных отражению ионов и распылению.

§ 4. Отражение ионов от поверхности

Как указывалось во введении, в реакторе-токамаке со стенкой взаимодействуют в основном перезарядные нейтральные атомы D и T с энергией порядка нескольких сот электрон-вольт. Распределение таких частиц по углам падения θ близко к $\cos \theta$. Поэтому в первую очередь представляет интерес отражение легких атомных частиц с энергиями, меньшими или равными 1 кэВ при $\theta \approx 0$. Кроме того, нужны коэффициенты отражения быстрых ионов He, рождающегося при DT-реакции с энергией 3,5 МэВ, которые падают на стенку при

малых скользящих углах (больших θ). Энергия частиц, приходящих на приемные пластины дивертора, ожидается порядка нескольких килоэлектрон-вольт. Для увеличения поверхности, принимающей поток частиц и энергии, приемные пластины дивертора предполагается ставить под скользящим углом к магнитным силовым линиям. В этом случае угол падения частиц будет определяться потенциалом плазмы вблизи диверторных пластин. Если этот потенциал меньше кинетической энергии частиц, то частицы попадут на пластины под скользящим углом; если потенциал больше кинетической энергии, то частицы будут набирать энергию в d -слое у поверхности приемных пластин и входить в пластины нормально.

Основная характеристика отражения — коэффициент отражения R , определяемый как отношение полного числа отраженных ионов к числу ионов, упавших на поверхность. В первом приближении коэффициент отражения частиц $R(E)$ можно найти [29, 36]:

$$R(E) = \int_{-\infty}^0 p(x, E) dx, \quad (60)$$

если известна функция распределения $p(x, E)$ ионов по глубине проникновения. Аналогично определяют коэффициент отражения энергии:

$$R_E(E) = \int_{-\infty}^0 F_E(x, E) dx, \quad (61)$$

где $F_E(x, E)$ — профиль распределения энергии, выделенной как при упругих столкновениях, так и в результате электронного торможения ионом и всеми смещенными атомами мишени. Функция $F_E(x, E)$ находится методами, описанными в § 3, но нормировка (56) должна проводиться на полную энергию иона E . Зная коэффициенты отражения частиц $R(E)$ и энергии $R_E(E)$, можно определить среднюю энергию отраженных частиц:

$$\bar{E} = \frac{R_E(E)}{R(E)}. \quad (62)$$

Однако выражения (60) и (61) явно занижают значения R и R_E , поскольку в данной постановке задачи [29, 36] плоскость $x = 0$ не является поверхностью мишени, а представляет собой только плоскость, откуда начинают свое движение частицы, которые при этом могут несколько раз пересекать плоскость $x = 0$. В [43] получена поправка к (60), учитывающая реальную поверхность при $x = 0$. Скорректированный коэффициент отражения R_S выражается через R , рассчитанный по (60):

$$R_S(\theta) = \frac{R(\theta)}{1-\delta}; \quad \delta = \int dE \rho(E) \frac{2R(0) \ln 2R(0) - 2R(0) + 1}{[\ln 2R(0)]^2}, \quad (63)$$

$\rho(E)$ — энергетический спектр отраженных частиц. В (63) предполагается, что отраженные частицы распределены по углам вылета θ по закону $\cos \theta$. На рис. 5 [37] приведены зависимости R и R_S от

энергии ионов E при $\theta = 0$. Было принято $\rho(E) \sim E^{-\nu}$, а показатель степени ν выбирался так, чтобы средняя энергия отраженных ионов равнялась $0,1E$; $0,2E$; $0,3E$, как отмечено на разных кривых для $R_S(E)$.

Приведенные для сравнения экспериментальные значения R для $Be^+ \rightarrow Au$ действительно лучше ложатся на кривые $R_S(E)$.

Однако для вычисления распределения легких ионов по глубине проникновения $p(x, E)$ с достаточной точностью требуется тем больше моментов, чем больше энергия ионов. Это обусловлено асимметрией распределения $p(x, E)$ [29]. Поэтому для высоких энергий ($\varepsilon = E/E_1 \gtrsim 10$) развивалась теория в приближении одного столкнове-

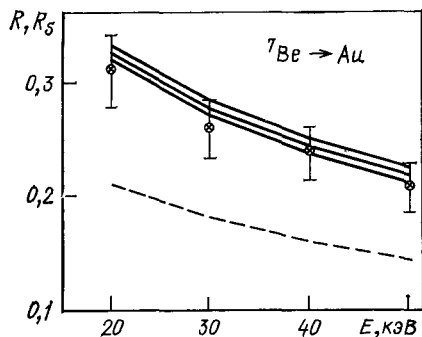


Рис. 5. Зависимость коэффициента отражения ионов бериллия, падающих нормально на золотую мишень, от энергии ионов:

пунктирная кривая — расчет по формуле (60); сплошные — расчет по формуле (63); \odot — экспериментально измеренные коэффициенты отражения

ния [45, 46]. В [38] коэффициент отражения был рассчитан для однократного рассеяния на кулоновском потенциале, что справедливо лишь для больших энергий ионов (рис. 6). В работе [39] использован экранированный потенциал рассеяния и учитывались только неупругие потери энергии S_e иона на пути до рассеяния и от места рассеяния.

При таком предположении профиль внедренных ионов определяется из уравнения

$$F(x, E) = \delta(x - R_0) \left[1 - N \int_0^{R_T} dy \int_0^\pi d\sigma(y, \Phi) \right] + N \int_0^{R_T} dy \int_0^\pi d\sigma(y, \Phi) \delta[x - y - (R_0 - y) \cos \Phi], \quad (64)$$

которое получается как сложение вероятностей рассеяться и не рассеяться на пути пробега R_0 .

Вероятность рассеяния на угол $\Phi > \pi/2$ мала, и уравнение (64) линейно по сечению рассеяния. Таким образом, это приближение применимо для частиц, падающих на поверхность нормально или под малыми углами падения θ . Сечение $d\sigma(y, \Phi) = d\sigma(E(y), \Phi)$, поскольку E_y для $S_e \sim \sqrt{E}$ определяется соотношением

$$E(y) = E \left(1 - \frac{y}{R_T} \right)^2, \quad (65)$$

В этом случае коэффициент отражения ионов R равен

$$R(E) = \int_{-R_T}^0 F(x, E) dx = N \int_0^{R_T} dy \int_0^\pi d\sigma(y, \Phi), y + (R_T - y) \cos \Phi \leq 0. \quad (66)$$

Аналогичным способом получено [39] выражение для коэффициента отражения энергии

$$R_E(E) = \frac{N}{E_1} \int_0^E dE_1 E_1 \int_0^{R_T} dy \int_{\pi/2}^\pi d\sigma(y, \Phi) \delta \left\{ E_1 - E \left[y \left(1 - \frac{1}{\cos \Phi} \right) \right] \right\}. \quad (67)$$

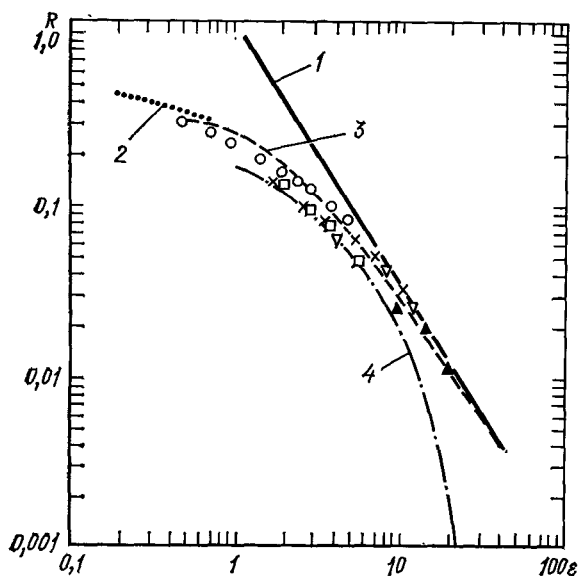


Рис. 6. Зависимость коэффициента R отражения протонов, падающих нормально на тяжелые мишени, от безразмерной энергии ε . Расчеты различными методами:

1 — [38]; 2 — [37]; 3 — [39]; 4 — [29]. Экспериментальные точки [38]: \blacktriangle — Al; ∇ — пержавающая сталь; \times — Cu; \square — Ag; \circ — Au

На рис. 6 и 7 приведены зависимости коэффициентов отражения $R(E)$ и $R_E(E)$, рассчитанные разными методами в сравнении с экспериментальными данными.

Обратим внимание, что коэффициенты отражения $R(E)$ и $R_E(E)$ легких ионов от различных мишеней зависят лишь от безразмерной энергии ε (8).

Более точно можно получить коэффициент отражения, а также дифференциальные распределения отраженных частиц по энергии и по углу в приближении малых углов рассеяния, т. е. для наклонно падающих частиц достаточно большой энергии.

Быстрые ионы, для которых потенциал взаимодействия с атомами мишени достаточно пологий (кулоновский или по крайней мере $U(r) \sim r^{-2}$), рассеиваются в основном на малые углы и при этом в каждом столкновении теряют энергию, малую по сравнению с первоначальной. В этом случае можно пользоваться приближением непрерывного замедления, т. е. считать, что изменение энергии иона опре-

деляется непрерывно действующей силой $-F = \left(\frac{dE}{dx}\right)_n + \left(\frac{dE}{dx}\right)_e$. В то же время изменение направления импульса иона происходит в результате упругих столкновений. Такое приближение наиболее обоснованно для легких ионов, $M_i/M_a \ll 1$, но качественно верно даже для $M_i \approx M_a$, поскольку в последнем случае при рассеянии на угол $\pi/3$ в системе центра инерции частица теряет лишь 25% своей энергии. В приближении непрерывного замедления кинетическое уравнение для стационарной функции распределения $f(z, \theta, \varphi, E)$, зависящей от

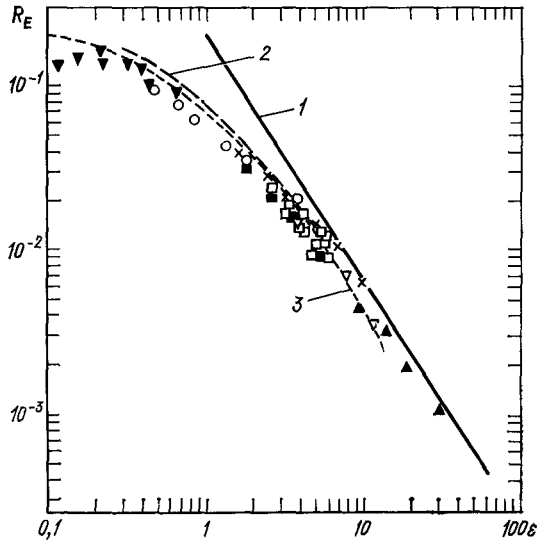


Рис. 7. Зависимость коэффициента отражения энергии R_E от безразмерной энергии ϵ для протонов, падающих нормально на тяжелые мишени. Расчеты различными методами: 1 — [38]; 2 — [39]; 3 — [44]. Обозначение экспериментальных точек то же, что и на рис. 6

глубины z , углов полярного θ и азимутального φ , а также от энергии E , имеет вид [40]

$$\xi v \frac{\partial f}{\partial z} + \frac{1}{v^2} \frac{\partial}{\partial v} \frac{F}{M_i} v^2 f = N \int [f(z, v', \xi', \varphi') - f(z, v, \xi, \varphi)] v \sigma(E, \alpha_n) d\Omega_n, \quad (68)$$

где введен угол скольжения ξ , отсчитываемый от поверхности мишени, в отличие от угла θ , который отсчитывается от нормали к поверхности. При малых ξ (рис. 8) $\xi \approx \cos \theta$. Сечение $\sigma(E, \alpha_n)$, зависящее от энергии E и угла рассеяния α_n в лабораторной системе координат, вынесено из-за скобок в силу принципа детального равновесия.

Граничные условия для функции $f(z, \xi, \varphi, E)$ имеют вид

$$f(0, \xi, \varphi, E) = \begin{cases} \delta(\xi - \xi_0) \delta(\varphi) \delta(E - E_0), & \xi > 0 \\ S(0, \xi, \varphi, E), & \xi < 0, \end{cases} \quad (69)$$

$f(z, \xi, \varphi, E)$ нормирована на один падающий ион.

Поток частиц, рассеянных с энергией E и вылетающих в направлении, определяемом углами ξ , φ , равен

$$J(\xi, \varphi, E) = \xi v S(\xi, \varphi, E). \quad (70)$$

Поток $J(\xi, \varphi, E)$ параметрически зависит от начальной энергии иона E_0 и начального угла скольжения ξ_0 .

В описанной выше постановке задачи удалось найти [40] поток частиц $I(\xi)$, проинтегрированный по всем азимутальным углам и по энергии E , которая в приближении непрерывного торможения однозначно связана с путем, пройденным частицей в среде. При решении полагалось также, что полный коэффициент отражения равен еди-

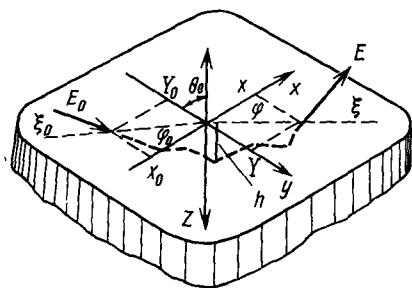


Рис. 8. Схематическое изображение рассеяния частицы, влетающей в мишень с энергией E_0 под углом ξ_0 к поверхности в азимутальной плоскости φ

нице, т. е. что частицы выходят из мишени раньше, чем останавливаются. Это справедливо для малых ξ_0 . Ввиду малости всех углов в задаче полагалось также

$$\alpha_{\pi} = \sqrt{(\xi' - \xi)^2 + (\varphi' - \varphi)^2}, \quad (71)$$

где ξ , φ и ξ' , φ' — углы, определяющие импульс частицы до и после рассеяния.

Поток $I(\xi)$ был найден для сечения

$$\sigma(E, \alpha_{\pi}) = \frac{\pi A M_a^2}{4 (M_i + M_a)^2 E_0 \alpha_{\pi}^3}, \quad (72)$$

которое соответствует потенциалу взаимодействия $U = A/r^2$, причем использовалось приближение $\sigma(E, \alpha_{\pi}) \approx \sigma(E_0, \alpha_{\pi})$, справедливое в случае, когда частицы выходят из мишени раньше, чем существенно затормозятся.

Для определения потока $I(\xi)$ была введена некоторая функция $\mathcal{F}(y, \xi)$, зависящая также от безразмерной глубины $y = z \frac{\pi A M_a^2}{4 (M_i + M_a)^2 E_0}$, которая связана с $I(\xi)$ соотношением

$$\xi \mathcal{F}(0, \xi) = I(\xi).$$

Для $\mathcal{F}(y, \xi)$ получено интегродифференциальное уравнение, вытекающее из (68):

$$\xi \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial y} = \int \frac{\mathcal{F}(y, \xi', \varphi') - \mathcal{F}(y, \xi, \varphi)}{[(\xi' - \xi)^2 + (\varphi' - \varphi)^2]^{3/2}} d\xi' d\varphi'. \quad (73)$$

Решение уравнения (73) дано в [47]. Оно довольно громоздкое, а результат простой:

$$\xi \mathcal{F}(0, \xi) = I(\xi) = \frac{2}{\pi \sqrt{3} \xi_0} \left[\left(\frac{\xi}{\xi_0} \right)^{4/3} + 1 + \left(\frac{\xi_0}{\xi} \right)^{4/3} \right]^{-1}, \quad (74)$$

Как видно из рис. 9, $I(\xi)$, имеет максимум при угле зеркального отражения $\xi = \xi_0$, однако большая часть частиц рассеивается с углами $\xi > \xi_0$.

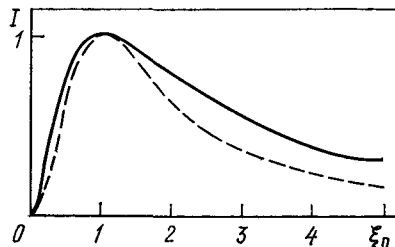


Рис. 9. Поток рассеяния как функция отношения ξ/ξ_0 :

сплошная кривая — расчет по формуле (74); пунктирная кривая — расчет по формуле (78)

Кроме того, из размерных соображений были оценены средняя глубина h , на которую проникают частицы, и средний путь s , пройденный в мишени (см. рис. 8):

$$\left. \begin{aligned} h &\approx \frac{4(M_i + M_a)^2 \sqrt{Z_i^{2/3} + Z_a^{2/3}}}{\pi M_a^2 0,4 Z_i Z_a} E_0 \xi_0^2; \\ s &\approx 4h/\xi_0 \sim \xi_0. \end{aligned} \right\} \quad (75)$$

Из сравнения s и $R_0 = \int_E^0 dE \left/ \left(\frac{dE}{dx} \right) \right.$ видно, при каких углах скольжения ξ_0 можно считать коэффициент отражения частиц $R = 1$.

Более подробную информацию о рассеянных частицах можно получить, если помимо приближения непрерывного торможения предположить также, что эффективные углы рассеяния частиц в каждом столкновении малы по сравнению с характерными углами задачи, т. е. $\alpha_n \ll \xi_0$, и использовать диффузионное приближение по угловым переменным ξ и φ . При этом интеграл столкновений в (68) разлагается в ряд по степеням $(\xi' - \xi)$ и $(\varphi' - \varphi)$ и удерживаются лишь квадратичные члены. Тогда вместо интеграла столкновений появляется лапласиан функции $f(z, \xi, \varphi, E)$ по угловым переменным ξ, φ , умноженный на средний квадрат угла рассеяния на единице пути $\langle \alpha^2(E) \rangle$.

Если, кроме того, мал средний квадрат угла рассеяния на всем пробеге R_0

$$\langle \alpha^2 \rangle R_0 \ll 1, \quad (76)$$

то задачу можно решать в малоугловом приближении. В этом случае для функции распределения $f(z, \xi, \varphi, E)$ получим

$$\xi v \frac{\partial f}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial E} \left[\left(\frac{dE}{dx} \right) f \right] + \frac{\langle \alpha^2 \rangle}{4} \left[\frac{\partial^2 f}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (77)$$

Это приближение хорошо обосновано при $\langle \alpha^2 \rangle \gg (\langle \alpha^n \rangle)^{2/n}$, где $n > 2$, что выполняется лишь для кулоновского потенциала рассеяния, когда $\sigma \sim \alpha^{-4}$, но несправедливо для более крутых потенциалов $U \sim r^{-1/m}$ ($m < 1$), и $\sigma \sim \alpha^{-2-2m}$.

Однако распределение отраженных частиц по углам ξ (проинтегрированное по φ и по E), полученное в диффузионном приближении [41], не сильно отличается от распределения (74), найденного для потенциала $U \sim r^{-2}$. В диффузионном приближении при $\xi \ll 1$ [41]

$$I(\xi) = \frac{3}{2\pi} \frac{1}{\xi_0} \left[\left(\frac{\xi}{\xi_0} \right)^{3/2} + \left(\frac{\xi_0}{\xi} \right)^{3/2} \right]^{-1}. \quad (78)$$

Это распределение, так же как и (74), имеет максимум при $\xi = \xi_0$, но несколько меньшую полуширину, чем распределение (74) (рис. 9).

В диффузионном приближении был получен [42] также дифференциальный коэффициент отражения $R(\xi, \varphi, E)$, представляющий собой отношение числа частиц, отраженных в направлении ξ и φ с энергией E , к числу частиц, падающих на единицу поверхности в единицу времени. Коэффициент $R(\xi, \varphi, E)$ связан с функцией $S(\xi, \varphi, E)$, определяющей граничное условие (69) для функции распределения,

$$R(\xi, \varphi, E) = \xi v S(\xi, \varphi, E). \quad (79)$$

Задача решалась в малоугловом приближении, а также при

$$\langle \alpha_n^2(E) \rangle \approx \langle \alpha_n^2(E_0) \rangle = \text{const},$$

что оправдано, поскольку максимум энергетического распределения отраженных частиц при $\xi \ll 1$ находится при $E \approx E_0$.

Само решение [42], представляющее, несомненно, самостоятельный интерес, довольно громоздко, и поэтому здесь приводится лишь окончательный результат, который удобно выразить в переменных

$$\psi = \xi/\xi_0, \quad \chi = \varphi/\xi_0, \quad s = L(E)/R_0, \quad (80)$$

где $L(E) = R_0 - R(E) = \int_{\xi}^{E_0} dE \left/ \left(\frac{dE}{dx} \right) \right.$ — путь, пройденный частицей

с энергией E . В приближении непрерывного торможения приведенный путь частицы s и энергия E связаны однозначно:

$$R(\psi, \chi, s) = \frac{\sqrt{3}}{2\pi^2} \frac{E_0 \psi}{R_0 \left(\frac{dE(s)}{dx} \right)} \frac{\exp \{ -[4(\psi^2 - \psi + 1) + \chi^2]/4\sigma s \}}{\sigma^{3/2} s^{5/2}} \times \\ \times \text{Erf} \left[\left(\frac{3\psi}{\sigma s} \right)^{1/2} \right], \quad (81)$$

где $\text{Erf}(x) = \int_0^x \exp(-t^2) dt$.

Единственный безразмерный параметр

$$\sigma = \langle \alpha^2 \rangle R_0 / 4\xi_0^2 \quad (82)$$

имеет простой смысл: по порядку величины он равен отношению квадрата угла рассеяния частицы на всем пробеге R_0 к квадрату угла скольжения. Чем больше величина σ , тем большая доля частиц отразится от поверхности, тем уже энергетический спектр рассеянных частиц.

Интересно отметить, что недавно В. С. Ремизович и Н. С. Тилинин получили дифференциальный коэффициент отражения также и для безграничной среды $R_\infty(\psi, \chi, s)$, т. е. в такой же постановке задачи, в какой находятся профили остановившихся ионов методом моментов. Выражение для $R_\infty(\psi, \chi, s)$ отличается от (81) лишь отсутствием множителя $\text{Erf}\left(\sqrt{\frac{3\psi}{\sigma s}}\right)$. Это показывает, что приближение безграничной среды справедливо при больших значениях параметра $\psi/\sigma s = 4\xi\xi_0/\langle\alpha^2\rangle L$.

Полный коэффициент отражения ионов R получается интегрированием $R(\psi, \chi, s)$ по всем ψ, χ и s и зависит лишь от параметра σ :

$$\left. \begin{aligned} R &\approx \frac{1}{2} \text{Erf}\left(\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\sigma}}\right), & \sigma < 3; \\ R &\approx 1 - 1,06\sigma^{-1/4}, & \sigma > 3. \end{aligned} \right\} \quad (83)$$

Приведем теперь выражения для функции $\langle\alpha^2(E)\rangle$, $s(E)$ и $\sigma(E)$ в наиболее интересном случае легких ионов, когда $dE/dx = (dE/dx)_e$, а рассеяние определяется экранированным кулоновским потенциалом:

$$\left. \begin{aligned} \langle\alpha^2(E)\rangle &= \frac{2\pi N Z_i^2 Z_a^2 e^2}{E} \ln \left[1 + \frac{0,7E}{30,5 Z_i Z_a \sqrt{Z_i^{2/3} + Z_a^{2/3}}} \right]; \\ s &= 1 - \sqrt{\frac{E}{E_0}}; \quad \left(\frac{dE}{dx}\right)_e = \frac{2\sqrt{EE_0}}{R_0}; \\ R_0 &= \frac{(Z_i^{2/3} + Z_a^{2/3})^{3/2} \sqrt{EE_0}}{4\pi\xi_e N a_0 e^2 Z_i^{7/6} Z_a}. \end{aligned} \right\} \quad (84)$$

Параметр σ для легких ионов ($M_i \ll M_a$) является универсальной функцией безразмерной энергии ε и угла ξ :

$$\sigma = \frac{3,15 \sqrt{M_i}}{\xi_e Z_i^{2/3} \varepsilon} \frac{1}{\xi^2} \ln(1 + 0,7\varepsilon). \quad (85)$$

Таким образом, в согласии с экспериментами полный коэффициент отражения легких ионов при фиксированном ξ для разных мишеней определяется лишь величиной ε . Этот факт, полученный в данной теории при малых ξ , справедлив и при нормальном падении ионов (см. рис. 6).

На рис. 10 приведены энергетические спектры протонов с энергией $E_0 = 20$ кэВ, рассеянных на никелевой мишени при $\xi_0 = 15^\circ$, рассчитанные по формуле (81), а также полученные экспериментально [43].

Видно, что согласие с экспериментом достаточно хорошее и тем лучше, чем меньше ξ .

К сожалению, все описанные теории применимы при достаточно больших энергиях ионов $E > 1$ кэВ/нуклон. В то же время для термоядерных реакторов наибольший интерес представляет отражение ионов с энергией меньше 1 кэВ. Аналитические результаты можно лишь качественно экстраполировать в эту область энергий. Основные данные при малых энергиях помимо эксперимента получены методом статистических испытаний на ЭВМ [44, 45], в котором определялась

«судьба» каждого иона, движущегося в мишени. Координаты точки входа частицы в мишень разыгрывались статистически. Совокупность всех рассчитанных траекторий позволяет получить информацию о рассеянии потока частиц. В наиболее удоб-

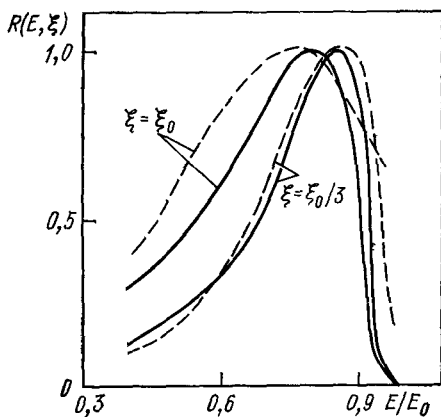


Рис. 10. Энергетические спектры протонов ($E_0 = 20$ кэВ), отраженных никелевой мишенью под разными углами:

сплошные кривые — расчет по формуле (81) [42], пунктир — эксперимент [43]

ном для практических целей виде представлены результаты работы [45], где даны эмпирические формулы для коэффициентов отражения $R(E, \theta)$ и $R_E(E, \theta)$, аппроксимирующие результаты расчетов на ЭВМ.

§ 5. Распыление

Разрушение мишени ускоренными ионами называется распылением. Основной характеристикой распыления является коэффициент распыления S , определяемый как отношение числа распыленных атомов мишени к числу падающих ионов. Коэффициент распыления зависит от вида, энергии и угла падения иона, а также от материала и температуры мишени.

Угловое распределение и энергетические спектры распыленных частиц являются также важными характеристиками процесса распыления.

Настоящий параграф посвящен изложению сути физических механизмов и теоретических основ распыления. Экспериментальные исследования представлены в работе [46].

Распыление — явление достаточно сложное и обусловлено целым рядом процессов, которые удобно классифицировать по времени их протекания [47]. Если первичный ион падает на мишень в момент $t = 0$, то за время $10^{-15} < t < 10^{-14}$ с происходят быстрые столкновительные процессы, в результате которых часть атомов покидает

мишень. В интервале $10^{-14} < t < 10^{-12}$ с возникает каскад столкновений атомов мишени, создающий поток распыляемых атомов. К моменту 10^{-12} с энергия всех движущихся частиц (иона и смещенных атомов) становится меньше энергии смещения E_d , а затем происходит термализация атомов в области, где произошел каскад столкновений [48]. Из этой горячей области, или термического пика, как его называют, происходит испарение атомов. Температура в термическом пике может достигать около 1 эВ, а время существования пика 10^{-11} — 10^{-10} с. При $t > 10^{-10}$ с происходят медленные тепловые процессы, такие, как распад химических соединений, например щелочно-галогидных, а также процессы, обусловленные разрывом химических связей в результате возбуждения электронной подсистемы. Однако указанные медленные процессы не существенны для металлов.

В большинстве случаев основной вклад в распыление при не очень малых энергиях ионов вносит каскадный, столкновительный процесс. Впервые каскадная теория распыления была предложена Гаррисоном [49] в 1956 г., а затем разработана более подробно Зигмундом [50]. В этой теории взаимодействия ионов и смещенных атомов с атомами мишени описывается функциями распределения $F_i(\mathbf{r}, \mathbf{v}_0, \mathbf{v})$ и $F_a(\mathbf{r}, \mathbf{v}_0, \mathbf{v})$ для ионов (индекс i) и смещенных атомов (индекс a) в точке \mathbf{r} , движущихся со скоростью \mathbf{v}_0 в каскаде столкновений, инициированных ионом, начавшим свое движение в точке $\mathbf{r} = 0$ со скоростью \mathbf{v} . Функции $F_i(\mathbf{r}, \mathbf{v}_0, \mathbf{v})$ и $F_a(\mathbf{r}, \mathbf{v}_0, \mathbf{v})$ представляют собой результат интегрирования от $t = 0$ до $t = \infty$ соответствующих функций распределения, зависящих от времени.

В случае распыления однородным моноэнергетическим потоком ионов функции распределения F_i и F_a зависят только от переменных x , v и $\eta = \cos \theta$, где θ — угол между направлением скорости \mathbf{v} и осью x , которая параллельна нормали к поверхности. Тогда удобно ввести функции $F_i(x, E_0, \eta_0, E, \eta)$ и $F_a(x, E_0, \eta_0, E, \eta)$, которые удовлетворяют уравнениям *

$$\frac{1}{E} \delta(x) \delta(E - E_0) - \eta \frac{\partial F_i}{\partial x} = N \int d\sigma(E, T) [F_i(x, E, \eta) - F_i(x, E', \eta') - F_a(x, E'', \eta'')] + NS_e \frac{\partial F_i}{\partial E}; \quad (86)$$

$$- \eta \frac{\partial F_i}{\partial x} = N \int d\sigma(E, T) [F_a(x, E, \eta) - F_a(x, E', \eta') - F_a(x, E'', \eta'')] + NS_e \frac{\partial F_a}{\partial E}. \quad (87)$$

Сечение упругого рассеяния $d\sigma$, (E, T) и соотношения между величинами $E, \eta, E', \eta', E'', \eta''$ определены в § 2. Функции F_i и F_a нормированы на один падающий ион.

* При рассмотрении распыления внутренними источниками, например осколками деления ядер, необходимы функции распределения F_i и F_a , зависящие от трех координат скорости \mathbf{v} .

Тогда коэффициент распыления выражается интегралом

$$S = \int F_a(0, v_0, \mathbf{v}) |v_{0x}| dv_0, \quad (88)$$

где интегрирование ведется по всем скоростям атомов, для которых энергия, соответствующая v_{0x} , превышает величину поверхностного потенциального барьера U_0 (плоский барьер). Величина U_0 обычно принимается равной энергии сублимации и составляет 5—10 эВ.

Зигмундом [50] была введена также функция

$$H(x, E, \eta) = \int F_a(x, E_0, E) |v_{0x}| dv_0, \quad (89)$$

где интегрирование ведется по той же области, что и в (88), и поэтому $H(0, E, \eta) = S(E, \eta)$. Функция $H(x, E, \eta)$ удовлетворяет уравнению

$$-\delta(x) \eta \theta(-\eta) \theta(E - U(\eta)) - \eta \frac{\partial H}{\partial x} = N S_e \frac{\partial H}{\partial E} + N \int d\sigma(E, T) \times \\ \times [H(x, E, \eta) - H(x, E', \eta') - H(x, E'', \eta'')]. \quad (90)$$

Функцию $H(x, E, \eta)$ можно разложить по полиномам Лежандра и по моментам распределения по x (см. § 3). В случае степенного потенциала, когда $d\sigma = C_m E^{-m} T^{-1-m} dT$, в линейном приближении по U_0/E , моменты $H_l^n(E, \eta)$ удовлетворяют тем же уравнениям, что и моменты функции $\frac{3}{4\pi^2} \frac{F_D(x, E, \eta)}{NC_0 U_0}$, где $F_D(x, E, \eta)$ — распределение энергии, затраченной при упругих столкновениях; C_0 — константа в сечении рассеяния атомов мишени при $m = 0$. Случай $m = 0$ выбран как наиболее адекватный при энергиях атомов, характерных для распыления ≤ 100 эВ. Из совпадения уравнений, которым удовлетворяют моменты, следует и равенство функций $H(x, E, \eta) = \frac{3}{4\pi^2} \frac{F_D(x, E, \eta)}{NC_0 U_0}$. Таким образом,

$$S = H(0, E, \eta) = \frac{3}{4\pi^2} \frac{F_D(0, E, \eta)}{NC_0 U_0}. \quad (91)$$

Формула (91) может быть получена более наглядно из следующих соображений: $\lambda = (NC_0)^{-1}$ — длина пробега атомов мишени и в то же время глубина слоя, из которого может быть передана энергия распыляемым атомам. Энергия, вкладываемая в процесс распыления при каскадном механизме, равна $\frac{1}{NC_0} F_D(0, E, \eta)$.

Для степенного потенциала при $m \rightarrow 0$ [33] число смещенных атомов в каскаде с энергией, большей E_0 , равно (см. § 3)

$$v(E, E_0) = \frac{6 \ln 2}{\pi^2} \frac{E^*}{E_0}, \quad (92)$$

где следует считать $E^* = \lambda F_D(0, E, \eta)$.

Спектр энергий смещенных атомов получается дифференцированием (92) по E_0 и равен

$$\frac{6 \ln 2}{\pi^2} \frac{F_D(0, E, \eta)}{NC_0} \frac{dE_0}{E_0^2}, \quad (93)$$

Интегрирование (93) по всем импульсам, направленным из мишени при условии плоского потенциального барьера $E_0 > U_0 \eta^{-2}$, дает коэффициент распыления

$$S = \frac{\ln 2}{\pi^2} \frac{F_D(0, E, \eta)}{NC_0 U_0}, \quad (94)$$

который отличается от (91) лишь множителем $\frac{4}{3} \ln 2 \approx 0,92$.

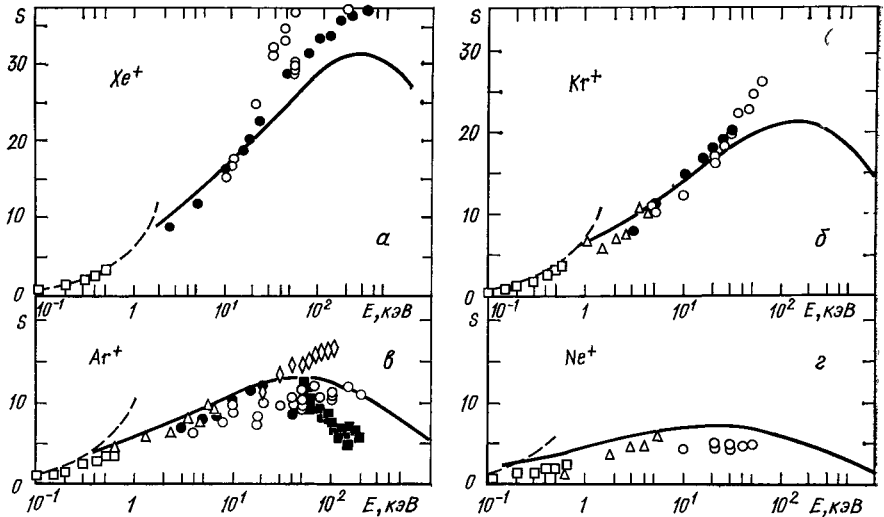
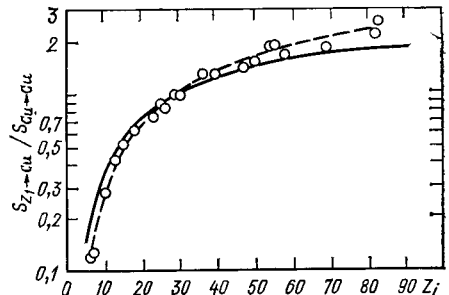


Рис. 11. Зависимости коэффициентов распыления меди ионами Xe (а), Kr (б), Ar (в), Ne (г):

кривые — теория [50]; точки — экспериментальные данные различных авторов

Формула (91) неоднократно проверялась экспериментально, см., например, рис. 11 и 12 [50, 51]. В общем теория достаточно хорошо передает зависимость коэффициента распыления S от энергии E и

Рис. 12. Зависимость коэффициента распыления меди различными ионами с энергией 45 кэВ от атомного номера иона Z_i . Коэффициенты распыления нормированы на коэффициент самораспыления, $Cu^+ \rightarrow Cu$: сплошная кривая — теория [50]; пунктир — аппроксимация экспериментальных точек [51]



вида иона Z_i . Зависимость S от угла падения ионов θ (при $\theta \leq 70^\circ$) также удовлетворительно описывается теорией. В то же время значения коэффициентов распыления, вычисленные по формуле (91), могут

отличаться от экспериментальных в 2—3 раза. Однако для легких ионов (H^+ , D^+ , T^+ , He^+) и при малых энергиях ($E \lesssim 1$ кэВ) расхождение теории с экспериментом существенно больше, причем не только в численных значениях, но и в функциональных зависимостях $S(E, Z_i, \theta)$. Причины этих расхождений и ограничения теории [50] будут обсуждаться ниже.

Формулу (91) можно модифицировать, представив $F_D(0, E, \eta)$ как

$$F_D(0, E, \eta) = \alpha(Z_i, Z_a, E, \eta) \left(\frac{dE}{dx} \right)_n,$$

где $\alpha(Z_i, Z_a, E, \eta)$ — некоторая безразмерная функция, которая описывает рассеяние иона и слабо зависит от энергии.

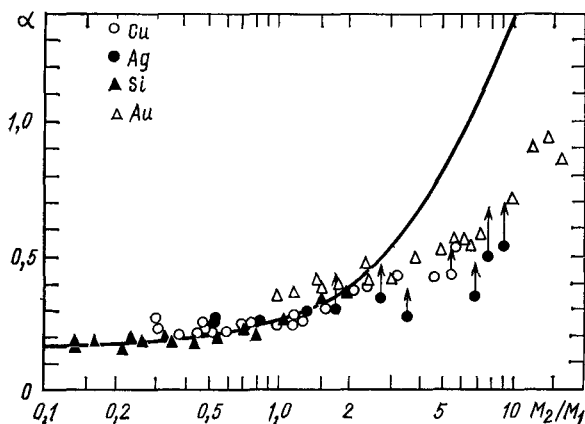


Рис. 13. Зависимость безразмерного коэффициента α от отношения масс M_2/M_1 : теоретическая кривая — расчет по теории [50]; точки — экспериментальные данные различных авторов, проведенные в [50]

При нормальном падении ($\eta = 1$) для $M_a/M_i < 1$ $\alpha < 1$, поскольку смещенные атомы получают импульс, направленный в глубь мишени. При увеличении $\frac{M_a}{M_i}$ α растет (рис. 13), и при $M_a/M_i \gg 1$ $\alpha > 1$, что объясняется рассеянием падающих ионов в поверхностном слое λ и увеличением выделенной энергии вблизи поверхности. Зависимость коэффициента распыления от угла падения θ содержится в $\alpha(\cos \theta)$. При $\theta \lesssim 70^\circ$ $\alpha \propto (\cos \theta)^{-\nu}$, причем $\nu \approx 5/3$ при $M_a/M_i \lesssim 1$ и $\nu \approx 1$ при $M_a/M_i \approx 1$.

Коэффициент распыления при $\theta = 0$ удобно представить также в виде

$$S = \frac{3,56}{U_0} \frac{M_i}{M_i + M_a} \frac{Z_i Z_a}{(Z_i^{2/3} + Z_a^{2/3})^{1/2}} g(\epsilon). \quad (95)$$

Функция $g(\epsilon)$ зависит только от безразмерной энергии ϵ и не зависит от материала мишени и вида ионов (за исключением случая, когда $M_a/M_i \gg 1$).

Как при выводе формулы (91), так и при расчетах функции $F_D(0, E, \eta)$ делается целый ряд предположений, которые ограничивают область применимости теории [50].

1. При выводе формулы (91) используется разложение по параметру U_0/E_0 , где E_0 — энергия смещенных атомов в каскаде.

2. Предполагается изотропное распределение импульсов всех смещенных атомов.

3. Не учитывается энергия связи атомов в объеме и энергия, затрачиваемая на смещение атома из угла кристаллической решетки.

4. При расчете функции $F_D(0, E, \eta)$ обычно учитываются все энергии, переданные атомам, в том числе и $E_0 < E_d$.

5. Расчеты $F_D(0, E, \eta)$, как правило, проводятся для безграничной среды.

Уже первое ограничение делает теорию неприменимой для легких ионов и малых энергий, когда энергия, переданная первичным смещенным атомом, мала и сравнима с энергией связи поверхностных атомов U_0 или с энергией смещения атомов в объеме E_d .

Второе условие выполняется, если число столкновений в каскаде не очень мало. Если энергия атомов невелика и их взаимодействие можно описывать взаимодействием твердых сфер, то при рассеянии атомов с равными массами распределение импульсов изотропно. Быстрые первичные ионы, для которых потенциал рассеяния экранированный кулоновский или даже кулоновский, имеют вытянутую вперед индикатрису рассеяния, а атомы отдачи, смещенные такими первичными ионами, имеют импульсы, распределенные в основном вблизи плоскости, перпендикулярной первоначальному импульсу ионов. Поэтому предположение об изотропности импульсов атомов в каскаде справедливо лишь для вторичных смещенных атомов. Следует отметить, что сама каскадная модель подразумевает достаточно большое число столкновений в каскаде, а это возможно только при условии, если энергии каскада много больше энергии смещения атомов E_d . Это опять-таки не выполняется для легких ионов и малых энергий.

Пренебрежение энергией связи и энергией смещения атомов мишени в объеме оправдано лишь при больших энергиях смещенных атомов. Если атому мишени передается энергия $E_0 < E_d$, то атом не смещается и эта энергия не дает вклада в распыление в рамках каскадного механизма, а идет лишь на разогрев кристаллической решетки. Поэтому при расчете функции $F_D(x, E, \eta)$ надо учитывать лишь энергии $E_0 > E_d$. Отметим, что еще в теории переноса нейтронов [52] в интегральный член для функции распределения $F_a(x, E, \eta; E_0, \eta_0)$ вводилась $h(E_0)$ — вероятность того, что частица с энергией E_0 не захватывается при столкновении. При этом интегральный член в уравнении (87) записывается так:

$$N \int d\sigma [F_a(r, v, v_0) - h(v'_0) F_a(r, v, v'_0) - h(v''_0) F_a(r, v, v''_0)].$$

Но в теории переноса нейтронов обычно $h(E_0)$ — это константа, а

в нашем случае \hbar близка к ступенчатой функции:

$$\hbar = 0 \quad \text{при } E_0 < E_d; \quad \hbar = 1 \quad \text{при } E_0 > E_d. \quad (96)$$

При \hbar , определенном (96), кинетическое уравнение не решалось. Учет энергии связи атома в кристалле E_s , равной разности потенциальной энергии атома в узле кристаллической решетки и смещенного атома, можно провести в кинетических уравнениях заменой энергии смещенных атомов E' и E'' на $E' - E_b$ и $E'' - E_b$ соответственно.

В работе [50] было показано, что в разложении по малым параметрам E_s/E' и E_s/E'' энергию связи E_b можно учесть введением эффективной энергии связи $U_0^*(E_b)$. Вид зависимости $U_0^*(E_b)$ определяется формой потенциального барьера, но во всех случаях введение U_0^* оправдано лишь при $U_0 \gg E_b$, что, вообще говоря, не выполняется.

Расчет функции $F_D(x, E, \eta)$ в приближении безграничной среды завышает коэффициент распыления. Зигмундом на основе простых физических соображений получено выражение для скорректированного коэффициента распыления S_c , в котором учтено наличие реальной поверхности:

$$S_c = \frac{S - R \langle S \rangle}{1 + \langle S_s \rangle}, \quad (97)$$

где S — нескорректированный коэффициент распыления; R — коэффициент отражения ионов; $\langle S \rangle$ — коэффициент распыления, усредненный по всем углам и энергиям отраженных ионов, а $\langle S_s \rangle$ — коэффициент самораспыления (т. е. распыления собственными атомами), усредненный по энергетическому и угловому распределению распыленных атомов.

Учет самораспыления $\langle S_s \rangle$ несуществен из-за малых энергий распыленных атомов, а поправочный член $\langle R \langle S \rangle \rangle$ становится заметным при больших углах падения θ , когда велик коэффициент отражения. В работе [53] было показано, что на кривой зависимости $S(\theta)$ должны наблюдаться максимумы при $\theta = 68 \div 85^\circ$ в зависимости от энергии и соотношения масс иона и атома мишени. Максимум $S(\theta)$ наблюдается, когда глубина \hbar (75), на которую проникают ионы, становится сравнима с глубиной $\lambda = (C_0 N)^{-1}$ слоя, участвующего в распылении.

Таким образом, каскадная теория [50] применима, когда вкладываемая в процесс распыления энергия $\frac{F_D(0, E, \eta)}{C_0 N} \gg U_0$, т. е. $S > 1$.

Это условие не выполняется для легких ионов всегда и для тяжелых ионов при малых энергиях, и теория действительно в этих случаях «работает плохо». Однако в области больших энергий, где также $S < 1$, теория дает правильную зависимость S от энергии иона: $S(E)$ ведет себя как тормозное кулоновское сечение рассеяния $S \sim \frac{1}{E} \ln E$. Коэффициент распыления типичных металлов в максимуме $S(E)$ ионами H^+ составляет примерно 10^{-2} атом/ион, а при распылении ионами He^+ — 10^{-1} атом/ион, поэтому теория [50] для

них, естественно, неприменима. В [54] для легких ионов были подобраны эмпирические функции $g(\epsilon)$, входящие в формулу (95).

Оказалось, что для легких ионов H^+ , D^+ , T^+ , He^+ вид функции $g(\epsilon)$ зависит от массы иона. В области максимума эмпирические $g(\epsilon)$ на порядок и более превышают $g(\epsilon)$, полученные из теории [50]. В области высоких энергий $\epsilon \gg 1$ все функции $g(\epsilon)$ имеют асимптотику $\ln \epsilon/\epsilon$. Функции $g(\epsilon)$ для ионов H^+ , D^+ , T^+ , He^+ , а также для тяжелых ионов $M_i \gg M_a$ представлены на рис. 14.

В этой же работе [54] было показано, что если в формулу (95) ввести поправочный множитель, определяемый из эксперимента по распылению данного материала, то коэффициенты распыления этого вещества другими ионами и с другой энергией ($\epsilon \geq 0,2$) можно рассчитать, используя эмпирические функции $g(\epsilon)$, с хорошей точностью.

Расхождение такого расчета с экспериментами для простой одноатомной мишени не превышало 10—15%, а для сложных многоатомных веществ, когда для расчетов использовались \bar{Z}_a и \bar{M}_a (что вообще не оправдано, см. ниже), расхождение было $\leq 30\%$.

Упомянув эмпирические формулы, следует отметить простую формулу Смита [55], хорошо аппроксимирующую зависимости коэффициента распыления от энергии ионов E и атомных номеров Z_i и Z_a при $\eta = 1$ в той же области, где применима теория [50]:

$$S = \frac{20}{U_0} Z_i^2 Z_a^2 \frac{M_i}{M_a} \frac{E}{(E + 50Z_i Z_a)^2}, \quad (98)$$

где U_0 и E выражены в эВ.

В области энергии около 100 эВ для легких ионов, где теории по существу нет, удовлетворительное согласие с экспериментом дает эмпирическая формула [56]

$$S_N = 8,5 \cdot 10^{-3} \tilde{E}^{1/4} (1 - 1/\tilde{E})^{7/2}, \quad (99)$$

где S_N — универсальный нормированный коэффициент распыления, $S_N = 0,75 M_a \lambda^{5/3} S$, $\lambda = 4M_i M_a / (M_i + M_a)^2$; $\tilde{E} = E/E_{II}$ — нормированная энергия иона (E_{II} — пороговая энергия). При $M_i/M_a < 0,4$ E_{II} выражается через энергию связи U_0 :

$$E_{II} = U_0(1 - \lambda)/\lambda. \quad (100)$$

Пока обсуждалось распыление одноатомных веществ, но практический интерес представляют также вещества, состоящие из атомов различных сортов, — это сплавы и соединения.

В работах [8, 57] аналогично теории [61] было рассмотрено распыление сложного аморфного вещества с плотностью атомов i -го сорта

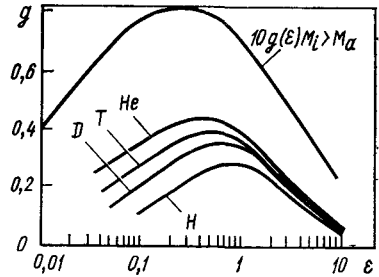


Рис. 14. Функции $g(\epsilon)$ для ионов H^+ , D^+ , T^+ , He^+ , а также для ионов с $M_i > M_a$

$N_i = \alpha_i N$ (N — полное число атомов в единице объема). Предполагалось, что атом каждого сорта имеет свою энергию связи U_i , а сечение взаимодействия налетающего атома i -го сорта с атомом k -го сорта описывается сечением

$$\begin{aligned} d\sigma_{ik} &= C_{ik} E^{-m_i} T^{-1-m_i} dT; \\ 0 < T < \gamma_{ik} E; \\ \gamma_{ik} &= \frac{4M_i M_a}{(M_i + M_a)^2}. \end{aligned} \quad (101)$$

Записывая уравнения Больцмана для распределения по скоростям частиц каждого сорта и вводя аналогично (89) функцию $H_{ik}(x, E, \eta)$, которая представляет собой поток атомов k -го сорта из мишени, вызванной атомом i -го сорта, авторы [69] получили выражение для коэффициента распыления атомов i -го сорта:

$$S_i = \frac{B_i}{U_i} F_D(0, E, \eta), \quad (102)$$

где F_D — энергия, теряемая бомбардирующими ионами с энергией E и углом падения $\theta = \arccos \eta$ вблизи поверхности ($x = 0$) в результате упругих соударений со всеми атомами мишени. Коэффициенты B_i выражают долю энергии F_D , которая идет на распыление атомов i -го сорта.

Для двухатомных веществ, состоящих из атомов 1-го и 2-го сорта, отношение коэффициентов распыления

$$\frac{S_1}{S_2} = \frac{B_1 U_2}{B_2 U_1} = \frac{\alpha_1 U_1^{2m_1-1}}{\alpha_2 U_2^{2m_2-1}} \frac{(1-2m_2)(1-m_2)^2}{(1-2m_1)(1-m_1)^2} \frac{C_{21}}{C_{12}} \gamma^{m_2-m_1}. \quad (103)$$

Из (103) следует, что при $U_1 = U_2$ преимущественно распыляется легкая компонента вещества, что подтверждается многочисленными экспериментами. Практически, однако, обеднение приповерхностного слоя одной из компонент приводит к диффузии этой компоненты из глубины. Процесс осложняется в ряде случаев радиационно стимулированной сегрегацией элементов, которая проявляется в том, что на поверхность из глубины выходит какой-либо элемент сплава или соединения. Так, в алюминиевом сплаве АМГ-2, содержащем в исходном состоянии 0,4% Mg, поверхность образца, подвергнутого облучению ионами, содержит до 50% Mg.

Теоретические исследования распыления сложных соединений пока не охватывают всех сторон этого явления. Остается непонятным, например, наблюдавшийся факт [58] резкого изменения (в несколько раз или даже на порядок) коэффициента распыления вещества при добавлении в него примеси в количестве всего нескольких атомных процентов.

Следует отметить, что даже для простых веществ, когда теория [61] применима, она позволяет рассчитать значения S с точностью до фактора 2—3. Это обусловлено, во-первых, модельностью представлений об энергии связи поверхностных атомов, во-вторых, необхо-

димостью учета кристаллической структуры мишени и, в-третьих, тем, что для ряда случаев вклад других механизмов распыления, упоминавшихся ранее, не мал.

В большинстве работ использовалась модель плоского барьера, однако уже в работе [50] показано, что модели плоского и сферического барьера приводят к разным формулам для коэффициентов распыления. Наиболее подробно роль формы потенциального барьера исследовалась в работе [59].

Авторы [59] рассмотрели более общую модель — сферический барьер — ступеньку с преломлением траекторий движения распыляемых атомов, причем центр барьера-сферы лежит ниже начального положения распыляемого атома. В такой модели «внутренние» переменные E , Φ , θ , т. е. энергия, азимутальный и полярный углы атома до прохождения барьера, связаны с «внешними» переменными, ε , φ , θ , характеризующими энергию и углы вылета атома после прохождения барьера, соотношениями

$$E = \varepsilon + U; \quad \Phi = \varphi; \quad \Theta = \theta \frac{n}{n\gamma + 1 - \gamma}, \quad (104)$$

где $n = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\varepsilon + u}}$; U — энергия связи — высота барьера; R — радиус сферы-барьера; r — расстояние от начального положения атома до верхней точки барьера; $\gamma = r/R$. Модель учитывает многочастичный характер связи и несимметрию тепловых колебаний поверхностных атомов. Вид дифференциального энергетического спектра распыленных атомов и полный коэффициент распыления сильно зависят от параметра γ .

Так, если энергетическое распределение смещенных атомов внутри потенциального барьера $\mathcal{F}(E) \approx \text{const}/E^\lambda$ (в каскадной теории $\lambda = 2$), то энергетический спектр вылетающих атомов для плоского барьера ($\lambda = 0$) имеет максимум при

$$\varepsilon_{\text{макс}} = U/\lambda. \quad (105)$$

Энергетический спектр для сферического барьера ($\gamma = 1$) имеет максимум при $\varepsilon = 0$ и затем спадает как $(\varepsilon + U)^{-\lambda}$. При $\lambda = 2$ коэффициент распыления для плоского барьера $S_{\gamma=0}$ в три раза меньше, чем для сферического барьера $S_{\gamma=1}$.

Таким образом, зная энергетический спектр распыленных атомов, можно найти параметры U и γ (один параметр, например r , можно постулировать равным межатомному расстоянию) потенциального барьера для поверхностных атомов и уточнить фактор $\frac{3}{4\pi^2} \frac{1}{NC_0U_0}$ в формуле (91) для коэффициента распыления. Однако, к сожалению, вид энергетического спектра распыленных атомов зависит и от материала мишени, и от вида и энергии бомбардирующих ионов. Это ограничивает практическую ценность работы [59].

Кристаллическая структура мишени, вообще говоря, влияет и на энергию, передаваемую поверхностным атомом при упругих столкновениях, и на передачу энергии из глубины мишени к поверхности.

В работах [60, 61] было теоретически показано, что если ионный пучок входит в кристалл в направлениях плотной упаковки, то такие направления наиболее прозрачны для ионов и передаваемая энергия, а следовательно, и коэффициент распыления минимальны. При ориентациях пучка, не совпадающих с направлениями атомных рядов, когда кристаллические зерна ориентированы хаотически, результаты усреднения по ориентациям зерен передаваемой энергии и коэффициента распыления совпадают со значением для аморфной мишени.

Передача энергии при столкновении смещенных атомов возможна также в фокусируемых последовательностях столкновений, в которых один из смещенных атомов, получив импульс в направлении плотной упаковки, испытывает почти лобовое столкновение со следующим атомом в этом атомном ряду. При этом для атомов равной массы происходит почти полная передача энергии следующему атому.

Возможно условие, при котором угол между импульсами атомов и кристаллографическим направлением атомного ряда θ_n уменьшается от столкновения к столкновению (с ростом n). Для модели атомов твердых сфер с диаметром D (E), зависящим от энергии, условие $\theta_{n+1} < \theta_n$ имеет вид

$$\cos \theta_n > l/2D (E),$$

где l — расстояние между атомами в кристалле. Отсюда следует существование «энергии фокусировки» E_f максимальной энергии, при которой возможна фокусировка. E_f находится из условия $2D (E_f) = l$ и приблизительно равна энергии замещения атомов вдоль плотноупакованного ряда и в несколько раз превышает усредненную по углам энергию смещения атомов E_a . В отличие от фокусируемых последовательностей столкновений, называемых также «фокусонами», возможны краудионные последовательности столкновений, или «краудионы», в которых θ_n однако все же остается малым. При краудионных столкновениях возможны замещения атомов. Практически важную роль играют такие последовательности столкновений, в которых θ_n сначала растет с ростом n и при этом уменьшается энергия, передаваемая по цепочке, до такого значения, когда начинает выполняться условие фокусировки и θ_n в дальнейшем уменьшается с ростом n . Поэтому нет смысла четко разделять фокусоны и краудионы.

Описанные коррелированные последовательности столкновений осуществляются в направлениях максимально плотной упаковки атомов, где l минимально, например в направлениях $\langle 110 \rangle$ у кубических гранцентрированных кристаллов.

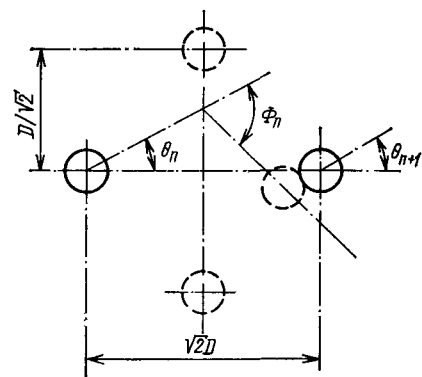


Рис. 15. Фокусирующий эффект соседних рядов в направлении $\langle 100 \rangle$ кубических гранцентрированных (КГЦ) кристаллов

В менее плотноупакованных атомных рядах, например $\langle 100 \rangle$ в кубических гранецентрированных кристаллах, фокусировка, т. е. уменьшение θ_n от столкновения к столкновению, возможна только вследствие направляющего и фокусирующего действия соседних атомных рядов, атомы которых на рис. 15 изображены пунктирными кружками. В этом случае углы θ_{n+1} и θ_n связаны следующим рекуррентным соотношением:

$$\theta_{n+1} = \left(\frac{IJ(E)}{\sqrt{2}} \right) \Phi_n - (\sqrt{2} IJ(E) - 1) \theta_n, \quad (106)$$

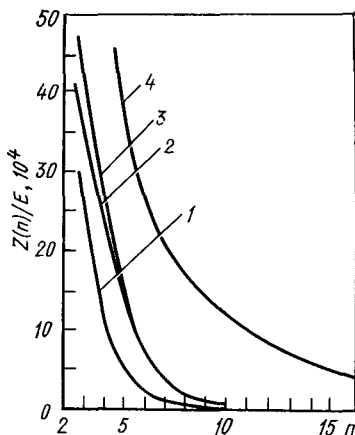
где
$$J(E) = \int_{r_{\text{мин}}}^{\infty} \frac{dr}{r^2 \sqrt{1 - V(r)/E}} (V(r) -$$

потенциал взаимодействия атомов в атомном ряду); Φ_n — угол отклонения n -го атома при рассеянии на атомах соседнего ряда.

Подробный обзор коррелированных последовательностей столкновений был

Рис. 16. Зависимость числа последовательных столкновений Z , созданных на единицу энергии (в эВ) в каскаде столкновений в меди, от длины пробега n :

кривые 1—3 соответствуют направлению $\langle 100 \rangle$ КГЦ-кристаллов: 1 — $E_{\text{мин}} = E_d = 22,5$ эВ; 2 — $E_{\text{мин}}$ равна высоте потенциального барьера, создаваемого кольцом атомов соседних рядов; 3 — $E_{\text{мин}} = U_0 = 7$ эВ; 4 — число коррелированных последовательностей столкновений в направлении $\langle 110 \rangle$ КГЦ-кристалла [64]



сделан в [62], а особенности распыления монокристаллов, обусловленные коррелированными последовательностями столкновений, рассмотрены в обзоре [63].

На рис. 16 представлены результаты теоретических расчетов [64, 65] длин пробега коррелированных последовательностей столкновений, в которых использовался борн-майеровский потенциал взаимодействия атомов $V(r) = A \exp(-r/a)$, рассматривались как фокусоны, так и краудионы и учитывалось взаимодействие с соседними рядами. На рисунке дано число коррелированных последовательностей столкновений Z , образующихся в каскаде на единицу энергии, вложенной в каскад, от длины пробега до заданной величины энергии $E_{\text{мин}}$, в качестве которой выбиралась либо энергия смещения E_d , либо энергия связи поверхностного атома U_0 .

Чтобы оценить вклад коррелированных последовательностей столкновений в коэффициент распыления, надо сравнить, во-первых, полное число коррелированных последовательностей столкновений

$$\nu_{\langle ikl \rangle} = \int_1^{\infty} Z dn \quad (\nu_{\langle ikl \rangle} \text{ — число столкновений в данной последо-}$$

вательности, образующихся в каскаде) и число всех смещенных атомов в каскаде ν , а во-вторых, среднюю длину пробега в коррелированных последовательностях столкновений $\overline{\lambda_{<ikl>}}$ и длину пробега смещенного атома в каскаде $\lambda = (C_0 N)^{-1}$, которая входит в (91). Из расчетов [64, 65] следует, что для меди $\nu_{<100>} \approx E/60$, $\nu_{<110>} \approx E/20$, а $\nu = E/2E_d \approx E/50$ (E — энергия, затраченная в каскаде на упругие столкновения, в эВ); $\overline{\lambda_{<100>}} = 3,3$ атомных расстояний, $\overline{\lambda_{<110>}} = 4,5$ атомных расстояний, а $\lambda = (C_0 N)^{-1} \approx 3 \div 4$ атомных расстояний [50].

Следует также взять проекцию $\overline{\lambda_{<110>}}$ и $\overline{\lambda_{<100>}}$ на нормаль к поверхности и усреднить по всем возможным углам выхода на поверхность атомных рядов $\langle 110 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$. При этом глубина, с которой передается энергия по коррелированным последовательностям столкновений, уменьшается примерно в $\sqrt{2}$ раз.

Таким образом, мы видим, что глубина, с которой передается энергия в фокусированных последовательностях столкновений, практически та же, что и глубина, с которой передается энергия в некоррелированном каскаде. Число же коррелированных последовательностей сравнимо с числом смещенных атомов в каскаде.

Таким образом, механизм коррелированных последовательностей столкновений может внести заметный вклад в распыление, но поскольку число коррелированных последовательностей также пропорционально энергии, переданной в упругих столкновениях в каскаде и $\lambda_{<ikl>} \approx \lambda = (C_0 N)^{-1}$, то учет коррелированных последовательностей столкновений приведет лишь к изменению числового множителя перед $F_D(0, E, \eta)$ в формуле (91).

Следует отметить, что в приведенных оценках не учтены дефекты кристалла, возникающие при ионной бомбардировке и, как было показано [66], уменьшающие длины коррелированных последовательностей столкновений.

Кроме того, последовательности столкновений без направляющего действия соседних рядов возможны лишь в КГЦ-металлах, таких, как Cu, Ag, Au. Для этих металлов вклад фокусонов, исследованный по угловым распределениям вылетающих атомов, составляет действительно до 30—50%.

В практически наиболее интересных металлах с кубической объемно-центрированной решеткой (Fe, Mo, Nb, W), их сплавах и соединениях, а также в графитовых материалах с гексагональной решеткой возможны лишь направляемые коррелированные последовательности столкновений, вклад которых значительно меньше.

Отметим, что зависимость коэффициента распыления от атомного номера мишени — периодическая, причем максимумы наблюдаются для меди, серебра, золота, платины. Это, по-видимому, объясняется вкладом коррелированных последовательностей столкновений в распыление этих металлов, а также малой энергией связи поверхностных атомов.

Как уже отмечалось выше, для легких ионов и при малых энергиях механизм распыления в результате развернутого каскада дает

малый вклад, поскольку легкие ионы передают атомам мишени энергию, в основном сравнимую с энергией смещения атомов E_d . При этом создаются либо одиночные смещенные атомы, либо атомы, способные создать еще лишь 1—2 смещенных атома. В такой ситуации основной вклад в распыление дают быстрые столкновительные процессы. Эти процессы изучались в основном с помощью моделирования на ЭВМ, которое подробно освещается в обзоре [67].

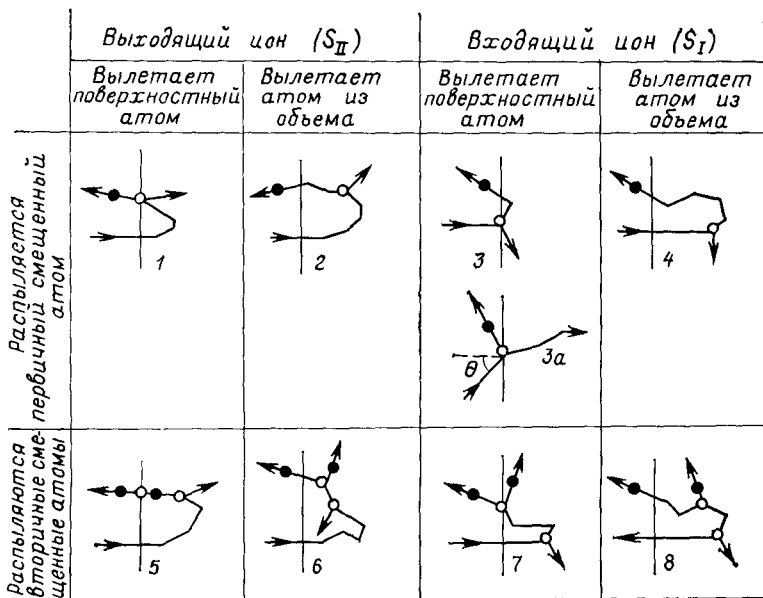


Рис. 17. Различные процессы, приводящие к распылению легкими ионами малых энергий [68]:

→ — ион; ● — смещенный атом; ○ — вакансия

На рис. 17 [68] приведены возможные механизмы распыления легкими ионами. Анализ траекторий ионов и смещенных атомов мишени, проведенный на ЭВМ [68], показал, что при малых энергиях (0,1—10 кэВ) для легких ионов основной вклад дают процессы распыления, производимые отраженными ионами S_{II} и в особенности 1 и 2, которые приводят к распылению первичных смещенных атомов.

Как видно из рис. 17, распыление легкими ионами обусловлено, как правило, небольшим числом столкновений. В то же время наличие нескольких столкновений затрудняет аналитическое рассмотрение таких процессов. Теоретически рассмотрен [69] лишь наиболее простой случай S_I (рис. 17, поз. 3а), когда влетающий с углом падения $\theta \neq 0$ ион непосредственно выбивает поверхностный атом. Конкретный расчет [69], проведенный для случая Kr^+ (44 кэВ) → Al, показал, что вклад механизма S_I (рис. 17, поз. 3а) в этом случае составляет примерно 15%.

Идея термического механизма распыления была высказана еще в 1902 г. Штарком, а затем развивалась в ряде работ, обзор которых можно найти в [38, 70]. Суть этого механизма заключается в следующем. После того как энергия всех смещенных атомов становится меньше E_d , происходит термализация атомов в объеме каскада столкновений. Температура T этой разогретой области становится достаточной для испарения атомов. В предположении термодинамического равновесия можно определить поток атомов с поверхности:

$$q = p (2\pi M_a T)^{-1/2}, \quad (107)$$

где $p = p_0 \exp(-H/T)$ — давление пара металла, находящегося в равновесии с поверхностью; p_0 и H — константы, не зависящие от T , причем H — энергия сублимации. В (107) для простоты рассматриваются одноатомный газ и одноатомный металл.

Вклад испарения из горячего пятна, называемый коэффициентом «термического распыления» S_T , равен

$$S_T = \int q(T(r, t)) 2\pi r dr dt - \int q(T_0) 2\pi r dr dt, \quad (108)$$

где r — полярная координата, отсчитываемая на поверхности от точки влета иона, интегрирование по dr и dt ведется от 0 до ∞ ; T_0 — средняя температура мишени, а второй член в (108) необходимо вычесть, чтобы не учитывать испарение не обусловленного ударом иона. Самая сложная и неопределенная задача в теории «термического распыления» — это определение функции $T(r, t)$. В наиболее простой постановке $T = T_0 + T_1(r, t)$, а T_1 находится из уравнения теплопроводности

$$\frac{\partial T_1}{\partial t} = k \Delta T_1 \quad (109)$$

с постоянным коэффициентом теплопроводности k . Начальное распределение температуры определяется размерами и формой каскада атомных столкновений. При этом в зависимости от вида и энергии иона задача может иметь и сферическую, и цилиндрическую геометрию. Остыванием за счет излучения можно пренебречь, потому что за характерное время $t_{\text{оф}}$ существования горячей области энергия не передается от атомной к электронной подсистеме. Поэтому на поверхности ($z = 0$) мишени принимается граничное условие отражения тепла

$$T = T_0 + T_1(z, r, t) + T_1(-z, r, t). \quad (110)$$

При этих предположениях было получено [85]:

$$\left. \begin{aligned} S_T &= p_0 \exp\left(-\frac{H}{T_0 + T_1^0}\right) \frac{\pi a^2 t_{\text{оф}}}{\sqrt{2\pi M_a (T_0 + T_1^0)}}; \\ t_{\text{оф}} &\approx \frac{(\Delta Z)^2}{4k} \left(\frac{T_0 + T_1^0}{H}\right)^2 \frac{2\delta_z}{\frac{1}{2} + \frac{\langle \Delta z^2 \rangle}{\langle x^2 \rangle} - \frac{\langle z \rangle^2}{2\delta_z \langle \Delta z^2 \rangle}}, \end{aligned} \right\} \quad (111)$$

где T_1^0 — максимальная температура в точке $z = x = 0$; a — атомный размер в кристалле мишени; $\langle z \rangle$ — средняя глубина каскада:

$\langle \Delta z^2 \rangle$ и $\langle x^2 \rangle$ — средние квадратичные размеры каскада по координатам z и x ; величина δ_z связывает среднеквадратичные размеры единичного каскада и среднеквадратичные размеры, усредненные по многим каскадам (см. конец § 3).

Наиболее слабыми местами теории термического распыления являются использование 1) выражения (107) для равновесного потока испаряющихся атомов и 2) уравнения теплопроводности (109). Поскольку T^* лишь немного меньше H или даже сравнимо с этой величиной, то, очевидно, что испарение атомов отнюдь не равновесно. Отметим также, что неравновесный характер испарения должен изменить также граничное условие (110), в котором, по-видимому, нужно учесть охлаждение за счет испарения.

Распространение тепла, выделенного в ограниченном объеме, может происходить в виде ударной волны [71], диссипирующей за конечное время и переходящей далее в распространение тепла согласно уравнению теплопроводности. Условие возникновения и время распространения ударной волны пока не исследованы. Неясен также вопрос о коэффициенте температуропроводности k . Поскольку за время $t_{эф}$ энергия еще не передается электронам, то обычно используют коэффициенты теплопроводности, характерные для изоляторов. Однако, как отмечалось в [70], в рассматриваемом процессе не участвуют фононы с длиной волны, большей, чем размер горячей области. В другом случае [72] в качестве k использованы значения, оцененные для идеального газа, что также неадекватно, поскольку при этом учитывается только энергия поступательного движения.

Возникает также вопрос о зависимости k от температуры и пространственных координат. Эти вопросы рассмотрены в [47]. Учет лишь температурной зависимости $k(T)$ несущественно изменяет результат и, кроме того, не решает более важных физических проблем.

Несмотря на серьезные недостатки теория термического распыления правильно отражает некоторые характерные закономерности. В энергетических спектрах распыленных атомов можно выделить группу частиц с максвелловским распределением. Напомним, что для линейного каскада, описываемого теорией [50], спектр распыленных атомов пропорционален E^{-2} . Распыление с максвелловским распределением по энергии интерпретируется как термическое распыление. Наблюдались характерные температуры таких распыленных атомов: $T \approx H$ [73] и $T < H$ [74]. Вклад термического распыления при комнатных температурах для ионов средних масс ($Z_i \approx 30$) составляет около 10%, но быстро растет с увеличением массы ионов. Отметим, что для тяжелых, но не очень быстрых ($E \sim 1$ кэВ) ионов плотность смещенных атомов в каскаде больше плотности атомов в мишени, т. е. отдельные части каскада перекрываются. Для такого режима неприменима линейная теория каскада, описанная в § 3, на которой основывается теория распыления [50]. В этом случае область каскада называется «пиком» и распыление рассматривается [72] на основе механизма испарения атомов из области пика. Представление о термическом пике для области каскада большой плотности, по-видимому, разумно при рассмотрении объемных дефектов [75], поскольку в конце

процесса все смещенные атомы термализуются. Однако сведение всего распыления к испарению из термического пика вряд ли обоснованно, так как среди распыляемых атомов присутствуют и атомы с энергией, большей энергии смещения E_d , которые уж никак нельзя считать термализованными. Оправданием такого подхода служит наблюдавшееся превышение (примерно в 2 раза) коэффициента распыления золота ионами $Te^{\frac{1}{2}}$ (360 кэВ) в пересчете на один атом Te по сравнению с коэффициентом распыления ионами Te^+ (180 кэВ) [76]. При бомбардировке молекулярными ионами происходит перекрытие каскадов от двух атомов Te и температура пика растет, что приводит к нелинейному увеличению термического распыления. По линейной же теории, основанной на формуле (91), коэффициенты распыления в пересчете на один атом Te должны быть равны в обоих случаях.

Кроме того, из (5.25) следует, что вклад S_T должен экспоненциально расти с увеличением средней температуры мишени T . Действительно, экспериментально наблюдается резкое возрастание коэффициента распыления S с ростом температуры, начиная с некоторой температуры T_1 (эмпирически $T_1 \approx H/40$) (см., например, [77]). Таким образом, термическое распыление может стать основным фактором эрозии деталей термоядерного реактора, работающих при высоких температурах и подверженных ионной бомбардировке, например приемных пластин дивертора.

Хотя в начале параграфа указывалось, что возбуждение электронной подсистемы не оказывает существенного влияния на распыление материалов, представляющих интерес для термоядерного реактора, однако существует специальный случай, который может быть важен, — бомбардировка многозарядными ионами. Поскольку тяжелые примеси в термоядерной плазме могут иметь заряд вплоть до $Z = 20 \div 25$ и попадать на приемные пластины дивертора, то распыление многозарядными ионами представляет особый интерес.

В [78] было показано, что многозарядные ионы нейтрализуются в результате каскадного оже-процесса, причем число родившихся оже-электронов приблизительно вдвое больше заряда налетающего иона. Поскольку время оже-процесса составляет всего $10^{-14} \text{—} 10^{-15}$ с, налетающий многозарядный ион, имеющий скорость около 10^7 см/с, нейтрализуется на пути порядка одного межатомного расстояния. В результате образуется область однократно заряженных ионов с суммарным зарядом около $2Z$. Энергия, уносимая оже-электронами, оказывается мала по сравнению с энергией кулоновского отталкивания образовавшихся ионов:

$$E_c \approx Z \sum_{i=1}^{2Z-1} \frac{e^2}{d_i} \approx \frac{(2Z^2 - Z) e^2}{R}, \quad (112)$$

где суммирование ведется по расстояниям между ионами d_i ; R — средний радиус области заряженных ионов. Грубая оценка коэффициента распыления многозарядными ионами [78] основана на следующих предположениях.

Энергия E_c поровну распределена между $2Z$ ионами и переходит в энергию «кулоновского взрыва», т. е. в кинетическую энергию разлетающихся ионов. Предполагается также плоский потенциальный барьер U_0 , общий для всех разлетающихся ионов. Коэффициент распыления многозарядными ионами оценивался как

$$S = Z \left[1 - \sqrt{\frac{2ZU_0}{E_c}} \right]. \quad (113)$$

Механизм «кулоновского взрыва» [78] был предложен лишь для диэлектриков и полупроводников, и считалось, что в металлах он не реализуется из-за малого времени релаксации электронов. Однако можно указать аналогичную ситуацию, когда возбуждение электронов происходит быстрыми осколками деления ядер с энергией около 100 мэВ и массой $M \approx 100$. Осколок деления теряет энергию в основном (95—98%) на возбуждение электронов, и при этом $dE/dx \approx 3$ кэВ/А°, т. е. плотность энергии сравнима с плотностью энергии, выделяемой при нейтронизации многозарядного иона с $Z = 20 \div 25$. Известно, что осколки деления хотя и не оставляют трека в объеме металла, но вызывают сильное распыление поверхности [79], особенно в случае мелкозернистых образцов. При этом коэффициент распыления может достигать значений $S \approx 10^3 \div 10^4$ атом/осколок, что на несколько порядков превышает значения, предсказываемые теорией [50].

Теоретически вопрос о распылении металлов осколками деления ядер еще не изучен; ясно, что основную роль здесь играет именно возбуждение электронной подсистемы. Поэтому следует ожидать, что многозарядные ионы высокой кратности ($Z \geq 20$) могут вызывать распыление металлов, причем с очень большими коэффициентами распыления ($S \approx 10^3$).

Таким образом, в настоящее время достигнуто удовлетворительное понимание физических механизмов распыления, получены формулы, которые в большинстве случаев позволяют оценить коэффициент распыления с точностью до фактора 2—3.

В то же время все процессы, определяющие распыление, вряд ли могут быть описаны единой теорией.

§ 6. Зарядовое состояние отраженных и распыленных частиц

Зарядовое состояние частиц, поступающих в плазму со стенки, диафрагмы, а также из дивертора, определяет их поведение в поверхностном слое плазмы и, как говорилось во введении, влияет на процессы рециклинга газов и эрозии поверхностей, взаимодействующих с плазмой.

Изменение зарядового состояния атомных частиц, движущихся вблизи поверхности металла, изучается сравнительно давно. Наиболее достоверные эксперименты [80, 81], посвященные зарядовому составу атомных частиц, заключались в определении заряженной и нейтральной фракций частиц, прошедших тонкую металлическую фольгу. Их энергия на выходе из фольги имела значения от нескольких до

сотен килоэлектронвольт. Для легких частиц это соответствует диапазону скоростей $(1-10) \cdot 10^8$ см/с.

Другая группа экспериментов посвящена исследованию зарядового состава частиц, отраженных от поверхности твердого тела. Энергии отраженных частиц составляют несколько (до двадцати) килоэлектронвольт — это соответствует условиям, близким к реальному взаимодействию термоядерной плазмы с поверхностью.

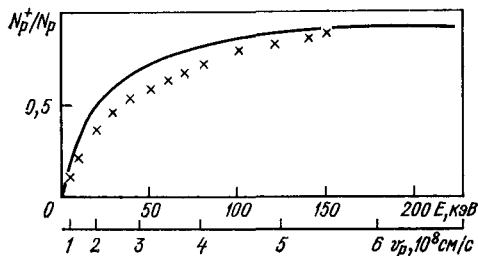


Рис. 18. Зависимость фракции протонов от энергии (скорости) частиц, вылетевших из золотой фольги:

* — эксперимент [80, 71]; сплошная кривая — теория тройной рекомбинации (117), (118)

Третья группа — это эксперименты по распылению твердого тела. Энергии распыленных частиц лежат в диапазоне несколько — сотни электронвольт, и заряженная фракция составляет доли процента.

Результаты экспериментов представлены на рис. 18 и 19, из которых видно, что основная закономерность — возрастание доли положительно заряженных частиц с ростом скорости.

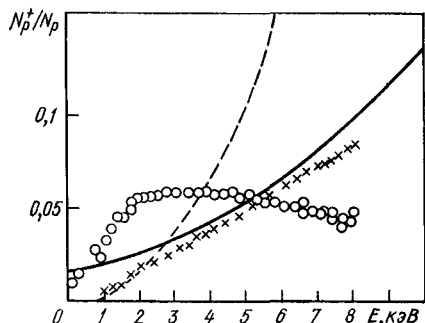


Рис. 19. Зависимость положительной фракции отраженных частиц (протонов) от чистой поверхности золота при малых энергиях:

сплошная кривая — теория нейтрализации (133), (134), (135); пунктир — теория тройной рекомбинации. Эксперимент [95]: × — положительная фракция; ○ — отрицательная фракция

Фракция отрицательных ионов возрастает с ростом энергии до значений $E = 2-3$ кэВ, а затем убывает с увеличением энергии и при $E > 5$ кэВ становится меньше, чем положительная фракция ионов. До сих пор теоретически исследовались лишь положительная и нейтральная фракции частиц, а отрицательной фракцией пренебрегалось.

Зарядовое состояние частицы, вылетающей из мишени, определяется, во-первых, ее состоянием внутри твердого тела и, во-вторых, процессами, происходящими при пересечении частицей поверхности. Поэтому необходимо рассмотреть вопрос о том, в каком состоянии находится примесный атом в решетке металла. Поскольку для термоядерной плазмы наибольший интерес представляет зарядовый состав отраженных частиц водорода, дейтерия и трития, рассмотрим спектр связанных состояний атома водорода, помещенного в решетку металла.

Положительный заряд, находящийся в среде с большой плотностью квазисвободных электронов, экранируется отрицательными зарядами последних. Спектр связанных состояний атома водорода в этом случае имеет конечное число уровней. Уменьшение характерной длины экранирования d приводит к уменьшению числа связанных состояний и, вообще говоря, может быть причиной их исчезновения. Наличие характерной длины экранирования, зависящей от плотности электронов металла как $n^{-1/6}$, приводит к сужению потенциальной ямы атома. По мере увеличения плотности связанные состояния постепенно как бы «всплывают» в непрерывный спектр. Сначала исчезают возбужденные состояния, имеющие больший размер орбиты, а затем при некоторой плотности $n_{кр}$ исчезает основное состояние.

В простейшей постановке — это задача о спектре связанных состояний в потенциале Юкавы $V(r) = -\frac{e^2}{r} \exp(-r/d)$ ($d = (1/2) \times (\pi/3)^{1/6} a_0^{1/2} n^{-1/6}$ — длина Дебая — Хюккеля для ферми-газа электронов металла, $a_0 = \hbar^2/mc^2$ — борковский радиус), к сожалению, не имеет аналитического решения. Поэтому целым рядом авторов были выполнены численные расчеты (см. [82] и приведенную там библиографию). Кроме того, возможен подход, позволяющий получить ответ на вопрос, при каком минимальном значении $d_{кр}$ исчезает основное состояние. Такая задача о виртуальном уровне ($E = 0$) впервые была решена получисленным методом в работе [83], авторы которой показали, что при $d \leq d_{кр} = 0,84 a_0$ связанные состояния отсутствуют. Этот результат был подтвержден численными расчетами [82], а также аналитическим решением [84]. Полученное значение $d_{кр}$ соответствует плотности электронов $n_{кр} = 0,045 (\pi/3)$, $a_0^{-3} \approx 3 \cdot 10^{23} \text{ см}^{-3}$. В металлах плотность электронов составляет $(1-10) \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$, а первое возбужденное состояние исчезает при $n \approx 10^{20} \text{ см}^{-3}$ [82], поэтому можно сделать вывод, что атом водорода, помещенный в металл, имеет одно связанное состояние, энергия ионизации которого 1—2 эВ [85].

Однако в приведенных оценках не учитывался обменный член потенциала взаимодействующих электронов. Впервые такая попытка была предпринята в работе [86]. Полученное уравнение Томаса — Ферми — Дирака решалась методом возмущений и оставался только первый член разложения. При этом для потенциала получено выражение типа потенциала Юкавы, но с несколько измененной характерной длиной экранирования. Из дальнейшего анализа автор [86] сделал вывод об отсутствии связанного состояния электрона в таком атоме.

Плотность электронов и потенциал в теории Томаса — Ферми — Дирака связаны соотношением (в атомных единицах $e = \hbar = m = 1$) [7]

$$(3\pi^2\rho)^{2/3}/2 - (3\rho/\pi)^{1/3} = \Phi, \quad (114)$$

где ρ — электронная плотность; Φ — электростатический потенциал электронов и ионов. Поскольку выражение (114) получено без учета кулоновской корреляции, оно справедливо при $\rho > 0,1$ или $\Phi > 0,5$.

Разрешая (114) относительно ρ и полагая $2\pi^2\Phi \gg 1$, можно получить

$$\rho = (1 + \sqrt{1 + 2\pi^2\Phi})^3 / 3\pi^5 \approx (2\sqrt{2}/3\pi^2)\Phi^{3/2} + (2/\pi^3)\Phi + (3\sqrt{2}/2\pi^4)\Phi^{1/2} + \dots \quad (115)$$

Уравнение Пауссона в этом случае имеет вид

$$\nabla^2\Phi = -4\pi \sum_i Z_i \delta(r - R_i) - 4\pi Z_0 \delta(r - R_0) + (8\sqrt{2}/3\pi)\Phi^{3/2} + (8/\pi^2)\Phi + (6\sqrt{2}/\pi^3)\Phi^{1/2}, \quad (116)$$

где Z_i и R_i — заряд и координаты ядер решетки; Z_0 и R_0 — заряд и координата движущейся частицы. Изменение потенциала и электронной плотности, вызванное движущимся ионом, рассматривается как возмущение. Тогда $\Phi = \Phi_0 + \delta\Phi$ и

$$\left. \begin{aligned} \nabla^2\delta\Phi &= -4\pi Z_0 \delta(r - R_0) + \kappa^2\delta\Phi; \\ \kappa^2 &= (4\sqrt{2}/\pi)\Phi_0^{1/2} + (8/\pi^2) + (3\sqrt{2}/\pi^3)\Phi_0^{-1/2}. \end{aligned} \right\} \quad (117)$$

Величина κ (Φ_0) — слабо меняющаяся функция (см. табл. 2), а поскольку представляет интерес лишь область $0,5 < \Phi \infty 1$, возмущенный потенциал приближенно можно представить в виде $\delta\Phi \approx \frac{Z_0}{r} \times \times \exp(-\kappa r)$. Причем $\kappa > \sqrt{2,276} = 1,51$, а связанное состояние атома водорода отсутствует уже при $\kappa_0 = 1/0,84 = 1,19$.

Т а б л и ц а 2. Зависимость Φ_0 (κ)

Φ_0	0,5	0,8	1	1,5	2	3	5	10
κ^2	2,276	2,573	2,747	3,126	3,452	4,006	4,896	6,545

Вообще вопрос о наличии уровня в такой системе чрезвычайно важен по следующим соображениям. Если связанное состояние существует (пусть уровень даже очень мелкий), то схематически оно должно располагаться ниже дна полузаполненной зоны металла. Такой уровень, созданный неподвижным протоном, всегда будет занят электроном, — в результате образуется нейтральный атом. Ионизация этой системы, по-видимому, невозможна вследствие принципа Паули: и электрон ионизирующий и электрон, возникший в результате ионизации, должны иметь энергию, превышающую ϵ_F — энергию Ферми. Если же протон обладает направленной скоростью v_p , то уровень ϵ_0 , соответствующий связанному состоянию, будет «всплывать», при некоторой скорости v_{p0} совпадет с уровнем Ферми

$$v_{p0} = \sqrt{\frac{2}{m}(\epsilon_F - \epsilon_0)},$$

и ионизация при $v_p > v_{p0}$ становится возможной. Таким образом, наличие даже очень мелкого уровня приводит к тому, что протон, движущийся в металле со скоростью $v_p < v_{p0} \approx u_F$, должен захватить электрон и образовать нейтральный атом.

Все приведенные выше рассуждения основаны на статической экранировке. На самом деле при движении протона происходит динамическое экранирование его заряда. Этот вопрос обсуждался в [103]. Экранирующий заряд ρ_g , возникающий при движении заряженной частицы, связан со статическим зарядом ρ_c :

$$\rho_g = \rho_c [1 - \exp(-t/\tau)],$$

где $t \sim d/v_p$ — время пролета длины Дебая — Хюккеля частицей со скоростью v_p , а $\tau \sim 1/\omega_p$ — время релаксации, определяемое плазменной частотой ω_p электронного газа. При малых скоростях $v_p < < u_F t/\tau \gg 1$ и динамическое экранирование не отличается от статического. При больших скоростях $v_p > u_F$ $\rho_g \approx \frac{u_F}{v_p} \rho_c$, динамическое экранирование существенно слабее статического и протон может иметь связанное состояние, поскольку дебаевский экранирующий потенциал не успевает устанавливаться. Автор [87] указывает, что согласно численным расчетам, основанным на использовании диэлектрической проницаемости электронного газа, при $v_p \lesssim 2u_F$ действительно происходит расширение потенциальной ямы протона, однако оно недостаточно для возникновения связанного состояния.

Для протонов больших энергий $E_p \gtrsim 1$ МэВ связанное состояние возникает и сечения захвата электрона и ионизации атома водорода совпадают с их значениями в газе. Поэтому равновесная нейтральная фракция в пучке протонов равна

$$\Phi_0 = 1/[1 + (\sigma_i/\sigma_e)],$$

где σ_i и σ_e — сечение ионизации и захвата электрона соответственно.

Современное понимание вопроса о связанных состояниях атома водорода, помещенного в металл, можно резюмировать следующим образом. Потенциальная яма, создаваемая зарядом протона, движущегося в металле, вследствие экранировки электронами не имеет ни одного связанного состояния при $v_p < u_F$ и может иметь их при больших скоростях $v_p \gg u_F$.

Таким образом, начальным условием для задачи о зарядовом состоянии частиц, вылетающих из металла, является утверждение — все частицы, движущиеся к поверхности твердого тела из глубины, являются, по крайней мере, однократно заряженными ионами.

Когда заряженная частица пересекает границу металл — вакуум, она имеет конечную вероятность захватить электрон и нейтрализоваться. Это происходит потому, что граница металла не является резкой, электронная плотность убывает вдоль траектории движения по степенному закону и частица попадает в область, где появляется связанное состояние. Рассмотрим эту задачу подробнее.

Структуру поверхностного слоя электронов металла, вытесненного давлением P и уравновешенного возникшим электрическим полем E ,

Можно найти, пользуясь уравнением равновесия

$$-\nabla P - en(x)E = 0 \quad (118)$$

и уравнением Максвелла

$$\nabla E = \frac{\partial E_x}{\partial x} = 4\pi en(x). \quad (119)$$

Получая из (118) и (119) соотношение $P + E^2/8\pi = 0$, а также выражая давление вырожденного электронного газа через его плотность $P = [(3\pi^2)^{2/3}/5] \frac{\hbar^2}{m} n^{5/3}(x)$, находим

$$n(x) = n_0 [1 + (x/d_0)\sqrt{30}]^{-6}, \quad (120)$$

где d_0 — длина Дебая—Хюккеля, определенная по плотности электронов при $x = 0$, которая полагается равной плотности внутри металла n_0 . Такое рассмотрение поверхностного электронного слоя является непоследовательным, поскольку не решена внутренняя задача, где в результате уменьшения плотности электронов создается объемный положительный заряд. Но в данном случае важно продемонстрировать размер области, где $n(x) < n_0$ и возможно появление связанного состояния. Характерная длина такого слоя для типичного металла при $n_0 \approx 5 \cdot 10^{22} \text{ см}^{-3}$ оказывается порядка $d_0\sqrt{30} \approx 7a_0$. Поэтому можно рассмотреть задачу о нейтрализации протона, пролетающего приповерхностный слой, в результате тройной рекомбинации в плотном газе [88].

Такой механизм, предложенный Ланжевенном, определяется потоком электронов в координатном пространстве

$$I(x) = \oint ds v n; \quad (x) = 4\pi r^2 n(x) v,$$

где $v = \frac{\tau_e}{m} eE = \frac{e^2}{r^2} \frac{\tau_e}{m}$ — скорость диффузионного дрейфа электрона в кулоновском поле протона; τ_e — время замедления электрона. Поскольку в указанном слое плотность электронов уже достаточно мала, для определения τ_e можно пользоваться моделью парных столкновений. Поскольку поток $I(x)$ зависит только от расстояния иона до поверхности и интегрирование по времени можно заменить интегрированием по $dx = v_p dt$, где v_p — скорость частицы, которая, как предполагается всюду в этом параграфе, направлена нормально поверхности, то положительная фракция в пучке частиц равна

$$\frac{N_p^+}{N_p^{\text{tot}}} = \exp \left[-\frac{1}{v_p} \int_0^\infty dx I(x) \right] = \exp \left[-4 \sqrt{\frac{30\beta}{\pi^3}} \mathcal{F} \left(\frac{v_p}{v_F} \right) \right], \quad (121)$$

где $\beta = e^2/\hbar u_F$, $\mathcal{F} \left(\frac{v_p}{v_F} \right)$ — некоторая функция, имеющая довольно громоздкий вид [85], хорошо аппроксимируемая выражением

$$\mathcal{F}(y) = (0,6/y) \exp(-0,76y^{0,7}). \quad (122)$$

Сравнение приведенных формул (121), (122) с экспериментальными данными [81] приведено на рис. 18. Кривая, соответствующая расчету, в диапазоне 5—150 кэВ для золота превышает опытные точки примерно на 20%. Это означает, что в эксперименте нейтрализуется большее число протонов, чем дает представленная теория. В нейтрализацию протонов тройная рекомбинация дает вклад, но не может объяснить весь эффект.

Протоны, не испытавшие тройной рекомбинации, могут изменить свое зарядовое состояние в результате туннельной рекомбинации или Оже-эффекта. Если ион или возбужденный атом находится вблизи поверхности металла (со стороны вакуума), то ион может быть нейтрализован, а возбужденный атом может перейти в невозбужденное состояние или испытать резонансную ионизацию. Существуют четыре процесса: резонансная нейтрализация, резонансная ионизация, оже-релаксация и оже-нейтрализация.

В работе [89] впервые высказана мысль о возможности резонансной нейтрализации иона вблизи поверхности металла вследствие перехода электрона металла через потенциальный барьер на возбужденный уровень. Задача сводилась к вычислению автоэлектронной эмиссии из металла под действием электрического поля иона. Был рассмотрен переход электрона металла на возбужденный уровень иона. Затем электрон может перейти в основное состояние, излучая при этом фотон либо возбуждая электрон проводимости. Но поскольку характерное время оже-процесса составляет 10^{-14} — 10^{-15} с, а время испускания фотона 10^{-8} с, то всегда энергия возбуждения передается второму электрону. Если величина передаваемой энергии превышает работу выхода металла, электрон покинет металл (потенциальная эмиссия). Более точное квантовомеханическое рассмотрение этой задачи было проведено в [90], где предполагалось существование уровней равной энергии в металле и ионе. Однако полученный коэффициент потенциальной электронной эмиссии существенно отличается от экспериментальных данных.

Наиболее правильная постановка задачи о потенциальной электронной эмиссии и ее решение представлены в [91], где ион играет роль возникшего нового энергетического уровня системы, более низкого, чем занятые уровни металла. Поэтому система металл — ион оказывается возбужденной, а ее релаксация приводит к выделению энергии нейтрализации иона. Задача поставлена как двухэлектронная, и в ней рассматривается передача выделившейся энергии второму электрону, что может привести к его эмиссии. В [91] используются зоммерфельдовская модель металла и ортонормированные волновые функции. Задача решается с применением стационарной теории возмущений, причем вероятность процесса в единицу времени

$$P = (2\pi/\hbar) |V|^2 \delta(\epsilon), \quad (123)$$

где $V = \int \psi_e(1,2)(-e^2/r_{12})\psi_m^*(1,2)dr_1dr_2$ — матричный элемент перехода между начальным состоянием ψ_e и конечным ψ_m ; $\delta(\epsilon)$ отражает закон сохранения энергии.

В работе [92] рассматривается потенциальная электронная эмиссия, вызываемая налетающими ионами гелия. Электрон металла нейтрализует ион с образованием метастабильного атома, релаксация которого приводит к эмиссии электронов. Авторы [92] использовали более точные волновые функции электронов металла, а также учли зависимость возмущающего потенциала от расстояния, на котором находится ион гелия.

Экспериментальные исследования потенциальной эмиссии позволили автору [93] несколько уточнить результаты [91]. Учет зависимости матричного элемента оже-процесса от расстояния возбужденного электрона металла до поверхности, сдвига энергетических уровней иона и роли изоэнергетических переходов при вычислении относительной вероятности оже-процессов привел к лучшему совпадению теории с экспериментальными данными. Однако появление большого числа параметров снижает ценность полученных результатов.

Все расчеты в перечисленных работах [89—93] основаны на стационарной теории возмущений. Поскольку потенциальную электронную эмиссию можно экспериментально обнаружить только ниже порога кинетической эмиссии, предполагается, что скорость иона мала, т. е. $v_p \ll u_F$. Вероятность электронного перехода в единицу времени не зависит от скорости v_p , а зависит лишь от расстояния иона до поверхности металла R . Тогда уменьшение числа ионов в результате нейтрализации описывается уравнениями

$$\frac{dN^+}{dt} = -PN^+; \quad N^+(\infty) = N^+(0)(1 - \omega), \quad (124)$$

где P — вероятность нейтрализации в единицу времени; $N^+(0)$ — плотность ионов на границе металл — вакуум ($R = 0$); $N^+(\infty)$ — плотность ионов вдали от границы; ω — полная вероятность рекомбинации.

Проинтегрировав (124), найдем (считая $dt = dR/v_p$)

$$\omega = 1 - \exp\left(-\frac{1}{v_p} \int_0^\infty P(R) dR\right). \quad (125)$$

Качественная оценка, основанная на простом предположении о подбарьерном просачивании электронов из металла на уровень иона, дает выражение [94, 85]

$$\omega = 1 - \exp\left(-\frac{u_F}{v_p} \sqrt{\frac{\epsilon_F}{\phi}}\right), \quad (126)$$

где ϕ — работа выхода. Формула (126) сильно завышает значения ω при $v_p \gg u_F$.

При больших скоростях протона возмущение нельзя рассматривать как стационарное и вероятность электронного перехода следует определять из уравнения Шредингера, учитывающего изменение

состояния во времени:

$$\left. \begin{aligned} \hat{H}\Psi &= i\hbar (\partial\Psi/\partial t); \\ \hat{H} &= (\hbar^2/2m)\Delta + U(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \right\} \quad (127)$$

Здесь

$$U(\mathbf{r}, t) = \begin{cases} -e^2/|\mathbf{r}-\mathbf{v}t|, & x > 0; \\ -|W|, & x < 0, \end{cases} \quad (128)$$

где $|W| = \varphi + \varepsilon_F$. Волновую функцию электрона можно представить в виде

$$\left. \begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t) &= \alpha(t)\chi(\mathbf{r}, t) + \beta(t)\psi(\mathbf{r}, t); \\ \chi(\mathbf{r}, t) &= \chi(\mathbf{r}) \exp[-(i/\hbar)(-|W| + \varepsilon)t], \end{aligned} \right\} \quad (129)$$

где $\chi(\mathbf{r})$ — волновая функция электрона металла вблизи границы [91], а $\psi(\mathbf{r}, t)$ — электронная функция атома водорода, которая в лабораторной системе координат для основного состояния равна

$$\begin{aligned} \psi(\mathbf{r}, t) &= (\pi a_0^3)^{-1/2} \exp\{-|\mathbf{r}-\mathbf{v}t|/a_0 + i(I/\hbar)t + \\ &+ i[(mv_p/\hbar)x - (mv_p^2/2\hbar)t]\}. \end{aligned} \quad (130)$$

Коэффициенты $\alpha(t)$ и $\beta(t)$ в соотношении (129) определяют вероятность состояния электрона в момент времени t в металле или в движущемся атоме водорода.

В начальный момент времени $t = 0$ протон покидает металл и со скоростью v_p удаляется в бесконечность, что эквивалентно условиям $\alpha(0) = 1$, $\beta(0) = 0$. В предположении малости кулоновского возмущения $-e^2/|\mathbf{r}-\mathbf{v}_p t|$

$$\dot{\beta}(t) = (1/i\hbar) \int d\mathbf{r} \psi^*(\mathbf{r}, t) [-e^2/|\mathbf{r}-\mathbf{v}_p t|] \chi(\mathbf{r}, t). \quad (131)$$

Выполнив интегрирование (131), можно найти величину $\beta(t)$, квадрат модуля которой определяет зависящую от времени t вероятность нахождения электрона в основном состоянии атома водорода. Проведя усреднение по распределению Ферми (обозначаемое треугольными скобками), можно ввести вероятность нейтрализации в единицу времени

$$P(t) = \frac{d}{dt} \langle |\beta(t)|^2 \rangle, \quad (132)$$

которая в отличие от стационарной теории является функцией времени. Используя рассуждения (124), (125), получаем выражение для полной вероятности нейтрализации с переходом электрона металла в основное состояние атома водорода:

$$w_1^v = 1 - \exp\{\langle |\beta(\infty)|^2 \rangle\}. \quad (133)$$

Экспонента в (133) вычислена в [85], и в случае малых скоростей оказывается равной

$$\langle |\beta(\infty)|^2 \rangle = (2^8/3\pi)(\varepsilon_F/|W|)^3 \beta^5 L(v_p/u_F); \quad (134)$$

$$L(v_p/u_F) = \frac{1}{2} \int_0^1 \frac{dz z^{3/2}}{q^2 + (z - z_p)^2}, \quad (135)$$

где $z_p = (|W| - I)/\epsilon_F + (v_p/u_F)^2$; $q = 1,25\beta (v_p/u_F)$; $I = 13,6$ эВ — потенциал ионизации атома водорода.

Значения интеграла (135), а также величина ω_1^v для типичного металла ($\epsilon_F = 6$ эВ, $|W| = 10$ эВ) представлены в таблице 3.

Таблица 3. Зависимость $L(v_p/v_F)$ и $\omega_1^{(v)}$ от v_p/u_F

v_p/u_F	0	0,2	0,316	0,4	0,5	0,6	0,7	0,8	0,9	1,0
$L(v_p/u_F)$	0,128	0,125	0,121	0,116	0,110	0,102	0,0093	0,083	0,073	0,063
$\omega_1^{(v)}$	0,0176	0,0194	0,022	0,0257	0,0311	0,040	0,0534	0,073	0,1	0,137

На рис. 18, 19 изображены теоретические кривые, соответствующие тройной рекомбинации (121), (122), а также нейтрализации (133)—(134), (135) при малых энергиях протонов (≤ 10 кэВ); приводятся также экспериментальные зависимости положительной и отрицательной фракций отраженных частиц от их энергии [95]. Как видно из рисунка, при малых энергиях зависимость, соответствующая формулам (121), (122), соответственно отличается от экспериментальных данных. Теория нейтрализации, полученная в рамках нестационарной теории возмущений, в области энергий 2—8 кэВ удовлетворительно совпадает с экспериментальными данными. При совсем малых энергиях $E \leq 1$ кэВ согласия нет, что, по-видимому, связано с сильным искажением системы электронных уровней атома (или иона) и приповерхностных слоев металла.

Взаимодействие более тяжелых атомных частиц (например, ионов инертных газов) с металлической поверхностью явилось предметом изучения во многих исследованиях. В этом случае возможен процесс образования не только однозарядных, но также и многозарядных ионов. В работе [96] изучались столкновения ионов аргона (энергия 60—90 кэВ) с медной металлической поверхностью, а также возникающее при этом изменение зарядового состояния рассеянных ионов. Для объяснения полученных экспериментальных результатов авторы [96] развили модельную теорию, рассматривающую две фазы процесса. В первой—налетающий ион аргона ионизируется в результате столкновения с атомом меди, находящимся в поверхностном слое. Для оценки этого акта используются газовые сечения и взаимодействием с другими атомами меди пренебрегается. Во второй фазе образовавшийся многозарядный ион взаимодействует со всем металлом — в частности, возможен захват электрона из металла. Авторы [97] развили

эти идеи, а также провели более детальное исследование происходящих процессов. В частности, в [97] указывается, что многозарядный ион образуется лишь в том случае, когда дырка появляется во внутренних оболочках.

Возникновение дырки во внешней оболочке приводит к появлению однозарядного иона или же нейтрального атома. Ион, удаляющийся от металла с дырками во внутренних электронных оболочках, релаксирует на больших расстояниях в результате радиационных переходов без изменения заряда. Распад автоионизационного состояния увеличивает заряд иона на единицу в каждом переходе. Окончательный заряд частицы, удаляющейся от металлической поверхности, определяется количеством дырок во внутренних и внешних электронных оболочках, а также числом возбужденных электронов, оставшихся к моменту выхода частицы из металла. Поскольку процессы нейтрализации необратимы, число оставшихся дырок определяется временем, в течение которого ион двигался внутри металла. Это время зависит от глубины, на которой произошло столкновение, а также от формы траектории и ее положения относительно поверхности металла. Решение всех этих вопросов позволило авторам [97] получить выражение для заряженной фракции отраженных ионов, хорошо согласующееся с экспериментальными данными.

Изложенные выше рассуждения и расчеты зарядового состояния частиц, движущихся вблизи поверхности металла, являются несостоятельными при малых скоростях $v_p \ll u_F$. Их главный порок [98] заключается в использовании невозмущенных волновых функций электронов металла и частицы, образующей потенциальную яму. Протон или тяжелый ион (в случае распыления), движущийся с малой скоростью $v_p \ll u_F$ вблизи поверхности, образуют с металлом единую квантовомеханическую систему. Электрон, находящийся в каком-либо связанном состоянии атома (согласно квантовым представлениям), на самом деле принадлежит и атому и металлу. Этот факт можно интерпретировать как интенсивный электронный обмен между атомом и металлом, поскольку при малой скорости v_p атом (или ион) в течение конечного времени находится на расстоянии в несколько боровских радиусов a_0 от поверхности металла. При этом дискретный энергетический спектр атома превращается в непрерывный (см. [98], § 4.2), а система волновых функций электронов металла претерпевает сильные изменения.

Точные электронные волновые функции для системы металл — атом являются решением нестационарного уравнения Шредингера, однако они еще не получены вследствие больших математических трудностей. Некоторые попытки получить измененные уровни энергии электрона в атоме, находящемся вблизи поверхности металла, обсуждаются в [98]. На примере грубых моделей (одномерные прямоугольные ямы, имитирующие систему атом — металл) продемонстрирован [98] подъем уровня основного состояния атома вблизи поверхности металла. Это может приводить к ионизации атома, удаляющегося от поверхности [99]. Это утверждение нужно признать чрезвычайно важным для изучения зарядового состава частиц при распыле-

нии, поскольку для всех металлов работа выхода ϕ на 2—4 эВ меньше потенциала ионизации изолированного атома.

В работах [100] предпринята попытка учесть изменение волновых функций атома, находящегося вблизи поверхности металла. В гамильтониан, описывающий взаимодействие электрона металла с ионом, включены члены, соответствующие силам зеркального изображения. Расчет был выполнен в параболической системе координат, которая в данной задаче позволяет разделить переменные в некоторой области пространства вокруг нормали к поверхности, проходящей через атом. В дальнейшем автор [100] ввел ряд упрощающих предположений, которые фактически свели это рассмотрение к задаче о нейтрализации иона вблизи поверхности металла с учетом сил зеркального изображения. К сожалению, в [100] не удалось разрешить наиболее важный вопрос о квазинепрерывном энергетическом спектре электронов в атоме.

Применение адиабатического приближения для нахождения заряженной фракции распыляемых частиц было осуществлено в [101]. Согласно этой теории частицы покидают металл в нейтральном состоянии. Гамильтониан системы частица — металл, зависящий от времени, описывает процесс ионизации удаляющегося атома, т. е. переход электрона из основного состояния на уровень Ферми-металла. В [101] не учитывается зависимость основного состояния атома от времени и считается, что разность энергий электрона в атоме и металле постоянна. Кроме того, матричный элемент перехода фактически не вычисляется, а используется ряд аппроксимаций. Свободные параметры, возникающие в задаче, определяются из сравнения с экспериментальными данными [102]. Таким образом, можно говорить о получении эмпирической формулы для описания заряженной фракции распыленных ионов, а не о создании теории, объясняющей физическое явление.

В заключение необходимо отметить следующее. Существующие теории, описывающие зарядовое состояние частиц, движущихся вблизи поверхности металла со скоростями $v_p \gg u_F$ и $v_p \gtrsim u_F$, дают результаты, качественно или полуколичественно совпадающие с экспериментальными данными. Остается неясным еще целый ряд вопросов, связанных с конкретными механизмами нейтрализации и ионизации. Эти вопросы подлежат выяснению. Гораздо хуже обстоит дело в случае, когда частица движется с малой скоростью $v_p \ll u_F$. Теории, основанные на применении стационарной и нестационарной теории возмущений, к сожалению, не дают и не могут дать удовлетворительных результатов, пока используются невозмущенные волновые функции электронов в металле и атомной частице. Потенциал, описывающий взаимодействие протона с электроном металла (кулоновский потенциал), нельзя рассматривать как возмущение при малых скоростях. Удовлетворительные результаты может дать лишь теория, последовательно учитывающая распределение электронов в приповерхностном слое металла, измененное электрическим полем иона, а также измененный спектр связанных состояний иона.

1. Интор. Международный токамак-реактор. Материалы СССР. Т. 1, 2. ИАЭ, 1980; Intor, zero phase, report IAEA, 1980.
2. Behrlish R., Gähler R., Kalus J. — J. Nucl. Mater., 1974, v. 53, 183.
3. Гусева М. И., Маргынченко Ю. В. — Успехи физ. наук, 1981, т. 135, № 4.
4. Бушаров Н. П. и др. — Физика плазмы, 1976, т. 2, с. 588.
5. Фирсов О. Б. — Журн. эксперим. и теорет. физ., 1957, т. 33, с. 696.
6. Фирсов О. Б. — Там же, 1958, т. 34, с. 447.
7. Гамбош П. — Статистическая теория атома и ее применение: Пер. с англ. М.: Изд-во иностр. лит., 1951.
8. Andersen N., Sigmund P. — Dan. Vid. Selsk. Mat.-Fys. Medd., 1974, v. 39, № 3.
9. Born M., Mayer J. E. — Z. Phys., 1932, Bd 75, S. 1.
10. Готт Ю. В. Взаимодействие частиц с веществом в плазменных исследованиях. М.: Атомиздат, 1978.
11. Кумахов М. А., Комаров Ф. Ф. Энергетические потери и пробеги ионов в твердых телах. Минск, Изд. БГУ им. Лейкина, 1979.
12. Lindhard J. — Dan. Vid. Selsk. Mat.-Fys. Medd., 1954, v. 28, № 8.
13. Ritchie R. H. — Phys. Rev., 1959, v. 114, p. 644.
14. Lindhard J., Winter A. — Dan. Vid. Selsk. Mat.-Fys. Medd., 1964, v. 33, № 4.
15. Трубников Б. А., Явлинский Ю. Н. — Журн. эксперим. и теорет. физ., 1965, т. 48, с. 253.
16. Ferrell T. L., Ritchie R. H. — Phys. Rev. B, 1977, v. 16, p. 115.
17. Явлинский Ю. Н. — Журн. эксперим. теорет. физ., 1981, т. 80, с. 1622.
18. Lindhard J., Scharff M. — Phys. Rev., 1961, v. 124, p. 128.
19. Фирсов О. Б. — Журн. эксперим. и теорет. физ., 1959, т. 36, с. 1517.
20. Кишиневский Л. М. — Изв. АН СССР. Сер. физ., 1962, т. 26, 1410.
21. Brice D. K. — Phys. Rev. A, 1972, v. 6, p. 1791.
22. Комаров Ф. Ф., Кумахов М. А. — Журн. эксперим. и теорет. физ., 1973, т. 53, с. 1329.
23. Lindhard J., Scharff M., Schitt H. — Dan. Vid. Selsk. — Mat. — Fys. Medd, 1963, v. 33, № 14.
24. Brice D. K. — J. Appl. Phys., 1975, v. 46, p. 3385.
25. Лизунов Ю. Д., Рязанов А. И. — Журн. техн. физ., 1980, т. 51, с. 170.
26. Буренков А. Ф. и др. Препринт ИАЭ-3332/11. М.: 1980.
27. Ryazanov A. I., Lisunov Y. D. — Radiation Effects, 1980, v. 37, p. 353.
28. Sigmund P. — Rev. Roum. Phys., 1972, v. 17, p. 823.
29. Weissmann R., Sigmund P. — Radiation Effects, 1973, v. 19, p. 7.
30. Марчук Г. И. Методы расчета ядерных реакторов. М.: Атомиздат, 1961.
31. Robinson M. T. — Nuclear Fusion Reactors, British Nuclear Energy Society, London, 1971.
32. Kinehin G. H., Pease R. S. — Report Progr. Phys., 1955, v. 18, p. 1.
33. Sigmund P. — Radiation Effects, 1969, v. 1, p. 15.
34. Ryasanov A. I., Mefelkin E. V. — Ibid., 1980, v. 52, p. 15.
35. Manning J., Mueller G. P. — Comput. Phys. Comm., 1974, v. 7, p. 86.
36. Böttiger J. e. a. — Radiation Effects, 1971, v. 11, p. 69.
37. Böttiger J., Winterborn K. B. — Ibid., 1973, v. 20, p. 65.
38. McCracken G. M., Freemann N. J. — J. Phys., 1969, v. B2, p. 661.
39. Vucanič J., Sigmund P. — Appl. Phys., 1976, v. 11, p. 265.
40. Фирсов О. Б. — Журн. техн. физ., 1970, т. 40, с. 83.
41. Фирсов О. Б. — Докл. АН СССР. Сер. физ., 1966, т. 169, с. 1311.
42. Ремизович В. С., Рязанов М. И., Тилинин Н. С. — Журн. эксперим. и теорет. физ., 1980, т. 79, с. 448; Докл. АН СССР, 1980, т. 251, с. 848; там же, т. 254, с. 616.
43. Жабров Г. И., Курнаев В. А., Тельковский В. Г. — Журн. техн. физ., 1974, т. 44, с. 1560.
44. Robinson J. E., Harms A. A., Karapetas S. K. — Appl. Phys. Lett., 1975, v. 27, p. 425.
45. Akkermann A. F. — Phys. Stat. Sol. (a), 1978, v. 48, p. 47.
46. Плешивцев Н. В. Катодное распыление. М.: Атомиздат, 1968.

47. Kelly R. — In: Proc. of the Intern. Conf. on Ion Beam Modification of Materials, eds. J. Gyulai, T. Lohner, E. Pastor, Budapest, Hungary, 1979, v. 3, p. 1465.
48. Sigmund P. — Appl. Phys. Lett., 1974, v. 25, p. 169.
49. Harrison D. E. — Phys. Rev., 1956, v. 102, p. 1473.
50. Sigmund P. — Phys. Rev., 1969, v. 184, p. 383.
51. Andersen H. H., Bay H. L. — Radiation Effects, 1973, v. 19, p. 139.
52. Дэвидсон Б. Теория переноса нейтронов: Пер. с англ. М.: Атомиздат, 1960.
53. Firsov O. B. — Atomic Collision in Solids, ed. by D. W. Palmer, M. W. Thompson, P. D. Townsend. North-Holland, 1970, p. 301.
54. Гусева М. И., Мартыненко Ю. В. — Физика плазмы, 1976, т. 2, с. 324.
55. Smith D. L. — J. Nucl. Mat., 1978, v. 75, p. 20.
56. Bohdansky J., Roth J., Bay H. L. — J. Appl. Phys., 1980, v. 51(5), p. 2861.
57. Jiménez-Rodríguez J. J., Rodríguez-Vidal M., Valles-Abarca J. A. — Radiation Effects, 1979, v. 41, p. 165.
58. Jouts O. C. — In: Proc. Nucl. Fusion Reactor Conf., Culhum, 1969, p. 424.
59. Кывакин М. В., Лусников А. В., Мотавех Х. А. — Физика твердого тела, 1979, т. 21, с. 2870.
60. Одинцов Д. Д. — Физика твердого тела, 1963, т. 5, с. 1114.
61. Мартыненко Ю. В. — Физика твердого тела, 1964, т. 6, с. 2003.
62. Гарбер Р. И., Федоренко А. И. — Успехи физ. наук, 1964, т. 83, с. 385.
63. Yurasova V. E. — In: Proc. of VIII Internat. Summer School on the Physics of Ionized Gases. Dubrovnik, Yugoslavia, 1976, p. 35.
64. Ленченко В. М., Пугачева Т. С. — Изв. АН Узб. ССР. Сер. физ.-мат., 1966, № 5, с. 76.
65. Диняева Н. С., Мартыненко Ю. В., Рыжов Ю. А. — Физика твердого тела, 1968, т. 10, с. 2873.
66. Булгаков Ю. В. — Изв. АН СССР. Сер. физ., 1964, т. 33, с. 500.
67. Yurasova V. E., Eltekov B. A. — Radiation Effects, 1981, v. 56, p. 137, Symposium on sputtering, Vienna, 1980, p. 134.
68. Bohrish R. e. a. — Appl. Phys., 1979, v. 18, p. 391.
69. Лусников А. В. — Физика твердого тела, 1978, т. 20, с. 2492.
70. Kelly R. — Radiation Effects, 1977, v. 32, p. 91.
71. Carter G. — Radiation Effects Lett., 1979, v. 43, p. 193.
72. Sigmund P. — Appl. Phys. Lett., 1974, v. 25, p. 169.
73. Szymonski M., d. Vries A. E. — Phys. Lett., 1977, v. 63a, p. 353.
74. Chapman G. E. e. a. — Radiation Effects, 1977, v. 32, p. 91.
75. Martynenko Yu. V. — Ibid., 1976, v. 29, p. 129.
76. Thompson D. A., Johar S. S. — Appl. Phys., Lett., 1979, v. 34, p. 342.
77. Ваулин Е. П. и др. Физика твердого тела, 1977, т. 19, с. 1423.
78. Parilis E. S. — Atomic collisions phenomena in solids. Ed. by Palmer D. W., Thompson M. W., Townsend P. D., Amsterdam—Lond., North-Holland Publ. Comp., 1970, p. 324.
79. Александров Б. П. и др. — Атомная энергия, 1975, т. 38, с. 47.
80. Hall T. — Phys. Rev., 1950, v. 79, p. 504.
81. Phillips J. A. — Phys. Rev., 1955, v. 97, p. 404.
82. Rodgers F. J., Graboske H. C., Jr., Harwood D. J. — Phys. Rev., 1970, v. 1A, p. 1577.
83. Sachs R. G., Goerpert-Mayer M. — Ibid., 1938, v. 53, p. 991.
84. Трубинков Б. А., Явлинский Ю. Н. — Журн. эксперим и теорет физ., 1965, т. 48, с. 1618.
85. Готт Ю. В., Явлиинский Ю. Н. Взаимодействие медленных частиц с веществом и диагностика плазмы. М. Атомиздат, 1973.
86. Isenberg I. — Phys. Rev., 1950, v. 79, p. 736.
87. Brandt W. — Atomic Collisions in Solids. V. 1/Ed. by Datz S., Appleton B. R., Moak C. D. N. Y., Plenum Press, 1975, p. 261.
88. Месси Г., Бархон Е. Электронные и ионные столкновения. Пер. с англ. М., Изд-во иностр. лит., 1958, с. 539.
89. Oliphant M. L., Moon P. B. — Proc. Roy. Soc., 1930, v. A127, p. 388.
90. Massey H. S. W. — Proc. Cambr. Phil. Soc., 1930, v. 26, p. 386.
91. Шехтер Ш. Ш. — Журн. эксперим и теорет. физ., 1937, т. 7, с. 750.

92. Cobas A., Lamb W. E. — Phys. Rev., 1944, v. 65, p. 327.
93. Hagstrum H. D. — Ibid., 1954, v. 96, p. 336.
94. Трубников Б. А., Явлииский Ю. Н. — Журн. эксперим. и теорет. физ., 1967, т. 52, с. 1638.
95. Verbeek H., Eckstein W., Bhattacharoya R. S. — Surface Science, 1980, v. 95, p. 380.
96. Van Der Veg W. F., Biermann D. J. — Physica, 1969, v. 44, p. 177.
97. Kishinevsky L. M., Parilis E. S., Verleger V. K. — Radiation Effects, 1976, v. 29, p. 215.
98. Векслер В. И. — Вторичная ионная эмиссия металлов. М., Наука, 1978, гл. 4. Veksler V. I. — Radiation Effects, 1980, v. 51, № 3—4, p. 129.
99. Паздерский В. А., Ципинюк Б. А. — Физика твердого тела, 1978, т. 20, № 11, с. 3283.
100. Janev R. K. — J. Phys. B: Atom. Molec. Phys., 1974, v. 7, p. 1506; p. L 359.
101. Schroerer J. M., Rhodin T. N., Bradley R. C. — Surface Science, 1973, v. 34, p. 571; Schroerer J. M. — Ibid., v. 35, p. 485.
102. Beske H. E. — Z. Naturforschung, 1967, Bd 22a, S. 459; Kopitzki K., Stier H. E. — Ibid., 1962, Bd 17a, S. 346.

СОВРЕМЕННОЕ СОСТОЯНИЕ ТЕОРИИ СПЕКТРОВ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ. <i>У. И. Сафронова, В. С. Сенашенко</i>	3
§ 1. Введение	3
§ 2. Теоретические методы описания спектров многозарядных ионов	6
§ 3. Некоторые результаты расчетов атомных характеристик многозарядных ионов	15
Заключение	28
Список литературы	28
ВОЗБУЖДЕНИЕ И ИОНИЗАЦИЯ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ ЭЛЕКТРОНАМИ. <i>В. А. Базылев, М. И. Чибисов</i>	30
Введение	30
§ 1. О методе Кулон—Борна с обменом (КБО). Резонансы. Релятивизм	31
§ 2. Возбуждение дипольных переходов с $\Delta n = 0$	41
§ 3. Ионизация многозарядных ионов. Вклад внутренних оболочек	49
Список литературы	57
ТОРМОЗНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ В ГОРЯЧЕЙ ПЛАЗМЕ. <i>В. И. Гервидс, В. П. Жданов, В. И. Коган, Б. А. Трубников, М. И. Чибисов</i>	58
Введение	58
§ 1. Статическое приближение	58
§ 2. Анализ зависимостей интенсивности ТИ от энергии, температуры и частоты излучения	62
§ 3. Борновское приближение и аппроксимация интенсивности ТИ на основе результатов для низкочастотного предела $\omega \rightarrow 0$	66
§ 4. Аппроксимация на основе квазиклассического приближения	69
§ 5. Сравнение результатов различных приближений	74
Список литературы	78
ДИЭЛЕКТРОННАЯ РЕКОМБИНАЦИЯ. <i>В. П. Жданов</i>	79
§ 1. Механизм диэлектронной рекомбинации и общие формулы	79
§ 2. Численные расчеты	82
§ 3. Влияние плотности электронов на диэлектронную рекомбинацию	87
§ 4. Экспериментальные исследования	90
Заключение	92
Список литературы	92
ПЕРЕЗАРЯДКА АТОМОВ НА МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНАХ	94
<i>В. А. Абрамов, Ф. Ф. Барышников, А. И. Казанский, И. В. Комаров, В. С. Лисица, М. И. Чибисов</i>	94
Введение	94
§ 1. Асимптотика обменного взаимодействия и модель распада для вычисления сечения	95
§ 2. Перезарядка атома водорода на полностью ионизованных ионах. Расчеты с использованием модели Ландау—Зинера	100
§ 3. Перезарядка атома водорода на полностью ионизованных ионах — голых ядрах. Метод сильной связи	106
Заключение	112
Список литературы	112

ПЕРЕНОС ИЗЛУЧЕНИЯ В ПЛАЗМЕ. <i>В. А. Абрамов, В. И. Коган, В. С. Лисица</i>	114
§ 1. Введение	114
§ 2. Уравнение Бибермана—Холстейна	
§ 3. Некоторые решения уравнения Бибермана—Холстейна. Диффузионный и антидиффузионный перенос возбуждения	121
§ 4. Вероятностная трактовка переноса возбуждения. Характеристики переноса в полупространстве	125
§ 5. Время миграции резонансного фотона на заданное расстояние. Элементарная трактовка недиффузионного переноса излучения	132
§ 6. Излучение конечного объема неравновесной плазмы в резонансной линии	137
§ 7. Характерные длины в проблеме переноса излучения	140
§ 8. Радиационные потери термически равновесных плазменных систем	145
§ 9. Заключение	151
Список литературы	153
КИНЕТИКА ИЗЛУЧЕНИЯ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ В ТЕРМОЯДЕРНОЙ ПЛАЗМЕ. <i>В. И. Гервидс, А. Г. Жидков, В. С. Марченко, С. И. Яковленко</i>	156
Введение	156
§ 1. Ионизационное состояние примеси и кинетика заселения уровней	157
§ 2. Спектроскопическая диагностика примесных ионов	171
§ 3. Излучение примеси и баланс энергии	188
Приложение	199
Список литературы	202
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АТОМНЫХ ЧАСТИЦ С ТВЕРДЫМ ТЕЛОМ. <i>Ю. В. Мартыненко, А. И. Рязанов, О. Б. Фирсов, Ю. Н. Явлинский</i>	205
§ 1. Введение	205
§ 2. Потери энергии быстрых частиц в твердом теле	210
§ 3. Распределение внедренных ионов и дефектов по глубине проникновения	215
§ 4. Отражение ионов от поверхности	227
§ 5. Распыление	236
§ 6. Зарядовое состояние отраженных и распыленных частиц	253
Список литературы	265

УДК 533.6.92

Сафронова У. И., Сенашенко В. С. Современное состояние теории спектров многозарядных ионов. — В кн.: Вопросы теории плазмы. Вып. 12/ Под ред. Б. Б. Кадомцева. М.: Энергоиздат, 1982, с. 3.

Рассматриваются теоретические методы описания спектров многозарядных ионов, основанные на нерелятивистском приближении либо учитывающие эффекты промежуточной связи. Приводятся результаты расчетов энергий переходов, потенциалов ионизации, сил осцилляторов, вероятностей радиационных и безрадиационных переходов, времен жизни возбужденных состояний различных ионов. Обсуждается влияние корреляционных эффектов и релятивистских взаимодействий на структуру наблюдаемых спектров. Результаты, полученные различными методами, сравниваются между собой и имеющимися экспериментальными данными.

Табл. 9. Ил. 8. Библиогр. 52.

УДК 533.6.92

Базылев В. А., Чибисов М. И. Возбуждение и ионизация многозарядных ионов электронами. — В кн.: Вопросы теории плазмы. Вып. 12/ Под ред. Б. Б. Кадомцева. М.: Энергоиздат, 1982, с. 30.

Обсуждается применимость теории возмущений по межэлектронному взаимодействию к процессам неупругого взаимодействия электрона с многозарядным ионом. Показано, что расчеты этих процессов методом Кулона—Борна с обменом имеют относительную точность $1/Z$, где Z — заряд иона. Приведены результаты расчетов сечений и скоростей возбуждения некоторых ионов. Обсуждается вклад внутренних оболочек в вероятность ионизации положительных ионов.

Ил. 5. Библиогр. 46.

УДК 533.6.92.

Гервидс В. И., Жданов В. П., Коган В. И., Трубников Б. А., Чибисов М. И. Тормозное излучение электронов в горячей плазме. — В кн.: Вопросы теории плазмы. Вып. 12/ Под ред. Б. Б. Кадомцева. М.: Энергоиздат, 1982, с. 58.

Статья представляет собой обзор результатов теоретических расчетов тормозного излучения (ТИ) электронов килоэлектрон-вольтного диапазона энергий на многоэлектронных атомах и ионах типичных примесей в горячей плазме. Дано обоснование используемого в этих расчетах приближения статического атомного потенциала. Приведены схема и результаты численных квантовомеханических расчетов спектральной интенсивности ТИ для ряда электронных энергий, а также оценки соответствующих гаунт-факторов для плазмы с данной температурой. Изложены результаты расчетов ТИ приближенными методами; в борновском приближении, в «квазиборновской» аппроксимации на основе низкочастотного предела $\omega = 0$, в полуклассическом и классическом приближениях. Результаты, полученные различными методами, сопоставлены друг с другом.

Табл. 1. Ил. 6. Библиогр. 26.

УДК 533.6.92

Жданов В. П. Диэлектронная рекомбинация. — В кн.: Вопросы теории плазмы. Вып. 12/ Под ред. Б. Б. Кадомцева. М.: Энергоиздат, 1982, с. 79.

Дается обзор современного состояния теории диэлектронной рекомбинации — процесса связывания внешнего налетающего электрона с положительным ионом, происходящего в результате последовательности нескольких событий в одном элементарном акте. Налетающий электрон возбуждает связанный электрон, а сам переходит также на возбужденный уровень этого же иона. Состояние с двумя возбужденными электронами стабилизируется затем излучением двух фотонов. Отмечается важность этого пути рекомбинации для разреженной плазмы.

Табл. 4. Библиогр. 21.

УДК 533.6.92

Абрамов В. А., Барышников Ф. Ф., Казанский А. И., Комаров И. В., Лисица В. С., Чибисов М. И. Перезарядка атомов на многозарядных ионах. — В кн.: Вопросы теории плазмы. Вып. 12/ Под ред. Б. Б. Кадомцева. М.: Энергоиздат, 1982, с. 94.

Исследуется асимптотика одноэлектронного обменного взаимодействия атома с многозарядным ионом. Сечение перезарядки оценивается двумя альтернативными способами: методом подбарьерного распада и оценкой межъядерного расстояния, при котором становится возможным уход электрона от атома к иону в приближении классической механики. Детальные расчеты сечений перезарядки проведены в приближении Ландау—Зинера и методом сильной связи с использованием точного адиабатического базиса для столкновения атома водорода в основном состоянии с голыми ядрами.

Табл. 7. Ил. 3. Библиогр. 53.

УДК 533.951

Абрамов В. А., Коган В. И., Лисица В. С. Перенос излучения в плазме. — В кн.: Вопросы теории плазмы. Вып. 12/ Под ред. Б. Б. Кадомцева. М.: Энергоиздат, 1982, с. 114.

Дается обзор теории переноса излучения в плазме в рамках модели полного перераспределения по частоте. На единой основе рассмотрен перенос в резонансной линии и в континууме. Изложены некоторые приближенные методы решения стационарного уравнения Бибермана—Холстейна и вероятностная трактовка проблемы переноса. Рассмотрена нестационарная задача, и на ее основе дана элементарная трактовка недиффузионного переноса в линии. Определены характерные длины задачи, в том числе длина «запирания» излучения в системе конечных размеров. Проанализированы перенос излучения и соответствующие радиационные потери энергии равновесных и неравновесных плазменных систем в континууме и в линиях. Кратко обсуждены границы применимости используемых теоретических моделей.

Ил. 9. Библиогр. 49.

УДК 533.6.92

Гервидс В. И., Жидков А. Г., Марченко В. С., Яковлево С. И. Кинетика излучения многозарядных ионов в термоядерной плазме. — В кн.: Вопросы теории плазмы. Вып. 12/ Под ред. Б. Б. Кадомцева. М.: Энергоиздат, 1982, с. 156.

Дан обзор расчетов заселенностей и распределений по кратностям примесных ионов в термоядерной плазме. Существенное внимание уделено моделям, учитывающим отклонения от коронального равновесия (учет метастабильных состояний, ускоренных электронов, пучков нейтральных атомов). Рассмотрены вопросы диагностики и энергодисбаланса термоядерной плазмы, связанные с примесными ионами.

Ил. 28. Библиогр. 109.

УДК 533.924

Мартыненко Ю. В., Рязанов А. И., Фирсов О. Б., Явлинский Ю. Н. Взаимодействие атомных частиц с твердым телом. — В кн.: Вопросы теории плазмы. Вып. 12/ Под ред. Б. Б. Кадомцева. М.: Энергоиздат, 1982, с. 205.

Обзор посвящен взаимодействию термоядерной плазмы с поверхностью твердого тела. Обсуждаются следующие вопросы: отражение ионов от поверхности, внедрение ускоренных ионов в твердое тело, образование радиационных дефектов при ионной бомбардировке, распыление, зарядовое состояние отраженных частиц. Основное внимание уделяется физическим механизмам и теоретическим методам, применяемым для описания рассматриваемых явлений.

Табл. 3. Ил. 19. Библиогр. 102.

ВОПРОСЫ ТЕОРИИ ПЛАЗМЫ

В ы п. 12

Редактор *В. Н. Безрукова*

Художественный редактор *А. Т. Кирьянов*

Переплет художника *Н. Я. Вовк*

Технический редактор *Н. П. Собакина*

Корректор *Л. С. Тимохова*

ИБ № 9

Сдано в набор 26.04.82 Подписано в печать 17.09.82
Т-18261. Формат 60×90^{1/16}. Бумага типографская
№ 1. Гарнитура литературная. Печать высокая
Усл. печ. л. 17,0. Усл. кр.-отт. 17,0. Уч.-изд. л. 19,69
Тираж 795 экз. Заказ 953. Цена 3 р. 30 к.

Энергоиздат, 113114, Москва, М-114,
Шлюзовая наб., 10

Московская типография № 4 Союзполиграфпрома
при Государственном комитете СССР
по делам издательств, полиграфии
и книжной торговли

129041, Москва, Б. Переяславская ул., д. 46

ВОПРОСЫ
ТЕОРИИ
ПЛАЗМЫ

ЭНЕРГОИЗДАТ