

Федеральное государственное  
бюджетное учреждение науки  
«Физический институт имени П.Н.Лебедева  
Российской академии наук»

---

На правах рукописи

Кислов Константин Сергеевич

Резонансные процессы неадиабатического обмена  
энергии электронов и фотонов с молекулярными ионами  
в плазме инертных газов

Специальность 01.04.05 — Оптика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени  
кандидата физико-математических наук

Москва – 2020 г.

Работа выполнена в Физическом институте им. П.Н.Лебедева Российской академии наук.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук  
**Лебедев Владимир Сергеевич**

Научный консультант: кандидат физико-математических наук  
**Нариц Александр Александрович**

Официальные оппоненты: **Бычков Владимир Львович**  
доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник Отделения радиофизики Физического факультета МГУ им. В.Н. Ломоносова  
**Лисица Валерий Степанович**  
доктор физико-математических наук, профессор, начальник лаборатории теории излучения, Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»

Ведущая организация: Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт спектроскопии Российской Академии Наук (ИСАН)

Защита диссертации состоится 7 декабря 2020 г. в 11 час. на заседании диссертационного совета Д 002.023.03 Физического института им. П.Н.Лебедева Российской академии наук по адресу: 119991, Москва, Ленинский проспект, 53.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФИАН им. П.Н. Лебедева

<https://www.lebedev.ru/ru/fian-dissertation-councils/posts.html?id=368>

Автореферат разослан «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2020 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета Д 002.023.03  
доктор физико-математических наук

**Золотко А. С.**

# Общая характеристика работы

## Актуальность темы исследования

Элементарные радиационные и столкновительные процессы, происходящие с участием или образованием молекулярных и атомарных ионов, а также процессы релаксации энергии электронного возбуждения по атомным уровням представляют огромный интерес для спектроскопии, кинетики и диагностики низкотемпературной плазмы [1–3], физики звездных и планетных атмосфер [4, 5], физики и химии ранней Вселенной [6, 7]. Информация о наиболее эффективных физических механизмах такого рода процессов и надежные данные об их сечениях и константах скоростей необходимы для многих приложений физики плазмы, а также для выяснения основных каналов и эффективных способов формирования инверсной заселенности в активных средах газовых и плазменных лазеров. Большой интерес для решения многих фундаментальных и прикладных проблем современной оптики и спектроскопии, атомной и молекулярной физики, физики плазмы и плазмохимии представляют, в частности, резонансные процессы неадиабатического обмена энергии электронов и фотонов с молекулярными и квазимолекулярными ионами. К числу изучаемых в диссертации процессов относится фотодиссоциация, прямое диссоциативное возбуждение и диссоциативная рекомбинация молекулярных ионов, а также тройная рекомбинация электронов с ионами с образованием атомов в ридберговских состояниях, переходы между высоковозбужденными атомными уровнями  $n-n'$  при столкновениях с нейтральными и заряженными частицами и свободно-свободные фотопереходы при столкновениях атомов и ионов.

Указанные процессы будут исследованы в диссертационной работе в широком диапазоне температур и степеней ионизации в плазмах смесей инертных газов, возбуждаемых электронным пучком, импульсными разрядами или в результате оптической накачки. Исследования указанных процессов в смесях инертных газов представляют значительный интерес для разработки эффективных источников ВУФ-излучения [8] и мощных газовых и плазменных лазеров [9–12]. Изучаемые процессы происходят в результате механизма неадиабатического обмена энергией между внешним и внутренними электронами системы, состоящей из электрона и молекулярного или квазимолекулярного иона, образованного в ходе столкновения атомарного иона с нейтральной частицей буферного газа. Актуальность исследования подобного рода механизмов связана с тем, что в целом ряде случаев указанные переходы вносят определяющий вклад в заселение возбужденных и высоковозбужденных состояний атомов, что имеет принципиальное значение для ряда практических приложений. В

частности, известно, что диссоциативная рекомбинация гетероядерных и гомоядерных ионов инертных газов играет важную роль в формировании инверсной заселенности в активной среде мощного ксенонового лазера ИК-диапазона, функционирующего на переходе  $5d \rightarrow 6p$  [13, 14]. Кроме того, согласно оценкам (см., например, [14]), заселение верхних состояний рабочих переходов происходит преимущественно не прямым способом, а в результате захватов электронов на ридберговские уровни и серии столкновительных резонансных переходов, сопровождающихся девозбуждением атома ксенона. К этому следует добавить, что по теоретическим оценкам [15, 16], резонансный механизм трехчастичного захвата электронов атомарными ионами и столкновительного тушения энергии электронного возбуждения атомов может существенно увеличивать эффективность электрон-ионной рекомбинации в плазме смесей инертных газов.

Это указывает на актуальность проведения надежных расчетов сечений и констант скоростей указанных выше процессов. При этом особое внимание должно быть уделено исследованию резонансных механизмов радиационных переходов, а также процессов захвата электронов атомарными и молекулярными ионами и неупругих переходов между уровнями атомов ввиду их определяющей роли при заселении возбужденных и высоковозбужденных состояний атомов. Построенная в работе теория и полученные на ее основе конкретные результаты создадут надежную основу для дальнейшего построения кинетики электрон-ионной рекомбинации и релаксации низкотемпературной плазмы смесей инертных газов, а также для изучения ее излучательных свойств и проведения детальной спектроскопической диагностики.

## **Цель диссертации и решаемые задачи**

Основная цель диссертационной работы состоит в теоретическом исследовании ряда эффективных резонансных процессов, происходящих при столкновениях молекулярных и квазимолекулярных ионов с электронами и фотонами в низкотемпературной плазме инертных газов. К ним относятся процессы фотодиссоциации, диссоциативной рекомбинации и диссоциативного возбуждения сильновозбужденных связанных молекулярных ионов электронным ударом, сопровождающиеся адиабатическими переходами между их различными электронными термами. Помимо этого, к ним относятся резонансные процессы неадиабатического обмена энергии внешнего электрона с квазимолекулярными ионами, образующимися в ходе столкновения атомарных ионов с атомами буферного газа (трехчастичный захват электрона ионом и переходы между ридберговскими уровнями), а также свободно-свободные радиационные переходы при взаимодействии фотонов с квазимолекулярными ионами. В качестве кон-

кретных объектов исследования выбраны гомоядерные и гетероядерные ионы инертных газов с сильно различающимися друг от друга значениями энергии диссоциации в диапазоне от 30 мэВ до 1 эВ.

В диссертации сформулированы и решены следующие задачи:

- Разработка самосогласованных теоретических моделей и вывод полуаналитических формул для сечений и констант скоростей резонансных механизмов диссоциативной рекомбинации электронов с сильновозбужденными молекулярными ионами и трехчастичного захвата электронов атомарными ионами при столкновениях с нейтральными частицами с образованием атомов в ридберговских состояниях.
- Сравнительный анализ эффективностей резонансных механизмов диссоциативной и трехчастичной электрон-ионной рекомбинации в условиях, типичных для низкотемпературной плазмы смесей инертных газов. Установление характера зависимостей эффективных сечений и констант скоростей указанных процессов от степени ионизации и температур электронной и ионной компонент плазмы, а также от параметров молекулярных ионов, в том числе от величины их энергии диссоциации.
- Расчет абсолютных вкладов процессов резонансного захвата электронов ионами и резонансных неупругих переходов между высоковозбужденными уровнями  $n \rightarrow n'$  и установление относительной роли этих процессов в динамике заселения ридберговских состояний атомов инертных газов.
- Вывод аналитических выражений импульсного приближения для сечений и констант скоростей процесса захвата электронов атомарными ионами на ридберговские уровни  $nl$  при столкновениях с нейтральными частицами в результате нерезонансного механизма передачи энергии налетающего электрона в кинетическую энергию относительного движения частиц  $A(nl)$  и  $B$ .
- Выяснение роли процессов резонансного захвата электронов атомарными ионами на ридберговские уровни и резонансного тушения высоковозбужденных состояний атомов путем сравнения их констант скоростей с соответствующими величинами для традиционных механизмов нерезонансного захвата и неупругого тушения энергии электронного возбуждения атомов при столкновениях со свободными электронами и нейтральными частицами плазмы.
- Построение квазиклассической модели расчета сечений и констант скоростей процесса резонансной диссоциации молекулярных ионов электронным ударом. Сравнение вкладов и выяснение доминирующей роли процессов прямой диссоциации и диссоциативной рекомбинации гомоядерных и гетероядерных ионов инертных газов в разрушении этих ионов в плазме в зависимости от их энергии диссоциации и температуры.
- Расчеты и исследование поведения эффективных сечений и коэффициентов

поглощения света в процессах фотодиссоциации гомоядерных ионов инертных газов и свободно-свободных радиационных переходов при столкновениях атомов и атомарных ионов. Сравнительный анализ вкладов указанных процессов в результирующий спектр фотопоглощения в широкой области температур квазиравновесной плазмы.

– Сравнение полученных в диссертации результатов расчетов с имеющимися в литературе теоретическими и экспериментальными данными.

## **Научная новизна работы**

Одна из наиболее важных особенностей исследуемых в работе процессов заключается в том, что они протекают в условиях эффективного теплового возбуждения огромного числа их колебательно-вращательных состояний и сопровождаются неадиабатическими переходами между различными электронными термами молекулярных и квазимолекулярных ионов. В представленной работе впервые проведено детальное исследование указанных процессов в случае слабосвязанных ( $D_0 = 33$  мэВ для  $\text{NeXe}^+$ ) и умеренносвязанных ( $D_0 = 171$  и  $400$  мэВ для  $\text{ArXe}^+$  и  $\text{KrXe}^+$ ) гетероядерных ионов инертных газов. Надежных сведений об элементарных процессах с участием таких ионов ранее в литературе практически не было. Важным элементом научной новизны является разработанный в диссертации оригинальный теоретический подход, основанный на квазиклассической версии теории неадиабатических переходов и на приближении квазинепрерывного спектра колебательно-вращательных уровней молекулярных ионов. Благодаря данному подходу имеется возможность относительно простым полуаналитическим образом рассчитать интегральный вклад всего колебательно-вращательного квазиконтинуума молекулярного иона в динамику исследуемых резонансных процессов. Это имеет чрезвычайно важное значение, поскольку прямое решение поставленных в диссертации задач, исходя из первых принципов, связано с колоссальными вычислительными трудностями из-за необходимости учета огромного числа состояний, вовлеченных в динамику рассматриваемых неадиабатических переходов. Еще одним принципиально новым элементом диссертационной работы является исследование динамики резонансных процессов трехчастичного захвата электронов атомарными ионами в ридберговские состояния атомов при столкновениях с нейтральными атомными частицами плазмы в ходе электрон-ионной рекомбинации, а также демонстрация важной (а в ряде случаев и доминирующей) роли этого процесса в низкотемпературной плазме смесей инертных газов, содержащей слабосвязанные ионы инертных газов. Таким образом, в случае слабосвязанных молекулярных ионов в работе впервые установлена ключевая роль состояний

непрерывного спектра относительного движения их ядер в динамике релаксации и электрон-ионной рекомбинации в плазме смесей инертных газов. Научно-значимыми для оптики и спектроскопии плазмы инертных газов являются также полученные в диссертации результаты расчета эффективных сечений и интегрального вклада всего колебательно-вращательного квазиконтинуума в полный коэффициент непрерывного поглощения света гомоядерными ионами, обусловленный связанно-свободными и свободно свободными фотопереходами.

## Научная и практическая ценность работы

Полученная в диссертационной работе новая информация о физических механизмах и количественные данные о динамических характеристиках исследуемых резонансных процессов неадиабатического обмена энергии электронов и фотонов с молекулярными ионами существенно расширяют устоявшиеся представления о роли этих процессов в спектроскопии и кинетике электрон-ионной рекомбинации и релаксации энергии электронного возбуждения в низкотемпературной плазме смесей инертных газов. Благодаря этим данным появляются возможности для дальнейшей модификации уже имеющихся и для разработки принципиально новых кинетических моделей радиационно-столкновительных процессов в такого рода неравновесной плазме, применяемой во многих практических приложениях. К ним, в частности, относятся широко проводимые исследования и разработки в области мощных газовых лазеров и эффективных источников излучения ВУФ-диапазона. Сведения об эффективности резонансных процессов фотодиссоциации, диссоциативной рекомбинации и диссоциативного возбуждения молекулярных ионов аргона электронным ударом важны, например, при разработке лазеров с оптической накачкой на инертных газах. В свою очередь, данные о сечениях и константах скоростей процессов резонансного захвата электронов ионами на фиксированные ридберговские уровни и переходов между ними необходимы при исследовании каналов образования инверсной заселенности на переходах  $5d - 6p$  атома ксенона в работах по созданию мощных инфракрасных лазеров на смесях Ar/Xe. В этом контексте значимость для спектроскопии и кинетики плазмы, а также для приложений к лазерной физике представляет проведенный в работе сравнительный анализ эффективностей процессов диссоциативной рекомбинации и прямой диссоциации гомоядерных,  $\text{Xe}_2^+$ , и гетероядерных ионов,  $\text{ArXe}^+$ , электронным ударом. Полученные в диссертации результаты необходимы также для приложений к кинетике и спектроскопии плазмы послесвечения импульсных газовых разрядов и плазмы смесей инертных газов, возбуждаемых электронным пучком или в результате оптической накачки.

## Достоверность полученных результатов

Для расчетов сечений и констант скоростей изучаемых в работе резонансных и нерезонансных процессов в плазме в диссертации был использован ряд самосогласованных теоретических подходов и современных методов спектроскопии и атомно-молекулярной физики, доказавших свою эффективность и надежность в применениях к решениям многих физических проблем. При реализации развитых в работе теоретических методов и численных алгоритмов были использованы современные надежные данные по кривым потенциальной энергии и спектроскопическим параметрам гомоядерных и гетероядерных ионов инертных газов. При исследовании резонансных механизмов диссоциативного и трехчастичного захвата на ридберговские уровни были использованы надежные современные данные по энергетической структуре электронных уровней ридберговских атомов инертных газов. Достоверность полученных результатов расчета непосредственно подтверждена хорошим качественным и количественным согласием с имеющимися в литературе экспериментальными и теоретическими данными.

## Положения, выносимые на защиту

1. При резонансном захвате электронов на ридберговские уровни атомов в плазме смесей инертных газов, содержащей атомарные и молекулярные ионы, тройная рекомбинация в столкновениях электронов с атомарными ионами,  $A^+$ , и атомами,  $B$ , буферного газа доминирует в гетероядерных системах  $BA^+ + e$  с малой энергией диссоциации,  $D_0$ , иона  $BA^+$  ( $D_0 \lesssim 10-50$  meV), а диссоциативная рекомбинация молекулярных ионов,  $BA^+$ , с электронами – в системах с большими и промежуточными значениями  $D_0 \gtrsim 0.1 - 1$  eV.
2. В процессах тройной электрон-ионной рекомбинации и заселения низколежащих ридберговских уровней атомов  $Xe$  в плазмах смесей инертных газов  $Rg/Xe$  ( $[Xe] \ll [Rg]$ ,  $Rg = Ar, Kr$ ) резонансные механизмы захвата электронов ионами преобладают над нерезонансными в столкновениях с атомами буферного газа и с электронами в широкой области температур и степеней ионизации плазмы  $\kappa$ . Эффекты резкого возрастания скорости рекомбинации проявляются при этом вплоть до значений  $\kappa \lesssim 10^{-5}$ , а при более высоких  $\kappa$  доминируют столкновения с электронами.
3. Вклад процесса резонансного диссоциативного возбуждения в полную скорость разрушения молекулярных ионов инертных газов электронным ударом существенно возрастает по мере увеличения температуры  $T_e$  и сильно



зависит от значения энергии диссоциации  $D_0$ . Для слабосвязанных гетероядерных ионов с энергией  $D_0 < 100$  мэВ ( $\text{NeXe}^+$ ) этот процесс доминирует над альтернативным каналом резонансного распада ионов (диссоциативной рекомбинацией) практически во всей области температур электронов, в том числе и при  $T_e \sim 300$  К.

4. В процессах столкновения гомоядерных ионов инертных газов,  $\text{Rg}_2^+$ , с электронами в зависимости от температуры  $T_e$  реализуются три различных канала их разрушения: (i) диссоциативная рекомбинация с заселением низких электронных уровней атомов, (ii) диссоциативная рекомбинация с заселением ридберговских уровней, (iii) прямое диссоциативное возбуждение молекулярного иона. При низких  $T_e$  доминирует канал (i) разрушения иона; с увеличением  $T_e \gtrsim 5000$  К сначала проявляется канал (ii), а при дальнейшем росте  $T_e \gtrsim 10000$  К включается канал (iii), который становится доминирующим при  $T_e \gtrsim 40000$  К.
5. В процессе фотодиссоциации гомоядерных ионов инертных газов,  $\text{Rg}_2^+$ , при достаточно низких температурах  $T \lesssim 1000$  К у коэффициентов поглощения света наблюдается явно выраженный максимум в области энергий квантов  $\hbar\omega \gtrsim 1$  эВ. Его положение определяется величиной расщепления электронных термов иона, между которыми происходят неадиабатические переходы. При увеличении температуры максимум становится более высоким, а его положение смещается в сторону более низких энергий  $\hbar\omega$ .
6. При высоких температурах наряду с фотодиссоциацией гомоядерных ионов инертных газов существенную роль в процессе фотопоглощения играют свободно-свободные радиационные переходы между различными электронными термами квазимолекулярного иона,  $\text{Rg}_2^+$ . Их вклад становится сопоставимым с вкладом фотодиссоциации при  $T \gtrsim 3000 - 5000$  К.

## **Личный вклад автора диссертации**

Личный вклад автора диссертации состоит в проведении всех численных расчётов, в подборе и анализе литературы по теме диссертации, в активном участии в обсуждении постановки задач, в совместном с соавторами анализе полученных результатов и написании статей, в формулировке основных выводов диссертации.

## **Апробация работы**

Основные результаты диссертации опубликованы в 8 статьях в рецензируемых журналах, индексируемых базами Web of Science и Scopus. Кроме того,

основные результаты диссертации были отражены в 11 докладах, представленных на российских и международных конференциях: «Импульсная Сильноточная Вакуумная и Полупроводниковая Электроника» ИСВПЭ-2017 (19-20 октября 2017, ФИАН); 60-я Всероссийская научная конференция МФТИ, ФИАН, 23 ноября 2017; The Fifth MIPT-UEC-LPI International Workshop on Atomic, Molecular and Optical Physics, Moscow, 1-3 October, 2018; XXXI International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions Deauville, France, July 23-30, 2019; Школа молодых ученых «Быстропротекающие электровзрывные, электронные и электромагнитные процессы в импульсной электронике и оптоэлектронике» БПИО-2019, 12-14 ноября, ФИАН; 62-я Всероссийская научная конференция МФТИ, ФИАН, 18 ноября 2019. Список публикаций автора по теме диссертации представлен на с. 25–27 автореферата.

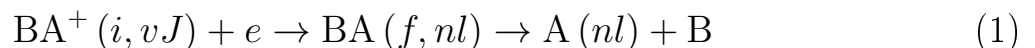
## Структура и объем диссертации

Диссертация включает в себя Введение, шесть глав основного текста, заключение и список литературы. Объем диссертации составляет 173 страницы текста, в том числе 31 рисунок, 188 наименований в списке литературы.

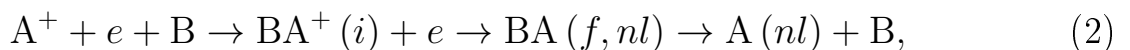
## Содержание диссертации

Во **введении** представлено обоснование актуальности исследования, сформулированы ключевые цели работы и решаемые задачи, обоснована новизна научного исследования и достоверность полученных результатов, а также представлен список выносимых на защиту положений.

В **Главе 1** описано современное состояние исследований по тематике работы. Приведена классификация ключевых механизмов захвата и связанно-связанных переходов с участием ридберговских атомов в лабораторной низкотемпературной плазме, возбуждаемой импульсными разрядами или электронным пучком. К изучаемым в диссертации резонансным процессам относится диссоциативная рекомбинация молекулярных ионов с электронами:

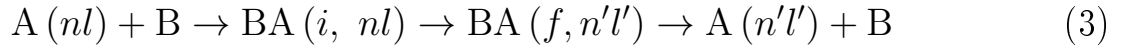


и резонансный захват электронов атомарными ионами в тройных столкновениях с нейтральными атомными частицами:



а также неупругие резонансные переходы  $n \rightarrow n'$  между высоковозбужденными уровнями атома А, которые сопровождаются неадиабатическими переходами

ми  $i \rightarrow f$  между различными электронными термами образовавшегося в ходе столкновения квазимолекулярного иона  $BA^+$ :

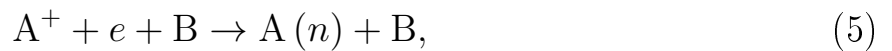


Здесь  $n, n'$  и  $l, l'$  – главное и орбитальное квантовые числа ридберговских атомов  $A(nl)$  и  $A(n'l')$ ,  $v$  и  $J$  – колебательное и вращательное квантовые числа иона  $BA^+$  в начальном электронном состоянии  $i$ .

Помимо резонансных каналов захвата и связанно-связанных переходов, в диссертации рассмотрены традиционные механизмы рекомбинации и релаксации энергии электронного возбуждения при столкновениях с электронами и нейтральными атомными частицами. К указанным процессам относятся процессы нерезонансного захвата электронов ионами на ридберговские уровни  $n$  в тройных столкновениях со свободными электронами плазмы



и нейтральными частицами буферного инертного газа:



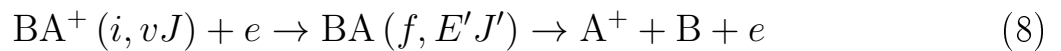
а также нерезонансные переходы  $n \rightarrow n'$  между ридберговскими уровнями при столкновениях с электронами



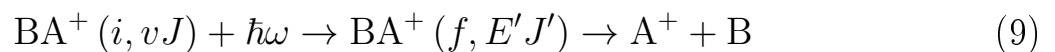
и нейтральными частицами буферного газа



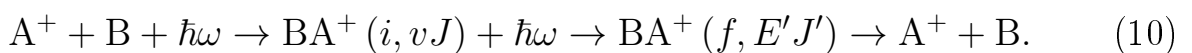
В Главе 1 кратко обсуждаются также изучаемые в диссертации резонансные неадиабатические процессы, приводящие к разрушению молекулярных ионов инертных газов  $BA^+$ . К ним относится процесс прямого диссоциативного возбуждения молекулярных ионов электронным ударом



а также процессы неадиабатического обмена энергии молекулярных ионов с фотонами, а именно фотодиссоциация



и свободно-свободные радиационные переходы



Здесь  $E'$  — энергия относительного движения ядер в конечном канале реакции.

В Главе 1 названы проблемы и научные направления, для которых исследование указанных выше механизмов представляет наибольший интерес. Кратко перечислены основные физические подходы и методы описания исследуемых процессов, а также указаны некоторые экспериментальные и теоретические работы, в которых были получены важные результаты по теме диссертации.

В **Главе 2** разработан оригинальный теоретический подход для описания традиционного нерезонансного механизма трехчастичного захвата электронов атомарными ионами при столкновениях с атомами буферного газа (5). Выведены аналитические выражения для эффективных сечений  $\sigma_{\varepsilon \rightarrow n}^{\text{cap}}(E)$  [ $\text{см}^4 \cdot \text{с}$ ] и констант скоростей  $\beta_n^{\text{cap}}(T_e, T)$  [ $\text{см}^6 \cdot \text{с}^{-1}$ ] этого процесса (5) в плазме с электронной температурой  $T_e$  и газовой температурой  $T$ . В рассматриваемом механизме захвата происходит непосредственная передача кинетической энергии налетающего электрона в энергию относительного движения атомов  $A(n)$  и  $B$ . В основе используемого подхода лежит импульсное приближение [17] в комбинации с модифицированной теорией эффективного радиуса для рассеяния медленных электронов, что позволяет корректным образом учесть влияние эффектов короткодействующего и поляризационного взаимодействия электрона с атомом буферного газа [18]. Установлены критерии применимости выведенных аналитических выражений и определены характерные значения параметров задачи (главное квантовое число  $n$ , газовая и электронная температуры в плазме смесей инертных газов), при которых использование данных выражений правомерно.

**Глава 3** посвящена разработке и применению теоретических моделей для описания исследуемых в диссертации резонансных процессов (1) и (2) захвата электронов на ридберговские уровни атомов ксенона в низкотемпературной плазме смесей инертных газов  $\text{Rg}/\text{Xe}$  ( $[\text{Xe}] \ll [\text{Rg}]$ ). В рамках разработанного теоретического подхода процессы (1) и (2) рассматриваются единообразно, как результат неадиабатического обмена энергии электронов с молекулярными ионами  $\text{VA}^+$  и квазимолекулярными ионами, образующимися в ходе столкновения атомарного иона  $A^+$  с нейтральной частицей  $B$ .

Выражения для сечений резонансных процессов диссоциативного (1) и трехчастичного (2) захвата электронов ионами были получены с использованием формул для процессов резонансной прямой и ассоциативной ионизации из работы [19] и соотношения детального баланса для взаимно обратных процессов, происходящих с участием состояний непрерывного спектра. Для описания неадиабатических переходов в классически разрешенных областях межъядерного расстояния  $R$  использовалось квазиклассическое приближение для матричных элементов оператора взаимодействия. Одна из главных оригинальных

особенностей используемого подхода состояла в том, что при изучении диссоциативной рекомбинации (1) был реализован алгоритм расчета интегрального вклада всего квазиконтинуума  $vJ$ -состояний молекулярного иона в динамику резонансного захвата электронов. Это позволило рассматривать резонансные процессы (1) и (2) единым образом и, при условиях квазиравновесия плазмы по ядерному движению, прямым образом сравнивать их эффективность и рассчитывать совокупный вклад в вероятности заселения возбужденных и высоковозбужденных состояний атомов.

На основе используемого подхода в Главе 3 диссертации получены квазиклассические формулы для сечений  $\sigma_{nl,\varepsilon}^{\text{dr}}(T)$  [ $\text{см}^2$ ] и  $\sigma_{nl,\varepsilon}^{\text{tr}}(E)$  [ $\text{см}^4 \cdot \text{с}$ ] резонансных процессов (1) и (2). Расчеты соответствующих констант скоростей  $\alpha_{nl}^{\text{dr}}(T_e, T) = \langle v_e \sigma_{nl,\varepsilon}^{\text{dr}}(T) \rangle_{T_e}$  [ $\text{см}^3 \cdot \text{с}^{-1}$ ] и  $\beta_{nl}^{\text{tr}}(T_e, T) = \langle v_e \langle V \sigma_{nl,\varepsilon}^{\text{tr}}(E) \rangle_T \rangle_{T_e}$  [ $\text{см}^6 \cdot \text{с}^{-1}$ ] производились путем численного интегрирования по функциям распределения скоростей свободных электронов  $v_e$  и скоростей  $V$  относительного движения частиц  $A^+$  и  $B$ . По умолчанию во всех расчетах применялось максвелловское распределение, если не оговаривалось обратное.

В результативной части Главы 3 рассмотрен широкий комплекс вопросов, связанных с анализом эффективности и установлением основных свойств резонансных (1) и (2) и традиционных нерезонансных процессов (4) и (5) заселения ридберговских уровней в лабораторной плазме инертных газов. Особое внимание уделено изучению свойств и роли резонансных каналов захвата (1), (2) захвата электронов ионами. Одна из основных решаемых в Главе 3 задач состояла в разработке оригинального способа расчета, необходимого для проведения сравнительного анализа эффективностей исследуемых резонансных процессов диссоциативной (1) и трехчастичной (2) рекомбинации. Большинство расчетов сечений и констант скоростей процессов (1) и (2) были проведены для случая смесей инертных газов  $Rg/Xe$  ( $Rg = Ne, Ar$  и  $Kr$ ) при малых концентрациях ксенона ( $[Xe] \ll [Rg]$ ) в условиях, характерных для плазмы послесвечения разрядов или плазмы, возбуждаемой электронным пучком. При этом рассматривалась плазма с электронной температурой  $T_e$  и газовой температурой  $T$ . Газовая температура варьировалась в диапазоне  $T \approx 300 \div 1000$  К, а электронная температура  $T_e$  – в диапазоне  $T_e \approx 300 \div 5000$  К. Важная особенность исследуемых столкновительных систем  $Rg + Xe^+ + e$  состоит в том, что гетероядерные ионы  $RgXe^+$  имеют сравнительно низкие энергии диссоциации  $D_0$  основного терма ( $D_0(NeXe^+) = 33$  meV,  $D_0(ArXe^+) = 171$  meV,  $D_0(KrXe^+) = 400$  meV). Поэтому при рассматриваемых газовых температурах уровни  $vJ$  оказываются сильновозбужденными, что позволяет использовать приближение колебательно-вращательного квазиконтинуума.

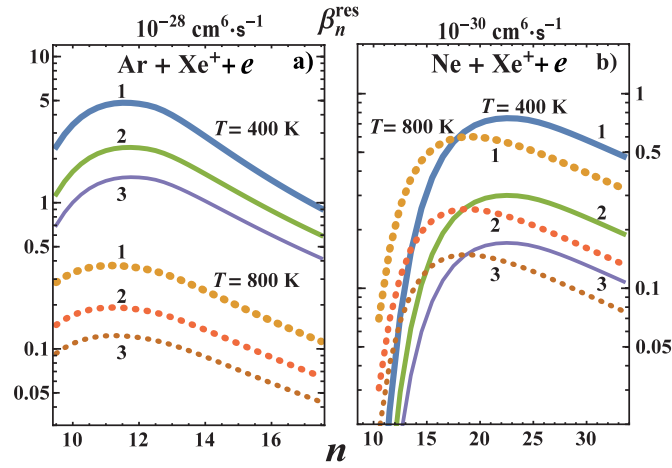


Рис. 1: Полные константы скорости,  $\beta_n^{\text{res}}(T_e, T) = \beta_n^{\text{tr}} + \beta_n^{\text{dr}}$ , резонансного захвата электронов на ридберговские уровни  $n$  для систем  $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$  (а) и  $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$  (б) при газовых температурах  $T = 400$  К (сплошные кривые) и  $800$  К (пунктирные кривые) и электронных температурах  $T_e = 1000, 2000$  и  $3000$  К (кривые 1, 2 и 3).

На рис. 1 представлены графики зависимости полных констант скорости резонансного захвата  $\beta_n^{\text{res}}(T_e, T)$  на уровни  $n$  атома ксенона в столкновительных системах  $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$  (рис. 1а) и  $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$  (рис. 1б) при температурах  $T = 400$  К и  $800$  К и  $T_e = 1000, 2000$  и  $3000$  К. Из рисунка видно, что для каждого заданного набора величин  $T$  и  $T_e$  константа скорости резонансного трехчастичного захвата электронов ионами  $\beta_n^{\text{res}}(T_e, T)$  имеет явно выраженный максимум в зависимости от главного квантового числа  $n$ , т.е. происходит преимущественное заселение определенных ридберговских уровней. Положение данного максимума можно оценить из условия, что захват на уровень  $n$  происходит вблизи положения равновесия,  $R_e$ , молекулярного иона  $\text{RgXe}^+$ . Отсюда следует, что по мере роста энергии диссоциации молекулярных ионов  $\text{RgXe}^+$  положение максимума смещается в сторону более низких электронных уровней атомов Хе, образующихся в результате захвата электронов ионами.

Представленные в Главе 3 результаты сравнительного анализа эффективности резонансных процессов диссоциативной рекомбинации (1) и трехчастичного захвата (2) на ридберговские уровни указывают на то, что в системах  $\text{VA}^+ + e$  с малой энергией связи молекулярного (квазимолекулярного) иона  $\text{VA}^+$  ( $D_0 < k_B T$ ) доминирует процесс трехчастичного захвата (2). Его вклад в заселение ридберговских уровней атомов в подобных условиях может приближаться к 100 %. При этом канал (2) заселяет в основном состояния с достаточно высокими значениями  $n \gtrsim 10$ . В обратном случае систем с большими или промежуточными энергиями диссоциации ( $D_0 \gtrsim k_B T$ ) преобладает механизм диссоциативной рекомбинации (1). При этом происходит преимущественное заселение низколежащих возбужденных состояний атомов  $n \lesssim 10$ .

Важно отметить, что описанные выше выводы об относительной роли процессов (1) и 2 относятся к случаям, когда справедлив закон действующих масс для частиц в свободном и связанных состояниях и распределение Максвелла для скорости свободных электронов. В Главе 3 показано, что при отклонении от больцмановского и максвелловского распределений роли процессов (1) и (2) могут существенно поменяться. В частности, приведен пример того, как в конфигурации экспериментов с совмещенными пучками ионов и электронов роль механизма трехчастичного захвата (2) при заселении низких уровней  $n$  усиливается в несколько раз.

Один из важных вопросов, рассмотренных в Главе 3, состоит в сравнении вкладов диссоциативной рекомбинации (1) гетероядерных,  $\text{NeXe}^+$  и  $\text{ArXe}^+$ , и гомоядерных,  $\text{Xe}_2^+$ , ионов в заселение ридберговских состояний атомов Хе. Такая задача представляет интерес для работ по моделированию кинетики рекомбинационных и релаксационных процессов в неравновесной плазме смесей инертных газов и для выяснения механизма формирования инверсной заселенности мощного ксенонового лазера ИК диапазона. Показано, что эффективная область захвата электронов в случае гомоядерного иона  $\text{Xe}_2^+$  смещена в сторону низколежащих уровней  $n < 8$  по сравнению со случаем гетероядерных систем. Установлено, что влиянием канала диссоциативной рекомбинации иона  $\text{Xe}_2^+$  при заселении ридберговских уровней  $n \geq 8$  можно пренебречь в том случае, если концентрация  $[\text{Xe}_2^+]$  хотя бы на порядок меньше концентрации  $[\text{RgXe}^+]$ .

Для того, чтобы показать правомерность представленного в работе теоретического подхода, в Главе 3 проведено сравнение результатов проделанных в диссертации расчетов коэффициентов диссоциативной рекомбинации (1) с результатами других экспериментальных и теоретических работ. Сравнение проведено для гетероядерных систем  $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$ ,  $\text{Ar} + \text{Xe}^+ + e$ , а также гомоядерных систем  $\text{Ne}_2^+ + e$  и  $\text{Ar}_2^+ + e$ . Расчет коэффициентов диссоциативной рекомбинации гомоядерных ионов потребовал некоторой модификации используемого теоретического подхода, заключающейся в необходимости учета высокой вероятности обратного процесса автоионизационного распада путем введения экспоненциального фактора выживания. В Главе 3 продемонстрировано, что окончательные результаты наших расчетов находятся в хорошем качественном и количественном согласии с многочисленными достоверными данными из других экспериментальных и теоретических работ. На рис. 2 представлены соответствующие результаты сравнения на примере систем  $\text{Ne}_2^+ + e$  и  $\text{Ar}_2^+ + e$ .

Еще один пласт задач, рассмотренных в Главе 3, связан со сравнительным анализом резонансных процессов захвата (1, 2) с традиционными нерезонансными механизмами заселения ридберговских уровней. Расчеты проводились для систем  $\text{Rg} + \text{Xe}^+ + e$  ( $\text{Rg} = \text{Ne}, \text{Ar}$ ) при условиях, характерных для плаз-

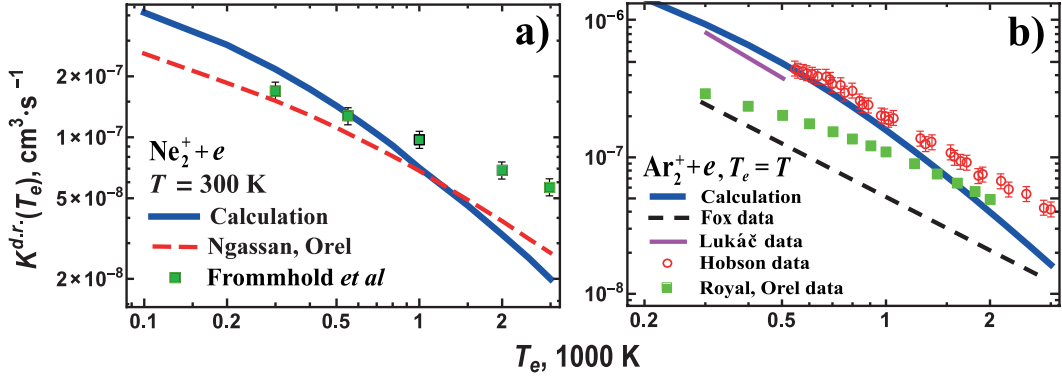


Рис. 2: Зависимости коэффициентов диссоциативной рекомбинации гомоядерных ионов инертных газов от температуры электронов  $T_e$ . (a) — Сопоставление проведенных в диссертации расчетов для ионов  $\text{Ne}_2^+$  с теоретическими [20] и экспериментальными [21] данными. (b) — Сопоставление проведенных в диссертации расчетов для ионов  $\text{Ar}_2^+$  с теоретическими данными [22], результатами экспериментов с ударными трубами [23, 24] и с данными по послесвечению плазмы тлеющего разряда [25].

мы смесей инертных газов. Газовая температура  $T$  варьировалась в пределах от 300 до 900 К, а электронная температура  $T_e \sim 300 \div 5000$  К. Одна из главных задач состояла в сравнении скорости  $W_n^{\text{tr}}$  [с<sup>-1</sup>] резонансного трехчастичного процесса (2) и скорости  $W_n^{ee}$  [с<sup>-1</sup>] традиционного захвата электронов ионами при тройных столкновениях со свободными электронами (4). Скорость захвата электронов в процессе (4) равна  $W_n^{ee} = \beta_n^{ee}(T_e)N_e^2$ , где  $\beta_n^{ee}(T_e)$  [с<sup>6</sup>с<sup>-1</sup>] — константа скорости этого процесса. Отсюда следует, что отношение скоростей процессов (2) и (4)

$$\frac{W_n^{ee}}{W_n^{\text{tr}}} = \frac{\beta_n^{ee}(T_e)N_e^2}{\beta_n^{\text{tr}}(T_e, T)N_eN_B} = \varkappa \frac{\beta_n^{ee}(T_e)}{\beta_n^{\text{tr}}(T_e, T)}$$

т.е. их относительная эффективность пропорциональна степени ионизации плазмы  $\varkappa = N_e/N_B \sim 10^{-8} \div 10^{-5}$ . По этой причине в Главе 3 проводилось сравнение константы скорости  $\beta_n^{\text{tr}}(T_e, T)$  процесса (2) с эффективной константой скорости  $\tilde{\beta}_n^{ee}(T_e) = \varkappa\beta_n^{ee}(T_e)$  процесса (4). Степень ионизации варьировалась в пределах  $\varkappa \sim 10^{-8} \div 10^{-3}$ . Расчет величины  $\beta_n^{ee}(T_e)$  проводился с использованием формул для сечений захвата, полученных в [26], и численного интегрирования по распределению Максвелла скоростей свободных электронов.

На рисунке 3 приведены результаты сопоставления величин  $\beta_n^{\text{tr}}$  и  $\tilde{\beta}_n^{ee}$ , характеризующих относительную эффективность процессов (2) и (4), при газовой температуре  $T = 300$  К и  $T_e = 10000$  К. Обращает на себя внимание кардинально различный характер заселения ридберговских уровней атомов в процессах (2) и (4). При резонансном трехчастичном захвате происходит преимущественное заселение ограниченного набора низколежащих возбужденных состояний, определяемого параметрами иона  $\text{RgXe}^+$ . В результате же нерезонансных тройных столкновений со свободными электронами заселяются высоковозбужден-



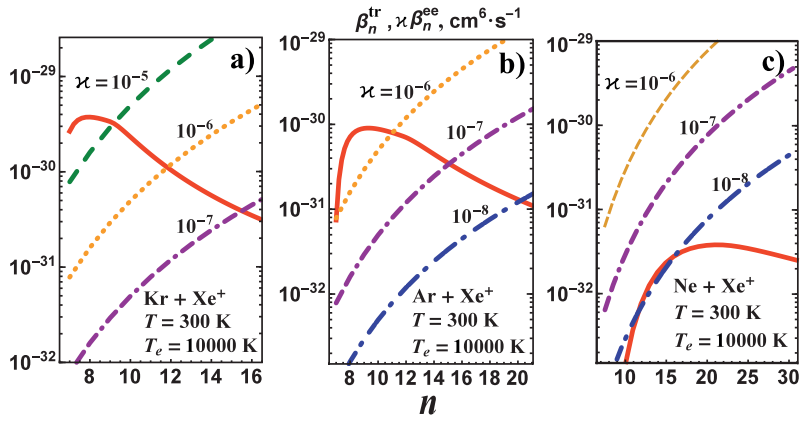


Рис. 3: Сравнение эффективностей трехчастичного захвата электронов на ридберговские уровни атома  $Xe(n)$  в резонансных реакциях (2):  $Xe^+ + e + Kr$  (а),  $Xe^+ + e + Ar$  (б) и  $Xe^+ + e + Ne$  (в) и в столкновениях с электронами (4) при различных степенях ионизации плазмы  $\kappa$  ( $T=300$  К,  $T_e=10000$  К). Сплошные кривые – константы скорости  $\beta_n^{tr}$  процесса (2). Штриховые кривые – относительная эффективность  $\tilde{\beta}_n^{ee} = \beta_n^{ee} \kappa$  процесса (4).

ные состояния  $n \gg 1$  с низкими энергиями связи. Для систем с умеренными значениями энергии диссоциации  $D_0 \gtrsim 100$  мэВ (как  $KrXe^+$  и  $ArXe^+$ ) механизм (4) тройной электрон-ионной рекомбинации на свободных электронах плазмы вносит определяющий вклад в заселение всех  $n$ -уровней лишь при степенях ионизации:  $\kappa \gtrsim 10^{-6} - 10^{-5}$  для случая  $ArXe^+$ . По мере уменьшения величины  $\kappa$  начинается конкуренция обсуждаемых рекомбинационных процессов и возрастает вклад резонансного канала (2) захвата электронов ионами в столкновениях с атомами буферного инертного газа в заселение низколежащих состояний атомов ксенона с  $n \lesssim 15$ .

Из рисунка 3 видно, что “рабочая” область резонансного трехчастичного захвата (2) смещается в сторону низких  $n$  по мере роста энергии диссоциации молекулярных ионов  $VA^+$ . Таким образом, для систем с умеренными значениями энергии диссоциации  $D_0 \gtrsim k_B T$  (например, для  $KrXe^+$  и  $ArXe^+$ ) преобладает резонансный захват на низколежащие уровни  $n \lesssim 15$  даже при достаточно больших степенях ионизации  $\kappa \sim 10^{-5}$ . С другой стороны, в случае систем с низкими энергиями диссоциации  $D_0 \lesssim k_B T$  (например,  $NeXe^+$ ) происходит преимущественный резонансный захват электронов в высоковозбужденные состояния с  $n \gtrsim 15$ . При этом при малых  $D_0$  величина  $\beta_n^{tr}$  крайне мала по сравнению с эффективной константой скорости  $\tilde{\beta}_n^{ee} = \beta_n^{ee} \kappa$ , за исключением случаев слабоионизованной плазмы с  $\kappa \lesssim 10^{-8}$ .

В Главе 3 также проведено сравнение резонансного (2) и нерезонансного (5) механизмов захвата электронов на уровни  $n$  при столкновениях с атомами буферного газа В. Показано, что эти процессы приводят к кардинально различному характеру заселения возбужденных состояний атомов. В случае нерезонансного процесса (5) происходит преобладающее заселение наиболее высоко-

ковозбужденных состояний атомов  $A(n)$ . Напротив, при резонансном захвате (2) происходит доминирующее заселение низколежащих ридберговских уровней. Эффективность процессов (2) и (5) становится сопоставимой лишь при чрезвычайно высоких значениях  $n \sim 50$ . Отсюда следует, что при анализе кинетики релаксации плазмы смесей инертных газов влиянием нерезонансного механизма захвата (5) в большинстве случаев можно пренебречь.

В **Главе 4** проведено теоретическое рассмотрение резонансного механизма (3) связанно-связанных неупругих переходов между высоковозбужденными уровнями атома  $n \rightarrow n'$ , которые приводят к тушению энергии электронного возбуждения в рекомбинирующей плазме. Формальное отличие этого процесса от процесса резонансного трехчастичного захвата электронов ионами (2) состоит в том, что при тушении электрон в начальном канале реакции находится в связанном состоянии. По этой причине при теоретическом описании резонансного механизма (3) связанно-связанных переходов использовался подход, аналогичный тому, что применялся при описании трехчастичного захвата (2). С использованием этого подхода был выполнен анализ эффективности канала (3) столкновительного тушения ридберговских состояний  $Xe(n)$  в низкотемпературной плазме смесей инертных газов. Установлено, что доминирующим каналом девозбуждения является переход  $n \rightarrow n - 1$ . В случае систем с энергией диссоциации молекулярного иона  $D_0 \lesssim kT$  сечения и константы скорости резонансного перехода  $n \rightarrow n - 1$  имеют ярко выраженный максимум по  $n$ . Этот максимум смещен в сторону более низких ридберговских уровней по отношению к максимуму сечений процессов (1) и (2) резонансного захвата электронов (см. рис. 4). Это указывает на то, что резонансное тушение может приводить к увеличению скорости электрон-ионной рекомбинации. Показано, что в системах с малыми значениями  $D_0$  эффективность резонансного тушения энергии рекомбинирующего электрона может существенно превышать эффективность резонансного захвата электрона. Как показано в работе, в этом случае становится принципиальным учет резонансных переходов  $n \rightarrow n'$  для описания процессов заселения состояний с  $n \lesssim 15$ .

В **Главе 4** был также осуществлен сравнительный анализ резонансного (3) и традиционных нерезонансных процессов (6) и (7) связанно-связанных переходов  $n \rightarrow n'$ . При расчете сечений и констант скоростей процессов (3), (6), (7) использовались теоретические подходы, аналогичные используемым при описании процессов (2, 4, 5) захвата электронов ионами. В результате было установлено, что учет резонансного механизма связанно-связанных переходов (3) существенно влияет на скорости заселения низколежащих ридберговских уровней с  $n \lesssim 15$  даже при степенях ионизации плазмы  $\alpha \sim 10^{-6}$ . С другой стороны, на заселение высоковозбужденных состояний с  $n \gtrsim 20$  в большей сте-

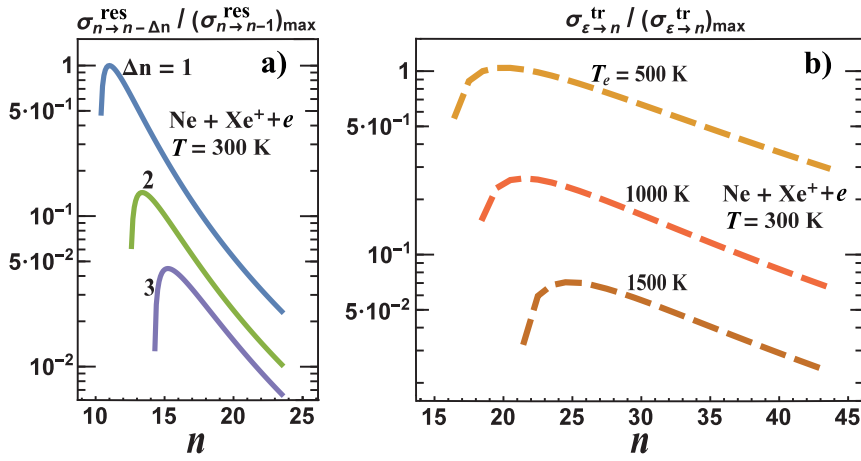


Рис. 4: (а) — нормированные сечения  $\sigma_{n \rightarrow n-\Delta n}^{\text{res}} / (\sigma_{n \rightarrow n-1}^{\text{res}})_{\text{max}}$  резонансного тушения ридберговских уровней  $\text{Xe}(n)$  атомами  $\text{Ne}$  при  $\Delta n = 1, 2$  и  $3$ . (б) — нормированные сечения  $\sigma_{\varepsilon \rightarrow n}^{\text{tr}} / (\sigma_{\varepsilon \rightarrow n}^{\text{tr}})_{\text{max}}$  резонансного захвата электронов в столкновениях  $\text{Ne} + \text{Xe}^+ + e$  при энергии электронов  $\varepsilon = k_B T_e / 2$  ( $T_e = 500, 1000$  и  $1500$  K). Энергия столкновения частиц  $\text{Ne}$  и  $\text{Xe}^+$  равна  $E = k_B T / 2$  ( $T = 300$  K).

пени влияют традиционные нерезонансные механизмы переходов  $n \rightarrow n'$  при столкновениях с электронами (6) и нейтральными частицами (7).

Отметим, что результаты исследования резонансных и нерезонансных механизмов свободно-связанных  $\varepsilon \rightarrow n$  и связанно-связанных  $n \rightarrow n'$  переходов электрона существенно расширяют имеющиеся представления об основных каналах заселения ридберговских состояний атомов инертных газов. Они показывают, в частности, что в случае умеренносвязанных гетероядерных ионов с  $D_0 \gtrsim k_B T$  (как  $\text{ArXe}^+$ ) резонансные процессы захвата (1), (2) и тушения (3) вносят определяющий вклад в заселение низколежащих ридберговских уровней  $n \lesssim 15$  даже при достаточно больших степенях ионизации плазмы  $\kappa \sim 10^{-5}$ . Этот вывод представляет значительный интерес как для решения ряда фундаментальных задач атомной спектроскопии, так и для ряда прикладных задач, связанных с исследованием механизмов образования инверсной заселенности в лазерах на смесях инертных газов.

В Главе 5 представлены результаты теоретического исследования резонансного механизма диссоциативного возбуждения (ДВ) молекулярных ионов электронным ударом (8). Подобно диссоциативной рекомбинации (1), рассматриваемый в диссертации механизм процесса ДВ обусловлен резонансными неадиабатическими переходами между основным  $U_i(R)$  и первым возбужденным  $U_f(R)$  термами молекулярного иона  $\text{VA}^+$ . Отличие процесса (8) от (1) состоит в том, что при диссоциативном возбуждении электрон находится в состояниях непрерывного спектра как в начальном, так и в конечном каналах реакции. Поэтому при расчете сечений и констант скоростей процесса (8) использовался такой же теоретический подход, что и для аналогичного процесса резонансной диссоци-

ативной рекомбинации. Вычисления проводились для случая гетероядерных систем  $\text{RgXe}^+ + e$  ( $\text{Rg} = \text{Ne}, \text{Ar}$ ), а также гомоядерных систем  $\text{Ar}_2^+ + e$  и  $\text{Xe}_2^+ + e$  в плазме инертных газов. Газовая температура, в зависимости от рассматриваемых условий, варьировалась в диапазоне  $T \sim 100 \div 2000$  К, а электронная температура изменялась в диапазоне  $T_e \sim 300 \div 70000$  К.

Из результатов Главы 5 следует, что в случае умеренно- и сильно-связанных систем процесс ДВ имеет явно выраженный пороговый характер, что проявляется в наличии максимума в зависимости константы скорости  $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$  от  $T_e$ . Этот эффект связан с тем, что большинство умеренносвязанных ионов локализовано вблизи положения равновесия  $R_e$ . Соответственно, при повышении газовой температуры пороговый характер процесса ДВ ослабевает, и его эффективность при низких  $T_e$  растет. Также показано, что в случае слабосвязанных ионов в исследуемом в диссертации диапазоне температур пороговый характер процесса диссоциативного возбуждения не проявляется, а константа скорости  $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$  убывает по мере роста  $T_e$ .

Одна из основных задач, решаемых в Главе 5, состояла в сравнительном анализе двух резонансных каналов разрушения молекулярных ионов: диссоциативного возбуждения и диссоциативной рекомбинации. Из полученных результатов следует, что роль механизма ДВ (8) существенно растет по мере увеличения температуры электронов  $T_e$  и уменьшения энергии диссоциации  $D_0$  молекулярных ионов. На рисунке 5 приведены результаты расчета констант скоростей диссоциативной рекомбинации на ридберговские уровни  $\alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}(T_e, T)$  и диссоциативного возбуждения молекулярных ионов  $\text{Xe}_2^+$  электронным ударом  $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$  при  $T \sim 300 - 2000$  К и  $T_e \sim 1500 - 70000$  К. Видно, что в случае сильносвязанных ионов с  $D_0 \sim 1$  эВ ( $\text{Ar}_2^+$ ,  $\text{Xe}_2^+$ ) процесс (8) начинает вносить значительный вклад в их разрушение при температуре  $T_e \gtrsim 10000$  К. В случае же слабосвязанных ионов с  $D_0 < 100$  мэВ ( $\text{HeXe}^+$  и  $\text{NeXe}^+$ ) процесс (8) доминирует над каналом диссоциативной рекомбинации (1) даже при очень низких значениях  $T_e \sim 300$  К.

Еще одна важная задача, рассмотренная в Главе 5, заключалась в исследовании процессов потери энергии электронов за счет ДВ и ДР в плазме смесей  $\text{Kr}/\text{Xe}$ ,  $\text{Ar}/\text{Xe}$  и  $\text{Ne}/\text{Xe}$ . Анализ проводился путем расчета дифференциальных сечений и констант скоростей (8) и (1) в единичный интервал конечной энергии электрона в непрерывном или квазинепрерывном спектре. Из приведенных результатов следует, что в случае слабосвязанных ионов резонансные столкновительные процессы имеют квазиупругий характер, а начальные и конечные энергии электронов близки к нулю. Доминирующим столкновительным процессом является при этом процесс диссоциативного возбуждения. Иная ситуация наблюдается в случае сильно- и умеренно-связанных ионов при низких

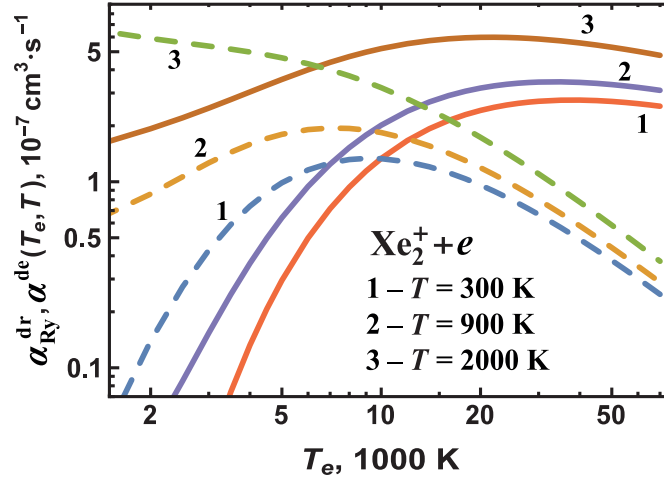


Рис. 5: Константы скорости диссоциативной рекомбинации на ридберговские уровни  $\alpha_{\text{Ry}}^{\text{dr}}(T_e, T)$  (пунктирные кривые) и диссоциативного возбуждения молекулярных ионов  $\text{Xe}_2^+$  электронным ударом  $\alpha^{\text{de}}(T_e, T)$  (сплошные кривые) при различных  $T$ .

температурах  $T \lesssim 1000 \text{ K}$  и  $T_e \lesssim 2000 \text{ K}$ : при таких условиях доминируют процессы ДР с характерной передачей энергии  $\hbar\omega \approx \Delta U_{fi}(R_e)$  ( $R_e$  — положение равновесия ионов  $\text{VA}^+$ ). Подобные переходы сопровождаются заселением низколежащих ридберговских уровней  $n$  с энергией связи  $|\varepsilon_n| \approx \Delta U_{fi}(R_e)$ . Однако, по мере повышения электронной температуры до  $T_e \gtrsim 10000 \text{ K}$  начинают преобладать переходы с передачей энергии  $\hbar\omega \approx \Delta U_{fi}(R_e)$ , происходящие в результате диссоциативного возбуждения. С другой стороны, по мере роста газовой температуры от значения  $T \sim 300 \text{ K}$  до  $T \sim 2000 \text{ K}$  существенно усиливается роль квазиупругих процессов ДВ в области околонулевых энергий электронов  $\varepsilon$ . Указанные результаты представляют интерес при исследовании характера охлаждения электронов в задачах спектроскопической диагностики и кинетики релаксации плазмы.

В Главе 5 выполнено также сравнение результатов проведенных в диссертации расчетов сечений и констант процесса (8) с имеющимися в литературе результатами ряда теоретических и экспериментальных работ по диссоциации гомоядерных ионов инертных газов. Во всех случаях достигнуто хорошее качественное и количественное соответствие со сравниваемыми данными.

В Главе 6 представлены результаты расчетов эффективных сечений и коэффициентов поглощения света в процессах неадиабатического обмена энергии фотонов с молекулярными ионами. К ним относятся процессы фотодиссоциации (9) и радиационные свободно–свободные переходы (10). При вычислении сечений и коэффициентов фотопоглощения использовались формулы из работы [27]. Конкретный теоретический анализ был проведен на примере гомоядерных ионов инертных газов  $\text{Kr}_2^+$  при газовых температурах в диапазоне  $T \sim 300 \div 15000 \text{ K}$ . При этом учитывались два типа резонансных неадиабата-

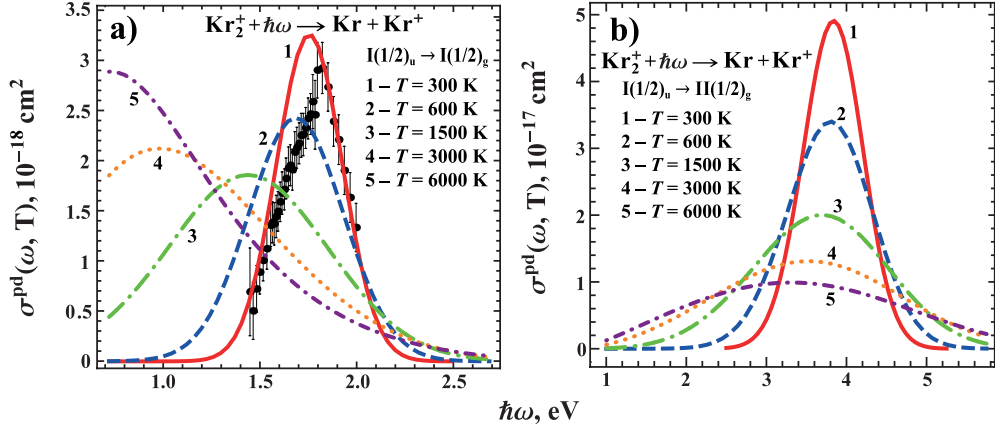


Рис. 6: Сечения фотодиссоциации  $\sigma^{\text{pd}}(\omega, T)$  молекулярных ионов  $\text{Kr}_2^+$  в результате неадиабатических переходов  $I(1/2)_u \rightarrow I(1/2)_g$  (а) и  $I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g$  (б) при газовых температурах  $T=300$  К (кривые 1), 600 К (кривые 2), 1500 К (кривые 3), 3000 К (кривые 4) и 6000 К (кривые 5). Круги – экспериментальные данные [28]

тических переходов между термами:  $I(1/2)_u \rightarrow I(1/2)_g$  и  $I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g$ . Результаты расчетов сечений фотодиссоциации ионов  $\text{Kr}_2^+$  представлены на рисунке 6. Видно, что в случае низких газовых температур  $T \lesssim 1000$  К у сечений фотодиссоциации (9) в зависимости от частоты фотона наблюдается явно выраженный максимум, положение которого определяется спецификой и энергетической структурой электронных термов и может быть оценено из условия того, что неадиабатические переходы преимущественно происходят вблизи положения равновесия иона  $R_e$ , т.е.  $\hbar\omega \approx \Delta U_{fi}(R_e)$ . По мере увеличения газовой температуры, однако, максимум становится более пологим, а его положение смещается в сторону низких энергий. В диссертации показано, что такое поведение обусловлено тем, что по мере роста  $T$  ионы перестают быть локализованными вблизи положения равновесия  $R_e$ .

К важным результатам этой главы относится проведенный в ней сравнительный анализ эффективностей радиационных процессов (9) и (10) при различных температурах. Показано, что в криптоновой равновесной плазме при низких температурах  $T \lesssim 1000$  К процесс фотодиссоциации (9) ионов  $\text{Kr}_2^+$  вносит определяющий вклад в результирующий коэффициент поглощения света. С увеличением температуры начинает возрастать роль свободно-свободных неадиабатических фотопереходов (10) в квазимолекулярном ионе  $\text{Kr}_2^+$ , индуцированных столкновениями атомарных ионов  $\text{Kr}^+$  с атомами  $\text{Kr}$ . Поглощение света в процессе (10) начинает преобладать над фотодиссоциацией в плазме с температурой  $T \gtrsim 5000$  К. Отметим также, что зависимости коэффициентов поглощения света в процессе (10) от частоты фотона  $\omega$  (см. рис. 6) существенно отличаются от соответствующих зависимостей коэффициентов фотодиссоциационного поглощения (см. рис. 5), у которых наблюдается ярко выраженный

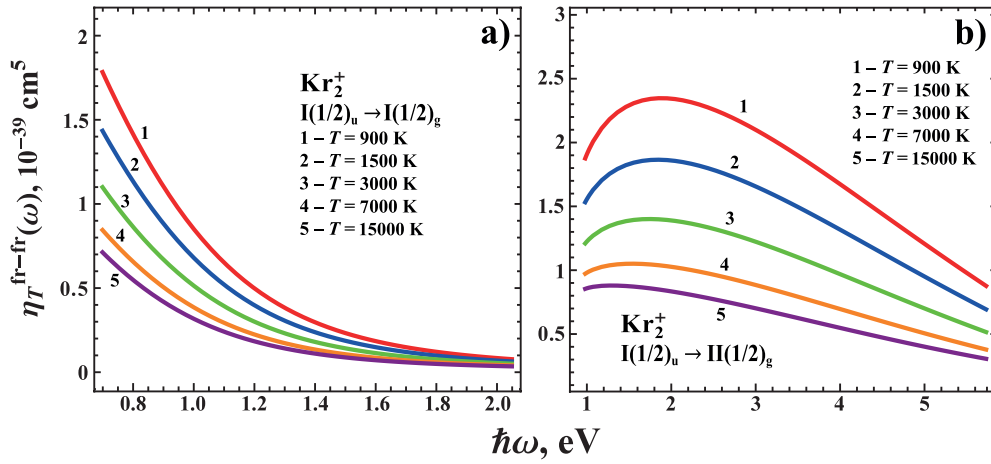


Рис. 7: Коэффициент фотопоглощения  $\eta_T^{\text{fr-fr}}(\omega)$  [ $\text{cm}^5$ ], обусловленный свободно-свободными переходами  $I(1/2)_u \rightarrow I(1/2)_g$  (a) и  $I(1/2)_u \rightarrow II(1/2)_g$  (b) в квазимолекулярном ионе  $\text{Kr}_2^+$  при газовых температурах  $T=900$  К (кривые 1), 1500 К (кривые 2), 3000 К (кривые 3), 7000 К (кривые 4) и 15000 К (кривые 5).

максимум (особенно при невысоких температурах).

В Главе 6 было проведено сравнение результатов проведенных в диссертации теоретических расчетов интегрального вклада всех колебательно-вращательных уровней гомоядерных ионов инертных газов в суммарный коэффициент поглощения света в процессах (9) и (10) с имеющимися экспериментальными данными. Показано, что результаты выполненных в диссертации расчетов хорошо согласуются с экспериментом.

В **Заключении** сформулированы основные результаты диссертации.

## Основные результаты диссертации

1. В рамках теории неадиабатического обмена энергии электронов и фотонов с молекулярными ионами и квазимолекулярными ионами, образующимися в ходе столкновения атомарных ионов с атомами буферного или собственного газа, получены полуаналитические выражения для сечений и констант скоростей ряда резонансных свободно-связанных, связанно-связанных и свободно-свободных переходов. Они определяют кинетику электрон-ионной рекомбинации и релаксации энергии электронного возбуждения по атомным уровням и коэффициенты поглощения света в плазме смесей инертных газов.
2. Для гетероядерных ( $\text{ArXe}^+$  и  $\text{NeXe}^+$ ) и гомоядерных ( $\text{Ne}_2^+$ ,  $\text{Ar}_2^+$ ,  $\text{Kr}_2^+$  и  $\text{Xe}_2^+$ ) ионов инертных газов в условиях теплового возбуждения всех колебательно-вращательных уровней выполнены конкретные расчеты сечений и констант скоростей процессов фотодиссоциации, прямой диссоциации элект-

тронным ударом и диссоциативной рекомбинации с образованием атомов в ридберговских состояниях. Установлены основные закономерности в поведении указанных величин в широком диапазоне энергий и температур электронной и ионной компонент плазмы ( $T_e = 100 - 80000$  К,  $T = 100 - 15000$  К), а также в зависимости от значения энергии диссоциации иона  $D_0$  в диапазоне от 30 мэВ до 1 эВ.

3. Исследована относительная эффективность процессов диссоциативной рекомбинации гомоядерных  $\text{Xe}_2^+$  и гетероядерных  $\text{RgXe}^+$  ( $\text{Rg} = \text{Kr}, \text{Ar}, \text{Ne}$ ) ионов в заселении ридберговских уровней атомов Xe в плазме смесей инертных газов Rg/Xe. Показано, что роль гетероядерных ионов при заселении уровней с  $n \geq 8$  является преобладающей, если их концентрация на порядок величины превышает концентрацию ионов  $\text{Xe}_2^+$ .
4. Наряду с резонансными процессами трехчастичного захвата электронов ионами при столкновениях с атомами инертного газа в рамках импульсного приближения построена теория нерезонансного захвата электронов на высоковозбужденные уровни атомов. Выяснена роль этих процессов в различных областях главного квантового числа и проведено сравнение их эффективности с традиционным механизмом тройной рекомбинации при столкновениях со свободными электронами. Показано, что в случае умеренно связанных и сильно связанных ионов ( $D_0 \gtrsim 0.1 - 1$  эВ) резонансные процессы вносят доминирующий вклад в заселение уровней атомов инертных газов с  $n \lesssim 15$  даже при степенях ионизации плазмы  $\alpha \lesssim 10^{-5}$ .
5. В широкой области температур исследована роль резонансных процессов диссоциативной рекомбинации и прямого диссоциативного возбуждения электронным ударом гетероядерных и гомоядерных ионов с сильно отличающимися друг от друга значениями энергии диссоциации  $D_0$ . Показано, что в случае слабосвязанных ионов ( $\text{NeXe}^+$ ) процесс диссоциативного возбуждения является преобладающим во всем рассмотренном диапазоне температур. Установлено, что для умеренно связанных и сильно связанных ионов ( $\text{ArXe}^+$ ,  $\text{Ar}_2^+$  и  $\text{Xe}_2^+$ ) процесс диссоциативного возбуждения оказывается неэффективным при  $T_e \lesssim 1000$  К, но доминирует при высоких температурах ( $T_e \gtrsim 5000$  К для  $\text{ArXe}^+$  и  $T_e \gtrsim 20000$  К для  $\text{Ar}_2^+$  и  $\text{Xe}_2^+$ ).
6. Выполнены расчеты интегрального вклада всех колебательно-вращательных уровней молекулярного иона  $\text{Kr}_2^+$  в сечение фотодиссоциации и в соответствующий коэффициент фотодиссоциационного поглощения света в квазиравновесной криптоновой плазме. Установлены основные закономерности в поведении этого процесса в зависимости от частоты фотона в широком



диапазоне температур. Рассчитан и проанализирован вклад неадиабатических свободно-свободных переходов в результирующий коэффициент фотопоглощения. Показано, что роль этого процесса становится существенной при высоких температурах  $T \gtrsim 3000 - 5000$  К.

## Список публикаций автора по теме диссертации

### Статьи в рецензируемых журналах:

1. V.S. Lebedev, K.S. Kislov, A.A. Narits / Rydberg states population via three-body and dissociative recombination in low-temperature plasmas of rare gas mixtures // Plasma Sources Sciences and Technology – 2020. – V. 29. – No. 2 – P. 025002. doi 10.1088/1361-6595/ab652f
2. A.A. Narits, K.S. Kislov, V.S. Lebedev / Semiclassical Theory of Resonant Dissociative Excitation of Molecular Ions by Electron Impact // Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics – 2020. – V. 53. – No 19 – P. 195201. doi 10.1088/1361-6455/aba3a7
3. В.С. Лебедев, К.С. Кислов, А.А. Нарич / Резонансный захват электронов ионами в ридберговские состояния атомов // ЖЭТФ – 2020. – Т. 157. – Вып. 3. – С. 579–595.
4. К.С. Кислов, А.А. Нарич, В.С. Лебедев / Анализ эффективностей процессов захвата электронов ионами в ридберговские состояния и неупругих переходов  $n-n'$  в плазме смесей инертных газов // Оптика и спектроскопия – 2020 – Т. 128. – Вып. 4. – С. 462–479. doi 10.21883/OS.2020.04.49195.319-19
5. К.С. Кислов, А.А. Нарич, В.С. Лебедев / Прямое диссоциативное возбуждение гетероядерных и гомоядерных ионов инертных газов электронным ударом // Оптика и спектроскопия – 2020. – Т. 128. – № 11 – С. 1596-1612. doi 10.21883/OS.2020.11.50161.171-20
6. К.С. Кислов, А.А. Нарич, В.С. Лебедев / Температурные зависимости сечений фотодиссоциации в криптоновой плазме // Краткие сообщения по физике – 2020 – № 10, С 24-30. Опубликовано онлайн <https://ksf.lebedev.ru/contents.php?post=1&year=2020&number=10&pages=&z=0>
7. A.A. Narits, K.S. Kislov, V.S. Lebedev / Electron capture to the Rydberg atomic states in ternary collisions with neutral particles // Journal of Physics: Conference Series – 2020. – Vol. 1412. – No. 19. – P. 192007. doi 10.1088/1742-6596/1412/19/192007

8. K.S. Kislov, A.A. Narits, V.S. Lebedev / Strong enhancement of electron-ion recombination induced by free-bound and bound-bound resonance transitions // Journal of Physics: Conference Series – 2020. – Vol. 1412. – No. 19. – P. 192008. doi 10.1088/1742-6596/1412/19/192008

### **Тезисы докладов на конференциях**

1. К.С. Кислов, А.А. Нарич, В.С. Лебедев. Анализ эффективностей резонансного механизма электрон-ионной рекомбинации в тройных столкновениях с атомами буферного газа и процесса диссоциативной рекомбинации. «Импульсная Сильноточная Вакуумная и Полупроводниковая Электроника» ИСВПЭ-2017 (19-20 октября 2017, ФИАН) Сборник трудов сс. 19 – 22
2. К.С. Кислов, А.А. Нарич, В.С. Лебедев. «Исследование процессов резонансной трехчастичной и диссоциативной электрон-ионной рекомбинации в плазме, содержащей атомарные и молекулярные ионы». 60-я Всероссийская научная конференция МФТИ (МФТИ-60), ФИАН, 23 ноября. Сборник трудов сс. 99 – 101
3. К.С. Кислов, А.А. Нарич, В.С. Лебедев. «Образование атомов в ридберговских состояниях в тройных столкновениях электрон-ион-атом». МФТИ-60, ФИАН, 23 ноября. Сборник трудов сс. 101 – 102
4. A.A. Narits, K.S. Kislov and V.S. Lebedev. Resonant Electron Transfer and Capture Processes Involving Rydberg Atoms. MIPT-UFC-LPI-2018. Moscow Institute of Physics and Technology, P.N.Lebedev Physical Institute. Proceedings p. 16
5. V.S. Lebedev, K.S. Kislov and A.A. Narits. The Mechanism of Resonant Electron Capture by Atomic and Weakly Bound Molecular Ions to the Rydberg States. MIPT-UFC-LPI-2018. Moscow Institute of Physics and Technology, P.N.Lebedev Physical Institute. Proceedings pp. 16-17
6. A.A. Narits, K.S. Kislov, V.S. Lebedev. Electron Capture to the Rydberg Atomic States in Ternary Collisions with Neutral Particles. XXXI International Conference on Photonic, Electronic and Atomic Collisions. Deauville, France, July 23-30, 2019. Proceedings p. 192
7. К.С. Кислов, В.С. Лебедев, А.А. Нарич. Исследование альтернативных механизмов захвата электронов атомарными ионами в тройных столкновениях с атомами буферного газа. Школа молодых ученых БПИО-2019, 12-14 ноября, Колонный Зал ФИАН. Сборник трудов сс. 28-32

8. К.С. Кислов, В.С. Лебедев, А.А. Нариз. Расчет констант скоростей диссоциативной рекомбинации гомоядерных и гетероядерных ионов инертных газов с образованием атомов ксенона в ридберговских состояниях. Школа молодых ученых БПИО-2019, 12-14 ноября, Колонный Зал ФИАН. Сборник трудов сс. 32-35
9. К.С. Кислов, В.С. Лебедев, А.А. Нариз. Кинетическая модель расчета коэффициента электрон-ионной рекомбинации при наличии многоступенчатых переходов и резонансного захвата электронов в ридберговские состояния атомов. Школа молодых ученых БПИО-2019, 12-14 ноября, Колонный Зал ФИАН. Сборник трудов сс. 50-52
10. К.С. Кислов, В.С. Лебедев, А.А. Нариз. Сравнение эффективностей различных механизмов захвата электронов ионами в высоковозбужденные состояния атомов при столкновениях с электронами и нейтральными частицами плазмы. 62-я Всероссийская научная конференция МФТИ (МФТИ-62), ФИАН, 18 ноября 2019. Сборник трудов сс. 169-170
11. К.С. Кислов, В.С. Лебедев, А.А. Нариз. Роль резонансной тройной и диссоциативной рекомбинации в двухтемпературной и существенно неравновесной плазме смесей Ne/Xe, Ar/Xe и Kr/Xe. МФТИ-62, ФИАН, 18 ноября 2019. Сборник трудов сс. 170-172

## Список цитированной литературы

- [1] Piel A. "Plasma Physics. 2nd edition", Springer International Publishing AG, 2017. 463 p.
- [2] Иванов В.А., Петровская А.С., Скобло Ю.Э. / Энергия связи и диссоциативная рекомбинация ионов  $\text{Ne}^+$  и  $\text{HeNe}^+$  // ЖЭТФ. – 2019. – Т. 155. – № 5. – С. 901.
- [3] Буреева Л.А., Лисица В.С. Возмущенный атом, Москва: ИздАТ, 1997. 464 с.
- [4] Smirnov B.M. "Microphysics of Atmospheric Phenomena", Springer International Publishing, 2017. 270 p.
- [5] Srećković V.A., Mihajlov A.A., Ignjatović Lj.M., Dimitrijević M.S. / Ion-atom radiative processes in the solar atmosphere: quiet Sun and sunspots // Adv. Space Res. – 2014. – V. 54. – No. 7. – P. 1264.
- [6] Suazo M., Prieto J., Escala A., Schleicher D.R. / The Role of Gas Fragmentation During the Formation of Supermassive Black Holes // The Astrophysical Journal – 2019. – V. 885. – No. 2. – P. 127.

- [7] Coppola C.M., Longo S., Capitelli M., Palla F., and Galli D. / Vibrational level population of  $H_2$  and  $H_2^+$  in the early universe // The Astrophysical Journal Supplement Series. – 2011. – V. 193. – No. 1. – P. 7.
- [8] Cooley J.E., Urdahl R., Xue J., Denning M., Tian P. and Kushner M.J. / Properties of microplasmas excited by microwaves for VUV photon sources // PSST – 2015. – V. 24. – No. 6. – P. 065009.
- [9] Emmons D.J., Weeks D.E. / Kinetics of high pressure argon-helium pulsed gas discharge // J. App. Phys. – 2017. – V. 121. – No. 20. – P. 203301.
- [10] Emmons D.J., Weeks D.E., Eshel B., Perram G.P. / Metastable Ar ( $1s5$ ) density dependence on pressure and argon-helium mixture in a high pressure radio frequency dielectric barrier discharge // J. App. Phys. – 2018. – V. 123. – No. 4. – P. 043304.
- [11] Hoskinson A.R., Gregorio J., Hopwood J., Galbally-Kinney K., Davis S.J., Rawlins W.T. / Argon metastable production in argon-helium microplasmas // J. App. Phys. 2016. V. 119. No. 23. P. 233301.
- [12] Sun P., Zuo D., Mikheyev P.A., Han J., Heaven M.C. / Time-dependent simulations of a CW pumped, pulsed DC discharge Ar metastable laser system // Opt. Express – 2019. – V. 27. – No. 16. – P. 22289.
- [13] J. P. Apruzese, J. L. Giuliani, M. F. Wolford, J. D. Sethian, G. M. Petrov, D. D. Hinshelwood, M. C. Myers, and D. M. Ponce, F. Hegeler, Ts. Petrova / Experimental evidence for the role of  $Xe_2^+$  in pumping the Ar–Xe infrared laser // Appl. Phys. Lett. – 2006. – V. 88. – P. 121120
- [14] А.П. Минеев, С.М. Нефедов, П.П. Пащинин, П.А. Гончаров, В.В. Киселев / Планарные ИК-лазеры с вч-накачкой на смесях инертных газов // Вестник Воздушно-Космической Обороны – 2018. – № 1 – С. 78.
- [15] Ivanov V.A., Lebedev V.S., Marchenko V.S. / Collision quenching of Rydberg atomic levels and electron-ion recombination in a noble buffer gas // Soviet Physics-JETP – 1988. – No. 11. – P. 2225.
- [16] Лебедев В.С., Кислов К.С., Нариц А.А. / Сильный рост скорости электрон-ионной рекомбинации в результате свободно-связанных и связанно-связанных резонансных переходов // Письма в ЖЭТФ. 2018. Т. 108. № 9. С. 618.
- [17] Lebedev V.S. and Beigman I.L. “Physics of Highly Excited Atoms and Ions”, Springer, Berlin, Heidelberg (1998).
- [18] O’Malley T.F. / Extrapolation of Electron-Rare Gas Atom Cross Sections to Zero Energy // Phys. Rev. – 1963. – V. 130. – P. 1020.
- [19] Lebedev V.S. / Ionization of Rydberg atoms by neutral particles. II. Mechanisms of the perturber-core scattering// J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 1991. – V. 24. – P. 1993.

- [20] Ngassam V. Orel A. E. / Dissociative recombination of  $\text{Ne}_2^+$  molecular ions // Phys. Rev. A – 2006. – V. 73. – No. 3. – P. 032720.
- [21] Frommhold L., Biondi M., Mehr F.J. / Electron-Temperature Dependence of Electron-Ion Recombination in Neon // Phys. Rev. – 1968 – V. 165. – No. 1. – P. 44.
- [22] J. Royal and A. E. Orel / Dissociative recombination of  $\text{Ar}_2^+$  // Phys. Rev. A – 2006. – V. 73. – P. 042706
- [23] A. J. Cunningham and R. M. Hobson / Experimental Measurements of Dissociative Recombination in Vibrationally Excited Gases // Phys. Rev. – 1969. – V. 185. – P. 98.
- [24] Fox J. N., Hobson R. M. / Temperature dependence of dissociative recombination coefficients in argon // Physical Review Letters. – 1966. – V. 17. – No. 4. – P. 161.
- [25] Lukáč, P., Mikuš, O., Morva, I., Zábudlá, Z., Trnovec, J., & Morvová, M. / Electron and gas temperature dependences of the dissociative recombination coefficient of molecular ions  $\text{Ar}_2^+$  with electrons // PSST – 2011 – V. 20 – No.5. – P. 055012.
- [26] Percival I.C., Richards D. / The Theory of Collisions between Charged Particles and Highly Excited Atoms // Adv. At. Mol. Phys. – 1976 – V. 11. – P. 1 - 82.
- [27] Lebedev V.S., Presnyakov L.P. / Photodissociation from a manifold of rovibrational states and free-free absorption by a diatomic molecule. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. – 2002. – V. 35. – No. 21. – P. 4347.
- [28] Lee L.C., Smith G.P. / Photodissociation cross sections of  $\text{Ne}_2^+$ ,  $\text{Ar}_2^+$ ,  $\text{Kr}_2^+$ , and  $\text{Xe}_2^+$  from 3500 to 5400 Å // Physical Review A – 1979. – V. 19. – No. 6. – P. 2329.