

О р д е н а Л е н и н а
И Н С Т И Т У Т П Р И К Л А Д Н О Й М А Т Е М А Т И К И
и м . М . В . К е л д ы ш а
Р о с с и й с к о й а к а д е м и и н а у к

В.С. Захаров, В.Г. Новиков

РАСЧЕТ СКОРОСТЕЙ И СЕЧЕНИЙ
СТОЛКНОВИТЕЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ
ПО МОДЕЛИ ХАРТРИ-ФОКА-СЛЭТЕРА

Москва, 2005

РАСЧЕТ СКОРОСТЕЙ И СЕЧЕНИЙ СТОЛКНОВИТЕЛЬНЫХ ПРОЦЕССОВ ПО МОДЕЛИ ХАРТРИ-ФОКА-СЛЭТЕРА

В.С. ЗАХАРОВ, В.Г. НОВИКОВ

Препринт Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН

На основе квантово-статистической модели самосогласованного поля Хартри-Фока-Слэтера разработана и реализована универсальная методика расчета скоростей и сечений столкновительных процессов в плазме многозарядных ионов для широкого диапазона температур и плотностей. Расчеты проведены для плазмы ксенона и олова. Выполнено сравнение полученных результатов с экспериментальными данными и с различными широко распространенными методами. Проведен анализ вкладов процессов не прямой ионизации, исследована зависимость сечений столкновительных процессов от плотности плазмы. Построены простые аппроксимационные выражения для скоростей ионизации и возбуждения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда Фундаментальных Исследований, грант РФФИ № 05-01-00682.

COLLISIONAL RATES AND CROSS-SECTIONS CALCULATED BY HARTREE-FOCK-SLATER MODEL

V.S. ZAKHAROV, V.G. NOVIKOV

Preprint of the Keldysh Institute of Applied Mathematics of RAS

On the basis of quantum-statistical model of self-consistent field – the Hartree-Fock-Slater model for the average atom – the universal procedure for calculation of rates and cross-sections of collisional processes in plasma of multicharged ions is developed. The calculations for Xe and Sn plasmas are fulfilled. Comparison with experimental data and widely used methods is carried out. It is shown that for some Xe ions the contribution of indirect processes to ionization rate may be very important. The influence of density effects on excitation and ionization cross-sections is analyzed.

The work was supported by Russian Foundation for Basic Research, grant № 05-01-00682.

Содержание

Введение	4
1. Поуровневая кинетика электронов в плазме по модели среднего атома	5
2. Сечения и скорости процессов возбуждения и ионизации	7
2.1 Метод искаженных волн	7
2.2 Приближение Борна	11
3. Результаты расчетов скоростей и сечений для плазмы ксенона и олова	13
3.1 Возбуждение	13
3.2 Ионизация	17
3.3 Аппроксимационные выражения	20
3.4 Влияние плотностных эффектов на величину сечений	24
4. Анализ вклада не прямых процессов в сечения ионизации	27
Список литературы	31

Введение

Плазма многозарядных ионов представляет значительный интерес в связи с фундаментальными исследованиями в области атомной и квантовой физики, а также в различных прикладных задачах, в частности, для создания источника излучения в диапазоне длин волн $\lambda \sim 13.5$ нм (extreme ultraviolet, EUV) в литографии [1]. Излучение плазмы определяется кинетикой ионизации и возбуждения, для описания которых необходимо знать сечения и скорости соответствующих процессов в широком диапазоне температур и плотностей. Несмотря на значительный прогресс в понимании физических явлений и методах описания квантовых процессов в плазме, расчеты процессов ионизации и возбуждения многозарядных ионов представляют значительную трудность ввиду неприменимости кулоновского приближения для многоэлектронных систем, влияния плотностных эффектов, и требуют дальнейшего совершенствования моделей и методов расчета.

Для вычисления сечений элементарных процессов возбуждения и ионизации наиболее точным считается метод искаженных волн [2], который, однако, не нашел широкого применения в силу своей трудоемкости. На практике применяют, как правило, более простые методы, в частности, широко используется метод Борна [2-4] и различные его модификации с применением некоторых уточнений и поправок, а также различные полуэмпирические выражения для вычисления сечений и скоростей, например, такие, как формулы Лотца [5], Ван Режемортера [6] и др. Точность этих методов и область их применимости исследована в недостаточной степени; кроме того, в упомянутых выше методах не проводится учет плотностных эффектов.

Для описания состояний плазмы многозарядных ионов и вычисления скоростей атомных процессов в широком диапазоне температур и плотностей можно воспользоваться достаточно надежными квантово-статистическими моделями вещества, например такими, как модель самосогласованного поля Хартри-Фока-Слэтера (ХФС) [7, 8]. В модели ХФС используется самосогласованное поле Хартри и приближение локального обмена, уточняющее обменный потенциал Слэтера. В результате решения уравнения Шрёдингера с полученным самосогласованным потенциалом может быть найден энергетический спектр многозарядного иона, соответствующие волновые функции, а также средние числа заполнения и средняя степень ионизации вещества [7].

В данной работе полученные в модели ХФС характеристики состояния многозарядных ионов используются для прямого расчета скоростей ионизации, возбуждения и рекомбинации. На основе различных методов и приближений первого порядка теории возмущений разработана универсальная методика вычисления скоростей и сечений процессов возбуждения и ионизации. Проанализировано поведение сечений столкновительных процессов в зависи-

мости от плотности вещества - эффект, малоизученный на настоящий момент. Проведены расчеты для олова и ксенона, т.е. для тех элементов, которые в настоящее время изучаются во многих лабораториях в связи с созданием источника EUV для рентгеновской литографии (см. например, [1, 9, 10]).

1. Поуровневая кинетика электронов в плазме по модели среднего атома

Поуровневая кинетика электронов рассматривается в приближении среднего атома, т.е. иона со средними числами заполнения одноэлектронных уровней ν , который вместе со свободными электронами находится в электронной-сферической ячейке радиуса r_0 [7]. Радиус ячейки в атомных единицах определяется плотностью вещества:

$$r_0 = 1.388 \left(\frac{A}{\rho} \right)^{1/3},$$

где A - атомный вес, ρ - плотность вещества в г/см³. Под состоянием ν понимается одноэлектронное состояние: $\nu = n\ell$, где n - главное квантовое число, ℓ - орбитальное квантовое число.

В этом приближении система уравнений баланса электронов по уровням ν для средних чисел заполнения N_ν имеет вид [11, 12]:

$$\frac{dN_\nu}{dt} = \left(1 - \frac{N_\nu}{g_\nu} \right) S_\nu - N_\nu L_\nu, \quad (1)$$

$$S_\nu = \sum_{\mu < \nu} N_\mu (\alpha_{\mu\nu}^{abs} + \alpha_{\mu\nu}^{ex}) + \sum_{\mu > \nu} N_\mu (\alpha_{\mu\nu}^{em} + \alpha_{\mu\nu}^{dex}) + \alpha_\nu^{ir} + \alpha_\nu^{phr} + \alpha_\nu^{dc}, \quad (2)$$

$$L_\nu = \sum_{\mu < \nu} \left(1 - \frac{N_\mu}{g_\mu} \right) (\alpha_{\nu\mu}^{em} + \alpha_{\nu\mu}^{dex}) + \sum_{\mu > \nu} \left(1 - \frac{N_\mu}{g_\mu} \right) (\alpha_{\nu\mu}^{abs} + \alpha_{\nu\mu}^{ex}) + \alpha_\nu^{ii} + \alpha_\nu^{phi} + \alpha_\nu^{ai}, \quad (3)$$

где S_ν - суммарная скорость процессов в 1/сек, ведущих к увеличению числа электронов в состоянии ν , а L_ν - суммарная скорость процессов, ведущих к уменьшению числа электронов в этом состоянии; g_ν - статистический вес уровня ν . Здесь и далее в работе, если не оговорено противное, используются атомные единицы: $e = m = \hbar = 1$.

Для скоростей процессов, определяющих количество одноэлектронных переходов на один ион в единицу времени, введены следующие обозначения:

$\alpha_{\mu\nu}^{ex}$, $\alpha_{\nu\mu}^{dex}$ - для возбуждения и, соответственно, гашения уровня ν ; α_{ν}^{ii} , α_{ν}^{ir} - для ударной ионизации и трехчастичной рекомбинации; $\alpha_{\mu\nu}^{abs}$, $\alpha_{\nu\mu}^{em}$ - для поглощения и излучения в линиях; α_{ν}^{phi} , α_{ν}^{phr} - для фотоионизации и фоторекомбинации; α_{ν}^{ai} , α_{ν}^{dc} - для автоионизации и диэлектронного захвата.

Число свободных электронов в расчете на один ион с зарядом ядра Z , т.е. средняя степень ионизации вещества Z_0 , определяется как

$$Z_0 = Z - \sum_{\nu} N_{\nu}.$$

Скорости радиационных процессов (поглощение и излучение в линиях, фотоионизация и фоторекомбинация) зависят от поля излучения через спектральную интенсивность I_{ω} и выражаются через соответствующие эффективные сечения взаимодействия [12, 13].

Методика расчета скоростей столкновительных процессов, т.е. процессов возбуждения и гашения уровня, ионизации и трехчастичной рекомбинации, а также автоионизации и диэлектронного захвата основана на использовании одноэлектронных волновых функций модели среднего атома. Одноэлектронные волновые функции вычисляются в самосогласованном потенциале Хартри-Фока-Слэтера для иона с заданными числами заполнения, удовлетворяющими системе уравнений (1). С полученными волновыми функциями вычисляются уровни энергии, силы осцилляторов, матричные элементы, сечения и скорости электрон-ионных взаимодействий. Для вычисления скоростей столкновительных процессов возбуждения $\alpha_{\mu\nu}^{ex}$ и ионизации α_{ν}^{ii} используются следующие выражения (см. [2]):

$$\alpha_{\mu\nu}^{ex} = \langle v \sigma_{\mu\nu}^{ex} \rangle, \quad \alpha_{\nu}^{ii} = \langle v \sigma_{\nu}^{ii} \rangle,$$

где v - скорость электрона, $\sigma_{\mu\nu}^{ex}$, σ_{ν}^{ii} - соответствующие сечения возбуждения и ионизации, а усреднение проводится по функции распределения электронов по скоростям. В первом порядке теории возмущений сечение перехода иона из состояния γ_0 в состояние γ определяется через сумму матричных элементов

$$\sigma \sim \sum_{\lambda, \lambda_0} \left\langle \gamma \varepsilon' \lambda \left| \tilde{V} \right| \gamma_0 \varepsilon \lambda_0 \right\rangle^2, \quad (4)$$

где ε , ε' и λ_0 , λ - энергии и орбитальные моменты свободного электрона до и после взаимодействия соответственно, \tilde{V} - потенциал взаимодействия налетающего электрона и иона. Матричные элементы (4) вычисляются с использованием волновых функций электронов дискретного и непрерывного спектров, полученных различными методами (см. далее п. 2).

Для описания нестационарных процессов ионизации и возбуждения необходимо решать систему уравнений поуровневой кинетики (1) - (3). Эта система уравнений является нелинейной, главным образом из-за зависимости среднего заряда иона Z_0 от чисел заполнения N_ν . В квазистационарном случае выполняется условие

$$\frac{dN_\nu}{dt} = 0 \quad (5)$$

и распределение ионов по уровням энергии определяется тем, что прямые процессы компенсируются обратными, при этом средняя степень ионизации может быть вычислена исходя из равновесных моделей: обобщенной столкновительно-излучательной модели, корональной модели или, в случае полного термодинамического равновесия, модели Саха (см. например, [7, 15, 16]). Система уравнений (1)-(3) при этом значительно упрощается. В дальнейшем условие квазистационарности (5) предполагается выполненным.

2. Сечения и скорости процессов возбуждения и ионизации

В задаче столкновения электрона с многоэлектронным ионом необходимо учитывать состояние иона и его конфигурацию, обменные эффекты и различные каналы рассеяния. Мы будем рассматривать только неупругие взаимодействия, сопровождающиеся возбуждением или ионизацией атома (иона), и использовать теорию возмущений.

Будем считать, что в возбуждении участвует только один электрон иона, находящийся на внешней оболочке (внешний электрон), причем волновые функции иона будем строить из одноэлектронных волновых функций по модели Хартри-Фока-Слэтера для среднего иона [7]. На основе этих предположений можно получить формулы для сечения возбуждения, которые в общем виде получены в [17].

2.1 Метод искаженных волн

В первом порядке теории возмущений наиболее общим для вычисления сечений является метод искаженных волн и его модификации для вычисления сечений и скоростей возбуждения, ионизации, диэлектронной рекомбинации и автоионизации [2]. В методе искаженных волн учитывается, что на движение свободного электрона оказывает влияние поле иона. Волновая функция электрона является решением уравнения Шрёдингера в поле иона с полным учетом взаимодействия в приближении Хартри-Фока. Эффективное сечение возбуждения иона для перехода из состояния γ_0 в γ (с возбуждением электрона из состояния с квантовыми числами n, ℓ в состояние с квантовыми

числами n', ℓ') представляется в виде

$$\sigma_{\gamma_0\gamma} = \sum_{\kappa} \left[\sigma'_{\kappa}(\ell, \ell') + \sigma''_{\kappa}(\ell, \ell') \right]. \quad (6)$$

Здесь $\sigma'_{\kappa}(\ell, \ell')$, $\sigma''_{\kappa}(\ell, \ell')$ - одноэлектронные сечения, причем σ' включает прямую и интерференционную части сечения, а σ'' - обменную часть:

$$\sigma'_{\kappa}(\ell, \ell') = \pi a_0^2 \frac{16}{(2\ell + 1)k^2} \left(\frac{\pi}{2} \right)^2 \sum_{\lambda, \lambda'} P_{\kappa}^d \left(P_{\kappa}^d - \sum_{\kappa'} P_{\kappa'\kappa}^e \right), \quad (7)$$

$$\sigma''_{\kappa}(\ell, \ell') = \pi a_0^2 \frac{16}{(2\ell + 1)k^2} \left(\frac{\pi}{2} \right)^2 \sum_{\lambda, \lambda'} \left(\sum_{\kappa'} P_{\kappa'\kappa}^e \right)^2, \quad (8)$$

где $k = (2\varepsilon)^{1/2}$ - импульс налетающего электрона; $\varepsilon, \varepsilon'$ и λ, λ' - энергии и орбитальные моменты этого электрона до и после столкновения; P_{κ}^d и $P_{\kappa'\kappa}^e$ - так называемые прямые и обменные радиальные интегралы, которые выражаются с использованием $3jm$ и $6j$ символов Вигнера [19] следующим образом [2]:

$$P_{\kappa}^d = \sqrt{\frac{(2\ell_0 + 1)(2\ell + 1)(2\lambda_0 + 1)(2\lambda + 1)}{2\kappa + 1}} \begin{pmatrix} \kappa & \ell & \ell' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \kappa & \lambda & \lambda' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times \\ \times R_{n\ell, n'\ell'; \varepsilon\lambda, \varepsilon'\lambda'}^{(\kappa)} \quad (9)$$

$$P_{\kappa'\kappa}^e = (-1)^{\kappa+\kappa'} \sqrt{(2\kappa + 1)(2\ell + 1)(2\ell' + 1)(2\lambda + 1)(2\lambda' + 1)} \times \\ \times \begin{pmatrix} \kappa' & \ell & \lambda' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \kappa' & \lambda & \ell' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} \kappa' & \ell & \lambda' \\ \kappa & \lambda & \ell' \end{matrix} \right\} R_{\varepsilon\lambda, n'\ell'; n\ell, \varepsilon'\lambda'}^{(\kappa')} \quad (10)$$

Здесь $R_{\alpha, \beta; \gamma, \delta}^{(\kappa)}$ - интеграл Слэтера:

$$R_{\alpha, \beta; \gamma, \delta}^{(\kappa)} = \int \int R_{\alpha}(r') R_{\beta}(r') \frac{r_{\leq}^{\kappa}}{r_{>}^{\kappa+1}} R_{\gamma}(r'') R_{\delta}(r'') dr' dr'', \quad (11)$$

где $R_{\alpha}(r)$, $R_{\beta}(r)$, $R_{\gamma}(r)$, $R_{\delta}(r)$ - радиальные части одноэлектронных волновых функций электронов дискретного и непрерывного спектра.

Следует заметить, что физический смысл индекса κ для первого и второго члена в (6) различен, несмотря на одинаковые пределы суммирования. Если для первого члена κ соответствует мультипольности взаимодействия, то для второго члена κ является дополнительным индексом суммирования, а мультипольность взаимодействия учитывается при суммировании по κ' в (8).

Диапазон значений κ и κ' определяется отличием от нуля соответствующих $3jm$ и $6j$ символов и лежит в пределах:

$$\kappa_{min} \leq \kappa \leq \kappa_{max}, \quad \kappa'_{min} \leq \kappa' \leq \kappa'_{max},$$

где

$$\begin{aligned} \kappa_{min} &= \max(|\ell' - \ell|, |\lambda' - \lambda|), & \kappa_{max} &= \min(\ell + \ell', \lambda + \lambda'), \\ \kappa'_{min} &= \max(|\ell' - \lambda|, |\lambda' - \ell|), & \kappa'_{max} &= \min(\ell' + \lambda, \lambda' + \ell). \end{aligned}$$

Что же касается максимальных значений орбитальных чисел λ и λ' , по которым проводится суммирование в (7) и (8), то их значения ограничены условием существования классической области движения внутри атомной ячейки для свободного электрона с энергией ε , то есть условием

$$p^2(r_0) = 2\varepsilon - 2V(r_0) - \frac{\lambda_{max}(\lambda_{max} + 1)}{r_0^2} = 2\varepsilon - \frac{\lambda_{max}(\lambda_{max} + 1)}{r_0^2} > 0,$$

где r_0 - радиус атомной ячейки. Очевидно, что в расчетах необязательно проводить суммирование до значений $\lambda = \lambda_{max}$, принимая во внимание малость P_{κ}^d и $P_{\kappa'\kappa}^e$ при $\lambda \gg 1$, однако для больших значений энергий свободных электронов ряд по λ и λ' сходится достаточно медленно и приходится учитывать не менее 40-50 членов.

В случае столкновительных процессов число актов возбуждения в единицу времени на один ион пропорционально электронной плотности N_e , а также усредненному по распределению электронов произведению сечения $\sigma_{\gamma_0\gamma}$ на скорость электронов $v = \sqrt{2\varepsilon}$:

$$\alpha_{\gamma_0\gamma}^{ex} = N_e \langle \sigma_{\gamma_0\gamma} v \rangle = N_e \int_{\Delta E}^{\infty} \sqrt{2\varepsilon} \sigma_{\gamma_0\gamma}(\varepsilon) F(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (12)$$

где ΔE - энергия перехода $n\ell \rightarrow n'\ell'$, $F(\varepsilon)$ - функция распределения свободных электронов по энергиям при температуре θ (максвелловское распределение):

$$F(\varepsilon) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \sqrt{\varepsilon} \theta^{-3/2} e^{-\varepsilon/\theta}.$$

Формулы, приведенные для вычисления скорости возбуждения иона, несложно обобщить на случай, когда одно из состояний электрона является состоянием непрерывного спектра, т.е. процесса ионизации.

Выражения для дифференциального сечения ионизации электрона с квантовыми числами $n\ell$ (он переходит в состояние непрерывного спектра

$\varepsilon^* \lambda^*$) получаются из представленных выше формул (6)-(10), если состояние γ отнести к непрерывному спектру:

$$d\sigma_{\gamma_0\gamma} = \sum_{\kappa} \left[d\sigma'_{\kappa}(\ell, \lambda^*) + d\sigma''_{\kappa}(\ell, \lambda^*) \right], \quad (13)$$

$$d\sigma'_{\kappa}(\ell, \lambda^*) = \pi a_0^2 \frac{16}{(2\ell + 1)k^2} \left(\frac{\pi}{2} \right)^2 \sum_{\lambda, \lambda'} P_{\kappa}^d \left(P_{\kappa}^d - \sum_{\kappa'} P_{\kappa'\kappa}^e \right) d\varepsilon^*, \quad (14)$$

$$d\sigma''_{\kappa}(\ell, \lambda^*) = \pi a_0^2 \frac{16}{(2\ell + 1)k^2} \left(\frac{\pi}{2} \right)^2 \sum_{\lambda, \lambda'} \left(\sum_{\kappa'} P_{\kappa'\kappa}^e \right)^2 d\varepsilon^*, \quad (15)$$

$$P_{\kappa}^d = \sqrt{\frac{(2\ell + 1)(2\lambda^* + 1)(2\lambda + 1)(2\lambda' + 1)}{2\kappa + 1}} \begin{pmatrix} \kappa & \ell & \lambda^* \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \kappa & \lambda & \lambda' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times \\ \times R_{n\ell, \varepsilon^* \lambda^*; \varepsilon \lambda, \varepsilon' \lambda'}^{(\kappa)} \quad (16)$$

$$P_{\kappa'\kappa}^e = (-1)^{\kappa + \kappa'} \sqrt{(2\kappa + 1)(2\ell + 1)(2\lambda^* + 1)(2\lambda + 1)(2\lambda' + 1)} \times \\ \times \begin{pmatrix} \kappa' & \ell & \lambda' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \kappa' & \lambda & \lambda^* \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \left\{ \begin{matrix} \kappa' & \ell & \lambda' \\ \kappa & \lambda & \lambda^* \end{matrix} \right\} R_{\varepsilon \lambda, \varepsilon^* \lambda^*; n\ell, \varepsilon' \lambda'}^{(\kappa')}. \quad (17)$$

В отличие от сечений возбуждения, при вычислении полного эффективно-го сечения ионизации необходимо полученную величину (13) просуммировать по моментам λ^* и проинтегрировать по энергиям ε^* ионизованного электрона:

$$\sigma_{\gamma_0\gamma} = \sum_{\lambda^*} \int_0^{\varepsilon - \varepsilon^i} \frac{d\sigma_{\gamma_0\gamma}}{d\varepsilon^*} d\varepsilon^*, \quad (18)$$

где ε^i - энергия ионизации атома (иона) с уровня $n\ell$ (в одноэлектронном приближении $\varepsilon^i = -\varepsilon_{n\ell}$), ε - энергия налетающего на ион электрона.

Для вычисления скорости процесса ионизации по аналогии с выражением (12) для скорости возбуждения используется следующая формула:

$$\alpha_{\gamma_0\gamma}^i = N_e \int_{\varepsilon^i}^{\infty} \sum_{\lambda^*} \int_0^{\varepsilon - \varepsilon^i} \frac{d\sigma_{\gamma_0\gamma}}{d\varepsilon^*} (1 - n_{\varepsilon^*}) d\varepsilon^* \sqrt{2\varepsilon} F(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (19)$$

где n_{ε^*} - населенность электронов с энергией ε^* :

$$n_{\varepsilon^*} = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{\varepsilon^* - \mu}{\theta}\right)},$$

μ - химический потенциал.

Как можно видеть из формул (18) и (19), при вычислении сечений и скоростей ионизации присутствует дополнительное суммирование по моментам и интегрирование по энергиям ионизованного электрона, что усложняет расчеты по сравнению с вычислением сечений и скоростей возбуждения. Кроме того, при вычислении сечений как возбуждения, так и ионизации, требуется проводить интегрирование для сильно осциллирующих функций, какими являются волновые функции электронов непрерывного спектра, что представляет дополнительные вычислительные сложности и требует высокой точности расчета или использования полуаналитических методов. Что касается скоростей обратных процессов, таких как гашение и трехчастичная рекомбинация, то, зная скорости прямых процессов, их можно вычислить в соответствии с принципом детального равновесия [2].

2.2 Приближение Борна

Метод искаженных волн, рассмотренный выше, требует больших вычислительных затрат. Во многих случаях для расчета сечений возбуждения и ионизации применимо более простое борновское приближение [2, 3], точность которого зачастую не уступает точности метода искаженных волн. В приближении Борна все взаимодействия считаются малым возмущением, поэтому для применимости борновского приближения скорость налетающего электрона должна быть большой по сравнению со скоростями атомных электронов. Сечение возбуждения из состояния γ_0 в состояние γ в борновском приближении имеет вид

$$\sigma_{\gamma_0\gamma}^B = \frac{8\pi}{k^2 g_0} \int_{k-k'}^{k+k'} \left| \left\langle \gamma \left| \sum_j e^{-iqr_j} \right| \gamma_0 \right\rangle \right|^2 \frac{dq}{q^3}, \quad (20)$$

где k и k' - начальный и конечный импульсы налетающего электрона, g_0 - статистический вес состояния γ_0 .

После разложения экспоненты в ряд и представления волновой функции в одноэлектронном приближении, сечение (20) (с возбуждением электрона $n_0\ell_0 \rightarrow n\ell$) можно записать в виде [2]

$$\sigma_{\gamma_0\gamma}^B = \pi a_0^2 \frac{8}{k^2 (2\ell + 1)} \sum_{\kappa} \int_{k-k'}^{k+k'} [R_{\kappa}(q)]^2 \frac{dq}{q^3}, \quad (21)$$

где $k = (2\varepsilon)^{1/2}$ и $k' = (2\varepsilon')^{1/2}$, а $R_{\varkappa}(q)$ - радиальный интеграл:

$$R_{\varkappa}(q) = \sqrt{(2\varkappa + 1)(2\ell + 1)(2\ell' + 1)} \begin{pmatrix} \varkappa & \ell & \ell' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \int_0^{r_0} R_{n\ell}(r) R_{n'\ell'}(r) j_{\varkappa}(qr) dr. \quad (22)$$

Здесь $j_{\varkappa}(qr)$ - сферические функции Бесселя порядка \varkappa , которые можно выразить через цилиндрические функции полуцелого порядка [18]:

$$j_{\varkappa}(z) = \left(\frac{\pi}{2z} \right)^{1/2} J_{\varkappa+1/2}(z).$$

Так же, как и метод искаженных волн, приближение Борна несложно обобщить на случай процессов ионизации. Для этого нужно в интеграле (22) заменить радиальную часть волновой функции дискретного спектра $R_{n\ell}(r)$ на радиальную часть волновой функции непрерывного спектра $R_{\varepsilon^*\lambda^*}$ и использовать следующие формулы

$$d\sigma_{\gamma_0\gamma}^B = \pi a_0^2 \frac{8}{k^2(2\ell + 1)} d\varepsilon^* \sum_{\varkappa} \int_{k-k'}^{k+k'} [R_{\varkappa}(q)]^2 \frac{dq}{q^3}, \quad (23)$$

$$\sigma_{\gamma_0\gamma}^B = \sum_{\lambda^*} \int_0^{\varepsilon^{-\varepsilon^i}} \frac{d\sigma_{\gamma_0\gamma}^B}{d\varepsilon^*} d\varepsilon^*. \quad (24)$$

Скорости процессов возбуждения и ионизации по Борну можно вычислить, используя выражения (12), (19) и сечения (21), (24).

В целом приближение Борна дает, как правило, завышенные значения сечений возбуждения для атома. Особенно это завышение существенно в припороговой области, где, вообще говоря, нарушаются условия применимости борновского приближения, а также сказывается отсутствие учета обменного взаимодействия.

Для иона, наоборот, приближение Борна дает заниженные значения сечений возбуждения. Дело в том, что в этом случае большую роль играет эффект увеличения потока электронов вблизи иона вследствие кулоновского притяжения электронов к иону. Этот эффект приводит к качественному изменению хода сечения – оно оказывается конечным в пороге, в то время как в приближении Борна сечение в пороге равно нулю. В этом случае хорошие результаты дает метод искаженных волн. Это особенно важно при расчетах значений скоростей, т.к. в широком диапазоне температур скорости определяются поведением сечения вблизи порога.

3. Результаты расчетов скоростей и сечений для плазмы ксенона и олова

Использование метода искаженных волн требует вычисления огромного количества волновых функций непрерывного спектра с различными значениями энергии ϵ и момента λ свободного электрона. Объем вычислений можно значительно сократить, если в качестве волновых функций непрерывного спектра использовать квазиклассические волновые функции, которые не уступают в точности численным [7]. Для вычисления волновых функций дискретного спектра целесообразно использовать численные решения уравнения Шрёдингера, поскольку при вычислении сечений для заданного уровня требуется всего лишь одна-две волновые функции. Волновые функции электронов дискретного и непрерывного спектра вычисляются в самосогласованном потенциале квантово-статистической модели Хартри-Фока-Слэтера. Полученные волновые функции используются для расчета сил осцилляторов, сечений и скоростей возбуждения и ионизации.

3.1 Возбуждение

Как уже отмечалось во введении, плазма ксенона ($Z = 54$) и олова ($Z = 50$) представляет особый интерес в связи с созданием источника мягкого рентгеновского излучения. Основным излучающим переходом в ксеноне, используемым для рентгеновской литографии, считается переход $4d-5p$ иона Хе XI с длиной волны около 13.5 нм. Потенциал ионизации иона Хе X, из которого получается ион Хе XI, составляет 202-205 эВ [1, 14]. Таким образом, для получения десятикратного иона необходима достаточно высокая температура плазмы $T \sim 30$ эВ. Причем плазма тяжелых ионов находится, как правило, в неравновесном состоянии (вне локального термодинамического равновесия), как за счет частичного выхода излучения, так и за счет эффектов нестационарности быстропротекающих процессов в плазме невысокой плотности [12, 20-24].

Доля ионов Хе XI в такой плазме определяется соотношениями скоростей ионизации и рекомбинации. Кроме того, возбуждение нужного перехода $4d-5p$ для плазмы ксенона находится в конкуренции с переходом $4d-4f$, который расположен вне интересующего нас спектрального интервала. За счет большего статистического веса уровней $4f$ интенсивность возбуждения перехода $4d-4f$ значительно выше, чем $4d-5p$. Ввиду этих факторов, значения скоростей ионизации, возбуждения и рекомбинации в плазме ксенона определяют населенность уровня $5p$, а значит и интенсивность излучения при $\lambda \sim 13.5$ нм.

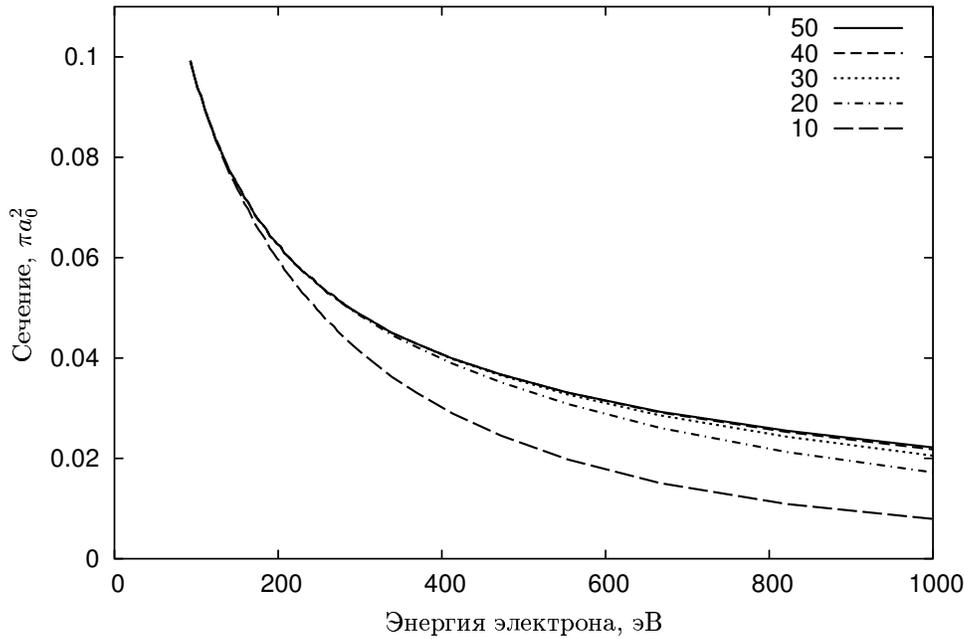


Рис. 1. Эффективное сечение возбуждения 4d-4f в ионе Хе XI, рассчитанное методом искаженных волн с различным количеством членов κ_{max} в сумме по κ ($\kappa_{max} = 10, 20, 30, 40, 50$)

На рис. 1 представлены эффективные сечения возбуждения 4d-4f в ионе Хе XI, рассчитанные методом искаженных волн для различного максимального числа членов в сумме (6). Видно, что для удовлетворительного описания сечений методом искаженных волн необходимо брать κ_{max} как минимум равным 40 (при плотности 10^{-6} г/см³). Как показали исследования, величина κ_{max} не зависит от вещества и постепенно снижается с ростом плотности (при плотности 10^{-1} г/см³ достаточно положить $\kappa_{max} = 20$).

Рассмотрим результаты расчетов эффективных сечений возбуждения различными методами для многозарядных ионов Хе XI и Sn X, которые представлены на рис. 2 и 3. Для рассматриваемых ионов метод искаженных волн должен давать хорошие результаты, поскольку здесь важен учет искажения падающей и рассеянной волн за счет сильного и дальнедействующего поля иона. Это приводит к значительному росту сечения в припороговой области, которое более чем в 3 раза отличается от сечения, полученного в приближении Борна. Широко применяемая на практике формула Ван Режемортера [2, 6] дает сечения возбуждения для перехода 4d-5p в ионе Хе XI близкие к результатам, полученным методом искаженных волн (см. рис. 2), однако для перехода 4d-4f в ионе Sn X эти сечения отличаются более чем в два раза (см. рис. 3).

Как можно видеть из результатов расчетов, приближение Борна дает заниженные значения сечений, особенно при малых энергиях, так как при малых скоростях налетающего электрона происходит существенное искажение плоской волны притягивающим полем иона.

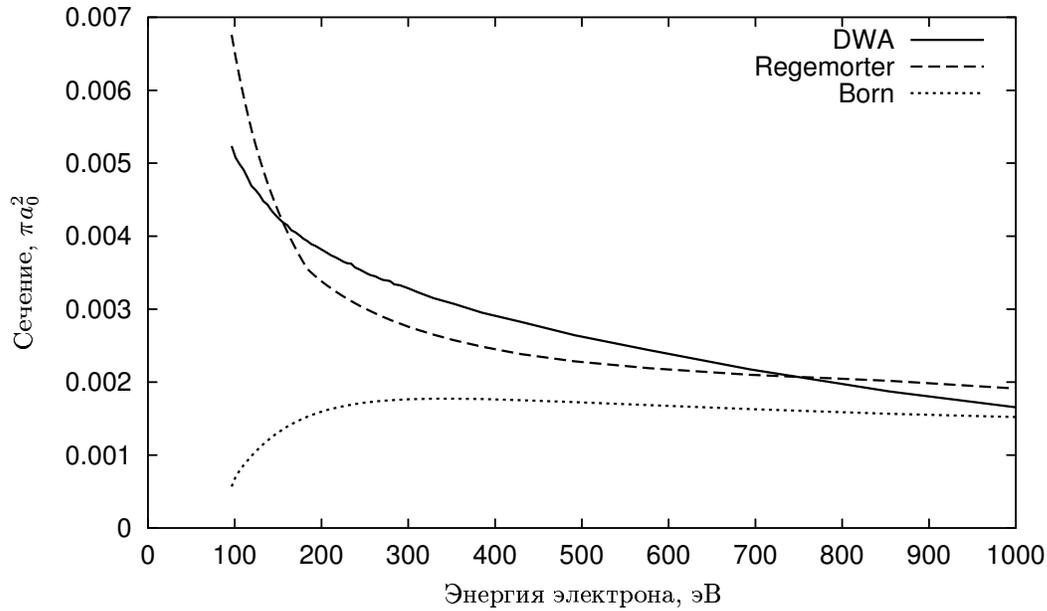


Рис. 2. Эффективное сечение возбуждения 4d-5p в ионе Хе XI, рассчитанное методом искаженных волн (DWA), в приближении Борна (Born) и по формуле Ван Режемортера (Regemorter)

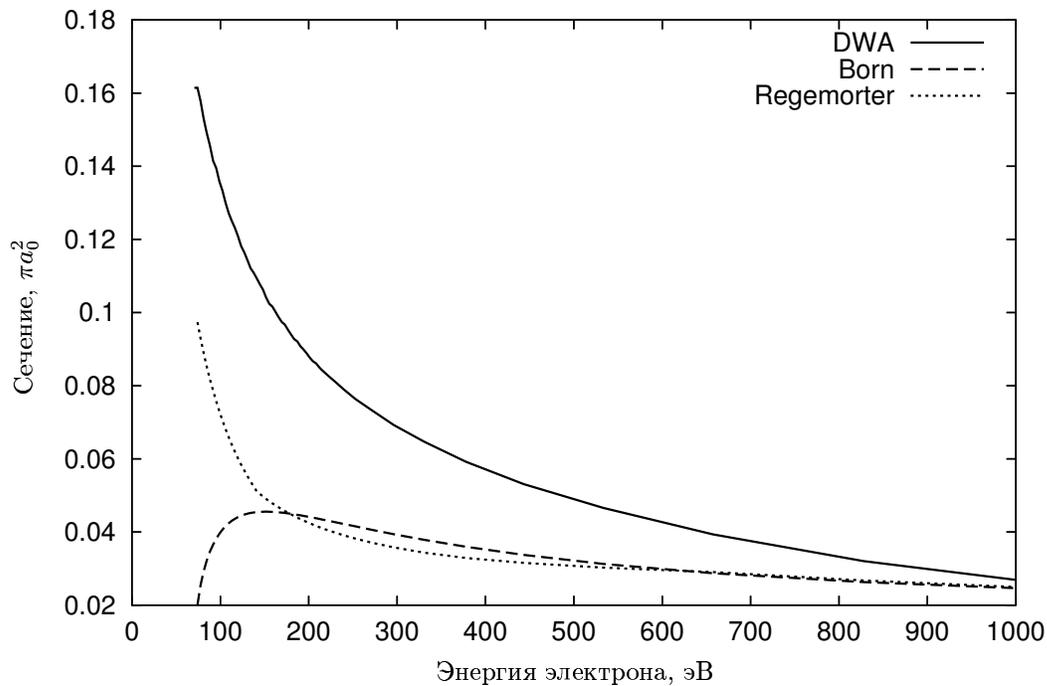


Рис. 3. Эффективное сечение возбуждения 4d-4f в ионе Sn X, рассчитанное методом искаженных волн (DWA), в приближении Борна (Born) и по формуле Ван Режемортера (Regemorter)

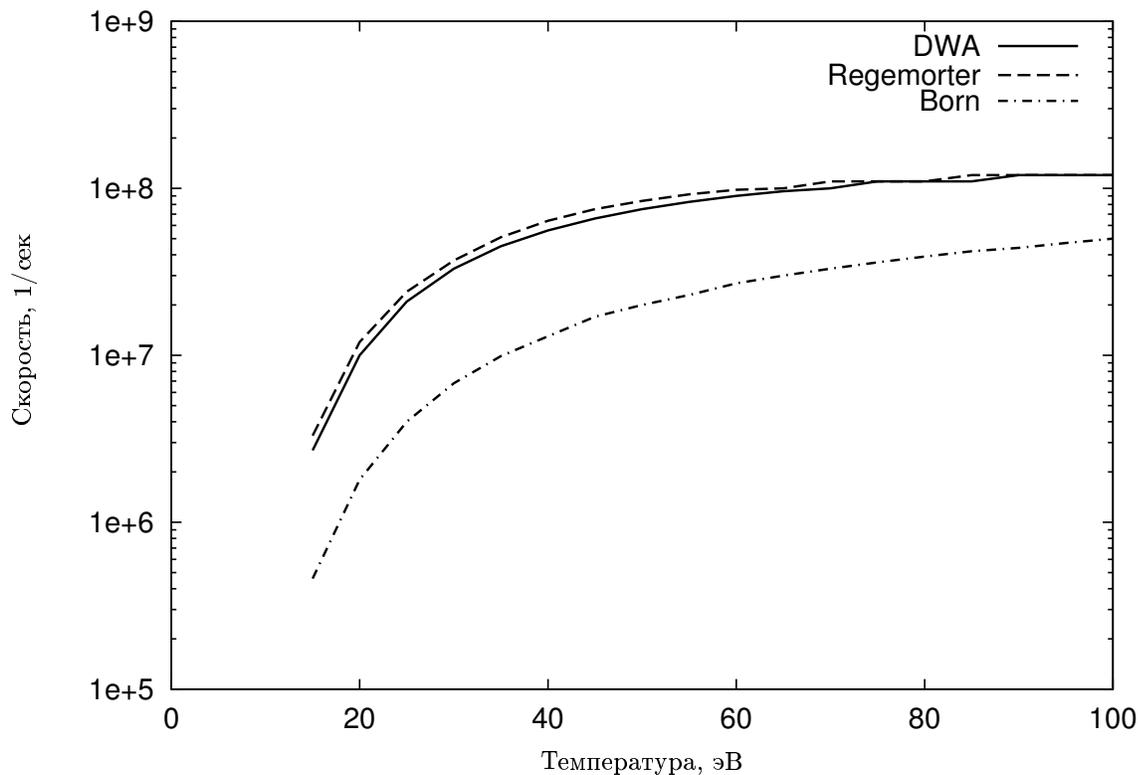


Рис. 4. Скорость процесса возбуждения 4d-5p в ионе Xe XI при плотности $\rho = 10^{-5}$ г/см³, рассчитанная методом искаженных волн (DWA), по формуле Ван Режемортера (Regemorter) и в приближении Борна (Born)

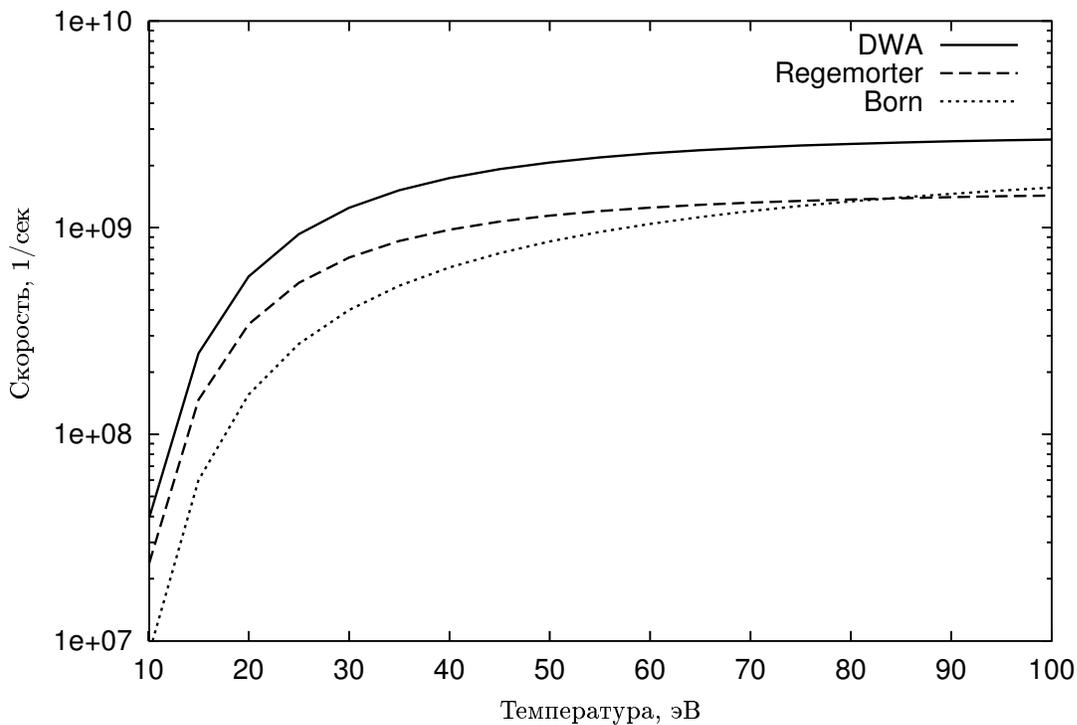


Рис. 5. Скорость процесса возбуждения 4d-4f в ионе Sn X при плотности $\rho = 10^{-5}$ г/см³, рассчитанная методом искаженных волн (DWA), по формуле Ван Режемортера (Regemorter) и в приближении Борна (Born)

По полученным сечениям проводились расчеты скоростей возбуждения (см. рис. 4 и 5). Как и в случае сечений, величины скоростей, полученные при использовании метода искаженных волн и формулы Ван Режемортера, близки для перехода 4d-5p в ионе Хе XI (см. рис. 4) и отличаются в 2 раза для перехода 4d-4f в ионе Sn X (см. рис. 5). Приближение Борна дает значения скоростей, заниженные в 2-3 раза по сравнению с методом искаженных волн.

Как показывает практика, для расчета скоростей важное значение имеет точность сечений при малых энергиях электронов, где имеются значительные расхождения в поведении сечений для различных приближений. Как следует из приведенных результатов расчетов метод искаженных волн является наиболее предпочтительным из всех рассмотренных. Однако в силу его трудоемкости, этот метод целесообразно использовать для получения параметров в простых аппроксимационных выражениях для сечений и скоростей.

3.2 Ионизация

Расчеты сечений и скоростей ионизации были проведены для ряда ионов Хе и Sn. Для верхнего заполненного уровня иона Sn X результаты, полученные при использовании метода искаженных волн и приближения Борна существенно различны (см. рис. 6), что, как и в случае расчета процессов возбуждения, можно объяснить отсутствием учета искажения падающей и отраженной волн, приводящим к занижению величины сечения.

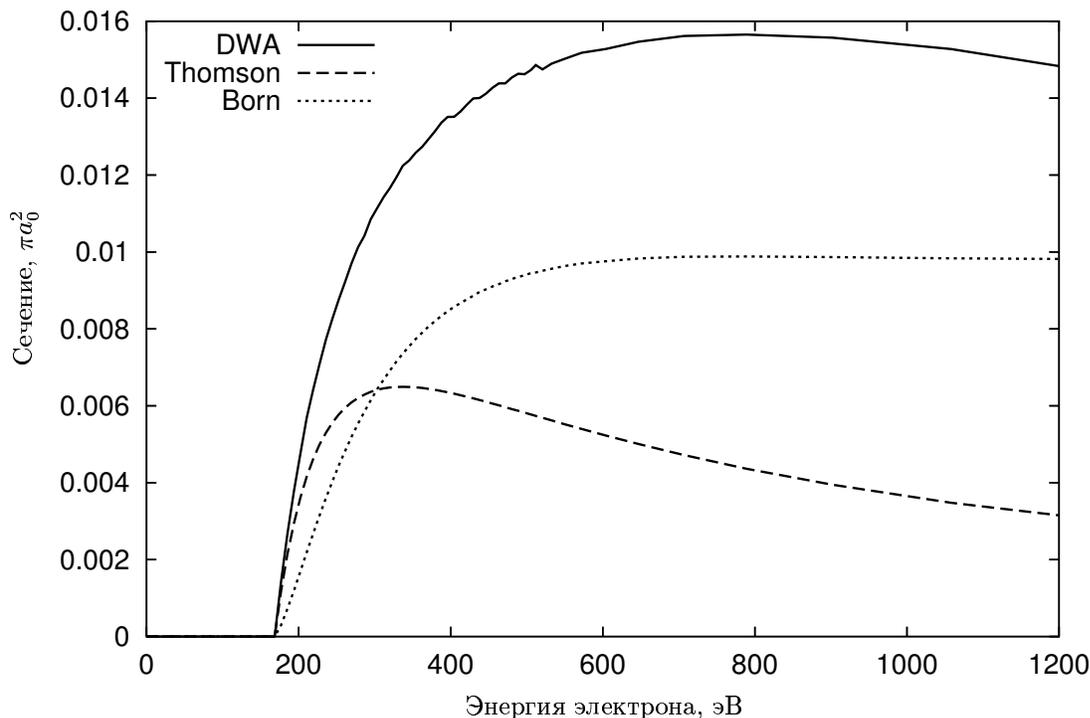


Рис. 6. Сечение ионизации уровня 4d иона Sn X, рассчитанное методом искаженных волн (DWA), в приближении Борна (Born) и по формуле Томсона (Thomson)

Эмпирическая формула Томсона [2] также занижает сечение ионизации более чем в 2 раза по сравнению с методом искаженных волн.

Результаты расчетов скоростей ионизации ионов Xe X и Sn X представлены на рис. 7 и 8. Расчеты проводились методом искаженных волн, с использованием приближения Борна, а также по формулам Томсона и Лотца [2]. Как и ожидалось, приближение Борна дает заниженные значения, которые близки к результатам, полученным с использованием формул Томсона и Лотца.

При сравнении результатов расчетов сечений ионизации с экспериментальными данными (см. рис. 9), значения, вычисленные методом искаженных волн, хорошо соответствуют эксперименту. Заметим, что проведение сравнения сечений ионизации с экспериментальными данными требует тщательного анализа, поскольку существенный вклад в сечения могут вносить дополнительные эффекты, такие как возбуждение внутренних оболочек и последующая автоионизация (т.н. непрямая ионизация, см. далее п. 4).

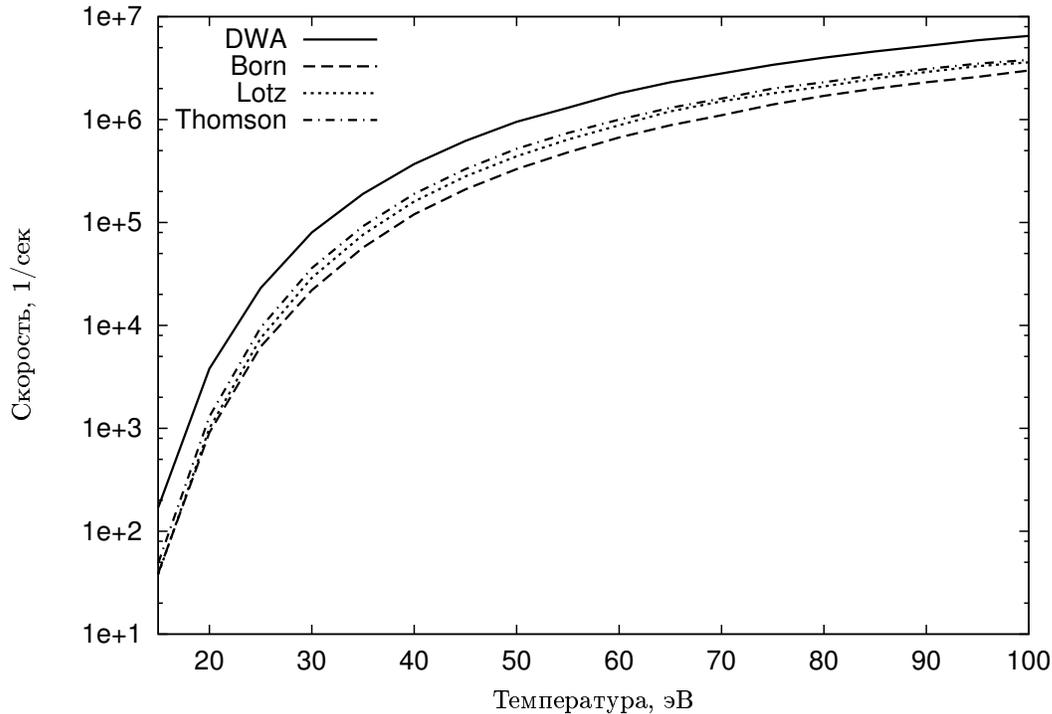


Рис. 7. Скорость процесса ионизации уровня 4d в ионе Xe X при плотности 10^{-6} г/см³, рассчитанная методом искаженных волн (DWA), в приближении Борна (Born), по формуле Лотца (Lotz) и формуле Томсона (Thomson)

На основании представленных выше результатов можно утверждать, что метод искаженных волн дает наиболее надежные результаты для скоростей процессов возбуждения и ионизации среди методов первого порядка теории возмущений и при этом является наиболее общим и универсальным методом, позволяющим расширить область его применения на процессы диэлектронной рекомбинации и автоионизации.

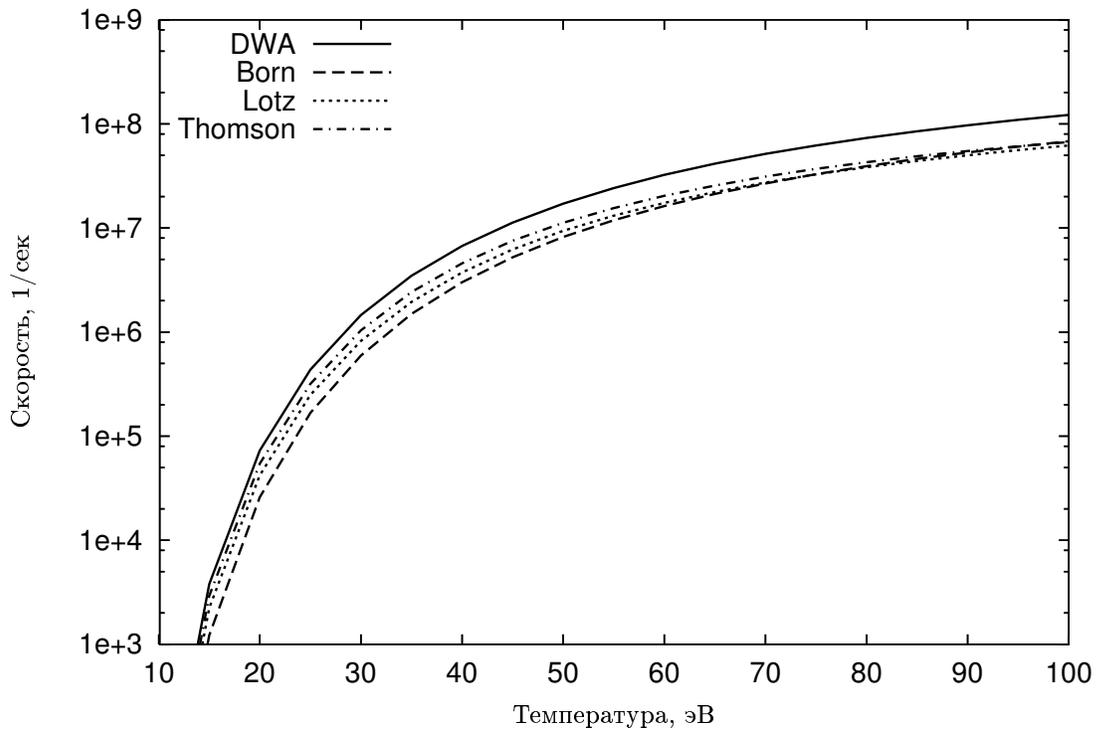


Рис. 8. Скорость процесса ионизации уровня 4d в ионе Sn X при плотности 10^{-5} г/см³, рассчитанная методом искаженных волн (DWA), в приближении Борна (Born), по формуле Лотца (Lotz) и формуле Томсона (Thomson)

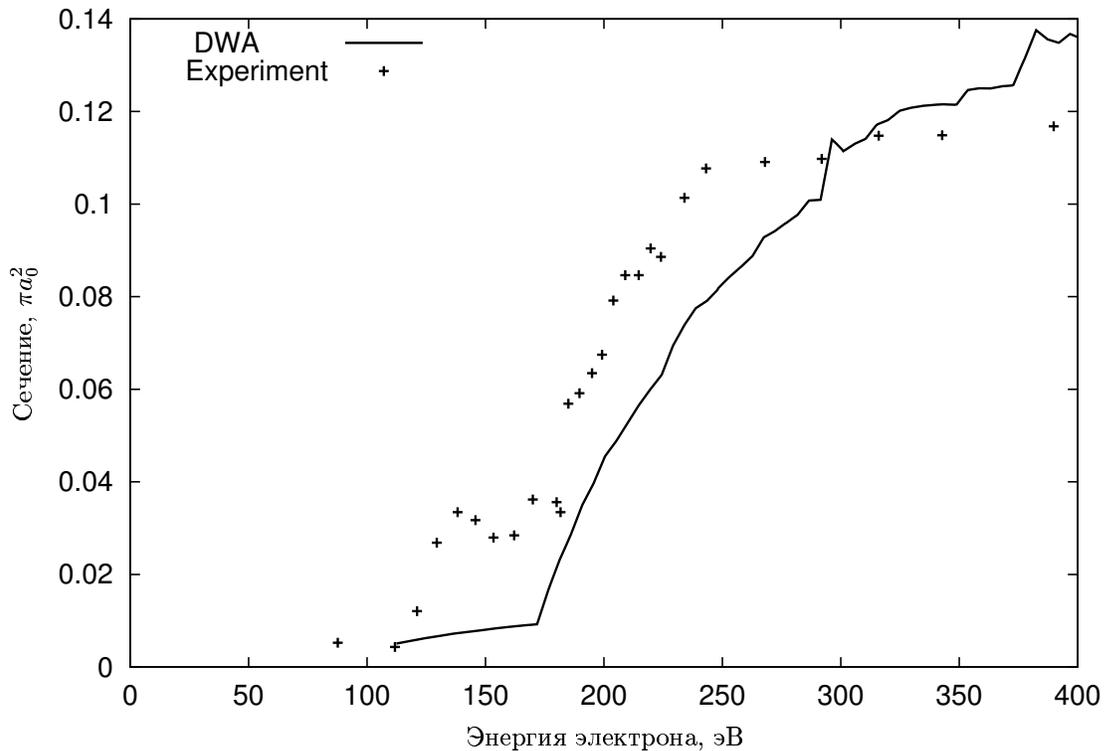


Рис. 9. Сечение ионизации иона Xe IX, полученное методом искаженных волн (DWA), в сравнении с экспериментальными данными [25]

Более точные методы второго и третьего порядка теории возмущений уже не являются универсальными, а их применение возможно лишь для конкретных элементов с определенными в каждом частном случае всеми возможными переходами, что для многоэлектронных элементов являются трудноразрешимой задачей.

Являясь наиболее простым из прямых методов расчета, метод искаженных волн, тем не менее, требует больших вычислительных затрат. Поэтому построение эффективных численных методик является необходимым условием при проведении многочисленных расчетов. В частности, при проведении расчетов по модели Хартри-Фока-Слэтера используется квазиклассическое приближение для волновых функций непрерывного спектра, построены специальные квадратурные и аппроксимационные формулы для вычисления интегралов Слэтера и сумм по орбитальным моментам свободного электрона. Кроме того, необходимо использовать адаптированные к поведению волновых функций сетки с переменным шагом для вычисления многократных интегралов вида (11).

3.3 Аппроксимационные выражения

Непосредственное использование метода искаженных волн для расчета скоростей процессов в уравнениях поуровневой кинетики неприемлемо из-за громоздкости и сложности вычислений. Поэтому для вычисления величин скоростей, необходимых в кинетике, удобнее использовать эмпирические выражения с подгоночными коэффициентами, полученными в результате аппроксимации данных, рассчитанных методом искаженных волн. Эти выражения должны учитывать асимптотическую зависимость и находиться в хорошем соответствии с численными данными.

В результате исследования различных аппроксимационных формул для расчета скоростей столкновительной ионизации и возбуждения электронов в ионах можно выделить следующие простые аналитические аппроксимационные выражения с использованием двух подгоночных параметров [2].

Для скорости ионизации

$$\alpha^i = N_e \frac{C}{2\ell_0 + 1} \left(\frac{1}{\varepsilon_i} \right)^{3/2} e^{-\varepsilon_i/\theta} \frac{\varepsilon_i \theta}{\varepsilon_i + \chi \theta},$$

которую можно переписать в следующем виде

$$\alpha^i = 10^{-9} N_e a_1 e^{-\varepsilon_i/\theta} \frac{\theta^{1/2}}{a_2 + \theta}, \quad (25)$$

где вместо коэффициентов C и χ используются подгоночные параметры a_1 и a_2 , подбираемые методом наименьших квадратов по результатам численного

расчета; ε_i - энергия ионизации уровня, θ - температура (обе величины в ат. ед.), N_e - плотность электронов:

$$N_e = \frac{Z_0 \rho}{A} N_A;$$

Z_0 - средний заряд иона, ρ - плотность вещества в г/см³, A - атомный вес, N_A - постоянная Авогадро. Результаты использования (25) с коэффициентами a_1 , a_2 , приведенными в таблице 1, представлены на рис. 10 и 11.

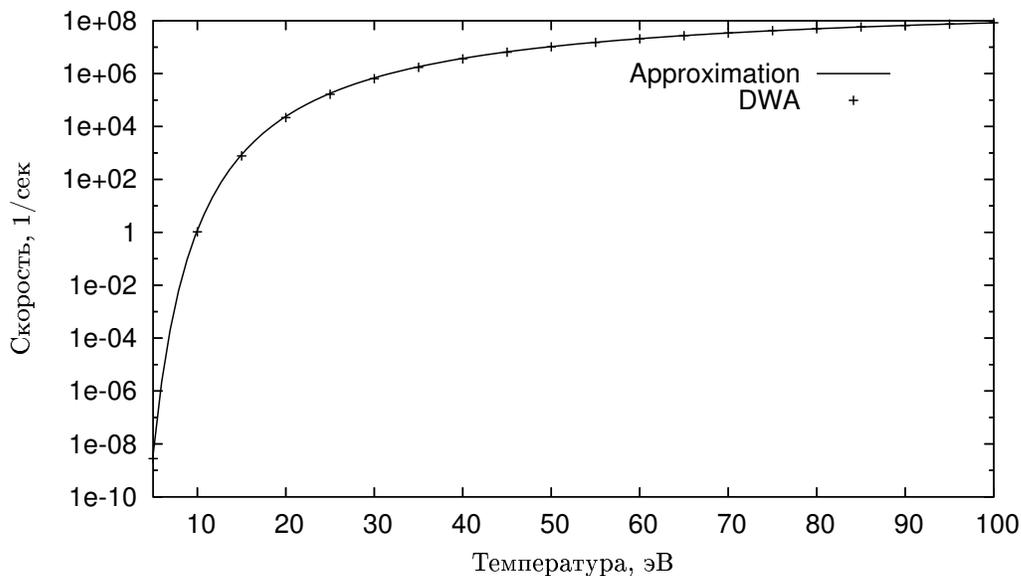


Рис. 10. Скорость ионизации для иона Sn XI с уровня 4d при плотности $\rho = 10^{-5}$ г/см³. Метод искаженных волн (DWA) и его аппроксимация (25) - (Approximation)

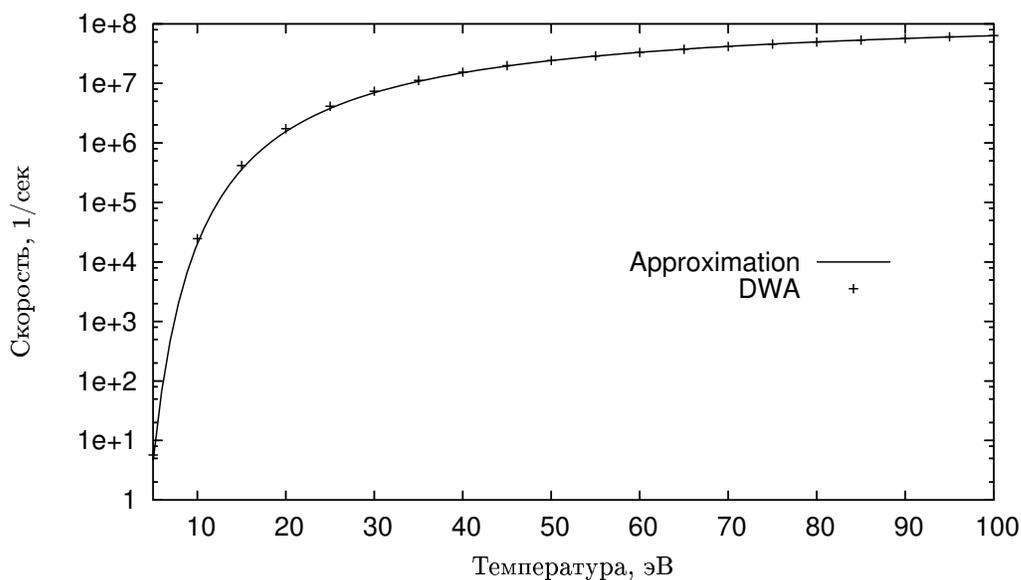


Рис. 11. Скорость ионизации для иона Хе VII с уровня 5s при плотности $\rho = 10^{-6}$ г/см³. Метод искаженных волн (DWA) и его аппроксимация (25) - (Approximation)

Для скоростей возбуждения, по аналогии с ионизацией, правильную асимптотику обеспечивает формула [2]:

$$\alpha^{ex} = N_e \frac{C}{2\ell_0 + 1} \left(\frac{1}{\Delta\varepsilon} \frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_0} \right)^{3/2} e^{-\Delta\varepsilon/\theta} \frac{\left(\frac{\Delta\varepsilon}{\theta} \right)^{1/2} \left(\frac{\Delta\varepsilon}{\theta} + 1 \right)}{\frac{\Delta\varepsilon}{\theta} + \chi}, \quad (26)$$

где $\Delta\varepsilon$ - энергия перехода, а ε_0 и ε_1 - уровни энергий электрона до и после взаимодействия. Формулу (26) можно переписать следующим образом

$$\alpha^{ex} = 10^{-9} N_e c_1 e^{-\Delta\varepsilon/\theta} \frac{\left(\frac{\Delta\varepsilon}{\theta} + 1 \right) \sqrt{\theta}}{\theta + c_2}, \quad (27)$$

где c_1 и c_2 - подгоночные параметры.

В некоторых случаях для лучшего соответствия численным расчетам необходимо ввести в формулу (26) дополнительный третий параметр:

$$\alpha^{ex} = 10^{-9} N_e d_1 e^{-d_2/\theta} \frac{\theta^{1/2}}{d_3 + \theta}, \quad (28)$$

где d_1, d_2, d_3 - подгоночные коэффициенты.

Таблица 1. Значения аппроксимационных параметров для расчета скоростей.

Ион (ρ , г/см ³)	Столкновительная ионизация			Столкновительное возбуждение		
	Уровень	a_1	a_2	Переход	c_1	c_2
Sn X (10^{-3})	4d	5.7486	5.139	4d-4f	15.9164	1.0081
Sn X (10^{-4})	4d	5.6500	5.030	4d-4f	16.2370	0.9999
Sn X (10^{-5})	4d	5.6851	5.047	4d-4f	16.4573	0.7515
Sn X (10^{-6})	4d	5.7595	5.013	4d-4f	16.6304	0.9837
Sn X (10^{-5})				4d-5f	0.3894	0.5762
				4d-5p	1.3256	1.3968
Sn XI (10^{-5})	4d	6.0587	6.712	4d-4f	16.1656	0.8951
Sn XI (10^{-5})				4d-5p	1.1075	1.3907
Xe VII (10^{-6})	4d	40.5180	49.75			
	5s	28.4280	6.858			
Xe IX (10^{-6})	4d	8.0400	11.41			
	4p	1.6614	4.508			
Xe XI (10^{-5})				4d-4f	11.6985	0.9894
				4d-5p	0.7512	1.4001

Как видно из рис. 12 и 13 в диапазоне температур от 5 до 100 эВ выражение (28) приводит к лучшему соответствию численным расчетам, однако в большинстве случаев такие незначительные различия не играют существенной роли. Если предполагается использование полученных выражений для температур, превышающих 5-10 эВ, то приемлемую точность обеспечивает формула (27) с двумя подгоночными параметрами. Некоторые значения параметров для ряда ионов Xe и Sn приведены в таблице 1.

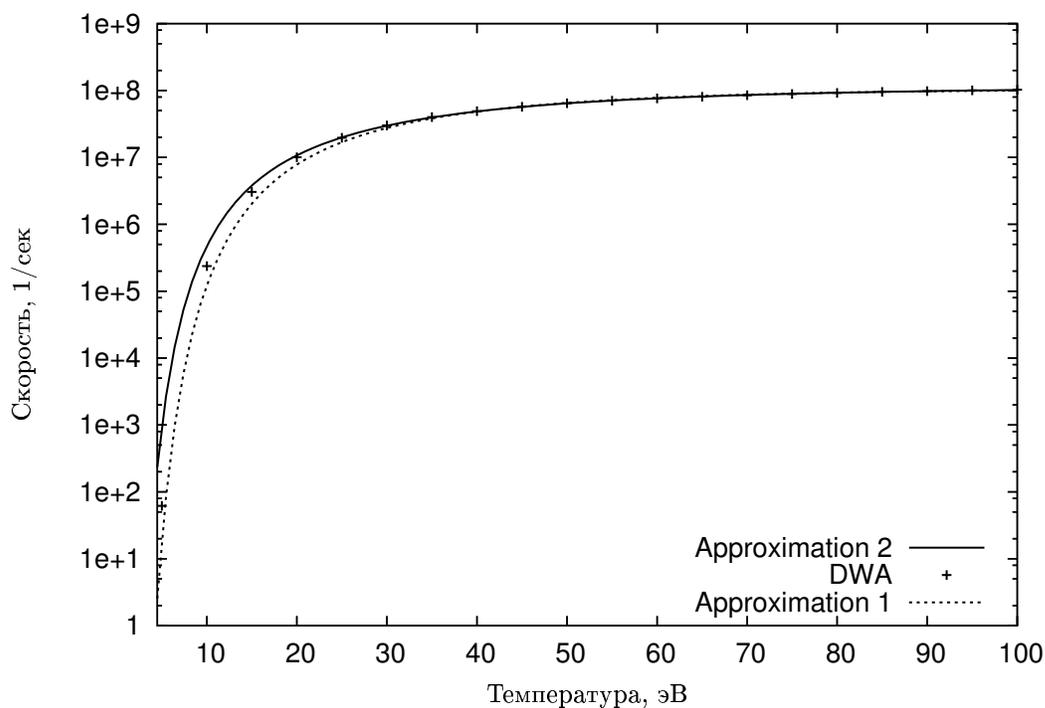


Рис. 12. Скорость возбуждения для иона Xe XI для перехода 4d-5p при плотности $\rho = 10^{-5}$ г/см³. Метод искаженных волн (DWA) и его аппроксимации: (27) - (Approximation 1) и (28) - (Approximation 2)

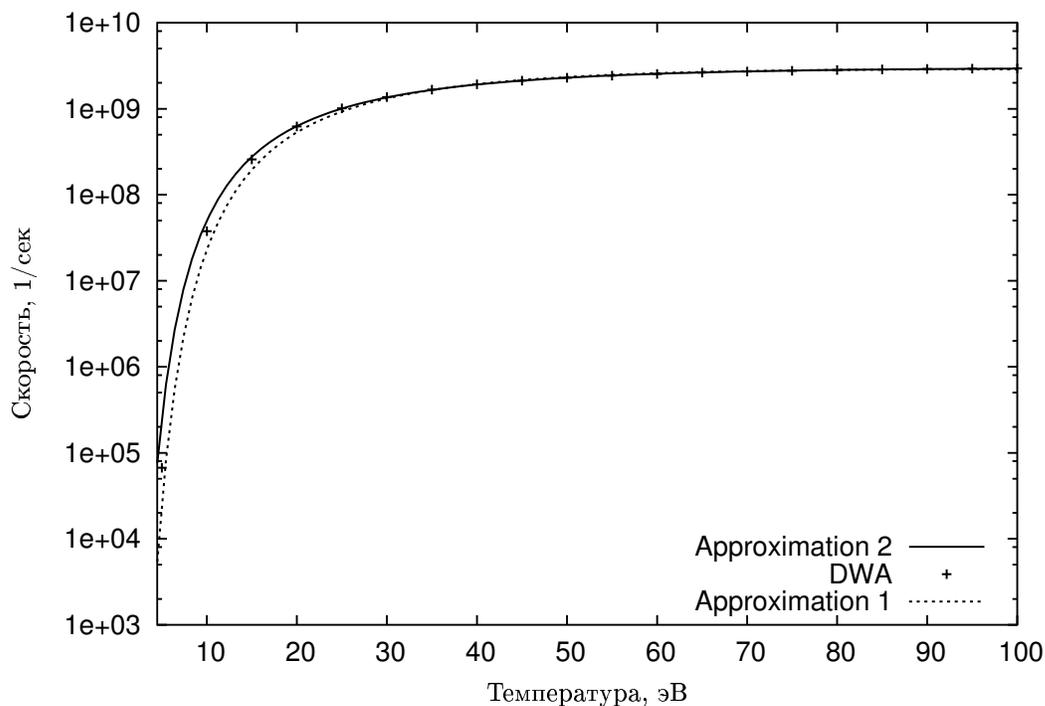


Рис. 13. Скорость возбуждения для иона Sn XI для перехода 4d-4f при плотности $\rho = 10^{-5}$ г/см³. Метод искаженных волн (DWA) и его аппроксимации: (27) - (Approximation 1) и (28) - (Approximation 2)

3.4 Влияние плотностных эффектов на величину сечений

При расчете сечений возбуждения и ионизации методом искаженных волн используются одноэлектронные волновые функции дискретного и непрерывного спектра, рассчитанные в самосогласованном потенциале Хартри-Фока-Слэтера для атомной ячейки. Полученная при этом электронная плотность, а значит и потенциал, зависят от плотности вещества, в т.ч. из-за изменения радиуса атомной ячейки. Все это приводит к смещению уровней энергии, изменению волновых функций и т.п. Таким образом, сечение столкновительных процессов в модели среднего атома зависит от плотности вещества.

На рис. 14 и 15 приведены примеры влияния плотности на волновые функции электронов дискретного и непрерывного спектров.

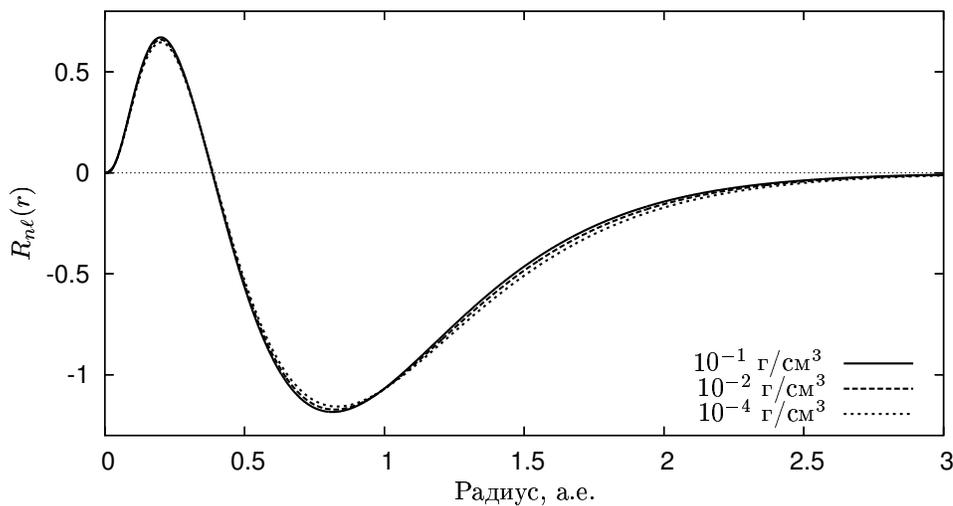


Рис. 14. Радиальные части численных волновых функций дискретного спектра $R_{nl}(r)$ для уровня 4d иона Sn X при различной плотности

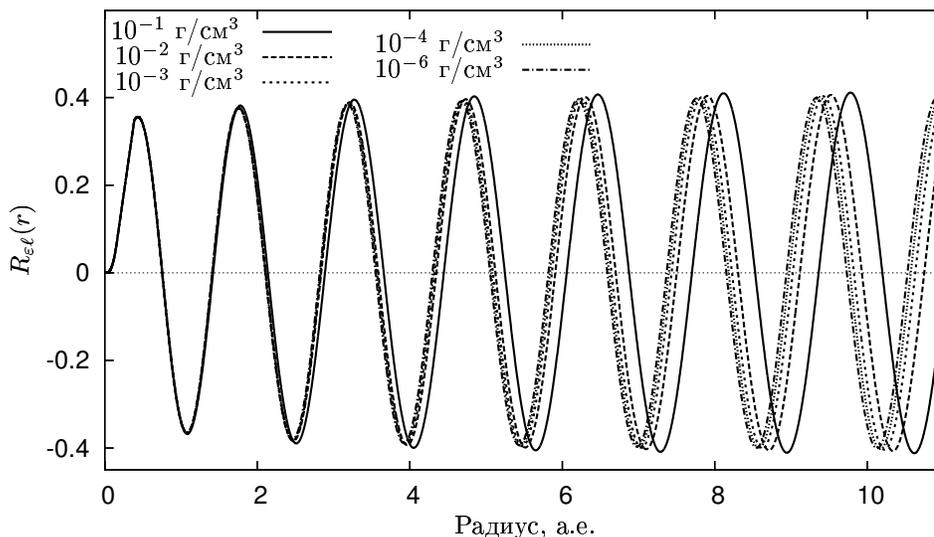


Рис. 15. Радиальные части численных волновых функций непрерывного спектра $R_{εℓ}(r)$ для иона Sn X ($ε = 7$ а.е., $ℓ = 3$) при различной плотности

Как можно видеть на рис. 14, увеличение плотности приводит к незначительному увеличению величины амплитуды волновых функций дискретного спектра. В случае волновых функций непрерывного спектра имеет место заметный сдвиг фазы при удалении от центра ячейки (см. рис. 15).

Влияние плотностных эффектов на сечения ионизации и возбуждения проиллюстрировано на рис. 16-18. Как видно из рисунков, при плотности $\rho < 10^{-2}$ г/см³ сечения для иона Sn X изменяются в пределах нескольких процентов. При увеличении плотности до 10^{-1} г/см³, такое изменение для сечения ионизации достигает 40% (см. рис. 18). Также необходимо обратить внимание на почти двухкратное изменение сечения возбуждения 4d-5p для иона Xe X при росте плотности с 10^{-6} г/см³ до 10^{-1} г/см³ (см. рис. 17).

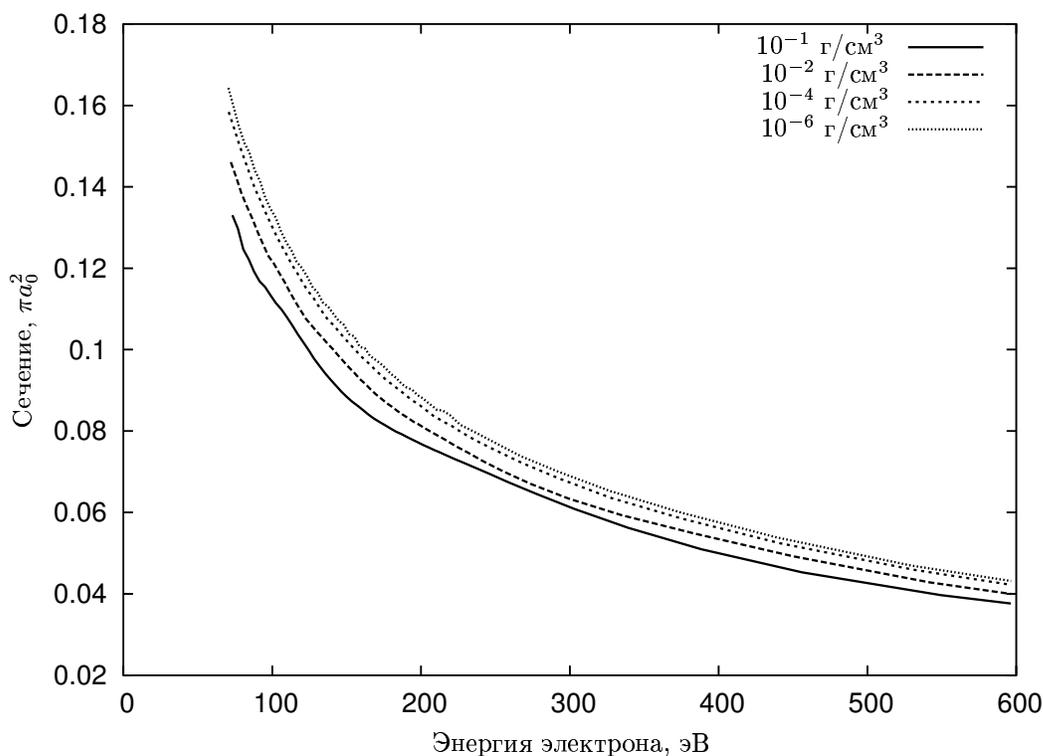


Рис. 16. Эффективное сечение возбуждения 4d-4f в ионе Sn X при различной плотности плазмы

Таким образом, в некоторых случаях плотностные эффекты могут оказывать значительное влияние на величину сечений. Это, наряду со смещением уровней энергий, способно существенно изменить скорости соответствующих процессов.

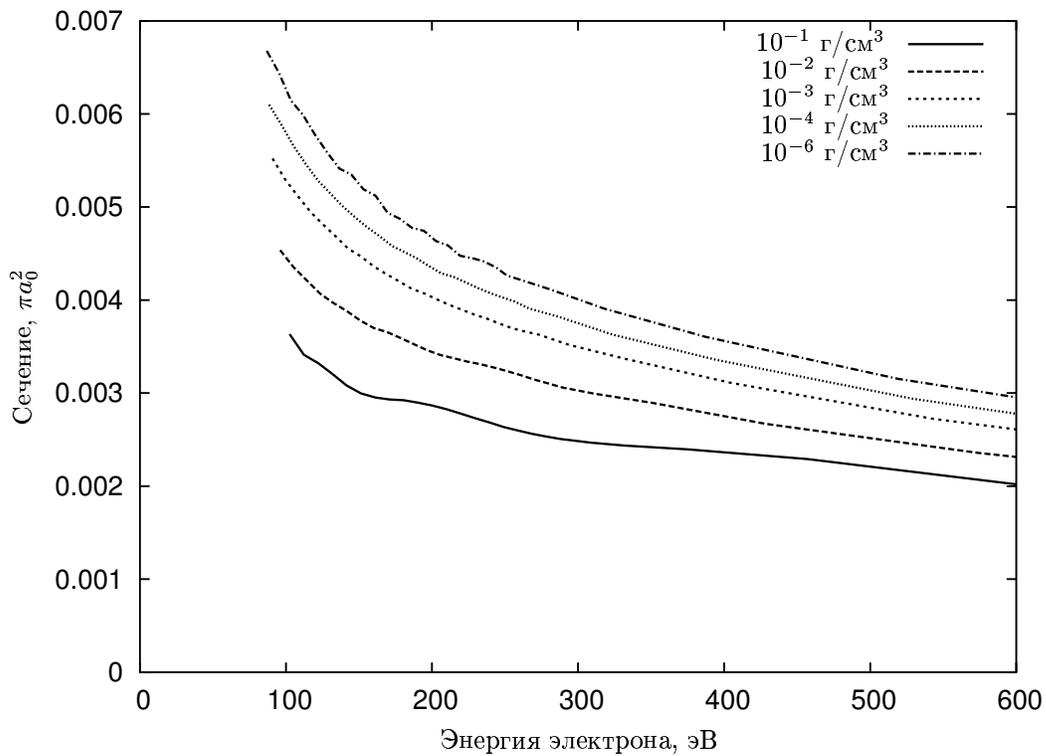


Рис. 17. Эффективное сечение возбуждения 4d-5p в ионе Xe X при различной плотности плазмы

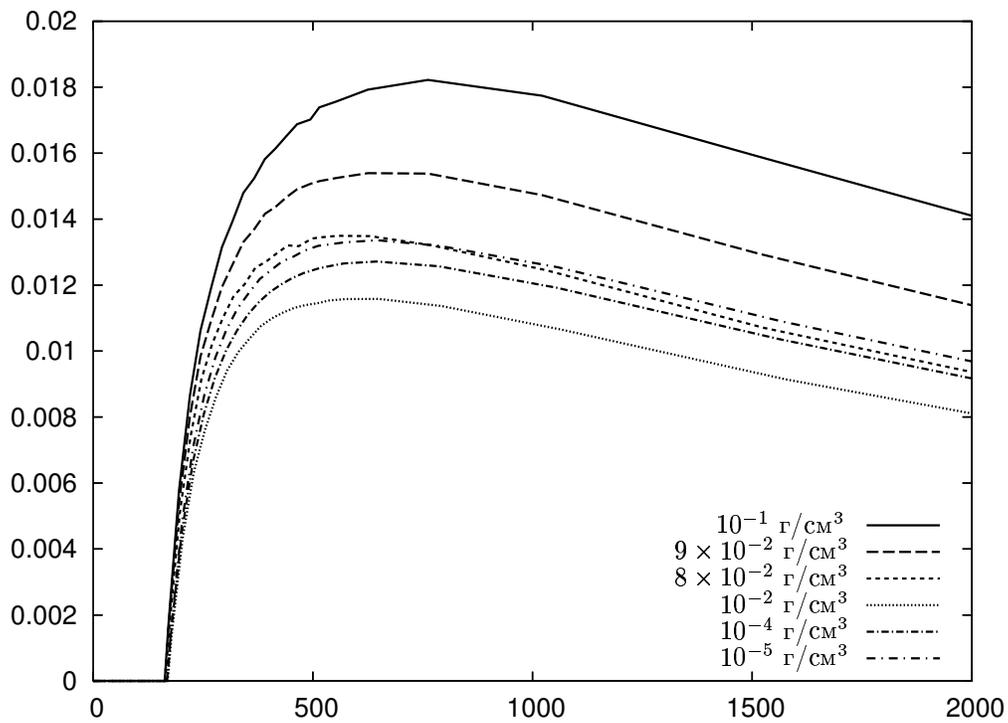


Рис. 18. Эффективное сечение ионизации уровня 4d в ионе Sn X при различной плотности плазмы

4. Анализ вклада непрямых процессов в сечения ионизации

Расчет сечения столкновительной ионизации методом искаженных волн для иона Xe VI дает значительно меньшие значения по сравнению с экспериментальными данными [25]. Причиной таких несоответствий является значительный вклад непрямых процессов ионизации, таких как столкновительное возбуждение иона до автоионизационного состояния и последующая автоионизация. В случаях, когда возбуждение иона до автоионизационного состояния маловероятно, т.е. сечение такого процесса мало, полное сечение ионизации целиком определяется процессом прямой ионизации. Это имеет место для иона Xe IX (см. рис. 9), поскольку в основном состоянии иона Xe IX верхняя населенная оболочка $4d$ полностью заполнена (порог ионизации соответствует ~ 170 эВ). Возбуждения в автоионизационные состояния в данном случае невозможны. Однако, когда населенность оболочек $5s$, $5p$ отлична от нуля, как, например, для иона Xe VI - Xe VII , процессы возбуждения с последующей автоионизацией могут существенно изменить величину сечения ионизации (см. рис. 19-21).

Как можно видеть на примере ионов Xe VI и Xe VII , вклад, значительно превосходящий остальные, вносит переход $4d-4f$ с пороговой энергией около 80-100 эВ. Также существенны возбуждения с уровня $4d$ на автоионизационные уровни $5d$ и $5f$, а также на уровень $5p$ для иона Xe VI .

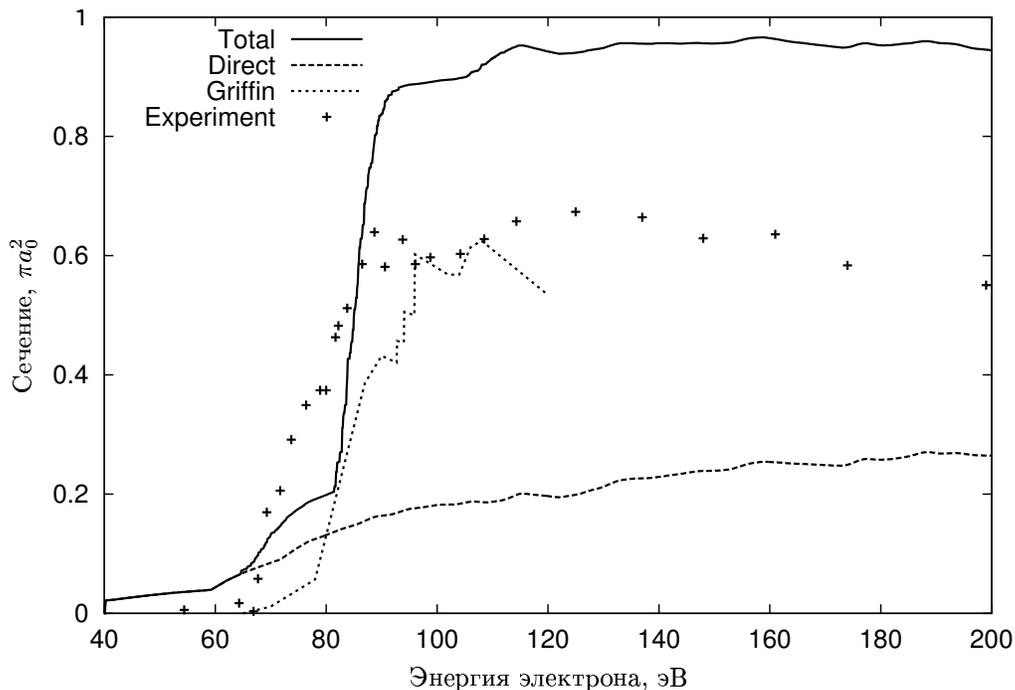


Рис. 19. Сечения ионизации иона Xe VI , полученные методом искаженных волн, для прямой ионизации (Direct) и с учетом процессов возбуждения-автоионизации (Total) в сравнении с результатами [26] - (Griffin) и экспериментальными данными [27]

Для расчета сечений в настоящей работе используется приближение среднего иона, в котором все уровни $4f$ являются автоионизационными, а возбуждение $4d-4f$ имеет усредненную энергию перехода ~ 80 эВ. На рис. 19 показаны результаты расчетов для иона Xe VI . Видно, что величина сечения ионизации превосходит экспериментальные данные на 30-40%, что может быть связано с особенностями отбора автоионизационных состояний. Действительно, как показано в [26, 27], при рассмотрении взаимодействия конфигураций с использованием более точных приближений далеко не всегда все состояния с электроном на уровне $4f$ являются автоионизационными и, судя по приведенным в работе результатам, доля неавтоионизационных состояний может составлять 40%. При этом энергии различных термов могут отличаться на 15-25 эВ. Также существенно отличаются эффективные потенциалы и волновые функции электронов для различных конфигураций ионов, что может приводить к существенному изменению величины матричных элементов. В результате вклад сечения возбуждения переходов $4d-4f$ для иона Xe VI может оказываться меньше примерно в 1,5 раза (см. [26]).

На рис. 20 и 21 представлены результаты расчетов для иона Xe VII в сравнении с различными экспериментальными данными. Как можно видеть в этом случае, основной вклад в сечение вносит переход $4d-4f$ с энергией ~ 108 эВ.

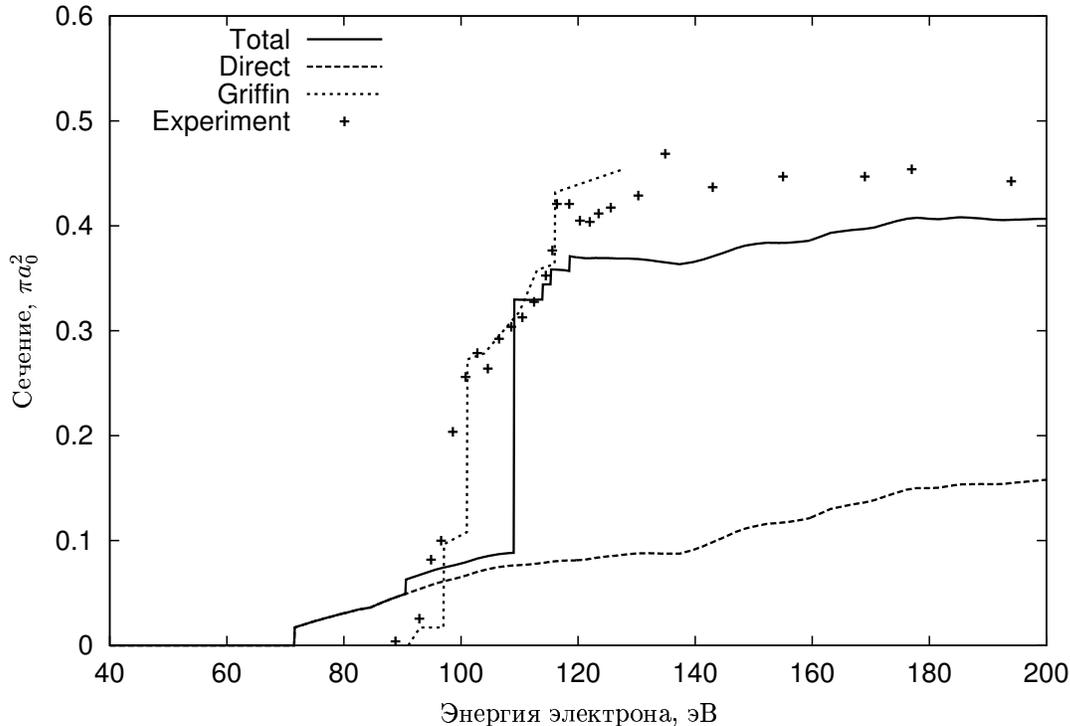


Рис. 20. Сечения ионизации иона Xe VII , полученные методом искаженных волн для прямой ионизации (Direct) и с учетом процессов возбуждения-автоионизации (Total) в сравнении с результатами [26] - (Griffin) и экспериментальными данными [27]

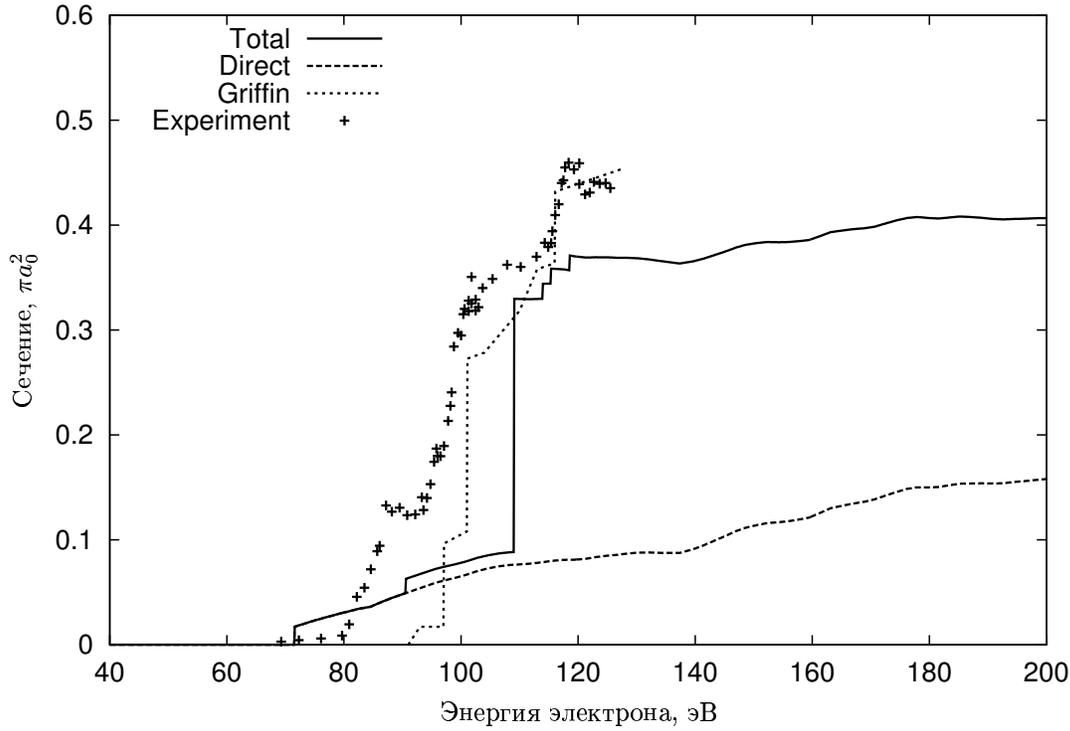


Рис. 21. Сечения ионизации иона Xe VII, полученные методом искаженных волн для прямой ионизации (Direct) и с учетом процессов возбуждения-автоионизации (Total) в сравнении с результатами [26] - (Griffin) и экспериментальными данными [27]

Для оценки вклада непрямых процессов σ^{ai} в сечение ионизации σ^i за счет возбуждения иона и перехода электрона с уровня α на автоионизационный уровень β' из всего набора уровней β , на которые разрешен переход, были использованы следующие приближенные выражения:

$$\sigma^{ai} = \sigma^{ex} \sum_{\alpha, \beta'} W_{\alpha} W_{\beta'}, \quad (29)$$

где σ^{ex} - одноэлектронное сечение возбуждения, усредненное по конфигурации; W_{α} и W_{β} - соответствующие вероятности, которые вычисляются следующим образом (используется распределение Больцмана для состояний α ($\Delta E_{\alpha} < \theta$) и дипольное приближение для вероятности возбуждения $\alpha \rightarrow \beta$ [28]):

$$W_{\alpha} = \frac{P_{\alpha}}{\sum_{\alpha} P_{\alpha}}, \quad W_{\beta} = \frac{P_{\beta}}{\sum_{\beta} P_{\beta}},$$

$$P_{\alpha} = g_{\alpha} \exp\left(-\frac{\Delta E_{\alpha}}{\theta}\right),$$

$$P_{\beta} = \frac{f_{\alpha\beta} \exp(-\Delta \varepsilon_{\alpha\beta}/\theta)}{\Delta \varepsilon_{\alpha\beta}^2}.$$

Здесь g_α - статистический вес α , ΔE_α - разность энергий текущей и минимальной энергий по конфигурации, θ - температура в ат. ед., $f_{\alpha\beta}$ - сила осциллятора перехода между уровнями α и β , $\varepsilon_{\alpha\beta}$ - энергия перехода между уровнями α и β .

Следует еще раз отметить, что не все получаемые в результате возбуждения состояния являются автоионизационными, поэтому в (29) суммирование проводится только по автоионизационным уровням β' , однако приведенные величины необходимо вычислять для всех возможных уровней α и β .

Поскольку в ионе в случае возбуждения электрон может перейти на любой из автоионизационных уровней, то для вычисления полного вклада не прямых процессов необходимо рассмотреть все переходы с учетом детальной структуры энергетического спектра, в результате которых возможно образование автоионизационных состояний. Детальная структура термов для ионов Xe и Sn вычислялась по программе TERM [29].

Список литературы

- [1] I. Fomenkov, R. Oliver, S. Melnychuk et al. Characterization of a Dense Plasma Focus Device as a Light Source for EUV Lithography // 1st International EUV Lithography Symposium, Dallas, 2002.
- [2] В.А. Вайнштейн, И.И. Собельман, Е.А. Юков. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. -М.: Наука, 1979.
- [3] Г.Ф. Друкарев. Столкновения электронов с атомами и молекулами. -М.: Наука, 1978.
- [4] В.И. Очкур. О методе Борна-Оппенгеймера в теории атомных столкновений // ЖЭТФ. - 1963. - Т. 45 - С. 735.
- [5] W. Lotz. Electron-impact ionization cross-sections for atoms up to $Z = 108$ // Ztschr. Phys. - 1970. - V. 232 - P. 101.
- [6] H. Van Regemorter. Rate of collisional excitation in stellar atmospheres // Astrophysical Journal. - 1962. - V. 132. - P. 906.
- [7] А.Ф. Никифоров, В.Г. Новиков, В.Б. Уваров. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчета росселандовых пробегов и уравнений состояния. -М.: Физматлит, 2000.
- [8] B.F. Rozsnyai. Relativistic Hartree-Fock-Slater calculations for arbitrary temperature and matter density // Physical Review A. - 1972. - V. 5, N. 3. - P. 1137.
- [9] M. Egan, S. Ellwi, A. Comley et al. Intense In-band Source Based on High Power Laser Produced Plasma // 1st International EUV Lithography Symposium, Dallas, 2002.
- [10] S.V. Zakharov, P. Choi, V.G. Novikov, A.D. Solomyannaya, A.Yu. Kroukovski, V.S. Zakharov. EUV Emission from Xe and Sn Laser Plasmas // XI Conf. on Laser Optics (LO'2003), St.Petersburg, 2003.
- [11] D.E. Post, R.V. Jensen, C.B. Tarter et al. Steady state radiative cooling rates for low density high temperature plasmas // Atomic Data Nucl. Data Tables. - 1977. - V. 20. - P. 397.
- [12] V.G. Novikov, S.V. Zakharov. Modeling of non-equilibrium radiating tungsten liners // Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer. - 2003. - V. 81. - P. 339.
- [13] D. Mihalas. Stellar atmospheres. 2nd ed. San Francisco: W.H. Freeman & Co, 1978.
- [14] V.G. Novikov, V.S. Zakharov, A.D. Solomyannaya, V.V. Nagovitsyn, S.V. Zakharov. Ionization & Excitation Rate Coefficient Calculations for Plasma Emitting in EUV Range // 2nd Int. Extreme Ultraviolet Lithography (EUVL) Symposium, Antwerp, 2003.
- [15] D. Salzman. Atomic Physics in Hot Plasmas. New York-Oxford: Oxford University Press, 1998.
- [16] Б.М. Смирнов. Введение в физику плазмы. -М.: Наука, 1975.

- [17] Л.А. Вайнштейн, И.И. Собельман. Вывод радиальных уравнений теории столкновений электронов с атомами // ЖЭТФ. - 1960. - Т. 39. - С. 767.
- [18] А.Ф. Никифоров, В.Б. Уваров. Специальные функции математической физики. -М.: Наука, 1984.
- [19] Д.А. Варшалович, А.Н. Москалев, В.К. Херсонский. Квантовая теория углового момента. -Л.: Наука, 1975.
- [20] R. Benattar, S.V. Zakharov, A.F. Nikiforov, V.G. Novikov, V.A. Gasilov, A.Yu. Krukovskii, V.S. Zakharov. Influence of magnetohydrodynamic Rayleigh-Taylor instability on radiation of imploded heavy ion plasmas // Physics of Plasmas. - 1999. - V. 6 - P. 175.
- [21] А.В. Гасилов, В.С. Захаров, С.В. Захаров, А.Ю. Круковский, А.Ф. Никифоров, В.Г. Новиков. Влияние магнитогидродинамической неустойчивости Рэлея-Тэйлора на мощность излучения плазмы многозарядных ионов Z-пинчей // Тезисы докладов XXVI Звенигородской конференции по физике плазмы и УТС, Звенигород, 1999, С. 115.
- [22] С.В. Захаров, А.Ф. Никифоров, В.Г. Новиков, В.С. Захаров. Генерация полей излучения высокой интенсивности в системах двойных лайнеров и "dynamic hohlraum"// Тезисы XV Международной конференции "Уравнения состояния вещества", Терскол, 2000, С. 64.
- [23] А.А. Андреев, С.В. Захаров, В.С. Захаров, К.Ю. Платонов, А.А. Левковский. Иницирование зажигания мишени петаваттным лазером в системах двойных лайнеров и "dynamic hohlraum"// Тезисы XVI Международной конференции "Воздействие интенсивных потоков энергии на вещество", Эльбрус, 2001, С. 12.
- [24] S.V. Zakharov, A.S. Chuvatin, P. Choi, V.G. Novikov, V.A. Gasilov, V.S. Zakharov. Dynamics and Radiation Emission of a Nanosecond Capillary Discharge // Тезисы XVI Международной конференции "Воздействие интенсивных потоков энергии на вещество", Эльбрус, 2001, С. 13.
- [25] M.E. Bannister, D. W. Mueller, L. J. Wang, M. S. Pindzola, D. C. Griffin, and D. C. Gregory. Cross sections for electron-impact single ionization of Kr^{8+} and Xe^{8+} // Physical Review A. - 1988. - V. 38. - P. 38.
- [26] D. C. Griffin, C. Bottcher, M.S. Pindzola, S. M. Younger, D. C. Gregory and D. H. Crandall. Electron-impact ionization in the xenon isonuclear sequence // Physical Review A. - 1984. - V. 29. - P. 1729.
- [27] D. C. Gregory, D. H. Crandall. Measurement of the cross section for electron-impact ionization of Xe^{6+} ions // Physical Review A. - 1983. - V. 27. - P. 2338.
- [28] B.F. Rozsnyai. Collisional-radiative average-atom model for hot plasmas // Physical Review E. - 1997. - V. 55. - P. 7507.
- [29] В.Г. Новиков, А.Д. Соломянная. Расчет спектров многозарядных ионов в приближении связи промежуточного типа // Препринт ИПМ им. М.В. Келдыша РАН №65, 2001.