

Справочные данные сечений фотоионизации ксенона

Скороход Е.П.

Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), Волоколамское шоссе, 4, Москва, А-80, ГСП-3, 125993, Россия
e-mail: e.p.skorohod@mail.ru

Аннотация

Физико-химическая радиационная плазмодинамика стремительно развивающаяся область науки, находящая применение при решении задач двигателестроения ракетно-космической отрасли. При проведении математического моделирования процессов в установках и устройствах, где “рабочим телом” является плазма, необходимы справочные данные констант различных плазмохимических реакций. В кулоновском приближении рассчитаны фотоионизации возбужденных состояний атома Хе сечения.

Ключевые слова: плазма ксенона, сечения фотоионизации Хе, метод квантового дефекта.

Введение

В [1-9,14-16] большое внимание уделяется построению оптических моделей газов и плазмы, предназначенных для решения задач радиационной плазмодинамики. Такие построения основываются на квантово-механических расчётах (в тех или иных приближениях) и квазиклассических

обобщениях элементарных радиационных процессов. В этом кроется некоторое противоречие. С одной стороны расчётные модели должны быть универсальными и достаточно теоретически обоснованными, чтобы можно было создавать алгоритмы любой сложности для произвольных компонентов и их смесей. С другой стороны, должна присутствовать спектральная адекватность, соответствующая достоверности теоретических построений при изучении оптических свойств.

Классификация оптических моделей подробно рассмотрена в [2]. В работе [3] для массовых расчётов была сформулирована так называемая оптическая модель среды. Следует подчеркнуть, что в этой трактовке температура среды и излучения предполагается общей, и тем самым заведомо используется локальное термодинамическое равновесие (ЛТР) Саха–Больцмана [6]. В наших работах [7,8,14-16] была предпринята попытка по возможности максимально учесть в расчётах коэффициента поглощения все механизмы, влияющие на его величину.

1. Плазмохимические реакции с участием фотонов

Фотоионизация атома из возбуждённого i -го состояния X_i (i -го уровня) в континуум представляется как



Здесь $h\nu$ – энергия фотона, X^+ – концентрация ионов. Формально скорость процесса следовало бы записать с учётом концентрации фотонов $N_{h\nu}$

$$\frac{dN_i}{dt} = -FO_i N_i N_{h\nu}. \quad (2)$$

Согласно [10] для скорости фотоионизации используется запись

$$\frac{dN_i}{dt} = -\beta_i N_i \quad (3)$$

Вероятность фотоионизации в единицу времени (частота) $\beta_i = \sigma_i c N_{h\nu}$ зависит от сечения фотоионизации $\sigma_i(\nu)$, скорости света и концентрации фотонов $N_{h\nu}$. С учётом того, что энергия всех фотонов

$$h\nu N_{h\nu} = \frac{4\pi}{c} \mathfrak{I}_\nu \quad (4)$$

вероятность в единицу времени (частота) будет

$$\beta_i = 4\pi \int_{\nu_i}^{\infty} \mathfrak{I}_\nu \sigma_i(\nu) \frac{d\nu}{h\nu} \quad (5)$$

В ряде случаев, чтобы избежать вычисления плотности излучения $u_\nu = \frac{4\pi}{c} \mathfrak{I}_\nu$, фотоионизацию представляют в виде отрицательной спонтанной рекомбинации, скорость которой будет равна

$$\frac{dN_i}{dt} = -F_i N_e N^+ (1 - \theta_i). \quad (6)$$

Величина $1 - \theta_i = \mu$ в (6) является множителем, учитывающим поглощение фотонов атомами на уровне i (параметр θ – показатель пленения излучения, параметр Бибермана -Холстейна) [4,14]. Когда $\mu = 1$, ($\theta_i = 0$), фотоионизацией можно пренебречь; при $\mu = 0$ ($\theta_i = 1$) плазма становится оптически плотной (излучательная рекомбинация сбалансирована фотоионизацией).

2. Дифференциальное сечение фотоионизации

Начнём рассмотрение с водородоподобного атома.

Воспользуемся общей формулой теории возмущений для вероятности перехода W электрона из состояния дискретного спектра f_0 (в результате поглощения фотона) в состояние непрерывного спектра $[f, f + df]$.

$$dW = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{f_0,f}|^2 \delta(E_{f_0} - E_{f_i}) df, \quad (7)$$

где $|M_{f_0,f}|^2$ - дипольный матричный элемент рассматриваемого перехода.

Дифференциальное сечение фотоионизации пропорционально этой вероятности, и для кванта энергии $\hbar\omega$ с переходом из дискретного (n_1, ℓ_1) - в состояние (f, ℓ_2) непрерывного спектра определяется формулой

$$\sigma_{n_1\ell_1 \rightarrow f}(\hbar\omega) = a_0^2 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right) \frac{(2\pi)^2}{3} \left(\frac{\hbar\omega}{2Ry}\right) \sum_{l_2} |C_{l_2 0}^{l_1 0}| \cdot |\langle R_{f l_2} | r | R_{n_1 l_1} \rangle|^2. \quad (8)$$

Здесь n_1 - главное квантовое число начального состояния; ℓ_1, ℓ_2 - орбитальные квантовые числа в начальном и конечном состояниях соответственно; a_0 - радиус Бора; $Ry = \frac{me^4}{2\hbar^2} = 13,6 \text{ эВ}$ - потенциал ионизации атома водорода; $C_{l_2 0}^{l_1 0}$ - коэффициент Клебша-Гордана; $\langle R_{f l_2} | r | R_{n_1 l_1} \rangle$ - радиальный матричный элемент перехода (в атомных единицах); $R_{n_1 l_1}(r)$ - радиальная функция начального состояния атома водорода, выражаемая через гипергеометрическую функцию, а безразмерный параметр есть

$$k = + \sqrt{\frac{\hbar\omega}{Ry} - \frac{1}{n_1^2}}. \quad (9)$$

Расчёты сечений фотоионизации атома водорода рассмотрены в малоизвестной работе [11]. Отдельные значения сечений фотопоглощения атома водорода для энергий фотона $\hbar\omega$, выраженных в электронвольтах, приведены в табл.1. Сечения даны в атомных единицах πa_0^2 ($\sigma_{cm^2} = 0,88 \cdot 10^{-16} \sigma_{a.e.}$); n, ℓ - главное квантовое число и орбитальный момент соответственно. Энергия освобожденного электрона указывается в таблице в безразмерных единицах k , согласно (9).

Таблица 1

Сечения фотоионизации атома водорода в единицах πa_0^2 .

$\hbar\omega, \text{эВ};$ k	n	$\sigma_{a.e.},$ $\ell = 0$	$\sigma_{a.e.},$ $\ell = 1$	$\sigma_{a.e.},$ $\ell = 2$	$\sigma_{a.e.},$ $\ell = 3$	$\sigma_{a.e.},$ $\ell = 4$	$\sigma_{a.e.},$ $\ell = 5$	$\sigma_{a.e.},$ $\ell = 6$
<u>$\hbar\omega = 13.6$</u>								
$k=0$	1	0.72(-1)	-	-	-	-	-	-
$k=0.2$		0.64(-1)	-	-	-	-	-	-
$k=0.4$		0.48(-1)	-	-	-	-	-	-
$k=0.6$		0.31(-1)	-	-	-	-	-	-
$k=0.8$		0.19(-1)	-	-	-	-	-	-
$k=1$		0.11(-1)	-	-	-	-	-	-
<u>$\hbar\omega = 3.396$</u>								
$k=0$	2	0.17(+0)	0.15(+0)	-	-	-	-	-
$k=0.2$		0.12(+0)	0.97(-1)	-	-	-	-	-
$k=0.4$		0.57(-1)	0.33(-1)	-	-	-	-	-
$k=0.6$		0.23(-1)	0.88(-2)	-	-	-	-	-
$k=0.8$		0.91(-2)	0.24(-2)	-	-	-	-	-
$k=1$		0.38(-2)	0.73(-3)	-	-	-	-	-
<u>$\hbar\omega = 1.507$</u>								
$k=0$	3	0.29(+0)	0.30(+0)	0.21(+0)	-	-	-	-
$k=0.2$		0.15(+0)	0.14(+0)	0.70(-1)	-	-	-	-
$k=0.4$		0.43(-1)	0.28(-1)	0.80(-2)	-	-	-	-
$k=0.6$		0.12(-1)	0.55(-2)	0.90(-3)	-	-	-	-

$k=0.8$		0.40(-2)	0.13(-2)	0.13(-3)	-	-	-	-
$k=1$		0.15(-2)	0.34(-3)	0.23(-4)	-	-	-	-
$\hbar\omega = 0.846$								
	4	0.42(+0)	0.45(+0)	0.41(+0)	0.22(+0)	-	-	-
$k=0$		0.15(+0)	0.14(+0)	0.95(-1)	0.31(-1)	-	-	-
$k=0.2$		0.29(-1)	0.19(-1)	0.74(-2)	0.11(-2)	-	-	-
$k=0.4$		0.66(-2)	0.31(-2)	0.68(-3)	0.54(-4)	-	-	-
$k=0.6$		0.20(-2)	0.65(-3)	0.89(-4)	0.42(-5)	-	-	-
$k=0.8$		0.70(-3)	0.17(-3)	0.15(-4)	0.48(-6)	-	-	-
$k=1$								
$\hbar\omega = 0.54$								
$k=0$	5	0.58(+0)	0.61(+0)	0.61(+0)	0.47(+0)	0.20(+0)	-	-
$k=0.2$		0.14(+0)	0.13(+0)	0.95(-1)	0.45(-1)	0.96(-2)	-	-
$k=0.4$		0.19(-1)	0.13(-1)	0.54(-2)	0.12(-2)	0.10(-3)	-	-
$k=0.6$		0.38(-2)	0.19(-2)	0.45(-3)	0.52(-4)	0.22(-5)	-	-
$k=0.8$		0.11(-2)	0.37(-3)	0.56(-4)	0.39(-5)	0.98(-7)	-	-
$k=1$		0.38(-3)	0.91(-4)	0.94(-5)	0.43(-6)	0.71(-8)	-	-
$\hbar\omega = 0.374$								
$k=0$	6	0.75(+0)	0.79(+0)	0.82(+0)	0.72(+0)	0.47(+0)	0.17(+0)	-
$k=0.2$		0.11(+0)	0.11(+0)	0.84(-1)	0.46(-1)	0.15(-1)	0.22(-2)	-
$k=0.4$		0.12(-1)	0.78(-2)	0.39(-2)	0.99(-3)	0.13(-3)	0.69(-5)	-
$k=0.6$		0.24(-2)	0.12(-2)	0.30(-3)	0.40(-4)	0.27(-5)	0.68(-7)	-
$k=0.8$		0.65(-3)	0.22(-3)	0.36(-4)	0.29(-5)	0.11(-6)	0.17(-8)	-
$k=1$		0.22(-3)	0.55(-4)	0.60(-5)	0.32(-6)	0.82(-8)	0.79(-10)	-
$\hbar\omega = 0.274$								
$k=0$	7	0.94(+0)	0.99(+0)	0.10(+1)	0.98(+0)	0.77(+0)	0.43(+0)	0.13(+0)
$k=0.2$		0.94(-1)	0.89(-1)	0.71(-1)	0.42(-1)	0.17(-1)	0.39(-2)	0.40(-3)
$k=0.4$		0.36(-2)	0.61(-2)	0.28(-2)	0.77(-3)	0.12(-3)	0.10(-4)	0.35(-6)
$k=0.6$		0.16(-2)	0.77(-3)	0.20(-3)	0.30(-4)	0.24(-5)	0.98(-7)	0.16(-8)
$k=0.8$		0.42(-3)	0.15(-3)	0.24(-4)	0.21(-5)	0.10(-6)	0.24(-8)	0.22(-10)
$k=1$		0.14(-3)	0.35(-4)	0.40(-5)	0.23(-6)	0.72(-8)	0.11(-9)	0.67(-12)

3. Сечение фотоионизации для неводородоподбных атомов

Обычно для приближенных расчётов сечений фотоионизации используют полуклассическую формулу Крамерса [12]

$$\sigma_n^{\text{клас}}(\nu) = \frac{64\alpha}{3\sqrt{3}} \frac{\pi a_0^2}{z^2} \frac{1}{n^5} \left(\frac{z^2 Ry}{\hbar\omega} \right)^3, \quad (10)$$

где n - главное квантовое число, z - заряд атомного остатка (для атома $z = 1$), $\hbar\omega$ - энергия поглощающего фотона, α - постоянная тонкой структуры. Для неводородоподобных атомов главное квантовое число в формуле (10) n заменяют на эффективное квантовое число n^*

$$n_i^* = \sqrt{\frac{Ry}{I - E_i}} \quad (11)$$

где $Ry = 13,6$ эВ, I - потенциал ионизации атома. Для атома Хе значения эффективного квантового числа n^* согласно (11) приведены в табл.2.

Таблица 2.

Энергии и эффективные главные квантовые числа Хе,
 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 5s^2 5p^6 {}^1S_0$, I.P. 12.127 eV (13.433 eV)

$N\theta$	$nl[KJ]$	g	E	n^*
1	5p 1S_0	1	0.000	1.059
2	6s[3/2] ₂	5	8.315	1.889
3	6s[3/2] ₁	3	8.436	1.919
4	6p[1/2] ₁	3	9.579	2.310
5	6p[5/2] ₂	5	9.685	2.359
6	6p[5/2] ₃	7	9.720	2.376
7	6p[3/2] ₁	3	9.789	2.411
8	6p[3/2] ₂	5	9.820	2.427
9	5d[1/2] ₀	1	9.890	2.465
10	5d[1/2] ₁	3	9.917	2.480
11	6p[1/2] ₀	1	9.933	2.489
12	5d[7/2] ₄	9	9.943	2.494
13	5d[3/2] ₂	5	9.959	2.497
14	5d[7/2] ₃	7	10.039	2.551
15	5d[5/2] ₂	5	10.157	2.626
16	5d[5/2] ₃	7	10.220	2.669
17	5d[3/2] ₁	3	10.401	2.805
18	7s[3/2] ₂	5	10.562	2.946
19	7s[3/2] ₁	3	10.593	2.976
20	7p[1/2] ₁	3	10.901	3.328
21	7p[5/2] ₂	5	10.954	3.402
22	7p[5/2] ₃	7	10.969	3.423
23	6d[1/2] ₀	1	10.971	3.427

24	6d[1/2] ₁	3	10.978	3.438
25	7p[3/2] ₂	5	10.996	3.464
26	6d[3/2] ₂	5	10.998	3.468
27	7p[3/2] ₁	3	11.003	3.475
28	7p[1/2] ₀	1	11.015	3.493
29	6d[7/2] ₄	9	11.024	3.507
30	6d[7/2] ₃	7	11.037	3.529
31	6d[5/2] ₂	5	11.064	3.574
32	6d[5/2] ₃	7	11.101	3.636
33	6d[3/2] ₁	3	11.163	3.750

В приближении jl -связи состояния (уровни) атомов инертных газов $X[n p^5(^2P_1)nl [K]_j]$ характеризуются квантовыми числами n , l , j , K и J . Здесь n – главное квантовое число; l – орбитальный момент оптического электрона; j – полный момент атомного остатка, записанный в приближении LS -связи как $\vec{j} = \vec{L}_p + \vec{S}_p$ (квантовые числа полного углового момента принимают значения $j = 3/2, 1/2$). Квантовое число $K = |j-l|, \dots, j+l-1, j+1$ соответствует угловому моменту $\vec{K} = \vec{j} + \vec{l}$. Полный момент атома равен $\vec{J} = \vec{K} + \vec{s}$, где $s = 1/2$ – спин оптического электрона. В табл. 2 указаны спектроскопический символ состояния, статистический вес $g = 2J + 1$, энергия возбуждения E_i , в эВ, эффективное квантовое число согласно [13,14].

Для неводородоподобных атомов радиальный интеграл, входящий в выражение для эффективного сечения фотоионизации, нельзя вычислить точно. Для расчётов матричных элементов в (7) используется метод квантового дефекта [6]. Сечения фотопоглощения при переходе электрона с некоторого i -го уровня атома или иона в континуум определяется формулой

$$\sigma_i(n\ell \rightarrow \varepsilon\ell') = (\pi a_0^2) \frac{4\alpha}{3} \left(\frac{\hbar\omega}{Ry} \right) \left(\frac{n^*}{z} \right)^4 \cdot \ddot{S}_{\ell\ell'} g^2(n\ell \rightarrow \varepsilon\ell'), \quad (12)$$

где $\ddot{S}_{\ell\ell'}$ – приведённый матричный элемент, определяемый угловыми моментами начального и конечного состояний, а функция $g(n\ell \rightarrow \varepsilon\ell')$ связана с радиальным интегралом соотношением

$$\int_0^\infty R_{n\ell}(r) r G_{\varepsilon\ell'}(r) r^2 dr = \left(\frac{n_\ell^*}{z} \right)^2 g(n\ell \rightarrow \varepsilon\ell'). \quad (13)$$

Здесь $R_{n\ell}$ и $G_{\varepsilon\ell'}$ – волновые функции связанного и свободного состояний. Индексы ℓ, ℓ' – условные, состояние может зависеть от всей совокупности квантовых чисел.

В приближении квантового дефекта, по методу Берджесса–Ситона имеем

$$g(n\ell \rightarrow \varepsilon\ell') = \frac{(-1)^{\ell+1}}{\sqrt{\zeta_\ell}} \cdot \frac{G_{\ell\ell'}}{(1 + \varepsilon(n^*)^2)^\gamma} \cos \pi \left[\mu_{\ell'}(\varepsilon) + \chi_{\ell\ell'}(n^*) + \alpha_{\ell\ell'} \frac{\varepsilon n^*}{1 + \varepsilon n^*} + \beta_{\ell\ell'} \frac{\varepsilon (n^*)^2}{1 + \varepsilon (n^*)^2} \right]; \quad (14)$$

где

$$\chi_{\ell\ell'}(n^*) = n^* + a_{\ell\ell'} + \frac{b_{\ell\ell'}}{n^*} + \frac{c_{\ell\ell'}}{(n^*)^2}. \quad (15)$$

В этой формуле $\mu_{\ell'}(\varepsilon)$ – квантовый дефект в континууме, который можно определить экстраполяцией значений $\mu_{\ell'} = n_{\ell'} - n_{\ell'}^*$ для известных уровней в область положительных энергий. Неплохим приближением для интересующей нас области энергий ε является линейная комбинация (ритцевская зависимость)

$$\mu(\varepsilon) = a + b\varepsilon. \quad (16)$$

В случае Хе значения коэффициентов a и b приведены в табл.3.

Таблица 3

Значения коэффициентов a и b квантового дефекта атома ксенона для

Уровень	J	a	b
ns[3/2]	1	3.99269	- 0.32037
ns[3/2]	2	4.01932	- 0.32709
np[1/2]	0	3.42715	- 0.5828
np[1/2]	1	3.5881	- 59325
np[3/2]	1	3.51339	- 0.39146
np[3/2]	2	3.49978	- 0.42556
np[5/2]	2	3.55627	- 0.47022
np[5/2]	3	3.53747	- 0.48174
nd[1/2]	0	2.53691	- 0.11477
nd[1/2]	1	2.5006	- 0.33778
nd[3/2]	1	2.17537	- 0.55356
nd[3/2]	2	2.43896	- 432333
nd[5/2]	2	2.40827	+ 0.16734
nd[5/2]	3	2.38882	+ 33212
nd[7/2]	3	2.439	- 0.07345
nd[7/2]	4	2.47963	- 0.16225

Поправочный множитель ζ_ℓ в формуле (14) можно представить в виде

$$\zeta_\ell = \frac{n^* - \ell}{n^*} \cdot \frac{n^* + 2\ell}{n^* + 1} \quad (17)$$

Функции $G_{\ell\ell'}(n^*)$ и $\gamma = \gamma_{\ell\ell'}(n^*)$, а также коэффициенты $a_{\ell\ell'}, b_{\ell\ell'}, c_{\ell\ell'}, \alpha_{\ell\ell'}, \beta_{\ell\ell'}$

взяты из таблиц [6]. Квантовый дефект рассматривался как линейная комбинация от безразмерной величины энергии ионизации уровня. В области положительных энергий эта величина соответствует энергии вылетающего

электрона

$$\varepsilon = \frac{\hbar\omega}{Z^2 Ry} - \frac{1}{(n^*)^2}. \quad (18)$$

4. Сечение фотоионизации Хе

Результаты расчёта сечений фотоионизации согласно (12) для ксенона (максимального значения в пороге) приведены в табл. 4.

Таблица 4

Максимальные значения сечений фотоионизации Хе, в единиц. 10^{-18}см^2 .

.Переход	I, Эв	$\sigma(\epsilon=0)$	Переход	I, Эв	$\sigma(\epsilon=0)$
6s[3/2] ₁ →εp	3,69	1,8	7s[3/2] ₁ →εp	1,534	3,946
6s[3/2] ₂ →εp	3,812	2,4	7s[3/2] ₂ →εp	1,565	6,944
6s'[1/2] ₀ →εp'	3,986	0,81	7s'[1/2] ₀ →εp'	1,565	1,334
6s'[1/2] ₁ →εp'	3,863	0,68	7s'[1/2] ₁ →εp'	1,555	0,808
6p[1/2] ₀ →εs	2,194	3,27	7p[1/2] ₀ →εs	1,112	14,55
6p[1/2] ₁ →εs	2,547	2,74	7p[1/2] ₁ →εs	1,225	11,9
6p[3/2] ₁ →εs	2,338	2,52	7p[3/2] ₁ →εs	1,124	10,6
6p[3/2] ₂ →εs	2,306	2,6	7p[3/2] ₂ →εs	1,131	9,55
6p[5/2] ₂ →εs	2,441	2,54	7p[5/2] ₂ →εs	1,173	11,76
6p[5/2] ₃ →εs	2,406	2,73	7p[5/2] ₃ →εs	1,158	10,15
6p'[1/2] ₀ →εs'	2,292	2,87	7p'[1/2] ₀ →εs'	1,152	10,76
6p'[1/2] ₁ →εs'	2,346	2,631	7p'[1/2] ₁ →εs'	1,152	3,61
6p'[3/2] ₁ →εs'	2,475	2,831	7p'[3/2] ₁ →εs'	1,177	14,67
6p'[3/2] ₂ →εs'	2,378	2,982	7p'[3/2] ₂ →εs'	1,15	13,99
6p[1/2] ₀ →εd	2,194	27,5	7p[1/2] ₀ →εd	1,112	87,2
6p[1/2] ₁ →εd	2,547	24,8	7p[1/2] ₁ →εd	1,225	67,1
6p[3/2] ₁ →εd	2,338	34,1	7p[3/2] ₁ →εd	1,124	120,2
6p[3/2] ₂ →εd	2,306	29,05	7p[3/2] ₂ →εd	1,131	9,83
6p[5/2] ₂ →εd	2,441	27,9	7p[5/2] ₂ →εd	1,173	8,36
6p[5/2] ₃ →εd	2,406	29,8	7p[5/2] ₃ →εd	1,158	9,27
6p'[1/2] ₀ →εd'	2,292	15,9	7p'[1/2] ₀ →εd'	1,152	28,9
6p'[1/2] ₁ →εd'	2,346	28	7p'[1/2] ₁ →εd'	1,152	85
6p'[3/2] ₁ →εd'	2,475	27,1	7p'[3/2] ₁ →εd'	1,177	80,4
6p'[3/2] ₂ →εd'	2,378	31,1	7p'[3/2] ₂ →εd'	1,15	86,23
5d[1/2] ₀ →εp	2,237	0,25	6d[1/2] ₀ →εp	1,16	1,629
5d[1/2] ₁ →εp	2,21	0,41	6d[1/2] ₁ →εp	1,148	2,24
5d[3/2] ₁ →εp	1,726	2,86	6d[3/2] ₁ →εp	0,964	9,97
5d[3/2] ₂ →εp	2,168	0,55	6d[3/2] ₂ →εp	1,129	4,01
5d[5/2] ₂ →εp	1,97	14	6d[5/2] ₂ →εp	1,06	0,718
5d[5/2] ₃ →εp	1,907	16,8	6d[5/2] ₃ →εp	1,03	0,879
5d[7/2] ₃ →εp	2,088	0,37	6d[7/2] ₃ →εp	1,089	5,2
5d[7/2] ₄ →εp	2,184	0,45	6d[7/2] ₄ →εp	1,103	4,17
5d'[3/2] ₁ →εp'	1,826	2,02	6d'[3/2] ₁ →εp'	1,177	7,4

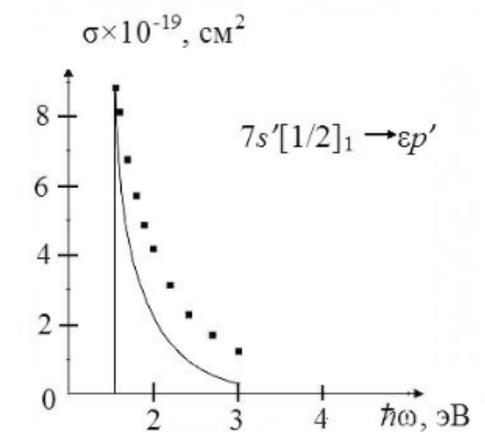
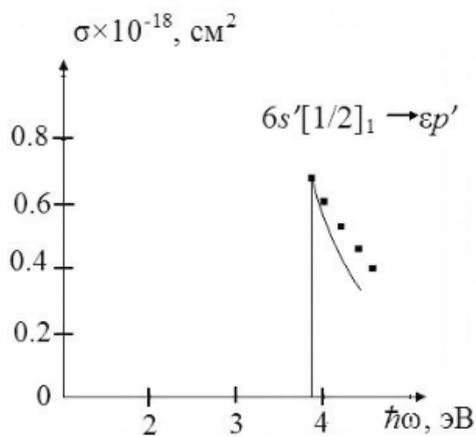
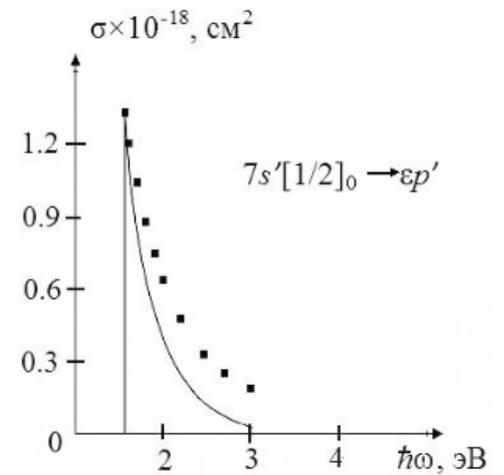
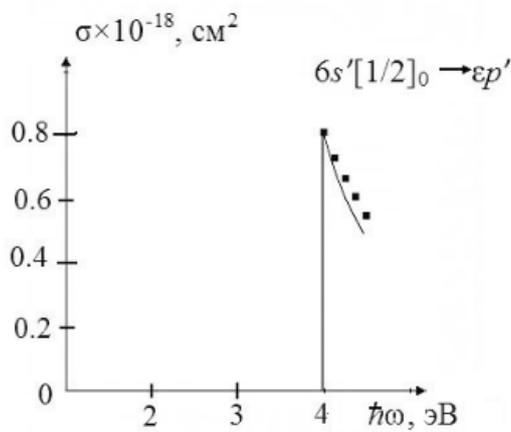
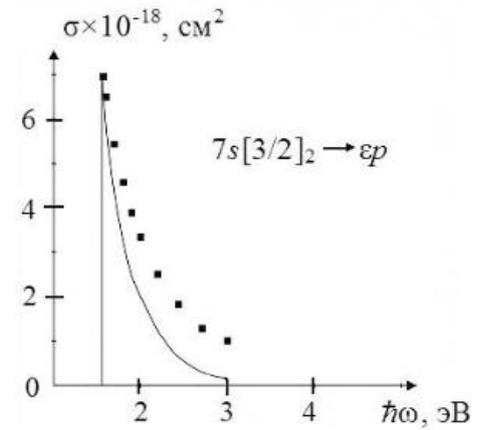
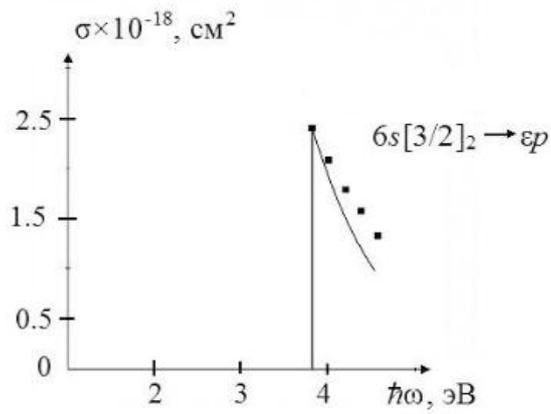
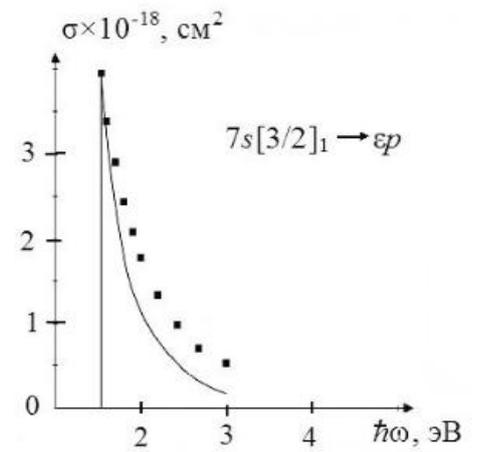
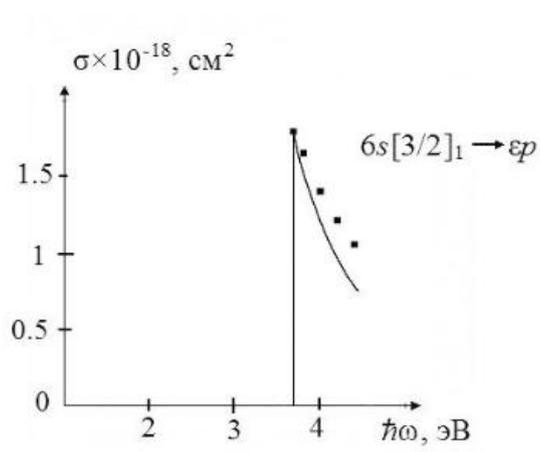
5d'[3/2] ₂ →εp'	2,095	0,901	6d'[3/2] ₂ →εp'	1,08	7,51
5d'[5/2] ₂ →εp'	2,132	1,21	6d'[5/2] ₂ →εp'	1,094	8,03
5d'[5/2] ₃ →εp'	2,058	1,34	6d'[5/2] ₃ →εp'	1,067	8,62
5d[1/2] ₀ →εf	2,237	67	6d[1/2] ₀ →εf	1,156	5,19
5d[1/2] ₁ →εf	2,21	61,3	6d[1/2] ₁ →εf	1,148	4,59
5d[3/2] ₁ →εf	1,726	81,2	6d[3/2] ₁ →εf	0,964	177,1
5d[3/2] ₂ →εf	2,168	60	6d[3/2] ₂ →εf	1,129	71,4
5d[5/2] ₂ →εf	1,97	78,5	6d[5/2] ₂ →εf	1,062	114,9
5d[5/2] ₃ →εf	1,907	77	6d[5/2] ₃ →εf	1,026	141,5
5d[7/2] ₃ →εf	2,088	49,3	6d[7/2] ₃ →εf	1,089	11,12
5d[7/2] ₄ →εf	2,184	61,5	6d[7/2] ₄ →εf	1,103	10,15
5d'[3/2] ₁ →εf ^o	1,826	2,02	6d'[3/2] ₁ →εf ^o	1,177	10,03
5d'[3/2] ₂ →εf ^o	2,095	90	6d'[3/2] ₂ →εf ^o	1,08	8,67
5d'[5/2] ₂ →εf ^o	2,132	1,21	6d'[5/2] ₂ →εf ^o	1,094	7,61
5d'[5/2] ₃ →εf ^o	2,058	1,34	6d'[5/2] ₃ →εf ^o	1,067	9,9

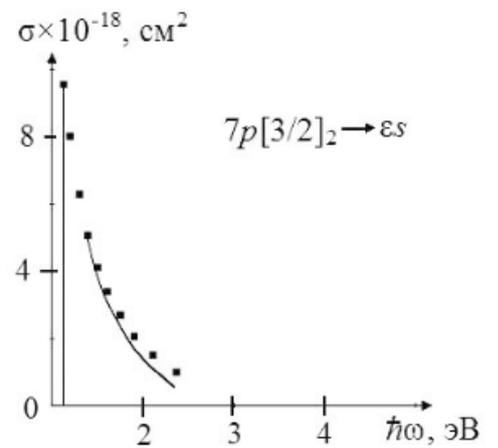
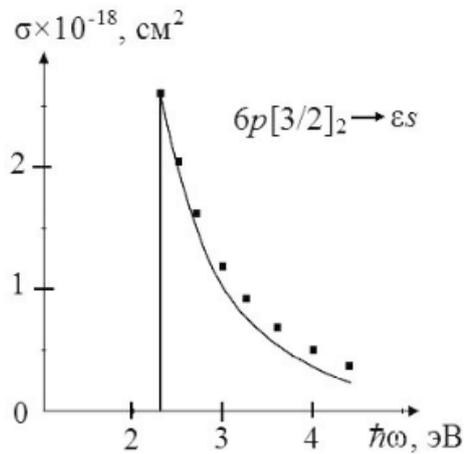
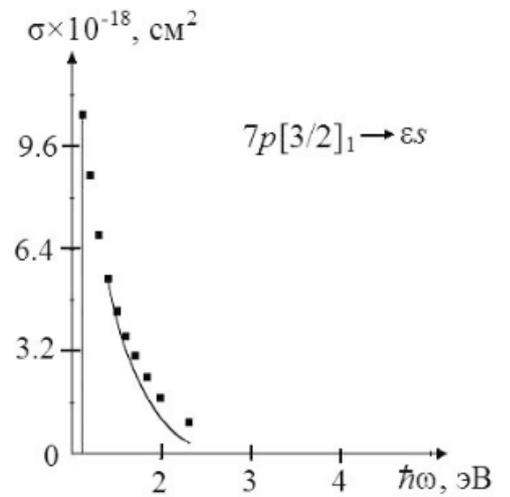
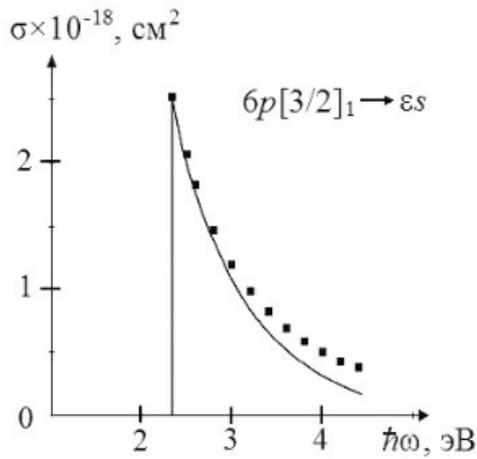
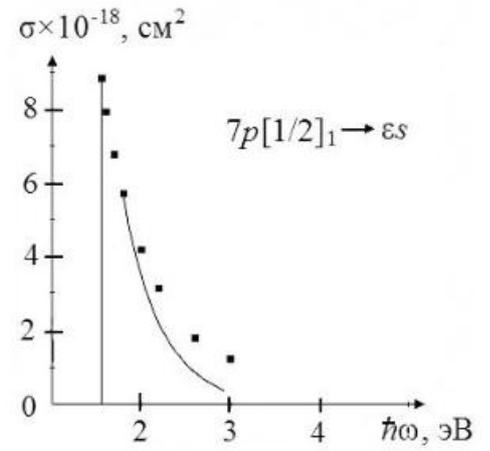
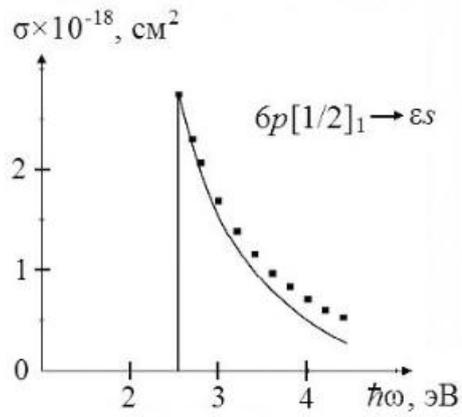
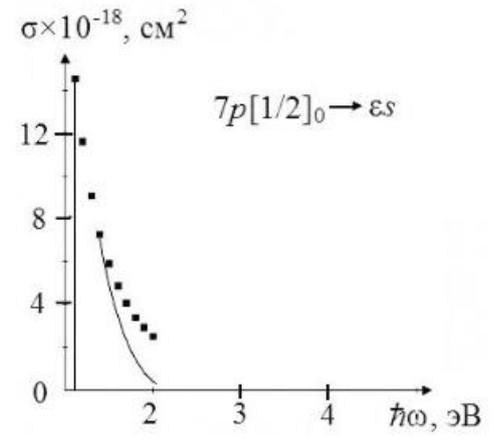
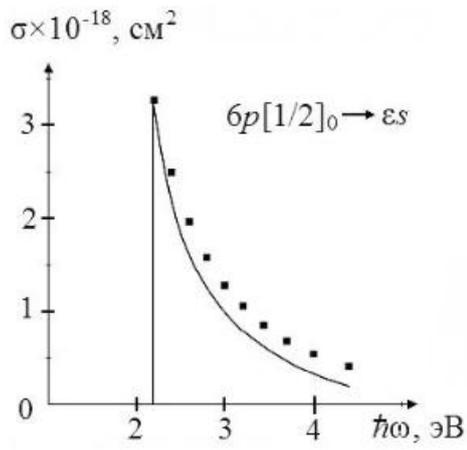
Результаты расчёта сечений фотоионизации в приближении квантового дефекта по методу Берджесса-Ситона для ксенона представлены графически сплошными кривыми на представленных ниже рисунках.

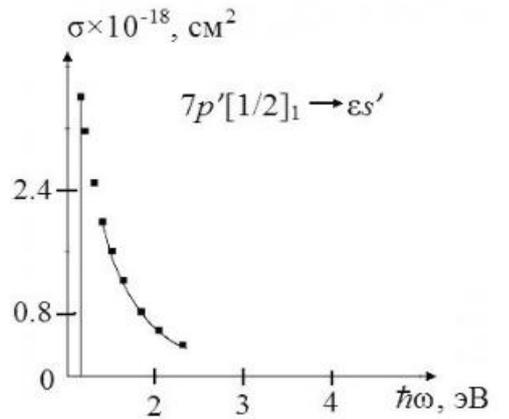
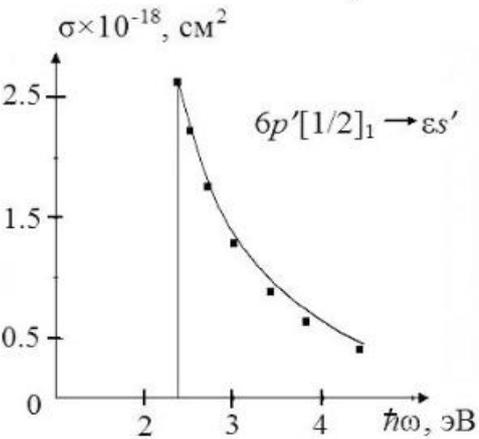
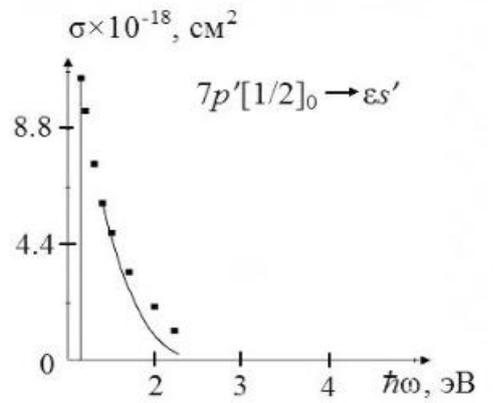
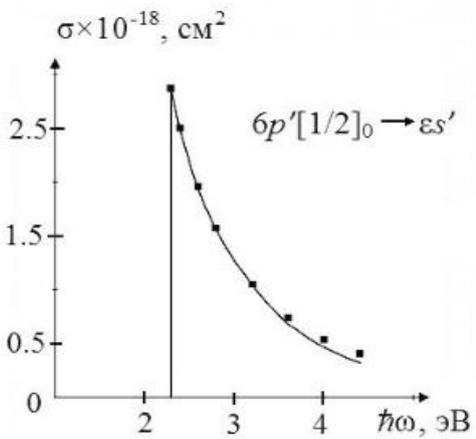
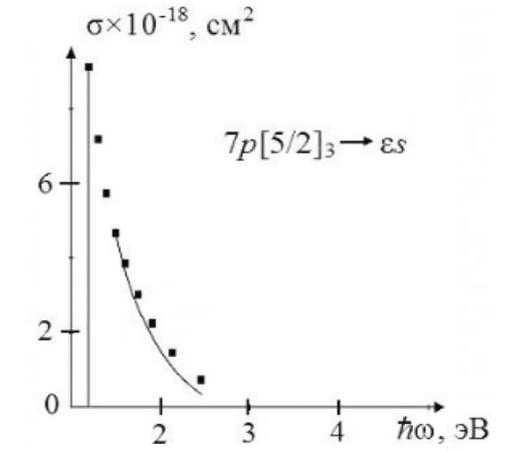
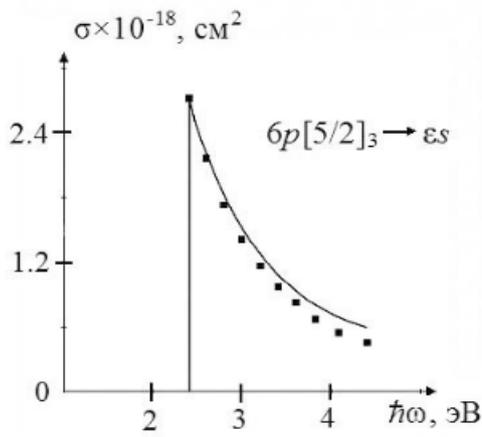
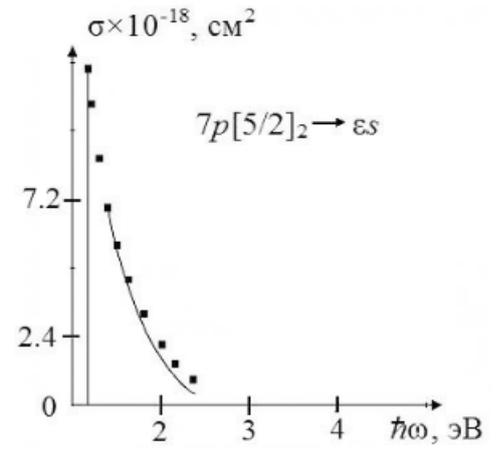
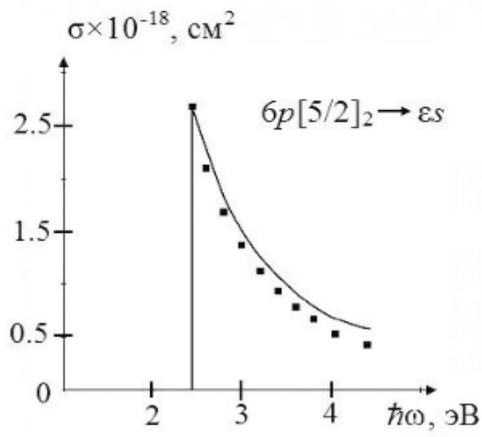
Для массовых расчётов многоуровневой кинетики удобен способ с использованием формулы (10). Одно из значений $\hbar\omega$ фиксируем как $\hbar\omega_0$, и ему будет соответствовать значение сечения σ_0 . Используя выражение

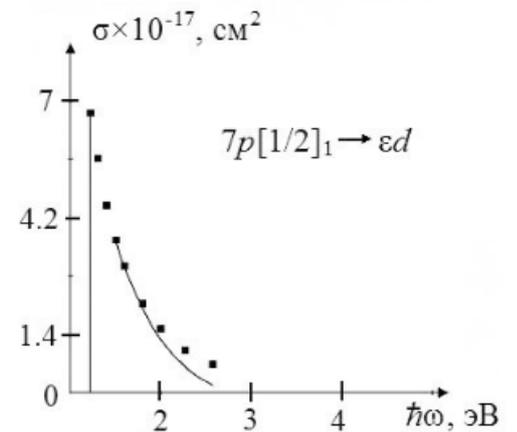
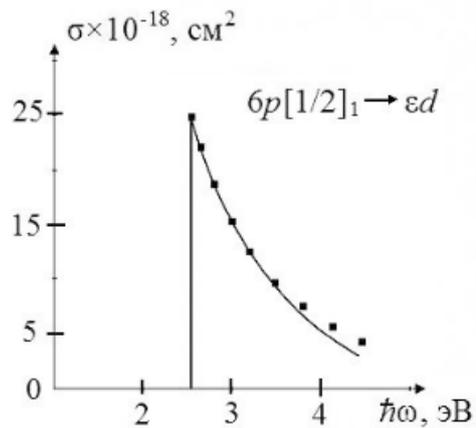
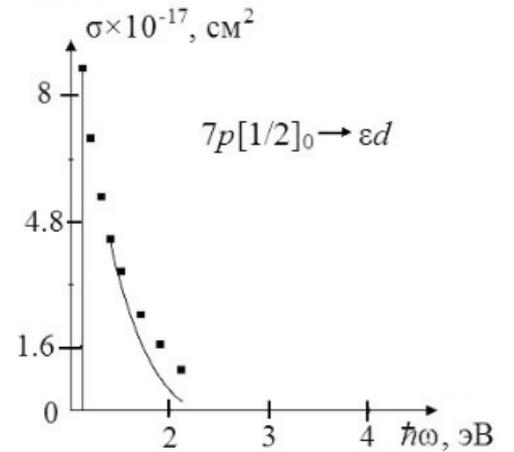
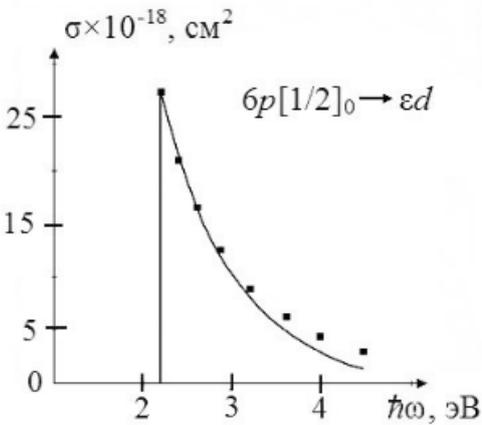
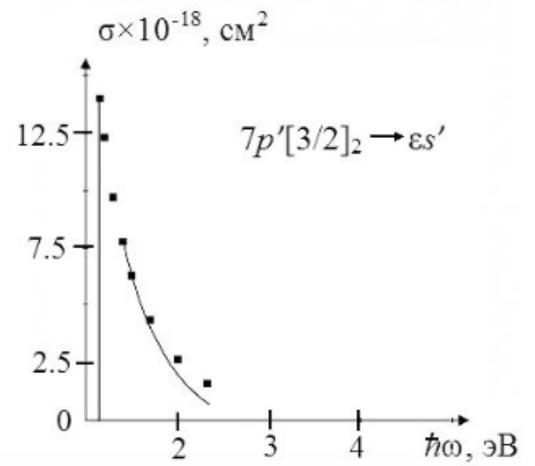
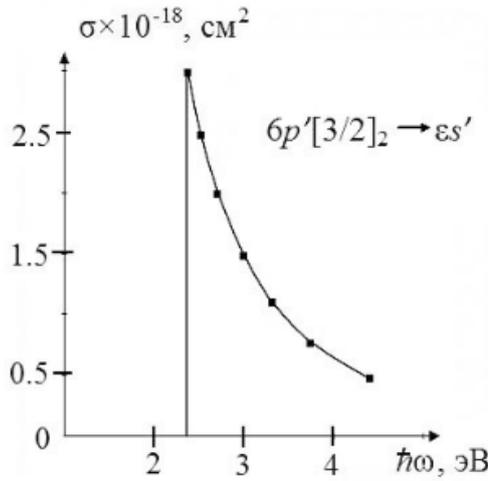
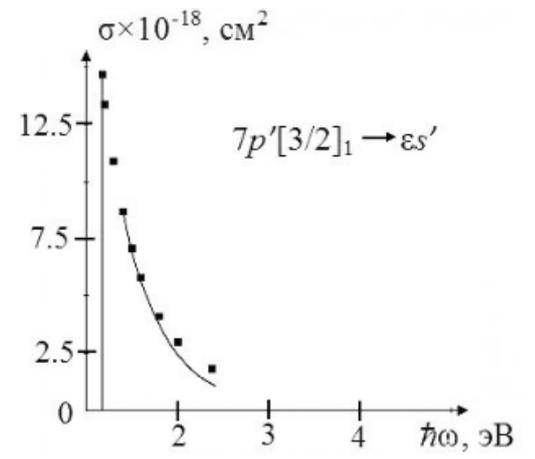
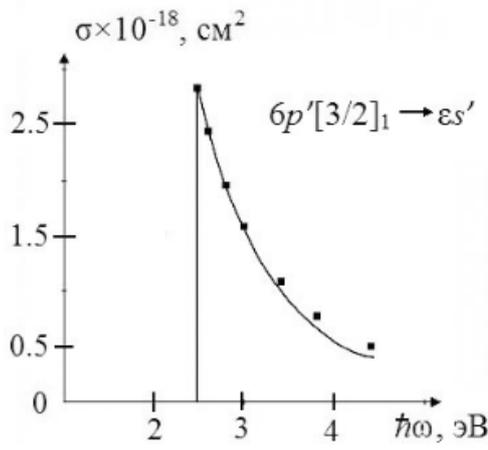
$$\sigma = \sigma_0 \left(\frac{\hbar\omega_0}{\hbar\omega} \right)^3, \text{ которое следует из (10) можем получить значения сечений для}$$

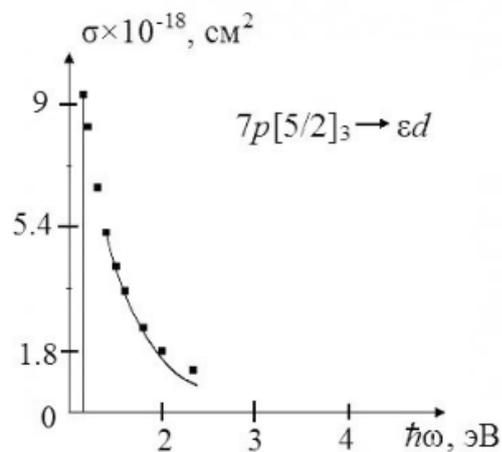
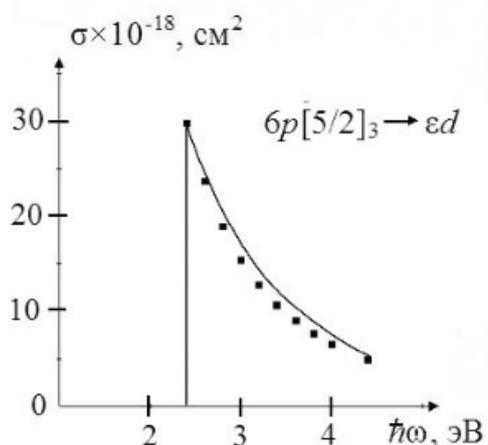
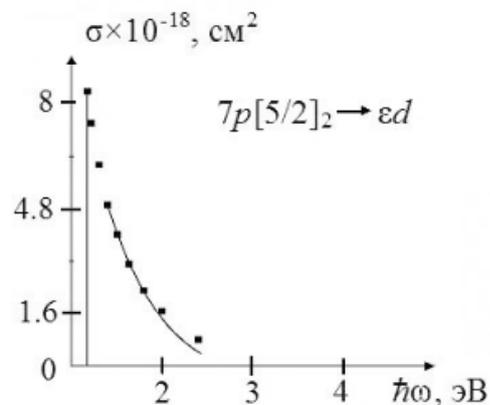
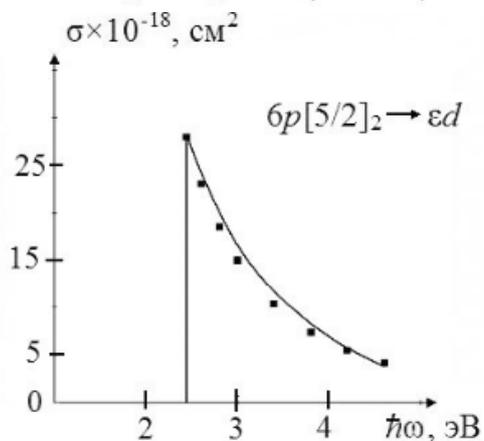
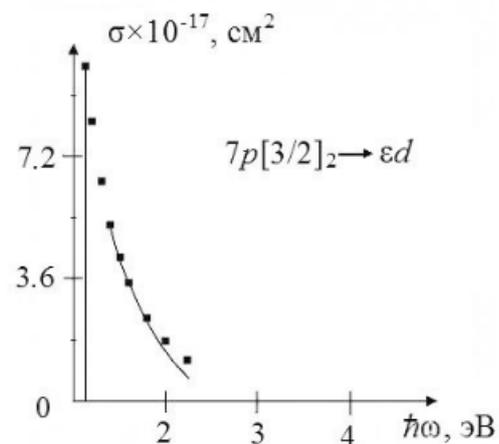
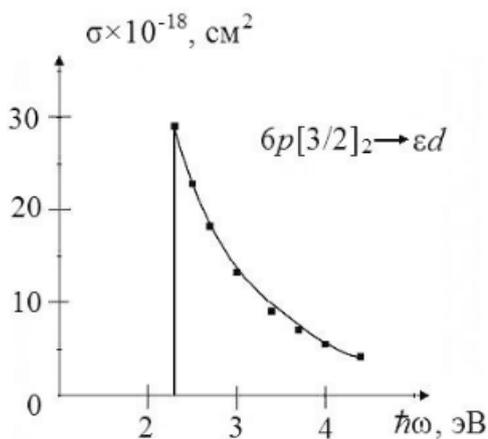
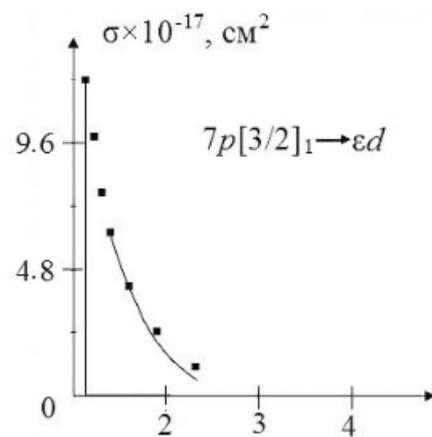
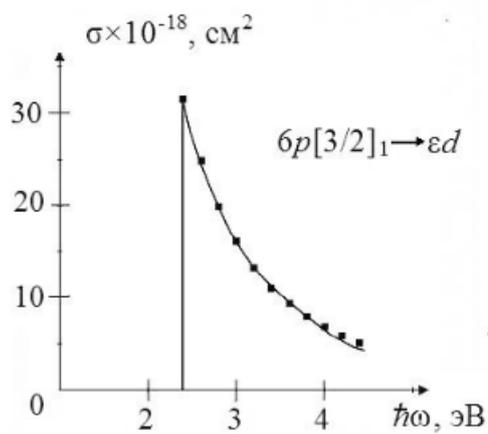
других энергий. Эти значения на рис. 1 представлены точками. Сечения фотоионизации для водорода могут на порядок величины превосходить значения сечений тяжёлых инертных газов. Оценки по формуле Крамерса дают такую же погрешность.

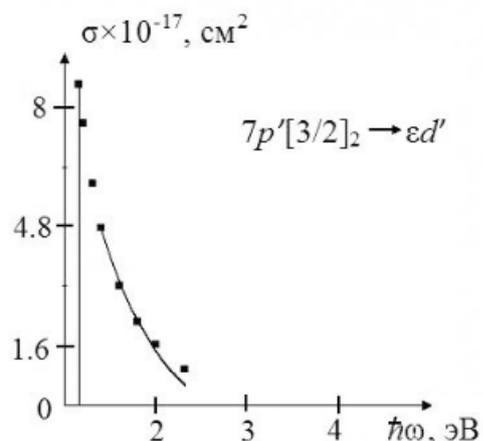
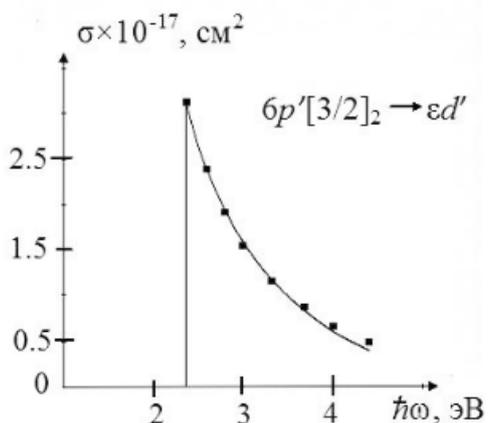
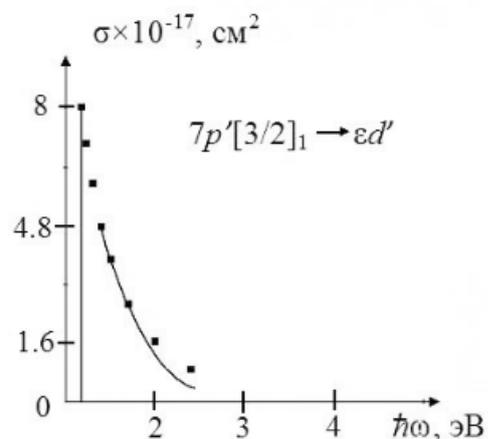
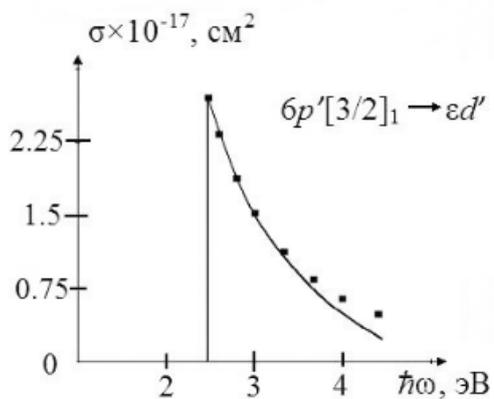
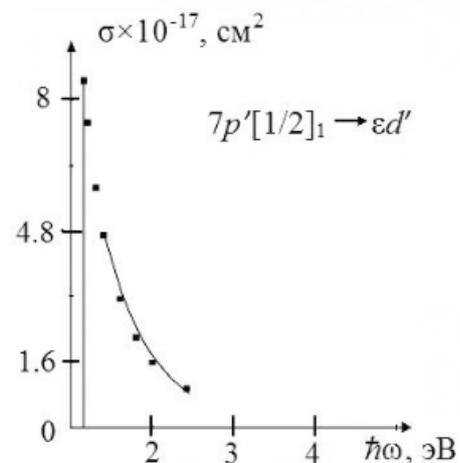
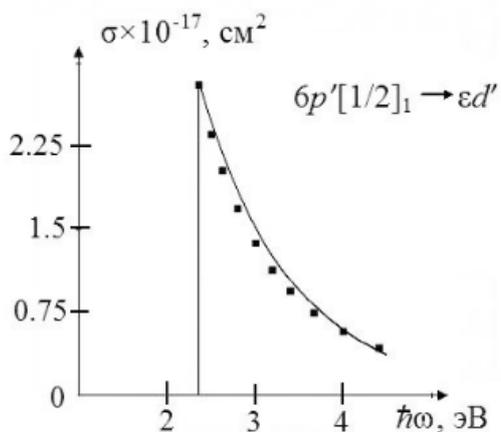
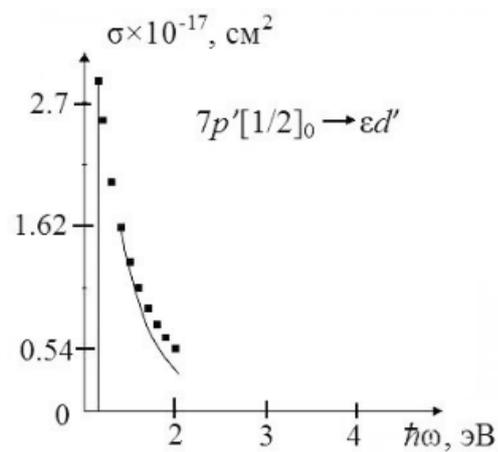
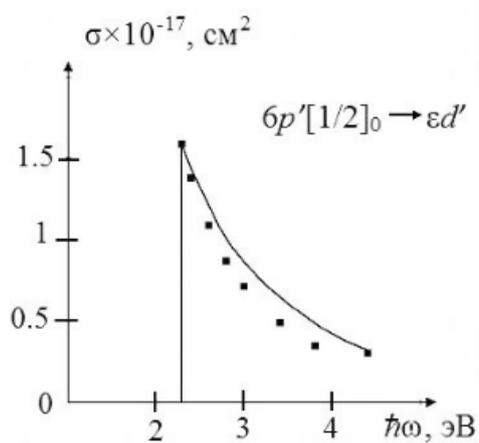


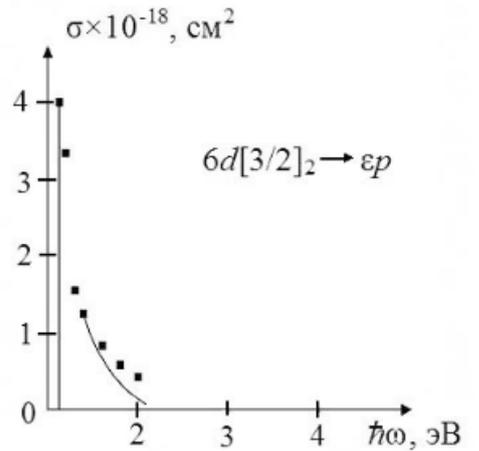
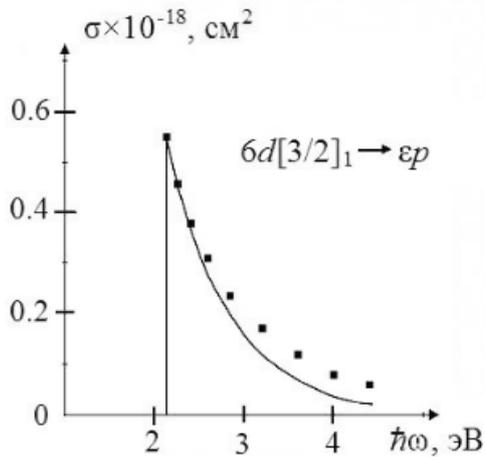
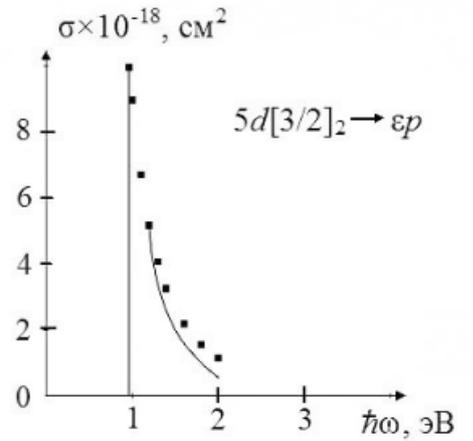
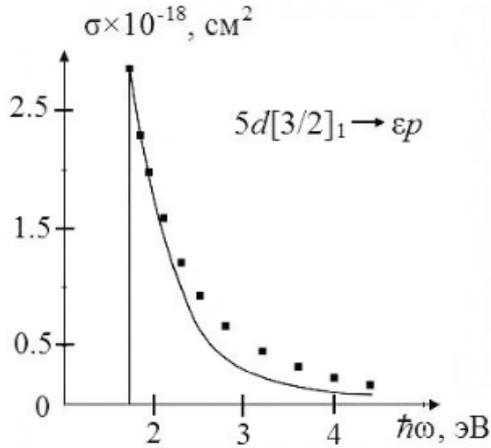
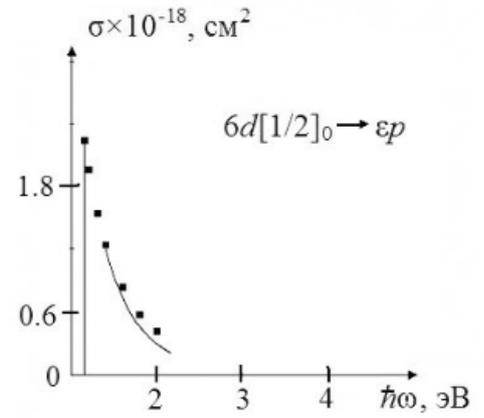
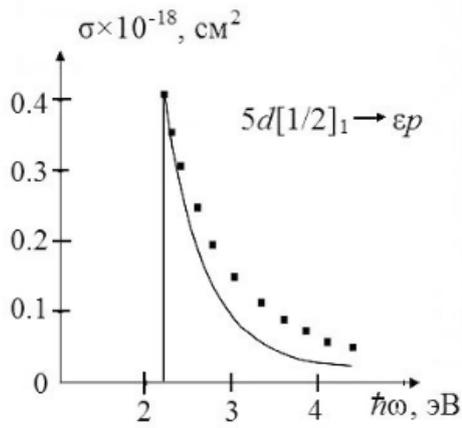
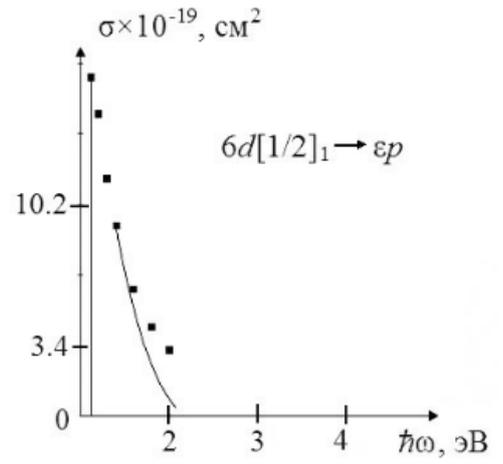
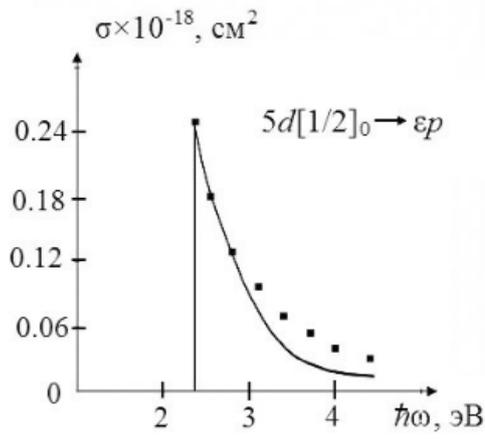


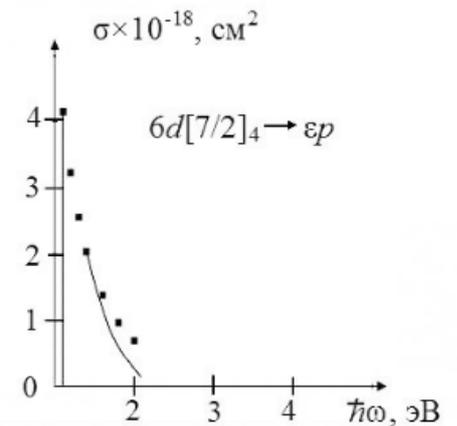
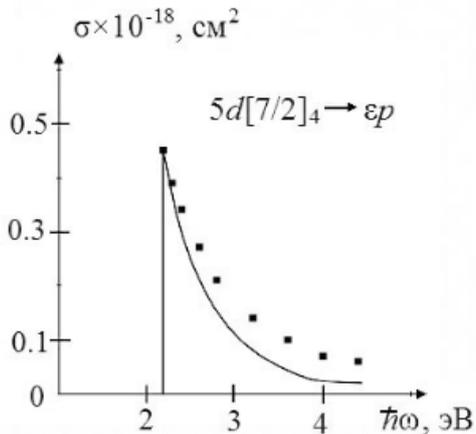
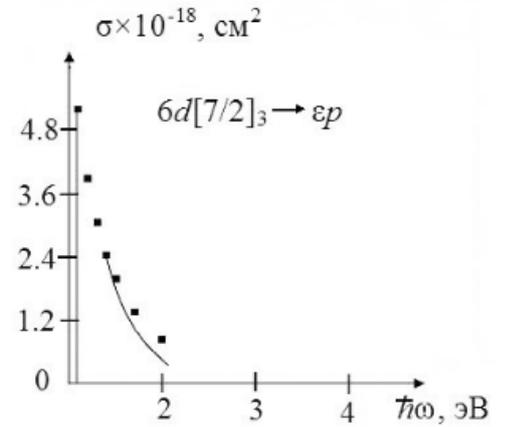
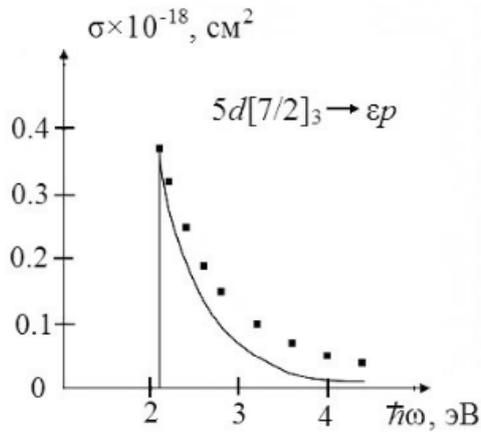
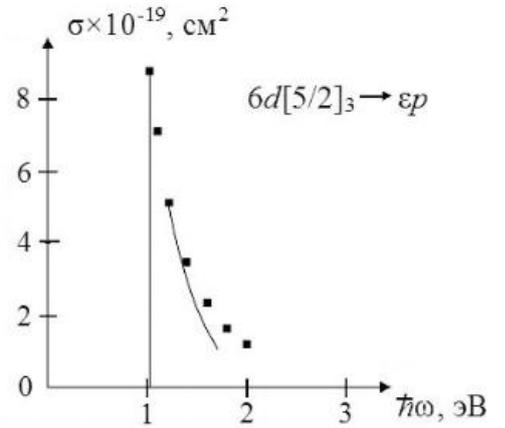
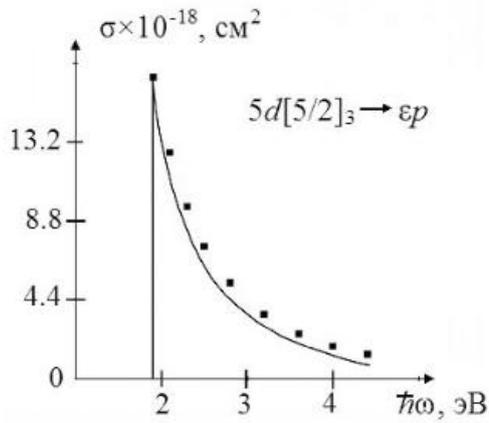
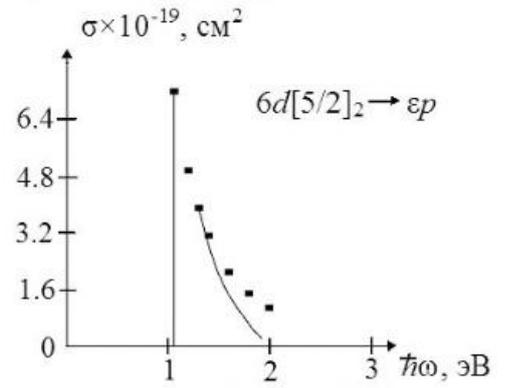
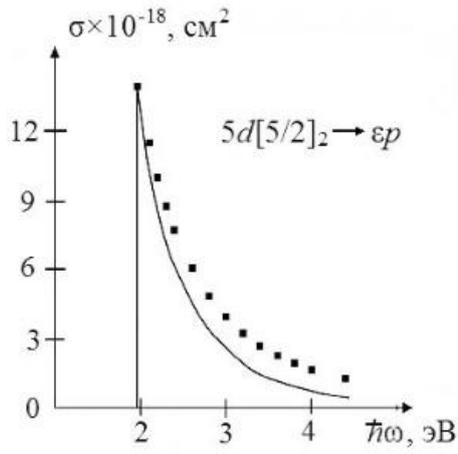


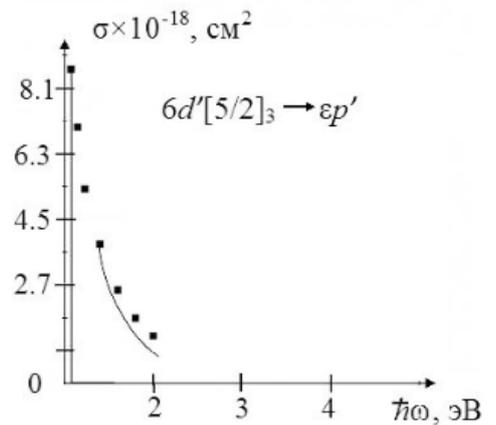
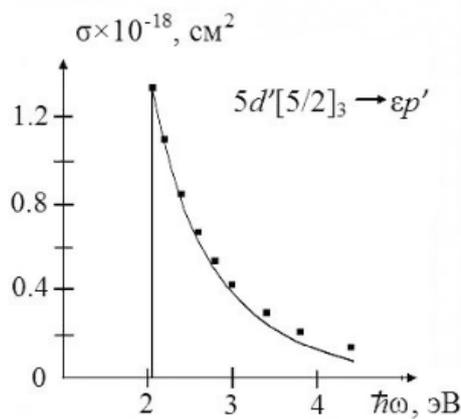
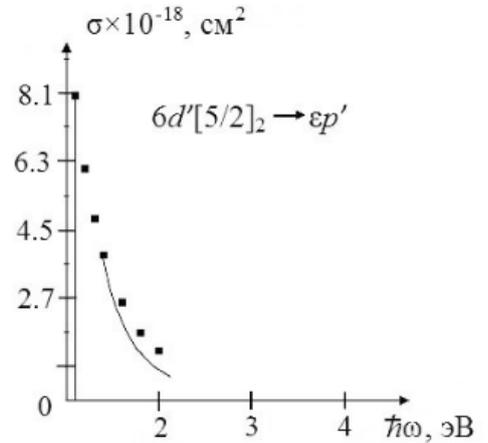
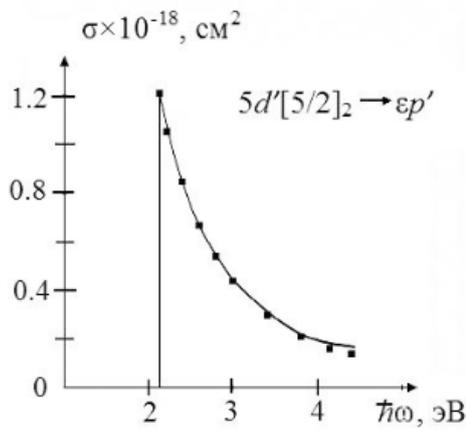
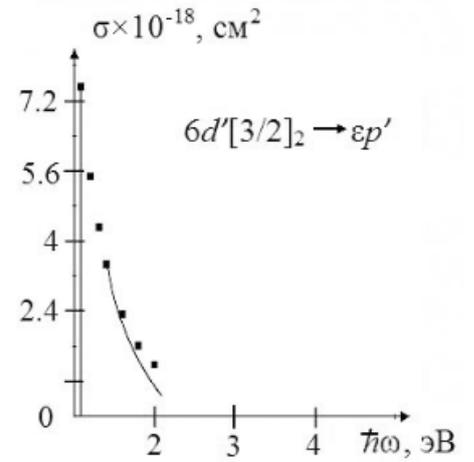
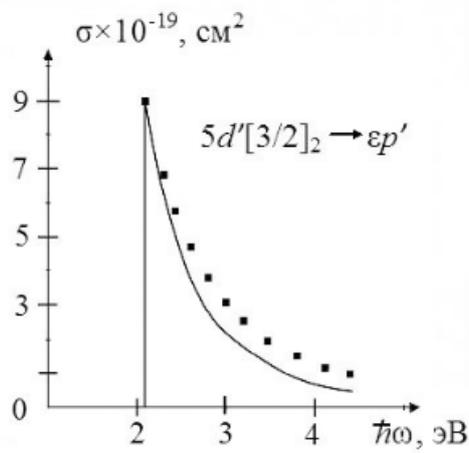
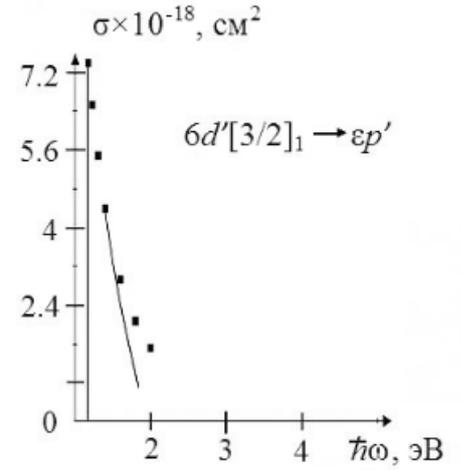
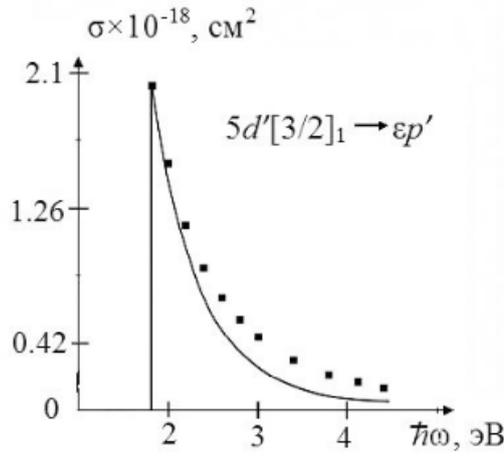


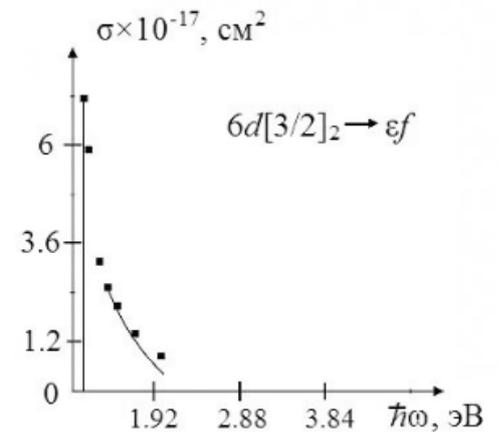
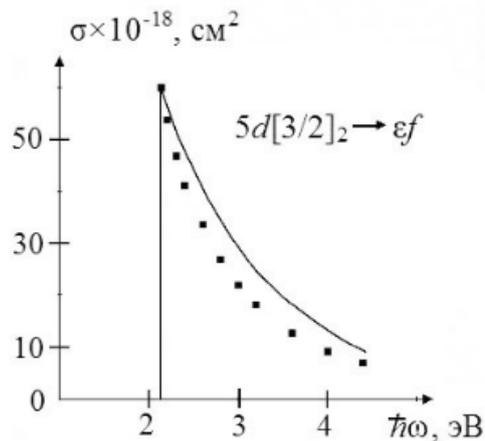
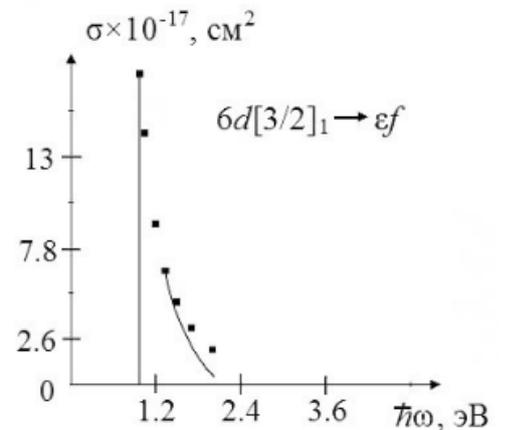
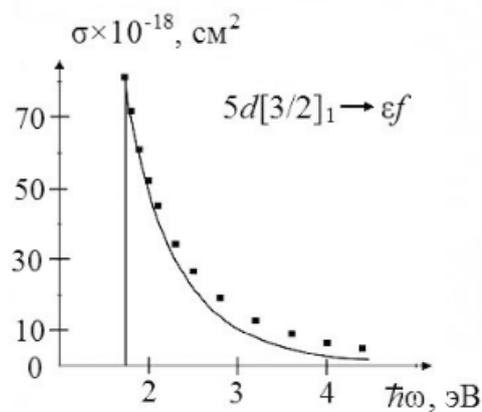
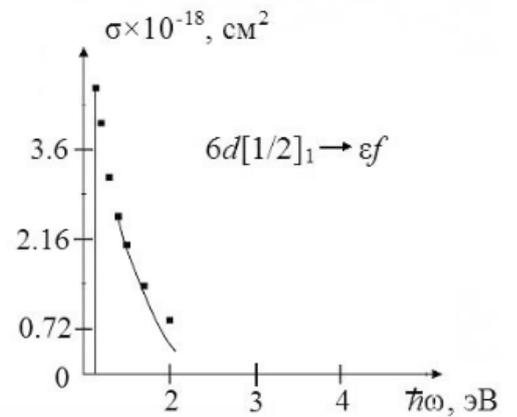
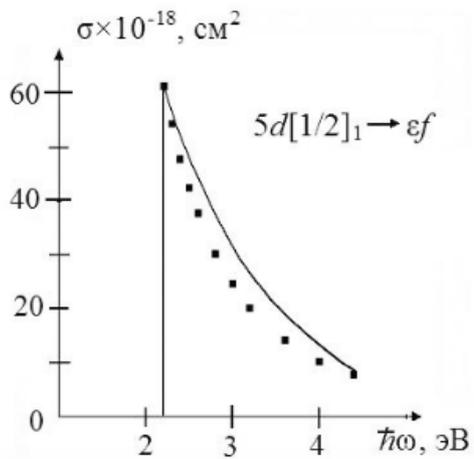
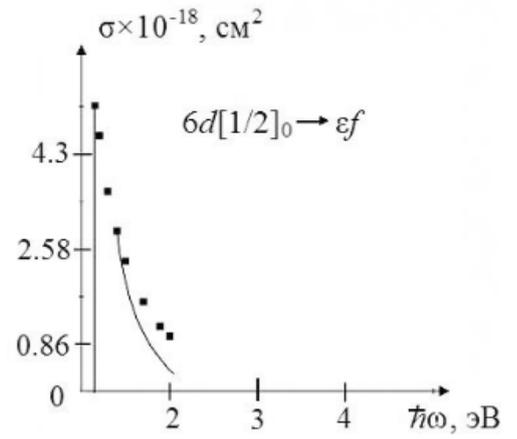
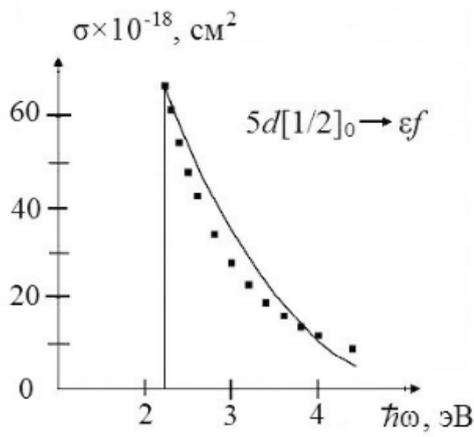


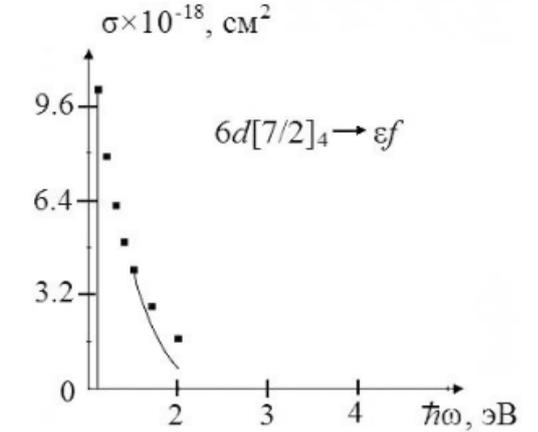
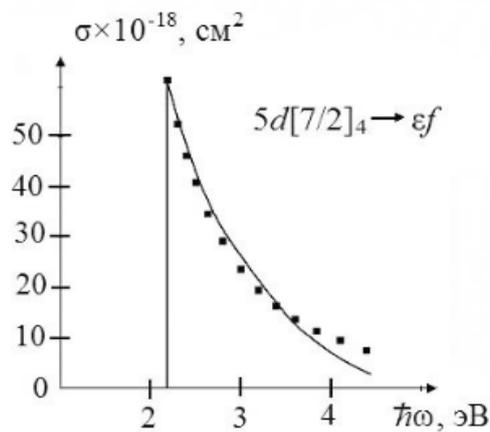
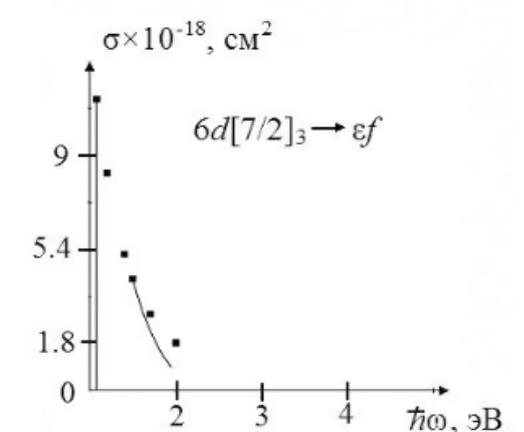
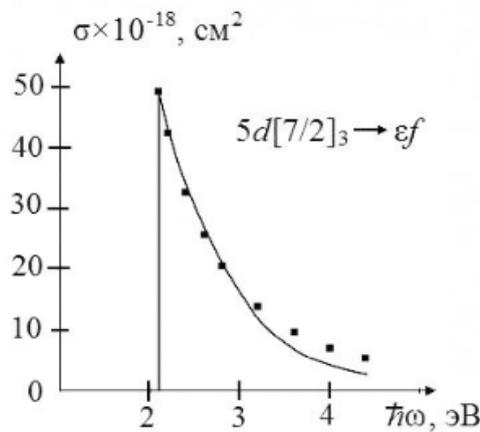
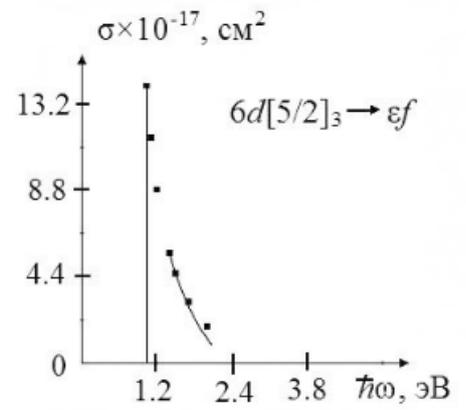
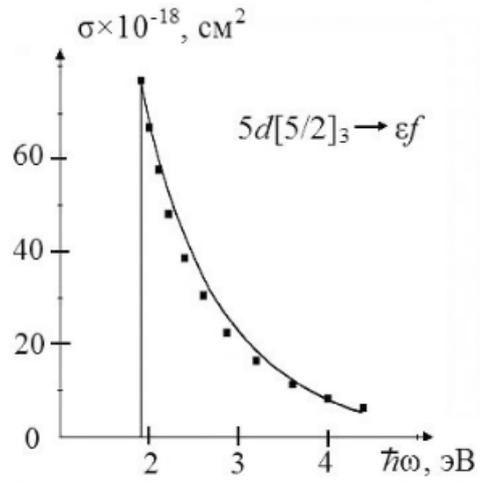
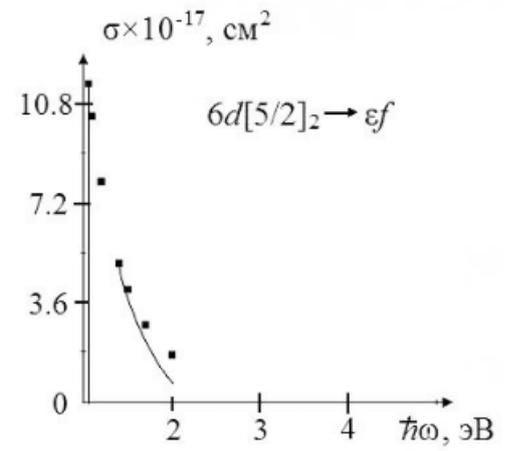
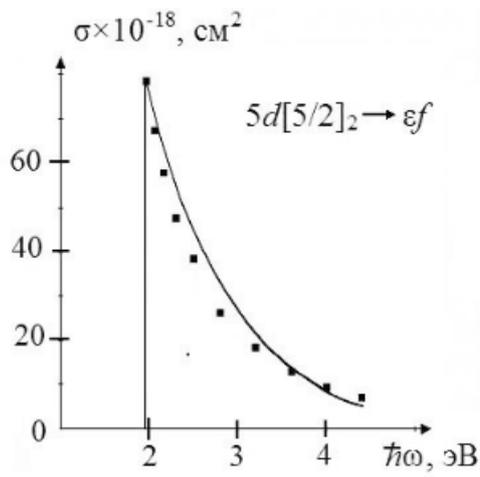












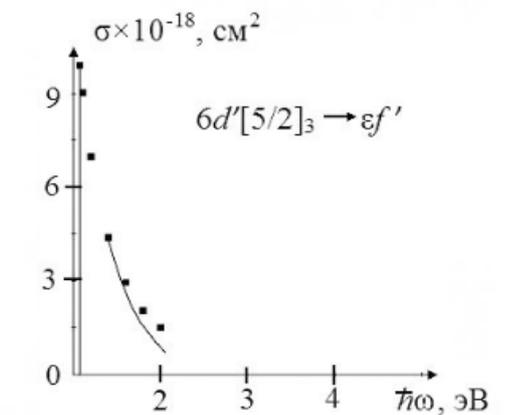
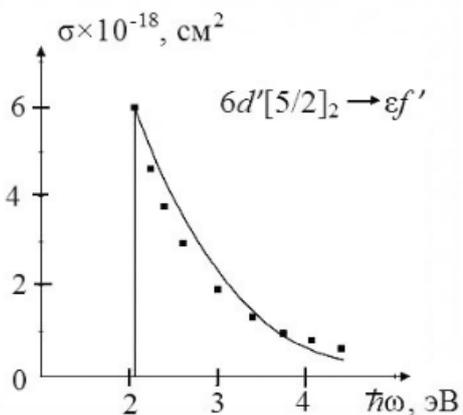
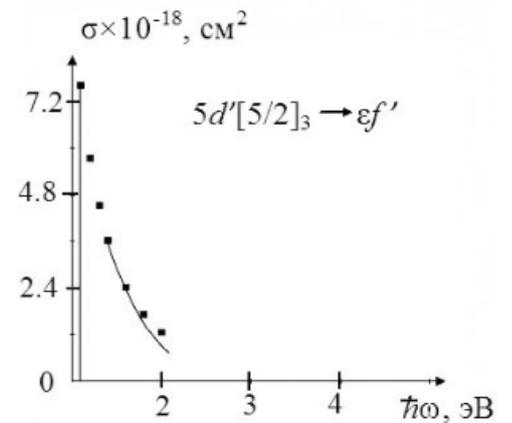
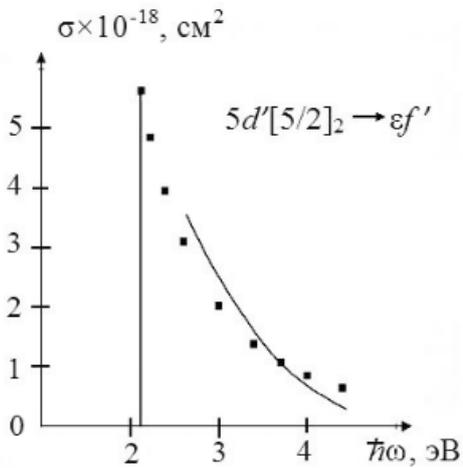
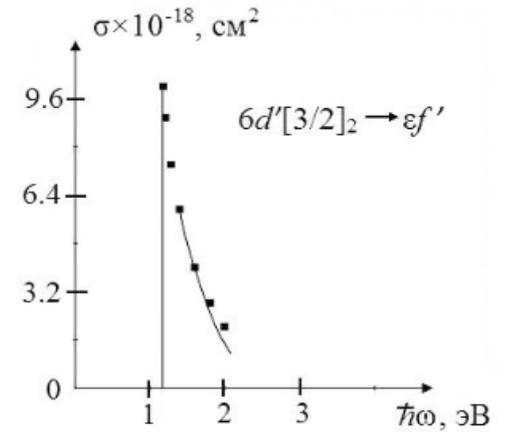
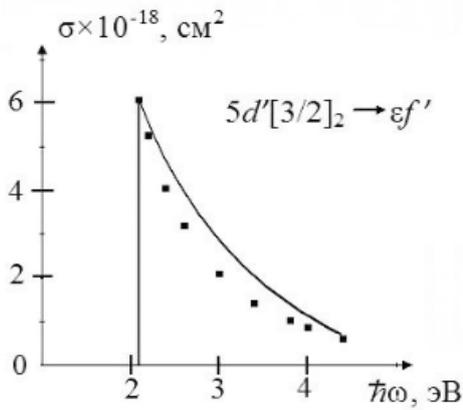
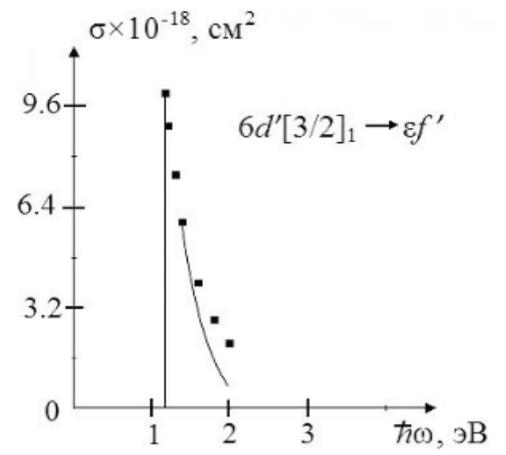
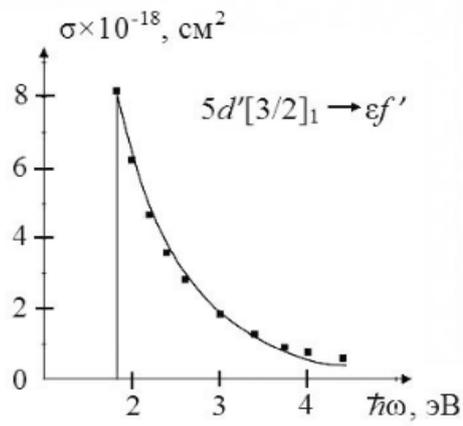


Рис. 1 Сечения фотоионизации Хе.

Автор выражает благодарность А.Ю. Гавриловой, М.Е. Кули-заде и Р.А. Мироновой за помощь в работе.

Библиографический список

1. Суржиков С.Т. Оптические свойства газов и плазмы. — М.: Из-во МГТУ им. Н.Э.Баумана, 2004. - 575 с.
2. Физико-химическая кинетика и термодинамика. Справочник / Под ред. Г.Г.Черного и С.А. Лосева. Том 2. — М.: НИЦ механики, 2002. - 368 с.
3. Суржиков С.Т. Тепловое излучение газов и плазмы. - М.: Из-во МГТУ им. Н.Э.Баумана, 2004. - 546 с.
4. Гаврилова А.Ю., Киселёв А.Г., Скороход Е.П. Диаграммы метаравновесных состояний тяжёлых инертных газов // Теплофизика высоких температур. 2014. Т. 52. №2. С.174-185.
5. Справочник констант элементарных процессов с участием атомов, ионов, электронов, фотонов. - С-Пб.: Санкт-Петербургский государственный университет, 1994. - 336 с.
6. Грим Г. Спектроскопия плазмы. - М.: Атомиздат, 1969. - 452 с.
7. Скороход Е.П. Оптические свойства низкотемпературной ксеноновой плазмы: Дисс. канд. ф.-м.н. М: 1983.
8. Скороход Е.П. Спектроскопические методы исследования физико-химических и тепловых процессов в плазменных устройствах: Дисс. доктора техн. наук. М.: 2003.

9. Киселёв А.Г., Скороход Е.П. Многоконфигурационное приближение и матрица плотности // Труды МАИ, 2011, № 49: <https://www.mai.ru/science/trudy/published.php?ID=28183>
10. Семиохин И.А. Элементарные процессы в низкотемпературной плазме. - М.: Изд-во МГУ, 1988. - 142 с.
11. Grechukhin D.P., Karpushkina, E.I. // J. Nucl. Energy, Part C. V.6. 1964. pp. 631.
12. Методы исследования плазмы / (Под ред. Лохте-Хольтгревена). - М.: Мир, 1971.— 552 с.
13. URL: <http://physics.nist.gov>; Atomic Physics; Atomic Spectra Database.
14. Гаврилова А.Ю., Скороход Е.П. Сечения и константы скоростей плазмохимических реакций инертных газов. - М.: Из-во МАИ, 2011. - 192 с.
15. Войницкий С.О., Скороход Е.П. Расчёт заселённостей аргона в проточной дуге // Труды МАИ, 2012, № 50: <http://www.mai.ru/science/trudy/published.php?ID=28694>
16. Гаврилова А.Ю., Кули-заде М.Е. Скороход Е.П. Распределения возбуждённых состояний атомов в плазменной струе аргона // Труды МАИ, 2012, № 50: <http://www.mai.ru/science/trudy/published.php?ID=28604>
<http://www.mai.ru/science/trudy/published.php?ID=28604>
17. Гидаспов В.Ю., Москаленко О.А. Численное моделирование инициирования детонации в керосино-воздушной газочапельной смеси падающей ударной волной // Труды МАИ, 2016, № 90: <http://www.mai.ru/science/trudy/published.php?ID=74647>

18. Гидаспов В.Ю. Численное моделирование стационарных детонационных волн в смеси частиц алюминия с воздухом // Труды МАИ, 2011, № 49:
http://www.mai.ru/science/trudy/published.php?ID=28605&PAGEN_2=3

19. Гидаспов В.Ю. Численное моделирование одномерного стационарного равновесного течения в детонационном двигателе // Труды МАИ, 2015, № 83:
<http://www.mai.ru/science/trudy/published.php?ID=61826>