

01

# Прямое диссоциативное возбуждение гетероядерных и гомоядерных ионов инертных газов электронным ударом

© К.С. Кислов, А.А. Наритц, В.С. Лебедев

Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН,  
119991 Москва, Россия

e-mail: vlebedev@sci.lebedev.ru; kislov93@mail.ru; narits@sci.lebedev.ru

Поступила в редакцию 06.06.2020 г.

В окончательной редакции 06.06.2020 г.

Принята к публикации 16.07.2020 г.

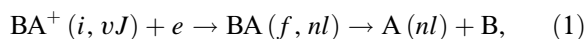
Дано теоретическое описание процесса диссоциативного возбуждения молекулярного иона электронным ударом в условиях эффективного заселения огромного числа его колебательно-вращательных уровней. Рассмотрение базируется на квантовой версии теории неадиабатических переходов между электронными термами молекулярного иона и на замене суммирования по  $vJ$ -уровням на интегрирование по  $v$  и  $J$ . Получены полуаналитические формулы для интегрального вклада всего колебательно-вращательного квазиконтинуума в сечения,  $\sigma_T^{de}(\varepsilon)$ , и константы скорости,  $\alpha^{de}(T, T_e)$ , изучаемого процесса в плазме с температурами  $T_e$  и  $T$  ее электронной и ионной компонент. Разработанная теория использована для исследования процессов диссоциативного возбуждения гетероядерных ( $\text{HeXe}^+$  и  $\text{ArXe}^+$ ) и гомоядерных ( $\text{Ar}_2^+$  и  $\text{Xe}_2^+$ ) ионов инертных газов. Установлена сильная зависимость результатов от энергии диссоциации иона и большие отличия в поведении и характерных величинах  $\sigma_T^{de}(\varepsilon)$  и  $\alpha^{de}(T, T_e)$  для указанных систем в различных диапазонах энергий,  $\varepsilon$ , и температур  $T_e$  и  $T$ . Определены области доминирования вкладов двух конкурирующих каналов: прямого диссоциативного возбуждения и диссоциативной рекомбинации в полные сечения и скорости разрушения молекулярных ионов инертных газов электронным ударом. В результате анализа поведения дифференциальных констант скоростей диссоциативного возбуждения в единичный интервал энергии электрона в конечном канале реакции продемонстрированы качественные различия в динамике этого процесса в случаях слабосвязанных и умеренносвязанных молекулярных ионов.

**Ключевые слова:** диссоциативное возбуждение, столкновения с электронами ионов, диссоциативная рекомбинация, неадиабатические переходы, электронные термы, гомоядерные и гетероядерные ионы инертных газов.

DOI: 10.21883/OS.2020.11.50161.171-20

## 1. Введение

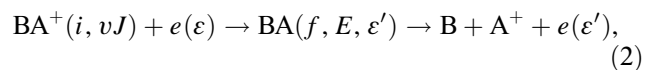
Процессы образования и распада молекулярных ионов представляют интерес для спектроскопии, кинетики и диагностики низкотемпературной плазмы [1–3], физики ранней вселенной [4–6], для разработки источников ВУФ излучения [9] и мощных газовых лазеров [10–13]. Большое внимание уделяется, в частности, изучению процессов столкновения молекулярных ионов с электронами, включая ионизацию [14], фрагментацию [15,16], диссоциативную рекомбинацию [17] и прямую диссоциацию электронным ударом [18,19]. Одним из наиболее эффективных механизмов распада молекулярных ионов является процесс диссоциативной рекомбинации (ДР):



происходящий в результате резонансного неадиабатического обмена энергии внешнего и внутренних электронов системы  $\text{BA}^+ + e$  с изменением электронного состояния  $|i\rangle \rightarrow |f\rangle$  и с образованием невозбужденного,  $\text{B}$ , и возбужденного или высоковозбужденного атома,  $\text{A}(nl)$ , в конечном канале реакции. Здесь  $v$  и  $J$  — колебательное и вращательное квантовые числа иона  $\text{BA}^+$  в

начальном электронном состоянии  $|i\rangle$ . Процесс (1) интенсивно изучался ранее как экспериментально [20–21], так и теоретически [25–31] для многообразия простых, сложных и кластерных ионов (подробнее см. [17,32,33]).

Значительный интерес представляют исследования еще одного резонансного процесса разрушения молекулярного иона электронным ударом:



называемого его диссоциативным возбуждением (ДВ). В этом процессе происходит связанно-свободный переход ядер  $|vJ\rangle \rightarrow |EJ'\rangle$  иона  $\text{BA}^+$  и свободно-свободный переход внешнего электрона  $|\varepsilon\rangle \rightarrow |\varepsilon'\rangle$  системы  $\text{BA}^+ + e$ . Другими словами, в отличие от ДР (1) в процессе ДВ внешний электрон находится в непрерывном спектре как в начальном, так и в конечном состояниях. В то же время при резонансном механизме реакции (2) диссоциация иона  $\text{BA}^+$ , так же как и в случае ДР, происходит в результате обмена энергии внешнего и внутренних электронов системы  $\text{BA}^+ + e$  и сопровождается неадиабатическим переходом между электронными термами  $U_i(R)$  и  $U_f(R)$  молекулярного (квазимолекулярного) иона  $\text{BA}^+$  (рис. 1).

Исследования резонансных процессов диссоциативного возбуждения (2) проводились в ряде работ. Наибольшее количество из них посвящено процессу ДВ молекулярных ионов водорода и их изотопов. Экспериментальные исследования проводились в [34–36] для  $\text{H}_2^+$  и в [37] для  $\text{H}_3^+$ , в то время как теоретические в [18,38–41] для  $\text{H}_2^+$ , в [42,43] для  $\text{H}_3^+$ , а также в [40] для  $\text{D}_2^+$  и  $\text{T}_2^+$ . Кроме того, ряд работ посвящен исследованию процессов диссоциативного возбуждения (2) гомоядерных ионов инертных газов ввиду важной роли таких ионов в плазменных средах, возбуждаемых электронным пучком, в газовых разрядах и с помощью оптической накачки лазерным излучением. В экспериментальных работах по  $\text{Ar}_2^+$  [44] и  $\text{Xe}_2^+$  [45], а также в теоретической работе [46] было показано, что эффективность процесса ДВ (2) сопоставима с эффективностью диссоциативной рекомбинации (2) при электронных температурах  $T_e \approx 10000$  К.

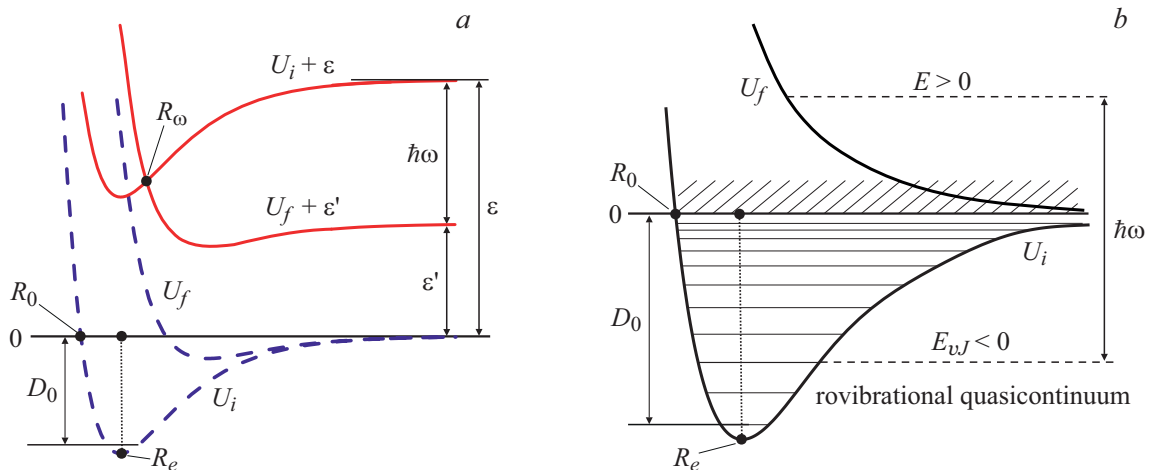
Наиболее полное теоретическое описание процесса (2) для гомоядерных ионов инертных газов было дано в работе [47], где были получены квазиклассические выражения для сечений их диссоциативного возбуждения. На основе этих выражений в работах [46,48] были получены полуэмпирические оценочные формулы для соответствующих констант скоростей ДВ ионов  $\text{He}_2^+$  и  $\text{Ar}_2^+$ . Эти формулы использовались в [10–13] при построении кинетических моделей аргоновой плазмы атмосферного давления в рамках разработки лазеров с оптической накачкой на инертных газах (OPRGL). Их применимость ограничена областью температур  $T_e \lesssim 2$  eV при рабочем диапазоне  $T_e \lesssim 5$  eV. В целом надежных теоретических данных по константам скоростей диссоциативного возбуждения гомоядерных ионов инертных газов электронным ударом в широком диапазоне температур электронной,  $T_e$ , и газовой,  $T$ , компонент плазмы на настоящий момент явно недостаточно. Более того, в настоящее время отсутствуют экспериментальные и теоретические данные по сечениям и константам скоростей процессов диссоциативного возбуждения гетероядерных ионов инертных газов. Эти данные требуются для получения самосогласованной физической картины процессов распада молекулярных ионов в плазме смесей инертных газов наряду с полученными недавно данными [49–51] по сечениям и константам скоростей конкурирующего процесса диссоциативной рекомбинации ионов  $\text{RgXe}^+$  ( $\text{Rg} = \text{He}, \text{Ne}, \text{Ar}, \text{Kr}$ ).

Цель данной работы состоит в разработке аналитического подхода для описания процесса (2), в проведении численных расчетов и анализе результатов для сечений и констант скоростей диссоциативного возбуждения гетероядерных ( $\text{HeXe}^+$ ,  $\text{ArXe}^+$ ) и гомоядерных ( $\text{Ar}_2^+$ ,  $\text{Xe}_2^+$ ) ионов. Энергии диссоциации,  $D_0$ , таких ионов существенно различаются и их можно отнести к слабо-связанным  $\text{HeXe}^+$  ( $D_0 = 13.1$  meV), умеренно-связанным  $\text{ArXe}^+$  ( $D_0 = 171$  meV) и сильно-связанным  $\text{Ar}_2^+$  и  $\text{Xe}_2^+$  ( $D_0 = 1.19$  eV и  $0.97$  eV). Это приводит к различному соотношению величины  $D_0$  и тепловой энергии  $k_B T$  при

одной и той же газовой температуре  $T$ . В силу разной структуры и симметрии электронных термов гомоядерных и гетероядерных ионов, участвующих в переходах, сильно отличаются друг от друга и матричные элементы оператора взаимодействия в системах  $\text{A}_2^+ + e$  и  $\text{BA}^+ + e$ . Поэтому можно ожидать существенно различное поведение сечений и констант скоростей ДВ для таких ионов при варьировании температуры  $T$  в различных диапазонах энергий,  $\epsilon$ , и температур,  $T_e$ , электронов. Будет показано, что положения максимумов сечений,  $\sigma_T^{\text{de}}(\epsilon)$ , и констант скоростей,  $K^{\text{de}}(T, T_e)$ , процесса (2) и их характерные величины сильно отличаются друг от друга для гетероядерных и гомоядерных ионов.

Рассмотрение процесса (2) проведено в работе на основе квантовой версии теории неадиабатических переходов между электронными термами систем  $\text{A}_2^+ + e$  и  $\text{BA}^+ + e$  в комбинации с приближением квазинепрерывного спектра для колебательно-вращательных уровней. Аналогичный подход использовался нами при расчете интегрального вклада всех  $\nu J$ -уровней иона в усредненные по бальцмановскому распределению сечения фотодиссоциации и коэффициент фотопоглощения, обусловленный свободно-свободными переходами [52], а также при рассмотрении процесса ДР молекулярных ионов с образованием невозбужденного и ридберговского атомов [49–51]. Применение подобного подхода позволит получить полуаналитические выражения для сечения и константы скорости ДВ в условиях сильного возбуждения колебательно-вращательного квазиконтинуума. Это отличает его от большинства других подходов, практически реализуемых лишь при условии возбуждения низких колебательных уровней. Предлагаемая нами модель позволяет варьировать в широком диапазоне электронную,  $T_e$ , и газовую,  $T$ , температуры. В данной работе в зависимости от конкретных условий газовая и электронная температуры варьировались в диапазоне  $T \sim 100$ – $2000$  К и  $T_e \sim 300$ – $70000$  К. Указанный диапазон температур представляет интерес для многих приложений физики низкотемпературной плазмы и значительно превосходит рабочие диапазоны большинства других теоретических моделей ДВ.

Еще одна задача работы состоит в сравнительном анализе эффективностей процессов (1) и (2) для гомоядерных и гетероядерных ионов. Подобное сравнение было проведено ранее для молекулярных ионов водорода и его изотопов [18,35,40,41], а также для ионов  $\text{O}_2^+$  и  $\text{N}_2^+$  [53,54]. Сведения о конкуренции процессов (1) и (2) в случае гомоядерных ионов инертных газов менее полные. В работах [44] и [45] были экспериментально получены полные константы скорости разрушения ионов  $\text{Ar}_2^+$  и  $\text{Xe}_2^+$  электронным ударом с учетом вкладов ДР и ДВ и сделаны качественные оценки, указывающие, при каких температурах  $T_e$  доминирует тот или иной процесс. В работе [46] были проведены оценочные расчеты констант скоростей процессов (1) и (2). Однако применимость используемых выражений ограничена областью низких температур  $T_e \lesssim 2$  eV. Что



**Рис. 1.** (а) Схематическое изображение кривых потенциальной энергии,  $U_i(R)$  и  $U_f(R)$ , начального и конечного электронных термов молекулярного иона  $BA^+$  и пересекающихся в точке  $R_\omega$  кривых потенциальной энергии,  $U_i(R)+\varepsilon$  и  $U_f(R)+\varepsilon'$ , квазимолекулярной системы  $BA^+ + e$  в процессе (2). (б) Колебательно-вращательный квазиконтинуум ( $E_{vJ} < 0$ ) в начальном электронном состоянии  $|i\rangle$  иона  $BA^+$  и континуум ( $E > 0$ ) в его конечном состоянии  $|f\rangle$ ;  $D_0$  – энергия диссоциации иона,  $R_e$  – равновесное межъядерное расстояние,  $R_0$  – расстояние, определяемое из условия  $U_i(R_0) = 0$ .

же касается гетероядерных ионов инертных газов, то данные о конкуренции процессов (1) и (2) отсутствуют, так что актуальность подобного анализа очевидна. Самостоятельная задача состоит в исследовании и сравнении характерных значений передачи энергии от электронов ионам в процессах (1) и (2) с целью определения основных каналов охлаждения плазмы смесей инертных газов при различных температурах.

## 2. Постановка задачи. Исходные уравнения

Исходное выражение для дифференциального сечения диссоциативного возбуждения молекулярного иона в единичный интервал энергии относительного движения тяжелых частиц имеет вид

$$\frac{d\sigma_{vJ \rightarrow E}^{de}(\varepsilon \rightarrow \varepsilon')}{dE} = \frac{4\pi^3 g_f}{k^2 g_i} \sum_{lm, l'm'} \left| \left\langle \chi_{vJ}^{(i)}(R) \left| V_{i, \varepsilon lm}^{f, \varepsilon' l' m'}(R) \right| \chi_{EJ}^{(f)}(R) \right\rangle \right|^2. \quad (3)$$

Здесь  $\chi_{vJ}^{(i)}$  и  $\chi_{EJ}^{(f)}$  – радиальные волновые функции относительного движения ядер в начальном  $|i, vJ\rangle$  и конечном  $|f, EJ\rangle$  состояниях,  $E = \hbar^2 q^2 / 2\mu$  – энергия частиц  $A^+$  и  $B$  в непрерывном спектре,  $\mu$  – их приведенная масса;  $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m_e$  и  $\varepsilon' = \hbar^2 (k')^2 / 2m_e = \varepsilon - E - |E_{vJ}|$  – энергии электрона в начальном и конечном каналах реакции (1);  $g_f/g_i \equiv g_{de} = g_{BA^+(f)}/g_{BA^+(i)}$  – отношение статистических весов электронных состояний иона  $BA^+$ . Электрон-

ный матричный элемент определяется выражением

$$V_{i, \varepsilon lm}^{f, \varepsilon' l' m'}(\mathbf{R}) = \langle \psi_{\varepsilon' l' m'}(\mathbf{r}) | \langle \varphi_f(\mathbf{r}_k, \mathbf{R}) | V | \varphi_i(\mathbf{r}_k, \mathbf{R}) \rangle | \psi_{\varepsilon lm}(\mathbf{r}) \rangle, \quad (4)$$

где  $\psi_{\varepsilon lm}(\mathbf{r})$  и  $\psi_{\varepsilon' l' m'}(\mathbf{r})$  – волновые функции внешнего электрона системы  $BA^+ + e$  до и после столкновения;  $\varphi_i(\mathbf{r}_k, \mathbf{R})$  и  $\varphi_f(\mathbf{r}_k, \mathbf{R})$  – электронные волновые функции иона  $BA^+$ , соответствующие начальному,  $U_i(R)$ , и конечному,  $U_f(R)$ , термам.

Далее введем эффективный параметр взаимодействия,  $\Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}(R)$ , в виде:

$$\Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}(R) = \sum_{lm, l'm'} \Gamma_{\varepsilon' l' m', \varepsilon lm}(R) \longrightarrow \longrightarrow 2\pi \sum_{lm, l'm'} \left| V_{i, \varepsilon lm}^{f, \varepsilon' l' m'}(R) \right|^2. \quad (5)$$

Резонансная диссоциация электронным ударом, сопровождающаяся передачей энергии электрона  $\hbar\omega = \varepsilon - \varepsilon'$ , происходит в окрестности точки  $R_\omega$  пересечения эффективных кривых потенциальной энергии системы  $BA^+ + e$ :

$$U_i(R_\omega) + \hbar^2 k^2 / (2m_e) = U_f(R_\omega) + \hbar^2 (k')^2 / (2m_e). \quad (6)$$

Отсюда следует, что в точке  $R_\omega$  передача энергии налетающего электрона равна энергии расщепления термов

$$\hbar\omega = \varepsilon - \varepsilon' = E + |E_{vJ}| = \Delta U_{fi}(R_\omega), \quad \Delta U_{fi} = U_f - U_i. \quad (7)$$

При квантовом описании неадиабатических переходов в классически разрешенных и запрещенных областях межъядерных расстояний  $R$  нами использовалась теория

Райса для случая линейного пересечения кривых потенциальной энергии [55,56]. Квадрат модуля матричного элемента связанно-свободного перехода ядер выражается при этом через функцию Эйри:

$$\sum_{lm,l'm'} \left| \langle \chi_{vJ}^{(i)}(R) | V_{i,\epsilon lm}^{f,\epsilon' l' m'}(R) | \chi_{E'J}^{(f)}(R) \rangle \right|^2 = \frac{2\pi}{T_{vJ}} \sqrt{2\mu} \frac{\eta_{vJ}(R_\omega)}{\Delta F_{fi}(R_\omega)} \sum_{lm,l'm'} \left| V_{i,\epsilon lm}^{f,\epsilon' l' m'}(R_\omega) \right|^2, \quad (8)$$

$$\eta_{vJ}(R) = \sqrt{\xi_J(R)} \text{Ai}^2[-\xi_J(R) (E_{vJ} - U_i^J(R))], \quad (9)$$

$$\xi_J(R_\omega) = (2\mu/\hbar^2)^{1/3} |\Delta F_{fi}(R_\omega) / (F_f^J(R_\omega) F_i^J(R_\omega))|^{2/3}. \quad (10)$$

Здесь  $\Delta F_{fi}(R_\omega)$  — разность наклонов кривых потенциальной энергии,  $F(R) = -dU(R)/dR$  в точке  $R_\omega$ ;  $U_a^J(R)$  — эффективные кривые потенциальной энергии с учетом центробежного члена,  $F_a^J(R_\omega)$  — наклоны этих кривых:

$$U_a^J(R) = U_a(R) + \hbar^2 J^2 / (2\mu R^2),$$

$$F_a^J(R_\omega) = -dU_a^J/dR|_{R_\omega}, \quad (a = i, f). \quad (11)$$

В формулу (8) входит период  $T_{vJ} = \oint dR/V_{vJ}(R)$  — колебательно-вращательного движения ядер с энергией  $E_{vJ} < 0$  в эффективном потенциале  $U_i^J(R)$  со скоростью  $V_{vJ}(R) = [2(E_{vJ} - U_i(R) - \hbar^2 J^2 / 2\mu R^2) / \mu]^{1/2}$ .

С помощью формул (5), (8)–(10) выражение (3) для дифференциального сечения ДВ принимает вид

$$\frac{d\sigma_{vJ \rightarrow E}^{\text{de}}(\epsilon \rightarrow \epsilon')}{dE} = \frac{g_{\text{de}} 4\pi^3 \eta_{vJ}(R_\omega) \sqrt{2\mu} \Gamma_{\epsilon \rightarrow \epsilon'}(R_\omega)}{T_{vJ} k^2 \Delta F_{fi}(R_\omega)}. \quad (12)$$

Выражение для полного сечения ДВ молекулярного иона  $\text{BA}^+$ , находящегося на заданном уровне  $vJ$ , следует из (12) после интегрирования по энергии  $E$  относительного движения ядер и в области энергий электрона  $\epsilon \geq |E_{vJ}|$  выглядит следующим образом:

$$\sigma_{vJ}^{\text{de}}(\epsilon) = \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} \frac{g_{\text{de}} 4\pi^3 \eta_{vJ}(R_\omega) \sqrt{2\mu} \Gamma_{\epsilon \rightarrow \epsilon'}(R_\omega)}{T_{vJ} k^2 \Delta F_{fi}(R_\omega)} dE. \quad (13)$$

При  $\epsilon \leq |E_{vJ}|$  сечение,  $\sigma_{vJ}^{\text{de}}(\epsilon) = 0$ , отражая пороговый характер процесса (2). Верхний и нижний пределы интегрирования в (13) определяются условиями

$$E_{\min} = 0, \quad E_{\max} = \epsilon - |E_{vJ}|. \quad (14)$$

Для молекулярного иона  $\text{BA}^+(i, vJ)$ , находящегося на колебательно-вращательном уровне с энергией  $E_{vJ}$ , порог процесса ДВ определяется, таким образом, из условия  $\epsilon \geq |E_{vJ}|$ .

Используя далее формулу (7), заменим переменную интегрирования в (13) на  $\hbar\omega$ :

$$\sigma_{vJ}^{\text{de}}(\epsilon) = \int_{\hbar\omega_{\min}}^{\hbar\omega_{\max}} \frac{g_{\text{de}} 4\pi^3 \eta_{vJ}(R_\omega) \sqrt{2\mu} \Gamma_{\epsilon \rightarrow \epsilon'}(R_\omega)}{T_{vJ} k^2 \Delta F_{fi}(R_\omega)} d(\hbar\omega), \quad (15)$$

$$\hbar\omega_{\min} = |E_{vJ}| \equiv \Delta U_{fi}(R_{vJ}), \quad \hbar\omega_{\max} = \epsilon \equiv \Delta U_{fi}(R_\epsilon). \quad (16)$$

С помощью соотношения  $d(\hbar\omega) = \Delta F_{fi} dR_\omega$  выражение для сечения,  $\sigma_{vJ}^{\text{de}}(\epsilon)$  [см<sup>2</sup>], приобретает вид:

$$\sigma_{vJ}^{\text{de}}(\epsilon) = \int_{R_{\min}^{\text{de}}}^{R_{\max}^{\text{de}}} \frac{g_{\text{de}} 4\pi^3}{T_{vJ} k^2} \eta_{vJ}(R_\omega) \sqrt{2\mu} \Gamma_{\epsilon \rightarrow \epsilon'}(R_\omega) dR_\omega. \quad (17)$$

При квантовом описании относительного движения ядер пределы интегрирования по  $R$  определены, как  $R_{\min}^{\text{de}} = R_\epsilon$  и  $R_{\max}^{\text{de}} = R_{vJ}$  (16), а в квазиклассическом приближении и в пренебрежении движением по классически запрещенным областям они задаются равенствами  $R_{\min}^{\text{de}} = \max\{R_\epsilon, a_{vJ}^i\}$  и  $R_{\max}^{\text{de}} = \min\{R_{vJ}, b_{vJ}^i\}$ , где  $a_{vJ}^i$  и  $b_{vJ}^i$  — соответственно левая и правая ( $a_{vJ}^i < b_{vJ}^i$ ) классические точки поворота в состоянии  $vJ$ , определяемые соотношением:  $U_i^J(a_{vJ}^i) = U_i^J(b_{vJ}^i) = E_{vJ}$ .

### 3. Интегральный вклад колебательно-вращательных уровней в сечение диссоциативного возбуждения молекулярного иона

В рассматриваемых в работе плазмах смесей инертных газов содержатся молекулярные ионы с малыми энергиями диссоциации  $D_0$  и малыми колебательными квантами  $\hbar\omega_e$ . Поэтому даже при комнатных температурах ионной компоненты плазмы ( $T \gtrsim 300$  К) выполняется условие  $k_B T \gtrsim \hbar\omega_e$ , что приводит к заселению большого числа колебательно-вращательных уровней  $vJ$ . В такой ситуации усредненное сечение,  $\sigma_T^{\text{de}}(\epsilon) = \sum_{vJ} \sigma_{vJ}^{\text{de}}(\epsilon) (N_{\text{BA}^+(i,vJ)} / N_{\text{BA}^+}^{\text{tot}})$ , процесса ДВ при заданной температуре,  $T$ , определяется суммарным вкладом всех таких уровней иона  $\text{BA}^+(i)$  в начальном электронном состоянии  $|i\rangle$  с полной концентрацией  $N_{\text{BA}^+(i)}^{\text{tot}} = \sum_{vJ} N_{\text{BA}^+(i,vJ)}$ . Ниже приведен вывод формулы для сечения  $\sigma_T^{\text{de}}(\epsilon)$  [см<sup>2</sup>] в случае болыцмановского распределения молекулярных ионов по  $vJ$ -уровням:

$$\sigma_T^{\text{de}}(\epsilon) = \frac{1}{s Z_{\text{vr}}(T)} \sum_{vJ} (2J+1) \exp\left(-\frac{\epsilon_{vJ}}{k_B T}\right) \sigma_{vJ}^{\text{de}}(\epsilon),$$

$$Z_{\text{vr}} = \frac{1}{s} \sum_{vJ} (2J+1) \exp\left(-\frac{\epsilon_{vJ}}{k_B T}\right). \quad (18)$$

Здесь  $Z_{\text{vr}}$  — колебательно-вращательная статистическая сумма молекулярного иона, а  $s$  — фактор симметрии, равный 2 в случае гомоядерных ионов, если  $U_i(R)$  является  $\Sigma$ -термом, и равный 1 в иных случаях. В рамках приближения квазиконтинуума колебательно-

вращательных состояний имеем

$$\sigma_T^{de}(\epsilon) = \frac{1}{5Z_{vr}(T)} \int_0^{v_{max}} dv \times \int_0^{J_{max}(v)} 2JdJ \exp\left(-\frac{E_{vJ} + D_0}{k_B T}\right) \sigma_{vJ}^{de}(\epsilon). \quad (19)$$

Здесь  $E_{vJ} = \mathcal{E}_{vJ} - D_0$  — колебательно-вращательная энергия иона  $BA^+$ , отсчитанная от его границы диссоциации (когда  $E_{v=0, J=0} = -D_0$ ),  $J_{max}(E)$  — максимально возможное значение  $J$  для каждого фиксированного значения энергии в квазиконтинууме  $E_{vJ} \equiv E < 0$ . Величина  $J_{max}(E)$  находится из условия  $|U_i^J(R_e^J)| \geq |E|$ , где  $R_e^J$  — равновесное межъядерное расстояние в потенциальной яме  $U_i^J$  (см. (11)). Это условие означает, что глубина потенциальной ямы основного электронного терма молекулярного иона с учетом центробежного члена должна при  $0 \leq J < J_{max}$  превышать величину  $|E|$ .

С помощью соотношения Бора–Зоммерфельда  $dv = (T_{vJ}/2\pi\hbar) dE_{vJ}$  выражение (19) принимает вид

$$\sigma_T^{de}(\epsilon) = \frac{1}{\pi\hbar 5Z_{vr}(T)} \int_{-D_0}^0 dE \times \int_0^{J_{max}} \sigma_{v(E)J}^{de}(\epsilon) \exp\left(-\frac{E + D_0}{k_B T}\right) T_{v(E)J} dJ. \quad (20)$$

Подставляя сюда формулу (17) для сечения ДВ с заданного  $vJ$ -уровня, получим:

$$\sigma_T^{de}(\epsilon) = \frac{g_{de} 4\pi^2 \sqrt{2\mu}}{\hbar 5Z_{vr}(T) k^2} \int_{-D_0}^0 dE \int_0^{J_{max}} \exp\left(-\frac{E + D_0}{k_B T}\right) JdJ \times \int_{R_{min}^{de}(\epsilon)}^{R_{max}^{de}(v(E)J)} \eta_{vJ}(R_\omega) \Gamma_{\epsilon \rightarrow \epsilon'}(R_\omega) dR_\omega. \quad (21)$$

Замена порядка интегрирования в (21) дает:

$$\sigma_T^{de}(\epsilon) = \frac{g_{de} 4\pi^2 \sqrt{2\mu}}{\hbar 5Z_{vr}(T) k^2} \int_{R_{min}^{de}(\epsilon)}^\infty \Gamma_{\epsilon \rightarrow \epsilon'}(R_\omega) dR_\omega \times \int_{E_{min}(R_\omega)}^0 \exp\left(-\frac{E + D_0}{k_B T}\right) dE \int_0^{J_{max}} \eta_{vJ}(R_\omega) JdJ. \quad (22)$$

Здесь нижний предел интегрирования  $E_{min}(R_\omega) = -\min\{D_0, \Delta U_{fi}(R_\omega)\}$ .

Вводя далее безразмерные переменные

$$v = \hbar^2 J^2 / (2\mu R_\omega^2 k_B T), \quad \epsilon = (E - U_i(R_\omega)) / (k_B T),$$

$$\Lambda_v = k_B T \xi_J(R_\omega), \quad (23)$$

получаем итоговую формулу для усредненного по больцмановскому распределению сечения резонансного ДВ молекулярного иона электронным ударом при заданной газовой температуре  $T$ :

$$\sigma_T^{de}(\epsilon) = \frac{\tilde{g}_{de} 8\pi^3}{k^2 Z_{vr}(T)} \left(\frac{\mu k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} e^{-\frac{D_0}{k_B T}} \int_{R_{min}^{de}(\epsilon)}^\infty \Gamma_{\epsilon \rightarrow \epsilon'}(R_\omega) \times e^{-\frac{U_i(R_\omega)}{k_B T}} \Theta_T^{de}(R_\omega) R_\omega^2 dR_\omega. \quad (24)$$

Здесь  $\tilde{g}_{de} = g_{de}/5$ , а безразмерный фактор

$$\Theta_T^{de}(R_\omega) = 2\sqrt{\pi} \int_{\epsilon_{min}^{de}}^{\epsilon_{max}^{de}} d\epsilon \exp(-\epsilon) \times \int_0^{v_{max}} dv \sqrt{\Lambda_v(R_\omega)} \text{Ai}^2[-\Lambda_v(R_\omega)(\epsilon - v)] \quad (25)$$

возникает в результате учета интегрального вклада всего колебательно-вращательного квазиконтинуума в сечение процесса (2). Пределы интегрирования (23) в формуле (25) задаются соотношениями:

$$\epsilon_{min}^{de} = -\min\left\{\frac{D_0 + U_i(R_\omega)}{k_B T}, \frac{U_f(R_\omega)}{k_B T}\right\}, \quad \epsilon_{max}^{de} = -\frac{U_i(R_\omega)}{k_B T}, \quad v_{max} = v(J_{max}). \quad (26)$$

Колебательно-вращательная статистическая сумма  $Z_{vr}(T)$  молекулярного иона в приближении квазиконтинуума описывается выражением [57]

$$Z_{vr}(T) = \frac{1}{5} \left(\frac{\mu k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} e^{-\frac{D_0}{k_B T}} \int_{R_0}^\infty e^{-\frac{U_i(R)}{k_B T}} \times \left[1 - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \Gamma\left(\frac{3}{2}, \frac{|U_i(R)|}{k_B T}\right)\right] 4\pi R^2 dR, \quad (27)$$

где точка  $R_0$  определяется из условия  $U_i(R_0) = 0$  (рис. 1).

#### 4. Квантовые выражения для константы скорости диссоциативного возбуждения

Константа скорости ДВ молекулярного иона электронным ударом, учитывающая вклад всех колебательно-вращательных состояний, рассчитывается путем усреднения величины  $v_\epsilon \sigma_T^{de}(\epsilon)$  по функции распределения скоростей электронов при заданной температуре  $T_e$ .

В случае распределения Максвелла имеем

$$\alpha^{de}(T_e, T) = \langle v_\varepsilon \sigma_T^{de}(\varepsilon) \rangle_{T_e} = \frac{\sqrt{8/(\pi m_e)}}{(k_B T_e)^{3/2}} \int_0^\infty \varepsilon \sigma_T^{de}(\varepsilon) \exp\left(-\frac{\varepsilon}{k_B T_e}\right) d\varepsilon. \quad (28)$$

Подставляя сюда формулу (24) для сечения  $\sigma_T^{de}(\varepsilon)$  процесса (2), получим следующее выражение:

$$\alpha^{de}(T_e, T) = 4\pi \frac{k_B T_e}{\hbar} \frac{\tilde{g}_{de}}{Z_{vr}(T)} \exp\left(-\frac{D_0}{k_B T}\right) \left(\frac{\mu T}{m_e T_e}\right)^{3/2} \times \int_0^\infty e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T_e}} d\left(\frac{\varepsilon}{k_B T_e}\right) \times \int_{R_{min}^{de}(\varepsilon)}^\infty \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}(R_\omega) \exp\left(-\frac{U_i(R_\omega)}{k_B T}\right) \Theta_T^{de}(R_\omega) R_\omega^2 dR_\omega. \quad (29)$$

Замена порядка интегрирования приводит к окончательной формуле для константы скорости,  $\alpha^{de}(T_e, T)$  [ $\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$ ], диссоциативного возбуждения молекулярного иона:

$$\alpha^{de}(T_e, T) = \left(\frac{\mu T}{m_e T_e}\right)^{3/2} \frac{k_B T_e}{\hbar} \frac{4\pi \tilde{g}_{de}}{Z_{vr}(T)} \exp\left(-\frac{D_0}{k_B T}\right) \times \int_0^\infty \langle \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}(R_\omega) \rangle_{T_e} \Theta_T^{de}(R_\omega) \times \exp\left(-\frac{U_i(R_\omega)}{k_B T}\right) \exp\left(-\frac{\Delta U_{fi}(R_\omega)}{k_B T_e}\right) R_\omega^2 dR_\omega. \quad (30)$$

Безразмерная величина  $\langle \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}(R_\omega) \rangle_{T_e}$  в (30) вычисляется по формуле:

$$\langle \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}(R_\omega) \rangle_{T_e} = \int_{x_{min}}^\infty \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}(R_\omega) e^{-\frac{\Delta U_{fi}(R_\omega) - \varepsilon}{k_B T_e}} d\left(\frac{\varepsilon}{k_B T_e}\right), \quad (31)$$

где  $x_{min} = \Delta U_{fi}(R_\omega) / k_B T_e$ , а  $\Delta U_{fi} = U_f - U_i > 0$  (рис. 1).

Как следует из формул (24) и (30), эффективность процесса ДВ, помимо значений температур  $T$  и  $T_e$  и вида кривых потенциальной энергии  $U_i$  и  $U_f$ , определяется величиной,  $\Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}$ , безразмерного параметра взаимодействия (5) для процесса (2). Точное его нахождение основано на трудоемких многоэлектронных расчетах методами квантовой химии. В отдельных случаях могут быть использованы различные приближенные модели. Согласно общему правилу (см., например, [58]), параметр взаимодействия  $\Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}$  (5) для свободно-свободного перехода электрона  $|\varepsilon\rangle \rightarrow |\varepsilon'\rangle$  в процессе ДВ (2) связан с соответствующей величиной  $\Gamma_{\varepsilon \rightarrow n}$  для свободно-связанного перехода  $|\varepsilon\rangle \rightarrow |n\rangle$  в процессе ДР (1) (и со-

ответственно с автоионизационной шириной,  $\Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}$ , распада ридберговской молекулы  $\text{BA}(f, nl) \rightarrow \text{BA}^+(i, \varepsilon)$  соотношением

$$\Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'} = \frac{n^3 \Gamma_{\varepsilon \rightarrow n}}{2Ry}, \quad \Gamma_{\varepsilon \rightarrow n} = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) \Gamma_{nl \rightarrow \varepsilon}, \quad (32)$$

где  $n$  — главное квантовое число образующегося в процессе (1) атома  $\text{A}(n)$ . При этом энергию электрона в дискретном спектре ( $\varepsilon_n = Ry/n^2$ ) нужно заменить на его энергию в непрерывном спектре  $\varepsilon' = \hbar(k')^2 / (2m_e) > 0$ .

Резонансная диссоциация молекулярного иона может происходить как в результате ДВ, при котором электрон остается в непрерывном спектре в конечном канале реакции, так и в результате ДР, сопровождающейся захватом электрона в связанное состояние атома  $\text{A}(n)$ . Поскольку обе реакции (1) и (2) приводят к разрушению молекулярного иона, представляет интерес получить простое выражение для суммарной константы скорости,  $\alpha^{\text{tot}} = \alpha^{\text{dr}} + \alpha^{\text{de}}$ , резонансной диссоциации. Формула для константы скорости,  $\alpha_n^{\text{dr}}(T_e, T)$  [ $\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$ ], резонансного захвата электрона на ридберговский уровень  $n$  в процессе (1) приведена в работе [50]. Константа скорости диссоциативной рекомбинации на все уровни  $n$  рассчитывается путем суммирования констант скоростей захвата  $\alpha_n^{\text{dr}}(T_e, T)$  на отдельные уровни:  $\alpha^{\text{dr}}(T_e, T) = \sum_n \alpha_n^{\text{dr}}(T_e, T)$ . При этом для оценки можно использовать приближение квазидискретного спектра энергетических уровней связанного электрона ( $\varepsilon_n = -Ry/n_*^2$ ) и заменить суммирование по  $n$  на интегрирование по энергии  $\varepsilon_n$ . Тогда с использованием полученной здесь формулы (29) для константы скорости,  $\alpha^{\text{de}}$ , процесса ДВ после ряда преобразований приходим к следующему результату для суммарной константы скорости,  $\alpha^{\text{tot}}$ , резонансной диссоциации в процессах (1) и (2):

$$\alpha^{\text{tot}}(T_e, T) = \frac{\tilde{g}_{dr}}{Z_{vr}(T)} \left(\frac{\mu T}{m T_e}\right)^{3/2} \frac{k_B T_e}{\hbar} \times \int_0^\infty \langle \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}(R_\omega) \rangle_{T_e}^{\text{tot}} e^{-\frac{D_0 + U_i(R_\omega)}{k_B T}} \Theta_T(R_\omega) 4\pi R_\omega^2 dR_\omega, \quad (33)$$

где безразмерный фактор  $\Theta_T(R_\omega) \equiv \Theta_T^{\text{dr}}(R_\omega) = \Theta_T^{\text{de}}(R_\omega)$  определяется выражением (25), а величина  $\langle \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}(R_\omega) \rangle_{T_e}^{\text{tot}}$  имеет вид

$$\langle \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}(R_\omega) \rangle_{T_e}^{\text{tot}} = \int_0^\infty \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}(R_\omega) e^{-\frac{\varepsilon}{k_B T_e}} d\left(\frac{\varepsilon}{k_B T_e}\right). \quad (34)$$

В случае, когда  $\Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}(R_\omega)$  зависит лишь от частоты перехода  $\omega$  и в явном виде не зависит от энергии налетающего электрона, интегрирование по  $\varepsilon$  в (31) и (34) после вынесения этой величины за знак интеграла дает единицу, т.е. эта процедура не вносит никакой зависимости величин  $\langle \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}(R_\omega) \rangle_{T_e}$  и  $\langle \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}(R_\omega) \rangle_{T_e}^{\text{tot}}$

от  $T_e$ . Такая ситуация имеет место в используемых нами моделях расчета параметра взаимодействия  $\Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}(R_\omega)$  (например, для дипольных переходов в гомоядерных ионах в приближении Крамерса, когда фактор Гаунта  $G = 1$ , и для квадрупольных переходов в гетероядерных ионах в модели [59–61])). Тогда из (33) следует зависимость  $T_e^{-1/2}$  для полной константы скорости,  $\alpha^{\text{tot}}$ , диссоциации в процессах (1) и (2). Отметим, что при учете движения лишь по классически разрешенной области движения ядер нижний предел интегрирования в (33) должен быть заменен на  $R_0$  (рис. 1), а для фактора  $\Theta_T(R_\omega)$  нужно использовать формулу (39) из [49].

Для ряда задач кинетики низкотемпературной плазмы интерес представляет вычисление энергии  $\Delta\varepsilon$ , переданной от налетающего электрона в кинетическую энергию разлетающихся ядер в процессах (1) и (2). С этой целью ниже получены простые выражения для дифференциальных констант скоростей  $d\alpha(T_e, T, \varepsilon')/d\varepsilon'$  двух рассматриваемых здесь процессов резонансной диссоциации в единичный интервал энергии электрона  $\varepsilon'$  в непрерывном ( $\varepsilon' > 0$ ) или дискретном ( $\varepsilon' \equiv \varepsilon_n < 0$ ) спектрах. Используемый нами при этом подход позволяет рассчитывать соответствующие дифференциальные константы скорости процессов ДВ и ДР единым образом, а формальное отличие между ними состоит лишь в знаке энергии  $\varepsilon'$  в конечных каналах реакций (1) и (2). Будем исходить из следующего выражения для суммарной константы скорости,  $\alpha^{\text{dr}}(T_e, T) = \sum_n \alpha_n^{\text{dr}}(T_e, T)$ , захвата налетающего электрона на все ридберговские уровни  $n$ :

$$\alpha_{Ry}^{\text{dr}}(T_e, T) = \int \alpha_n^{\text{dr}}(T_e, T) dn = \int \alpha_{n(\varepsilon')}^{\text{dr}}(T_e, T) \frac{dn}{d\varepsilon'} d\varepsilon', \quad (35)$$

полученное в приближении квазиконтинуума слабосвязанных уровней атома. Таким образом, исходное выражение для дифференциальной константы скорости  $d\alpha^{\text{dr}}(\varepsilon', T_e, T)/d\varepsilon'$  процесса ДР на ридберговские уровни с энергией в интервале ( $\varepsilon', \varepsilon' + d\varepsilon'$ ) имеет вид

$$\frac{d\alpha^{\text{dr}}(T_e, T, \varepsilon')}{d\varepsilon'} = \alpha_{n(\varepsilon')}^{\text{dr}}(T_e, T) \frac{dn}{d\varepsilon'} = \alpha_{n(\varepsilon')}^{\text{dr}}(T_e, T) \frac{n^3}{2Ry}. \quad (36)$$

Единое выражение для дифференциальной константы скорости,  $d\alpha^{\text{tot}}(T_e, T, \varepsilon')/d\varepsilon'$ , резонансной диссоциации иона  $VA^+$  при заданной энергии электрона  $\varepsilon'$  в конечном состоянии определим следующим образом:

$$d\alpha^{\text{tot}}(T_e, T, \varepsilon')/d\varepsilon' = \begin{cases} d\alpha^{\text{dr}}(T_e, T, \varepsilon')/d\varepsilon', & \varepsilon' < 0, \\ d\alpha^{\text{dc}}(T_e, T, \varepsilon')/d\varepsilon', & \varepsilon' \geq 0. \end{cases} \quad (37)$$

Формула для дифференциальной константы скорости,  $d\alpha^{\text{dc}}(T_e, T, \varepsilon')/d\varepsilon'$ , исследуемого в данной работе процесса ДВ непосредственно следует из (29) после замены порядка интегрирования и с использованием соотношения  $\varepsilon' = \varepsilon - \hbar\omega$ . Аналогичная формула для величины  $d\alpha^{\text{dr}}(T_e, T, \varepsilon')/d\varepsilon'$  может быть выведена с помощью

выражения (36), а также формул (30) и (31) из нашей недавней статьи [50] для константы скорости,  $\alpha_n^{\text{dr}}(T_e, T)$ , захвата электрона в заданное ридберговское состояние  $n$ . Результирующее выражение для дифференциальной константы скорости,  $d\alpha^{\text{tot}}/d\varepsilon'$  [ $\text{cm}^3\text{s}^{-1}\text{erg}^{-1}$ ], резонансной диссоциации выглядит следующим образом:

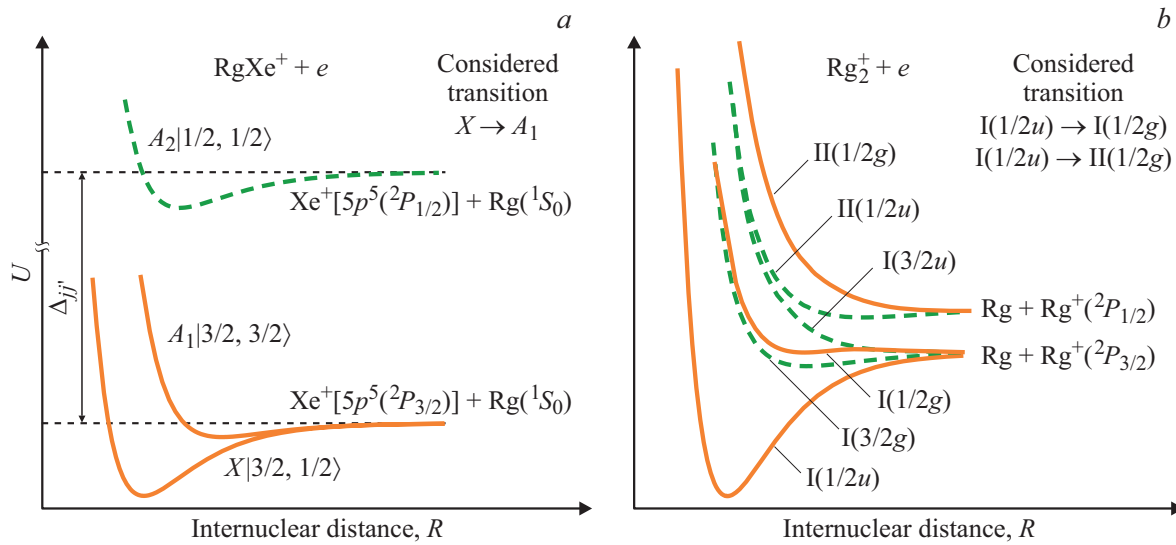
$$\frac{d\alpha^{\text{tot}}(T_e, T, \varepsilon')}{d\varepsilon'} = \frac{\tilde{g}_{\text{dc}}}{\hbar Z_{\text{vr}}(T)} \left( \frac{\mu T}{m T_e} \right)^{3/2} \int_0^{R_{\text{max}}(\varepsilon')} \Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}(R_\omega) \times e^{-\frac{U_i(R_\omega)+D_0}{k_B T}} e^{-\frac{\Delta U_{fi}(R_\omega)+\varepsilon'}{k_B T_e}} \Theta_T(R_\omega) 4\pi R_\omega^2 dR_\omega. \quad (38)$$

Безразмерный фактор  $\Theta_T(R) \equiv \Theta_T^{\text{dr}}(R) = \Theta_T^{\text{dc}}(R)$  в (38) вычисляется по формуле (25), а верхний предел интегрирования по межъядерному расстоянию равен:  $R_{\text{max}}(\varepsilon') = \infty$  при  $\varepsilon' \geq 0$  и  $R_{\text{max}}(\varepsilon') = R_{|\varepsilon'|}$  при  $\varepsilon' < 0$ , где точка  $R_{|\varepsilon'|}$  определяется из уравнения  $\Delta U_{fi}(R_{|\varepsilon'|}) = |\varepsilon'|$ . Интегрирование выражения (38) по энергии электрона  $\varepsilon'$  приводит к полученной в данной работе формуле (33) для суммарной константы скорости  $\alpha^{\text{tot}}(T_e, T)$  процессов ДВ и ДР. Сделанное после формулы (33) замечание относительно необходимости замены нижнего предела интегрирования по  $R_\omega$  с нуля на  $R_0$  при учете движения ядер лишь по классически разрешенной области остается в силе и здесь. Формула (38) позволяет проводить анализ распределения энергий электрона в конечных каналах резонансных процессов (1) и (2). Она дает возможность установить, при каких условиях электроны преимущественно окажутся в связанных или свободных состояниях в результате резонансного распада молекулярных ионов  $VA^+$ . Такая информация требуется для решения ряда задач спектроскопической диагностики и кинетики релаксации и рекомбинации низкотемпературной плазмы.

## 5. Результаты и обсуждение

Разработанная в предыдущих разделах теория использована здесь для проведения численных расчетов и анализа поведения сечений и констант скоростей процессов ДВ гетероядерных ( $\text{HeXe}^+$ ,  $\text{ArXe}^+$ ) и гомоядерных ( $\text{Ar}_2^+$ ,  $\text{Xe}_2^+$ ) ионов инертных газов. Расчеты выполнены с учетом конкретной структуры и симметрии электронных термов указанных ионов, а также характера взаимодействия внешнего и внутренних электронов в квазимолекулах  $\text{RgXe}^+ + e$  и  $\text{Rg}_2^+ + e$ . Это приводит к существенно отличающимся друг от друга величинам матричных элементов перехода и соответственно к различным значениям безразмерного параметра неадиабатической связи,  $\Gamma_{\varepsilon \rightarrow \varepsilon'}$ , для изучаемых здесь гетероядерных и гомоядерных систем (см. формулы (5), (32) и результаты нашей недавней работы [50] по процессу ДР).

Типичный вид кривых потенциальной энергии исследуемых ионов приведен на рис. 2 по данным работ [62–64]. При рассмотрении процессов ДВ гетероядерных



**Рис. 2.** Вид кривых потенциальной энергии нижних электронных термов гетероядерных,  $RgXe^+$  (a), и гомоядерных,  $Rg_2^+$  (b), ионов инертных газов с учетом спин-орбитального расщепления  $\Delta_{j=3/2, j'=1/2}$  уровней  $^2P_{3/2}$  и  $^2P_{1/2}$  иона  $Rg^+[n_0p^5(^2P_j)]$  ( $n_0 = 3$  и  $5$  для  $Ar^+$  и  $Xe^+$ ). Сплошные кривые — термы, участвующие в рассматриваемых переходах.

ионов,  $RgXe^+$ , нами учитывались неадиабатические переходы с участием основного  $X|j_i = 3/2, \Omega_i = 1/2\rangle$  и первого возбужденного  $A_1|j_f = 3/2, \Omega_f = 3/2\rangle$  электронных термов (рис. 2, a). Переходы с основного  $X|j_i = 3/2, \Omega_i = 1/2\rangle$  на второй возбужденный терм  $A_2|j_f = 1/2, \Omega_f = 1/2\rangle$  ионов  $HeXe^+$  и  $ArXe^+$  в расчетах не принимались во внимание, поскольку их влияние на величины сечений процессов ДВ оказывается малым в исследуемом диапазоне температур  $T_e \sim 100-20000$  К из-за большой величины энергии спин-орбитального расщепления  $\Delta_{j=3/2, j'=1/2} = 1.3$  eV уровней  $^2P_{3/2}$  и  $^2P_{1/2}$  иона  $Xe^+[5p^5(^2P_j)]$ . Для вычисления матричных элементов свободно-свободных переходов внешнего электрона системы  $RgXe^+ + e$  нами использовалась модель, предложенная в работах [60,61] и примененная в [49-51] для теоретического анализа процессов диссоциативной и трехчастичной электрон-ионной рекомбинации. В этой модели электронная оболочка иона сводится к одно-электронной вакансии („дырке“), взаимодействующей с внешним (свободным или связанным) электроном. Основной вклад в константу связи,  $\Gamma_{\epsilon \rightarrow \epsilon'}$ , вносит при этом квадрупольная и короткодействующая части этого взаимодействия.

Другая ситуация имеет место при рассмотрении процесса ДВ гомоядерных ионов  $Ar_2^+$  и  $Xe_2^+$ . Ввиду высоких значений энергии диссоциации  $D_0$  таких ионов нами был значительно расширен исследуемый диапазон электронных температур:  $T_e \sim 300-80000$  К, так что необходимым становится учет переходов с участием термов, расщепленных спин-орбитальным взаимодействием ( $\Delta_{j=3/2, j'=1/2} = 1.3$  и  $0.18$  eV для  $Xe^+$  и  $Ar^+$ ). Поэтому в расчетах процессов (1) и (2) диссоциации ионов  $Ar_2^+$  и  $Xe_2^+$  учитывались два типа дипольно-разрешенных переходов  $I(1/2u) \rightarrow I(1/2g)$  и  $I(1/2u) \rightarrow \Pi(1/2g)$  (рис. 2, b).

Принято во внимание, что при описании связанно-связанных, связанно-свободных и свободно-свободных переходов внешнего электрона в гомоядерных системах  $Rg_2^+ + e$  можно ограничиться дипольным приближением [47,65-67] для потенциала взаимодействия электрона с ионом  $Rg_2^+$  (подробнее см. [59]). Формулы, необходимые для расчета сечений и констант скоростей процесса ДР (1), приведены в работе [50]. Они были использованы здесь для вычисления параметра неадиабатической связи  $\Gamma_{\epsilon \rightarrow \epsilon'}$  в процессе ДВ в комбинации с формулой (32). Данные по электронным термам ионов  $Ar_2^+$  и  $Xe_2^+$  и матричным элементам разрешенных переходов между ними брались из работ [62,63,68,69].

### 5.1. Температурные зависимости констант скоростей диссоциативного возбуждения ионов $ArXe^+$ и $HeXe^+$

На рис. 3 приведены результаты расчетов констант скоростей  $\alpha^{de}(T_e, T)$  процесса ДВ ионов  $ArXe^+$  и  $HeXe^+$  в зависимости от температуры электронов,  $T_e$ . В случае умеренносвязанных ионов,  $ArXe^+$ , с энергией диссоциации  $D_0 = 171$  eV температура ионной компоненты плазмы выбиралась равной  $T = 300, 600, 900$  и  $2000$  К, а температура электронов варьировалась в диапазоне  $500-20000$  К. Из рис. 3, a следует, что при рассматриваемых значениях  $T$  характер зависимостей констант скоростей  $\alpha^{de}$  от температуры электронов сильно зависит от температуры газа (особенно при невысоких значениях  $T_e \lesssim 5000$  К). Кривая 1 показывает, что при  $T = 300$  К константы скорости  $\alpha^{de}$  малы в области низких электронных температур, т.е. эффективность процесса ДВ невысокая. Увеличение газовой температуры приводит к росту константы скорости  $\alpha^{de}$  при низких электрон-



ных температурах  $T_e$ , слева от максимума (кривые 2, 3 и 4). По мере роста температуры электронов константы скорости  $\alpha^{\text{de}}$  сначала достигают максимума, а затем при дальнейшем увеличении  $T_e$  в области  $T_e \gtrsim 5000$  К кривые 1, 2, 3 и 4 на рис. 3, *a* постепенно сливаются (т.е. температура газа  $T$  при этом оказывает слабое влияние на характер представленных зависимостей константы скорости  $\alpha^{\text{de}}$  от величины  $T_e$ ).

В целом вид кривых на рис. 3 отражает пороговый характер процесса ДВ (2). Он проявляется тем ярче, чем ниже температура газа, когда определяющий вклад в сечения и константы скорости вносят невысокие колебательно-вращательные уровни. Причина наиболее ярко выраженного порогового характера поведения величины  $\alpha^{\text{de}}$  при низких температурах  $T$  ионной компоненты плазмы состоит в том, что при этом характерные межъядерные расстояния  $R$  в умеренносвязанных ионах,  $\text{ArXe}^+$ , в ходе их колебательно-вращательного движения близки к равновесным,  $R_e$ . Поэтому в процессе ДВ доминируют переходы с достаточно высокой передачей энергии  $\Delta\epsilon$ , определяемой величиной расщепления верхнего и нижнего электронных термов  $\Delta U_{fi}(R_e)$  в точке  $R_e$ . Поэтому положение максимума  $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$  по шкале  $T_e$  может быть оценено из условия  $k_B T_e \sim \Delta U_{fi}(R_e)$ . Переходы с низкими начальными энергиями электронов происходят при больших межъядерных расстояниях  $R_\omega \gg R_e$ , и их вероятность оказывается экспоненциально малой. Это объясняет низкую эффективность процесса ДВ при  $T_e \lesssim 1000$  К. Из рис. 3, *a* видно также, что по мере повышения газовой температуры  $T$  пороговый характер процесса начинает ослабевать, и эффективность механизма ДВ при низких  $T_e$  растет. Такое поведение обусловлено тем, что при повышении газовой температуры характерные межъядерные расстояния  $R$  в умеренносвязанных ионах возрастают. Поэтому увеличивается и вероятность переходов, происходящих с малой передачей энергии  $\Delta\epsilon$  при больших  $R \geq R_e$ . Следует также пояснить тот факт, что при высоких электронных температурах  $T_e$  эффективность ДВ почти не зависит от  $T$  (рис. 3, *a*). Дело в том, что при чрезвычайно больших начальных энергиях электронов  $\epsilon$  допустимы переходы с любой передачей энергии  $\hbar\omega = \Delta U_{fi}(R_\omega)$  при любых межъядерных расстояниях  $R_\omega$ , так что конкретные значения функции распределения молекулярных ионов  $\text{VA}^+$  по межъядерным расстояниям  $R$  перестают быть принципиальными.

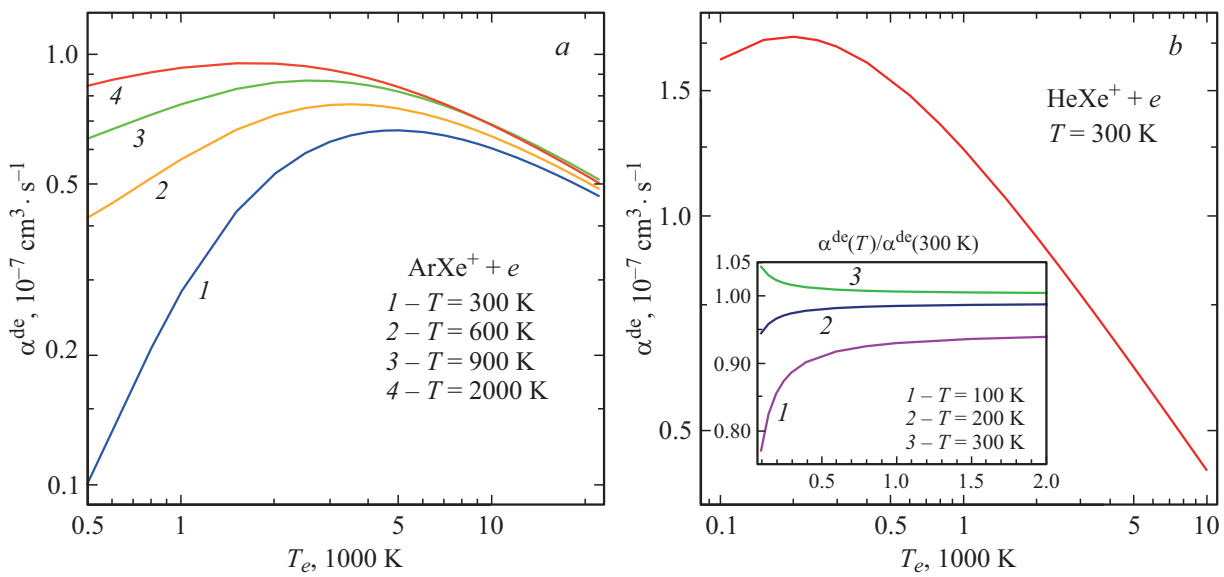
Процесс диссоциативного возбуждения слабосвязанного иона  $\text{HeXe}^+$  имеет ряд отличий от рассмотренного выше случая умеренносвязанного иона  $\text{ArXe}^+$ . Это обусловлено тем, что энергия диссоциации  $D_0$  иона  $\text{HeXe}^+$  более чем на порядок величины ниже, чем в случае  $\text{ArXe}^+$ , и составляет 13 meV, т.е. меньше тепловой энергии  $k_B T = 26$  meV при  $T = 300$  К. По этой причине пороговый характер диссоциативного возбуждения, проявляющийся в росте константы скорости  $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$  с увеличением  $T_e$  (область слева от максимума на рис. 3, *a*), наблюдается лишь в области низких значений температуры  $T_e$  и  $T$ . Соответственно на рис. 3, *b*, где

приведена зависимость  $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$  от  $T_e$  при  $T = 300$  К, мы наблюдаем область максимума лишь в окрестности  $T_e \approx 200$  К. При более высоких  $T_e$  константа скорости убывает. На вставке к рис. 3, *b* показано, что величина  $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$  достаточно слабо зависит от температуры газа  $T$ . Этот факт обусловлен тем, что слабосвязанные системы (такие, как  $\text{HeXe}^+$ ) в рассматриваемом диапазоне  $T$  не являются локализованными вблизи положения равновесия  $R_e$ . Поэтому не наблюдаются связанные с этим эффекты, описанные выше.

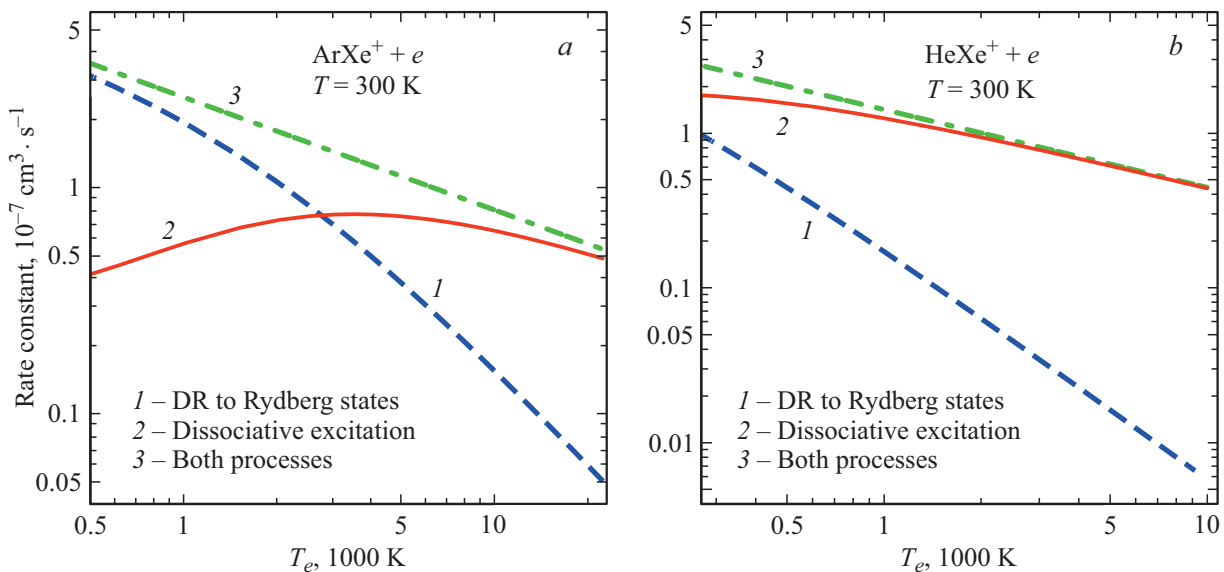
## 5.2. Сравнительный анализ вкладов диссоциативного возбуждения и диссоциативной рекомбинации в разрушение молекулярных ионов

Наряду с диссоциативным возбуждением (2) резонансное разрушение молекулярного иона при взаимодействии с электронами может вызываться процессом диссоциативной рекомбинации (1). Рассмотрим, как зависят вклады указанных процессов в полную константу скорости резонансной диссоциации  $\alpha^{\text{tot}}(T_e, T)$  от характеристик молекулярного иона  $\text{VA}^+$  и параметров плазмы. На рис. 4 для ионов  $\text{ArXe}^+$  и  $\text{HeXe}^+$  приведены результаты расчетов константы скорости ДВ,  $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$ , и суммарного вклада,  $\alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}(T_e, T)$ , процесса ДР, приводящего к образованию атомов в ридберговских состояниях  $\text{Xe}(n)$ . Для рассматриваемых в работе ионов  $\text{RgXe}^+$  величина  $\alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}(T_e, T)$  вычислялась как сумма  $\alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}(T_e, T) = \sum_{n \geq 8} \alpha_n^{\text{dr}}(T_e, T)$ , где  $\alpha_n^{\text{dr}}(T_e, T)$  — константа скорости диссоциативного захвата на отдельный ридберговский уровень  $n$ , рассчитанная по формулам (30) и (31) из [50].

Как видно из рис. 4, *a*, в случае умеренносвязанных ионов  $\text{ArXe}^+$  при низких температурах  $T_e$  эффективность резонансного процесса ДВ ввиду его явно выраженного порогового характера оказывается крайне низкой. По этой причине при данных условиях доминирующий вклад в разрушение ионов вносит диссоциативное заселение ридберговских уровней. Процесс (2), в свою очередь, начинает играть определяющую роль при электронных температурах  $T_e \gtrsim 3000$  К. Как следует из рис. 3, по мере роста газовой температуры  $T$  растет абсолютная и относительная эффективность процесса ДВ. Однако в случае умеренносвязанных ионов даже при  $T = 2000$  К данный процесс оказывается существенно слабее диссоциативной рекомбинации в области низких  $T_e \lesssim 1000$  К. Из рис. 4, *b* видно, что в случае слабосвязанных ионов  $\text{HeXe}^+$  наблюдается совершенно иное соотношение между эффективностями процессов ДВ и ДР: канал диссоциативного возбуждения вносит доминирующий вклад в разрушение таких ионов во всем рассматриваемом диапазоне температур  $T_e$ . Причина этого состоит в том, что при этом у процесса (2) гораздо меньше характерная передача энергии по сравнению с ДР. Согласно нашим вычислениям, в случае слабосвязанных ионов процесс ДР играет сколь бы то



**Рис. 3.** Константы скорости,  $\alpha^{de}(T_e, T)$ , диссоциативного возбуждения ионов  $\text{ArXe}^+$  (a) и  $\text{HeXe}^+$  (b) электронным ударом в зависимости от температуры электронов  $T_e$  при различных температурах  $T$  ионной компоненты плазмы. На вставке к рис. (b) приведено отношение  $\alpha^{de}(T_e, T)/\alpha^{de}(T_e, T = 300 \text{ K})$  при  $T = 100, 200$  и  $300 \text{ K}$  (кривые 1, 2 и 3 соответственно).



**Рис. 4.** Константы скорости диссоциативной рекомбинации на ридберговские уровни  $\alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}(T_e, T)$  (кривые 1) и диссоциативного возбуждения  $\alpha^{de}(T_e, T)$  (кривые 2), а также полные константы скорости диссоциации  $\alpha^{\text{tot}}(T_e, T) = \alpha^{de}(T_e, T) + \alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}(T_e, T)$  (кривые 3) ионов  $\text{ArXe}^+$  (a) и  $\text{HeXe}^+$  (b) при газовой температуре  $T = 300 \text{ K}$ .

ни было существенную роль лишь при крайне низких температурах  $T \sim T_e \sim 100 \text{ K}$ .

Для определения полного вклада процессов диссоциативного возбуждения и диссоциативного захвата электрона на ридберговские уровни в разрушение молекулярных ионов нами были проведены расчеты суммарной константы скорости  $\alpha^{\text{tot}} = \alpha^{de} + \alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}$  в рамках построенной теории. Из рис. 4 видно, что величина  $\alpha^{\text{tot}}$  имеет простую степенную зависимость  $T_e^{-1/2}$  во всем рассмотренном диапазоне изменения  $T_e$ . Зависимость

$T_e^{-1/2 \pm \delta}$  является традиционной и многократно наблюдалась в экспериментах при измерении коэффициентов ДР молекулярных ионов инертных газов при относительно невысокой температуре. При дальнейшем увеличении  $T_e$  происходит более быстрый спад коэффициента рекомбинации [17,32]. Процесс диссоциативного возбуждения компенсирует этот быстрый спад при высоких температурах, что и приводит к зависимости  $\alpha^{\text{tot}} \sim T_e^{-1/2}$  для полной константы скорости диссоциации в широком диапазоне температур электронов.

Наряду с системами  $e + \text{RgXe}^+$  нами был проведен сравнительный анализ эффективности процессов (1) и (2) при столкновениях электронов с гомоядерными ионами  $\text{Ar}_2^+$  и  $\text{Xe}_2^+$ , изучаемыми в экспериментах [44,45]. Для корректного описания процессов диссоциации таких ионов требуется принять во внимание два обстоятельства. Во-первых, для ионов  $\text{Ar}_2^+$  и  $\text{Xe}_2^+$  в исследуемом диапазоне температур необходимо учитывать два типа резонансных неадиабатических переходов:  $\text{I}(1/2u) \rightarrow \text{I}(1/2g)$  и  $\text{I}(1/2u) \rightarrow \text{II}(1/2g)$  (рис. 2). Во-вторых, эти ионы обладают большими значениями энергии диссоциации  $D_0$ , что требует учета захвата на низколежащие, неридберговские уровни при расчете константы скорости ДР. Для описания захвата электрона на низколежащие уровни нами была введена эффективная константа скорости  $\alpha_{\text{low}}^{\text{dr}}(T_e, T)$  [см<sup>3</sup>с<sup>-1</sup>], определяемая оценочно с помощью подхода [50] как захват на эффективный низколежащий уровень, для которого эффективное главное квантовое число и автоионизационная ширина были получены с помощью интерполяции методом наименьших квадратов экспериментальных данных из [45,70] для  $\text{Xe}_2^+$  и из [71] для  $\text{Ar}_2^+$  в области низких температур  $T_e \leq 5000$  К. Полная константа скорости диссоциативной рекомбинации  $\alpha^{\text{dr}} = \alpha_{\text{low}}^{\text{dr}} + \alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}$  далее рассчитывалась с учетом захвата как на низколежащие, так и на ридберговские уровни.

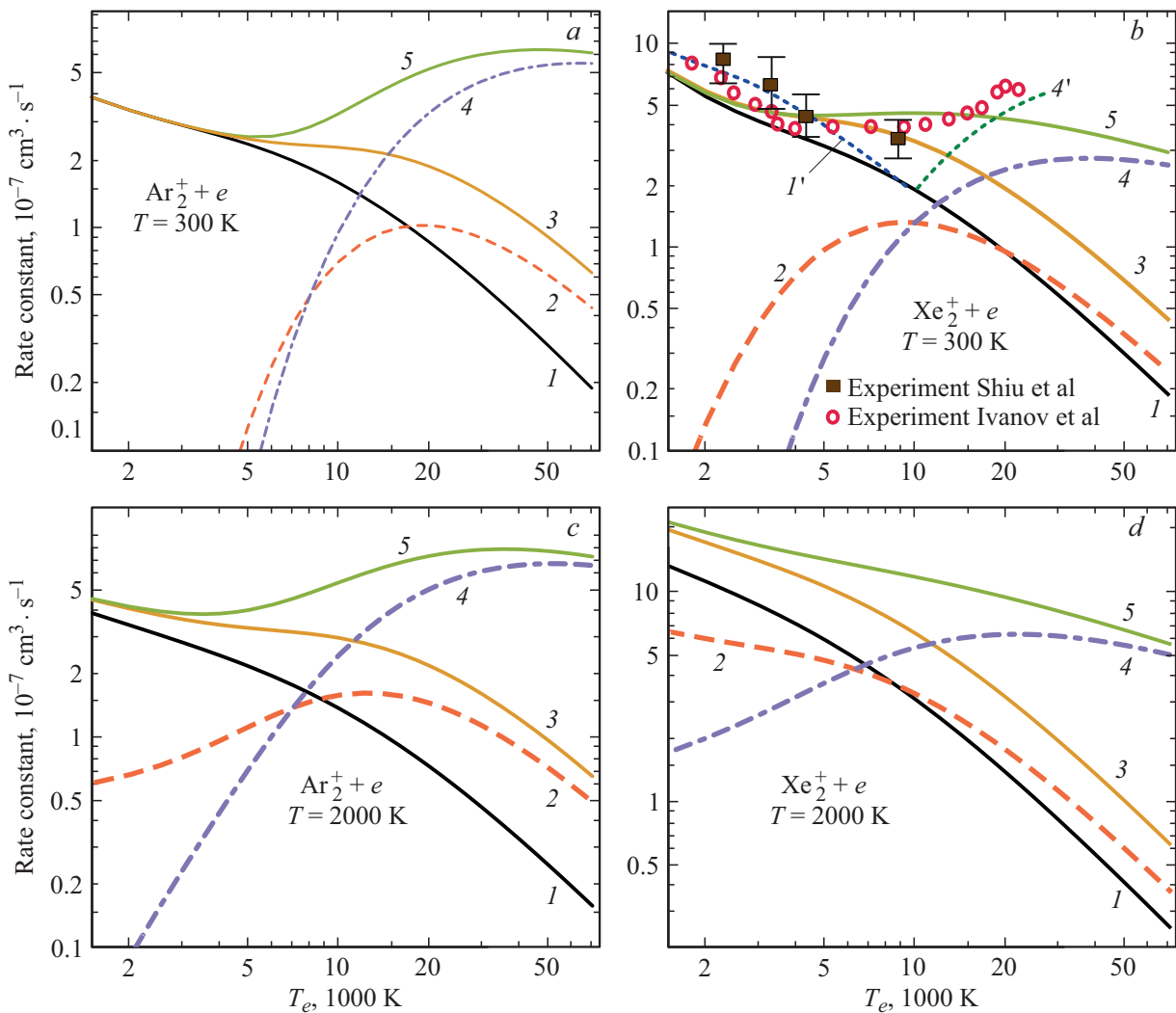
На рис. 5 приведены результаты расчетов констант скоростей диссоциативного возбуждения  $\alpha^{\text{de}}$  и диссоциативной рекомбинации  $\alpha^{\text{dr}} = \alpha_{\text{low}}^{\text{dr}} + \alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}$  с учетом захвата на низколежащие и ридберговские уровни, а также суммарной константы скорости  $\alpha^{\text{de}} + \alpha^{\text{dr}}$  разрушения ионов  $\text{Ar}_2^+$  (рис. 5, *a, c*) и  $\text{Xe}_2^+$  (рис. 5, *c, d*) электронным ударом при газовых температурах  $T = 300$  К (рис. 5, *a, b*) и  $2000$  К (рис. 5, *c, d*). Как видно из рисунка, процесс диссоциативного захвата на низкие уровни не имеет порогового характера, так как соответствующие неадиабатические переходы происходят вблизи положений равновесия молекулярных ионов  $\text{Ar}_2^+$  и  $\text{Xe}_2^+$ . Вследствие этого при  $T = 300$  К этот процесс многократно преобладает в области низких электронных температур  $T_e \lesssim 5000$  К. По мере повышения  $T_e$  растет роль диссоциативного захвата на ридберговские уровни  $n \gg 1$ . Как и  $\alpha^{\text{de}}$ , величина  $\alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}$  имеет явно выраженный пороговый характер, обусловленный тем, что неадиабатические переходы, приводящие к заселению ридберговских состояний, происходят вдали от положения равновесия  $R_e$  сильносвязанных молекулярных ионов. При дальнейшем повышении электронной температуры  $T_e \gtrsim 10000$  К начинает играть существенную роль резонансное диссоциативное возбуждение. В области  $T_e \gtrsim 40000$  К этот процесс становится доминирующим каналом разрушения иона. При этом из рисунка следует, что во всех случаях влияние процесса ДВ начинает проявляться при гораздо больших значениях  $T_e$ , чем диссоциативный захват на ридберговские уровни.

Представленные на рис. 5 результаты показывают, что при повышении газовой температуры  $T$  до  $2000$  К пороговая зависимость величин  $\alpha^{\text{de}}$  и  $\alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}$  от  $T_e$  начинает ослабевать, и эффективность данных каналов в области низких  $T_e$  существенно возрастает. Как и в случае гетероядерных ионов, увеличение  $T$  приводит к разбросу характерных межъядерных расстояний  $R$  ионов  $\text{Rg}_2^+$ , так что возрастает вероятность неадиабатических переходов при больших межъядерных расстояниях  $R \gg R_e$ . Так, из рис. 5, *d* видно, что при  $T = 2000$  К в случае ионов  $\text{Xe}_2^+$  величина  $\alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}$  вносит существенный вклад в диссоциацию даже при  $T_e \lesssim 2000$  К, а величина  $\alpha^{\text{de}}$  — уже при  $T_e \sim 5000$  К.

Из рис. 5, *a* и 5, *c* следует, что в случае ионов  $\text{Ar}_2^+$  процессы (1) и (2) становятся одинаково эффективными при  $T_e \approx 10000$  К, а по мере роста температур  $T$  и  $T_e$  диссоциативное возбуждение начинает преобладать. Эти результаты находятся в полном соответствии с оценочными расчетами, осуществленными в работе [46], и указывают на важность учета канала (2) при составлении кинетических моделей аргоновой плазмы, представляющих интерес для разработки лазеров с оптической накачкой на инертных газах (OPRGL) [10–13].

Для подтверждения эффективности предложенного подхода к описанию процессов (1) и (2) было проведено сравнение результатов наших расчетов констант скоростей с экспериментальными данными. Для этого на рис. 5, *b* для ионов  $\text{Xe}_2^+$  приведены данные по константе скорости,  $\alpha^{\text{dr}}$ , ДР из работы [70] и данные по полным константам скорости диссоциации  $\alpha^{\text{tot}}$  при  $T = 300$  К из работы [45]. Из рисунка следует, что нами достигнуто хорошее количественное соответствие с экспериментальными данными. Полученные нами результаты указывают на возможность трактовки данных по константам скорости  $\alpha^{\text{tot}}$ , существенно отличающейся от предложенной в статье [45]. В работе [45] величина  $\alpha^{\text{tot}}(T_e, T)$  описывается как сумма константы скорости  $\alpha^{\text{dr}}$  ДР на эффективный низколежащий уровень и константы скорости диссоциативного возбуждения  $\alpha^{\text{de}}$ . На рис. 5, *b* пунктиром приведены графики для этих величин, полученные на оценочном уровне в указанной работе (кривые *1'* и *4'* соответственно). Согласно [45], плато, наблюдаемое для величины  $\alpha^{\text{tot}}$  (круги на рис. 5, *b*) в области  $T_e \sim 5000$ – $10000$  К, связано с возрастающей ролью процесса ДВ в рассматриваемом диапазоне температур. Однако подобное же плато также наблюдается и для константы скорости  $\alpha^{\text{dr}}$  в работе [70] (квадраты на рис. 5, *b*). Сравнение кривой *1'* с квадратными маркерами на рис. 5, *b* в области  $T_e \approx 10000$  К показывает, что учета одного лишь канала ДР на низкие уровни недостаточно для описания данного плато.

В рамках нашего подхода учитываются не только каналы ДВ (кривая *4*) и ДР с заселением низких уровней (кривая *1*), но также и канал диссоциативного заселения ридберговских уровней (кривая *2*). Включение данного канала позволило добиться более точного количествен-

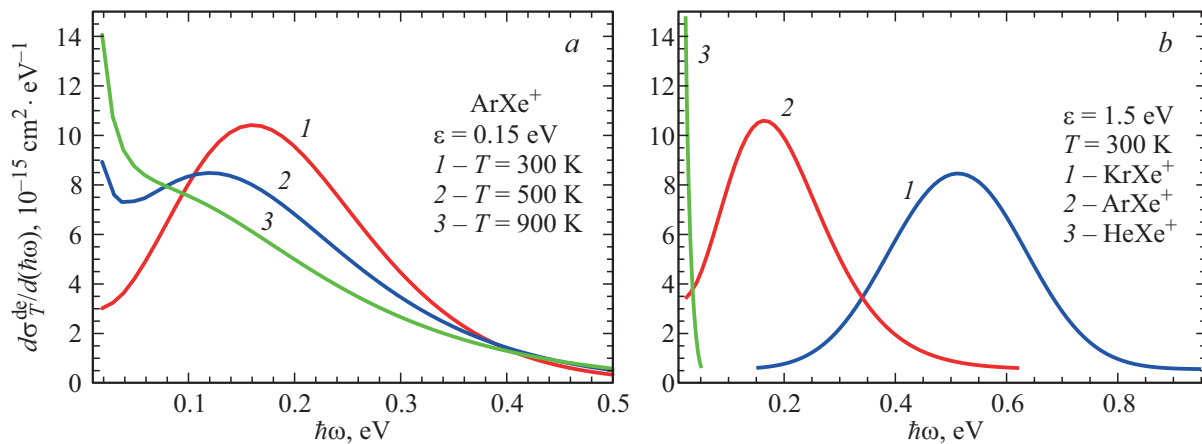


**Рис. 5.** Константы скорости диссоциативной рекомбинации ионов  $\text{Ar}_2^+$  (a, c) и  $\text{Xe}_2^+$  (b, d) на низкие атомные уровни  $\alpha_{\text{low}}^{\text{dr}}(T_e, T)$  (кривые 1), на ридберговские уровни  $\alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}(T_e, T)$  (кривые 2) и на все уровни  $\alpha^{\text{dr}}(T_e, T)$  (кривые 3), а также константы скорости диссоциативного возбуждения  $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$  (кривые 4) и полные константы скорости диссоциации  $\alpha^{\text{tot}}(T_e, T) = \alpha^{\text{de}}(T_e, T) + \alpha^{\text{dr}}(T_e, T)$  (кривые 5) при газовых температурах  $T = 300 \text{ K}$  (a, b) и  $2000 \text{ K}$  (c, d). Круги — экспериментальные данные из работы [45], квадраты — эксперимент [70]. Пунктирные линии 1' и 4' — полуэмпирические оценки [45] величин  $\alpha_{\text{low}}^{\text{dr}}(T_e, T)$  и  $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$  соответственно.

ного и качественного соответствия расчетов коэффициента ДР  $\alpha^{\text{dr}}$  (кривая 3) с экспериментальными результатами из работы [70] (квадраты) при  $T_e \approx 10000 \text{ K}$ , а также описать выход кривой  $\alpha^{\text{dr}}$  на плато в области  $T_e \sim 5000\text{--}10000 \text{ K}$ . Рассчитанная нами константа скорости  $\alpha^{\text{de}}$  оказывается меньше оценочной величины из статьи [45]. Однако за счет учета дополнительного канала ДР на ридберговские уровни полные константы скорости диссоциации ионов  $\text{Xe}_2^+$   $\alpha^{\text{tot}}$  (кривая 5 и круги на рис. 5, b) оказываются почти одинаковыми во всем рассматриваемом диапазоне  $T_e$ . Таким образом, разработанный в данной работе подход позволил предложить альтернативное объяснение данных эксперимента, позволяющее добиться существенно лучшего согласия результатов.

### 5.3. Изменение энергии электрона в процессе диссоциации молекулярного иона

Для ряда задач, связанных с изучением кинетики релаксации плазмы, наряду с интегральными по конечной скорости электрона константами скорости диссоциации, представленными выше, представляют интерес распределения величин константы скорости по энергии электрона в конечных каналах реакций (1) и (2). В этом разделе приведены результаты расчетов соответствующих дифференциальных сечений и констант скоростей диссоциативного возбуждения, а также сечений и констант скоростей диссоциативной рекомбинации, приводящей к заселению ридберговских уровней с конкретным значением  $n$ .



**Рис. 6.** Дифференциальное сечение  $d\sigma_T^{\text{de}}(\varepsilon, \hbar\omega)/d(\hbar\omega)$  резонансного диссоциативного возбуждения гетероядерных ионов инертных газов электронами с начальной энергией  $\varepsilon = 1.5 \text{ eV}$  в интервале изменения энергии  $\hbar(\omega, \omega + d\omega)$ . (a) расчет для ионов  $\text{ArXe}^+$  при газовых температурах  $T = 300 \text{ K}$  (кривая 1),  $500 \text{ K}$  (кривая 2) и  $900 \text{ K}$  (кривая 3). (b) расчет для ионов  $\text{KrXe}^+$  (кривая 1),  $\text{ArXe}^+$  (кривая 2) и  $\text{HeXe}^+$  (кривая 3) при  $T = 300 \text{ K}$ .

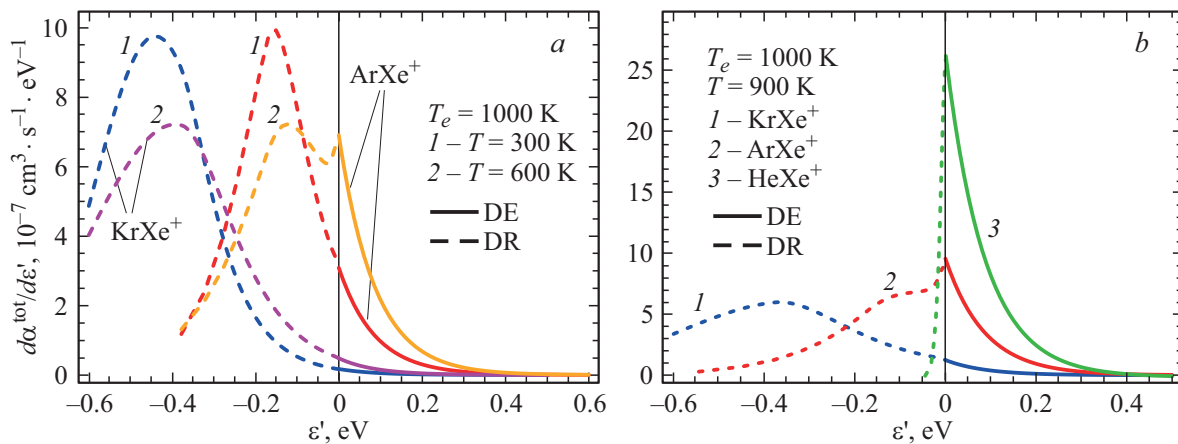
На рис. 6 приведены графики дифференциального сечения,  $d\sigma_T^{\text{de}}(\varepsilon, \hbar\omega)/d(\hbar\omega)$ , процесса ДВ иона  $\text{VA}^+$  электронным ударом, сопровождающегося изменением энергии электрона  $\Delta\varepsilon = \hbar\omega$  в интервале  $\hbar(\omega, \omega + d\omega)$  (7). При этом полное сечение (24) процесса (2) дается выражением  $\sigma_T^{\text{de}}(\varepsilon) = \int [d\sigma_T^{\text{de}}(\varepsilon, \hbar\omega)/d(\hbar\omega)] d(\hbar\omega)$ . Расчеты были проведены при начальной энергии электронов  $\varepsilon = 1.5 \text{ eV}$  для системы  $\text{ArXe}^+ + e$  для различных значений газовой температуры  $T$  (рис. 6, a), а также для ионов  $\text{KrXe}^+$ ,  $\text{ArXe}^+$  и  $\text{HeXe}^+$  при  $T = 300 \text{ K}$  (рис. 6, b).

Из рис. 6 видно, что в случае умеренносвязанных ионов ( $\text{ArXe}^+$  и  $\text{KrXe}^+$ ) при низких температурах ( $T = 300 \text{ K}$ ) кривые дифференциальных сечений  $d\sigma_T^{\text{de}}(\varepsilon, \hbar\omega)/d(\hbar\omega)$  имеют колоколообразную форму, что дополнительно подчеркивает пороговый характер процесса диссоциации ионов электронным ударом. Положение максимума сечений приблизительно равно  $\Delta U_{fi}(R_e)$ . Это означает, что характерное межъядерное расстояние в умеренносвязанных ионах при малых  $T$  близко к равновесному  $R_e$ . При увеличении  $T$  или уменьшении энергии диссоциации  $D_0$  возрастает вероятность заселения высоких колебательно-вращательных состояний, что позволяет реакции протекать при больших межъядерных расстояниях  $R_\omega \gg R_e$  с малой передачей энергии  $\hbar\omega = \Delta U_{fi}(R_\omega)$  (рис. 1). При достаточно высоких  $T$  или небольших  $D_0$  процесс становится квазиупругим с острым пиком вблизи  $\hbar\omega = 0$ . Это можно наблюдать на рис. 6, a для  $\text{ArXe}^+$  при  $T = 900 \text{ K}$  и на рис. 6, b для  $\text{HeXe}^+$ . В промежуточном случае  $T = 500 \text{ K}$  (кривая 2 на рис. 6, a) эффективности квазиупругих и существенно неупругих каналов реакции (2) сопоставимы, и у графика  $d\sigma_T^{\text{de}}(\varepsilon, \hbar\omega)/d(\hbar\omega)$  наблюдается плато за счет наложения двух максимумов.

В слабосвязанных ионах  $\text{HeXe}^+$  даже при комнатных газовых температурах доминируют квазиупругие переходы, причем характерные значения дифференциальных

сечений существенно превышают величины, полученные при расчетах для ионов  $\text{ArXe}^+$  и  $\text{KrXe}^+$ . Это объясняет принципиально различное поведение зависимостей констант скорости ДВ от газовой температуры, приведенных на рис. 3. Проведенный нами анализ результатов расчетов указывает на то, что в случае умеренносвязанных ионов (таких, как  $\text{ArXe}^+$  и  $\text{KrXe}^+$ ) диссоциация электронным ударом при низких температурах  $T$  в основном сопровождается переходами  $|\varepsilon\rangle \rightarrow |\varepsilon'\rangle$  с начальной энергией  $\varepsilon \approx \Delta U_{fi}(R_e)$  и конечной  $\varepsilon' \approx 0$ . При повышении температуры  $T$  возрастает вероятность переходов при больших межъядерных расстояниях, и характерные величины изменения энергии электрона  $\hbar\omega$  падают (см. рис. 6, a). Наконец, при очень высоких газовых температурах  $k_B T \gtrsim D_0$  или в случае слабосвязанных ионов основной вклад дают столкновения, при которых начальные и конечные энергии электронов крайне малы,  $\varepsilon, \varepsilon' \lesssim 0.02 \text{ eV}$ .

На рис. 7 представлена зависимость дифференциальной константы скорости  $d\alpha^{\text{tot}}(T_e, T, \varepsilon')/d\varepsilon'$  от конечной энергии электрона  $\varepsilon'$  для случая ионов  $\text{KrXe}^+$ ,  $\text{ArXe}^+$  и  $\text{HeXe}^+$ . Расчеты были проведены по формуле (38) при электронной температуре  $T_e = 1000 \text{ K}$  и газовых температурах  $T = 300, 600$  и  $900 \text{ K}$ . Как видно из рис. 7, a, в случае умеренносвязанных ионов  $\text{KrXe}^+$  и  $\text{ArXe}^+$  при комнатной газовой температуре  $T = 300 \text{ K}$  доминирует процесс (1), приводящий к заселению ограниченной области ридберговских состояний с низкими энергиями  $\varepsilon' < 0$ . Эффективность же канала (2) экспоненциально мала. По мере роста газовой температуры область эффективно заселяемых  $\varepsilon'$ -состояний смещается в сторону положительных энергий. В случае иона  $\text{ArXe}^+$  возникает локальный максимум величины  $d\alpha^{\text{tot}}(T_e, T, \varepsilon')/d\varepsilon'$  в области  $\varepsilon' = 0$ . Это свидетельствует о возрастании роли процессов диссоциативного возбуждения электронным ударом и диссоциативного захвата на высоково-



**Рис. 7.** Дифференциальная константа скорости  $d\alpha^{\text{tot}}(T_e, T, \epsilon')/d\epsilon'$  разрушения гетероядерных ионов инертных газов в результате ДВ ( $\epsilon' \geq 0$ ) и ДР ( $\epsilon' < 0$ ) в зависимости от конечной энергии электрона  $\epsilon'$ . (a) – диссоциация ионов  $\text{KrXe}^+$  и  $\text{ArXe}^+$  при газовых температурах  $T = 300$  К (кривая 1) и  $600$  К (кривая 2) и  $T_e = 1000$  К. (b) – то же для ионов  $\text{KrXe}^+$  (кривая 1),  $\text{ArXe}^+$  (кривая 2) и  $\text{HeXe}^+$  (кривая 3) при  $T = 900$  К и  $T_e = 1000$  К.

бужденные уровни атома ксенона с  $n \gg 1$ . Представленные результаты демонстрируют конкуренцию двух ключевых факторов, определяющих характер резонансных процессов столкновения электронов с молекулярными ионами, а именно: степень локализации ионов вблизи положения равновесия  $R_e$  и предпочтительность квазиупругих переходов. При низких  $T$  ионы с умеренными значениями  $D_0$  имеют характерные межъядерные расстояния  $R_e$ , и доминирующим является первый фактор. Из рис. 7, b видно, что в случае слабосвязанных ионов  $\text{HeXe}^+$  имеется один ярко выраженный максимум  $\epsilon' = 0$ , а значение в максимуме оказывается гораздо выше, чем в максимумах для ионов  $\text{ArXe}^+$  и  $\text{KrXe}^+$ , хотя полные константы скорости разрушения ионов  $\alpha(T_e, T)$  (площадь под кривыми) оказываются для всех случаев примерно одинаковыми. Этот факт указывает на исключительную эффективность низкоэнергетических переходов  $\epsilon \rightarrow \epsilon'$  в слабосвязанных системах. Соответственно следует ожидать, что в системах с малым  $D_0$  и при высоких  $T$  динамика процесса будет целиком определяться вторым фактором. В промежуточном случае (см., например, кривую 2 на рис. 7, b) влияние указанных факторов оказывается сравнимым, что может приводить к существенному усложнению описания поуровневой кинетики релаксации плазмы.

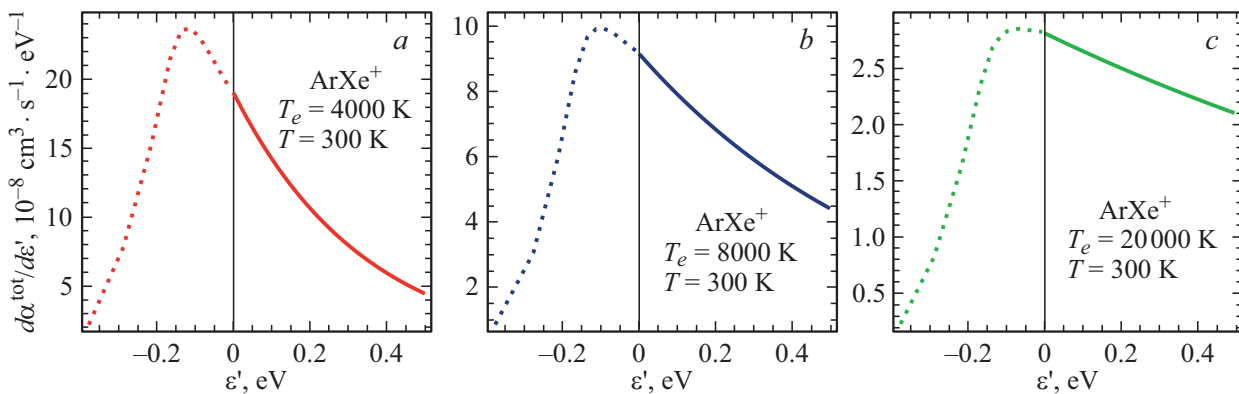
На рис. 8 показано, как для иона  $\text{ArXe}^+$  при заданной газовой температуре  $T = 300$  К изменяется зависимость величины  $d\alpha^{\text{tot}}(T_e, T, \epsilon')/d\epsilon'$  от энергии  $\epsilon'$  электрона в конечном канале реакции при увеличении электронной температуры от значения  $T_e = 4000$  К до  $T_e = 20000$  К. Рост температуры  $T_e$  смещает положение максимума в сторону более высоких энергий  $\epsilon'$ . Такое поведение легко объяснимо: при низких  $T$  преобладают переходы при межъядерных расстояниях  $R \approx R_e$  с передачей энергии  $\Delta U_{fi}(R_e)$ . Однако ввиду того, что характерные значения начальной энергии электронов оказываются

смещены в сторону высоких значений  $k_B T_e$ , конечные значения  $\epsilon'$  также оказываются смещены в сторону высоких энергий. Это приводит к повышению относительной роли процессов диссоциации молекулярных ионов, сопровождающихся переходами в состояния с  $\epsilon' > 0$ . Из этого следует, что процесс (2) начинает вносить определяющий интегральный вклад в разрушение молекулярных ионов при условии  $k_B T_e \gtrsim \Delta U_{fi}(R_e)$ . Такое поведение продемонстрировано на рис. 8, b и 8, c.

## 6. Заключение

На основе квантового варианта теории неадиабатических переходов между электронными термами системы  $\text{VA}^+ + e$  в приближении квазиконтинуума для колебательно-вращательных уровней получены полуаналитические формулы для сечений (24) и констант скоростей (30) процесса прямого диссоциативного возбуждения молекулярного иона электронным ударом. В комбинации с выведенными недавно [49] выражениями для констант скоростей захвата электрона ионом в процессе диссоциативной рекомбинации эти формулы позволили получить замкнутое выражение (33) для полной константы скорости,  $\alpha^{\text{tot}} = \alpha^{\text{dr}} + \alpha^{\text{de}}$ , процессов (1) и (2). Развита теория применима в условиях сильного теплового возбуждения всех  $vJ$ -уровней молекулярного иона и дает надежные результаты при  $k_B T \gtrsim \hbar\omega_e$  ( $\hbar\omega_e$  – нижний колебательный квант иона  $\text{VA}^+$ ).

В рамках разработанного подхода проведены численные расчеты и выполнен анализ поведения констант скоростей процесса (2) диссоциативного возбуждения гетероядерных,  $\text{ArXe}^+$  и  $\text{HeXe}^+$ , и гомоядерных,  $\text{Ar}_2^+$  и  $\text{Xe}_2^+$ , ионов в зависимости от температуры электронов,  $T_e$ . Газовая температура  $T$  варьировалась в диапазоне от 100 до 2000 К. Установлено, что характер исследованных температурных зависимостей сильно зависит от величини



**Рис. 8.** Дифференциальная константа скорости  $d\alpha^{\text{tot}}(T_e, T, \varepsilon')/d\varepsilon'$  разрушения ионов  $\text{ArXe}^+$  электронным ударом при  $T = 300$  К и  $T_e = 4000$  К (a),  $8000$  К (b) и  $20000$  К (c).

ны энергии диссоциации иона  $D_0$ . Для указанных ионов было проведено сравнение эффективностей процессов диссоциативной рекомбинации (1) и диссоциативного возбуждения (2). Установлено, что в случае слабосвязанных ионов процесс (2) является доминирующим во всем рассматриваемом диапазоне температур. В случае умеренносвязанных и сильносвязанных ионов влияние ДВ оказывается малым в области низких температур  $T_e \lesssim 1000$  К, но доминирует при высоких  $T_e$  ( $T_e \gtrsim 5000$  К для  $\text{ArXe}^+$  и  $T_e \gtrsim 20000$  К для  $\text{Ar}_2^+$  и  $\text{Xe}_2^+$ ).

Установлено, что в гомоядерных системах со значительной величиной энергии диссоциации  $D_0$  четко выделяются три различных канала разрушения молекулярных ионов электронным ударом: (i) ДР с заселением низких состояний, (ii) ДР с заселением ридберговских уровней и (iii) ДВ. В области низких электронных температур доминирует первый канал, так как соответствующие резонансные переходы происходят вблизи положения равновесия  $R_e$  ионов  $\text{Rg}_2^+$ . При повышении  $T_e \gtrsim 5000$  К начинает проявляться канал диссоциативного захвата электрона на ридберговские уровни, а при дальнейшем росте  $T_e \gtrsim 10000$  К включается механизм диссоциативного возбуждения, который становится доминирующим при  $T_e \gtrsim 40000$  К. Показано, что константа скорости реакции каждого из перечисленных каналов имеет свою зависимость от  $T_e$ , и соответствующие области их доминирования хорошо согласуются с экспериментальными данными. Установлено, что при  $D_0 \approx 1$  eV эффективность процесса (2) становится равной эффективности процесса (1) при  $T_e \approx 10000$ – $15000$  К в полном соответствии с экспериментом и теоретическими оценками, проведенными в работах [44–46]. Роль процесса ДВ усиливается по мере роста газовой и электронной температур, а также в системах с малой энергией диссоциации. Предложенный в работе подход позволил дать альтернативное объяснение экспериментальных данных [45]. При этом количественное согласие результатов эксперимента и теории оказывается существенно лучшим.

В работе были получены формулы и проведены расчеты дифференциальных сечений и констант скоростей резонансных процессов ДВ и ДР, описывающих диссоциацию ионов при условии нахождения энергии электрона в конечном канале в заданном единичном интервале. Анализ полученных результатов позволил дать простое объяснение качественным различиям в поведении констант скорости  $\alpha^{\text{tot}}(T_e, T)$  в слабосвязанных и умеренносвязанных системах. Было установлено, что в случае слабосвязанных ионов процесс резонансной диссоциации носит квазиупругий по энергии электрона характер, а начальные и конечные энергии электронов чрезвычайно малы. При этом доминирующим является процесс (2). В сильносвязанных и умеренносвязанных ионах при низких температурах  $T \lesssim 1000$  К и  $T_e \lesssim 2000$  К преобладают процессы ДР с передачей энергии  $\hbar\omega \approx \Delta U_{fi}(R_e)$  ( $R_e$  — положение равновесия иона  $\text{BA}^+$ ), сопровождающиеся заселением низколежащих ридберговских уровней  $n$  с энергией связи  $|\varepsilon_n| \approx \Delta U_{fi}(R_e)$ . Однако при повышении электронной температуры до значений  $T_e \gtrsim 10000$  К начинают преобладать неупругие переходы с большой передачей энергии  $\hbar\omega \approx \Delta U_{fi}(R_e)$ , происходящие в результате процесса ДВ. Увеличение газовой температуры с  $T \sim 300$  К до  $T \sim 2000$  К существенно увеличивает роль квазиупругих процессов ДВ в области околонулевых энергий электронов  $\varepsilon$ . В промежуточном случае возможно заселение широкого диапазона конечных энергий электрона.

Полученные результаты указывают на необходимость учета процесса прямого диссоциативного возбуждения молекулярных ионов для самосогласованного описания столкновительной и радиационной кинетики низкотемпературной плазмы смесей инертных газов, применяемых в качестве активных сред источников излучения ВУФ диапазона и мощных газовых лазеров. В частности, они требуются для дальнейшего развития кинетических моделей рекомбинационных и релаксационных процессов в такой плазме, предложенных в работах [60,72].

**Финансирование работы**

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ (грант № 19-79-30086).

**Конфликт интересов**

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

**Список литературы**

- [1] *Piel A.* Plasma Physics. 2nd edition, Cham: Springer International Publishing AG, 2017. 463 p. doi 10.1007/978-3-319-63427-2
- [2] *Fridman A., Kennedy L.A.* Plasma Physics and Engineering. 2nd edition, N.Y.: CRC Press Taylor & Francis Group, 2011. 941 p.
- [3] *Биберман Л.М., Воробьев В.С., Якубов И.Т.* Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы. М.: Наука, 1982. 378 с.
- [4] *Capitelli M., Fereirra C.M., Gordiets B.M., Osipov A.I.* Plasma Kinetics in Atmospheric Gases. Berlin, Heidelberg: Springer, 2000. 300 p. doi 10.1007/978-3-662-04158-1
- [5] *Smirnov B.M.* Microphysics of Atmospheric Phenomena. Cham: Springer International Publishing Switzerland, 2017. 270 p. doi 10.1007/978-3-319-30813-5
- [6] *Srećković V.A., Mihajlov A.A., Ignjatović Lj.M., Dimitrijević M.S.* // Adv. Space Res. 2014. V. 54. N 7. P. 1264. doi 10.1016/j.asr.2013.11.017
- [7] *Suazo M., Prieto J., Escala A., Schleicher D.R.* // The Astrophysical J. 2019. V. 885. N 2. P. 127. doi 10.3847/1538-4357/ab45eb
- [8] *Sugimura K., Coppola C.M., Omukai K., Galli D., Palla F.* // MNRAS. 2016. V. 456. N 1. P. 270. doi doi.org/10.1093/mnras/stv2655
- [9] *Cooley J.E., Urdahl R., Xue J., Denning M., Tian P., Kushner M.J.* // Plasma Sources Sci. Technol. 2015. V. 24. N 6. P. 065009. doi 10.1088/0963-0252/24/6/065009
- [10] *Emmons D.J., Weeks D.E.* // J. App. Phys. 2017. V. 121. N 20. P. 203301. doi 10.1063/1.4983678
- [11] *Emmons D.J., Weeks D.E., Eshel B., Perram G.P.* // J. Appl. Phys. 2018. V. 123. N 4. P. 043304. doi 10.1063/1.5009337
- [12] *Hoskinson A.R., Gregorio J., Hopwood J., Galbally-Kinney K., Davis S.J., Rawlins W.T.* // J. App. Phys. 2016. V. 119. N 23. P. 233301. doi 10.1063/1.4954077
- [13] *Sun P., Zuo D., Mikheyev P.A., Han J., Heaven M.C.* // Opt. Express 2019. V. 27. N 16. P. 22289. doi 10.1364/OE.27.022289
- [14] *Belic D.S., Urbain X., Cherkani-Hassani H., Defrance P.* // Phys. Rev. A. 2017. V. 95. N 5. P. 052702. doi 10.1103/PhysRevA.95.052702
- [15] *Defrance P., Jureta J., Lecointre J., Giglio E., Gervais B., Dal Cappello C., Ruiz-Lopez M., Charpentier I., Hervieux P.-A.* // Phys. Rev. A. 2014. V. 90. N 4. P. 042704. doi 10.1103/PhysRevA.90.042704
- [16] *Wang E., Shan X., Shen Zh., Gong M., Tang Y., Pan Y., Lau K.-C., Chen X.* // Phys. Rev. A. 2015. V. 91. N 5. P. 052711. doi 10.1103/PhysRevA.91.052711
- [17] *Larsson M., Orel A.E.* Dissociative Recombination of Molecular Ions. Cambridge: Cambridge University Press, 2008. 392 p.
- [18] *Fifirig M., Stroe M.* // J. Phys. B. 2011. V. 44. P. 085202. doi 10.1088/0953-4075/44/8/085202
- [19] *Lecointre J., Jureta J.J., Mitchell J.B.A., Ngassam V., Orel A.E., Defrance P.* // J. Phys. B. 2008. V. 41. N 4. P. 045201. doi 10.1088/0953-4075/41/4/045201
- [20] *Lukáč P., Mikuš O., Morva I., Zábudlá Z., Trnovec J., Morvová M.* // Contrib. Plasma Phys. 2011. V. 51. N 7. P. 672. doi 10.1002/ctpp.201000084
- [21] *Lukáč P., Mikuš O., Morva I., Zábudlá Z., Trnovec J., Morvová M., Hensel K.* // Plasma Sources Sci. Technol. 2012. V. 21. N 6. P. 065002. doi 10.1088/0963-0252/21/6/065002
- [22] *Novotný O., Buhr H., Geppert W., Grieser M., Hamberg M., Krantz C., Mendes M.B., Petrigiani A., Repnow R., Savin D.W., Schwalm D., Stützel J., Schwalm D.* // The Astrophysical J. 2018. V. 862. N 2. P. 166. doi 10.3847/1538-4357/aacefc
- [23] *Иванов В.А., Петровская А.С., Скобло Ю.Э.* // ЖЭТФ. 2019. Т. 155. N 5. С. 901. doi 10.1134/S0044451019050146
- [24] *Shapko D., Dohnal P., Kassayová M., Kálosi Á., Rednyk S., Roučka Š., Plašil R., Augustovičová L.D., Johnsen R., Špirko V., Glosík J.* // J. Chem. Phys. 2020. V. 152 N 2. P. 024301. doi 10.1063/1.5128330
- [25] *Bates D.R.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1991. V. 24. N 3. P. 703. doi 10.1088/0953-4075/24/3/025
- [26] *Orel A.E., Ngassam V., Roos J.B., Royal J., Larson A.* // J. Phys.: Conf. Ser. 2009. V. 192. P. 012006. doi 10.1088/1742-6596/192/1/012006
- [27] *Dissociative Recombination of Molecular Ions with Electrons.* Ed. by Guberman S.L. N.Y.: Springer, 2013. 473 p. doi 10.1007/978-1-4615-0083-4
- [28] *Little D.A., Chakrabarti K., Mezei J.Zs., Schneider I.F., Tennyson J.* // Phys. Rev. A. 2014. V. 90. N 5. P. 052705. doi 10.1103/PhysRevA.90.052705
- [29] *Douguet N., Fonseca dos Santos S., Kokoouline V., Orel A.E.* // EPJ Web of Conferences. 2018. V. 84. P. 07003. doi 10.1051/epjconf/20158407003
- [30] *Kokoouline V., Ayouz M., Mezei J.Z., Hassouni K., Schneider I.F.* // Plasma Sources Sci. Technol. 2018. V. 27. N 11. P. 115007. doi 10.1088/1361-6595/aae6f7
- [31] *Čurík R., Hvizdoš D., Greene C.H.* // Phys. Rev. Lett. 2020. V. 124. N 4. P. 043401. doi 10.1103/PhysRevLett.124.043401
- [32] *Иванов В.А.* // УФН. 1992. Т. 162. N 1. С. 35. doi 10.3367/UFNr.0162.199201b.0035
- [33] *Florescu-Mitchell A.I., Mitchell J.B.A.* // Phys. Rep. 2006. V. 430. N 5-6. P. 277. doi 10.1016/j.physrep.2006.04.002
- [34] *Yousif F.B., Mitchell J.B.A.* // Z. Phys. D. 1995. V. 34. P. 195. doi 10.1007/BF01437688
- [35] *Andersen L.H., Johnson P.J., Kella D., Pedersen H.B., Vejby-Christensen L.* // Phys. Rev. A. 1997. V. 55. P. 2799. doi 10.1103/PhysRevA.55.2799
- [36] *Abdellahi E., Ghazaly M.O., Jureta J., Urbain X., Defrance P.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2004. V. 37. P. 2467. doi 10.1088/0953-4075/37/12/003
- [37] *Yousif F.B., Van der Donk P.J.T., Orakzai M., Mitchell J.B.A.* // Phys. Rev. A. 1991. V. 44. P. 5653. doi 10.1103/PhysRevA.44.5653
- [38] *Tennyson J., Noble C.J.* // J. Phys. B 1985. V. 18. P. 155. doi 10.1088/0022-3700/18/1/018
- [39] *Takagi T.* // Phys. Scr. 2002. V. 2002. P. 52. doi 10.1238/Physica.Topical.096a00052
- [40] *Stroe M., Fifirig M.* // J. Phys. B. 2009. V. 42. P. 205203. doi 10.1088/0953-4075/42/20/205203



- [41] *Varlan A., Duca M., Fidirig M.* // Mol. Phys. 2010. V. 106. N 16. P. 2093. doi 10.1080/00268976.2010.505211
- [42] *Orel A.E.* // Phys. Rev. A. 1992. V. 46. P. 1333. doi 10.1103/PhysRevA.46.1333
- [43] *Gorfinkiel J.D., Tennyson J.* // J. Phys. B. 2004. V. 37. P. L343. doi 10.1088/0953-4075/37/20/L01
- [44] *Иванов В.А.* // Опт. и спектр. 1992. Т. 73. N 3. С. 637.
- [45] *Ivanov V.A., Prikhodjko A.S.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1991. V. 24 N 18. P. L459. doi 10.1088/0953-4075/24/18/005
- [46] *Jonkers J., van de Sande M., Sola A., Gamero A., Rodero A., van der Mullen J.* // Plasma Sources Sci. Technol. 2003. V. 12. N 3. P. 464. doi 10.1088/0963-0252/12/3/323
- [47] *Марченко В.С.* // ЖЭТФ. 1983. Т. 85. С. 500.
- [48] *Bultel A., van Ootegem B., Bourdon A., Vervisch P.* // Phys. Rev. E. 2002. V. 65. N 4. P. 046406. doi 10.1103/physreve.65.046406
- [49] *Лебедев В.С., Кислов К.С., Нарич А.А.* // ЖЭТФ. 2020. Т. 157. N 4. С. 579. doi 10.31857/S004445102004001X
- [50] *Кислов К.С., Нарич А.А., Лебедев В.С.* // Опт. и спектр. 2020. Т. 128. N 4. С. 462. doi 10.21883/OS.2020.04.49195.319-19
- [51] *Lebedev V.S., Kislov K.S., Narits A.A.* // Plasma Sources Sci. Technol. 2020. V. 29. N 2. P. 025002 doi 10.1088/1361-6595/ab652f
- [52] *Lebedev V.S., Presnyakov L.P.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2002. V. 35. N 21. P. 4347. doi 10.1088/0953-4075/35/21/303
- [53] *Peverall R., Rosén S., Peterson J.R., Larsson M., Al-Khalili A., Vikor L., Semaniak J., Bobbenkamp R., Padellec A.L., Maurellis A.N., van der Zande W.J.* // J. Chem. Phys. 2001. V. 114. N 15. P. 6679. doi 10.1063/1.1349079
- [54] *Peterson J.R., Padellec A.L., Danared H., Dunn G.H., Larsson M., Larson A., Peverall R., Strömholm C., Rosén S., af Ugglas M., van der Zande W.J.* // J. Chem. Phys. 1998. V. 108. N 5. P. 1978. doi 10.1063/1.475577
- [55] *Rice O.K.* // J. Chem. Phys. 1933. V. 1. N 6. P. 375. doi 10.1063/1.1749305
- [56] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М.: Физматлит, 2004. 800 с.
- [57] *Lebedev V.S.* Collision Processes of Highly Excited Atoms with Neutral Particles. Cambridge: Cambridge Scientific Publishers, 2004. 308 p.
- [58] *Beigman I.L., Lebedev V.S.* // Phys. Rep. 1995. V. 250. N 3–5. P.95. doi 10.1016/0370-1573(95)00074-Q
- [59] *Lebedev V.S., Beigman I.L.* Physics of Highly Excited Atoms and Ions. Berlin, Heidelberg: Springer, 1998. 298 p. doi 10.1007/978-3-642-72175-5
- [60] *Иванов В.А., Лебедев В.С., Марченко В.С.* // ЖЭТФ. 1988. Т. 94. N 5(11). С. 86.
- [61] *Lebedev V.S.* // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1991. V. 24. N 8. P. 1993. doi 10.1088/0953-4075/24/8/016
- [62] *Zehnder O., Mastalerz R., Reiher M., Merkt F., Dresser R.A.* // J. Chem. Phys. 2008. V. 128. N 23. P. 234306. doi 10.1063/1.2937133
- [63] *Ha T.-K., Rupper P., Wüest A., Merkt F.* // Mol. Phys. 2003. V. 101. N 6. P. 827. doi 10.1080/0026897031000075624
- [64] *Viehland L.A., Gray B.R., Wright T.G.* // Mol. Phys. 2010. V. 108. N 5. P. 547 doi 10.1080/00268971003604583
- [65] *Гореславский С.П., Делоне Н.Б., Крайнов В.П.* // ЖЭТФ. 1982. Т. 82. N 6. С. 1789.
- [66] *Жданов В.П., Чибисов М.И.* // ЖЭТФ. 1978. Т. 74. N 1. С. 75.
- [67] *Лебедев В.С., Марченко В.С.* // ЖЭТФ. 1983. Т. 84. N 5. С. 1623.
- [68] *Gadea F. X., Paidarová I.* // Chem. Phys. 1996. V. 209 N 2-3. P. 281–290. doi 10.1016/0301-0104(96)00107-3
- [69] *Paidarová I., Gadea F.X.* // Chem. Phys. 2001. V. 274 N 1. P. 1. doi 10.1016/s0301-0104(01)00505-5
- [70] *Shiu Y.J., Biondi M.A., Sipler D.P.* // Phys. Rev. A. 1977. V. 15. N 2. P. 494. doi 10.1103/PhysRevA.15.494
- [71] *Shiu Y.J., Biondi M.A.* // Phys. Rev. A. 1978. V. 17. N 3. P. 868. doi 10.1103/PhysRevA.17.868
- [72] *Лебедев В.С., Кислов К.С., Нарич А.А.* // Письма в ЖЭТФ. 2018. Т. 108. N 9. С. 618. doi 10.1134/S0370274X18210038