

ПЕРЕХОДЫ МЕЖДУ КОМПОНЕНТАМИ ТОНКОЙ СТРУКТУРЫ В He И He-ПОДОБНЫХ ИОНАХ ПРИ СТОЛКНОВЕНИЯХ С ПРОТОНАМИ

Д. А. Кондратьев^{a,b*}, И. Л. Бейгман^{a,b}

^a Московский физико-технический институт
141704, Долгопрудный, Московская обл., Россия

^b Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
119991, Москва, Россия

Поступила в редакцию 28 января 2010 г.

Рассмотрены сечения переходов между компонентами тонкой структуры триплетных уровней с $n = 2, 3$ в He и He-подобных ионах при столкновении с протонами. Специфика задачи состоит в присутствии виртуального уровня, связанного с компонентами мультиплетно-разрешенными переходами. В результате в сечении при средних скоростях столкновения возникает пик, величина которого в ряде случаев значительно превышает сечение перехода при столкновениях с электронами. Приведены расчеты сечений методом сильной связи для He и ионов C^{4+} , Fe^{24+} .

1. ВВЕДЕНИЕ

Переходы в атомах и ионах при столкновениях с тяжелыми заряженными частицами (протонами, дейтронами, α -частицами и т. п.) могут играть существенную роль в распределении населенностей уровней и интенсивностей спектральных линий в плазме. Для переходов между компонентами тонкой структуры (с малыми энергиями перехода) соответствующие скорости переходов могут быть сравнимы и даже больше, чем для переходов, вызванных столкновениями с электронами. Дипольное приближение для сечений переходов при столкновении с заряженными частицами было рассмотрено в работе [1]. Расчеты для переходов без изменения главного квантового числа для $n = 2-4$ в He и He-подобных ионах в борновском приближении с учетом нормировки выполнены в работе [2]. В работах [3, 4] были рассмотрены возбуждение и ионизация He из метастабильных состояний $2^1, 3S$ при столкновениях с протонами. Расчеты сечений переходов, вызванных столкновениями с тяжелыми частицами при больших скоростях, были выполнены в работе [5] в борновском и глауберовском приближениях. Ступенчатые переходы в He с $\Delta n = 0$ «возбуждения через перезарядку»

на основе адиабатического базиса были рассмотрены в работах [6, 7]. В статье [8] были исследованы переходы между термами с $n = 3$ в атоме He и приведено сравнение метода сильной связи с результатами [6, 7]. Обзор расчетов методом сильной связи представлен в работе [9]. Переходы между компонентами тонкой структуры возбужденных состояний водородоподобных ионов с $n = 2$ были рассмотрены в статье [10].

Для состояний в He и He-подобных ионах LS -связь оправдана лишь для $l < 3$. Состояния с $l > 2$ (включая $1s 4f$) описываются jj -связью [11]. Поскольку скорости дипольных переходов с $\Delta n = 0$ очень велики, это означает, что распределение по j при заданном n будет практически больцмановским. Это утверждение распространяется и на состояния $1s ns$, $1s np$, $1s nd$, ($n > 3$), поскольку все они связаны друг с другом и с состояниями $1s nl$ ($n > 3$, $l > 2$) цепочкой дипольных переходов, и «синглет-триплетной стены» нет. Поэтому особый интерес представляют столкновительные переходы между компонентами тонкой структуры уровней с $n = 2, 3$, для которых распределение по j определяется, в основном, скоростями этих переходов и вероятностями радиационных распадов в основное состояние. Другая специфическая особенность рассматриваемой проблемы состоит в присутствии

*E-mail: dkondr@sci.lebedev.ru

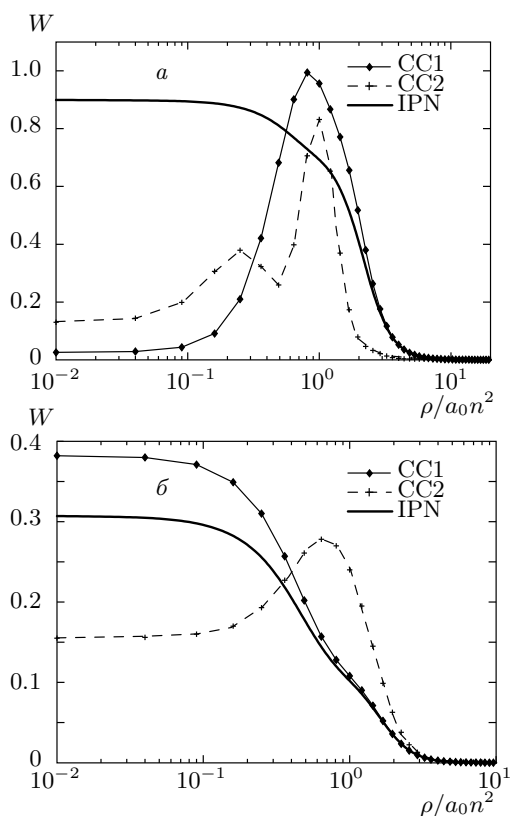


Рис.1. Вероятности перехода $2^3P_0-2^3P_2$ в He. CC1, CC2 — вычисления методом сильной связи для системы уровней соответственно 2^3P_J и $2^3S-2^3P_J$, IPN — приближение Борна с нормировкой. $v/v_0 = 0.224$ (а), 1 (б)

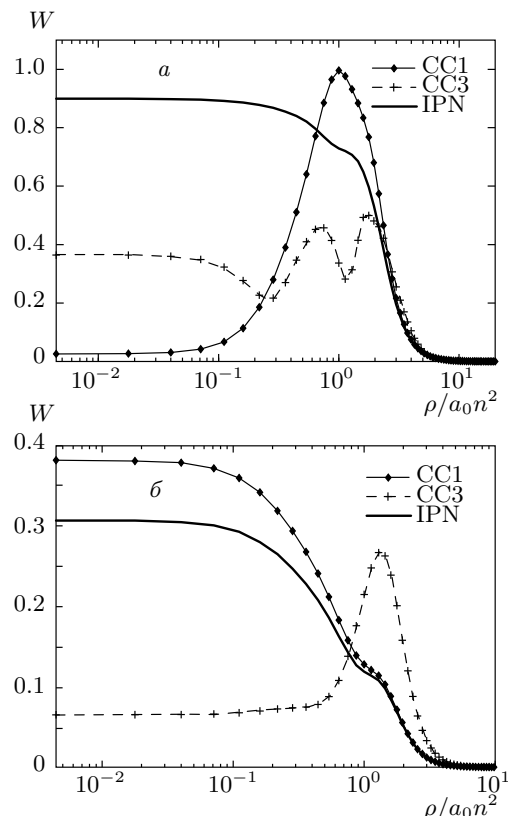


Рис.2. Вероятности перехода $3^3P_0-3^3P_2$ в He. CC1, CC3 — вычисления методом сильной связи для системы уровней соответственно 3^3P_J и $3^3S-3^3P_J-3^3D$, IPN — приближение Борна с нормировкой. $v/v_0 = 0.224$ (а), 1 (б)

виртуального уровня, связанного с компонентами мультиплета дипольно-разрешенными переходами.

В данной работе в рамках метода сильной связи рассматриваются сечения переходов между компонентами тонкой структуры триплетных уровней с $n = 2, 3$ в He и He-подобных ионах при столкновении с протонами на примере атома He и ионов C^{4+} , Fe^{24+} . Виртуальный уровень приводит к появлению широкого максимума при средних скоростях столкновения. При больших скоростях справедливо борновское приближение. Все расчеты сделаны в представлении параметра столкновения. Вычисления проводились с помощью программы АТСС, являющейся дополнением к программе АТОМ [12]. Используется система атомных единиц ($e = \hbar = m_e = 1$) с единицей Ry для энергии и πa_0^2 для сечений, где a_0 — боровский радиус. Мы пользуемся следующей сокращенной записью:

$$[j_1 j_2 j_3 \dots] = (2j_1 + 1)^{1/2} (2j_2 + 1)^{1/2} (2j_3 + 1)^{1/2} \dots$$

2. ОСНОВНЫЕ ФОРМУЛЫ

В представлении параметра столкновения атом или ион («мишень») рассматривается как квантовая система, а налетающая частица — как точечный заряд Z_1 ,двигающийся по классической траектории. Возмущением является электростатическое взаимодействие $\hat{V} = Z_1/|\mathbf{R} - \mathbf{r}|$ между оптическим электроном атома или иона и налетающей частицей. Здесь \mathbf{R} и \mathbf{r} — радиусы-векторы соответственно налетающей частицы и атомного электрона. Траектория $\mathbf{R}(t)$ налетающей частицы при расчетах предполагается прямолинейной, $\mathbf{R}(t) = \boldsymbol{\rho} + \mathbf{v}t$, где \mathbf{v} — скорость частицы, $\boldsymbol{\rho}$ — параметр удара. Сечение, вероятность и амплитуда перехода связаны соотношением

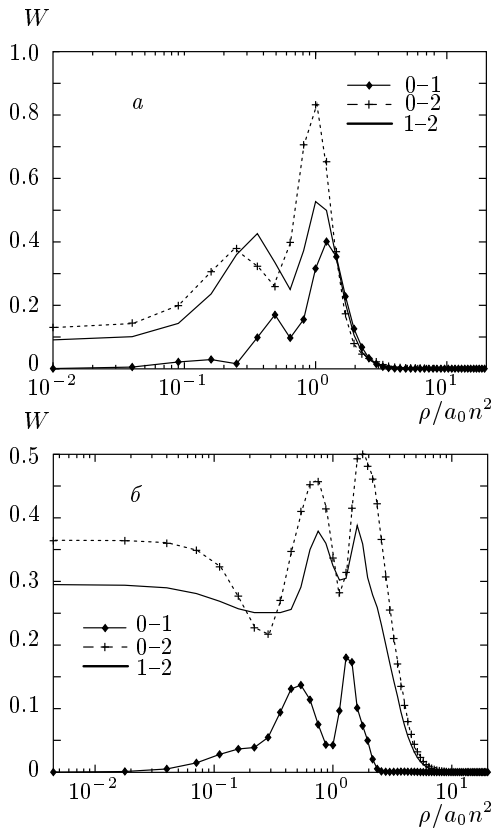


Рис. 3. Вероятности переходов $2^3 P_J - 2^3 P_{J'}$ (а) и $3^3 P_J - 3^3 P_{J'}$ (б) в He. Вычисления методом сильной связи для системы уровней $2^3 S - 2^3 P_J$ и $3^3 S - 3^3 P_J - 3^3 D$. Вероятность запрещенного перехода 0-1 умножена на 10. $v/v_0 = 0.224$

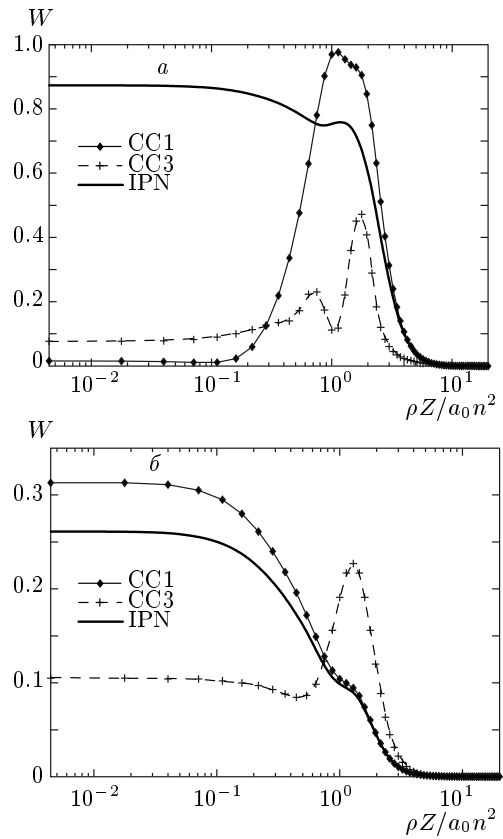


Рис. 4. Вероятности перехода $3^3 P_0 - 3^3 P_2$ в Fe^{24+} . CC1, CC3 — вычисления методом сильной связи для системы уровней соответственно $3^3 P_J$ и $3^3 S - 3^3 P_J - 3^3 D$, IPN — приближение Борна с нормировкой. $v/v_0 Z = 0.008$ (а), 0.044 (б)

$$\sigma_{01}(v) = 2\pi \int_0^\infty W_{01}(\rho, v) \rho d\rho, \quad (1)$$

$$W_{01}(\rho, v) = |a_{10}(+\infty)|^2.$$

Для расчета столкновительного возбуждения тяжелыми частицами использовались два подхода: борновское приближение с нормировкой и приближение сильной связи.

2.1. Метод Борна с нормировкой

В борновском подходе рассматриваются только начальное и конечное состояния. Вероятность и амплитуда перехода $0 \rightarrow 1$ в рамках нестационарной теории возмущений равны

$$W_{01}^B = aa^*, \quad a = -i \int_{-\infty}^\infty V_{01}(\mathbf{R}(t)) \exp(i\omega t) dt. \quad (2)$$

Здесь $V_{01}(t)$ и $\omega = E_0 - E_1$ — соответственно матричный элемент и частота перехода. Мы предполагаем, что атом описывается схемой SL -связи, поэтому задача сводится к взаимодействию атома в состоянии γSLJ с внешним полем. Ось z направим по скорости \mathbf{v} . Взаимодействие \hat{V} — одноэлектронный оператор по координатам атомных электронов, сохраняющий спин атома. Матричный элемент такого оператора,

$$V_{01}(t) = \left\langle \gamma_0 J_0 M_0 \left| \hat{V} \right| \gamma_1 J_1 M_1 \right\rangle = \left\langle \gamma_0 J_0 M_0 \left| \frac{Z_1}{\mathbf{R} - \mathbf{r}} \right| \gamma_1 J_1 M_1 \right\rangle,$$

можно записать в виде

$$V_{01}(t) = \sum_{\kappa\mu} \frac{\zeta_\kappa(\mathbf{R})}{R} Y_{\kappa\mu}^*(\mathbf{R}) \beta_{\kappa\mu}(JM) \times (-1)^{l_0} A M_{0\kappa\kappa}(L_c l L) \mathcal{M}_{0\kappa\kappa}(SLJ) \delta_{S_0 S_1}, \quad (3)$$

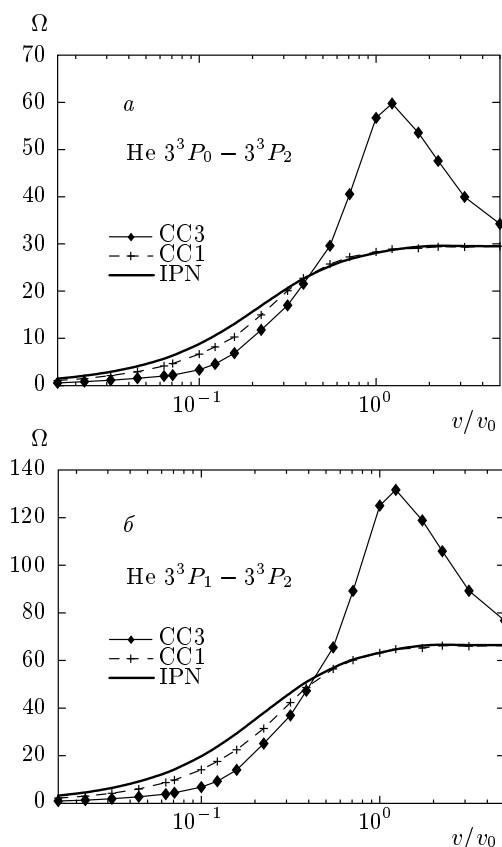


Рис. 5. Силы столкновения протонным ударом в He. CC1, CC3 — вычисления методом сильной связи для системы уровней соответственно 3^3P_J и $3^3S-3^3P_J-3^3D$, IPN — приближение Борна с нормировкой

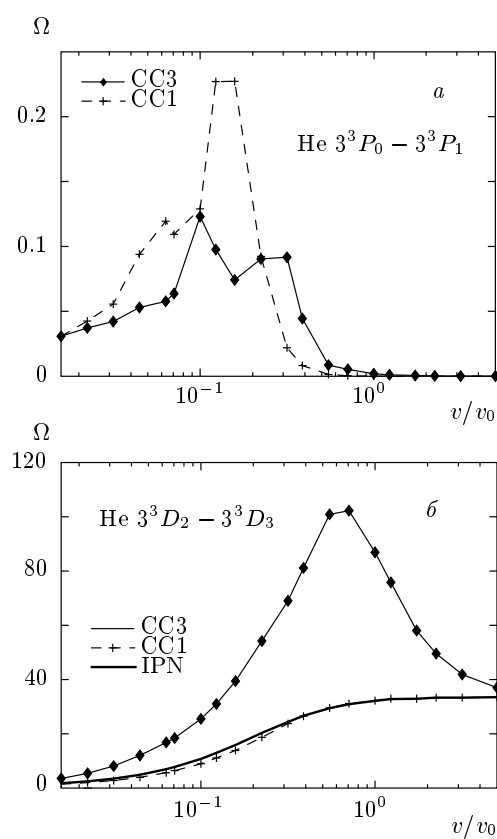


Рис. 6. Силы столкновения протонным ударом в He. а) CC1, CC3 — вычисления методом сильной связи для системы уровней 3^3P_J и $3^3S-3^3P_J-3^3D$. б) CC1, CC3 — вычисления методом сильной связи для системы уровней 3^3D_J и $3^3S-3^3P-3^3D_J$, IPN — приближение Борна с нормировкой

$$\beta_{\kappa\mu}(JM) = \sqrt{\frac{4\pi}{2\kappa+1}} (-1)^{J_0-M_0} \begin{pmatrix} J_0 & \kappa & J_1 \\ -M_0 & \mu & M_1 \end{pmatrix}.$$

Здесь κ — мультипольность, μ — ее проекция, $Y_{\kappa\mu}$ — сферическая функция,

$$Y_{\kappa\mu}(\mathbf{R}) = \Theta_{\kappa\mu}(\theta) \frac{e^{i\mu\varphi}}{\sqrt{2\pi}},$$

$$\theta = \arccos \frac{z}{\sqrt{z^2 + \rho^2}}, \quad z = vt,$$

$\zeta_\kappa(R)$ — радиальная часть матричного элемента, которая имеет следующий вид:

$$\zeta_\kappa(R) = [l_0 l_1] \begin{pmatrix} l_0 & \kappa & l_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times \\ \times Z_1 R \int \mathfrak{R}_{n_1 l_1}^* \mathfrak{R}_{n_0 l_0} \frac{r^\kappa}{r^{\kappa+1}} r^2 dr,$$

где \mathfrak{R} — радиальные функции атома, а через $r_<, r_>$ обозначены меньший и больший из модулей векторов \mathbf{r} и \mathbf{R} . Функция угловых моментов $\mathcal{M}_{q\kappa v}$ выражается через $9j$ -символ:

$$\mathcal{M}_{q\kappa v}(cba) \equiv \mathcal{M}_{q\kappa v}(c_0 b_0 a_0 - c_1 b_1 a_1) = \\ = [a_0 a_1 \kappa] \begin{Bmatrix} c_0 & c_1 & q \\ b_0 & b_1 & \kappa \\ a_0 & a_1 & v \end{Bmatrix}.$$

Коэффициент $A = 1$ для переходов, не затрагивающих оболочки эквивалентных электронов. Для перехода из оболочки l^m коэффициент $A = \sqrt{m} G_{S_c L_c}^{S L}$, где $G_{S_c L_c}^{S L}$ — генеалогический коэффициент.

Вероятность перехода, полученная в первом порядке теории возмущений (борновское приближение), пропорциональна квадрату взаимодействия и может превосходить единицу. Это наиболее существенно в области малых расстояний между атомом

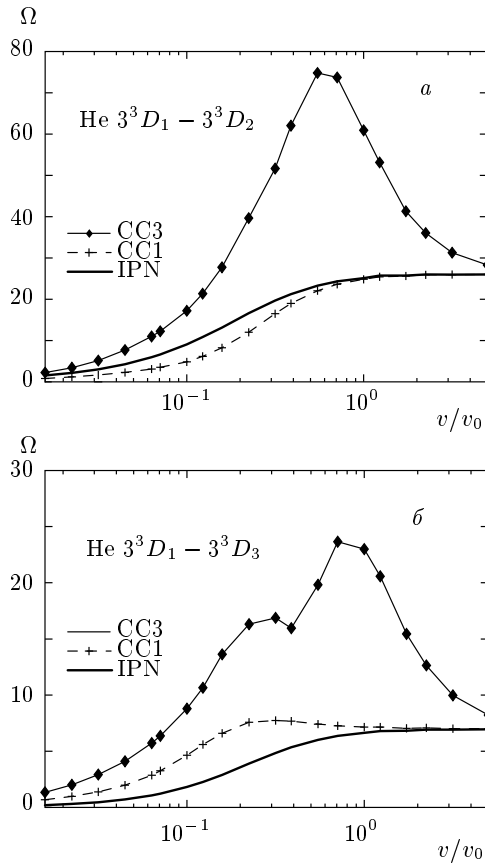


Рис. 7. Силы столкновения протонным ударом в He. CC1, CC3 — вычисления методом сильной связи для системы уровней соответственно 3^3D_J и $3^3S-3^3P-3^3D_J$, IPN — приближение Борна с нормировкой

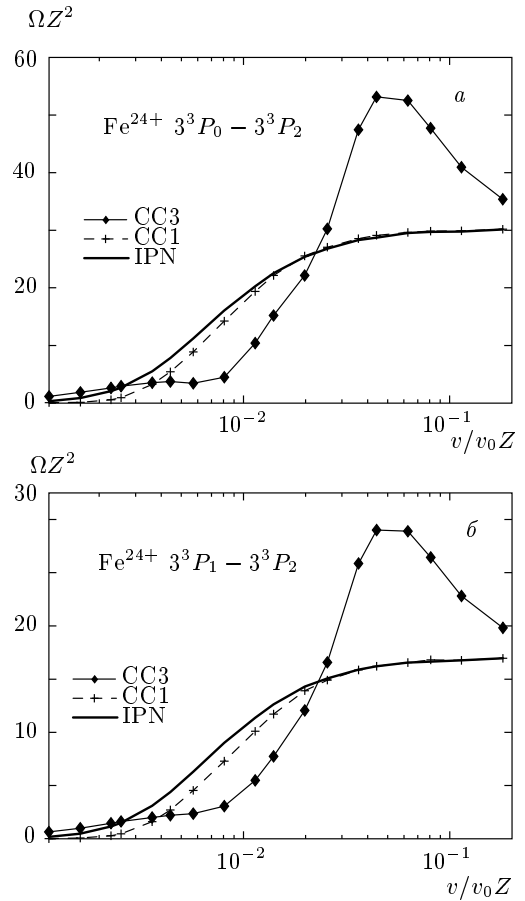


Рис. 8. Силы столкновения протонным ударом в Fe^{24+} . CC1, CC3 — вычисления методом сильной связи для системы уровней соответственно 3^3P_J и $3^3S-3^3P_J-3^3D$, IPN — приближение Борна с нормировкой

(или ионом) и налетающей частицей. Для устранения этого недостатка применяется процедура нормировки. Она заключается в том, что вероятности ограничиваются единицей. В настоящей работе это делается с помощью следующей формулы для нормированной вероятности (соответствующей одноканальной нормировке):

$$W_{\gamma_0 \gamma_1}^N(\rho) = \frac{W_{\gamma_0 \gamma_1}^B(\rho)}{1 + W_{\gamma_0 \gamma_1}^B(\rho)}. \quad (4)$$

Эффект нормировки особенно важен при малых энергиях столкновения. С увеличением как параметра столкновения ρ , так и скорости v он перестает быть существенным.

2.2. Уравнения сильной связи в представлении параметра столкновения

В представлении параметра столкновения волновая функция атома в поле налетающей частицы может быть записана как линейная комбинация невозмущенных волновых функций атома:

$$\Psi_n(t) = \sum_{\gamma} \bar{a}_{\gamma}(t) \psi_{\gamma}(r).$$

Здесь γ обозначает состояние, характеризуемое определенным набором квантовых чисел. Подставляя это разложение в уравнение Шредингера, можно получить систему уравнений сильной связи:

$$i \frac{\partial \bar{a}_{\gamma}}{\partial t} = E_{\gamma} \bar{a}_{\gamma} + \sum_{\gamma'} V_{\gamma \gamma'} \bar{a}_{\gamma'},$$

$$V_{\gamma \gamma'} = \langle \gamma | \hat{V} | \gamma' \rangle.$$

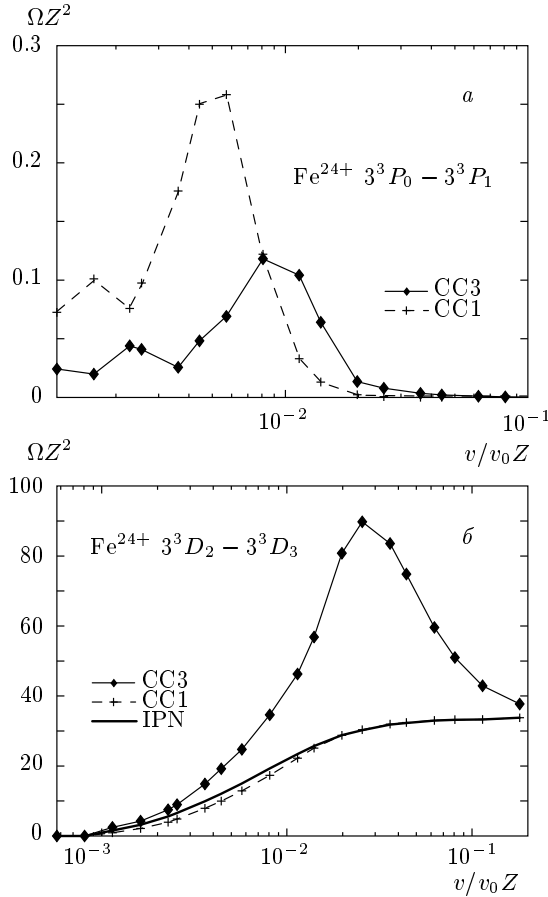


Рис. 9. Силы столкновения протонным ударом в Fe^{24+} . а) CC1, CC3 — вычисления методом сильной связи для системы уровней $3^3 P_J$ и $3^3 S-3^3 P_J-3^3 D$. б) CC1, CC3 — вычисления методом сильной связи для системы уровней $3^3 D_J$ и $3^3 S-3^3 P-3^3 D_J$, IPN — приближение Борна с нормировкой

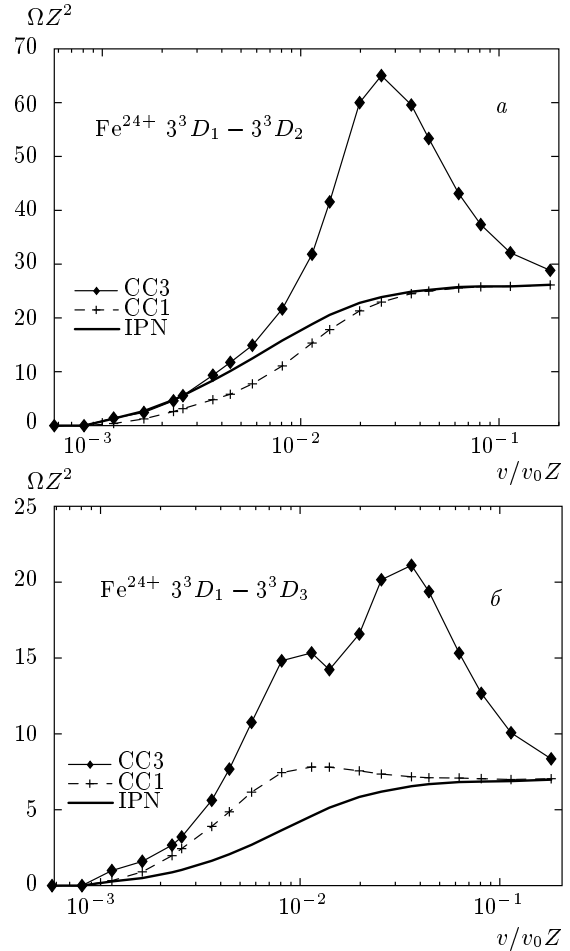


Рис. 10. Силы столкновения протонным ударом в Fe^{24+} . CC1, CC3 — вычисления методом сильной связи для системы уровней соответственно $3^3 D_J$ и $3^3 S-3^3 P-3^3 D_J$, IPN — приближение Борна с нормировкой

Для того чтобы найти вероятность перехода, необходимо найти решение с начальными условиями

$$\bar{a}_\gamma(-\infty) = \delta_{\gamma\gamma_0}.$$

После замены $\bar{a}_\gamma = a_\gamma \exp(-iE_\gamma t)$, $\omega_{\gamma\gamma'} = E_\gamma - E_{\gamma'}$ уравнения сильной связи принимают вид

$$i \frac{\partial a_\gamma}{\partial t} = \sum_{\gamma'} V_{\gamma\gamma'} \exp(i\omega_{\gamma\gamma'} t) a_{\gamma'}. \quad (5)$$

В наших расчетах мы пренебрегали диагональными членами $V_{\gamma\gamma}$. Причины, по которым это можно сделать, изложены в работе [13]. Набор квантовых чисел γ удобно представить в форме $\chi\xi$, где набор χ определяет группу начальных (или конечных) состояний, а ξ включает все прочие квантовые числа (например, магнитные квантовые числа). Матрица

решений $a_{\gamma\gamma_0}$ определяется с помощью $g(\chi_0)$, начальных условий $a_\gamma(-\infty) = \delta_{\gamma\gamma_0}$ и отвечает всевозможным значениям ξ_0 при фиксированном наборе χ_0 . Здесь $g(\chi_0)$ — статистический вес состояния χ_0 . Матрица решений имеет размерность $N \times g(\chi_0)$, где N — число базисных состояний, равное числу уравнений сильной связи. Амплитуда $a_{\gamma\gamma_0}$ соответствует переходу из начального состояния $\chi_0\xi_0$ в состояние $\chi_1\xi_1$. Вероятность перехода $\chi_0 \rightarrow \chi_1$ равна

$$W_{01} = W_{\chi_0\chi_1} = \frac{1}{g(\chi_0)} \sum_{\xi_1\xi_0} |a_{\gamma_1\gamma_0} (+\infty)|^2. \quad (6)$$

В борновском приближении

Таблица 1. Сечения переходов между компонентами тонкой структуры уровней 2^3P , 3^3P , 3^3D в He. Приведены величины $g_0\sigma/\pi a_0^2$ в форме мантиссы и десятичного порядка

$E, \text{эВ}$	5.00+0	1.00+1	2.00+1	4.00+1	8.00+1	1.00+2	2.00+2	3.00+2	5.00+2	1.00+3
v/v_0	1.58-2	2.24-2	3.16-2	4.47-2	6.33-2	7.08-2	1.00-1	1.23-1	1.58-1	2.24-1
Переходы										
$2p \ ^3P_1-^3P_3$	3.79+1	3.15+1	2.13+1	1.18+1	8.58+0	7.81+0	3.97+0	2.04+0	1.39+0	9.79-1
$\ ^3P_1-^3P_5$	3.23+2	2.01+2	1.29+2	7.81+1	4.51+1	3.88+1	2.52+1	2.14+1	1.88+1	1.59+1
$\ ^3P_3-^3P_5$	8.67+2	5.70+2	3.85+2	2.58+2	1.74+2	1.52+2	1.03+2	8.12+1	5.94+1	3.93+1
$3p \ ^3P_1-^3P_3$	1.23+2	7.41+1	4.21+1	2.65+1	1.44+1	1.27+1	1.23+1	6.45+0	2.97+0	1.80+0
$\ ^3P_1-^3P_5$	2.23+3	1.64+3	1.14+3	7.71+2	4.98+2	4.37+2	3.32+2	3.02+2	2.75+2	2.35+2
$\ ^3P_3-^3P_5$	3.96+3	2.74+3	1.93+3	1.38+3	9.64+2	8.80+2	6.84+2	6.13+2	5.63+2	5.00+2
$3d \ ^3D_3-^3D_5$	8.91+3	6.81+3	5.14+3	3.85+3	2.74+3	2.44+3	1.72+3	1.41+3	1.11+3	7.90+2
$\ ^3D_3-^3D_7$	5.37+3	4.00+3	2.93+3	2.05+3	1.43+3	1.27+3	8.79+2	7.04+2	5.46+2	3.25+2
$\ ^3D_5-^3D_7$	1.42+4	1.08+4	8.12+3	6.02+3	4.20+3	3.68+3	2.55+3	2.05+3	1.58+3	1.08+3
$E, \text{эВ}$	2.00+3	3.00+3	6.00+3	1.00+4	2.00+4	3.00+4	6.00+4	1.00+5	2.00+5	5.00+5
v/v_0	3.16-1	3.88-1	5.48-1	7.08-1	1.00+0	1.23+0	1.73+0	2.24+0	3.16+0	5.00+0
Переходы										
$2p \ ^3P_1-^3P_3$	7.05-1	3.66-1	6.76-2	2.15-2	5.06-3	2.01-3	3.56-4	9.06-5	1.31-5	9.35-7
$\ ^3P_1-^3P_5$	1.58+1	1.70+1	1.63+1	1.24+1	6.73+0	4.36+0	1.97+0	1.09+0	4.98-1	1.85-1
$\ ^3P_3-^3P_5$	3.30+1	3.26+1	3.13+1	2.50+1	1.42+1	9.37+0	4.31+0	2.41+0	1.11+0	4.15-1
$3p \ ^3P_1-^3P_3$	9.18-1	2.95-1	2.85-2	1.05-2	1.83-3	7.22-4	1.54-4	4.46-5	7.26-6	5.69-7
$\ ^3P_1-^3P_5$	1.70+2	1.43+2	9.86+1	8.09+1	5.67+1	3.95+1	1.79+1	9.48+0	4.00+0	1.37+0
$\ ^3P_3-^3P_5$	3.70+2	3.14+2	2.18+2	1.78+2	1.25+2	8.70+1	3.97+1	2.11+1	8.94+0	3.07+0
$3d \ ^3D_3-^3D_5$	5.17+2	4.12+2	2.49+2	1.47+2	6.09+1	3.51+1	1.38+1	7.18+0	3.13+0	1.13+0
$\ ^3D_3-^3D_7$	1.69+2	1.06+2	6.60+1	4.72+1	2.30+1	1.36+1	5.16+0	2.52+0	9.99-1	3.29-1
$\ ^3D_5-^3D_7$	6.91+2	5.39+2	3.36+2	2.04+2	8.69+1	5.01+1	1.94+1	9.87+0	4.19+0	1.48+0

$$W_{01}^B = W_{\chi_0 \chi_1}^B = \frac{1}{g(\chi_0)} \times \sum_{\xi_1 \xi_0} \left| \int_{-\infty}^{\infty} V_{\gamma_1 \gamma_0}(t) \exp(i\omega_{\gamma_1 \gamma_0} t) dt \right|^2. \quad (7)$$

После замены $a_\gamma \rightarrow \tilde{a}_\gamma \exp(iM_\gamma \varphi)$ вследствие аксиальной симметрии системы зависимость от φ исчезает. Подставляя выражение для матричного элемента, получаем окончательную форму уравнений сильной связи:

$$i \frac{d\tilde{a}_{\gamma\gamma_0}}{dt} = \sum_{\gamma'} \sum_{\kappa\mu} q_{\kappa}^{\gamma\gamma'} \Theta_{\kappa\mu}(\theta) \beta_{\kappa\mu} (-1)^l \frac{\zeta_{\kappa}^{\gamma\gamma'}(R)}{R} \times \exp(i\omega_{\gamma\gamma'} t) \tilde{a}_{\gamma'\gamma_0}, \quad (8)$$

$$\tilde{a}_{\gamma\gamma_0}(-\infty) = \delta_{\gamma\gamma_0}.$$

Система уравнений сильной связи определяет зависимость амплитуды вероятности каждого канала от всех прочих. Это означает, что если мы говорим о переходе между состояниями i и f , то можно говорить о прямом канале $i \rightarrow f$ и множестве ступенчатых каналов $i \rightarrow j \rightarrow \dots \rightarrow f$. Отметим, что решения получаются автоматически нормированными. Подробнее роль ступенчатого механизма, а также роль нормировки, будут рассмотрены далее.

При расчетах использовался комплекс программ АТСС-АТОМ [12]. Полуэмпирические волновые функции состояний γJ находились путем решения радиального уравнения Шредингера с потенциалом

Таблица 2. Сечения переходов между компонентами тонкой структуры уровней 2^3P , 3^3P , 3^3D в C^{4+} . Приведены величины $g_0\sigma Z^4/\pi a_0^2$ в форме мантиссы и десятичного порядка

$E, \text{эВ}$	5.00+0	1.00+1	2.00+1	4.00+1	8.00+1	1.00+2	2.00+2	3.00+2	5.00+2	1.00+3
vZ/v_0	2.95-3	4.17-3	5.89-3	8.33-3	1.18-2	1.32-2	1.86-2	2.28-2	2.95-2	4.17-2
Переходы										
$2p \ ^3P_1-^3P_3$	1.24+3	7.53+2	5.47+2	3.91+2	2.26+2	1.96+2	1.17+2	5.98+1	3.59+1	2.54+1
$\ ^3P_1-^3P_5$	9.28+3	5.68+3	3.13+3	1.95+3	1.17+3	1.01+3	6.76+2	5.84+2	5.19+2	4.37+2
$\ ^3P_3-^3P_5$	2.53+4	1.59+4	1.02+4	6.66+3	4.60+3	4.07+3	2.75+3	2.24+3	1.66+3	1.09+3
$3p \ ^3P_1-^3P_3$	4.07+3	2.88+3	1.47+3	1.22+3	6.39+2	6.64+2	5.15+2	3.42+2	1.96+2	7.36+1
$\ ^3P_1-^3P_5$	5.12+4	3.18+4	2.08+4	1.42+4	1.06+4	9.24+3	7.38+3	6.61+3	6.21+3	6.03+3
$\ ^3P_3-^3P_5$	1.26+5	7.92+4	5.11+4	3.58+4	2.61+4	2.34+4	1.70+4	1.44+4	1.25+4	1.28+4
$3d \ ^3D_3-^3D_5$	1.64+5	1.23+5	9.29+4	7.05+4	5.24+4	4.73+4	3.39+4	2.70+4	2.00+4	1.47+4
$\ ^3D_3-^3D_7$	1.02+5	7.69+4	5.65+4	4.13+4	3.04+4	2.76+4	2.02+4	1.67+4	1.34+4	8.56+3
$\ ^3D_5-^3D_7$	2.73+5	2.05+5	1.53+5	1.15+5	8.47+4	7.59+4	5.41+4	4.31+4	3.14+4	2.19+4
$E, \text{эВ}$	2.00+3	3.00+3	6.00+3	1.00+4	2.00+4	3.00+4	6.00+4	1.00+5	2.00+5	5.00+5
vZ/v_0	5.89-2	7.22-2	1.02-1	1.32-1	1.86-1	2.28-1	3.23-1	4.17-1	5.89-1	9.32-1
Переходы										
$2p \ ^3P_1-^3P_3$	2.10+1	1.17+1	2.19+0	6.94-1	1.73-1	7.09-2	1.30-2	3.37-3	4.93-4	3.56-5
$\ ^3P_1-^3P_5$	4.21+2	4.51+2	4.56+2	3.58+2	1.98+2	1.28+2	5.75+1	3.16+1	1.43+1	5.24+0
$\ ^3P_3-^3P_5$	8.98+2	8.70+2	8.62+2	7.11+2	4.14+2	2.74+2	1.26+2	6.98+1	3.18+1	1.17+1
$3p \ ^3P_1-^3P_3$	3.69+1	1.45+1	2.13+0	5.61-1	8.29-2	3.38-2	7.63-3	2.26-3	3.70-4	2.89-5
$\ ^3P_1-^3P_5$	5.05+3	4.25+3	3.00+3	2.41+3	1.71+3	1.21+3	5.52+2	2.90+2	1.20+2	4.01+1
$\ ^3P_3-^3P_5$	1.08+4	9.11+3	6.53+3	5.25+3	3.74+3	2.65+3	1.22+3	6.43+2	2.68+2	8.99+1
$3d \ ^3D_3-^3D_5$	1.08+4	9.28+3	6.45+3	4.10+3	1.81+3	1.06+3	4.19+2	2.16+2	9.30+1	3.31+1
$\ ^3D_3-^3D_7$	4.60+3	2.90+3	1.74+3	1.28+3	6.56+2	3.96+2	1.53+2	7.48+1	2.96+1	9.63+0
$\ ^3D_5-^3D_7$	1.52+4	1.25+4	8.69+3	5.66+3	2.55+3	1.50+3	5.85+2	2.97+2	1.25+2	4.33+1

$$U(r) = -\frac{1}{r}\zeta_c(r/\omega),$$

который вычислялся с помощью аналитических функций Слэтера. Энергетический параметр $\epsilon(nlSLJ)$ полагался равным экспериментальному значению энергии уровня (отсчитанной от границы ионизации), а масштабный коэффициент ω подбирался как собственное значение уравнения. Экспериментальные энергии уровней, необходимые для расчетов, были взяты из данных [14].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

3.1. Вероятности переходов

Мы рассматривали переходы между компонентами тонкой структуры внутри каждого из уровней

2^3P , 3^3P и 3^3D атома He и ионов C^{4+} , Fe^{24+} . Вычисления проводились методом сильной связи (8) и методом Борна с нормировкой (4). При решении уравнений сильной связи в качестве базиса для расчетов использовались системы уровней $2^3P_{0,1,2}$ (CC1), $3^3P_{0,1,2}$ (CC1), $3^3D_{1,2,3}$ (CC1), $2^3S-2^3P_{0,1,2}$ (CC2) и $3^3S-3^3P_{0,1,2}-3^3D_{1,2,3}$ (CC3). Дипольные переходы между компонентами тонкой структуры запрещены по четности, однако возможны квадрупольные переходы. Переходы $2^3P_0-2^3P_1$, $3^3P_0-3^3P_1$ запрещены в первом порядке теории возмущений (борновское приближение), поскольку для $\kappa = 2$ соответствующий j -символ

$$M_{0\kappa\kappa}(SLJ) \sim \left\{ \begin{matrix} J' & J & \kappa \\ L & L & S \end{matrix} \right\} \quad (9)$$

Таблица 3. Сечения переходов между компонентами тонкой структуры уровней 2^3P , 3^3P , 3^3D в Fe^{24+} . Приведены величины $g_0\sigma Z^4/\pi a_0^2$ в форме мантиссы и десятичного порядка

E , эВ	5.00+0	1.00+1	2.00+1	4.00+1	8.00+1	1.00+2	2.00+2	3.00+2	5.00+2	1.00+3
vZ/v_0	5.71-4	8.08-4	1.14-3	1.62-3	2.28-3	2.55-3	3.61-3	4.42-3	5.71-3	8.08-3
Переходы										
$2p\ ^3P_1-^3P_3$	3.76+3	3.22+3	4.78+3	2.13+3	5.19+3	4.70+3	2.09+3	1.04+3	4.35+2	2.14+2
$\ ^3P_1-^3P_5$	1.63+5	1.24+5	1.01+5	7.54+4	5.28+4	4.82+4	3.67+4	3.35+4	2.93+4	1.84+4
$\ ^3P_3-^3P_5$	3.46+5	2.71+5	2.18+5	1.61+5	1.18+5	1.09+5	9.15+4	9.65+4	8.36+4	4.97+4
$3p\ ^3P_1-^3P_3$	2.48+4	2.11+4	1.86+4	7.56+3	8.44+3	6.29+3	1.97+3	2.47+3	2.12+3	1.81+3
$\ ^3P_1-^3P_5$	1.39+6	1.13+6	8.96+5	7.07+5	5.05+5	4.49+5	2.72+5	1.91+5	1.05+5	6.87+4
$\ ^3P_3-^3P_5$	3.15+6	2.50+6	1.96+6	1.51+6	1.13+6	1.00+6	6.14+5	4.52+5	2.90+5	1.88+5
$3d\ ^3D_3-^3D_5$	0.00+0	0.00+0	1.08+6	9.29+5	8.90+5	8.54+5	7.19+5	6.02+5	4.58+5	3.32+5
$\ ^3D_3-^3D_7$	0.00+0	0.00+0	7.64+5	6.08+5	5.13+5	4.93+5	4.31+5	3.93+5	3.30+5	2.27+5
$\ ^3D_5-^3D_7$	0.00+0	0.00+0	1.88+6	1.61+6	1.44+6	1.37+6	1.14+6	9.82+5	7.58+5	5.30+5
E , эВ	2.00+3	3.00+3	6.00+3	1.00+4	2.00+4	3.00+4	6.00+4	1.00+5	2.00+5	5.00+5
vZ/v_0	1.14-2	1.40-2	1.98-2	2.55-2	3.61-2	4.42-2	6.26-2	8.08-2	1.14-1	1.81-1
Переходы										
$2p\ ^3P_1-^3P_3$	3.76+2	2.61+2	6.79+1	2.28+1	5.20+0	2.05+0	3.66-1	9.47-2	1.40-2	1.04-3
$\ ^3P_1-^3P_5$	7.24+3	4.80+3	5.67+3	5.60+3	3.82+3	2.71+3	1.36+3	7.95+2	3.79+2	1.44+2
$\ ^3P_3-^3P_5$	2.19+4	1.32+4	1.10+4	1.09+4	7.90+3	5.75+3	2.97+3	1.75+3	8.44+2	3.23+2
$3p\ ^3P_1-^3P_3$	8.02+2	3.27+2	3.44+1	1.21+1	2.61+0	1.09+0	2.36-1	6.88-2	1.14-2	9.07-4
$\ ^3P_1-^3P_5$	8.01+4	7.75+4	5.65+4	4.65+4	3.64+4	2.72+4	1.34+4	7.31+3	3.15+3	1.08+3
$\ ^3P_3-^3P_5$	1.69+5	1.58+5	1.23+5	1.02+5	7.94+4	5.94+4	2.95+4	1.62+4	7.02+3	2.42+3
$3d\ ^3D_3-^3D_5$	2.45+5	2.12+5	1.53+5	1.00+5	4.57+4	2.73+4	1.10+4	5.72+3	2.47+3	8.81+2
$\ ^3D_3-^3D_7$	1.18+5	7.26+4	4.23+4	3.10+4	1.62+4	9.92+3	3.91+3	1.94+3	7.75+2	2.55+2
$\ ^3D_5-^3D_7$	3.56+5	2.90+5	2.06+5	1.38+5	6.41+4	3.83+4	1.52+4	7.81+3	3.30+3	1.15+3

равен нулю. Учет ступенчатого механизма позволяет получить сечения этих переходов, которые оказываются аномально малы и при увеличении скорости столкновения убывают быстрее, чем $1/v^2$. В качестве иллюстрации на рис. 1–3 приведены вероятности переходов W в нейтральном He в зависимости от величины ρ/a_0n^2 (n — главное квантовое число) для двух значений скоростей столкновения (v_0 — скорость на борновской орбите). Скорости даются в системе центра масс. В области малых скоростей v и параметров столкновения ρ борновское приближение дает неоправданно большие значения вероятностей. Напротив, при больших ρ возмущение мало, поэтому применимо приближение Борна, и можно видеть хорошее согласие между результатами. Учет сильных дипольных каналов 2^3S-2^3P ,

3^3S-3^3P и 3^3P-3^3D приводит к появлению заметного пика в области промежуточных значений ρ при средних скоростях столкновения. Вероятность же, вычисленная в борновском приближении, при любых скоростях ведет себя монотонно.

Вероятность перехода $3^3P_0-3^3P_2$ для иона Fe^{24+} приведена на рис. 4. При взаимодействии с ионами большой кратности матричный элемент возмущения пропорционален $1/Z$ (Z — спектроскопический символ). Это приводит к увеличению (по ρ) области применимости борновского приближения. При переходе в область малых скоростей множитель $1/Z$ компенсируется уменьшением скорости и результаты качественно становятся аналогичными приведенным выше для He.

3.2. Сечения переходов

Множитель $1/v^2$ учитывается автоматически, если пользоваться силами столкновений $\Omega = g_0\sigma(v/v_0)^2$ (g_0 — статистический вес начального состояния). На рис. 5–7 приведены величины Ω для переходов $3^3P_J-3^3P_{J'}$ и $3^3D_J-3^3D_{J'}$ атома He как функции скорости. Нормированные борновские сечения практически совпадают во всей области энергий с результатами, полученными в рамках метода сильной связи с учетом только собственного канала (соответственно 3^3P_J и 3^3D_J). В то же время учет виртуальных дипольных каналов 3^3S-3^3P и 3^3P-3^3D , а значит ступенчатых переходов (например, $3^3P_J-3^3S-3^3P_{J'}$), приводит (так же как и для вероятностей переходов) к пику в зависимости силы столкновения от скорости. В области больших скоростей все методы должны давать результаты, совпадающие с борновскими. Как видно из рисунков, для нейтрального He это происходит при скоростях $v > 5v_0$. На рис. 8–10 приведены величины ΩZ^2 для переходов в ионе Fe^{24+} ($Z = 25$). Видно, что с точностью до сдвига в область малых скоростей силы столкновений качественно ведут себя, как в случае He. Выход на борновское приближение происходит при скоростях $v > 5v_0$ и не зависит от Z .

В табл. 1–3 приведены величины $g_0\sigma Z^4/\pi a_0^2$ для возбуждения переходов $nlSLJ \rightarrow n'l'SL'J'$ протонным ударом в He, C^{4+} и Fe^{24+} для $n = 2, 3$. В таблицах уровни обозначены в следующем виде: $nlgsLgJ$, где $g_S = 2S + 1$, $g_J = 2J + 1$. Например, состояние $2p^3P_0$ будет записано как $2p^3P_1$. Для записи чисел принята форма в виде мантиссы и десятичного порядка, например, $1.58 - 2 = 1.58 \cdot 10^{-2}$. Скорости и энергии относительного движения даны в системе центра масс.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Рассмотрены сечения переходов между компонентами тонкой структуры уровней 2^3P , 3^3P , 3^3D при столкновениях с протонами атома He и He-подобных ионов C^{4+} и Fe^{24+} . Исследованы эффекты нормировки, взаимодействия каналов и ступенчатого механизма возбуждения. Сравнение результатов позволяет сделать вывод о том, что борновское приближение применимо при скоростях

столкновений, удовлетворяющих условию $v > 5v_0$. В области $v \approx v_0$ силы столкновений для разрешенных переходов имеют пик, отсутствующий при расчете методом Борна. Приведены таблицы сечений переходов.

Авторы выражают благодарность Л. А. Вайнштейну и Д. В. Бородину за обсуждение работы, а также Л. Б. Переяславцу за помощь в оформлении.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Seaton, Proc. Phys. Soc. **79**, 1105 (1962).
2. И. Л. Бейгман, Д. В. Бородин, Л. А. Вайнштейн, Опт. и спектр. **95**, 533 (2003).
3. W. Fritch, Phys. Lett. A **158**, 227 (1991).
4. W. Taylor, K. I. Bell, and A. E. Kingston, J. Phys. B: Atom. Mol. Phys. **13**, 2983 (1980).
5. T. Igarashi and A. Shirai, Phys. Scr. T **62**, 95 (1996).
6. M. I. Chibisov, R. K. Janev, X. Urbain, and F. Brouillard, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **34**, 2631 (2001).
7. M. I. Chibisov, R. K. Janev, X. Urbain, and F. Brouillard, J. Phys. B: Atom. Mol. Opt. Phys. **35**, 5081 (2002).
8. D. Borodin, I. Beigman, L. Vainshtein, and A. Pospieszczyk, Phys. Scripta **74**, 464 (2006).
9. R. H. G. Reid, Adv. Atom. Mol. Phys. **25**, 251 (1989).
10. B. Zygelman and A. Dalgarno, Phys. Rev. A **35**, 4085 (1987).
11. M. Goto and T. Fujimoto, Prepr. NIFS-DATA-43 (1997).
12. V. P. Shevelko and L. A. Vainshtein, Atomic Physics for Hot Plasmas (1993).
13. I. I. Sobelman, L. A. Vainshtein, and E. A. Yukov, *Excitation of Atoms and Broadening of Spectral Lines*, Springer, New York (1995).
14. NIST Atomic Database online at <http://physics.nist.gov/>.