

УДК 532.18

## СЕЧЕНИЯ И СКОРОСТИ ВОЗБУЖДЕНИЯ $Li^+$ ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ

Боровский А. В., Гедеон В. Ф., Зацаринный О. И.,  
Заяц Т. М., Лендъял В. И.

Представлены результаты систематических расчетов сечений и скоростей возбуждения гелиеподобного иона  $Li^+$  электронным ударом. Расчеты выполнены в рамках метода сильной связи в приближении двух состояний. Рассмотрены все переходы между уровнями конфигураций  $1s^2$ ,  $1s2l$  и  $1s3l$ . Все сечения аппроксимированы простыми аналитическими зависимостями.

Для построения спектроскопических методов диагностики неравновесной плазмы, вычисления энергопотерь, проведения исследований в области коротковолновых лазеров и для решения многих других проблем современной физики требуются точные данные по сечениям и скоростям возбуждения гелиеподобных ионов электронным ударом. Во всех перечисленных задачах существенную роль играют процессы столкновительного перераспределения населенностей возбужденных уровней. Поэтому сечения и скорости должны быть известны не только для переходов из основного состояния иона, но также и для переходов между его возбужденными состояниями. К настоящему времени сечения столкновительных переходов He-подобных ионов между возбужденными уровнями рассчитывались в основном в рамках кулон—борновского приближения (КБО), и нет возможности делать надежные выводы о точности таких расчетов для большого числа переходов из-за отсутствия систематических расчетов, выполненных с применением более точных методов, например метода сильной связи (МСС). С другой стороны, известные литературные данные не перекрывают всех переходов, сечения для которых необходимо знать, чтобы уверенно решать перечисленные задачи.

В настоящей работе представлены результаты систематических расчетов с помощью МСС сечений и скоростей возбуждения электронным ударом He-подобного иона  $Li^+$ . Рассмотрены все переходы между уровнями конфигураций  $1s^2$ ,  $1s2l$  и  $1s3l$ . Проводится анализ точности расчетов путем сравнения с известными результатами других авторов. Предлагаются простые аппроксимации для всех сечений и скоростей, удобные в практических целях.

### Методика расчета

Выбор метода расчета процесса рассеяния основывается на имеющихся данных. Сравнительный анализ результатов по сечениям возбуждения He-подобных ионов до 1981 г. дан в [1, 2]. Большинство работ посвящено возбуждению из основного состояния и проведено методом КБО. Более точных расчетов в рамках МСС мало [3, 4]. Они, однако, показывают, что при зарядах ядра  $Z \leq 8$  погрешность КБО расчетов может достигать фактора 2. В данной работе сечения переходов между и внутри конфигураций  $1s^2$ ,  $1s2l$  и  $1s3l$  определяются в рамках МСС. Этот метод применяется в приближении двух состояний (2СС), которое позволило получить результаты высокой точности при минимальных затратах машинного времени счета.

Расчеты проводились по программе IMPACT, подробно описанной в [5]. Далее мы представим только основные черты используемого в этой программе варианта МСС, подчеркивая только те аспекты, которые по существу относятся к нашим расчетам. Для волновой функции системы электрон+ион была принята следующая форма (для каждой определенной полной симметрии системы  $SL\pi$ ):

$$\Psi^{SL\pi} = \sum_i \Theta_i^{SL\pi} + \sum_j c_j \Psi_j^{SL\pi}. \quad (1)$$

Первая сумма берется по волновым функциям так называемых «свободных» каналов  $\Theta^{SL\pi}$ , где

$$\Theta_i^{SL\pi} = A \{ \chi (S_i L_i) F_i (r, \epsilon_i l) \}^{SL\pi}. \quad (2)$$

Здесь  $\chi_i$  — волновые функции состояний мишени, учитываемых в разложении МСС (эти функции включают в себя спин-орбитальную часть волновой функции внешнего электрона);  $F (r, \epsilon_i, l)$  — радиальная орбиталь волновой функции свободного электрона;  $A$  — оператор антисимметризации (угловая связь в (2) опущена для краткости). Второе суммирование ведется по волновым функциям так называемых «связанных» каналов. Они могут быть представлены в виде

$$\Phi_j^{SL\pi} = A \{ \varphi (S_j L_j) P_{nl} (r) \}^{SL\pi}, \quad (3)$$

где  $\varphi_j$  — одноконфигурационные волновые функции, используемые при построении  $\chi_i$ ;  $P_{nl} (r)$  — одноэлектронные радиальные орбитали, используемые при построении  $\varphi_j$ . Таким образом,  $\Phi^{SL\pi}$  имеют форму связанных состояний системы электрон+ион. Суммирование по  $\Phi^{SL\pi}$  должно быть включено в разложение (1) из-за наложения условий ортогональности

$$\langle F_i (r, \epsilon_i, l) | P_{nl} (r) \rangle = 0. \quad (4)$$

Наряду с функцией компенсации условий ортогональности «связанные» каналы также могут выполнять функции представления автоионизационных состояний системы электрон+ион и учета корреляционных эффектов на малых расстояниях от ядра. В данных расчетах волновая функция основного состояния мишени определялась в хартри—фоковском приближении, а волновые функции возбужденных состояний рассчитывались в хартри—фоковском приближении с замороженной 1s-орбиталью, полученной при расчете основного состояния.

Уравнение Шредингера в случае разложения (1) для полной волновой функции приводит к системе интегродифференциальных уравнений для радиальных функций  $F_i (r, \epsilon_i, l)$  и алгебраических уравнений для коэффициентов  $c_j$ . В данных расчетах суммирование по свободным каналам в разложении (1) включало только два состояния иона: начальное и конечное состояния рассматриваемого перехода. Учитывая парциальное разложение волновой функции свободного электрона, это означает, что размерность системы интегродифференциальных уравнений МСС в данном приближении менялась в пределах от двух каналов ( $s-s$ -переходы) до 6 каналов ( $d-d$ -переходы), причем все вырожденные по энергии и тем самым сильно связанные каналы рассматривались совместно. Расчеты в рамках МСС были проведены для всех парциальных волн  $L \leq 15$ . Для дипольных переходов, а также для квадрупольных без изменения спина наблюдается медленная сходимост по парциальным вкладам. В этих случаях сечения с  $L > 15$  рассчитывались в КБО приближении, так как для таких  $L$  наблюдается хорошее согласие МСС с КБО расчетами. Для дипольных переходов при высоких энергиях налетающего электрона сходимост не достигается даже при  $L=25$ . В этих случаях вклад парциальных сечений для  $L > 25$  оценивается в приближении Кулон—Бете.

#### Аналитические аппроксимации сечений

Полученные сечения возбуждения при  $\Delta n \neq 0$  аппроксимировались простыми аналитическими формулами, содержащими по 3 подгоночных параметра.

Аналитический вид зависимостей выбирался, исходя из известных теоретических асимптотик сечений при больших энергиях налетающего электрона  $E$  ( $\sigma$  в ед.  $\text{см}^2$ )

$$\left. \begin{aligned} \Delta S=0, \Delta L=1 \quad Z^{4\sigma}(x) &= \frac{1}{x} \left( a_0 + \frac{a_1}{x} + a_5 \ln x \right) \cdot 10^{-16}, \\ \Delta S=0, \Delta L \neq 1 \quad Z^{4\sigma}(x) &= \frac{1}{x} \left( a_0 + \frac{a_1}{x} + \frac{a_2}{x^2} \right) \cdot 10^{-16}, \\ \Delta S=0 \quad Z^{4\sigma}(x) &= \frac{1}{x} \left( \frac{a_2}{x^2} + \frac{a_3}{x^3} + \frac{a_4}{x^4} \right) \cdot 10^{-16}, \end{aligned} \right\} \quad (5)$$

где  $x=E/\Delta E$ ,  $\Delta E$  — пороговая энергия возбуждения. Подгонка сечений производилась для энергий налетающего электрона от порога возбуждения до двойного потенциала ионизации  $\text{Li}^+$  ( $\sim 15 \text{ Ry}$ ). Большинство сечений дости-

Т а б л и ц а 1

Параметры аппроксимации ( $\alpha$ ) сечений и скоростей возбуждения  $\text{Li}^+$  электронным ударом

Дипольный переход	$\Delta E, \text{Ry}$	$a_0$	$a_1$	$a_5$
$1^1S-2^1P$	4.5726	-8.50+0	1.09+1	1.00+1
$1^1S-3^1P$	5.1486	1.77-2	3.93-1	1.23+0
$2^3S-3^3P$	0.7604	-2.85+1	5.05+1	5.12+1
$2^1S-3^1P$	0.6529	-8.74+1	9.87+1	1.26+2
$2^3P-3^3S$	0.5511	-2.18+1	4.45+1	3.34+1
$2^3P-3^3D$	0.6102	-3.90+1	2.62+2	4.20+2
$2^1P-3^1S$	0.5192	-1.59+1	1.94+1	2.77+1
$2^1P-3^1D$	0.5420	-9.63+2	1.57+3	1.07+3
$2^3S-2^3P$	0.1661	3.42+2	1.27+0	7.64+1
$2^1S-2^1P$	0.1069	4.71+2	7.24-1	9.42+1
$3^3S-3^3P$	0.0432	2.67+3	1.64+1	7.36+2
$3^1S-3^1P$	0.0268	3.57+3	1.86+1	1.01+3
$3^3P-3^3D$	0.0159	1.79+3	9.12+0	5.12+2
$3^1D-3^1P$	0.0040	1.39+3	7.06+0	4.23+2

гают своих асимптотик в указанных пределах. Поэтому аппроксимации можно применять для всех  $x$ . Ошибки аппроксимаций в среднем не превышают 5%. В табл. 1—3 приведены значения коэффициентов  $a_i$  для переходов с  $\Delta n \neq 0$ . Если сечения (5) усреднить по максвелловскому распределению энергий налетающих электронов, то для скоростей процесса возбуждения можно получить следующее выражение ( $\langle v\sigma \rangle$  в  $\text{см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$ ):

$$\langle v\sigma \rangle = 2.48 \cdot 10^{-8} \frac{1}{Z^3} \left( \frac{\Delta E}{Z^2 \text{ Ry}} \right)^{1/2} \beta^{1/2} \gamma(\beta), \quad \gamma(\beta) = a_0 e^{-\beta} + a_5 E_1(\beta) + \beta \sum_{n=1}^4 a_n E_n(\beta), \quad (6)$$

где  $\beta = \Delta E/kT$ ,  $E_n(\beta)$  — интегральная показательная функция. Таким образом, коэффициенты  $a_i$  можно использовать как для определения сечений, так и для оценки скоростей возбуждения.

В случае переходов между близкими уровнями ( $\Delta n=0$ ) пороговые единицы  $x$  и  $\beta$  неудобны. Поэтому в этом случае подгонка сечений была проведена относительно приведенной энергии налетающего электрона  $\varepsilon = E/(Z^2 \text{ Ry})$ . При этом для переходов с  $\Delta S=0$  вид функциональных зависимостей сечений рассеяния не менялся и можно использовать формулы (5) с заменой  $x \rightarrow \varepsilon$ . Для интеркомбинационных переходов с  $\Delta n=0$  не удалось достичь удовлетворительной точности аппроксимации с аналитической формулой (5). Для этих переходов была применена другая аппроксимирующая зависимость (в  $\text{см}^2$ ), а именно

$$Z^{4\sigma}(\varepsilon) = \frac{a}{\varepsilon(\varepsilon+b)^2} \cdot 10^{-16}, \quad (7)$$

Т а б л и ц а 2

Параметры аппроксимации ( $a$ ) сечений и скоростей  
возбуждения  $Li^+$  электронным ударом

Переходы с $\Delta S = 0$ , $\Delta L \neq 1$	$\Delta E$ , Ry	$a_0$	$a_1$	$a_2$
$1^1S-2^1S$	4.4657	1.53+0	-0.96+0	1.97-1
$1^1S-3^1S$	5.0918	2.89-1	-1.11-1	1.61-2
$1^1S-3^1D$	5.1146	1.16-1	-1.95-1	9.81-2
$2^3S-3^3S$	0.7172	8.79+1	—	—
$2^3S-3^3D$	0.7763	1.95+2	-2.28+2	1.05+2
$2^1S-3^1S$	0.6489	1.36+2	-1.38+1	7.96+0
$2^1S-3^1D$	0.6261	4.01+2	-7.00+2	4.77+2
$2^3P-3^3P$	0.5943	1.58+2	—	—
$2^1P-3^1P$	0.5460	1.94+2	—	—
$3^3S-3^3D$	0.0591	8.01+1	-3.18-1	2.00-3
$3^1S-3^1D$	0.0228	7.93+1	-3.24-1	7.71-3

Т а б л и ц а 3

Параметры аппроксимации ( $a$ ) сечений и скоростей  
возбуждения  $Li^+$  электронным ударом

Интеркомби- национный переход	$\Delta E$ , Ry	$a_2$	$a_3$	$a_4$
$1^1S-2^3S$	4.3379	3.36+0	-5.14+0	2.52+0
$1^1S-2^3P$	4.5040	6.65+0	-3.32+0	-4.28-1
$1^1S-3^3S$	5.0551	3.62-1	1.66-1	-2.99-1
$1^1S-3^3P$	5.0983	5.67-1	1.23+0	1.07+0
$1^1S-3^3D$	5.1142	9.48-3	9.00-2	1.96-1
$2^3S-3^1S$	0.7539	8.16+0	-7.23+0	1.90+0
$2^3S-3^1P$	0.7807	1.30+1	-8.95+0	3.62+0
$2^3S-3^1D$	0.7769	3.48+1	-5.12+1	8.82+1
$2^1S-3^3S$	0.5894	3.41+1	-4.58+1	3.00+1
$2^1S-3^3P$	0.6326	5.37+1	3.64+1	-3.90+1
$2^1S-3^3D$	0.6485	1.54+2	1.53+2	-1.76+2
$2^3P-3^1S$	0.5879	1.02+1	-8.00+0	5.02+0
$2^3P-3^1P$	0.6146	4.34+1	-1.87+1	-4.81+0
$2^3P-3^1D$	0.6106	6.47+1	-8.20+1	2.13+2
$2^1P-3^3S$	0.4825	5.08+1	-2.89+1	2.19+1
$2^1P-3^3P$	0.5257	1.55+2	-8.72+1	1.12+2
$2^1P-3^3D$	0.5416	1.36+2	1.31+3	-1.15+3

при помощи которой удалось достичь точности аппроксимации до 20 %. Если ввести в рассмотрение приведенную температуру  $\Theta = T/(Z^2Ry)$ , то для скоростей возбуждения ( $\langle v\sigma \rangle$  в  $cm^3 \cdot c^{-1}$ ) в этом случае можно получить формулу

$$\langle v\sigma \rangle = \frac{2.4S \cdot 10^{-8}}{Z^3} \frac{a}{b} \frac{e^{b/\Theta}}{\Theta^{3/2}} E_2(b/\Theta). \quad (8)$$

Параметры  $a$  и  $b$  приведены в табл. 4.

### Обсуждение результатов

Для анализа точности полученных данных на рисунке представлены некоторые из рассчитанных сечений и проведено сравнение с тремя наиболее распространенными методами расчета: метод сильной связи (5СС [3]), метод искаженных волн (МИВ [6]) и кулон—борновское приближение (КБО [7]). Расчеты, выполненные в данной работе, обозначены на рисунке через 2СС.

В случае переходов из основного состояния наибольшее расхождение (до 20 %) между 2СС и 5СС результатами наблюдается для дипольного перехода  $1^1S-2^1P$  (см. рисунок, а). Для других переходов из основного состояния 2СС результаты совпадают в пределах 5 % с 5СС, кроме узкого интервала припро-

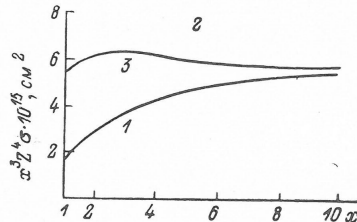
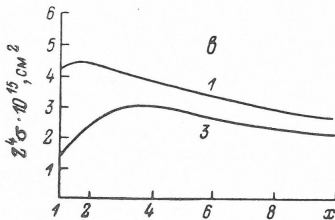
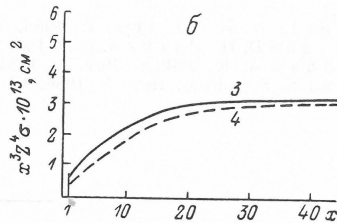
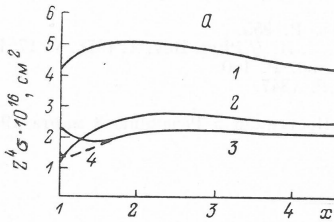
говых энергий ( $x < 2$ ) для переходов  $1^1S-2^1S$  и  $1^1S-2^3S$ , где они занижены на 20–30 %. Это связано с тем, что вблизи порога указанных переходов важна связь с каналами рассеяния  $1^1S-2^1P$  и  $1^1S-2^3P$  соответственно, которая учитывается в методе 5СС. Приведенное сравнение с 5СС дает представление о достаточно высокой точности 2СС расчетов. Для всех переходов из основного состояния получено хорошее согласие с методом МИБ. Можно сделать вывод, что для переходов с большой пороговой энергией связь между начальными и конечными состояниями невелика и важно учитывать лишь искажение волновой функции рассеиваемого электрона атомным полем. Исключения составляют только припороговые энергии ( $x \sim 1$ ).

Как видно из рисунка, *a*, наблюдается сильное расхождение с КБО расчетами, которые дают почти двукратное завышение сечений в случае  $1^1S-2^1P$ -перехода. Для других рассмотренных переходов из основного состояния также наблюдается значительное расхождение с КБО расчетами, причем это расхождение имеет тенденцию увеличиваться с ростом  $L$ .

На рисунке, *б*, в качестве примера переходов между близкими уровнями с  $\Delta n = 0$  приведено сечение возбуждения перехода  $2^1S-2^1P$ . Как видно из ри-

Т а б л и ц а 4  
П а р а м е т р ы а п р о к с и м а ц и и с е ч е н и й  
в о з б у ж д е н и я и н т е р к о м б и н а ц и о н н ы х п е р е х о д о в  
с  $\Delta n = 0$

Переход	$\Delta E, Ry$	$a$	$b$
$2^3S-2^1S$	0.1278	4.02-2	1.16-1
$2^3S-2^1P$	0.2347	5.82-2	7.06-2
$2^1S-2^3P$	0.0383	1.66-1	9.91-2
$2^3P-2^1P$	0.0686	1.52-1	1.67-2
$3^3S-3^1S$	0.0367	6.22-3	2.90-2
$3^3S-3^1P$	0.0632	1.05-2	3.13-2
$3^3S-3^1D$	0.0595	1.24-2	1.47-2
$3^1S-3^3P$	0.0065	2.81-2	3.69-2
$3^1S-3^3D$	0.0224	3.20-2	1.72-2
$3^3P-3^1P$	0.0203	1.45-2	3.84-2
$3^3P-3^1D$	0.0163	1.40-2	4.90-2
$3^3D-3^1D$	0.0004	2.81-2	4.89-2
$3^3D-3^1P$	0.0044	6.85-3	3.61-2



[ *a* —  $1^1S-2^1P$ , *б* —  $2^3S-2^1P$ , *в* —  $2^1S-3^1P$ , *г* —  $2^1S-3^3P$ . 1 — КБО, 2 — 5СС, 3 — 2СС, 4 — МИБ.

сунка, расхождение между методами 2СС и МИБ несколько больше, чем в случае переходов из основного состояния, и достигает 20 % для переходов без изменения спина и 15 % для интеркомбинационных переходов. Это можно объяснить тем, что для переходов между близкими уровнями важно учитывать взаимное влияние различных каналов рассеяния друг на друга. В отличие от МИБ это влияние учитывается при расчетах в рамках МСС. Интересно отметить, что для интеркомбинационных переходов расхождения наблюдаются только для

энергий ниже потенциала ионизации, на асимптотике все расчеты почти совпадают.

На рисунке, *в, г* приведены примеры переходов между уровнями с  $n=2$  и 3. Видно, что при больших энергиях налетающего электрона ( $x > 3$ ) расхождение между КБО и 2СС значительно меньше, чем в случае переходов  $1^1S-2^1,3L$ . Однако для припороговых энергий расхождение сильно увеличивается и достигает в пороге в некоторых случаях значения 4. Это связано с тем, что в случае рассеяния на возбужденных состояниях при малых энергиях особенно важно учитывать некулоновскую часть поля иона, так как в возбужденных состояниях искажение кулоновского поля иона осуществляется на значительно больших расстояниях от ядра.

В заключение необходимо отметить, что в литературе в последнее время появился ряд работ [4, 8, 9], в которых рассматривается вклад автоионизационных состояний в столкновительные скорости переходов в многозарядных He-подобных ионах. В этих работах показано, что учет резонансного возбуждения может приводить к значительным поправкам для отдельных переходов. Так, например, в случае  $Ca^{18+}$  [8] учет резонансных эффектов приводит только к поправкам в 2—7 % к скоростям возбуждения  $1^1S-2^1, 3P$ -переходов, в то время как для перехода  $1^1S-2^3S$  эти поправки уже составляют 45 %. Таким образом, точность полученных в настоящей работе сечений ограничена величиной указанных резонансных эффектов. С другой стороны, полученные результаты являются хорошей основой для дальнейшего изучения резонансного возбуждения.

#### Литература

- [1] Henry R. J. W. // Physics Reports. 1981. V. 68. P. 1.
- [2] Базылев В. А., Чибисов М. И. // УФН. 1981. Т. 133. С. 617.
- [3] Wungaarden W. L., Bhadra K., Henry R. J. W. // Phys. Rev. A. 1979. V. 20. P. 1409.
- [4] Christensen R. B., Norcross D. W. // Phys. Rev. A. 1985. V. 31. P. 142.
- [5] Grees M. A., Seaton M. J., Wilson P. M. H. // Comp. Phys. Commun. 1978. V. 15. P. 23.
- [6] Badnell N. R. // J. Phys. B. 1985. V. 18. P. 955.
- [7] Sampson D. H., Parks A. D., Clark R. E. H. // Phys. Rev. A. 1978. V. 17. P. 1619.
- [8] Pradhan A. K. // Phys. Rev. A. 1984. V. 30. P. 100.
- [9] Tayal S. S. // Phys. Rev. A. 1986. V. 34. P. 1847.

Поступило в Редакцию 3 марта 1988 г.