## Сильный рост скорости электрон-ионной рекомбинации в результате свободно-связанных и связанно-связанных резонансных переходов

В. С. Лебедев<sup>1)</sup>, К. С. Кислов, А. А. Нариц

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

Поступила в редакцию 17 сентября 2018 г. После переработки 20 сентября 2018 г.

Изучено влияние резонансных свободно-связанных и связанно-связанных неадиабатических переходов электрона на скорости электрон-ионной рекомбинации в плазме смесей инертных газов Ne/Xe и Ar/Xe. Предложена кинетическая модель рекомбинации, учитывающая релаксацию энергии в столкновениях с электронами, резонансный захват электронов в ридберговские состояния в результате тройных столкновений ионов Xe<sup>+</sup> с атомами Ne или Ar и диссоциативной рекомбинации ионов NeXe<sup>+</sup> или ArXe<sup>+</sup>, резонансные переходы  $n \rightarrow n'$ . Показано, что наличие эффективных резонансных процессов в квазимолекулярных системах приводит к резкому увеличению коэффициента рекомбинации и повышению роли столкновений с нейтральными частицами даже при достаточно высоких степенях ионизации плазмы.

DOI: 10.1134/S0370274X18210038

1. Введение. Процессы рекомбинации электронов с ионами играют ключевую роль в атомной и молекулярной физике, физике плазмы и астрофизике, в физике газовых разрядов, плазменных лазеров и ультрахолодных газов. В плотной низкотемпературной плазме рекомбинация электронов с атомарными ионами происходит в основном в результате тройных столкновений со свободными электронами или нейтральными частицами и сопровождается образованием атомов в высоковозбужденных состояниях [1, 2]. Тройные столкновения с электронами [3] обычно более существенны для рекомбинации, чем с нейтральными частицами, роль которых в случае механизма передачи энергии от рекомбинирующего электрона в поступательные степени свободы атома и иона [4] существенна только при очень низких степенях ионизации плазмы. Влияние столкновений с атомарными частицами на скорость рекомбинации значительно возрастает, однако, при наличии эффективного канала столкновительного тушения ридберговских состояний [5]. Известно также, что скорость рекомбинации в молекулярном газе значительно выше, чем в атомарном, из-за квазирезонансной передачи энергии от рекомбинирующего электрона колебательно-вращательным степеням свободы молекул [1].

В ряде недавних работ изучалась тройная рекомбинация электронов с атомарными и молекулярными ионами при пониженных температурах [6], а также рекомбинация в ультрахолодной плазме [7, 8]. В то же время основным каналом нейтрализации плазмы, содержащей молекулярные ионы, является их диссоциативная рекомбинация с электронами. В силу важности этого процесса для физики звездных и планетных атмосфер [9], газового разряда и газовых лазеров [10] исследованиям этого типа рекомбинации посвящено огромное число статей [11, 12]. Изучение процессов рекомбинации тесно связано со спектроскопическими исследованиями механизмов заселения возбужденных состояний атомов [13, 14], а также с исследованиями разнообразных столкновительных процессов с участием ридберговских атомов [15].

В данной работе на примере рекомбинационнонеравновесной плазмы смесей инертных газов (Ne/Xe и Ar/Xe) проведен анализ наиболее эффективных механизмов рекомбинации и релаксации энергии по ридберговским атомным уровням. Рассматриваемые физические условия существенно отличаются от тех, которые часто создаются при исследовании диссоциативной рекомбинации сильносвязанных ионов инертных газов [14, 16], когда заселено небольшое число их колебательновращательных уровней, а концентрации атомарных ионов малы. В исследуемой плазме, напротив, в основном присутствуют атомарные ионы, Xe<sup>+</sup>, и в значительно меньших концентрациях слабосвязанные гетероядерные ионы, NeXe<sup>+</sup> или ArXe<sup>+</sup> (концентрации ионов Xe<sub>2</sub><sup>+</sup> чрезвычайно малы в рассматриваемых условиях [Xe] « [Ne], [Ar]). Поэтому в процессе рекомбинации конкурируют различ-

 $<sup>^{1)}{\</sup>rm e\text{-}mail:}$ vlebedev@sci.lebedev.ru

ные механизмы релаксации энергии с участием состояний дискретного и непрерывного спектров атома Xe и молекулярного (квазимолекулярного) иона NeXe<sup>+</sup> или ArXe<sup>+</sup>. Целью работы является демонстрация определяющей роли изучаемых резонансных свободно-связанных и связанно-связанных неадиабатических переходов электрона в кинетике рекомбинации. Будет установлен вклад различных процессов (см. рис. 1) в результирующий коэф-



Рис. 1. (Цветной онлайн) Схема рассматриваемых релаксационных процессов

фициент рекомбинации в зависимости от степени ионизации плазмы,  $\varkappa$ , газовой, T, и электронной,  $T_e$ , температур, а также от соотношения между тепловой энергией, kT, и энергиями диссоциации,  $D_0$ , слабосвязанных ионов NeXe<sup>+</sup> или ArXe<sup>+</sup>. Конкретные расчеты проведены для параметров (T = 300 - 1000 К,  $T_e = 300-5000$  К и  $\varkappa = N_e/N_{\rm B} = 10^{-8}-10^{-4}$ , В = Ne или Ar), ориентированных на приложения построенной здесь теории для плазмы, создаваемой электронным пучком или в импульсных разрядах.

**2. Кинетическая модель.** В кинетике рекомбинации учтен захват электрона ионом  $Xe^+$  в тройных столкновениях с электронами и многоступенчатые переходы между уровнями  $n \to n'$  атома Xe(n):

$$A^{+} + e + e \to A(n) + e, \ A(n) + e \to A(n') + e, \ (1)$$

резонансный захват электронов из непрерывного спектра в результате тройных столкновений ионов Xe<sup>+</sup> с атомами буферного газа (Ne или Ar) и диссоциативной рекомбинации слабосвязанных ионов

Письма в ЖЭТФ том 108 вып. 9-10 2018

NeXe<sup>+</sup> или ArXe<sup>+</sup>, а также резонансные переходы  $n \to n'$  при столкновениях с атомами Ne или Ar:

$$A^{+} + B + e \rightarrow A(n) + B, BA^{+} + e \rightarrow A(n) + B,$$
(2a)
$$A(n) + B \rightarrow A(n') + B.$$
(2b)

Процессы (1) описываются аналогично [3] в рамках "диффузионной" модели релаксации энергии электрона. При описании процессов (2а) резонансного захвата электрона атомарными (Xe<sup>+</sup>) и гетероядерными (NeXe<sup>+</sup> и ArXe<sup>+</sup>) ионами с малыми энергиями диссоциации основного терма ( $D_0^{\text{NeXe}^+} = 33 \text{ мэB}$ и  $D_0^{\text{ArXe}^+} = 171 \text{ мэB}$ ) мы в рамках квазиклассического подхода (аналогичного развитому в [17] для прямой и ассоциативной ионизации ридберговских атомов) единым образом описываем интегральный вклад всего колебательно-вращательного квазиконтинуума, E < 0, и вклад состояний непрерывного, E > 0, спектра (см. рис. 1). Это оправдано, так как при  $T = 300 \div 1000$  К тепловой энергии kT достаточно для существенного возбуждения всех уровней этих ионов и для обеспечения заметного или даже определяющего вклада состояний непрерывного спектра ядер в резонансный захват электрона. Так же, как и резонансные переходы  $n \to n'$  (2b), процессы (2a) происходят в окрестности точки пересечения термов квазимолекулы,  $BA^+ + e$ , в результате неадиабатического обмена энергии ее внешнего и внутренних электронов.

В режиме преимущественной рекомбинации (когда концентрация свободных электронов существенно превышает равновесную  $N_e \gg N_e^{(0)}$ ) можно пренебречь ионизацией атомов и записать уравнение для заселенности,  $N_n$ , уровня n в виде:

$$\frac{\partial N_n}{\partial t} = N_e \sum_{n'} \left( N_{n'} K^e_{n'n} - N_n K^e_{nn'} \right) + N_e^2 N_{\rm A} + \beta^{(n)}_{ee} + N_{\rm B} \left[ \sum_{n'} \left( N_{n'} w_{n'n} - N_n w_{nn'} \right) + N_e N_{\rm A} + \beta^{(n)}_{e\rm B} \right].$$
(3)

Здесь  $N_{\rm A^+}$ ,  $N_{\rm B}$ ,  $N_e$  – концентрации частиц;  $K_{nn'}^e$  и  $\beta_{ee}^{(n)}$  – константы скорости переходов  $n \to n'$  и захвата на уровень n в столкновениях с электронами;  $w_{nn'} = \sum_{l\,l'} (2l+1) \langle v_E \sigma_{nl,n'l'} \rangle /n^2$  – константа скорости резонансного перехода  $n \to n'$ ;  $v_E$  – относительная скорость частиц A и B;  $\sigma_{nl,n'l'}$  – сечение переходов  $nl \to n'l'$ , определяемое на основе подхода [5];  $\beta_{eB}^{(n)}$  – константа скорости резонансного захвата электрона на уровень n в двух процессах (2a).

В рамках модифицированного диффузионного приближения из (3) следует уравнение для концентрации электронов,  $N(\varepsilon,t) = N_n(t) |dn/d\varepsilon|$ , в квазиконтинууме с энергией  $\varepsilon \equiv \varepsilon_n = -1/2n^2 < 0$ :

$$\frac{\partial N(\varepsilon,t)}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial |\varepsilon|} \left[ -\mathcal{D}_e(\varepsilon) N_0(\varepsilon) \frac{\partial}{\partial |\varepsilon|} \left\{ \frac{N(\varepsilon,t)}{N_0(\varepsilon)} \right\} + W_{\text{eff}}(\varepsilon) N_{\text{B}} N(\varepsilon,t) - \int_{|\varepsilon|}^{\infty} N_{\text{B}} N_{\text{A}^+} N_e \beta_{e\text{B}}(\varepsilon') d|\varepsilon'| \right], \quad (4)$$

где  $N_0(\varepsilon) = \pi^{3/2} \exp(|\varepsilon|/T_e) N_e N_{A^+} / (2T_e^{3/2} |\varepsilon|^{5/2})$  – равновесная плотность электронов,  $\mathcal{D}_e(\varepsilon)$  – коэффициент диффузии в столкновениях с электронами [3],  $W_{\text{eff}}(\varepsilon)$  – константа скорости тушения атомами В в квазиконтинууме (используются атомные единицы):

$$W_{\text{eff}}(\varepsilon) = W_{\text{eff}}^{n(\varepsilon)} \left| \frac{d\varepsilon}{dn} \right| = \left[ \sum_{n' < n} \sum_{k \ge n} w_{kn'} \right] (2 |\varepsilon|)^{3/2}, \quad (5)$$

 $\beta_{e\mathrm{B}}\left(\varepsilon\right)\equiv\beta_{e\mathrm{B}}^{n\left(\varepsilon\right)}|dn/d\varepsilon|,$ а $\beta_{e\mathrm{B}}^{\left(n\right)}$ – константа скорости резонансного захвата электрона на уровень n:

$$\beta_{eB}^{(n)}(T_e, T) = 4\pi \tilde{g} \left(\frac{2\pi}{T_e}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{|\varepsilon_n|}{T_e}\right) \times \\ \times \int_0^{R_n} \Gamma_{\varepsilon \to n}(R) e^{-\frac{\Delta U_{fi}(R)}{T_e}} e^{-\frac{U_i(R)}{T}} R^2 dR.$$
(6)

Здесь  $\tilde{g} = 1$  – отношение статистических весов;  $\Delta U_{fi} = U_f - U_i$ ;  $R_n$  – межъядерное расстояние, определяемое соотношением  $\Delta U_{fi}(R_n) = 1/(2n^2)$ ;  $\Gamma_{\varepsilon \to n}$  – вероятность свободно-связанного перехода электрона  $\varepsilon \to n$  ( $\varepsilon > 0$ ). Формула (6) получена в рамках подхода [5, 17] и с помощью соотношения детального баланса для процессов захвата электрона и обратных процессов резонансной ионизации ридберговского атома A(nl), рассмотренных в [17].

Из уравнения для плотности электронов в квазиконтинууме (4) в режиме стационарного стока следует выражение для рекомбинационного потока j < 0:

$$j = W_{\text{eff}}(\varepsilon) N_{\text{B}} N(\varepsilon) - \mathcal{D}_{e}(\varepsilon) N_{0}(\varepsilon) \frac{\partial}{\partial |\varepsilon|} \left[ \frac{N(\varepsilon, t)}{N_{0}(\varepsilon)} \right] - \int_{|\varepsilon|}^{\infty} N_{\text{B}} N_{\text{A}^{+}} N_{e} \beta_{e\text{B}}(\varepsilon') d|\varepsilon'|.$$
(7)

Решение уравнения (7) имеет вид:

$$N(\varepsilon) =$$

$$= N_{0}(\varepsilon) P(\varepsilon, N_{\rm B}) \left[ 1 + \int_{0}^{|\varepsilon|} \frac{P^{-1}(\varepsilon', N_{\rm B}) d|\varepsilon'|}{N_{0}(\varepsilon')\mathcal{D}_{e}(\varepsilon')} \times \left\{ j - j_{e\rm B}^{\rm tot} - N_{\rm B}N_{e}N_{\rm A^{+}} \int_{0}^{|\varepsilon'|} \beta_{e\rm B}(\varepsilon'') d|\varepsilon''| \right\} \right].$$
(8)

**N**T ( )

Здесь 
$$P(\varepsilon, N_{\rm B}) = \exp\left(N_{\rm B} \int_{0}^{|\varepsilon|} d|\varepsilon'|W_{\rm eff}(\varepsilon') \mathcal{D}_{e}^{-1}(\varepsilon')\right),$$
  
 $|j_{e\rm B}^{\rm tot}| = N_{e}N_{\rm A} + N_{\rm B}\beta_{e\rm B}^{\rm tot}; \quad \beta_{e\rm B}^{\rm tot} \equiv \int_{0}^{\infty} \beta_{e\rm B}(\varepsilon) d|\varepsilon| \quad (9)$ 

есть суммарный рекомбинационный поток, вызванный резонансным механизмом захвата электрона  $(j_{e\mathrm{B}}^{\mathrm{tot}} < 0)$ . В термодинамическом равновесии поTпроизведение  $N_{\mathrm{B}}N_{\mathrm{A}^+}$  связано с полной концентрацией ионов  $\mathrm{BA^+},~N_{\mathrm{BA}^+}=\sum_{vJ}N_{\mathrm{BA}^+}^{vJ}$ через закон действующих масс

$$N_{\rm BA^+} = N_{\rm A^+} N_{\rm B} \frac{Z_{\rm vr} g_{\rm BA^+}}{g_{\rm A^+} g_{\rm B}} \left(\frac{2\pi}{\mu T}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{D_0}{T}\right), \quad (10)$$

где  $Z_{\rm vr}$  – колебательно-вращательная статистическая сумма, g – статистический вес,  $\mu$  – приведенная масса BA<sup>+</sup>. При стандартном граничном условии  $N(|\varepsilon| = \infty) = 0$  [2], для полного потока получаем:

$$|j| = |j_{eB}^{\text{tot}}| + \left(\int_{0}^{\infty} \frac{P^{-1}\left(\varepsilon', N_{B}\right) d|\varepsilon'|}{N_{0}\left(\varepsilon'\right) \mathcal{D}_{e}\left(\varepsilon'\right)}\right)^{-1} \left[1 - N_{e}N_{A^{+}}N_{B}\int_{0}^{\infty} \frac{d|\varepsilon'| \int_{0}^{|\varepsilon'|} \beta_{eB}\left(\varepsilon''\right) d|\varepsilon''|}{N_{0}\left(\varepsilon'\right) \mathcal{D}_{e}\left(\varepsilon'\right) P\left(\varepsilon', N_{B}\right)}\right].$$
 (11)

Из общей формулы (11) следуют два предельных случая. В условиях, когда вкладом резонансного захвата можно пренебречь, рекомбинационный поток  $j_{ee}^{q}$  и соответствующий коэффициент рекомбинации  $\beta_{ee}^{q}$ , обусловленные столкновениями с электронами (1) и резонансным тушением атомами буферного газа (2b), определяются выражениями:

$$|j_{ee}^{\mathbf{q}}| = \beta_{ee}^{\mathbf{q}} N_{e}^{2} N_{\mathrm{A}^{+}}, \ \beta_{ee}^{\mathbf{q}} = \beta_{ee} \mathcal{E}, \ \beta_{ee} = \frac{2(2\pi)^{3/2} \Lambda_{\mathrm{c}}}{9T_{e}^{9/2}},$$
$$\mathcal{E}^{-1} = \int_{0}^{\infty} Q(\varepsilon) d|\varepsilon|, \ Q(\varepsilon) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \frac{|\varepsilon|^{3/2} e^{-|\varepsilon|/T_{e}}}{T_{e}^{5/2} P(\varepsilon, N_{\mathrm{B}})}.$$
(12)

Согласно (12), поток и коэффициент рекомбинации  $\alpha_{ee}^{q} = \beta_{ee}^{q} N_{e} \, [\mathrm{cm}^{3} \cdot \mathrm{c}^{-1}]$  выражаются через коэффициент тройной рекомбинации  $\beta_{ee}$  на свободных электронах ( $\Lambda_{c}$  – кулоновский логарифм) [3], умноженный на фактор  $\mathcal{E} > 1$ , обусловленный резонансным тушением  $n \to n'$  ридберговских уровней при столкновениях с атомами буферного газа (Ne или Ar).

Напротив, если пренебречь влиянием резонансного тушения  $W_{\text{eff}}(\varepsilon)$ , то для коэффициента рекомбинации  $\alpha_{ee}^{\text{cap}} = \beta_{ee}^{\text{cap}} N_e$ , описывающего вклады "диффузионного" механизма [3] и процессов резонансного захвата при столкновениях с атомами буферного газа (2a), получаем выражение

$$\alpha_{ee}^{\rm cap} = \beta_{ee} N_e + N_{\rm B} \int_0^\infty \beta_{e\rm B}(\varepsilon) \frac{\gamma(5/2, |\varepsilon|/T_e)}{\Gamma(5/2)} d|\varepsilon|.$$
(13)

Письма в ЖЭТФ том 108 вып. 9-10 2018

Здесь  $\gamma(z, x)$  – нижняя неполная гамма-функция.

Общее выражение для коэффициента рекомбинации, учитывающее вклад столкновений с электронами и резонансный захват в ридберговские состояния при столкновениях с атомами В, усиленные (благодаря фактору  $\mathcal{E}$ ) резонансными переходами  $n \to n'$  в дискретном спектре, принимает вид:

$$\alpha_{\rm rec} = \beta_{\rm rec} N_e = |j|/(N_e N_{\rm A^+}) = \mathcal{E} \left[ \beta_{ee} N_e + N_{\rm B} \int_0^\infty \beta_{e\rm B}(\varepsilon) d|\varepsilon| \int_0^{|\varepsilon|} Q(\varepsilon') d|\varepsilon'| \right].$$
(14)

**3.** Результаты и обсуждение. Расчеты показывают, что учет резонансного захвата электрона (2a) приводит к значительному увеличению эффективности релаксационных процессов в исследуемых системах. На рисунке 2 приведены зависимости от



Рис. 2. (Цветной онлайн) Отношение коэффициента рекомбинации  $\alpha_{ee}^{\rm cap}$  (13), учитывающего столкновения с электронами (1) и резонансный захват на ридберговские уровни (2а), к стандартному коэффициенту  $\alpha_{ee}$  рекомбинации [1, 3] в столкновениях иона A<sup>+</sup> с электронами. Расчеты выполнены для системы Ar+Xe<sup>+</sup>+e при газовых температурах T = 300 К (кривые 1), 600 К (кривые 2) и 900 К (кривые 3) и степенях ионизации  $\varkappa = 10^{-5}$  и  $10^{-6}$ 

электронной температуры  $T_e$  отношения коэффициента рекомбинации (13) в системе  $\operatorname{Ar}+\operatorname{Xe}^++e$ , учитывающего указанный механизм, к величине коэффициента  $\alpha_{ee}$ , описывающего лишь вклад тройных столкновений с электронами. В соответствии с (13), данное отношение тем выше, чем ниже степень ионизации  $\varkappa$ , и существенно зависит от температур T и  $T_e$ . С ростом газовой температуры, T, происходит уменьшение величины  $\alpha_{ee}^{\operatorname{cap}}$  и вклада механизма резонансного захвата из-за наличия экспоненциального фактора  $\exp(-U_i/T)$  в (6). Напротив, с ростом Те вклад резонансного захвата, а с ним и отношение  $\alpha_{ee}^{\rm cap}/\alpha_{ee}$ , существенно возрастает, что определяется значительно более быстрым спадом первого члена в (13) с ростом T<sub>e</sub>. При низких значениях T<sub>e</sub> и достаточно высоких Т (600 и 900 К) для степени ионизации  $\varkappa = 10^{-5}$  величина  $\alpha_{ee}^{\rm cap}/\alpha_{ee} \approx 1$ , т.е. эффективность процесса резонансного захвата электронов из состояний непрерывного спектра понижается. Однако с ростом  $T_e$  возможность резонансного захвата электрона (2а) на достаточно глубокие уровни атома (см. рис. 1) приводит к резкому увеличению коэффициента рекомбинации: до 5–10 раз при высоких  $\varkappa$  и T и до 3 порядков при  $\varkappa = 10^{-6}$  и T = 300 К. Согласно (13), в этом случае  $\alpha_{ee}^{\rm cap}/\alpha_{ee} \gg 1$ , и кинетика рекомбинации определяется процессами резонансного захвата с участием атомов буферного газа, Ar, и диссоциативной рекомбинации ионов ArXe<sup>+</sup> из всего колебательно-вращательного квазиконтинуума. Коэффициент рекомбинации  $\alpha_{\rm rec}$  становится пропорционален концентрации N<sub>Ar</sub>. При этом отношение  $\alpha_{ee}^{\rm cap}/\alpha_{ee}$  остается достаточно высоким даже при увеличении степени ионизации до  $10^{-4}$ . Расчеты показывают, что основной вклад в резонансный захват в системе  $Ar + Xe^+ + e$  вносит квазидискретный спектр иона ArXe<sup>+</sup>. Доля непрерывного спектра в полной константе захвата оказывается сравнимой с константой скорости традиционного механизма [3].

Для наглядной демонстрации эффекта сильного возрастания коэффициента рекомбинации вследствие резонансного захвата электрона в ридберговские состояния атома Xe(n) в условиях существенного преобладания концентрации атомарных ионов Хе<sup>+</sup> над молекулярными, на рис. 3 и 4 приведены его абсолютные и относительные величины в зависимости от температуры электронов при различных значениях  $\varkappa$  и T. На рисунке За для Ar+Xe<sup>+</sup> + e проведено сравнение абсолютных величин коэффициентов рекомбинации  $\beta$  [см<sup>6</sup> · c<sup>-1</sup>], соответствующих вкладам каждого из рассмотренных механизмов, определяющих кинетику рекомбинации. Целесообразность их сравнения определяется тем, что в отличие от обычного коэффициента рекомбинации  $\alpha$  $[cm^3 \cdot c^{-1}]$  эти величины не зависят от абсолютных значений концентраций электронов или буферного газа, а определяются лишь спецификой того или иного процесса, температурами и степенью ионизации плазмы, *ж*. Видно, что в дополнение к резонансному захвату электрона и традиционному механизму рекомбинации на свободных электронах, принципиальным является учет влияния резонансного тушения при связанно-связанных неадиабатических переходах. Сравнение кривых 1 и 2 (рис. 3а) пока-



Рис. 3. (Цветной онлайн) Сравнение вкладов различных механизмов в коэффициенты рекомбинации в системах  $\operatorname{Ar}+\operatorname{Xe}^++e$  (а) и  $\operatorname{Ne}+\operatorname{Xe}^++e$  (b). Кривая 1 – коэффициент  $\beta_{ee} = \alpha_{ee}/N_e \propto T_e^{-9/2}$  тройной рекомбинации на свободных электронах плазмы (1); 2 – коэффициент  $\beta_{ee}^q = \alpha_{ee}^q/N_e = \beta_{ee}\mathcal{E}$  (12) тройной рекомбинации на свободных электронах, усиленный ( $\mathcal{E} > 1$ ) в результате резонансного тушения  $n \to n'$  атомами буферного газа; 3 – вклад  $\beta_{ee}^{\operatorname{cap}} = \alpha_{ee}^{\operatorname{cap}}/N_e$  (13) тройной рекомбинации на свободных электронах (1) и процессов (2а) резонансного захвата электрона в ридберговские состояния атома  $\operatorname{Xe}(n)$ ; 4 – полный вклад,  $\beta_{\operatorname{rec}} = \alpha_{\operatorname{rec}}/N_e$ , всех процессов (14); 5 – вклад,  $\beta_{n-r} = \alpha_{n-r}/N_e \propto T/(\varkappa T_e^{7/2})$ , нерезонансного механизма [4] тройной рекомбинации в столкновениях с атомами Ar (a) и Ne (b)



Рис. 4. (Цветной онлайн) Отношение полного коэффициента рекомбинации  $\alpha_{\rm rec}$ , учитывающего все рассматриваемые в работе процессы (1) и (2), к значению коэффициента тройной рекомбинации  $\alpha_{ee}$  на свободных электронах плазмы (1). (a) – Ar+Xe<sup>+</sup>+e. (b) – Ne+Xe<sup>+</sup>+e

зывает, что процесс тушения, ускоряющий динамику релаксации рекомбинирующего электрона по вы-

соковозбужденным уровням, приводит к росту эффективности рекомбинации на свободных электронах в несколько раз. Соответствующий коэффицент рекомбинации  $\beta_{ee}^{q}$  (12) при  $T = 700 \,\mathrm{K}$  оказывается близким по величине к значению  $\beta_{ee}^{cap}$  ((13), кривая 3 на рис. За), описывающему суммарный вклад резонансного захвата электрона и "диффузионного" механизма. Вместе с тем, одновременный учет всех трех указанных механизмов (кривая 4 на рис. 3а) по формуле (14) приводит к дополнительному увеличению полного коэффициента рекомбинации до порядка величины. Таким образом, неадиабатические переходы (2b) эффективно ускоряют как нерезонансный (1), так и резонансный (2а) механизмы захвата, причем в случае системы  $Ar + Xe^+ + e$  вследствие достаточной глубины нижнего терма  $U_i(R)$  преобладает эффект, связанный с ускорением рассмотренного в работе процесса резонансного захвата электрона.

Для системы Ne + Xe<sup>+</sup> + e соотношение между эффективностями рекомбинационных механизмов оказывается существенно иным (рис. 3b). Изза малой энергии диссоциации  $D_0^{\text{NeXe}^+}$  прямой резонансный захват на достаточно глубокие уровни ксенона оказывается невозможным. В этих условиях процессы (2a) вносят малый вклад в полный коэффициент рекомбинации и кривые 1 и 3 (рис. 3b) практически совпадают. Учет процесса резонансного тушения значительно увеличивает коэффициент рекомбинации. Эффект оказывается тем больше, чем больше электронная температура. В соответствии с (12),  $\alpha_{ee}^{q}$  имеет довольно сложную зависимость от концентрации N<sub>B</sub> буферного газа. Таким образом, для слабосвязанных молекулярных ионов  $(D_0 \sim kT)$ захват электрона определяется тройными столкновениями со свободными электронами, однако благодаря роли резонансного тушения (2b) полный коэффициент рекомбинации сильно зависит от концентрации атомов N<sub>B</sub>. В общем случае соотношение между рассматриваемыми процессами определяется как величинами электронной и газовой температур, так и структурой нижнего электронного терма иона  $BA^+$ .

Наряду с указанными выше механизмами нами проведены расчеты коэффициента рекомбинации [4], при котором релаксация энергии электрона происходит из-за нерезонансного взаимодействия с атомами В буферного газа (кривые 5 на рис. За, b). Полученные результаты указывают на то, что соответствующий вклад,  $\beta_{n-r} = \alpha_{n-r}/N_e$ , от традиционного нерезонансного механизма рекомбинации,  $\alpha_{n-r} =$  $= 16(2\pi)^{1/2}N_B\sigma_{eB}^{tr}T/(3\mu T_e^{7/2})$ , оказывается на 2–3 порядка ниже вклада от резонансного захвата электрона ( $\sigma_{eB}^{tr}$  – транспортное сечение рассеяния частиц  $e \rightarrow B, \mu$  – приведенная масса атомов A и B).

Рассмотрим, как зависит эффект увеличения скорости рекомбинации вследствие резонансных процессов от степени ионизации плазмы  $\varkappa$ . На рисунке 4 представлено отношение полного коэффициента рекомбинации, вычисленного по формуле (14), к значению коэффициента рекомбинации  $\alpha_{ee}$ , не учитывающего влияние резонансных переходов. Данное отношение в явном виде характеризует усиление рекомбинации в результате резонансных процессов. При  $\varkappa = 10^{-7}$  процессы (2) приводят к росту скорости рекомбинации от нескольких раз при малых T<sub>e</sub> до нескольких порядков величины при  $T_e = 5000 \, \mathrm{K}.$ Вместе с тем, расчеты показывают, что даже при степенях ионизации порядка  $10^{-4}$  (для Ar+Xe<sup>+</sup>+e) и  $10^{-5}$  (для Ne+Xe<sup>+</sup>+e), характерных для плазмы, создаваемой мощным электронным пучком или импульсным разрядом, формула (14) предсказывает, что резонансные переходы увеличивают коэффициент рекомбинации в 2-3 раза. Лишь при дальнейшем увеличении ж при наличии резонансных процессов доминирующим становится традиционный механизм тройной рекомбинации на свободных электронах [3].

Сравнение результатов, изображенных на рис. 2, 3, указывает на важность одновременного самосогласованного описания всех рассматриваемых резонансных механизмов: отличие  $\beta_{ee}^{cap}$  и  $\beta_{ee}^{q}$  от  $\beta_{\rm rec}$ достигает порядка величины. В зависимости от специфики электронных термов конкретной системы и физических условий могут преобладать как связанно-связанные (2b), так и свободно-связанные (2a) переходы. Обычно  $\alpha_{ee}^{q}$  слабо изменяется с ростом газовой температуры. Напротив, как видно из рис. 2, для системы  $Ar+Xe^+ + e$  величина  $\alpha_{ee}^{cap}$ резко спадает с ростом Т. Таким образом, механизм резонансного тушения преобладает над резонансным захватом электронов в условиях высоких газовых температур Т и малых значений энергии диссоциации D<sub>0</sub>. Роль резонансного захвата электрона из непрерывного спектра оказывается определяющей при  $T \lesssim 500 \,\mathrm{K}$  в случае не слишком малых значений  $D_0$ .

4. Заключение. Дано аналитическое решение задачи об электрон-ионной рекомбинации и релаксации энергии электронного возбуждения по ридберговским уровням атома Xe(n) в плазме смесей инертных газов Ne/Xe и Ar/Xe ( $N_{Xe} \ll N_{Ne}, N_{Ar}$ ). Построена кинетическая модель основных процессов и рассчитаны коэффициенты рекомбинации в широком диапазоне значений  $T_e$ , T и степеней ионизации  $\varkappa$  в условиях существенного преобладания доли ато-

Письма в ЖЭТ<br/>Ф  $\,$ том 108  $\,$  вып. 9 – 10  $\,$  2018

марных ионов Xe<sup>+</sup> по сравнению с гетероядерными ионами NeXe<sup>+</sup> или ArXe<sup>+</sup>. Основное внимание было уделено исследованию роли резонансного захвата (2а) электронов в ридберговские состояния атома Xe(n) и резонансных переходов  $n \to n'$  в дискретном спектре (2b) в кинетике релаксации энергии электрона и анализу их вкладов в результирующий коэффициент рекомбинации в сравнении с вкладами известных механизмов рекомбинации электронов с ионами Хе<sup>+</sup> в тройных столкновениях с электронами [3] и атомами буферного газа [4]. Установлено, что наличие эффективных неадиабатических резонансных процессов радикально изменяет физическую картину рекомбинации и в широком диапазоне параметров плазмы, представляющих интерес для практических приложений, приводит к резкому увеличению скорости рекомбинации. Показано, что относительное влияние свободно-связанных и связанно-связанных резонансных переходов электрона зависит от параметров плазмы  $(T_e, T \, \mathrm{u} \, \varkappa)$  и оказывается качественно различным для систем  $Ar+Xe^++e$  и  $Ne+Xe^++e$ . Проведенные в работе исследования лежат в русле работ по кинетике и спектроскопии плазмы смесей инертных газов, которая широко используется в настоящее время в качестве активной среды мощных газовых и плазменных лазеров [18, 19], для создания эффективных источников узкополосного вакуумного ультрафиолетового излучения [20] и разработки массивов микроплазменных ячеек атмосферного давления [21].

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант #14-22-00273).

- 1. D. R. Bates, Adv. At. Mol. Phys. Eds. 15, 235 (1979).
- Л. М. Биберман, В. С. Воробьев, И. Т. Якубов, Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы, Наука, М. (1982).
- А.В. Гуревич, Л.П. Питаевский, ЖЭТФ 46, 1281 (1964).
- 4. Л.П. Питаевский, ЖЭТФ **42**, 1326 (1962).
- В. А. Иванов, В. С. Лебедев, В. С. Марченко, ЖЭТФ 94(11), 86 (1988).
- R. Plašil, P. Dohnal, Á. Kálosi, Š. Roučka, R. Johnsen, and J. Glosík, Plasma Sources Sci. Technol. 26, 035006 (2017).
- А. А. Бобров, С. Я. Бронин, Б. Б. Зеленер, Э. А. Маныкин, Д. Р. Хихлуха, ЖЭТФ 144, 185 (2013).
- J. Wolf, M. Deiß, A. Krükow, E. Tiemann, B. P. Ruzic, Y. Wang, J. P. D'Incao, P. S. Julienne, and J. Hecker Denschlag, Science 358, 921 (2017).
- A. A. Mihajlov, V. A. Srećkovi<sup>'</sup>c, Lj. M. Ignjatović, and M. S. Dimitrijević, MNRAS 458, 2215 (2016).

- С. И. Яковленко, в кн.: Энциклопедия низкотемпературной плазмы, под ред. В. Е. Фортова, Физматлит, М. (2005), сер. Б. т. XI-4, с. 26.
- 11. А.В. Елецкий, Б.М. Смирнов, УФН 136, 25 (1982).
- M. Larsson and A. E. Orel, Dissociative Recombination of Molecular Ions, Cambridge University Press, N.Y. (2008).
- T. V. Tsankov, R. Johnsen, and U. Czarnetzki, Plasma Sources Sci. Technol. 24, 065001 (2015).
- В. А. Иванов, А. С. Петровская, Ю. Э. Скобло, Оптика и спектроскопия 123, 689 (2017).
- I.L. Beigman and V.S. Lebedev, Phys. Rep. 250, 95 (1995).
- 16. В.А. Иванов, УФН **162**, 35 (1992).

- V. S. Lebedev, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 24, 1993 (1991).
- А. П. Минеев, А. П. Дроздов, С. М. Нефедов, П. П. Пашинин, П. А. Гончаров, В. В. Киселев, Квантовая электроника 42, 575 (2012).
- J. P. Apruzese, J. L. Giuliani, M. F. Wolford, J. D. Sethian, G. M. Petrov, D. D. Hinshelwood, M. C. Myers, A. Dasgupta, F. Hegeler, and Ts. Petrova, J. Appl. Phys. **104**, 013101 (2008).
- M. I. Lomaev, E. A. Sosnin, and V. F. Tarasenko, Chem. Eng. Technol. **39**, 39 (2016).
- A. R. Hoskinson, A. Yared, and J. Hopwood, Plasma Sources Sci. Technol. 24, 055002 (2015).