Фотопоглощение и диссоциация электронным ударом молекулярных ионов $ArXe^+$ и $KrXe^+$

В.С.Лебедев, К.С.Кислов, А.А.Нариц

Обсуждается ряд оптических и кинетических свойств тяжелых гетероядерных ионов инертных газов $ArXe^+$ и $KrXe^+$, образующихся в плазме смесей инертных газов. Рассмотрены различные типы неадиабатических фотопереходов между основным и возбужденными электронными термами таких ионов, сопровождающихся перезарядкой. В условиях теплового возбуждения всего колебательно-вращательного квазиконтинуума проанализированы вклады связанно-свободных (фотодиссоциация) и связанно-связанных фотопереходов в полный коэффициент фотопоглощения. Рассчитан вклад в фотопоглощение свободно-свободных и свободно-связанных (фотоассоциация) переходов. Приведены результаты расчетов эффективных сечений и констант скоростей указанных процессов непрерывного поглощения электромагнитного излучения видимого и УФ диапазонов ионами $ArXe^+$ и $KrXe^+$ при различных температурах ионной компоненты плазмы. Рассмотрен также резонансный механизм разрушения ионов $ArXe^+$ и $KrXe^+$ электронным ударом в процессах диссоциативной рекомбинации и прямого диссоциативного возбуждения. Проведенный в работе анализ расширяет физическую картину радиационных и столкновительных процессов в плазмах смесей инертных газов Rg/Xe (Rg = Ar, Kr), возбуждаемых электронным пучком, в газовых разрядах и при оптической накачке. Полученные результаты представляют интерес для построения кинетических моделей активных сред газовых и плазменных лазеров, источников излучения УФ диапазона, эксиламп и массивов микроплазменных ячеек.

Ключевые слова: *смеси инертных газов, гетероядерные молекулярные ионы, радиационные и столкновительные процессы, непрерывное поглощение электромагнитного излучения, фотодиссоциация и фотоассоциация, связанно-связанные и свободно-свободные фотопереходы, диссоциативная рекомбинация электронов с ионами, диссоциативное возбуждение.*

1. Введение

Атомы и ионы тяжелых благородных газов, ксенона, криптона и аргона, широко применяются в активных средах газовых лазеров [1–9]. Это связано как с наличием у этих элементов сильных линий в УФ диапазоне, позволяющих получить генерацию [3, 10–13] в принципиально важной для литографических применений области спектра, так и с большим числом метастабильных уровней, значительно расширяющих возможности выбора различных схем создания инверсной населенности [9, 14]. На практике чаще всего используются смеси инертных газов, Xe/He, Xe/Ne, Xe/Ar, Kr/He и т. п., в которых концентрация атомов и ионов более тяжелого элемента на один-три порядка меньше концентрации атомов более легкого, буферного, газа. Наличие легких атомов обеспечивает высокую эффективность столкновительного переноса населенности на верхние уровни активных переходов [1, 3]. Подобные смеси в настоящее время активно применяются при разработке лазеров на инертных газах с оптической накачкой [9, 14, 15], мощных лазерных установок с ядерной накачкой [7, 16], мощных ИК лазеров на переходах XeI [5, 17], разработкой которых активно занимался Н.Г.Басов [4, 14], источников излучения УФ диапазона [18], эксиламп [19] и массивов микроплазменных ячеек [20]. Следует также отметить, что активные среды галоген-инертных эксимерных лазеров (например, KrF-лазер [21–23]), используемых, в частности, в экспериментах по лазерному термоядерному синтезу, концепция которого была разработана Н.Г.Басовым и О.Н.Крохиным [24], также содержат смеси благородных газов.

Важным преимуществом применения благородных газов в газовых лазерах является их относительно низкая химическая активность, значительно сокращающая число альтернативных каналов релаксации возбуждения. Помимо снижения потерь энергии это упрощает описание радиационно-столкновительной кинетики заселения верхних и нижних уровней активных переходов [25, 26]. Кинетическое моделирование процессов в активных средах газовых и плазменных лазеров опирается на теоретические и экспериментальные данные по константам скоростей реакций, протекающих в таких средах. При накачке активных сред лазеров электронным пучком, а также при электроионизационном, рекомбинационном и ядерных способах накачки одну из ключевых ролей играют процессы с участием молекулярных ионов в связанном и свободном состояниях [27, 28]. В случае активных сред на основе смесей тяжелых инертных газов наряду с гомоядерными ионами, такими как Xe_2^+, необходимо включать в кинетическую схему элементарные процессы с участием гетероядерных ионов $KrXe^+$, $ArXe^+$ и т. п. Последние характеризуются малыми энергиями диссоциации (D_0) и сильным спин-орбитальным взаимодействием, энергия которого значительно превышает энергию связи иона. При газовых температурах T, характерных для активных сред газовых лазеров и эксиламп, выполняется условие $k_B T \gtrsim \hbar\omega_e$, где $\hbar\omega_e$ – так называемый нижний колебательный квант иона, вследствие чего эффективно заселенными

В.С.Лебедев, К.С.Кислов, А.А.Нариц. Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН, Россия, 119991 Москва, Ленинский просп., 53; e-mail: vlebedev@sci.lebedev.ru

Поступила в редакцию 15 сентября 2022 г.

оказываются большинство колебательно-вращательных уровней иона, а также существенная часть континуума межъядерного движения. Огромное число квантовых состояний, определяющих спектрально-кинетические свойства гетероядерных ионов тяжелых благородных газов, значительно осложняет их теоретическое описание и экспериментальное исследование. Этим, вероятно, обусловлено то, что на настоящий момент отсутствуют экспериментальные данные по фотопоглощению подобных ионов при $T \gtrsim 300$ K, а данные по спектрам излучения ограничены лишь относительными величинами [29–33].

При исследовании оптических свойств плазм смесей тяжелых инертных газов, как правило, учитываются вклады гомоядерных молекулярных ионов, в то время как влиянием гетероядерных катионов пренебрегается. Вместе с тем при характерных соотношениях концентраций активного и буферного газов, таких как [Xe]:[Ar] ~ 1:100 [6,14], концентрации гетероядерных ионов могут многократно превышать концентрации гомоядерных ионов активной среды. Более того, как неоднократно отмечалось (см., напр., [14]), диссоциативная рекомбинация (ДР) гетероядерных ионов $KrXe^+$, $ArXe^+$ является одним из основных каналов заселения возбужденных уровней ксенона в газовых лазерах.

В настоящей работе мы рассматриваем фотопроцессы, протекающие с участием молекулярных и квазимолекулярных катионов, в то время как спектральные свойства нейтральных молекул исследуются, например, в обзоре [13]. Вследствие огромного количества колебательно-вращательных уровней, участвующих в фотопереходах, спектр поглощения этих ионов оказывается квазинепрерывным и перекрывает значительную часть ближнего УФ (для $ArXe^+$) и видимого (для $KrXe^+$) диапазонов спектра. Установлены механизмы фотопереходов, ответственные за поглощение и излучение в различных спектральных областях. Здесь следует отметить, что вследствие специфики электронных термов изучаемых ионов фотопоглощение в указанных диапазонах сопровождается передачей электрона от легкого атома к иону ксенона. Полученные результаты важны для моделирования кинетики заселения уровней активных переходов газовых лазеров, спектроскопической диагностики активной среды и определения скоростей соответствующих столкновительных процессов, а также для оптимизации работы лазерных установок и мощных источников излучения УФ диапазона.

Наряду с изучением фотопереходов в ионах $RgXe^+$ (Rg = Ar, Kr) в работе рассматриваются процессы разрушения этих ионов в столкновениях с электронами плазмы. В то время как диссоциативная рекомбинация приводит к заселению рабочих уровней ксенона в лазерах высокого давления, альтернативный канал разрушения гетероядерных ионов $RgXe^+$ электронным ударом в результате процесса диссоциативного возбуждения (ДВ) уменьшает эффективность конкурирующего канала ДР. Соответственно, последовательное описание динамики указанных столкновительных процессов и определение их сечений и констант скоростей при различных параметрах плазмы является принципиальным для построения самосогласованных кинетических моделей создания инверсной заселенности в лазерах на переходах ксенона. Важно отметить, что в настоящей работе впервые указано на необходимость включения в кинетику активной среды лазеров на смесях инертных газов процесса диссоциативного возбуждения ионов $RgXe^+$ электронным ударом, сопровождающегося образованием нейтрального атома Xe и иона Ar^+ или Kr^+.

Актуальность исследования процессов диссоциативной рекомбинации электронов с молекулярными ионами в смесях инертных газов связана, в частности, с тем, что они играют важную роль при рекомбинационном заселении возбужденных уровней атомов в плазме послесвечения импульсных разрядов. В ряде работ отмечалось, что ДР ионов инертных газов ($HeXe^+$ и $NeXe^+$) вносит ключевой вклад в кинетику диэлектрических барьерных разрядов, используемых для создания эксимерных ламп и газовых лазеров [34–38]. Многочисленные исследования [39–46] указывают на то, что ДР молекулярных ионов инертных газов необходимо учитывать при анализе механизма формирования инверсной заселенности в активной среде мощного ксенового лазера ИК диапазона, функционирующего на переходе 5d → 6p. Согласно результатам работ [39, 45, 46] заселение верхних состояний рабочих переходов происходит преимущественно не прямым способом, а в результате захватов электронов на высокие уровни и серии столкновительных переходов с изменением главного квантового числа, сопровождающихся девозбуждением атома ксенона. К этому следует добавить, что в соответствии с нашими расчетами [47] резонансные механизмы захвата электронов атомарными ионами Xe^+ в возбужденные и высоковозбужденные состояния атомов ксенона и неупругих переходов $nl \to n'l'$ могут существенно увеличивать скорости электрон-ионной рекомбинации в плазме смесей инертных газов Rg/Xe.

Исследованиям рекомбинационных процессов в плазме чистых инертных газов и их смесей посвящено большое количество работ. Большинство из них было выполнено для процессов диссоциативной рекомбинации гомоядерных ионов инертных газов Xe_2^+, Kr_2^+, Ar_2^+, Ne_2^+ и He_2^+ (см. [48–50] и приведенные там ссылки). Напротив, надежных экспериментальных данных по константам скоростей рекомбинационных процессов с участием гетероядерных ионов инертных газов имеется крайне мало, а их теоретическое описание до недавнего времени было весьма фрагментарно. Детальные экспериментальные исследования выполнены недавно [51–54] лишь для процесса ДР ионов $HeNe^+$, обладающих значительной энергией диссоциации. Имеются также оценки [39, 55] констант скоростей ДР слабосвязанных, $NeXe^+$, и умеренно-связанных, $ArXe^+$, ионов, выполненные с использованием упрощенных теоретических подходов. В большинстве современных работ при анализе кинетики диссоциативной рекомбинации используются полуэмпирические формулы, полученные на основе простейших физических моделей [34, 35, 39, 55]. Однако соответствующие результаты заметно отличаются от имеющихся экспериментальных данных для области высоких температур, не описывают заселение отдельных атомных уровней и дают лишь общее представление о характере процесса рекомбинации.

Большинство авторов работ по исследованию диссоциативного возбуждения молекулярных ионов электронным ударом рассматривали ионы водорода и его изотопов. Ряд работ посвящен исследованию процессов ДВ гомоядерных ионов инертных газов ввиду важной роли таких ионов в плазменных средах, возбуждаемых электронным пучком, в газовых разрядах и с помощью оптической накачки лазерным излучением. В экспериментальных работах по исследованию Ar_2^+ [56] и Xe_2^+ [57], а

также в теоретической работе [58] было показано, что эффективность процесса ДВ сопоставима с эффективностью ДР при электронных температурах $T_e \approx 10000$ K. Наиболее полное теоретическое описание процесса диссоциативного возбуждения электронным ударом для гомоядерных ионов инертных газов было первоначально дано в работе [59]. На основе полученных в [59] квазиклассических выражений в работах [58, 60] были введены полуэмпирические оценочные формулы для соответствующих констант скоростей ДВ ионов He_2^+ и Ar_2^+. Эти формулы использовались в [61–64] при построении кинетических моделей аргоновой плазмы атмосферного давления в рамках разработки лазеров с оптической накачкой на инертных газах. Их применимость ограничена областью температур $T_e \lesssim 2$ эВ при рабочем диапазоне $T_e \lesssim 5$ эВ. В целом, надежных теоретических данных по константам скоростей диссоциативного возбуждения гомоядерных ионов инертных газов электронным ударом в широком диапазоне температур электронной (T_e) и газовой (T) компонент плазмы на настоящий момент явно недостаточно. Более того, до появления наших работ [65, 66] в литературе полностью отсутствовали экспериментальные и теоретические данные по сечениям и константам скоростей процессов ДВ гетероядерных ионов инертных газов. Эти данные, существенно расширенные с учетом впервые рассмотренного в настоящей работе диссоциативного возбуждения ионов с перезарядкой, требуются для получения самосогласованной физической картины процессов распада молекулярных ионов в плазме смесей инертных газов наряду с полученными недавно данными [67–69] по сечениям и константам скоростей процесса ДР ионов $RgXe^+$ (Rg = He, Ne, Ar, Kr) с образованием атомов в высоковозбужденных состояниях.

Представленная нами статья организована следующим образом. Разд.2 посвящен анализу процессов непрерывного фотопоглощения гетероядерными ионами $ArXe^+$ и $KrXe^+$, сопровождающихся переходами с перезарядкой. Предварительно дана сводка основных формул для расчета эффективных сечений, коэффициентов поглощения и констант скоростей основных радиационных переходов. В разд.3 приведены результаты исследования неадиабатических процессов столкновения электронов с ионами $ArXe^+$ и $KrXe^+$, приводящих к их разрушению. Это процессы диссоциативной рекомбинации с образованием атомов Xe в высоковозбужденных состояниях, а также прямое диссоциативное возбуждение этих ионов с образованием атомарных ионов в конечном канале. Предварительно обсуждается физический механизм изучаемых процессов и приведены формулы для расчета их эффективных сечений и констант скоростей. Основные результаты работы обсуждаются в Заключении.

2. Фотопереходы в гетероядерных ионах $ArXe^+$ и $KrXe^+$

2.1. Вид кривых потенциальной энергии и типы фотопереходов

Области длин волн и типы возможных фотопереходов между основным и первыми возбуждеными электронными состояниями гетероядерных ионов инертных газов определяются структурой кривых потенциальной энергии $U(R)$ этих ионов (рис.1). Ионы $ArXe^+$ и $KrXe^+$ обладают умеренно малыми значениями энергии диссоциации $D_0^{(i)}$ в основном состоянии $|i\rangle = |X[1/2]\rangle$ (179 и 389 мэВ для $ArXe^+$ и $KrXe^+$ соответственно). Энергия спин-орбитального расщепления состояний $^2P_{1/2}$ и $^2P_{3/2}$ ионов Xe^+, Kr^+ и Ar^+ равны соответственно 1.3, 0.67 и 0.18 эВ. Следует добавить, что электронные состояния ионов $ArXe^+$ и $KrXe^+$ относятся к типу связи «c» по Гунду [70] и характеризуются квантовым числом Ω, равным проекции полного электронного момента на молекулярную ось.

Помимо основного состояния, существует три типа возбужденных электронных состояний: 1) состояния A[3/2], которые диссоциируют до того же предела, что и основное состояние, Rg + Xe^+ ($^2P_{3/2}$); 2) состояния, которые диссоциируют к тому же распределению заряда, что и основное состояние, но к другой компоненте тонкой структуры Xe^+ ($^2P_{1/2}$) (состояния A[1/2]); 3) состояния, отвечающие переносу заряда. В $ArXe^+$ (рис.1,*а*) три нижних терма

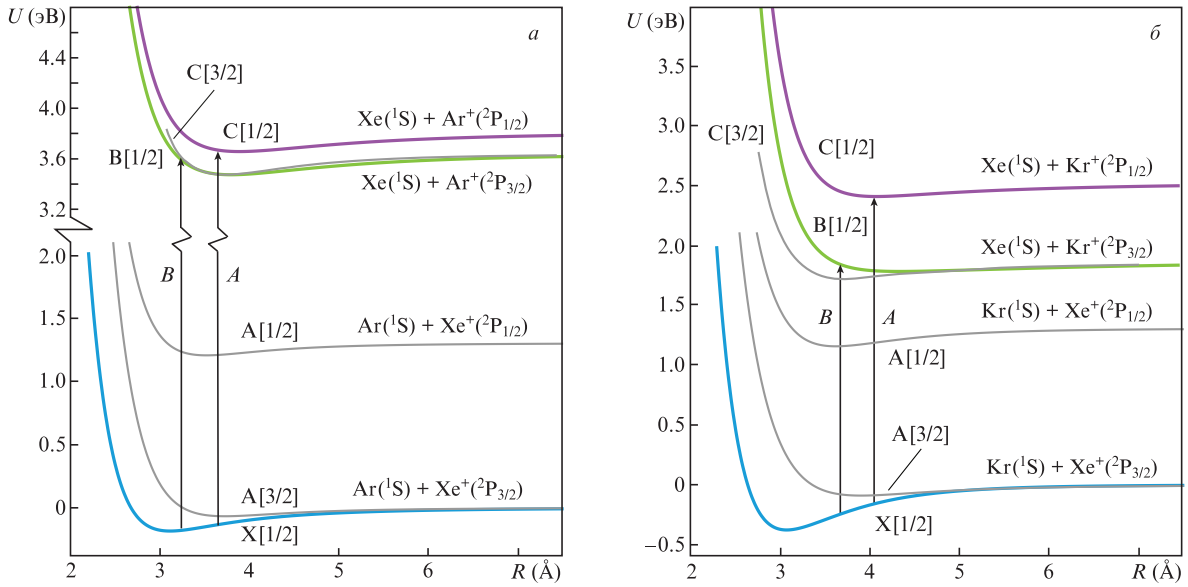

Рис.1. Кривые потенциальной энергии основного, X[1/2], и первых возбужденных, A[3/2], A[1/2], B[1/2], C[3/2] и C[1/2], электронных термов гетероядерных ионов $ArXe^+$ (*а*) и $KrXe^+$ (*б*) в зависимости от межъядерного расстояния R. Наиболее интенсивные дипольно-разрешенные переходы между электронными термами, сопровождаемые перезарядкой, указаны стрелками.

(X[1/2], A[3/2] и A[1/2]) соответствуют пределам диссоциации Ar + Xe^+ ($^2P_{3/2}$) и Ar + Xe^+ ($^2P_{1/2}$), тогда как три более высоких терма, B[1/2], C[3/2] и C[1/2], диссоциируют на компоненты Xe + Ar^+ ($^2P_{3/2}$) и Xe + Ar^+ ($^2P_{1/2}$) соответственно. Для иона $KrXe^+$ обозначения термов те же. Оптические переходы разрешены из основного состояния во все возбужденные состояния, показанные на рис.1. Наши расчеты силы осциллятора электронного перехода (f_{if}) показывают, что для переходов в состояния с переносом заряда B[1/2] и C_2[1/2] значения f_{if} по меньшей мере на три порядка больше, чем для всех других переходов. Наиболее интенсивные полосы обозначены как *B* и *A* [29].

В настоящей работе мы рассматриваем поглощение и излучение света молекулярными и квазимолекулярными ионами тяжелых инертных газов в видимой и УФ областях спектра. Изучаемые фотопроцессы сопровождаются неадиабатическими переходами между электронными термами. Обозначим атом более тяжелого элемента как A, а более легкого – как B. В зависимости от того, находится ли молекулярный ион в связанном ($E_{vJ} < 0$) или свободном ($E > 0$) состоянии в начальном канале, а также от того, является ли связанным ($E_{v'J'} < 0$) или свободным ($E' > 0$) конечное состояние иона, поглощение фотона с энергией $\hbar\omega$ может быть вызвано одним из четырех типов переходов:

$$BA^+(i,vJ) + \hbar\omega \to BA^+(f,E') \to \begin{cases} B + A^+, \\ B^+ + A, \end{cases} \quad (1)$$

$$B + A^+ + \hbar\omega \to BA^+(i,E) + \hbar\omega \to BA^+(f,E') \to \begin{cases} B + A^+, \\ B^+ + A, \end{cases} \quad (2)$$

$$BA^+(i,vJ) + \hbar\omega \to BA^+(f,v'J'), \quad (3)$$

$$B + A^+ + \hbar\omega \to BA^+(i,E) + \hbar\omega \to BA^+(f,v'J'), \quad (4)$$

где $|i\rangle$ обозначает электронный терм $U_i(R)$ в начальном состоянии; $|f\rangle$ – электронный терм $U_f(R)$ в конечном состоянии; E_{vJ} и E, а также $E_{v'J'}$ и E' – энергии относительного движения ядер иона BA^+ в начальном и конечном состояниях соответственно. Квантовые числа vJ и $v'J'$ характеризуют начальное и конечное связанные колебательно-вращательные состояния иона BA^+.

Процесс (1) фотодиссоциации молекулярного иона представляет собой связанно-свободный переход, сопровождающийся переходом $|i\rangle \to |f\rangle$ между его двумя электронными термами $U_i(R)$ и $U_f(R)$. Процесс (2) соответствует свободно-свободному переходу квазимолекулярного иона BA^+ и также сопровождается изменением $|i\rangle \to |f\rangle$ электронного состояния. Для этих двух типов радиационных процессов с нижним связанным термом и верхним отталкивательным термом (как в случае иона H_2^+) основы полуклассической теории непрерывного фотопоглощения были заложены Бейтсом [71] в рамках квазистатического рассмотрения. Такой подход был развит далее в серии наших работ [72–75] на основе квазиклассической и квантовой версий теории неадиабатических переходов [70, 76] и приближения квазинепрерывного спектра для колебательно-вращательных уровней двухатомной системы [77]. Для рассматриваемого здесь случая, когда обе кривые потенциальной энергии $U_i(R)$ и $U_f(R)$ начального и конечного электронных термов гетероядерного иона инертного газа имеют потенциальные ямы, обобщение этой теории дано нами недавно в работе [78]. В этом случае дополнительно к каналам (1) и (2) радиационных переходов открываются еще два канала – связанно-связанные (3) и свободно-связанные (4) переходы (рис.2,*а*).

Общей характерной чертой всех исследованных в настоящей работе фотопроцессов является то, что они происходят в достаточно узкой окрестности точки пересечения кривых потенциальной энергии $U_i(R) + \hbar\omega$ и $U_f(R)$, соответствующих начальному и конечному электронным термам молекулярной или квазимолекулярной системы. Положение этой точки R_ω зависит от частоты фотона ω и определяется из закона сохранения энергии

$$\Delta U_{fi}(R_\omega) = U_f(R_\omega) - U_i(R_\omega) = \hbar\omega. \quad (5)$$

Это означает, что в точке R_ω происходит резонансный обмен энергии фотона с энергией электронной оболочки иона BA^+ в результате неадиабатического перехода меж-

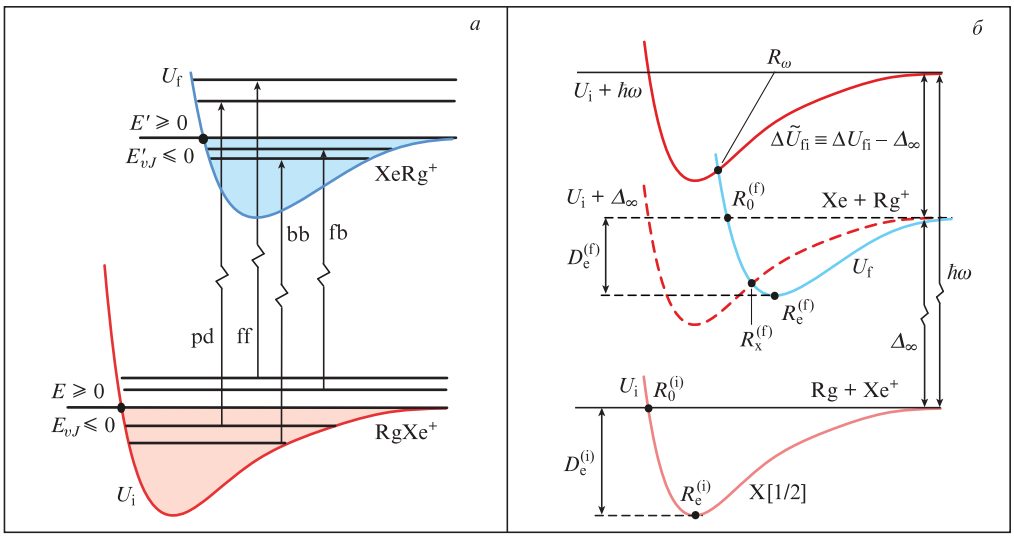

Рис.2. Схематическое изображение исследуемых радиационных процессов с участием гетероядерных ионов инертных газов $RgXe^+$: pd – фотодиссоциация, ff – свободно-свободные переходы, bb – связанно-связанные переходы, fb – свободно-связанные переходы (*а*), а также схематическое изображение пересечения кривых потенциальной энергии в точке R_ω, узкая окрестность которой вносит основной вклад в переход между нижним $U_i(R)$ и верхним $U_f(R)$ электронными термами иона $RgXe^+$, для фотопроцессов (1)–(4) (*б*).

ду его различными электронными термами $|\mathrm{i}\rangle \to |\mathrm{f}\rangle$ (см. рис.2).

2.2. Эффективные сечения и коэффициенты поглощения света

В условиях локального термодинамического равновесия при заданной температуре T ионной и атомно-молекулярной компонент плазмы исходную формулу для коэффициента поглощения света с частотой ω можно записать в виде

$$k_T^{(\mathrm{ch})} = \sigma_T^{(\mathrm{ch})}(\omega) N_{\mathrm{BA}^+}^{(\mathrm{i})}, \quad N_{\mathrm{BA}^+}^{(\mathrm{i})} = \sum_{vJ} N_{\mathrm{BA}^+}^{(\mathrm{i})}(vJ), \qquad (\mathrm{ch}) = \{\mathrm{pd}, \mathrm{bb}\}, \tag{6}$$

$$\sigma_T^{(\mathrm{ch})}(\omega) = \frac{1}{sZ_{\mathrm{vr}}} \sum_{vJ\in(\mathrm{ch})} (2J+1)\sigma_{vJ}^{(\mathrm{ch})}(\omega) \exp\left(-\frac{\varepsilon_{vJ}}{k_{\mathrm{B}}T}\right). \tag{7}$$

Здесь

$$\sigma_T^{(\mathrm{ch})}(\omega) = \sum_{vJ\in(\mathrm{ch})} \sigma_{vJ}^{(\mathrm{ch})}(\omega) \frac{N_{\mathrm{BA}^+}^{(\mathrm{i})}(vJ)}{N_{\mathrm{BA}^+}^{(\mathrm{i})}}$$

– усредненное по больцмановскому распределению сечение фотопоглощения, соответствующее одному из двух возможных каналов (ch) = {pd, bb} реакций (1) и (3); $N_{\mathrm{BA}^+}^{(\mathrm{i})}$ – суммарная по всем колебательно-вращательным vJ-уровням концентрация ионов BA^+ в связанных состояниях ($E_{vJ} < 0$) основного электронного терма $U_{\mathrm{i}}(R)$; $\sigma_{vJ}^{(\mathrm{ch})}(\omega)$ – парциальное сечение поглощения света с заданного уровня E_{vJ} основного электронного терма, $U_{\mathrm{i}}(R)$, иона BA^+;

$$Z_{\mathrm{vr}} = \frac{1}{s}\sum_{vJ}(2J+1)\exp\left(-\frac{\varepsilon_{vJ}}{k_{\mathrm{B}}T}\right)$$

– колебательно-вращательная статистическая сумма иона $\mathrm{BA}^+(\mathrm{i})$; s – фактор симметрии, равный 1 для гетероядерных и 2 для гомоядерных двухатомных молекул или ионов. Обозначение $vJ \in (\mathrm{ch})$ в (7) означает суммирование по всем энергетически разрешенным значениям v и J для данного канала реакции (ch).

В общем случае весьма трудоемкая задача расчета суммарного по огромному числу состояний vJ коэффициента поглощения света и усредненного по больцмановскому распределению сечения фотопоглощения $\sigma_T^{(\mathrm{ch})}(\omega)$ может быть аналитическим образом решена в приближении колебательно-вращательного квазиконтинуума. Это оправдано при условии, когда тепловая энергия превышает величину нижнего колебательного кванта молекулярного иона в начальном электронном состоянии: $k_{\mathrm{B}}T \gtrsim \hbar\omega_{\mathrm{e}}^{(\mathrm{i})}$. Окончательный результат может быть представлен в компактном виде [74]:

$$\sigma_T^{(\mathrm{ch})}(\omega) = \frac{16\pi^3}{3c}\frac{\omega R_\omega^2 |d_{\mathrm{fi}}(R_\omega)|^2}{\Delta F_{\mathrm{fi}}(R_\omega) sZ_{\mathrm{vr}}}\left(\frac{\mu kT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \times \exp\left(-\frac{D_0^{(\mathrm{i})} + U_{\mathrm{i}}(R_\omega)}{kT}\right)\Theta_T^{(\mathrm{ch})}(R_\omega). \tag{8}$$

Здесь c – скорость света; $d_{\mathrm{fi}}(R_\omega)$ – дипольный матричный элемент перехода между электронными термами U_{i} и U_{f};

$$\Delta F_{\mathrm{fi}}(R_\omega) = \left|\frac{\mathrm{d}U_{\mathrm{i}}}{\mathrm{d}R} - \frac{\mathrm{d}U_{\mathrm{f}}}{\mathrm{d}R}\right|_{R_\omega}$$

– разность их наклонов в точке R_ω, определяемой из условия (5). Для каждого заданного значения частоты света ω безразмерный фактор $\Theta_T^{(\mathrm{ch})}(\omega)$ определяет относительный вклад рассматриваемого канала поглощения света в полный коэффициент фотопоглощения k_T^{tot}:

$$\Theta_T^{(\mathrm{ch})}(\omega) = k_T^{(\mathrm{ch})}(\omega)/k_T^{\mathrm{tot}}(\omega), \qquad k_T^{\mathrm{tot}}(\omega) = k_T^{\mathrm{pd}}(\omega) + k_T^{\mathrm{ff}}(\omega) + k_T^{\mathrm{bb}} + k_T^{\mathrm{fb}}(\omega). \tag{9}$$

Коэффициент поглощения света $k_T^{(\mathrm{ch})}$ [см$^{-1}$] при свободно-свободном (2) или свободно-связанном (4) переходе с частотой ω имеет вид [74]

$$k_T^{(\mathrm{ch})}(\omega) = \eta_T^{(\mathrm{ch})}(\omega) N_{\mathrm{B}} N_{\mathrm{A}^+}, \qquad \eta_T^{(\mathrm{ch})} = \langle v_E \sigma_{\mathrm{i}E\to\mathrm{f}E'}^{(\mathrm{ch})}\rangle_T, \ (\mathrm{ch}) = \{\mathrm{ff}, \mathrm{fb}\}. \tag{10}$$

Здесь $\eta_T^{(\mathrm{ch})}$ [см^5] – соответствующая константа скорости; $\sigma_{\mathrm{i}E\to\mathrm{f}E'}^{(\mathrm{ch})}$ [см$^4\cdot$с] – эффективное сечение процессов (2) и (4); N_{B} и N_{A^+} – концентрации атомов B буферного инертного газа и атомарных ионов инертного газа A^+ в исходном электронном состоянии $|\mathrm{i}\rangle$. Обозначение $\langle v_E \sigma_{\mathrm{i}E\to\mathrm{f}E'}^{(\mathrm{ch})}\rangle_T$ означает усреднение по максвелловскому распределению относительных скоростей v_E сталкивающихся частиц при температуре газа T, рассчитанному по энергетически разрешенным областям, соответствующим свободно-свободному, (ch) = ff, или свободно-связанному, (ch) = fb, каналу фотопоглощения. Кинетические энергии E и E' сталкивающихся частиц A^+ и B в процессе (2) отсчитываются от соответствующих пределов диссоциации иона BA^+ при $R \to \infty$ в начальном $|\mathrm{i}\rangle$ и конечном $|\mathrm{f}\rangle$ электронных состояниях,

$$E = \frac{\hbar^2 q^2}{2\mu}, \quad E' = \frac{\hbar^2 q'^2}{2\mu} = E + \hbar\omega - \Delta_\infty, \qquad \Delta_\infty \equiv \Delta U_{\mathrm{fi}}(R\to\infty), \tag{11}$$

где μ – приведенная масса частиц A^+ и B; Δ_∞ – разность энергий их конечного, $U_{\mathrm{f}}(R)$, и начального, $U_{\mathrm{i}}(R)$, электронных термов при $R \to \infty$.

Для каждого из вкладов свободно-свободных (2) и свободно-связанных (4) переходов в коэффициент поглощения света $k_T^{(\mathrm{ch})}$ в работах [74, 78] в рамках подхода, аналогичного используемому при выводе формулы (8), было получено выражение

$$k_T^{(\mathrm{ch})}(\omega) = \eta_T^{(\mathrm{ch})} N_{\mathrm{B}} N_{\mathrm{A}^+}, \qquad \eta_T^{(\mathrm{ch})} = \frac{1}{s}\frac{g_{\mathrm{BA}^+}}{g_{\mathrm{A}^+} g_{\mathrm{B}}}\frac{16\pi^3}{3c}\frac{\omega R_\omega^2 |d_{\mathrm{fi}}(R_\omega)|^2}{\Delta F_{\mathrm{fi}}(R_\omega)} \times \exp\left(-\frac{U_{\mathrm{i}}(R_\omega)}{kT}\right)\Theta_T^{(\mathrm{ch})}(R_\omega). \tag{12}$$

Здесь g_{A^+}, g_{B} – электронные статистические веса частиц A^+ и B, а безразмерный фактор $\Theta_T^{(\mathrm{ch})}(R_\omega)$ согласно его общему определению (9) описывает относительный вклад процессов с участием непрерывного спектра в начальных каналах реакций (2) и (4), подобно тому, как в формуле (8) он определяет долю процессов (1) и (3) с участием колебательно-вращательного квазиконтинуума в результирующем фотопоглощении.

Коэффициенты фотопоглощения при свободно-свободных и свободно-связанных переходах непосредственно выражаются через произведение $N_{\rm B}N_{\rm A^+}$ концентраций атомов и атомарных ионов и соответствующие константы скорости $\eta_T^{\rm (ch)}$ процессов (2) и (4) (см. (10) и (12)). С другой стороны, коэффициенты поглощения (6) света молекулярными ионами $\rm BA^+(i)$, учитывающие суммарный вклад всех возможных колебательно-колебательных уровней, выражаются (см. (7)) через усредненные по больцмановскому распределению сечения $\eta_T^{\rm (ch)}(\omega)$ и полную концентрацию $N_{\rm BA^+}^{\rm (i)}$ связанных молекулярных ионов $\rm BA^+$ в основном электронном состоянии $|{\rm i}\rangle$, просуммированную по всем уровням vJ (см. (6)). В условиях локального термодинамического равновесия концентрации $N_{\rm B}$, $N_{\rm A^+}$ и $N_{\rm BA^+}$ частиц подчиняются закону действующих масс

$$\frac{N_{\rm BA^+}}{N_{\rm B}N_{\rm A^+}} = \frac{g_{\rm BA^+}}{g_{\rm B}g_{\rm A^+}} Z_{\rm vr}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{\mu k_{\rm B}T}\right)^{3/2}\exp\left(\frac{D_0}{k_{\rm B}T}\right). \qquad (13)$$

Это позволяет ввести соответствующие константы скорости $\eta_T^{\rm (ch)}$ реакций (1) и (3) с участием связанных молекулярных ионов $\rm BA^+(i)$, аналогично случаю радиационных переходов с участием континуума этого иона в начальных каналах реакций (2) и (4):

$$k_T^{\rm (ch)}(\omega) = \eta_T^{\rm (ch)}(\omega)N_{\rm B}N_{\rm A^+}, \qquad (14)$$

$$\eta_T^{\rm (ch)} = \sigma_T^{\rm (ch)}\frac{N_{\rm BA^+}}{N_{\rm B}N_{\rm A^+}}, \quad ({\rm ch}) = \{{\rm pd}, {\rm bb}\}.$$

В результате с помощью уравнений (8), (13) и (14) могут быть получены выражения для коэффициентов поглощения и констант скоростей η_T процессов (1) и (3), идентичные соответствующим выражениям для процессов (2) и (4). С использованием определения силы осциллятора

$$f_{\rm fi}(R_\omega) = \frac{2m_{\rm e}\omega}{3\hbar e^2}|d_{\rm fi}(R_\omega)|^2$$

электронного перехода $|{\rm i}\rangle \to |{\rm f}\rangle$ эти выражения записываются в следующем виде:

$$k_T^{\rm (ch)} = \frac{1}{s}\frac{g_{\rm BA^+}}{g_{\rm A^+}g_{\rm B}}N_{\rm B}N_{\rm A^+}8\pi^3\alpha\left(\frac{\hbar^2}{m_{\rm e}}\right)\frac{R_\omega^2 f_{\rm fi}(R_\omega)}{\Delta F_{\rm fi}(R_\omega)}$$

$$\times\exp\left(-\frac{U_{\rm i}(R_\omega)}{kT}\right)\Theta_T^{\rm (ch)}(R_\omega), \qquad (15)$$

где $\alpha = e^2/(\hbar c)$ – постоянная тонкой структуры; $m_{\rm e}$ – масса электрона.

Конкретные выражения для относительных вкладов $\Theta_T^{\rm (ch)}(R_\omega)$ каждого из рассматриваемых здесь четырех каналов поглощения света в полный коэффициент фотопоглощения $k_T^{\rm tot}$, полученные в рамках полуклассического подхода [74] и имеющие наглядный физический смысл, приведены в работе [78]. Как показано в [78], суммирование коэффициентов поглощения в (9) с учетом всех четырех каналов дает выражение (12) для полного коэффициента поглощения $k_T^{\rm tot}(\omega)$ с безразмерным фактором $\Theta_T^{\rm tot}(\omega) = 1$. Отметим также, что в условиях локального термодинамического равновесия для каждого фотопроцесса (1)–(4) имеет место известное соотношение

$$K_T(\omega) = k_T(\omega)\left[1 - \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_{\rm B}T}\right)\right], \qquad (16)$$

связывающее фигурирующий в представленных выше формулах коэффициент поглощения света $k_T(\omega)$ с коэффициентом поглощения $K_T(\omega)$, учитывающим дополнительно обратный процесс вынужденного испускания.

2.3. Фотопоглощение на связанно-связанных, связанно-свободных, свободно-свободных и свободно-связанных переходах

Сечения фотодиссоциации и связанно-связанных переходов. Поглощение света связанными ионами $\rm RgXe^+$, находящимися в основном электронном состоянии, приводит к радиационному опустошению начального канала процесса диссоциативной рекомбинации и, соответственно, непосредственно влияет на эффективность заселения верхних рабочих уровней лазеров и эксиламп, работающих на переходах Xe I. Ниже приведены результаты расчетов сечений фотодиссоциации $\sigma_T^{\rm pd}(\lambda)$ и связанно-связанных переходов $\sigma_T^{\rm bb}(\lambda)$, а также суммарного сечения $\sigma_T^{\rm pd}(\lambda) + \sigma_T^{\rm bb}(\lambda)$ неадиабатического фотопоглощения связанных ионов $\rm RgXe^+$. Нами рассмотрены наиболее интенсивные переходы: $\rm RgXe^+(X[1/2]) + \hbar\omega \to RgXe^+(C[1/2]) \to Xe + Rg^+(^2P_{1/2})$ (полоса *A*) и $\rm RgXe^+(X[1/2]) + \hbar\omega \to RgXe^+(B[1/2]) \to Xe + Rg^+(^2P_{3/2})$ (полоса *B*). Полученные результаты для иона $\rm ArXe^+$ приведены на рис.3 при температурах газовой смеси Ar/Xe T = 300, 500 и 800 K. Полные сечения $\sigma_T^{\rm pd} + \sigma_T^{\rm bb}$ имеют колоколообразный профиль, ограниченный максимальной длиной волны $\lambda_{\rm max}^{\rm (f)}$,

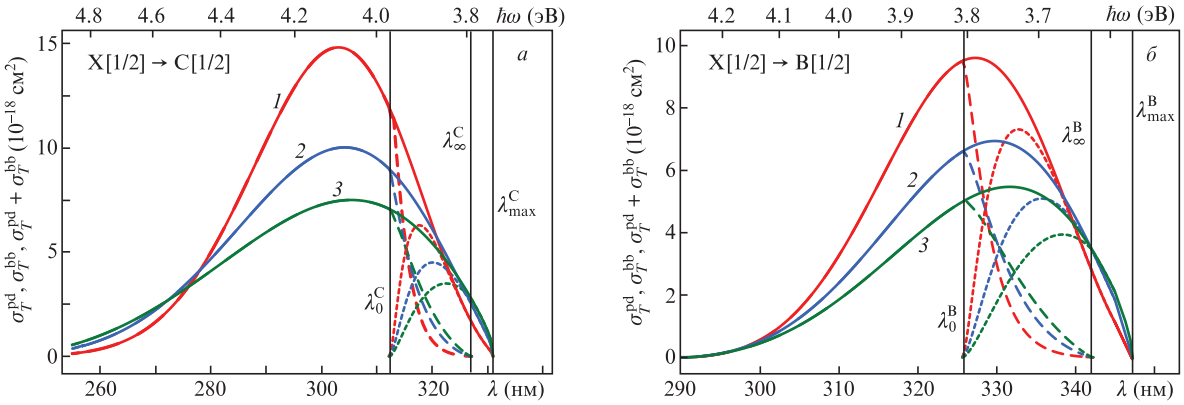

Рис.3. Сечения фотодиссоциации $\sigma_T^{\rm pd}$ (штриховые кривые), связанно-связанных переходов $\sigma_T^{\rm bb}$ (пунктирные кривые) и сумма сечений $\sigma_T^{\rm pd} + \sigma_T^{\rm bb}$ (сплошные кривые) в радиационных процессах $\rm ArXe^+(X[1/2]) + \hbar\omega \to ArXe^+(C[1/2]) \to Xe + Ar^+(^2P_{1/2})$ (полоса *A*) (*а*) и $\rm ArXe^+(X[1/2]) + \hbar\omega \to ArXe^+(B[1/2]) \to Xe + Ar^+(^2P_{3/2})$ (полоса *B*) (*б*) при газовых температурах T = 300 (*1*), 500 (*2*) и 800 K (*3*).

соответствующей минимально допустимому значению энергии неадиабатического перехода $\min\{\Delta U_{\rm fi}(R)\}$. Положения максимумов профилей могут быть оценены из условия, что переходы между термами $U_{\rm i}(R_\omega)$ и $U_{\rm f}(R_\omega)$ происходят вблизи положения равновесия $R_{\rm e}^{\rm (i)}$ нижней кривой потенциальной энергии, т.е. $R_\omega \approx R_{\rm e}^{\rm (i)}$ или $\hbar\omega \approx \Delta U_{\rm fi}(R_{\rm e}^{\rm (i)})$ (см. рис.2). По мере увеличения T профиль уширяется, а положение максимума медленно смещается в длинноволновую область. Это объясняется увеличением вероятности низкоэнергетических переходов, протекающих вдали от положения равновесия, $R_\omega \gg R_{\rm e}^{\rm (i)}$.

Из рис.3 следует, что ион $ArXe^+$ в связанном состоянии эффективно поглощает излучение в диапазоне 270–340 нм, включающем характерные длины волн ксенон-галогенных эксимерных лазеров. Фотодиссоциация вносит определяющий вклад в суммарное сечение поглощения $\sigma_T^{\rm pd} + \sigma_T^{\rm bb}$ в широком диапазоне длин волн, включая окрестность максимума. Максимальные значения сечений фотодиссоциации $\sigma_T^{\rm pd}$ оказываются $\sim 10^{-17}$ см^2. При $T = 300$ K $\max\{\sigma_T^{\rm pd}\} = 1.5 \times 10^{-17}$ см^2 на $\lambda = 305$ нм для перехода в полосе A и $\max\{\sigma_T^{\rm pd}\} = 0.95 \times 10^{-17}$ см^2 на $\lambda = 326$ нм для перехода в полосе B. Таким образом, процесс фотодиссоциации ионов $ArXe^+$ имеет ту же характерную область длин волн поглощения, что и в случае гомоядерных ионов Ar_2^+ и Xe_2^+ для наиболее сильного перехода $\mathrm{I}(1/2)_{\rm u} \to \mathrm{II}(1/2)_{\rm g}$. При этом максимальная эффективность фотодиссоциации ионов $ArXe^+$ оказывается всего в несколько раз меньше, чем для ионов Rg_2^+ (Rg = Ar и Xe). Так, при $T = 300$ K имеем $\max\{\sigma_T^{\rm pd}\} = 3.8 \times 10^{-17}$ см^2 на $\lambda = 300$ нм для ионов Ar_2^+ и $\max\{\sigma_T^{\rm pd}\} = 3.65 \times 10^{-17}$ см^2 на $\lambda = 335$ нм для ионов Xe_2^+ [79]. Важно отметить, что для рассматриваемых полос поглощения фотодиссоциация приводит к образованию ионов Ar^+ и нейтральных атомов ксенона. С учетом того, что ион Ar^+ может участвовать в дальнейших реакциях конверсии в молекулярные ионы $ArXe^+$, процесс (1) не является в полной мере «паразитным», и его следует принимать во внимание при составлении кинетических моделей соответствующих источников излучения УФ диапазона.

Сечение фотодиссоциации $\sigma_T^{\rm pd}(\lambda)$ начинает резко убывать с ростом λ при $\lambda > \lambda_0^{\rm (f)}$ (где (f) = {B, C}) и обращается в нуль при $\lambda = \lambda_\infty^{\rm (f)}$, соответствующей асимптотической энергии перехода между термами $\Delta_\infty \equiv \Delta U_{\rm fi}(R \to \infty)$. Указанная область длин волн соответствует точкам пересечения термов R_ω, лежащим в области межъядерных расстояний $R_0^{\rm (f)} < R_\omega \leqslant R_{\rm x}^{\rm (f)}$. Причина резкого убывания сечения $\sigma_T^{\rm pd}(\lambda)$ в указанной области λ состоит в появлении альтернативного канала поглощения – связанно-связанных фотопереходов (см. рис.2). Как видно из рис.3, интегральные сечения $\sigma_T^{\rm bb}$ таких переходов вносят существенный вклад в суммарное сечение поглощения $\sigma_T^{\rm pd} + \sigma_T^{\rm bb}$ в области длинноволновых крыльев спектров ($\lambda > 315$ нм для переходов в полосе A и $\lambda > 330$ нм для переходов в полосе B). Связанно-связанные фотопереходы особенно сильны в случае полосы B: максимальное значение $\sigma_T^{\rm bb}(\lambda)$ оказывается всего в 1.3–1.4 раза ниже максимального значения $\sigma_T^{\rm pd}(\lambda)$. Причина высокой эффективности связанно-связанных переходов заключается здесь в относительно близком расположении минимумов потенциальных ям термов $U_{\rm i}(R)$ и $U_{\rm f}(R)$.

На рис.4 приведены результаты аналогичных расчетов для ионов $KrXe^+$. Как и в случае с $ArXe^+$, суммарные

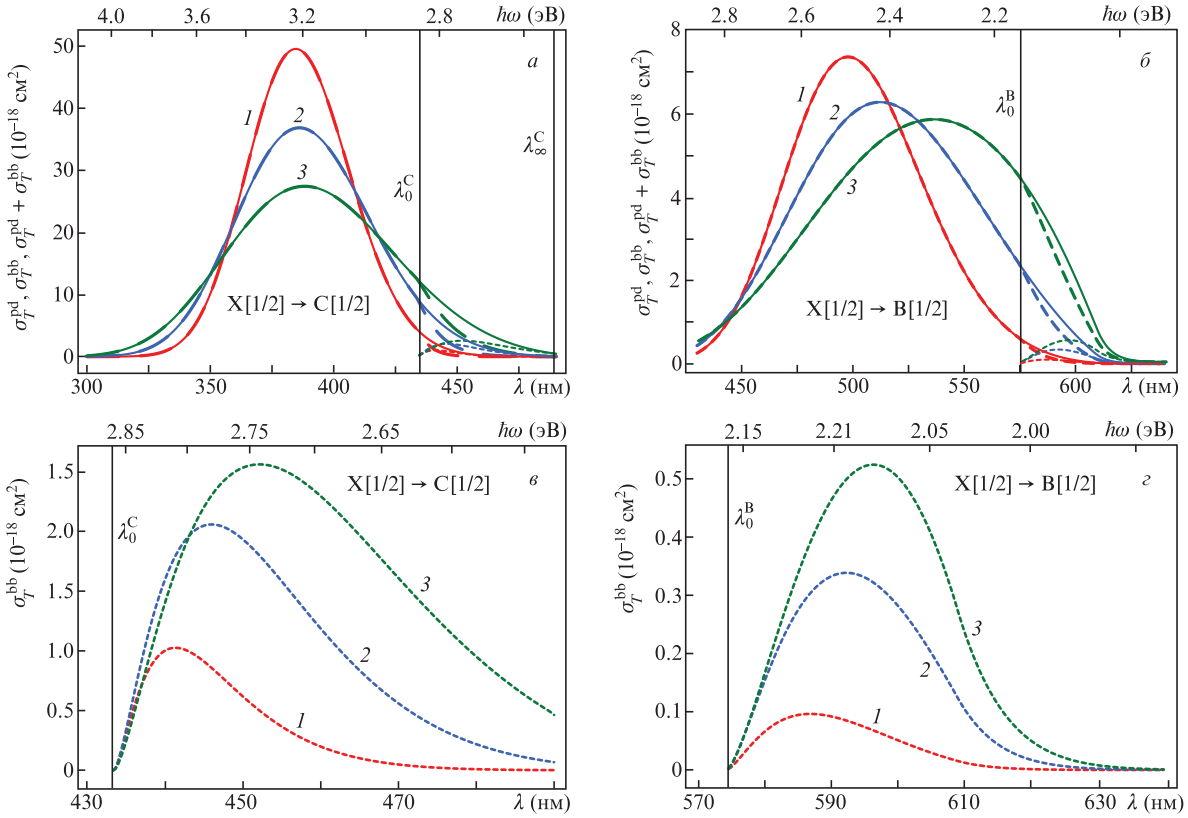

Рис.4. Сечения фотодиссоциации $\sigma_T^{\rm pd}$ (штриховые кривые), связанно-связанных переходов $\sigma_T^{\rm bb}$ (пунктирные кривые) и сумма сечений $\sigma_T^{\rm pd} + \sigma_T^{\rm bb}$ (сплошные кривые) в фотопроцессах $KrXe^+(X[1/2]) + \hbar\omega \to KrXe^+(C[1/2]) \to Xe + Kr^+(^2P_{1/2})$ (полоса A) (*а*) и $KrXe^+(X[1/2]) + \hbar\omega \to KrXe^+(B[1/2]) \to Xe + Kr^+(^2P_{3/2})$ (полоса B) (*б*), а также сечения связанно-связанных переходов $\sigma_T^{\rm bb}$ в реакциях $KrXe^+(X[1/2]) + \hbar\omega \to KrXe^+(C[1/2])$ (полоса A) (*в*) и $KrXe^+(X[1/2]) + \hbar\omega \to KrXe^+(B[1/2])$ (полоса B) (*г*) при газовых температурах $T = 300$ (*1*), 500 (*2*) и 800 K (*3*).

сечения фотопоглощения $\sigma_T^{\rm pd} + \sigma_T^{\rm bb}$ имеют явно выраженный колоколообразный профиль, а положение максимума также смещается в длинноволновую область по мере роста температуры T. Полоса A расположена в УФ диапазоне и обеспечивает сильное поглощение при λ = 350–420 нм, в то время как полоса B расположена в видимой области. Из-за больших сил осцилляторов перехода максимальное значение сечения фотодиссоциации ионов $KrXe^+$ оказывается существенно выше, чем для ионов $ArXe^+$: $\max\{\sigma_T^{\rm pd}\} = 5 \times 10^{-17}$ см^2 при λ = 385 нм и T = 300 K. Более того, оно оказывается даже несколько больше максимальных значений сечений фотодиссоциации гомоядерных ионов Kr_2^+ и Xe_2^+ для наиболее сильного перехода $\mathrm{I}(1/2)_{\rm u} \to \mathrm{II}(1/2)_{\rm g}$. Так, при T = 300 K имеем $\max\{\sigma_T^{\rm pd}\} = 4.0 \times 10^{-17}$ см^2 при λ = 320 нм для ионов Kr_2^+ и $\max\{\sigma_T^{\rm pd}\} = 3.65 \times 10^{-17}$ см^2 при λ = 335 нм для ионов Xe_2^+ [79]. Таким образом, учет роли гетероядерных ионов в спектральных свойствах смеси Kr/Xe носит принципиальный характер.

В отличие от $ArXe^+$, в случае иона $KrXe^+$ связанно-связанные переходы практически не вносят вклада в суммарное сечение $\sigma_T^{\rm pd} + \sigma_T^{\rm bb}$ и проявляются лишь в весьма узком длинноволновом крыле спектра поглощения. Максимальные значения сечений связанно-связанных переходов $\sigma_T^{\rm bb}$ оказываются при этом на 1–2 порядка ниже максимальных значений сечений фотодиссоциации $\sigma_T^{\rm pd}$. Причина столь низкой эффективности фотопоглощения на связанно-связанных переходах состоит в том, что у иона $KrXe^+$ существенно более высокая энергия диссоциации ($D_0^{\rm (i)}$ = 0.389 эВ), а положения минимумов потенциальных ям электронных термов $U_{\rm i}(R)$ и $U_{\rm f}(R)$ сильно отстоят друг от друга, так что поглощение света на связанно-связанных переходах происходит при больших межъядерных расстояниях $R_\omega \gtrsim R_{\rm e}^{\rm (i)}$. По этой же причине абсолютная эффективность связанно-связанных переходов в ионе $KrXe^+$ быстро растет с увеличением температуры T (см. рис.4,*в* и *г*).

Константы скоростей свободно-свободных и свободно-связанных переходов. На рис.5, 6 приведены результаты расчетов констант скоростей свободно-свободных, $\eta_T^{\rm ff}$, и свободно-связанных, $\eta_T^{\rm fb}$, фотопереходов для систем Ar + Xe^+ и Kr + Xe^+ соответственно. Вследствие того, что соответствующие переходы происходят в тройных столкновениях, их роль становится существенной при повышенных газовых температурах. Видно, что эффективность свободно-свободных переходов возрастает с ростом λ в широком диапазоне длин волн, достигая в максимуме значений $\eta_T^{\rm ff} \sim 10^{-39}$ см^5. С дальнейшим увеличением λ константа скорости $\eta_T^{\rm ff}$ резко падает при длинах волн, близких к $\lambda_{\rm max}^{\rm (f)}$. Таким образом, процесс свободно-свободных фотопереходов, сопровождающихся перезарядкой, демонстрирует пороговый характер.

Поглощение в результате данного процесса для Ar + Xe^+ перекрывает диапазон 240–342 нм, в то время как для Kr + Xe^+ этот диапазон гораздо шире и составляет 300–610 нм. Поскольку молекулярный ион в начальном кана-

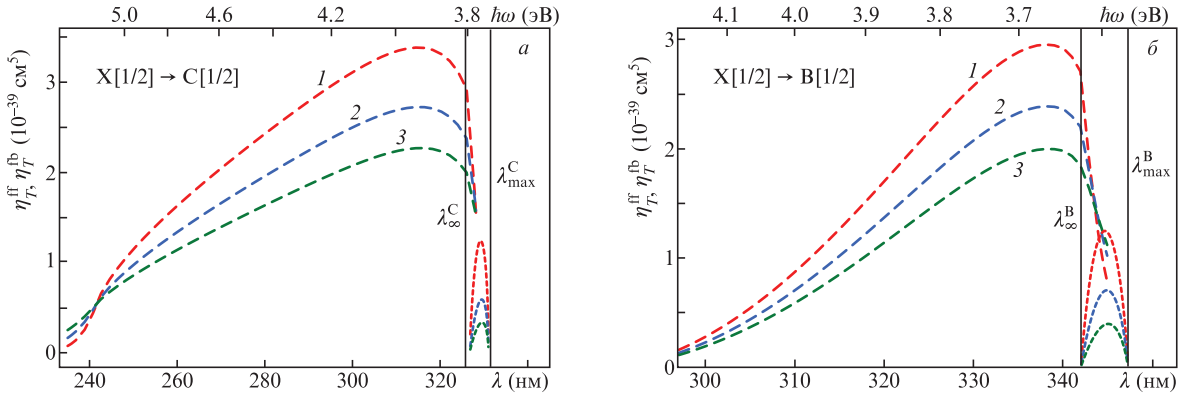

Рис.5. Константы скорости свободно-свободных переходов $\eta_T^{\rm ff}$ (штриховые кривые) и свободно-связанных переходов $\eta_T^{\rm fb}$ (пунктирные кривые) в фотопроцессах Ar + $Xe^+(^2P_{3/2})$ + $\hbar\omega$ → $ArXe^+$(C[1/2]) → Xe + $Ar^+(^2P_{1/2})$ (полоса A) (*а*) и Ar + $Xe^+(^2P_{3/2})$ + $\hbar\omega$ → $ArXe^+$(B[1/2]) → Xe + $Ar^+(^2P_{3/2})$ (полоса B) (*б*) при газовых температурах T = 300 (*1*), 500 (*2*) и 800 K (*3*).

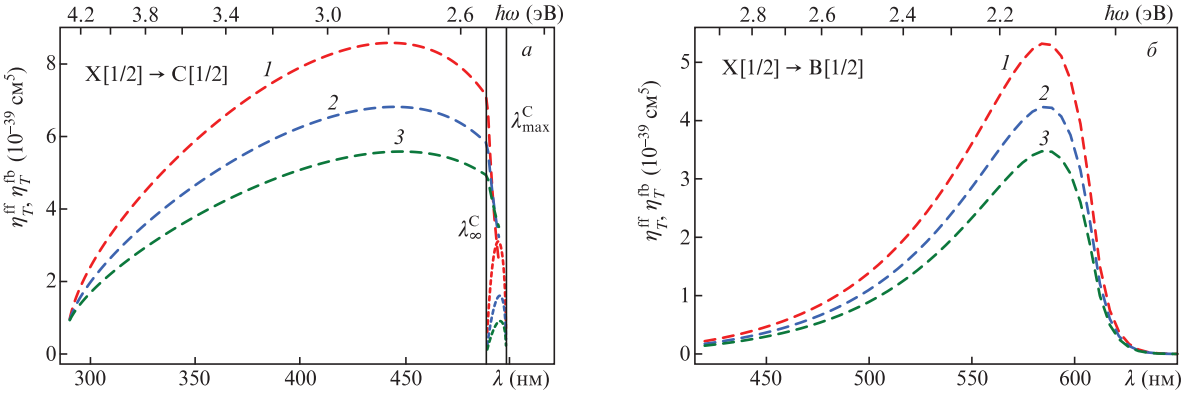

Рис.6. Константы скорости свободно-свободных переходов $\eta_T^{\rm ff}$ (штриховые кривые) и свободно-связанных переходов $\eta_T^{\rm fb}$ (пунктирные кривые) в реакциях Kr + $Xe^+(^2P_{3/2})$ + $\hbar\omega$ → $KrXe^+$(C[1/2]) → Xe + $Kr^+(^2P_{1/2})$ (полоса A) (*а*) и Kr + $Xe^+(^2P_{3/2})$ + $\hbar\omega$ → $KrXe^+$(B[1/2]) → Xe + $Kr^+(^2P_{3/2})$ (полоса B) (*б*) при газовых температурах T = 300 (*1*), 500 (*2*) и 800 K (*3*).

ле находится в свободном состоянии, процесс (2) не влияет на скорость диссоциативной рекомбинации ионов $RgXe^+$ с электронами. Вместе с тем он перекрывает значительную часть спектра, а также, являясь радиационно-индуцированной реакцией перезарядки, частично восполняет концентрацию атомарных ионов Ar^+ или Kr^+.

Профиль константы скорости свободно-связанных переходов (фотоассоциация) $\eta_T^{\rm fb}$ имеет вид горба. Такие процессы являются энергетически разрешенными лишь в весьма ограниченной области энергий перехода $\min\{\Delta U_{\rm fi}(R)\} \leqslant \hbar\omega \leqslant \Delta_\infty$, соответствующей узкому интервалу длин волн с шириной $\Delta\lambda \approx 5$ нм. Соответствующие неадиабатические переходы происходят при больших межъядерных расстояниях $R_\omega \geqslant R_{\rm x}^{(\rm f)}$ (см. рис.2) вдали от положения равновесия нижнего терма и от положений максимумов сил осцилляторов $f_{\rm fi}(R)$. Поэтому максимальные значения константы скорости $\eta_T^{\rm fb}$ оказываются минимум в 3–5 раз меньше максимальных значений констант скоростей свободно-свободных переходов $\eta_T^{\rm ff}$. Соответственно, свободно-связанные переходы вносят относительно малый вклад в суммарный профиль $\eta_T^{\rm ff} + \eta_T^{\rm fb}$ спектра поглощения системами $Rg + Xe^+$ и принципиальной роли в оптических свойствах смесей Ar/Xe и Kr/Xe не играют.

Таким образом, нами показано, что при температурах, характерных для активных сред газовых лазеров и эксиламп, гетероядерные ионы $ArXe^+$ и $KrXe^+$ обладают значительным квазинепрерывным фотопоглощением в УФ и видимой (в случае $KrXe^+$) областях спектра, причем соответствующие сечения фотопоглощения оказываются сравнимыми с аналогичными величинами для гомоядерных ионов. Это означает, что вклад гетероядерных ионов в оптические свойства смесей Rg/Xe, а также рассмотренные фотоиндуцированные электронные переходы необходимо учитывать при разработке кинетических моделей источников излучения УФ диапазона.

3. Разрушение гетероядерных ионов $ArXe^+$ и $KrXe^+$ электронным ударом

3.1. Механизм резонансного электрон-электронного обмена энергией

Обсудим сначала резонансный механизм разрушения молекулярных ионов BA^+, сопровождающийся образованием ридберговских атомов в плазме смесей инертных газов:

$$BA^+(\mathrm{i}, vJ) + e \to BA(\mathrm{f}, nl) \to A(nl) + B. \qquad (17)$$

Реакция (17) – резонансный диссоциативный захват электрона молекулярным ионом на высоковозбужденный nl-уровень атома (диссоциативная рекомбинация, ДР). Здесь n и l – главное и орбитальное квантовые числа атома $A(nl)$. В процессе (17) ядра системы $BA^+ + e$ совершают связанно-свободный переход. Аналогично тому, как описывались фотопереходы в разд.2, захват электрона в (17) происходит в результате пересечения начального, $U_{\rm i}(R) + \varepsilon$, и конечного, $U_{\rm f}(R) + \varepsilon_{nl}$, электронных термов системы $BA^+ + e$ (здесь $\varepsilon = \hbar^2k^2/(2m_{\rm e})$ – энергия свободного электрона, k – волновое число электрона, $\varepsilon_{nl} = -Ry/n_*^2$ – энергия ридберговского электрона (рис.7,*а*)). Для заданной эффективной частоты перехода $\omega = (\varepsilon + |\varepsilon_{nl}|)/\hbar$ акт резонансного захвата электрона происходит в окрестности точки пересечения R_ω потенциальных кривых $U_{\rm i,\varepsilon}(R) = U_{\rm i}(R) + \varepsilon$ и $U_{\rm f,\,nl}(R) = U_{\rm f}(R) + \varepsilon_{nl}$, определяемой из уравнения

$$U_{\rm i}(R_\omega) + \frac{\hbar^2k^2}{2m_{\rm e}} = U_{\rm f}(R_\omega) - \frac{Ry}{n_*^2}, \qquad (18)$$

где $n_* = n - \delta_l$ – эффективное главное квантовое число; δ_l – квантовый дефект nl-уровня. В точке R_ω энергия $\hbar\omega = \varepsilon + |\varepsilon_{nl}|$, отдаваемая налетающим электроном при его захвате на уровень nl, становится равной энергии расщепления $\Delta U_{\rm fi}(R_\omega) = U_{\rm f}(R_\omega) - U_{\rm i}(R_\omega)$ электронных термов (см. рис.7,*а* и аналогичное соотношение (5) для процесса поглощения фотона). Для процессов электрон-ионной рекомбинации с образованием атомов в высоковозбужденных состояниях мы рассматриваем здесь переходы между основным $|\mathrm{i}\rangle = |X[1/2]\rangle$ и первым возбужденным $|\mathrm{f}\rangle = |A[3/2]\rangle$ электронными термами ионов $ArXe^+$ и $KrXe^+$.

Заметим, что диссоциативная рекомбинация не является единственным конечным каналом реакции (17), сопровождающимся резонансным обменом энергией электрона. Альтернативный конечный канал реализуется в процессе

$$BA^+(\mathrm{i}, vJ) + e(\varepsilon) \to BA(\mathrm{f}, E, \varepsilon') \to \begin{cases} B + A^+ + e(\varepsilon'), \\ B^+ + A + e(\varepsilon'). \end{cases} \qquad (19)$$

Этот процесс (диссоциативное возбуждение иона) рассматривается нами на примере трех типов переходов $|\mathrm{i}\rangle \to |\mathrm{f}\rangle$ из основного электронного состояния $|\mathrm{i}\rangle = |X[1/2]\rangle$:

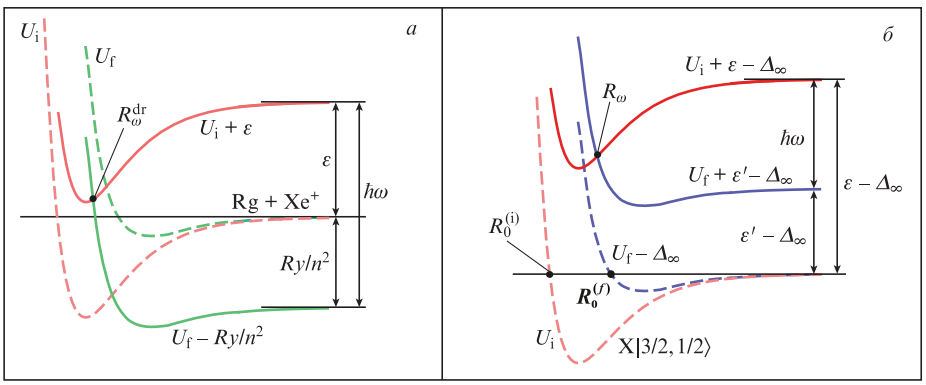

Рис.7. Схема пересечения кривых потенциальной энергии в точке R_ω, узкая окрестность которой вносит основной вклад в переход между нижним $U_{\rm i}(R)$ и верхним $U_{\rm f}(R)$ электронными термами молекулярного иона BA^+, для рассматриваемых в работе типов переходов: резонансный захват на ридберговские уровни $\varepsilon \to n$ (*а*); диссоциативное возбуждение при переходах между основным и первым возбужденным термами (при $\Delta_\infty \equiv \Delta U_{\rm fi}(R \to \infty) = 0$) и диссоциативное возбуждение с перезарядкой (при $\Delta_\infty \neq 0$).

это (1) – переход на первый возбужденный электронный терм $|f_1\rangle = |A[3/2]\rangle$, сходящийся к тому же диссоциационному пределу, а также (2) и (3) – переходы на возбужденные термы $|f_2\rangle = |C[1/2]\rangle$ и $|f_3\rangle = |B[1/2]\rangle$ гетероядерного иона инертного газа, сильно энергетически отщепленные от основного состояния и связанные с ним интенсивными дипольно-разрешенными переходами (см. рис.1). В процессе (19) происходит связанно-свободный переход ядер $|vJ\rangle \to |EJ'\rangle$ иона BA^+ и свободно-свободный переход внешнего электрона $|\varepsilon\rangle \to |\varepsilon'\rangle$ системы $BA^+(i, vJ) + \varepsilon$. Таким образом, в отличие от ДР (17), в процессе ДВ внешний электрон находится в непрерывном спектре как в начальном, так и в конечном состоянии.

Резонансная диссоциация электронным ударом, сопровождающаяся передачей энергии электрона $\hbar\omega = \varepsilon - \varepsilon'$ молекулярному иону BA^+, происходит в окрестности точки R_ω пересечения кривых потенциальной энергии системы $BA^+ + e$ (см. рис.7,*б*):

$$U_i(R_\omega) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} = U_f(R_\omega) + \frac{\hbar^2 k'^2}{2m_e}, \tag{20}$$

т.е. в точке R_ω энергия, передаваемая электроном, равна энергии расщепления термов, $\hbar\omega = \Delta U_{fi}(R_\omega)$.

3.2. Сечения и константы скоростей ДР и ДВ

Несмотря на различный характер процессов (17) и (19), в рамках развиваемого нами теоретического подхода [65, 68] их описание может быть проведено схожим образом с использованием полного гамильтониана квазимолекулы $BA^+ + e$ следующего вида:

$$H = T_{\boldsymbol{R}} + H_{BA^+} + H_e + V, \quad H_e = -\frac{\hbar^2 \Delta_{\boldsymbol{r}}}{2m_e} - \frac{e^2}{r}. \tag{21}$$

Здесь $T_{\boldsymbol{R}} = -\hbar^2 \Delta_{\boldsymbol{R}}/(2\mu)$ – оператор кинетической энергии относительного движения ядер ($\boldsymbol{R} = \boldsymbol{R}_A - \boldsymbol{R}_B$ – радиус-вектор, соединяющий ядра, μ – их приведенная масса); H_e – гамильтониан внешнего электрона; $H_{BA^+}(\boldsymbol{r}_\kappa, \boldsymbol{R})$ – электронный гамильтониан квазимолекулярного иона BA^+ в приближении Борна–Оппенгеймера. Потенциальная энергия

$$V = \sum_\kappa \frac{e^2}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_\kappa|} - \frac{Z_A e^2}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_A|} - \frac{Z_B e^2}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{R}_B|} + \frac{e^2}{r} \tag{22}$$

определяется кулоновским взаимодействием внешнего электрона ($\boldsymbol{r}$) со всеми внутренними электронами ($\boldsymbol{r}_\kappa$, $\kappa = 1, \ldots, N$) и ядрами ($\boldsymbol{R}_A$ и $\boldsymbol{R}_B$ – их радиус-векторы в системе центра масс). Последний член включен в (22), чтобы скомпенсировать кулоновский член, входящий в гамильтониан H_e.

Поскольку молекулярные ионы $ArXe^+$ и $KrXe^+$ имеют небольшие или умеренные значения энергии диссоциации D_0 и малые колебательные кванты $\hbar\omega_e$, уже при комнатных температурах ионной компоненты плазмы ($T \gtrsim 300$ K) выполняется условие $k_B T \gtrsim \hbar\omega_e$, что приводит к заселению большого числа колебательно-вращательных уровней vJ. В такой ситуации наибольший интерес для определения эффективности диссоциации ионов электронным ударом в процессах (17) и (19) представляют усредненные сечения

$$\sigma_T(\varepsilon) = \sum_{vJ} \sigma_{vJ}(\varepsilon) \left(\frac{N^{(i)}_{BA^+}(vJ)}{N^{(i)}_{BA^+}} \right) \text{[см}^2\text{]}$$

диссоциативной рекомбинации, $\sigma_T^{dr}(\varepsilon)$, и диссоциативного возбуждения, $\sigma_T^{de}(\varepsilon)$, при заданной температуре T ионной компоненты плазмы. Они определяются суммарным вкладом всех vJ-уровней иона $BA^+(i)$ в начальном электронном состоянии $|i\rangle$ с полной концентрацией

$$N^{(i)}_{BA^+} = \sum_{vJ} N^{(i)}_{BA^+}(vJ).$$

В случае больцмановского распределения молекулярных ионов по vJ-уровням для сечения процесса (17) захвата электрона молекулярным ионом BA^+ на ридберговский уровень атома $A(nl)$ была получена следующая формула [67, 68]:

$$\sigma^{dr}_{\varepsilon \to nl}(T) = \frac{8\pi^3 (2l+1) \tilde{g}_{dr} R_\omega^2}{k^2 Z_{vr}} \frac{\Gamma_{nl \to \varepsilon}(R_\omega)}{\Delta F_{fi}(R_\omega)} \left(\frac{\mu k_B T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \times \exp\left(-\frac{D_0^{(i)} + U_i(R_\omega)}{k_B T} \right) \Theta_T^{dr}(R_\omega), \tag{23}$$

где k и $\varepsilon = \hbar k^2/(2m_e)$ – волновое число и энергия налетающего электрона; $D_0^{(i)}$ – энергия диссоциации иона $BA^+(i)$; $\Delta F_{fi}(R_\omega) = |F_f - F_i|$ – разность наклонов $F_i = -\mathrm{d}U_i/\mathrm{d}R|_{R_\omega}$ и $F_f = -\mathrm{d}U_f/\mathrm{d}R|_{R_\omega}$ начального U_i и конечного U_f термов в точке R_ω, определяемой из условия (18); $\tilde{g}_{dr} = g_{dr}/s$ ($g_{dr} = g_{BA^+(f)}/g_{BA^+(i)}$) – электронный статистический фактор; Z_{vr} – колебательно-вращательная статистическая сумма иона BA^+ в начальном электронном состоянии $|i\rangle$. Ширина автоионизации $\Gamma_{nl \to \varepsilon}(R_\omega)$ квазимолекулы $BA(nl)$ в (23) выражается через электронный матричный элемент взаимодействия (22) внешнего электрона системы $BA^+ + e$ со всеми электронами и ядрами как

$$\Gamma_{nl \to \varepsilon}(R) = \frac{2\pi}{2l+1} \sum_{m,m'l'} \left| V^{f,nlm}_{i,\varepsilon l'm'}(R) \right|^2, \tag{24}$$

$$V^{f,nlm}_{i,\varepsilon l'm'}(R) = \langle \psi_{\varepsilon l'm'}(r) | \langle \varphi_i(r_\kappa, R) | V(r_\kappa, R) | \varphi_f(r_\kappa, R) \rangle | \psi_{nlm}(r) \rangle$$

при $R = R_\omega$. Здесь $\psi_{\varepsilon l'm'}(r)$ – волновая функция рекомбинирующего электрона в непрерывном спектре; $\psi_{nlm}(r)$ – волновая функция этого электрона в ридберговском состоянии; $\varphi_i(r_\kappa, R)$ и $\varphi_f(r_\kappa, R)$ – электронные волновые функции иона BA^+, соответствующие начальному, $U_i(R)$, и конечному, $U_f(R)$, термам.

Строгое квантово-механическое выражение для безразмерного фактора $\Theta_T^{dr}(R_\omega)$ приведено в [68]. Более простое полуклассическое выражение имеет вид

$$\Theta_T^{dr}(R_\omega) = \begin{cases} 0, \; R_\omega < R_0^{(i)}, \\ \dfrac{\gamma(3/2, |U_i(R_\omega)|/(k_B T))}{\Gamma(3/2)}, \; R_\omega \geqslant R_0^{(i)}. \end{cases} \tag{25}$$

Здесь

$$\gamma(3/2, z) = \int_0^z t^{1/2} \exp(-t)\, \mathrm{d}t$$

– нижняя неполная гамма-функция, $\Gamma(3/2)$ – гамма-функция Эйлера. Безразмерный фактор $\Theta_T^{dr}(R_\omega)$ в формуле (23) определяет относительный вклад всего колебательно-

вращательного квазиконтинуума ($E < 0$) в классической функции распределения $W(R) \propto 4\pi R^2 \exp[-U_i(R)/(k_B T)]dR$ межъядерных расстояний R в потенциальной яме $U_i(R)$, которая одновременно учитывает и интегральный вклад всего непрерывного спектра ($0 \leqslant E < \infty$).

Константа скорости диссоциативной рекомбинации $K_{nl}^{dr}(T_e, T)$ [см$^3 \cdot$ с$^{-1}$] с образованием атома A(nl) в плазме с температурами T и T_e ее газовой и электронной компонент получается усреднением величины $v_\varepsilon \sigma_{\varepsilon \to nl}^{dr}(T)$ (см. (23)) по функции распределения скоростей свободных электронов $f_{T_e}(\varepsilon)$:

$$K_{nl}^{dr}(T_e, T) = \int_0^\infty v_\varepsilon \sigma_{\varepsilon \to nl}^{dr}(T) f_{T_e}(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (26)$$

При максвелловском распределении скоростей результат выглядит следующим образом:

$$K_{nl}^{dr}(T_e, T) = (2l+1)\tilde{g}_{dr}\left(\frac{2\pi\hbar^2}{m_e k_B T_e}\right)^{3/2}$$
$$\times \frac{\exp[-D_0^{(i)}/(k_B T)]}{Z_{vr}(T)}\left(\frac{\mu k_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} \exp\left(\frac{|\varepsilon_{nl}|}{k_B T_e}\right)\int_{R_0}^{R_{nl}} \frac{\Gamma_{nl\to\varepsilon}(R)}{\hbar}$$
$$\times \exp\left(-\frac{\Delta U_{fi}(R)}{k_B T_e}\right)\exp\left(-\frac{U_i(R)}{k_B T}\right)\Theta_T^{dr}(R_\omega) 4\pi R^2 dR, \quad (27)$$

где $R_0^{(i)}$ и R_{nl} находятся из уравнений $U_i(R_0^{(i)}) = 0$ (см. рис.1) и $\Delta U_{fi}(R_{nl}) = |\varepsilon_{nl}|$.

В случае электрон-ионной рекомбинации с образованием ридберговских атомов интерес представляют суммарные по всем значениям lm уровня n сечения и константы скоростей:

$$\sigma_{\varepsilon \to n}^{dr} = \sum_{l=0}^{n-1} \sigma_{\varepsilon \to nl}^{dr}, \quad K_n^{dr} = \sum_{l=0}^{n-1} K_{nl}^{dr}. \quad (28)$$

В формулах (23) и (27) сечения $\sigma_{\varepsilon \to nl}^{dr}$ и константы скорости K_{nl}^{dr} резонансного захвата электрона на уровни nl выражаются через ширины автоионизации $\Gamma_{nl\to\varepsilon}$ ридберговских квазимолекул BA(f, nl). При расчете по формуле (28) удобно заменить величину $(2l+1)\Gamma_{nl\to\varepsilon}$ в выражении (23) на эффективный параметр связи

$$\tilde{\Gamma}_{\varepsilon \to n} = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1)\Gamma_{nl\to\varepsilon}(R_\omega) = 2\pi \sum_{ml, m'l'} \left| V_{i,\varepsilon l' m'}^{f,nlm}(R_\omega) \right|^2, \quad (29)$$

описывающий полный вклад nl-уровней в захват электронов во все nlm-состояния с заданным значением главного квантового числа n.

При расчетах величин $\Gamma_{nl\to\varepsilon}$ и $\tilde{\Gamma}_{\varepsilon \to n}$ следует учитывать структуру ридберговских уровней атома Xe и особенности электронных термов гетероядерных ионов инертных газов $RgXe^+$ (Rg = Ar($3s^2 3p^6\,{}^1S_0$) и Kr($4s^2 4p^6\,{}^1S_0$)). Ридберговские состояния Xe[$5p^5({}^2P_j)nl[K]_J$] характеризуются набором квантовых чисел n, l, K и J, где K – квантовое число углового момента $\boldsymbol{K} = \boldsymbol{j} + \boldsymbol{l}$, а $J = K \pm 1/2$ и $j = 3/2, 1/2$ – полный момент ридберговского атома и атомного отстатка соответственно. Подуровни $nl[K]_J$ при $l = 0, 1, 2$ имеют большие квантовые дефекты δ_J, а подуровни $nl[K]_J$ с $l \geqslant 3$ – почти водородоподобную структуру [80]. Наиболее простым образом структуру ридберговских уровней атома Xe можно учесть, введя эффективное главное квантовое число $n_* = n - \delta_{nl}^{eff}$. Здесь δ_{nl}^{eff} – эффективный квантовый дефект, полученный усреднением по набору квантовых дефектов $\delta_{nl[K]_J}$. Это оправдано, т.к $|\delta_{nl}^{eff} - \delta_{nl[K]_J}| \ll \delta_{nl}^{eff}$ для $l = 0, 1, 2$.

Электронная конфигурация иона Xe^+ ($5s^2 5p^5$) определяет сильное спин-орбитальное расщепление ($\Delta_{3/2,1/2}$ = 1.3 эВ) электронных термов, сходящихся к состояниям ${}^2P_{j=3/2}$ и ${}^2P_{j'=1/2}$ (см. рис.1). Поэтому в случае относительно невысоких температур T и T_e свободно-связанные переходы внешнего электрона системы $RgXe^+ + e$ в процессе рекомбинации (17) обусловлены переходом $X|j_i = 3/2, \Omega_i = 1/2\rangle \to A|j_f = 3/2, \Omega_f = 3/2\rangle$ между основным, $U_i(R)$, и первым возбужденным, $U_f(R)$, электронными термами иона $RgXe^+$ (см. рис.7,*а*). Высоколежащий терм $A|j' = 1/2, \Omega' = 1/2\rangle$, коррелирующий с состоянием ${}^2P_{j'=1/2}$, и более высокие термы можно при этом исключить из рассмотрения. Точное нахождение автоионизационных ширин $\tilde{\Gamma}_{\varepsilon \to n}$ основано на трудоемких многоэлектронных расчетах методами квантовой химии. В ряде случаев могут быть использованы приближенные модели. Так, для переходов в системе $RgXe^+ + e$ приближенные расчеты величин $\Gamma_{nl\to\varepsilon}$ и $\tilde{\Gamma}_{\varepsilon \to n}$ проведены в работах [77, 81] в рамках вакансионной модели. Результат для эффективного параметра связи описывается формулой

$$\tilde{\Gamma}_{\varepsilon \to n} = \frac{4\pi}{25} \sum_{ll'} \frac{\gamma_{ll'}}{n_*^3}. \quad (30)$$

Основной вклад в $\gamma_{ll'}$ вносят короткодействующая и квадрупольная части взаимодействия (22) внешнего электрона с электронами иона Xe^+ ($5s^2 5p^5$). Выражения для $\gamma_{ll'}$ и $\tilde{\Gamma}_{\varepsilon \to n}$ приведены в [77, 81].

При рассмотрении дипольно-разрешенных переходов между основным $|i\rangle = |X[1/2]\rangle$ и сильно удаленными от него возбужденными электронными термами $|f_2\rangle = |B[1/2]\rangle$ и $|f_3\rangle = |C[1/2]\rangle$ гетероядерных ионов инертных газов $RgXe^+$ при расчете электронных матричных элементов можно использовать дипольное приближение $V = -e\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{d}(\boldsymbol{r}_\kappa, \boldsymbol{R})/r^3$ для потенциала взаимодействия (22) и применить известную квазиклассическую формулу для матричного элемента электронной координаты по кулоновским волновым функциям дискретного и непрерывного спектров [82]. Это приводит к следующему выражению для ширины автоионизации $\Gamma_{nl\to\varepsilon}(R_\omega)$ квазимолекулы [69]:

$$\Gamma_{nl\to\varepsilon}(R_\omega) = \frac{\hbar\omega(l+1/2)^4}{3\pi n_*^3} f_{fi}(R_\omega)[K_{2/3}^2(u) + K_{1/3}^2(u)], \quad (31)$$

$$f_{fi}(R_\omega) = \frac{2m_e\omega\,|d_{fi}(R_\omega)|^2}{3\hbar e^2},$$

где $K_\nu(z)$ – функции Макдональда, $f_{fi}(R_\omega)$ – сила осциллятора электронного перехода в молекулярном ионе BA^+. В случае водородоподобных атомов, когда $n_* = n$ и R_ω не зависит от l, окончательное квазиклассическое выражение для $\tilde{\Gamma}_{\varepsilon \to n}(R_\omega)$ приобретает вид [69]

$$\tilde{\Gamma}_{\varepsilon \to n}(R_\omega) = \frac{8RyG_{n\to\varepsilon}}{3\sqrt{3}\,n^3}\left|\frac{d_{fi}(R_\omega)}{ea_0}\right|^2, \quad (32)$$

где e – заряд электрона, a_0 – боровский радиус, а $G_{n\to\varepsilon}$ – фактор Гаунта, определяющий отличие точного результата от квазиклассического приближения Крамерса $G_{n\to\varepsilon}^{Kram} = 1$ [83]. Использование выражения (32) оправдано при захвате электрона на уровни с $n \gg 1$, когда вкладом

членов $(2l+1)\Gamma_{nl\to\varepsilon}(R_\omega)$ с низкими l и большими квантовыми дефектами δ_l можно пренебречь. В остальных случаях необходимо провести прямое суммирование в формулах (28) с помощью соотношения (31).

Усредненное сечение

$$\sigma_T^{\rm de}(\varepsilon)=\sum_{vJ}\sigma_{vJ}^{\rm de}(\varepsilon)\left(\frac{N_{\rm BA^+}^{\rm (i)}(vJ)}{N_{\rm BA^+}^{\rm (i)}}\right)$$

процесса ДВ при заданной температуре T определяется суммарным вкладом всех колебательно-вращательных уровней иона $\rm BA^+(i)$ в начальном электронном состоянии $|{\rm i}\rangle$ с полной концентрацией

$$N_{\rm BA^+}^{\rm (i)}=\sum_{vJ}N_{\rm BA^+}^{\rm (i)}(vJ).$$

В случае больцмановского распределения молекулярных ионов по vJ-уровням,

$$\sigma_T^{\rm de}(\varepsilon)=\frac{1}{sZ_{\rm vr}(T)}\sum_{vJ}(2J+1)\exp\left(-\frac{\varepsilon_{vJ}}{k_{\rm B}T}\right)\sigma_{vJ}^{\rm de}(\varepsilon),\qquad(33)$$

$$Z_{\rm vr}=\frac{1}{s}\sum_{vJ}(2J+1)\exp\left(-\frac{\varepsilon_{vJ}}{k_{\rm B}T}\right),$$

итоговая формула для сечения $\sigma_T^{\rm de}(\varepsilon)$ [см^2] имеет вид

$$\sigma_T^{\rm de}(\varepsilon)=\frac{\tilde g_{\rm de}8\pi^3}{k^2Z_{\rm vr}(T)}\left(\frac{\mu k_{\rm B}T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}\exp\left(-\frac{D_0^{\rm (i)}}{k_{\rm B}T}\right)$$
$$\times\int_{R_{\min}^{\rm de}(\varepsilon)}^{\infty}\tilde\Gamma_{\varepsilon\to\varepsilon'}(R_\omega)\exp\left(-\frac{U_{\rm i}(R_\omega)}{k_{\rm B}T}\right)\Theta_T^{\rm de}(R_\omega)R_\omega^2{\rm d}R_\omega,\quad(34)$$

где $\tilde g_{\rm de}=g_{\rm de}/s$ ($g_{\rm de}=g_{\rm dr}$), а безразмерный фактор $\Theta_T^{\rm de}(R_\omega)$ возникает в результате учета интегрального вклада всего колебательно-вращательного квазиконтинуума в сечение процесса (19) и определяется той же формулой (25), что и для процесса ДР.

Константа скорости $K^{\rm de}(T_{\rm e},T)=\langle v_\varepsilon\sigma_T^{\rm de}(\varepsilon)\rangle_{T_{\rm e}}$ [см$^3\cdot$с$^{-1}$] диссоциативного возбуждения молекулярного иона определяется как [65, 66]

$$K^{\rm de}(T_{\rm e},T)=\left(\frac{\mu T}{m_{\rm e}T_{\rm e}}\right)^{3/2}\frac{k_{\rm B}T_{\rm e}}{\hbar}\frac{4\pi\tilde g_{\rm de}}{Z_{\rm vr}(T)}\exp\left(-\frac{D_0^{\rm (i)}}{k_{\rm B}T}\right)$$
$$\times\int_0^\infty\langle\tilde\Gamma_{\varepsilon\to\varepsilon'}(R_\omega)\rangle_{T_{\rm e}}\Theta_T^{\rm de}(R_\omega)\exp\left(-\frac{U_{\rm i}(R_\omega)}{k_{\rm B}T}\right)$$
$$\times\exp\left(-\frac{\Delta U_{\rm fi}(R_\omega)}{k_{\rm B}T_{\rm e}}\right)R_\omega^2{\rm d}R_\omega.\qquad(35)$$

Безразмерная величина $\langle\Gamma_{\varepsilon\to\varepsilon'}(R_\omega)\rangle_{T_{\rm e}}$ в (35) вычисляется по формуле

$$\langle\tilde\Gamma_{\varepsilon\to\varepsilon'}(R_\omega)\rangle_{T_{\rm e}}=\int_{\varepsilon_{\min}}^{\infty}\tilde\Gamma_{\varepsilon\to\varepsilon'}(R_\omega)\exp\left(\frac{\Delta U_{\rm fi}(R_\omega)-\varepsilon}{k_{\rm B}T_{\rm e}}\right){\rm d}\left(\frac{\varepsilon}{k_{\rm B}T_{\rm e}}\right),\quad(36)$$

где $\varepsilon_{\min}=\Delta U_{\rm fi}(R_\omega)/(k_{\rm B}T_{\rm e})$, $\Delta U_{\rm fi}=U_{\rm f}-U_{\rm i}>0$ (см. рис.7,*б*).

Эффективный параметр взаимодействия

$$\tilde\Gamma_{\varepsilon\to\varepsilon'}(R)\to 2\pi\sum_{lm,l'm'}\left|V_{{\rm i},\varepsilon lm}^{{\rm f},\varepsilon'l'm'}(R)\right|^2\qquad(37)$$

при этом выражается через электронный матричный элемент перехода

$$V_{{\rm i},\varepsilon lm}^{{\rm f},\varepsilon'l'm'}(R)=\langle\psi_{\varepsilon'l'm'}(r)|\langle\varphi_{\rm f}(r_\kappa,R)|V|\varphi_{\rm i}(r_\kappa,R)\rangle|\psi_{\varepsilon lm}(r)\rangle,\qquad(38)$$

где $\psi_{\varepsilon lm}(r)$ и $\psi_{\varepsilon'l'm'}(r)$ – волновые функции внешнего электрона системы $\rm BA^+ + \mathit{e}$ до и после столкновения.

Согласно общему правилу (см., напр,, [83]) параметр взаимодействия $\Gamma_{\varepsilon\to\varepsilon'}$ (37) для свободно-свободного перехода электрона $|\varepsilon\rangle\to|\varepsilon'\rangle$ в процессе ДВ (19) связан с соответствующей величиной $\Gamma_{\varepsilon\to n}$ для свободно-связанного перехода $|\varepsilon\rangle\to|n\rangle$ в процессе ДР (17) (и, соответственно, с автоионизационной шириной $\Gamma_{nl\to\varepsilon}$ распада ридберговской молекулы $\rm BA(f,\mathit{nl})\to BA^+(i,\varepsilon)$) соотношением

$$\tilde\Gamma_{\varepsilon\to\varepsilon'}=\frac{n^3\tilde\Gamma_{\varepsilon\to n}}{2Ry},\quad\tilde\Gamma_{\varepsilon\to n}=\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1)\Gamma_{nl\to\varepsilon},\qquad(39)$$

где n – главное квантовое число образующегося в процессе (17) атома $\rm A(\mathit{n})$. При этом энергию электрона в дискретном спектре ($\varepsilon_n=-Ry/n^2<0$) нужно заменить на его энергию в непрерывном спектре $\varepsilon'=\hbar k'^2/(2m_{\rm e})>0$.

Поскольку обе реакции (17) и (19) приводят к разрушению молекулярного иона, имеет смысл получить простое выражение для суммарной константы скорости $K^{\rm tot}=K^{\rm dr}+K^{\rm de}$ резонансной диссоциации. Используя результаты работы [69], получаем выражение для константы $K^{\rm tot}$ резонансной диссоциации в процессах (17) и (19):

$$K^{\rm tot}(T_{\rm e},T)=\frac{\tilde g_{\rm dr}}{Z_{\rm vr}(T)}\left(\frac{\mu T}{mT_{\rm e}}\right)^{3/2}\frac{k_{\rm B}T_{\rm e}}{\hbar}\int_0^\infty\langle\tilde\Gamma_{\varepsilon\to\varepsilon'}(R_\omega)\rangle_{T_{\rm e}}^{\rm tot}$$
$$\times\exp\left(-\frac{D_0^{\rm (i)}+U_{\rm i}(R_\omega)}{k_{\rm B}T}\right)\Theta_T(R_\omega)4\pi R_\omega^2{\rm d}R_\omega.\qquad(40)$$

В полуклассическом приближении величина $\langle\tilde\Gamma_{\varepsilon\to\varepsilon'}(R_\omega)\rangle_{T_{\rm e}}^{\rm tot}$ имеет вид

$$\langle\tilde\Gamma_{\varepsilon\to\varepsilon'}(R_\omega)\rangle_{T_{\rm e}}^{\rm tot}=\int_0^\infty\tilde\Gamma_{\varepsilon\to\varepsilon'}(R_\omega)\exp\left(-\frac{\varepsilon}{k_{\rm B}T_{\rm e}}\right){\rm d}\left(\frac{\varepsilon}{k_{\rm B}T_{\rm e}}\right),\qquad(41)$$

а безразмерный фактор $\Theta_T(R_\omega)\equiv\Theta_T^{\rm dr}(R_\omega)=\Theta_T^{\rm de}(R_\omega)$ определяется выражением (25).

3.3. Диссоциативная рекомбинация и диссоциативное возбуждение гетероядерных ионов $\rm RgXe^+$ при переходах $|{\rm X}[1/2]\rangle\to|{\rm A}[3/2]\rangle$

Ниже приведены результаты расчетов констант скоростей разрушения ионов $\rm RgXe^+$ в результате неадиабатических переходов между основным и первым возбужденным термами, $|{\rm X}[1/2]\rangle\to|{\rm A}[3/2]\rangle$. Рассматриваемые процессы включают в себя ДР (17) и ДВ (19). На рис.8 приведены константы скорости $K_n^{\rm dr}(T,T_{\rm e})$ диссоциативной рекомбинации ионов $\rm ArXe^+$ и $\rm KrXe^+$ на уровни n при газовой температуре $T=300$ K и электронных температурах, варьируемых в диапазоне 1000–20000 K. Видно, что для обоих типов ионов в зависимостях $K_n^{\rm dr}(T,T_{\rm e})$ от n имеется явно выраженный максимум. Положение $n^{\max}$ этого максимума соответствует переходам $|{\rm X}[1/2]\rangle\to|{\rm A}[3/2]\rangle$, происходящим вблизи положения равновесия $R_{\rm e}^{\rm (i)}$ нижнего терма $|{\rm X}[1/2]\rangle$ (см. рис.7). Оценка эффективного главного квантового числа $n_*^{\max}$ из условия $Ry/(n_*^{\max})^2=\Delta U_{\rm fi}(R_{\rm e}^{\rm (i)})$ дает $n_*^{\max}\approx 7.8$ для $\rm ArXe^+$ и $n_*^{\max}\approx 5$ для $\rm KrXe^+$.

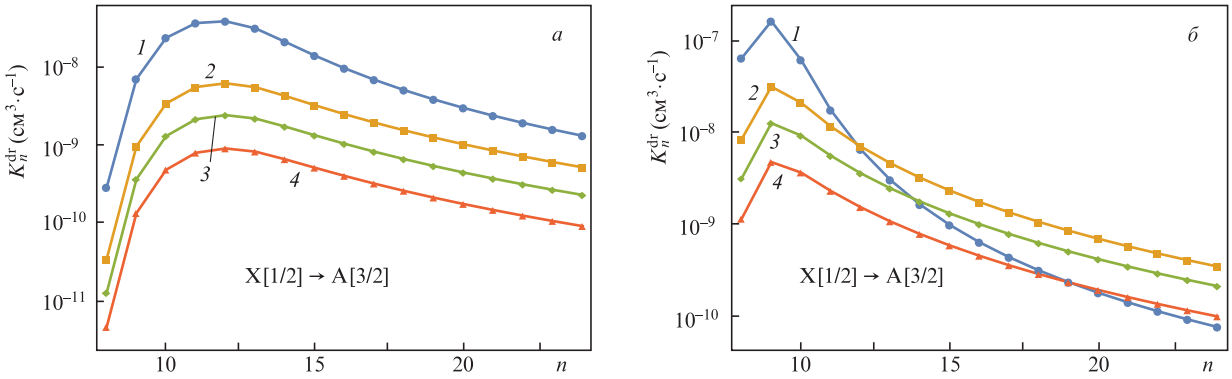

Рис.8. Константы скорости диссоциативной рекомбинации $K_n^{dr}(T_e, T)$ ионов $ArXe^+$ (*а*) и $KrXe^+$ (*б*) с образованием ридберговских атомов Xe (*n*) при газовой температуре $T = 300$ K и электронных температурах $T_e = 1000$ (*1*), 5000 (*2*), 10000 (*3*) и 20000 K (*4*).

Наблюдаемый на рис.8 сдвиг положений максимума на $\delta n \approx 4$ по сравнению с оценками n_*^{max} связан с учетом наличия больших квантовых дефектов у s-, p- и d-состояний ридберговских атомов Xe(*nl*) [80].

Из рис.8 следует, что для умеренно-связанных молекулярных ионов $ArXe^+$ и $KrXe^+$ наблюдается преимущественное заселение ограниченного числа ридберговских уровней с $n > 8$, а низколежащие уровни практически не заселяются – при смещении в сторону уровней с $n \leqslant 8$ константы скорости $K_n^{dr}(T_e, T)$ экспоненциально быстро убывают. Причины такого падения связаны с тем, что процессы захвата на низкие уровни сопровождаются большой передачей энергии $\hbar\omega = Ry/n_*^2 + \varepsilon \gtrsim \Delta U_{fi}(R_e^{(i)})$, так что соответствующие неадиабатические переходы происходят при малых межъядерных расстояниях $R_\omega \lesssim R_e^{(i)}$. Аналогично, $K_n^{dr}(T_e, T)$ быстро убывают с ростом *n* при $n \gtrsim n_*^{max}$, т. к. соответствующие неадиабатические переходы происходят в области $R_\omega \gtrsim R_e^{(i)}$. Отметим, что поскольку у иона $KrXe^+$ существенно более глубокая потенциальная яма основного терма $|X[1/2]\rangle$, чем у иона $ArXe^+$, то ширина профиля $K_n^{dr}(T_e, T)$ в зависимости от *n* (и, соответственно, количество эффективно заселяемых в процессе ДР ридберговских уровней) оказывается для него значительно меньше, чем для $ArXe^+$.

Из рис.8,*б* видно, что профили $K_n^{dr}(T_e, T)$ для $T_e = 1000$ K и для более высоких электронных температур $T_e \geqslant 5000$ K заметно отличаются. При низких T_e доминируют захваты в узкой области вблизи положения максимума n_*^{max}, соответствующие неадиабатическим переходам вблизи положения равновесия $R_e^{(i)}$ нижнего терма $|X[1/2]\rangle$. При увеличении температуры электронов до $k_B T_e \sim |U_i(R_e^{(i)})|$ возрастает вероятность переходов вдали от положения равновесия, так что растет эффективность захвата на высоковозбужденные уровни с $n \gtrsim n_*^{max}$, и профиль уширяется. Как следует из выражений для $K_n^{dr}(T_e, T)$ [67–69], при высоких температурах $k_B T_e \gtrsim \Delta U_{fi}(R_e^{(i)})$ (т. е. при $T_e \gtrsim 2000$ K для плазмы Ar/Xe и при $T_e \gtrsim 5000$ K для плазмы Kr/Xe) константы скорости $K_n^{dr}(T_e, T)$ убывают как $T_e^{-3/2}$, так что изменение профилей $K_n^{dr}(T_e, T)$ при дальнейшем увеличении T_e сводится к параллельному сдвигу в логарифмической шкале (см. рис.8).

Обсудим поведение суммарной константы скорости

$$K^{dr}(T_e, T) = \sum_n K_n^{dr}(T_e, T)$$

диссоциативной рекомбинации с учетом захвата электронов на все уровни. На рис.9 приведены соответствующие результаты для ионов $ArXe^+$ и $KrXe^+$ при газовых температурах $T = 300$ и 800 K и электронных температурах T_e, варьирующихся в диапазоне 300–50000 K. Видно, что при низких T_e (менее 1000 K) имеем $K^{dr}(T_e, T) \sim 10^{-7}$ см^3·с$^{-1}$. Таким образом, эффективность ДР гетероядерных ионов $RgXe^+$ (Rg = Ar, Kr) сопоставима с эффективностью ДР гомоядерных ионов Rg_2^+ (Rg = Ar, Kr, Xe), хотя и оказывается заметно слабее [49]. В области тем-

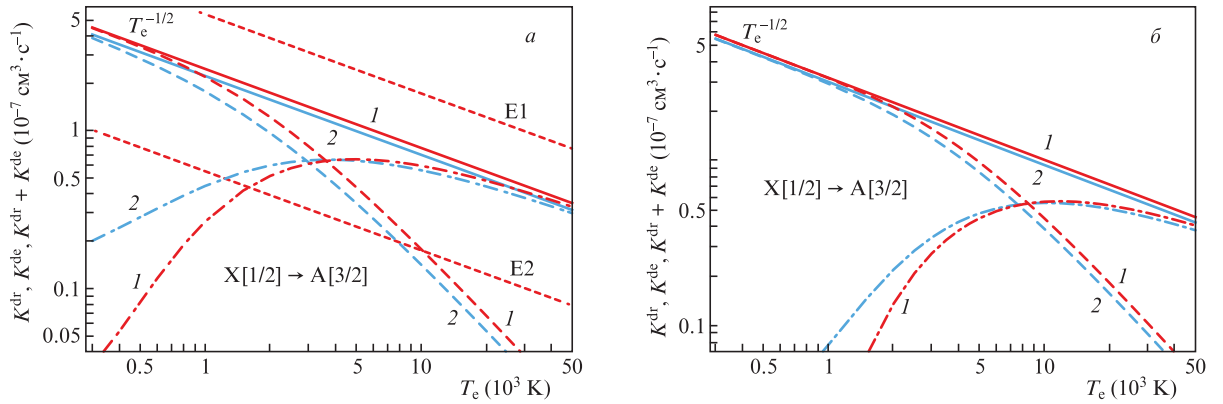

Рис.9. Суммарные по всевозможным ридберговским уровням константы скорости диссоциативной рекомбинации $K^{dr}(T_e, T) = \sum_n K_n^{dr}(T_e, T)$ (штриховые кривые) и константы скорости диссоциативного возбуждения $K^{de}(T_e, T)$ (штрихпунктирные кривые) ионов $ArXe^+$ (*а*) и $KrXe^+$ (*б*) при газовой температуре 300 (*1*) и 800 K (*2*). Сплошные кривые – полные константы скорости $K^{de}(T_e, T) + K^{dr}(T_e, T)$ разрушения молекулярных ионов $RgXe^+$ в результате диссоциативной рекомбинации и диссоциативного возбуждения; E1 и E2 – аппроксимационные выражения для $K^{dr}(T_e, T)$ из работ [84] и [28].

пературы T_e < 1000 K зависимость константы скорости K^{dr} от T_e близка к $T_e^{-1/2}$. При дальнейшем увеличении T_e скорость убывания величины $K^{dr}(T_e, T)$ возрастает. Как отмечено выше, при $T_e \gtrsim$ 5000 K зависимость $K^{dr}(T_e, T)$ стремится к $T_e^{-3/2}$. Из рис.9 видно, что зависимость константы скорости рекомбинации от газовой температуры гораздо более слабая и сводится к медленному убыванию $K^{dr}(T_e, T)$ при увеличении T от 300 до 800 K (примерно в 1.25 раза для $ArXe^+$ и в 1.15 раза для $KrXe^+$).

На рис.9,*а* приведены также константы скорости ДР, полученные с помощью простых приближенных выражений [84] (линия E1) и [28] (линия E2). Указанные выражения часто применяются при кинетическом моделировании активных сред газовых лазеров на смесях инертных газов. Как следует из рисунка, первая линия существенно завышает значение $K^{dr}(T_e, T)$, в то время как вторая линия его существенно занижает. Кроме того, видно, что, начиная с T_e = 1000 K аппроксимационные зависимости перестают давать даже качественное согласие с результатами более точных расчетов, вследствие обсуждавшегося выше изменения зависимости K^{dr} от T_e.

Альтернативный канал разрушения ионов $ArXe^+$ и $KrXe^+$ – диссоциативное возбуждение (19) – становится эффективным лишь при энергиях налетающего электрона $\varepsilon \gtrsim \Delta U_{fi}(R_e^{(i)})$. При более низких энергиях константы скорости этого процесса очень малы, т. к. соответствущие переходы происходят далеко от положения равновесия ($R_\omega \gtrsim R_e^{(i)}$). Таким образом, при низких температурах (T_e < 1000 K) ДВ вносит чрезвычайно малый вклад в скорость разрушения молекулярных ионов $ArXe^+$ и $KrXe^+$, на что указывают штрихпунктирные кривые на рис.9. По мере увеличения T_e относительная эффективность ДВ быстро растет, так что при температурах $k_B T_e \gtrsim \Delta U_{fi}(R_e^{(i)})$ ($T_e \gtrsim$ 2500 K для $ArXe^+$ и $T_e \gtrsim$ 6000 K для $KrXe^+$) процесс (19) начинает вносить существенный вклад в разрушение ионов. При дальнейшем возрастании T_e канал ДВ становится доминирующим и вносит определяющий вклад в полную скорость разрушения ионов при $T_e \gtrsim$ 20000 K для $ArXe^+$ и при $T_e \gtrsim$ 40000 K для $KrXe^+$. В указанной области температур константы скорости $K^{de}(T_e, T)$ составляют $\sim 10^{-8}$ см$^3 \cdot$с$^{-1}$, и с ростом температуры они убывают по закону $T_e^{-1/2}$.

Из рис.9 видно, что при низких электронных температурах (T_e < 1000 K) величина $K^{de}(T_e, T)$ быстро растет с ростом газовой температуры T. Такое поведение объясняется тем, что с увеличением T возрастают вероятность нахождения ионов при больших межъядерных расстояниях и, соответственно, скорости ДВ с малыми передачами энергии. При дальнейшем увеличении T_e константа скорости $K^{de}(T_e, T)$ практически не зависит от T. Полные константы скорости разрушения ионов $K^{de}(T_e, T)$ + $K^{dr}(T_e, T)$, учитывающие процессы (17) и (19), также практически не зависят от газовых температур (см. рис.9). Согласно полученным нами формулам величина $K^{de}(T_e, T)$ + $K^{dr}(T_e, T)$ зависит от электронной температуры как $T_e^{-1/2}$.

Здесь необходимо отметить, что для электроионизационных лазеров на смесях инертных газов характерные энергии «медленных» электронов составляют около 5 эВ [6, 14]. Из рис.9 следует, что при подобных электронных температурах процесс ДВ значительно превосходит по эффективности ДР. Вместе с тем в известной авторам литературе при составлении кинетических моделей заселения рабочих уровней атомов Xe процесс (19) не учитывался. Как следует из наших расчетов, он может привести к существенному опустошению основного состояния ионов $ArXe^+$ и $KrXe^+$.

3.4. Диссоциативное возбуждение ионов $ArXe^+$ и $KrXe^+$ электронным ударом в процессах с перезарядкой

В этом разделе впервые представлены данные по эффективности процессов ДВ ионов $RgXe^+$, сопровождающихся неадиабатическими переходами на перезарядочные термы $XeRg^+$. В отличие от ДВ с переходом на первый возбужденый терм, конечный канал которого представляет собой систему Rg + Xe^+ + e и, соответственно, является чистой потерей энергии накачки, продуктом ДВ с переходом на перезарядочный терм является система Rg^+ + Xe + e, которая (см., напр., [14]) может участвовать в дальнейшем комплексе переходов на рабочие уровни XeI. Как и в случае с рассмотренными выше фотопроцессами с перераспределением заряда, выделяются два наиболее интенсивных перехода: $RgXe^+(X[1/2])$ + e → $RgXe^+(C[1/2])$ + e → Xe + Rg^+ ($^2P_{1/2}$) + e (полоса *A*) и $RgXe^+(X[1/2])$ + e → $RgXe^+(B[1/2])$ + e → Xe + Rg^+($^2P_{3/2}$) + e (полоса *B*). Результаты расчетов констант скоростей $K^{de}(T_e, T)$ в широком диапазоне электронных температур (T_e = 5000 – 100000 K) для ионов $ArXe^+$ и $KrXe^+$ приведены на рис.10 и 11.

Процессы ДВ, сопровождающиеся перезарядкой, ввиду специфики конечных термов имеют пороговый харак-

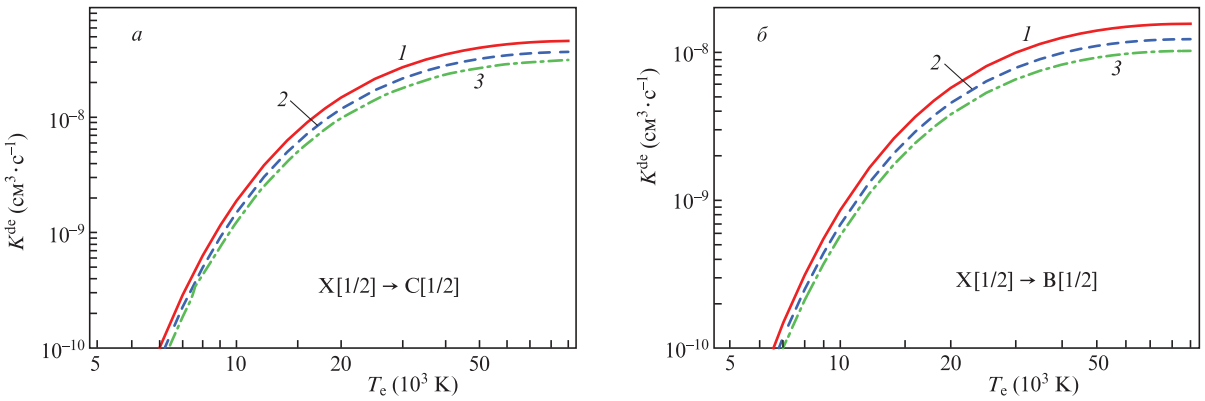

Рис.10. Константы скорости диссоциативного возбуждения $K^{de}(T_e, T)$ ионов $ArXe^+$ в процессах с переходами на перезарядочные термы $ArXe^+(X[1/2])$ + e → $ArXe^+(C[1/2])$ + e → Xe + $Ar^+(^2P_{1/2})$ + e (полоса *A*) (*а*) и $ArXe^+(X[1/2])$ + e → $ArXe^+(B[1/2])$+ e → Xe + $Ar^+(^2P_{3/2})$ + e (полоса *B*) (*б*) при газовых температурах T = 300 (*1*), 500 (*2*) и 800 K (*3*).

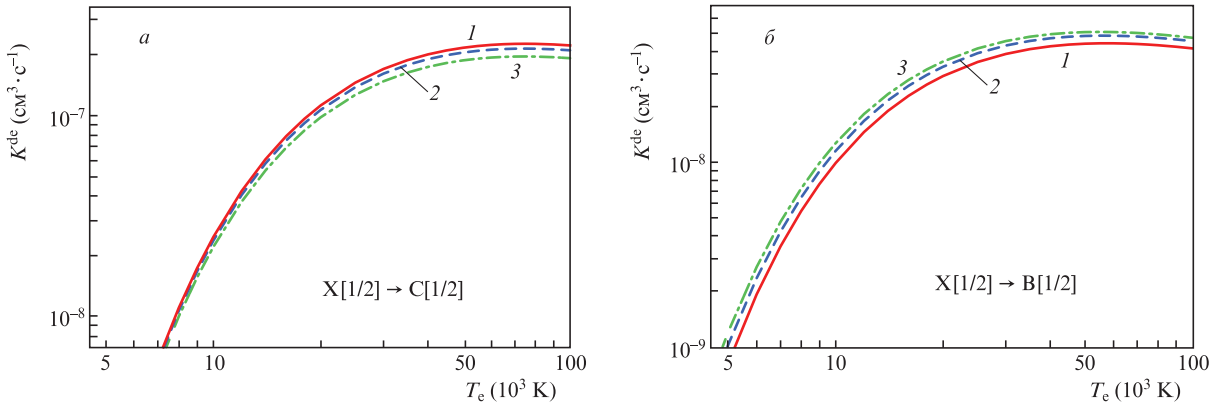

Рис.11. Константы скорости диссоциативного возбуждения $K^{de}(T_e, T)$ в процессах с переходами на перезарядочные термы $KrXe^+(X[1/2]) + e \to KrXe^+(C[1/2]) + e \to Xe + Kr^+(^2P_{1/2}) + e$ (полоса *A*) (*а*) и $KrXe^+(X[1/2]) + e \to KrXe^+(B[1/2]) + e \to Xe + Kr^+(^2P_{3/2}) + e$ (полоса *B*) (*б*) при газовых температурах $T = 300$ (*1*), 500 (*2*) и 800 K (*3*).

тер. По этой причине в области электронных температур $T_e \lesssim 10000$ K константы скорости $K^{de}(T_e, T)$ оказываются малыми, $K^{de}(T_e, T) \lesssim 10^{-9}$см$^3\cdot$с$^{-1}$, но экспоненциально возрастают с увеличением T_e. Из сравнения рис.9 с рис.10 и 11 видно, что положения максимумов констант скоростей ДВ с переходом на перезарядочные термы оказываются существенно сдвинутыми относительно положений максимумов констант скоростей при переходах $|X[1/2]\rangle \to |A[3/2]\rangle$. В случае ионов $KrXe^+$ максимум $K^{de}(T_e, T)$ приходится на область температур $T_e \approx 50000-70000$ K в зависимости от конкретной полосы, *A* или *B*. В случае ионов $ArXe^+$ константы скорости вовсе не достигают максимума в рассматриваемой области температур $T_e <$ 90000 K. Максимальные значения констант скоростей $K^{de}(T_e, T)$ для рассматриваемых процессов составляют $\sim 10^{-7}$ см$^3\cdot$с$^{-1}$ для ионов $KrXe^+$ и $\sim 10^{-8}$ см$^3\cdot$с$^{-1}$ для ионов $ArXe^+$, что по порядку величины совпадает с максимальными значениями констант скоростей ДВ ионов $KrXe^+$ и $ArXe^+$ при переходах между основным и первым возбужденным термами $|X[1/2]\rangle \to |A[3/2]\rangle$ (см. рис.9). Здесь важно отметить, что, учитывая характерные значения энергии медленных электронов в лазерах с электроионизационной накачкой, мы ожидаем, что для подобных установок более важную роль будет играть процесс ДВ с переходом на термы системы $XeRg^+$, обсуждаемый в данном разделе.

На рис.10, 11 наблюдаются традиционные зависимости констант скоростей от газовых температур, т.е. величины $K^{de}(T_e, T)$ медленно убывают с ростом *T*. Исключение составляют переходы типа B для случая ионов $KrXe^+$: $KrXe^+(X[1/2]) + e \to KrXe^+(B[1/2]) + e \to Xe + Kr^+(^2P_{3/2}) + e$, для которых наблюдается медленный рост этих констант с ростом газовой температуры (рис.11,*б*). Подобное поведение связано со спецификой зависимости функции квадрата матричного элемента дипольного момента перехода от межъядерного расстояния: $|d_{fi}(R_\omega)|^2$ быстро растет в ограниченной области по *R* при отдалении от точки равновесия в область $R_\omega > R_e^{(i)}$.

4. Заключение

Исследованы процессы резонансного опустошения основного электронного состояния ионов $ArXe^+$ и $KrXe^+$ при столкновениях с фотонами и электронами. Показано, что наряду с диссоциативной рекомбинацией гетероядерных ионов, являющейся одним из основных механизмов заселения рабочих уровней в мощных лазерах на переходах атома XeI, указанные ионы обладают интенсивным поглощением в видимой и УФ областях спектра. Вследствие малой энергии диссоциации спектры поглощения, определяемые в основном процессом фотодиссоциации гетероядерных ионов, оказываются квазинепрерывными и покрывают значительную часть спектра стандартных ксенон-галогенных эксимерных лазеров. Данное обстоятельство является существенным для определения КПД таких лазеров, т.к. активные среды эксимерных лазеров, как правило, включают в себя смеси инертных газов.

Продемонстрировано, что альтернативный процессу диссоциативной рекомбинации механизм диссоциативного возбуждения оказывается гораздо более эффективным при величинах электронных энергий, типичных для лазеров с накачкой электронным пучком и мощных электроионизационных лазеров высокого давления, разработкой которых занимался Н.Г.Басов с сотрудниками. Насколько известно авторам, до настоящего времени данный процесс не учитывался в кинетических моделях газовых лазеров. Впервые проведен расчет констант скоростей реакции диссоциативного возбуждения ионов $ArXe^+$ и $KrXe^+$, сопровождающейся неадиабатическим переходом на термы системы $XeRg^+$(Rg = Ar, Kr). Вследствие наличия у ионов $ArXe^+$ и $KrXe^+$ перезарядочных состояний фотопоглощение, а также диссоциативное возбуждение этих ионов приводит к образованию в конечном канале системы $Xe + Rg^+$, которая может эффективно принимать участие в каскаде процессов, ведущих к заселению рабочих уровней газовых лазеров.

В широкой области температур ионной (*T*) и электронной (T_e) компонент плазмы рассчитаны константы скоростей реакций диссоциативной рекомбинации ионов $ArXe^+$ и $KrXe^+$ с электронами. Исследованы их зависимости от квантовых чисел образующегося в процессе рекомбинации атома ксенона. Продемонстрировано, что применение часто используемых аппроксимационных соотношений для интегральных значений константы скорости приводит к значительной ошибке в определении величины $K^{dr}(T, T_e)$. Установлены также температурные зависимости суммарных констант скоростей процессов диссоциативной рекомбинации (17) и прямого диссоциативного возбуждения (19), определяющих полные скорости разрушения исследуемых молекулярных ионов электронным ударом.

Полученные в работе результаты по радиационым и столкновительным процессам, происходящим в плазме смесей инертных газов с участием гетероядерных молекулярных ионов $ArXe^+$ и $KrXe^+$, могут быть использованы при разработке современных кинетических моделей активных сред мощных лазеров на переходах атомов ксенона и тем самым способствовать формированию более полной картины создания инверсной населенности в подобного рода средах при различных способах накачки. Новые данные по процессам с участием гетероядерных ионов востребованы также в исследованиях и разработках интенсивных источников излучения УФ диапазона и эксиламп, функционирующих на смесях инертных газов. Кроме того, эти данные требуются для спектроскопии и диагностики плазмы послесвечения импульсных разрядов в смесях инертных газов Rg/Xe.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект № 19-79-30086).

1. Басов Н.Г., Данилычев В.А. *УФН*, **148**, 55 (1986) [*Sov. Phys. Usp.*, **29**, 31 (1986). DOI: 10.1070/PU1986v029n01ABEH003079.
2. Endo M., Walter R.F. *Gas Lasers* (CRC Press, 2007).
3. Яковленко С.И. *Энциклопедия низкотемпературной плазмы*. Под ред. В.Е.Фортова (М.: Наука, 2005, т. 4, с. 262).
4. Басов Н.Г., Баранов В.В., Белоглазов А.А., Данилычев В.А., Дудин А.Ю., Заярный Д.А., Королев А.Г., Романов А.В., Устиновский Н.Н., Холин И.В., Чугунов А.Ю. *Квантовая электроника*, **15**, 453 (1988) [*Sov. J. Quantum Electron.*, **18**, 287 (1988)]. DOI: 10.1070/QE1988v018n03ABEH011497.
5. Минеев А.П., Нефедов С.М., Пашинин П.П., Гончаров П.А., Киселев В.В., Стельмах О.М. *Квантовая электроника*, **50** (3), 277 (2020) [*Quantum Electron.*, **50** (3), 277 (2020)]. DOI: 10.1070/QEL17175.
6. Холин И.В. *Квантовая электроника*, **33**, 129 (2003) [*Quantum Electron.*,**33**,129(2003)]. DOI:10.1070/QE2003v033n02ABEH002374.
7. Mel'nikov S.P., Sizov A.N., Sinyanskii A.A., Miley G.H. *Lasers with Nuclear Pumping* (Springer, 2015, pp 149–154).
8. Han J., Heaven M.C. *Opt. Lett.*, **37**, 2157 (2012).
9. Михеев П.А. *Квантовая электроника*, **45**, 704 (2015) [*Quantum Electron.*, **45**, 704 (2015)]. DOI: 10.1070/QE2015v045n08-ABEH015750.
10. Басов Н.Г., Данилычев В.А., Попов Ю.М., Ходкевич Д.Д. *Письма в ЖЭТФ*, **12**, 473 (1970) [*JETP Lett.*, **12**, 329 (1970)].
11. Басов Н.Г., Данилычев В.А., Попов Ю.М. *Квантовая электроника*, **1**, 29 (1971) [*Sov. J. Quantum Electron.*, **1**, 18 (1971)].
12. Басов Н.Г., Данилычев В.А., Долгих В.А., Керимов О.М., Лобанов А.Н., Подсосонный А.С., Сучков А.Ф. *Квантовая электроника*, **2**, 28 (1975) [*Sov. J. Quantum Electron.*, **5**, 13 (1975)]. DOI: 10.1070/QE1975v005n01ABEH010657.
13. Герасимов Г.Н. *УФН*, **174**, 155 (2004) [*Phys. Usp.*, **47**, 149 (2004)]. DOI: 10.1070/PU2004v047n02ABEH001681.
14. Басов Н.Г., Данилычев В.А., Дудин А.Ю., Заярный Д.А., Устиновский Н.Н., Холин И.В., Чугунов А.Ю. *Квантовая электроника*, **11**, 1722 (1984) [*Sov. J. Quantum Electron.*, **14**, 1158 (1984)]. DOI: 10.1070/QE1984v014n09ABEH006101.
15. Lei P., Zhang Zh., Wang X., Zuo D. *Opt. Commun.*, **513**, 128116 (2022).
16. Mikheyev P.A., Chernyshov A.K., Svistun M.I., Ufimtsev N.I., Kartamysheva O.S., Heaven M.C., Azyazov V.N. *Opt. Express*, **27**, 38759 (2019).
17. Apruzese J.P., Giuliani J.L., Wolford M.F., Sethian J.D., Petrov G.M., Hinshelwood D.D., Myers M.C., Dasgupta A., Hegeler F., Petrova Ts. *J. Appl. Phys.*, **104**, 013101 (2008).
18. Gordienko Yu.N., Khasenov M.U., Batyrbekov E.G., Samarkhanov K.K., Ponkratov Yu.V., Amrenov A.K. *Laser Part. Beams*, **37**, 18 (2019).
19. Saidi S., Loukil H., Khodja K., Belasri A., Caillier B., Guillot P. *IEEE Trans. Plasma Sci.*, **50**, 2147 (2022).
20. Popović D., Mozetć M., Vesel A., Primc G., Zaplotnik R. *Plasma Process Polym.*, **18**, 2100061 (2021).
21. Басов Н.Г., Брунин А.Н., Данилычев В.А., Дегтярев А.Г., Долгих В.А., Керимов О.М. *Квантовая электроника*, **4**, 1595 (1977) [*Sov. J. Quantum Electron.*, **7**, 908 (1977)]. DOI: 10.1070/QE1977v007n07ABEH012718.
22. Басов Н.Г., Бакаев В.Г., Григорьянц Е.А., Данилов Е.О., Зворыкин В.Д., Кобелев П.В., Метревели Г.Е., Полянский С.В., Пролейко И.В., Сучков А.Ф., Сычугов Г.В. *Квантовая электроника*, **18**, 902 (1991) [*Sov. J. Quantum Electron.*, **21**, 816 (1991)]. DOI: 10.1070/QE1991v021n08ABEH003959.
23. Басов Н.Г., Вадковский А.Д., Зворыкин В.Д., Метревели Г.Е., Сучков А.Ф. *Квантовая электроника*, **21**, 15 (1994) [*Quantum Electron.*, **24**, 13 (1994)].
24. Басов Н.Г., Крохин О.Н. *ЖЭТФ*, **46**, 171 (1964) [*Sov. Phys. JETP*, **19**, 123 (1964)].
25. Басов Н.Г., Данилычев В.А., Долгих В.А., Керимов О.М., Лебедев В.С., Молчанов А.Г. *Письма в ЖЭТФ*, **26**, 20 (1977) [*JETP Lett.*, **26**, 16 (1977)].
26. Басов Н.Г., Данилычев В.А., Долгих В.А., Керимов О.М., Лебедев В.С., Молчанов А.Г. *Квантовая электроника*, **6**, 1010 (1979) [*Sov. J. Quantum Electron.*, **9**, 593 (1979)]. DOI: 10.1070/QE1979v009n05ABEH009034.
27. Басов Н.Г., Войтик М.Г., Зуев В.С., Кутахов В.П. *Квантовая электроника*, **12**, 2213 (1985) [*Sov. J. Quantum Electron.*, **15**, 1461 (1985)]. DOI: 10.1070/QE1985v015n11ABEH007959.
28. Бойченко А.М., Яковленко С.И. *Квантовая электроника*, **30**, 681 (2000) [*Quantum Electron.*, **30**, 681 (2000)]. DOI: 10.1070/QE2000v030n08ABEH001791.
29. Tanaka Y., Yoshino K., Freeman D.E. *J. Chem. Phys.*, **62**, 4484 (1975).
30. Millet P., Barrie A.M., Birot A., Brunet H., Dijols H., Galy J., Salamero Y. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **14**, 459 (1981).
31. Tsuji M., Tanaka M., Nishimura Y. *Chem. Phys. Lett.*, **256**, 623 (1996).
32. Tsuji M., Tanaka M., Nishimura Y. *Chem. Phys. Lett.*, **262**, 349 (1996).
33. Khasenov M. *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. B*, **482**, 45 (2020).
34. Автаева С.В., Кулумбаев Э.Б. *Физика плазмы*, **35**, 366 (2009); *Plasma Phys. Rep.*, **35**, 329 (2009). DOI: 10.1134/S1063780X09040060.
35. Belasri A., Harrache Z. *Plasma Chem. Plasma Process.*, **31**, 787 (2011).
36. Belasri A., Harrache Z., Baba-Hamed T. *Phys. Plasmas*, **10**, 4874 (2003).
37. Bendella S., Belasri A. *Plasma Devices Oper.*, **15**, 77 (2007).
38. Postel O.B., Cappelli M.A. *Appl. Phys. Lett.*, **76**, 544 (2000).
39. Ohwa M., Moratz T.J., Kushner M.J. *J. Appl. Phys.*, **66**, 5131 (1989).
40. Apruzese J.P., Giuliani J.L., Wolford M.F., Sethian J.D., Petrov G.M., Hinshelwood D.D., Myers M.C., Ponce D.M. *Appl. Phys. Lett.*, **88**, 121120 (2006).
41. Alford W.J., Hays G.N., Ohwa M., Kushner M.J. *J. Appl. Phys.*, **69** (4), 1843 (1991).
42. Dasgupta A., Apruzese J.P., Zatsarinny O., Bartschat K., Fischer C.F. *Phys. Rev. A*, **74**, 012509 (2006).
43. Apruzese J.P., Giuliani J.L., Wolford M.F., Sethian J.D., Petrov G.M., Hinshelwood D.D., Myers M.C., Dasgupta A., Hegeler F., Petrova Ts. *J. Appl. Phys.*, **104**, 013101 (2008).
44. Минеев А.П., Дроздов А.П., Нефедов С.М., Пашинин П.П., Гончаров П.А., Киселев В.В. *Квантовая электроника*, **42**, 575 (2012) [*Quantum Electron.*, **42**, 575 (2012)]. DOI: 10.1070/QE2012v042n07ABEH014841.
45. Карелин А.В., Синянский А.А., Яковленко С.И. *Квантовая электроника*, **24**, 387 (1997) [*Quantum Electron.*, **27**, 375 (1997)]. DOI: 10.1070/QE1997v027n05ABEH000952.
46. Минеев А.П., Нефедов С.М., Пашинин П.П., Гончаров П.А., Киселев В.В. *Вестник воздушно-космической обороны*, № 1 (17), 78 (2018).
47. Лебедев В.С., Кислов К.С., Нариц А.А. *Письма в ЖЭТФ*, **108**, 618 (2018) [*JETP Lett.*, **108**, 582 (2018)]. DOI: 10.1134/S0021364018210087.
48. Bates D.R. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **24** (3),703 (1991).
49. Иванов В.А. *УФН*, **162**, 35 (1992) [*Sov. Phys. Usp.*, **35**, 17 (1992)]. DOI: 10.1070/PU1992v035n01ABEH002192.
50. Guberman S.L. *Dissociative Recombination of Molecular Ions with Electrons* (New York: Springer, 2013).
51. Иванов В.А., Петровская А.С., Скобло Ю.Э. *Оптика и спектроскопия*, **114**, 750 (2013) [*Opt. Spectrosc.*, **114**, 688 (2013)]. DOI: 10.1134/S0030400X13040097.

52. Иванов В.А., Петровская А.С., Скобло Ю.Э. *Оптика и спектроскопия*, **117**, 896 (2014) [*Opt. Spectrosc.*, **117**, 869 (2014)]. DOI: 10.1134/S0030400X14120108.
53. Иванов В.А., Петровская А.С., Скобло Ю.Э. *Оптика и спектроскопия*, **123**, 689 (2017) [*Opt. Spectrosc.*, **123**, 692 (2017). DOI: 10.1134/S0030400X17110091.
54. Иванов В.А., Петровская А.С., Скобло Ю.Э. *ЖЭТФ*, **155**, 901 (2019) [*JETP*, **128**, 767 (2019)]. DOI: 10.1134/S1063776119030051.
55. Levin L., Moody S., Klosterman E., Center R., Ewing J. *IEEE J. Quantum Electron.*, **17**, 2282 (1981).
56. Иванов В.А. *Оптика и спектроскопия*, **73**, 637 (1992) [*Opt. Spectrosc.*, **73**, 374 (1992)].
57. Ivanov V.A., Prikhodjko A.S. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **24**, L459 (1991).
58. Jonkers J., van de Sande M., Sola A., Gamero A., Rodero A., van der Mullen J. *Plasma Sources Sci. Technol.*, **12**, 464 (2003).
59. Марченко В.С. *ЖЭТФ*, **85**, 500 (1983) [*JETP*, **58**, 292 (1983)].
60. Bultel A., van Ootegem B., Bourdon A., Vervisch P. *Phys. Rev. E*, **65**, 046406 (2002).
61. Emmons D.J., Weeks D.E. *J. Appl. Phys.*, **121**, 203301 (2017).
62. Emmons D.J., Weeks D.E., Eshel B., Perram G.P. *J. Appl. Phys.*, **123**, 043304 (2018).
63. Hoskinson A.R., Gregorio J., Hopwood J., Galbally-Kinney K., Davis S.J., Rawlins W.T. *J. Appl. Phys.*, **119**, 233301 (2016).
64. Sun P., Zuo D., Mikheyev P.A., Han J., Heaven M.C. *Opt. Express*, **27**, 22289 (2019).
65. Кислов К.С., Нариц А.А., Лебедев В.С. *Оптика и спектроскопия*, **128**, 1596 (2020) [*Opt. Spectrosc.*, **128**, 1719 (2020)]. DOI: 10.1134/S0030400X20110144.
66. Narits A.A., Kislov K.S., Lebedev V.S. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **53**, 195201 (2020). DOI: 10.1088/1361-6455/aba3a7.
67. Lebedev V.S., Kislov K.S., Narits A.A. *Plasma Sources Sci. Technol.*, **29**, 025002 (2020). DOI: 10.1088/1361-6595/ab652f.
68. Лебедев В.С., Кислов К.С., Нариц А.А. *ЖЭТФ*, **157**, 579 (2020) [*JETP*, **130**, 483 (2020)]. DOI: 10.1134/S1063776120030152.
69. Кислов К.С., Нариц А.А. , Лебедев В.С. *Оптика и спектроскопия*, **128**, 462 (2020) [*Opt. Spectrosc.*, **128**, 448 (2020)]. DOI: 10.1134/S0030400X20040116.
70. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. *Квантовая механика. Нерелятивистская теория* (М.: Физматлит, 2004).
71. Bates D.R. *Mon. Not. R. Astron. Soc.*, **112**, 40 (1952).
72. Лебедев В.С., Пресняков Л.П., Собельман И.И. *Астрономический журн.*, **77**, 390 (2000) [*Astron Rep.*, **44**, 338 (2000)]. DOI: 10.1134/1.163856.
73. Лебедев В.С., Пресняков Л.П., Собельман И.И. *Письма в ЖЭТФ*, **72**, 256 (2000) [*JETP Lett.*, **72**, 178 (2000)]. DOI: 10.1134/1.1320107.
74. Lebedev V.S., Presnyakov L.P. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **35**, 4347 (2002). DOI: 10.1088/0953-4075/35/21/303.
75. Лебедев В.С., Пресняков Л.П., Собельман И.И. *УФН*, **173**, 491 (2003) [*Phys. Usp.*, **46**, 473 (2003)]. DOI: 10.1070/PU2003v046n05ABEH001334.
76. Nakamura H. *Nonadiabatic Transition: Concepts, Basic Theories and Applications* (Singapore, London: World Scientific, 2011).
77. Lebedev V.S. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **24**, 1993 (1991). DOI: 10.1088/0953-4075/24/8/016.
78. Kislov K.S., Narits A.A., Lebedev V.S. *J. Russ. Laser Res.*, **43**, 556 (2022). DOI: 10.1007/s10946-022-10081-y.
79. Wadt W.R. *J. Chem. Phys.*, **73**, 3915 (1980).
80. Sukhorukov V.L., Petrov I.D., Schäfer M., et al. *J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys.*, **45**, 092001 (2012).
81. Иванов В.А., Лебедев В.С., Марченко В.С. *ЖЭТФ*, **94**, 86 (1988) [*Sov. Phys. JETP*, **67**, 2225 (1988)].
82. Гореславский С.П., Делоне Н.Б., Крайнов В.П. *ЖЭТФ*, **82**, 1789 (1982) [*JETP*, **55**, 1032 (1982)].
83. Lebedev V.S., Beigman I.L. *Physics of Highly Excited Atoms and Ions* (Berlin, Heidelberg: Springer, 1998).
84. Lawton S.A., Richards J.B., Newman L.A., Srecht L., DeTemple T.A. *J. Appl. Phys.*, **50**, 3888 (1979).