

# СТАТИСТИЧЕСКИЕ СКОРОСТИ ДИЭЛЕКТРОННОЙ РЕКОМБИНАЦИИ МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ ИОНОВ В ПЛАЗМЕ

*А. В. Демура<sup>a\*</sup>, Д. С. Леонтьев<sup>a</sup>, В. С. Лисица<sup>a,b</sup>, В. А. Шурьгин<sup>a</sup>*

*<sup>a</sup> Национальный исследовательский центр «Курчатовский институт»  
123182, Москва, Россия*

*<sup>b</sup> Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ»  
115409, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 29 декабря 2016 г.

Представлен общий аналитический вывод скоростного коэффициента диэлектронной рекомбинации многоэлектронных ионов в плазме на основе статистической теории атома в терминах пространственного распределения атомной электронной плотности. Проведены численные расчеты скоростей диэлектронной рекомбинации для сложных многоэлектронных ионов вольфрама в широком интервале изменения температуры плазмы, представляющие интерес для современных исследований по термоядерному синтезу. Результаты статистической теории сопоставлены с данными поуровневых кодов ADPAK, FAC, HULLAC и эксперимента. Рассмотрены различные статистические модели ДР на основе распределения Томаса–Ферми: интегральная и дифференциальная по орбитальным моментам ионного остова и захваченного электрона, а также модель Роста, являющаяся аналогом принципа Франка–Кондона в применении к атомным структурам. Статистический подход в силу своей универсальности и относительной простоты можно применять для экспрессной оценки скоростных коэффициентов диэлектронной рекомбинации при проведении комплексных расчетов параметров плазмы термоядерных установок. Использование статистических методов обеспечивает также получение данных для скоростей диэлектронной рекомбинации со значительно меньшими затратами вычислительных ресурсов по сравнению с существующими поуровневыми кодами.

DOI: 10.7868/S0044451017100145

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Процесс диэлектронной рекомбинации (ДР) играет важную роль в установлении ионизационного равновесия в астрофизической и лабораторной плазме [1–34]. В последнее время особенно активно проводится изучение процесса ДР сложных многоэлектронных ионов, который представляет интерес как в связи с использованием таких элементов как вольфрам в конструктивных элементах установок для исследования термоядерного синтеза с магнитным удержанием [13, 18, 21, 24–33], так и для исследований по астрофизике [25, 34]. Как известно [1–34], скорость диэлектронной рекомбинации выражается через сумму по разным реализациям коэффициентов ветвления, обусловленных конкуренцией процессов радиационного распада и автоионизации

дважды возбужденных состояний атомов или ионов. Такие поуровневые вычисления для многоэлектронных атомов или ионов достаточно сложны и трудоемки [1–15, 17–21, 23–34]. В то же время в применении к плазме термоядерных установок необходимы сложные вычисления транспорта и удержания частиц, которые сопровождаются параллельными расчетами ионизационного равновесия, кинетики заселения атомных уровней и переноса излучения, равновесия и баланса энергии [21, 24]. В этой связи естественно существует настоятельная потребность упрощения и ускорения вычислений ионизационного равновесия плазмы и кинетики заселения атомных уровней. Одним из путей такого упрощения является применение статистических методов [35], позволяющих как существенно облегчить процедуру получения нужных скоростных коэффициентов, так и выявить универсальные скейлинги этих процессов. В недавно опубликованных работах авторам удалось решить поставленную задачу в применении к процессам ионизации, возбуждения и радиацион-

\* E-mail: demura45@gmail.com

ного распада в рамках сформулированных статистических методов [36–40] для описания радиационных потерь плазмы термоядерных установок в широком диапазоне изменения температур и концентраций. Для замыкания системы уравнений ионизационного равновесия и атомной кинетики в статистическом подходе теперь необходимо развитие статистических методов расчета ДР, чему и посвящена настоящая работа.

## 2. СТРУКТУРНАЯ ФОРМУЛА ДЛЯ СКОРОСТНОГО КОЭФФИЦИЕНТА ДИЭЛЕКТРОННОЙ РЕКОМБИНАЦИИ

Диэлектронная рекомбинация — это двухстадийный процесс, в котором сначала при захвате электрона ионом с зарядом  $Z_i$  возникает дважды возбужденное состояние иона меньшей кратности  $Z_i - 1$  [7, 9]. Энергия этого состояния лежит выше порога однократной ионизации иона  $Z_i - 1$  [7, 9]. Это дважды возбужденное состояние иона  $Z_i - 1$  представляет собой возбужденное состояние  $i$  ионного остова  $Z_i$  и возбужденное состояние захваченного электрона, внешнего по отношению к остову с главным квантовым числом  $n$  и орбитальным моментом  $l$  [1–9]. На второй стадии процесса происходит радиационный распад дважды возбужденного состояния  $i, nl$ , при котором ионный остов  $Z_i$  переходит в невозбужденное состояние  $f$ , а внешний электрон остается в состоянии  $nl$  [7, 9]. Эта стадия процесса называется радиационной стабилизацией и завершает процесс диэлектронной рекомбинации [7, 9]. Дважды возбужденное состояние может также безызлучательно распасться в результате автоионизации, при которой ионный остов  $Z_i$  переходит из начального возбужденного состояния  $i$  в невозбужденное состояние  $f$ , передавая избыток энергии внешнему электрону в состоянии  $nl$ , который переходит в состояние в непрерывном спектре, приводя тем самым к ионизации иона  $Z_i - 1$  и образованию первоначального иона  $Z_i$  [1–9]. Если конечное состояние  $f$  ионного остова  $Z_i$  совпадает с начальным состоянием  $\alpha$  ионного остова перед электронным захватом, то принято говорить об упругом рассеянии, если же конечное состояние отличается от  $\alpha$ , то это различные неупругие каналы, для открытия которых необходимо удовлетворить определенным соотношениям между энергией налетающего электрона, энергией связи внешнего возбужденного захваченного электрона и разностью энергий конечного и начального состояний ионного остова [1–14].

Основываясь на самых общих представлениях об определении процесса диэлектронной рекомбинации, приведенных выше, можно выразить его скоростной коэффициент в виде суммы коэффициентов ветвления, связанных с конкурирующими каналами радиационного и автоионизационного распада дважды возбужденных состояний атомов или ионов [7]. Традиционно дважды возбужденное состояние маркируется одновременно возбужденным состоянием  $i$  атомного остова и квантовыми числами  $nl$  как  $i, nl$ . Обозначая квантовомеханическую вероятность радиационного распада дважды возбужденного состояния иона как  $W_R(i, nl; f, nl)$ , а скорость автоионизационного (безызлучательного) распада дважды возбужденного атомного энергетического уровня как  $W_a(i, nl; f)$  и используя принцип детального равновесия и уравнение Саха, искомое структурное выражение для скорости диэлектронной рекомбинации можно представить в виде [7]

$$Q_{DR}(T) = \frac{a_0^3}{2} \left( \frac{4\pi Ry}{T} \right)^{3/2} \times \sum_{inl,f} \frac{g_{inl}}{g_f} \exp\left(-\frac{E_{inl,f}}{T}\right) \frac{W_a(i, nl; f)W_R(i)}{W_R(i) + W_a(i, nl)}, \quad (1)$$

$$W_R(i) \equiv \sum_{f'} W_R(i, nl; f', nl),$$

$$W_a(i, nl) \equiv \sum_{f''} W_a(i, nl; f''),$$

где  $a_0$  — радиус Бора,  $2 Ry$  — атомная единица энергии,  $Z_i$  — заряд иона,  $g_{inl}, g_f$  — статистические веса дважды возбужденного состояния  $i, nl$  иона с зарядом  $Z_i - 1$  и ионного остова с зарядом  $Z_i$ ,  $E_{inl,f}$  — разность энергий дважды возбужденного состояния  $i, nl$  иона с зарядом  $Z_i - 1$  и состояния  $f$  ионного остова с зарядом  $Z_i$ ,  $T$  — температура электронов плазмы.

Во многих классических работах [1–9], посвященных ДР, для упрощения расчетов используется также водородоподобное приближение для описания энергии внешнего возбужденного электрона. Тогда считается [3, 6–9], что основной вклад в скорость ДР дают дважды возбужденные состояния, в которых внешний электрон достаточно слабо связан с возбужденным атомным остовом, и вследствие этого далеко расположен от ядра. Это приближение позволяет представить отношение статистических весов и экспоненциальный множитель в (1) в виде [1–9]

$$\frac{2(2l+1)g_i}{g_f} \exp\left(-\frac{\hbar\omega_{if}}{T} + \frac{Z_i^2 Ry}{n^2 T}\right),$$

где  $g_i$  — статистический вес возбужденного состояния ионного остова, а  $2(2l + 1)$  — статистический вес состояния  $nl$  внешнего возбужденного электрона [6, 9] с энергией связи  $-Z_i^2 \text{Ry} / n^2$ , а  $\omega_{if}$  — частота радиационного перехода  $i \rightarrow f$  в ионном остове. Естественным условием такого приближения будет  $n \gg l \gg 1$ . Очевидно, предполагается, что набор квантовых чисел  $f$  описывает стационарные невозбужденные состояния ионного остова, а  $i$  — возбужденные состояния.

Нужно отметить, что в таком традиционном представлении скоростного коэффициента ДР уже содержится предположение, что радиационный переход в ионном остове  $i \rightarrow f$  слабо подвержен влиянию внешнего возбужденного электрона и его можно не учитывать. Поэтому в вероятность радиационного перехода  $i, nl \rightarrow f, nl$  не входит информация о дальнейшей эволюции внешнего возбужденного электрона [7], что позволяет ее представить только как вероятность радиационного перехода в ионном остове  $W_R(i, nl; f, nl) \approx W_R(i; f)$ . Уже на этом этапе проявляется некая асимметрия рассмотрения, так как скоростной коэффициент процесса автоионизации сохраняет составную двухэлектронную структуру и соответствующее представление [6, 7].

В то же время современные расчеты диэлектронной рекомбинации с помощью поуровневых квантовомеханических кодов проводятся с учетом чрезвычайно разнообразных реализаций каскадов радиационных и автоионизационных распадов, когда состояния  $f'$  могут лежать и в континууме, а их релаксация должна описываться также с учетом дополнительных факторов ветвления (см. [13–15, 18, 25, 27–34]). Кроме этого, необходимо учитывать существенное влияние подбарьерных резонансов вблизи порогов ионизации (см. [26]). При этом число учитываемых состояний может быть очень велико. Например, в так называемом «железном проекте», который был посвящен вычислению сечений фотопоглощения, фотоионизации, ДР и непрозрачности спектров различных ионов железа, атомное строение которого намного проще чем у вольфрама, число учитываемых атомных состояний достигало нескольких порядков величины (см. [25]). Однако такое подробное поуровневое описание требует знания тонких деталей энергетической структуры различных электронных конфигураций и значительных затрат вычислительных ресурсов и, к сожалению, не может быть осуществлено универсально и единообразно. В то же время в рамках статистического подхода к ДР, развитие которого собственно и является целью настоящей рабо-

ты, удается достигнуть универсальности и единообразия в описании ДР. При этом статистический подход оказывается значительно менее ресурсозатратным и в силу своей универсальности более удобным для выяснения законов подобия описываемых элементарных процессов [36–40]. Это является его важным преимуществом при применении для генерации атомных данных и расчетов атомной кинетики совместно с комплексными плазменными кодами.

### 3. СТРУКТУРНАЯ ФОРМУЛА ДЛЯ СКОРОСТИ АВТОИОНИЗАЦИОННОГО РАСПАДА

Рассматривая соответствующий процессу автоионизации двухэлектронный переход под действием кулоновского потенциала межэлектронного взаимодействия в дипольном приближении, можно легко установить, что скорость автоионизационного распада пропорциональна произведению квадратов матричных элементов дипольных моментов переходов ионного остова и внешнего электрона, описывающих радиационную релаксацию ионного остова и ионизацию внешнего возбужденного электрона, которому была передана высвободившаяся энергия при переходе в ионном остове (см. [6–9]). Это позволяет выразить скорость безрадиационного процесса автоионизации  $W_a(i, nl; f)$  через произведение силы осциллятора радиационного перехода в ионном остове  $f_{fi}$  и сечения фотоионизации внешнего электрона, поглотившего энергию виртуального фотона от радиационной релаксации ионного остова, в виде (ср. с [6–9])

$$W_a(i, nl; f) = \frac{3}{4\pi} \omega_a \frac{\hbar c}{e^2} f_{fi} \frac{\omega_{if}^2}{\omega_a^2} \frac{1}{Z_i^2 a_0^2} \sigma_{ph}(nl, E) \quad (2)$$

при  $E = \hbar \omega_{if} - \frac{Z_i^2 \text{Ry}}{n^2}$ ,

где  $\sigma_{ph}(nl, E)$  — сечение фотоионизации внешнего по отношению к остову возбужденного электрона при поглощении виртуального фотона с частотой  $\omega_{if}$ ,  $\omega_a = me^4 / \hbar^3 = 2 \text{Ry} / \hbar$  — атомная единица частоты,  $e$ ,  $m$  — заряд и масса электрона,  $c$  — скорость света. Для описания этого сечения фотоионизации  $\sigma_{ph}(nl, E)$  мы применим результаты квазиклассического метода [41], что является допустимым в свете предполагаемого ниже применения статистической теории.

Квазиклассическое сечение фотоионизации на частоте  $\omega_{if}$  имеет вид (ср. [41])

$$\sigma_{ph}^{if}(nl, E) = \frac{4}{3} a_0^2 \frac{e^2}{\hbar c} \left( \frac{\omega_a}{\omega_{if}} \right)^2 \frac{1}{n^3} \frac{l^4 \omega_{if}}{3\omega_a} \times \left[ K_{2/3}^2 \left( \frac{\omega_{if} l^3}{3\omega_a Z_i^2} \right) + K_{1/3}^2 \left( \frac{\omega_{if} l^3}{3\omega_a Z_i^2} \right) \right] \quad (3)$$

при  $E = \hbar\omega_{if} - Z_i^2 \text{Ry} / n^2$  и очевидных предположениях о больших значениях  $n \gg l \gg 1$ . В формуле (3) и далее  $K_{2/3}(z)$ ,  $K_{1/3}(z)$  — функции Макдональда с дробным индексом [41].

В итоге приходим к традиционному результату для скорости автоионизационного распада в рамках квазиклассического подхода (ср. с [3–9, 22]):

$$W_a(i, nl; f) = \frac{1}{\pi} \omega_a \frac{f_{fi} l}{n^3} G \left( \frac{\omega_{if} l^3}{3\omega_a Z_i^2} \right), \quad (4)$$

$$G(u) = u \left[ K_{2/3}^2(u) + K_{1/3}^2(u) \right].$$

#### 4. СКОРОСТЬ ДИЭЛЕКТРОННОЙ РЕКОМБИНАЦИИ В СТАТИСТИЧЕСКОМ ПОДХОДЕ

Отправным моментом статистического подхода для описания элементарных атомных процессов является введение эффективной силы осцилляторов переходов, связанной с распределением атомной электронной плотности [36–40] и удовлетворяющей правилу сумм Куна–Райхе [42, 43]

$$f_{ij} \propto n(r) d^3 r. \quad (5)$$

При этом распределение атомной электронной плотности может описываться, например, статистической моделью Томаса–Ферми  $n_{TF}(r)$  [35, 42]. Для использования этого обстоятельства при выводе формулы для ДР в статистическом подходе выразим и скоростной коэффициент для  $W_R(i, f')$  радиационной релаксации через силу осцилляторов, так же как и скоростной коэффициент для автоионизации  $W_a(i, nl; f)$  (ср. [39]):

$$\frac{g_i}{g_f} W_R(i, f) = -2 \frac{e^2}{mc^3} \omega_{if}^2 \frac{g_i}{g_f} f_{if} = 2 \frac{e^2}{mc^3} \omega_{if}^2 f_{fi}. \quad (6)$$

Для проведения суммирования по начальным и конечным состояниям в статистических моделях необходимо ввести дополнительные предположения, связывающие частоту перехода  $\omega_{if}$ , которую мы естественным образом приравняем текущей частоте  $\omega$ , с пространственной переменной  $r$  и тем самым замкнуть систему уравнений. Если на основании той

или иной аргументации соответствующая зависимость  $\omega_{if} = \omega(r)$  выбрана, то интеграл по  $d^3 r$  разумно связать с суммированием по конечным состояниям  $i$ , а интеграл по  $d\omega$  с суммированием по начальным  $f$  в полном соответствии с построением формулы (1) [7, 9].

Выразим теперь вероятности излучения и автоионизации через силы осцилляторов и текущую частоту  $\omega$  (ср. [39]) с учетом упомянутого выше условия замыкания

$$W_R(i, f) = 2 \frac{e^2}{mc^3} \omega^2 n(r) \delta(\omega - \omega(r)) d^3 r d\omega, \quad (7)$$

$$W_a(i, nl; f) = \frac{\omega_a l}{\pi n^3} G \left( \frac{\omega l^3}{3\omega_a Z_i^2} \right) \times n(r) \delta(\omega - \omega(r)) d^3 r d\omega. \quad (8)$$

Тогда искомые полные скоростные коэффициенты радиационного и автоионизационного распада конечного состояния, необходимые для вычисления фактора ветвления в общем случае [7–9], определяются как

$$W_R(i) = 2 \frac{e^2}{mc^3} \omega^2(r) n(r) d^3 r, \quad (9)$$

$$W_a(i, nl) = \frac{\omega_a l}{\pi n^3} G \left( \frac{\omega(r) l^3}{3\omega_a Z_i^2} \right) n(r) d^3 r. \quad (10)$$

В итоге в общем случае [7] скорость ДР в статистическом подходе после сокращения одинаковых множителей в числителе и знаменателе преобразуется к виду

$$Q_{DR}^{st}(T) = 4\pi a_0^3 \omega_a \left( \frac{4\pi \text{Ry}}{T} \right)^{3/2} \sum_{nl} \int_{r_{min}}^{r_{max}} dr r^2 n(r) \times \exp \left( -\frac{\hbar\omega(r)}{T} + \frac{Z_i^2 \text{Ry}}{n^2 T} \right) (2l+1) \times \left[ 2 \left( \frac{e^2}{\hbar c} \right)^3 \frac{\omega^2(r)}{\omega_a^2} \frac{l}{\pi n^3} G \left( \frac{\omega(r) l^3}{3\omega_a Z_i^2} \right) \right] \times \left[ 2 \left( \frac{e^2}{\hbar c} \right)^3 \frac{\omega^2(r)}{\omega_a^2} + \frac{l}{\pi n^3} G \left( \frac{\omega(r) l^3}{3\omega_a Z_i^2} \right) \right]^{-1}. \quad (11)$$

В формуле (11) и ниже значения  $r_{max, min}$  выбираются на основе свойств функции  $n(r)$  и соотношения значений  $\hbar\omega(r)$  и потенциалов ионизации ионов с зарядами  $Z_i, Z_i - 1$ .

Полученный результат (11) допускает также обобщение на случай, когда распределение атомной

электронной плотности представляет собой суммарную плотность от разных значений орбитального момента ионного остова  $L$

$$n(r) = \int dL n_L(r), \quad (12)$$

где  $n_L(r)$  — парциальная атомная электронная плотность. Следуя рассуждениям общего характера (см., например, [44,45]), представим парциальную плотность в виде интеграла по энергии  $E$  связанных состояний:

$$\begin{aligned} n_L(r) &= \int dE n_L(r, E) = \\ &= C \int_{U(r)}^0 dE \left( \frac{1}{a_0^3} \frac{1}{(2 \text{Ry})^{3/2}} \right) \frac{\hbar^2}{m} \frac{L+1/2}{r^2} \times \\ &\times \left( 2(E - U(r)) - \frac{\hbar^2}{m} \frac{(L+1/2)^2}{r^2} \right)^{-1/2}, \quad (13) \end{aligned}$$

где  $U(r) < 0$  — самосогласованный статистический потенциал, а  $C$  — соответствующая ему нормировочная константа. Парциальная по  $L$  атомная электронная плотность  $n_L(r, E)$  определена в (13) при условии положительности подкоренного выражения между точками поворота. Такое распределение будет имитировать распределение атомной плотности по электронным оболочкам наподобие известной оболочечной модели строения атома [42, 44, 45]. Обращаем внимание, что в формуле (13) явным образом учтен квазиклассический вид центробежного потенциала (см. [41–45]).

Используя (12), (13), можно обобщить результат (11). Очевидно, что ввиду разбиения полной плотности по  $L$ , полная скорость диэлектронной рекомбинации в статистическом подходе представляет собой сумму парциальных скоростей диэлектронной рекомбинации  $Q_{DR}^{st(L)}$ , отвечающих фиксированным  $L$ :

$$Q_{DR}^{st} = \sum_L Q_{DR}^{st(L)}. \quad (14)$$

В общем случае и частота перехода  $\omega^{(L)}(r)$  зависит от  $L$ . В итоге формула для  $Q_{DR}^{st}$  (11) преобразуется к виду

$$\begin{aligned} Q_{DR}^{st}(T) &= 4\pi a_0^3 \omega_a \left( \frac{4\pi \text{Ry}}{T} \right)^{3/2} \sum_{L, nl} \exp \left( \frac{Z_i^2 \text{Ry}}{n^2 T} \right) \times \\ &\times \int_{r_{min}^{(L)}}^{r_{max}^{(L)}} dr r^2 n_L(r) \exp \left( -\frac{\hbar \omega^{(L)}(r)}{T} \right) (2l+1) \times \\ &\times \left[ 2 \left( \frac{e^2}{\hbar c} \right)^3 \left( \frac{\omega^{(L)}(r)}{\omega_a} \right)^2 \frac{l}{\pi n^3} G \left( \frac{\omega^{(L)}(r) l^3}{3\omega_a Z_i^2} \right) \right] \times \\ &\times \left[ 2 \left( \frac{e^2}{\hbar c} \right)^3 \left( \frac{\omega^{(L)}(r)}{\omega_a} \right)^2 + \right. \\ &\left. + \frac{l}{\pi n^3} G \left( \frac{\omega^{(L)}(r) l^3}{3\omega_a Z_i^2} \right) \right]^{-1}, \quad (15) \end{aligned}$$

где парциальная плотность  $n_L(r)$  с орбитальным моментом  $L$  определена как

$$\begin{aligned} n_L(r) &= C \left( \frac{1}{a_0^3} \frac{1}{(2 \text{Ry})^{3/2}} \right) \frac{\hbar^2}{m} \frac{L+1/2}{r^2} \times \\ &\times \left( 2|U(r)| - \frac{\hbar^2}{m} \frac{(L+1/2)^2}{r^2} \right)^{1/2}. \quad (16) \end{aligned}$$

Теперь проведем традиционное преобразование (15), в результате которого скорость ДР в статистическом подходе  $Q_{DR}^{st}(T)$  принимает вид

$$\begin{aligned} Q_{DR}^{st}(T) &= 4\pi a_0^3 \omega_a \left( \frac{4\pi \text{Ry}}{T} \right)^{3/2} \times \\ &\times \sum_{L, nl} \int_{r_{min}^{(L)}}^{r_{max}^{(L)}} dr r^2 n_L(r) \times \\ &\times \exp \left( -\frac{\hbar \omega^{(L)}(r)}{T} + \frac{Z_i^2 \text{Ry}}{n^2 T} \right) (2l+1) \frac{l}{\pi} \times \\ &\times G \left( \frac{\omega^{(L)}(r) l^3}{3\omega_a Z_i^2} \right) [n^3 + B(r, L, l)]^{-1}, \quad (17) \\ B(r, L, l) &= \frac{1}{2\pi} \left( \frac{\hbar c}{e^2} \right)^3 \left( \frac{\omega_a}{\omega^{(L)}(r)} \right)^2 \times \\ &\times l G \left( \frac{\omega^{(L)}(r) l^3}{3\omega_a Z_i^2} \right). \end{aligned}$$

По аналогии с [7] введем значение главного квантового числа внешнего электрона  $n = n_1$ , при котором показатель экспоненты в (17) обращается в нуль:

$$n_1 = Z_i \sqrt{\frac{\omega_a}{2\omega^{(L)}(r)}} \quad (18)$$

и переменную  $t = n/n_1$ . Обращение в нуль показателя экспоненты в (17) означает нижнюю границу

непрерывного спектра. Тогда величина кванта возбуждения остова совпадает с энергией связи высоковозбужденного состояния захваченного электрона, и естественным ограничением на допустимые значения  $n$  является

$$n \geq n_1.$$

Тем не менее можно указать и другие физические ограничения снизу на значение  $n$ . Из простых соображений ясно, что  $n$  не может быть меньше чем эффективное квантовое число валентной оболочки  $n_v$ , которое определяется первым потенциалом ионизации  $I_{Z_i}$  ионного остова [6, 9]

$$n_v \sim (Z_i + 1)(Ry / I_{Z_i})^{1/2}. \quad (19)$$

Напомним, что реальное главное квантовое число внешней оболочки основного состояния многоэлектронного атома или иона отличается от эффективного значения  $n_v$ , определяемого в водородоподобной модели.

Поскольку функция  $G(u)$  экспоненциально убывает при больших  $l$ , сумму по  $l$  с приемлемой точностью можно заменить несобственным интегралом, распространив верхний предел до бесконечности. Аналогичные соображения позволяют также перейти от суммирования к интегрированию по  $n$  с последующей заменой переменной интегрирования на  $t$ .

После этих преобразований (17) принимает вид

$$\begin{aligned} Q_{DR}^{st}(T) &= 2^{11/2} \pi^{3/2} a_0^3 \omega_a \left( \frac{2 Ry}{T} \right)^{3/2} \times \\ &\times \frac{1}{Z_i^2} \sum_L \int_{r_{min}^{(L)}}^{r_{max}^{(L)}} dr r^2 n_L(r) \left( \frac{\omega^{(L)}(r)}{\omega_a} \right) \times \\ &\times \int_{t_{min}}^{\infty} dt \exp \left[ -\frac{\hbar \omega^{(L)}(r)}{T} \left( 1 - \frac{1}{t^2} \right) \right] \times \\ &\times \left( \int_0^{t_{max}} dl \frac{(l + 1/2) l G(\omega^{(L)}(r) l^3 / 3 \omega_a Z_i^2)}{t^3 + A(r, L, l)} \right), \\ A(r, L, l) &= \frac{B(r, L, l)}{n_1^3} = \frac{2^{1/2}}{\pi} \left( \frac{\hbar c}{e^2} \right)^3 \times \\ &\times \frac{1}{Z_i^3} \left( \frac{\omega_a}{\omega^{(L)}(r)} \right)^{1/2} l G \left( \frac{\omega^{(L)}(r) l^3}{3 \omega_a Z_i^2} \right), \\ l_{max} &= t Z_i \sqrt{\frac{\omega_a}{2 \omega^{(L)}(r)}} - 1. \end{aligned} \quad (20)$$

Необходимо обратить внимание на то, что при оперировании с парциальной по орбитальному моменту ионного остова атомной электронной плотностью

полные скорости радиационного распада и парциальные и полные скорости автоионизации в рассматриваемых статистических моделях оказываются функциями орбитального момента  $L$ .

### 5. УСРЕДНЕНИЕ СКОРОСТИ АВТОИОНИЗАЦИИ ПО ОРБИТАЛЬНОМУ МОМЕНТУ $l$ ВНЕШНЕГО ВОЗБУЖДЕННОГО ЭЛЕКТРОНА

Как правило, поуровневые квантовомеханические расчеты факторов ветвления и последующее их суммирование представляют значительные трудности, и для их упрощения традиционно используется замена полного суммирования подстановкой усредненных скоростей автоионизации по квантовым числам  $LSJ$  [7] в знаменатель общего выражения для скорости ДР (1). Аналогом такого приближения в нашем случае может служить замена полного суммирования по  $l$  на подстановку усредненных скоростей автоионизации по квантовым числам  $l$ , которая уже использовалась в литературе [3, 6–9]. Для этого необходимо умножить  $W_a(i, nl)$  на число проекций по магнитному квантовому числу  $m$  при данном значении орбитального момента  $l$  внешнего электрона, равному, как известно,  $(2l + 1)$ , и просуммировать по всем значениям  $l$ , разделив на полное число состояний  $n^2$  при данном значении главного квантового числа  $n$  [42–45]. Ввиду свойств асимптотик функций Макдональда с дробным индексом суммирование можно заменить интегрированием, а верхний предел положить равным бесконечности. Кроме того, поскольку само используемое выражение для сечения фотоионизации получено в предположении  $n \gg l \gg 1$ , можно пренебречь  $1/2$  по сравнению с  $l$  в  $(2l + 1)/n^2 = 2(l + 1/2)/n^2 \approx 2l/n^2$ . Затем в подынтегральном выражении можно сразу выделить полный дифференциал аргумента функций Макдональда и привести интегралы от квадратов этих функций к аналитически интегрируемому виду [46]

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} du \left[ K_{2/3}^2(u) + K_{1/3}^2(u) \right] &= \\ &= \frac{1}{2} \frac{\pi}{\sin \pi/3} = \frac{1}{2} \frac{\pi}{\sqrt{3}/2} = \frac{\pi}{\sqrt{3}}. \end{aligned}$$

В итоге усредненная по орбитальному квантовому числу внешнего по отношению к остову электрона скорость автоионизации принимает вид (ср. [3, 9, 22])

$$\frac{\langle W_a(i, L, n) \rangle_l}{\omega_a} = \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{1}{n^5} \frac{Z_i^2}{\omega^{(L)}(r)/\omega_a} n_L(r) d^3r. \quad (21)$$

Этот результат имеет общий характер для любого определения  $n(r)$  и  $\omega(r)$ . В то же время этого еще недостаточно, чтобы определить, как вычислять при этом скорость ДР, так как в числителе уже фигурирует множитель  $(2l + 1)$ . Однако если подставить в знаменатель  $\langle W_a(i, L, n) \rangle_l$ , то очевидно, что в числителе достаточно провести просто суммирование или интегрирование по  $l$ . Именно такого рода рецепт приводится в монографии [7]. Легко видеть, однако, что в данном конкретном случае это эквивалентно подстановке в числитель усредненной величины  $\langle W_a(i, L, n) \rangle_l$ . Действительно, подстановка  $\langle W_a(i, L, n) \rangle_l$  в числитель и знаменатель выражения (19) позволяет провести суммирование по  $l$  множителя  $(2l + 1)$  в числителе (1) при изменении  $l$  от 0 до  $n - 1$ , что дает, как известно,  $n^2$ . В этом случае (20) приводится к виду

$$Q_{DR}^{st}(T) = a_0^3 \omega_a \frac{2^{11/2} \pi^{5/2}}{\sqrt{3}} \left( \frac{2 \text{Ry}}{T} \right)^{3/2} \times \sum_L \int_{r_{min}(L)}^{r_{max}(L)} dr r^2 n_L(r) \times \int_{t_{min}}^{\infty} dt \exp \left[ -\frac{2 \text{Ry}}{T} \frac{\omega^{(L)}(r)}{\omega_a} \left( 1 - \frac{1}{t^2} \right) \right] \times \frac{t^2}{t^5 + A(\omega^{(L)}(r)/\omega_a)}, \quad (22)$$

$$A \left( \frac{\omega^{(L)}(r)}{\omega_a} \right) = \frac{2^{5/2}}{\sqrt{3}} \left( \frac{\hbar c}{e^2} \right)^3 \frac{1}{Z_i^3} \left( \frac{\omega_a}{\omega^{(L)}(r)} \right)^{1/2}.$$

Далее мы выведем формулы для трех статистических моделей, в которых будет конкретизирован выбор и вид зависимостей  $n(r)$ ,  $\omega(r)$  или  $n_L(r)$ ,  $\omega^{(L)}(r)$  для случая прямого суммирования по  $l$  (19) или после описанной выше приближенной процедуры подстановки усредненных по  $l$  скоростей автоионизации (22), полученных в настоящем разделе. Это позволяет уточнить и выбор верхнего и нижнего пределов интегрирования по  $r$  в формулах (17), (20), (22).

**6. МОДЕЛЬ ЛОКАЛЬНОЙ ПЛАЗМЕННОЙ ЧАСТОТЫ БРАНДТА – ЛУНДКВИСТА**

В этой модели полагается [46], что текущая частота равна локальной плазменной частоте, определяемой распределением плотности в ионе согласно статистической модели Томаса – Ферми [35, 42, 44, 45]

$$\omega(r) = \omega_p(r) = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n_{TF}(r, Z_i)}{m}}, \quad (23)$$

где  $n_{TF}(r, Z_i)$  – статистическое распределение атомной электронной плотности Томаса – Ферми в ионе с зарядом  $Z_i$  и зарядом ядра  $Z$ . Тогда, следуя (11), (18) и (20), определим скорость диэлектронной рекомбинации в случае прямого суммирования по  $l$  формулой

$$Q_{DR, BLd}^{st}(T) = 2^{11/2} \pi^{3/2} a_0^3 \omega_a \left( \frac{2 \text{Ry}}{T} \right)^{3/2} \frac{1}{Z_i^2} \times \int_{r_{min}}^{r_{max}} dr r^2 n_{TF}(r) \left( \frac{\omega_p(r)}{\omega_a} \right) \times \int_{t_{min}}^{\infty} dt \exp \left[ -\frac{\hbar \omega_p(r)}{T} \left( 1 - \frac{1}{t^2} \right) \right] \times \left( \int_0^{l_{max}} dl \frac{(l + 1/2) l G \omega_p(r) l^3 / 3 \omega_a Z_i^2}{t^3 + A(r, L)} \right), \quad (24)$$

$$A(r, l) = \frac{B(r, l)}{n_1^3} = \frac{2^{1/2}}{\pi} \left( \frac{\hbar c}{e^2} \right)^3 \times \frac{1}{Z^3} \left( \frac{\omega_a}{\omega_p(r)} \right)^{1/2} l G \left( \frac{\omega_p(r) l^3}{3 \omega_a Z_i^2} \right),$$

$$l_{max} = t Z_i \sqrt{\frac{\omega_a}{2 \omega_p(r)}} - 1.$$

Индекс «BLd» означает модель Брандта – Лундквиста для частоты с распределением плотности Томаса – Ферми и с суммированием по орбитальным моментам внешнего электрона. В выражениях (24) полная атомная электронная плотность и частота не зависят, естественно, от орбитального момента ионного остова  $L$  и могут быть представлены через универсальную функцию Томаса – Ферми  $\chi(q, x)$  [35, 42, 44] для иона с зарядом  $Z_i$  и зарядом ядра  $Z$ :

$$n_{TF}(r) = \frac{1}{a_0^3} \frac{Z^2}{4\pi} \frac{128}{9\pi^2} \left( \frac{\chi(q, x)}{x} \right)^{3/2}, \quad (25)$$

$$\frac{\omega_p(x)}{\omega_a} = Z \left( \frac{128}{9\pi^2} \right)^{1/2} \left( \frac{\chi(q, x)}{x} \right)^{3/4},$$

где  $q = Z_i/Z$ ,  $x = r/r_{TF}$ ,  $r_{TF} = a_0 Z^{-1/3} (9\pi^2/128)^{1/3}$  – радиус Томаса – Ферми. В модели Томаса – Ферми ион обладает конечным размером  $r_0(q) = x_0(q) r_{TF}$ , где атомная электронная плотность обращается в нуль [35, 42, 44]. Поскольку речь идет о дважды возбужденных состояниях иона  $Z_i - 1$ , их энергия должна лежать в непрерывном спектре выше порога ионизации иона  $Z_i - 1$ . В модели ТФ этот порог определяется выражением

$$\frac{I_{Z_i-1}}{2 \text{Ry}} = \left( \frac{128}{9\pi^2} \right)^{1/3} \frac{Z^{4/3} (q - Z^{-1})}{x_0 (q - Z^{-1}, Z)}. \quad (26)$$

Как правило, ион с меньшей кратностью обладает большим размером, поэтому энергия возбуждений остова больше энергии ионизации (26) и легко удовлетворяет этому условию с учетом дополнительной энергии состояния  $(n, l)$ . В случае же замены суммирования по  $l$  подстановкой усредненных значений  $\langle W_a(i, n) \rangle_l$ , которые тогда не зависят от  $L$ , получаем

$$Q_{DR,BLa}^{st}(T) = a_0^3 \omega_a \frac{2^{11/2} \pi^{5/2}}{\sqrt{3}} \left( \frac{2 \text{Ry}}{T} \right)^{3/2} \times \int_{r_{min}}^{r_{max}} dr r^2 n_{TF}(r) \times \int_{t_{min}}^{\infty} dt \exp \left[ -\frac{2 \text{Ry}}{T} \frac{\omega_p(r)}{\omega_a} \left( 1 - \frac{1}{t^2} \right) \right] \times \frac{t^2}{t^5 + A(\omega_p(r)/\omega_a)}, \quad (27)$$

$$A \left( \frac{\omega_p(r)}{\omega_a} \right) = \frac{2^{5/2}}{\sqrt{3}} \left( \frac{\hbar c}{e^2} \right)^3 \frac{1}{Z_i^3} \left( \frac{\omega_a}{\omega_p(r)} \right)^{1/2}.$$

Здесь индекс «BLa» означает модель Брандта–Лундквиста для частоты с распределением плотности Томаса–Ферми и с подстановкой усредненных по орбитальным моментам внешнего электрона скоростей автоионизации. Таким образом, в представленной модели процессы радиационного излучения, поглощения и возбуждения ионов в результате столкновений с электронами, а следовательно, и процесс диэлектронной рекомбинации описываются в терминах коллективных возбуждений, соответствующих локальным плазменным частотам.

В то время как нижний предел интегрирования по  $r$  в выражениях (24) и (27)  $r_{min}$  соответствует достижению частотой  $\omega_p(r)$  значения, соответствующего потенциалу ионизации ионного остова с зарядом  $Z_i$  [35],

$$\hbar \omega_p(r_{min}) = \frac{I_{Z_i}}{2 \text{Ry}} = \left( \frac{128}{9\pi^2} \right)^{1/3} \frac{Z^{4/3} q}{x_0(q, Z)}, \quad (28)$$

верхний предел интегрирования  $r_{max}$  определяется расстоянием от ядра, при котором энергия плазмона  $\hbar \omega_p(r_{max})$  сравнивается с разностью потенциалов ионизации ионов с зарядами  $Z_i$  и  $Z_i - 1$ , определяемых формулами (26), (28),

$$\hbar \omega_p(r_{max}) = I_{Z_i} - I_{Z_i-1}.$$

Интересно отметить, что результат оказывается мало чувствителен к значению  $r_{max}$ . Так, например,

он почти не меняется, если распространить верхний предел интегрирования в (24), (27) вплоть до размера ионного остова  $r_0$  в модели Томаса–Ферми [35, 42].

Нижний же предел внутреннего интеграла по  $n$  в (24) и в (27), т. е. после замены переменных по  $t$ , естественным образом ограничен в этой модели единицей  $t_{min} = 1$ , что согласуется с выбором (28).

## 7. МОДЕЛЬ БРАНДТА–ЛУНДКВИСТА ДЛЯ ПАРЦИАЛЬНОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ ИОННОГО ОСТОВА

В обобщении модели Брандта–Лундквиста [47] на парциальное по орбитальному моменту  $L$  распределение электронной плотности ионного остова  $n_{TF,L}(r, q)$  [44, 45] условие резонанса, определяющее частоту коллективных возбуждений ионного остова, теперь имеет вид

$$\omega(r) = \omega_p^{(L)}(r) = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n_{TF,L}(r, Z_i)}{m}}, \quad (29)$$

где  $n_{TF,L}(r, Z_i)$  определяется уравнением (16) с  $C = 1/\pi^2$ , а потенциальная энергия в (16) удовлетворяет соотношению (ср. [33, 42, 44])

$$|U(r)| = |U_{TF}(r)| = 2 \text{Ry} Z^{4/3} \left( \frac{128}{9\pi^2} \right)^{1/3} \frac{\chi(x, q)}{x}. \quad (30)$$

Далее, используя общий результат для этого случая (20), приходим к выражению

$$Q_{DR,BLLd}^{st}(T) = 2^{11/2} \pi^{3/2} a_0^3 \omega_a \left( \frac{2 \text{Ry}}{T} \right)^{3/2} \times \frac{1}{Z_i^2} \sum_L \int_{r_{min}(L)}^{r_{max}(L)} dr r^2 n_{TF,L}(r) \frac{\omega_p^{(L)}(r)}{\omega_a} \times \int_{t_{min}}^{\infty} dt \exp \left[ -\frac{\hbar \omega_p^{(L)}(r)}{T} \left( 1 - \frac{1}{t^2} \right) \right] \times \left( \int_0^{l_{max}} dl \frac{(l+1/2) l G(\omega_p^{(L)}(r) l^3 / 3\omega_a Z_i^2)}{t^3 + A(r, L, l)} \right), \quad (31)$$

$$A(r, L, l) = \frac{B(r, L, l)}{n_1^3} = \frac{2^{1/2}}{\pi} \left( \frac{\hbar c}{e^2} \right)^3 \times \frac{1}{Z_i^3} \left( \frac{\omega_a}{\omega_p^{(L)}(r)} \right)^{1/2} l G \left( \frac{\omega_p^{(L)}(r) l^3}{3\omega_a Z_i^2} \right),$$

$$l_{max} = t Z_i \sqrt{\frac{\omega_a}{2\omega^{(L)}(r)}} - 1.$$

В случае же замены суммирования по  $l$  подстановкой усредненных значений  $\langle W_a(i, L, n) \rangle_l$ , которые в данной модели уже будут зависеть от  $L$ , получаем

$$Q_{DR, BL_a}^{st}(T) = a_0^3 \omega_a \frac{2^{11/2} \pi^{5/2}}{\sqrt{3}} \left( \frac{2 \text{ Ry}}{T} \right)^{3/2} \times \sum_L \int_{r_{min}(L)}^{r_{max}(L)} dr r^2 n_{TF, L}(r) \times \sum_{t_{min}}^{\infty} dt \exp \left[ -\frac{2 \text{ Ry}}{T} \frac{\omega_p^{(L)}(r)}{\omega_a} \left( 1 - \frac{1}{t^2} \right) \right] \times \frac{t^2}{t^5 + A \left( \frac{\omega_p^{(L)}(r)}{\omega_a} \right)}, \quad (32)$$

$$A \left( \frac{\omega_p^{(L)}(r)}{\omega_a} \right) = \frac{2^{5/2}}{\sqrt{3}} \left( \frac{\hbar c}{e^2} \right)^3 \frac{1}{Z_i^3} \left( \frac{\omega_a}{\omega_p^{(L)}(r)} \right)^{1/2}.$$

Следует указать, что верхний и нижний пределы интегрирования по  $r$  в формулах (31), (32) теперь определяются также точками поворота в (16). Использование для верхнего предела верхней точки поворота, как легко видеть, является более жестким ограничением для распределения (16) по сравнению с размером ионного остова  $r_0$ . Что же касается ограничения на возможное значение нижнего предела, то наряду с нижней точкой поворота следует рассматривать ограничение, налагаемое неравенством, аналогичным использованному в выражении (27),

$$\hbar \omega_p^{(L)}(r) \leq I_{Z_i}, \quad (33)$$

где  $I_{Z_i}$  определяется согласно (28).

Анализ показывает, что условие (33) оказывается более жестким, чем нижняя точка поворота при всех  $L \geq 0$  вплоть до достаточно больших по величине значений  $L$ , после которых начинает работать нижняя точка поворота, поскольку значение  $r$ , отвечающее условию (33), уже не попадает в интервал значений  $r$ , соответствующий положительной определенности подкоренного выражения в распределении (16). Нижний же предел внутреннего интегрирования по  $t$  по-прежнему определяется единицей, как и в предыдущем разделе.

### 8. МОДЕЛЬ РОСТА И ПРИМЕНЕНИЕ КРАМЕРСОВСКОЙ ЭЛЕКТРОДИНАМИКИ

В настоящем подходе скорость автоионизации выражается через сечение фотовозбуждения ионного остова. Для расчета таких сечений в применении

к процессам фотоионизации Ростом [48] была предложена простая модель, позволяющая выразить эти сечения также через распределение атомной электронной плотности с выбором частоты перехода  $\omega$ , равной изменению центробежной энергии при дипольных переходах  $\omega_K^{(L)}(r)$ , соответствующей изменению орбитального момента на единицу. Модель Роста была тестирована на атомах водорода и гелия и при сравнении с точными результатами для водорода, экспериментом и численными расчетами для гелия продемонстрировала высокую точность меньше 5% [48]. Это приближение является аналогом принципа Франка–Кондона в применении к атомным структурам, когда основной вклад в переход дают точки поворота электронных траекторий (см. [48], а также [49]). Здесь мы укажем на соответствие этого приближения принципам крамерсовской электродинамики [16, 50], широко использованном для расчета тормозного излучения электронов на сложных атомах. Согласно этим принципам, основной вклад в излучательный переход вносят точки поворота электронной траектории, где кинетическая энергия электрона уже значительно превышает начальную энергию за счет ускорения в поле мишени, и единственным интегралом движения остается орбитальный момент  $M$ . Таким образом, дипольный радиационный переход определяется изменением центробежного потенциала при изменении квадрата орбитального момента  $M^2$ . Соответствующая частота перехода оказывается равной изменению угловой скорости вращения вблизи точки поворота  $\hbar \omega = \Delta M^2 / 2mr^2$ ,  $\Delta M^2 = 2\hbar^2(L+1/2)$  (см. [48]). Именно эта частота используется ниже в общих выражениях (11), (15) для скорости ДР. Одновременно здесь для частичного распределения атомной электронной плотности используется, по-прежнему, как и везде в этой работе, модель Томаса–Ферми.

Мы обозначим описанную модель с прямым суммированием по орбитальным моментам  $l$  внешнего электрона с помощью нижних индексов « $KLd$ ». Полная скорость ДР  $Q_{DR, KLd}^{st}$  в этой модели также будет определяться суммой частичных скоростных коэффициентов  $Q_{DR, KLd}^{st(L)}$ :

$$Q_{DR, KLd}^{st} = 2^{11/2} \pi^{3/2} a_0^3 \omega_a \left( \frac{2 \text{ Ry}}{T} \right)^{3/2} \frac{1}{Z_i^2} \times \sum_L \int_{r_{min}(L)}^{r_{max}(L)} dr r^2 n_{TF, L}(r) \frac{\omega_K^{(L)}(r)}{\omega_a} \times$$

$$\begin{aligned} & \times \int_{t_{min}}^{\infty} dt \exp \left[ -\frac{\hbar\omega_K^{(L)}(r)}{T} \left( 1 - \frac{1}{t^2} \right) \right] \times \\ & \times \left( \int_0^{l_{max}} dl \frac{(l+1/2)lG(\omega_K^{(L)}(r)l^3/3\omega_a Z_i^2)}{t^3 + A(r, L, l)} \right), \\ A(r, L, l) &= \frac{B(r, L, l)}{n_1^3} = \frac{2^{1/2}}{\pi} \left( \frac{\hbar c}{e^2} \right)^3 \times \\ & \times \frac{1}{Z_i^3} \left( \frac{\omega_a}{\omega_K^{(L)}(r)} \right)^{1/2} lG \left( \frac{\omega_K^{(L)}(r)l^3}{3\omega_a Z_i^2} \right), \\ l_{max} &= tZ_i \sqrt{\frac{\omega_a}{2\omega_K^{(L)}(r)}} - 1. \end{aligned} \quad (34)$$

Отметим, что значение частоты  $\omega_K^{(L)}(r)$  в выражении (34), определяемое соотношением

$$\frac{\omega_K^{(L)}(r)}{\omega_a} = \frac{L + 1/2}{(r/a_0)^2}, \quad (35)$$

часто в литературе называют также частотой Роста [48].

В случае же замены суммирования по  $l$  в (34) подстановкой усредненных значений  $\langle W_a(i, L, n) \rangle_l$  получаем

$$\begin{aligned} Q_{DR, KLa}^{st}(T) &= a_0^3 \omega_a \frac{2^{11/2} \pi^{5/2}}{\sqrt{3}} \left( \frac{2 Ry}{T} \right)^{3/2} \times \\ & \times \sum_L \int_{r_{min}(L)}^{r_{max}(L)} dr r^2 n_{TF, L}(r) \times \\ & \times \int_{t_{min}}^{\infty} dt \exp \left[ -\frac{2 Ry}{T} \frac{\omega_K^{(L)}(r)}{\omega_a} \left( 1 - \frac{1}{t^2} \right) \right] \times \\ & \times \frac{t^2}{t^5 + A \left( \omega_K^{(L)}(r)/\omega_a \right)}, \\ A \left( \frac{\omega_K^{(L)}(r)}{\omega_a} \right) &= \frac{2^{5/2}}{\sqrt{3}} \left( \frac{\hbar c}{e^2} \right)^3 \frac{1}{Z_i^3} \left( \frac{\omega_a}{\omega_K^{(L)}(r)} \right)^{1/2}. \end{aligned} \quad (36)$$

Допустимая область интегрирования по объему в выражениях (34) и (36) определяется аналогично предыдущей модели точками поворота распределения (16), в то время как частоты соответствуют их эффективным значениям, следующим из крамеровской электродинамики [16, 50] и сходной с ней в этом отношении модели Роста [48]. При этом аналогично предыдущему разделу в качестве нижнего предела интегрирования по  $r$  при данном  $L$  выбирается минимальное значение из нижней точки поворота (16) и следующее из условия

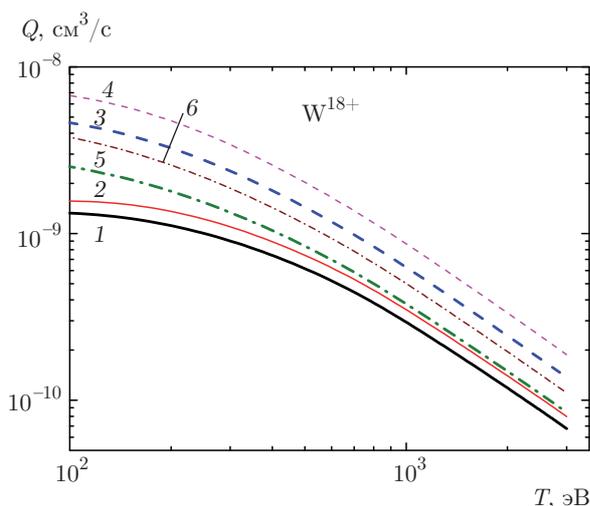
$$\hbar\omega_K^{(L)}(r_*) \leq I_{Z_i}, \quad r_*(L) \geq \sqrt{\left( L + \frac{1}{2} \right) \cdot \frac{2 Ry}{I_{Z_i}}}, \quad (37)$$

с точками поворота из (16) и частотой Роста из (35) —  $\omega_K^{(L)}(r)/\omega_a = (L + 1/2)/(r/a_0)^2$ . Как показывает анализ, в этой модели именно условие (37) при любых значениях  $L$  оказывается более жестким при определении нижнего предела интегрирования по  $r$ , чем нижняя точка поворота в выражении (16). В дальнейшем для краткости мы будем называть эту статистическую модель — моделью Роста.

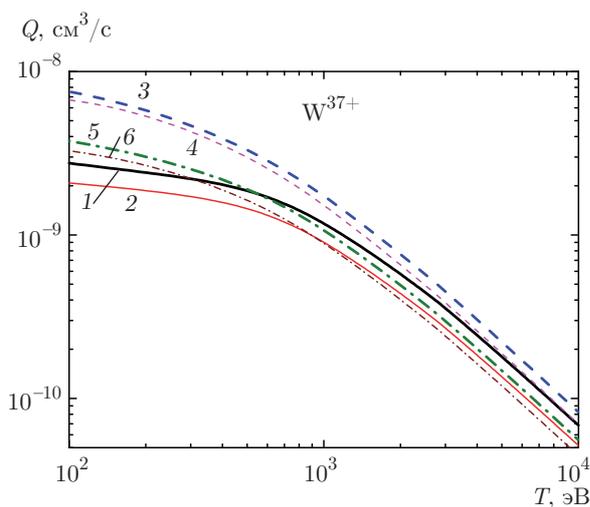
### 9. ПОВЕДЕНИЕ СКОРОСТНЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ ДР ДЛЯ РАЗНЫХ ИОНОВ ВОЛЬФРАМА

Мы провели численные расчеты скоростных коэффициентов ДР для семи ионов вольфрама  $W^{18+}$ ,  $W^{20+}$ ,  $W^{29+}$ ,  $W^{37+}$ ,  $W^{41+}$ ,  $W^{43+}$ ,  $W^{56+}$  в зависимости от температуры по формулам шести статистических моделей, представленных выше, а также в зависимости от заряда ионов при двух характерных значениях температуры. Проведено также сопоставление статистических скоростных коэффициентов с экспериментом [27, 31] и с данными расчетов поровневыми кодами ADPAK [21], FAC [23, 28, 30, 33] и HULLAC [13, 18]. При проведении расчетов для описания распределения электронной плотности согласно модели Томаса – Ферми использовались табличные данные для функции  $\chi(x)$ , соответствующей универсальному распределению плотности в нейтральных атомах с соответствующей аппроксимацией Зоммерфельда для описания атомной электронной плотности ионов [35]. Приведенные размеры ионов  $x_0(q)$  вычислялись с помощью аппроксимаций [51] и [52]. Все расчеты проведены с параллельным контролем нормировки распределений ионной плотности, следующим из правила сумм Куна – Райхе для сил осцилляторов [42, 43], а также сходимости результатов в зависимости от размера шага на каждой из трех операций последовательного интегрирования и числа членов в сумме по  $L$ . При определении точек поворота использовалась дискриминационная процедура, позволяющая учесть только внутренние точки поворота в области положительных значений подкоренного выражения в (16). При проведении расчетов использовались библиотеки NumPy [53] и SciPy [54] для языка программирования Python.

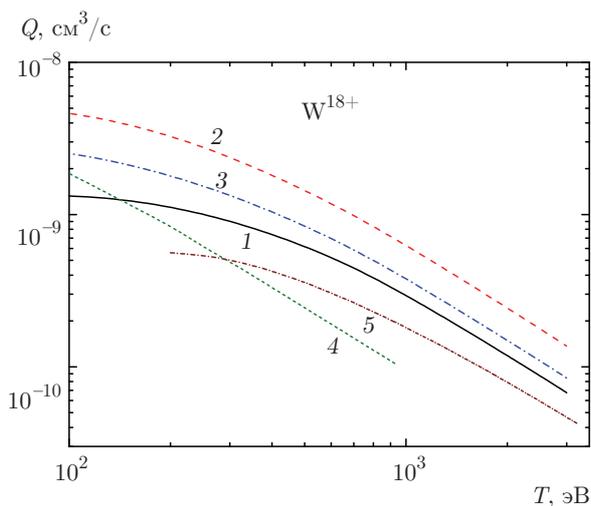
Сравнение результатов расчетов скоростных коэффициентов диэлектронной рекомбинации в зависимости от температуры плазмы в соответствии



**Рис. 1.** Зависимости скорости ДР иона  $W^{18+}$  от температуры для разных статистических моделей: 1 — модель Томаса–Ферми и модель Брандта–Лундквиста; 2 — усредненная по  $l$  модель Томаса–Ферми и модель Брандта–Лундквиста согласно (27); 3 — модель Томаса–Ферми с электронными оболочками ионного остова с орбитальным моментом  $L$  и Брандта–Лундквиста с парциальной по  $L$  электронной плотностью; 4 — усредненная по  $l$  модель Томаса–Ферми с электронными оболочками ионного остова с орбитальным моментом  $L$  и Брандта–Лундквиста с парциальной по  $L$  электронной плотностью согласно (32); 5 — модель Томаса–Ферми с парциальной по  $L$  плотностью электронов и крамерсовская электродинамика для частоты (модель Роста); 6 — модель Томаса–Ферми с парциальной по  $L$  плотностью электронов и крамерсовская электродинамика для частоты (модель Роста), усредненная по  $l$  согласно (36)



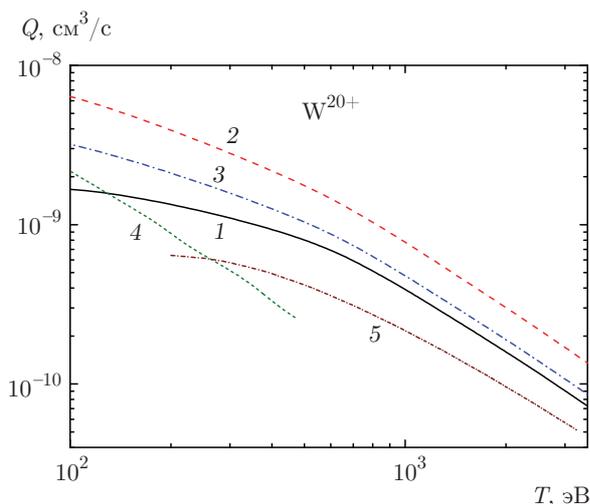
**Рис. 2.** Зависимости скорости ДР иона  $W^{37+}$  от температуры для разных статистических моделей. Обозначения 1–6 те же, что и на рис. 1



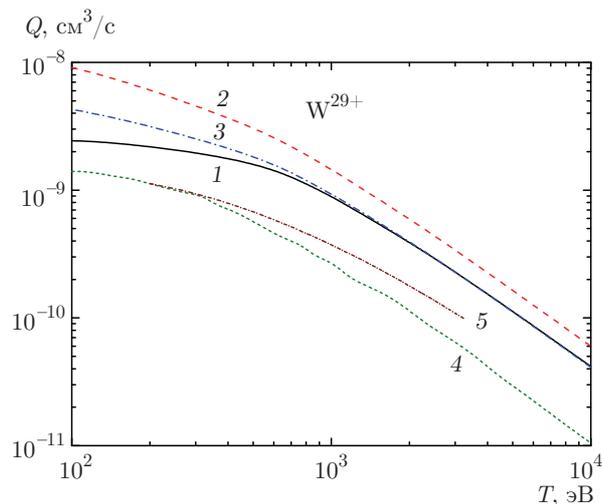
**Рис. 3.** Сравнение статистических зависимостей скорости ДР иона  $W^{18+}$  от температуры с экспериментом [19] и с расчетами поуровневым кодом ADPAK [21]: 1 — модель Томаса–Ферми и модель Брандта–Лундквиста; 2 — модель Томаса–Ферми с электронными оболочками ионного остова с орбитальным моментом  $L$  и Брандта–Лундквиста с парциальной по  $L$  электронной плотностью; 3 — модель Томаса–Ферми с парциальной по  $L$  плотностью электронов и крамерсовская электродинамика для частоты (модель Роста); 4 — эксперимент [31]; 5 — ADPAK [21]

с шестью статистическими моделями, описанными выше, представлено для ионов вольфрама  $W^{18+}$  и  $W^{37+}$  на рис. 1 и 2. Как следует из проведенного сравнения, на рис. 1 в случае иона  $W^{18+}$  при проведении точного суммирования наибольшие значения скорости ДР дает модель с распределением парциальной по  $L$  плотности согласно модели Томаса–Ферми с частотой Брандта–Лундквиста. При этом проведение операции приближенного усреднения по  $l$  приводит к росту значений ДР для всех статистических моделей.

Сравнение статистических скоростей ДР при точном суммировании в рамках трех описанных выше моделей для ионов  $W^{18+}$  и  $W^{20+}$  в зависимости от температуры плазмы с экспериментом [27, 31] и результатами расчетов поуровневым кодом ADPAK [21] представлено на рис. 3 и 4. Как видно на рис. 3, 4, для ионов  $W^{18+}$  и  $W^{20+}$  наилучшее согласие с экспериментом достигается в рамках модели Томаса–Ферми с локальной плазменной частотой Брандта–Лундквиста и для модели с частотой Роста. Важно отметить, что данные эксперимента описываются практически прямой со значительно большим углом наклона к оси ординат, чем все расчетные кривые. Поэтому в интервале температур



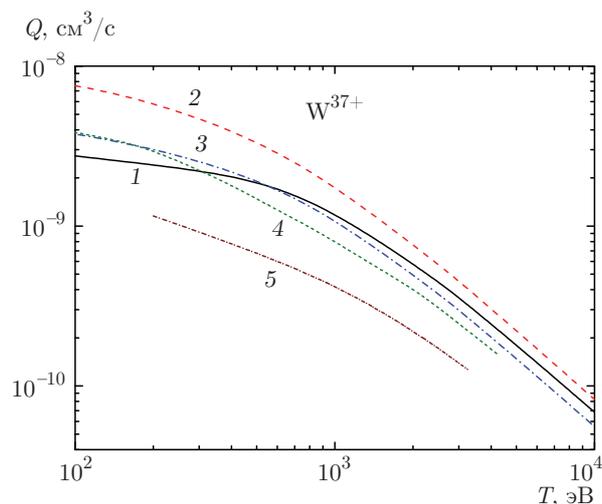
**Рис. 4.** Сравнение статистических зависимостей скорости ДР иона  $W^{20+}$  от температуры с экспериментом [27] и с расчетами поуровневым кодом ADPAK [21]. Обозначения 1–5 те же, что и на рис. 3



**Рис. 5.** Сопоставление статистических зависимостей скорости ДР иона  $W^{29+}$  от температуры с расчетами поуровневыми кодами FAC [23, 28] и ADPAK [21]. Обозначения 1–3, 5 те же, что и на рис. 3, 4 — данные применения кода FAC из работы [28]

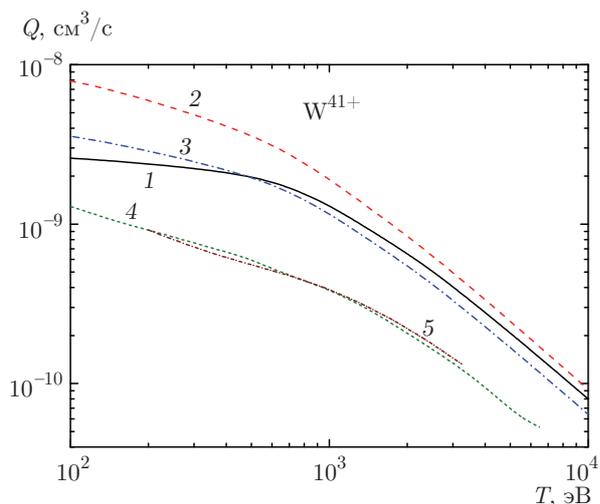
0.1–1.3 кэВ соотношение расчетных кривых с экспериментом меняется очень заметно. Все расчетные кривые демонстрируют некоторое подобие при изменении температуры. Наибольшее различие между расчетами имеет место в области малых температур. При этом все статистические модели дают значения, превышающие данные эксперимента (для модели Брандта–Лундквиста в 2–3 раза) и расчетов кодом ADPAK [21] (для модели Брандта–Лундквиста в 1.5–2 раза). Такое соотношение результатов представляется обоснованным, так как из общих физических соображений следует, что статистический подход фактически дает оценку сверху для значений сил осцилляторов переходов. Поэтому в целом на этом фоне по состоянию исследованности этой проблемы на данный момент результаты статистического подхода также дают оценку сверху для скоростей ДР. Отметим, что результаты эксперимента получены на накопительных кольцах, где условия существенно отличны от плазменной среды (в частности наличием метастабильных состояний ионов) (см. [32, 55, 56]).

На рис. 5–9 приведено сравнение результатов трех статистических моделей с точным суммированием по  $l$  для ионов  $W^{29+}$ ,  $W^{37+}$ ,  $W^{41+}$ ,  $W^{43+}$ ,  $W^{56+}$  в зависимости от температуры плазмы между собой и с данными, полученными кодами HULLAC [13, 18], FAC [23, 28, 30, 33] и кодом ADPAK в [21]. Видно, что зависимости от температуры, характер и величины различия результатов статистических моделей друг от друга и поуровневых квантовомеханических ко-

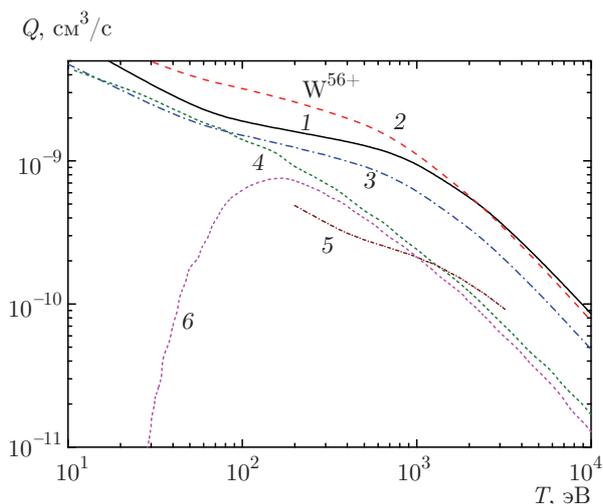


**Рис. 6.** Сопоставление статистических зависимостей скорости ДР иона  $W^{37+}$  от температуры с расчетами поуровневыми кодами FAC [23, 30, 33] и ADPAK [21]. Обозначения 1–3, 5 те же, что и на рис. 1–5; 4 — данные кода FAC из работ [30, 33]

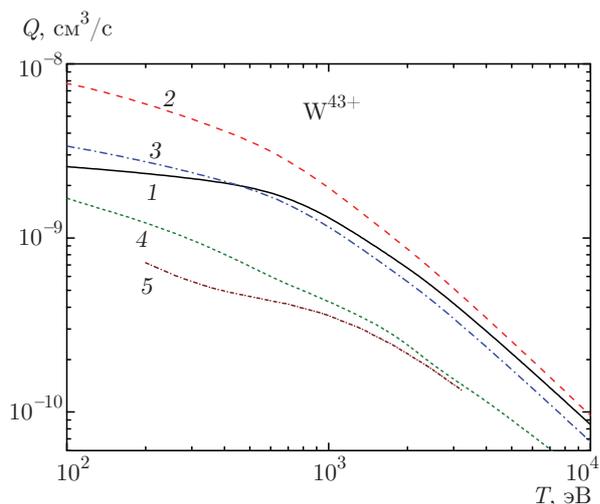
дов для разных ионов – разные. Для иона  $W^{29+}$  на рис. 5 данные модели Брандта–Лундквиста хорошо совпадают с данными модели Роста, а данные FAC [28] с ADPAK из [21]. Например, результаты для модели Брандта–Лундквиста на рис. 5 превышают данные ADPAK в 1.5–2 раза, а максимальное различие в области температур 1 кэВ от кода FAC составляет 3 раза. Кривые, описывающие результаты дру-



**Рис. 7.** Сопоставление статистических зависимостей скорости ДР иона  $W^{41+}$  от температуры с расчетами поуровневыми кодами FAC [23, 30, 33] и ADPAK [21]. Обозначения 1–3, 5 те же, что и на рис. 3–6; 4 — данные кода FAC из работ [30, 33]



**Рис. 9.** Сопоставление статистических зависимостей скорости ДР иона  $W^{56+}$  от температуры с расчетами поуровневыми кодами HULLAC [18] и ADPAK [21], а также полуэмпирической формулой Берджесса–Мерца [18]. Обозначения 1–3, 5 те же, что и на рис. 3–8; 4 — данные кода HULLAC [18]; 6 — расчет по формуле Берджесса–Мерца [1, 2, 4, 5] из работы [18]



**Рис. 8.** Сопоставление статистических зависимостей скорости ДР иона  $W^{43+}$  от температуры с расчетами поуровневыми кодами FAC [23, 30, 33] и ADPAK [21]. Обозначения 1–3, 5 те же, что и на рис. 3–7; 4 — данные кода FAC из работ [30, 33]

гих статистических моделей, при этом идут примерно в 3–4 раза выше результатов поуровневых кодов. Для иона  $W^{37+}$  на рис. 6 данные модели Брандта–Лундквиста хорошо совпадают с данными модели Роста и с данными FAC [30, 33] (различие составляет примерно не более 1.25 раза), а данные ADPAK из работы [21] лежат заметно ниже. Для иона  $W^{41+}$  на рис. 7 данные модели Брандта–Лундквиста хо-

рошо совпадают с данными модели Роста, а данные ADPAK из [21] совпадают с FAC [30, 33]. Результаты указанных статистических моделей превышают данные кодов от трех до четырех раз в рассматриваемом диапазоне температур. Для иона  $W^{43+}$  на рис. 8 данные модели Брандта–Лундквиста и модели Роста неплохо согласуются друг с другом, а данные FAC [30, 33] с данными ADPAK из [21]. При этом максимальное отличие модели Брандта–Лундквиста от FAC, порядка трех раз, наблюдается при температуре 1 кэВ, и оно уменьшается при меньших температурах. Отличие же модели Брандта–Лундквиста от ADPAK в этой области возрастает. И наконец, для иона  $W^{56+}$  на рис. 9 данные HULLAC [18] слабо отличаются от данных ADPAK из [21], но имеют другой наклон в зависимости от температуры, а кривые статистических моделей с плазменными частотами лежат выше кривых в модели Роста, которые в области низких температур совпадают с данными HULLAC [18]. Максимальное отличие модели Брандта–Лундквиста от данных HULLAC опять в области 1 кэВ порядка четырех раз, а модели Роста — 2.5 раза. Данные же модели Брандта–Лундквиста с парциальным по орбитальному моменту распределением атомной электронной плотности превышают результаты кодов также примерно в четыре раза. В целом, различие данных разных моделей для рассмотренных ионов находится в пределах от

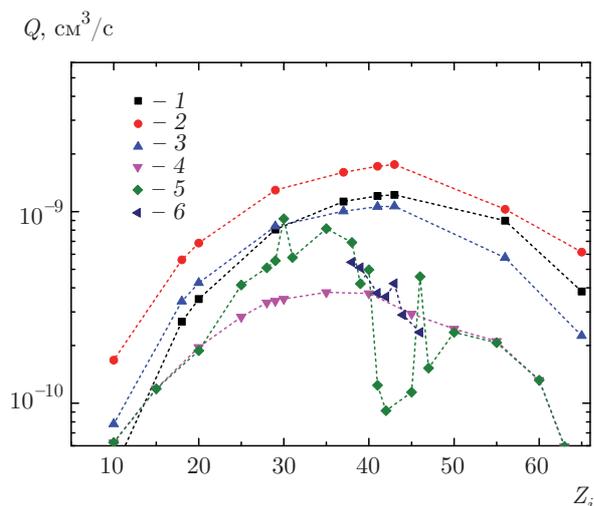


Рис. 10. Сравнение зависимостей скорости ДР от заряда иона вольфрама при температуре 1.1 кэВ. Обозначения 1–3 те же, что и на рис. 3–9; 4 — ADPAK [21]; 5 — версия ADPAK из работы [24]; 6 — код FAC [23, 28, 30, 33]

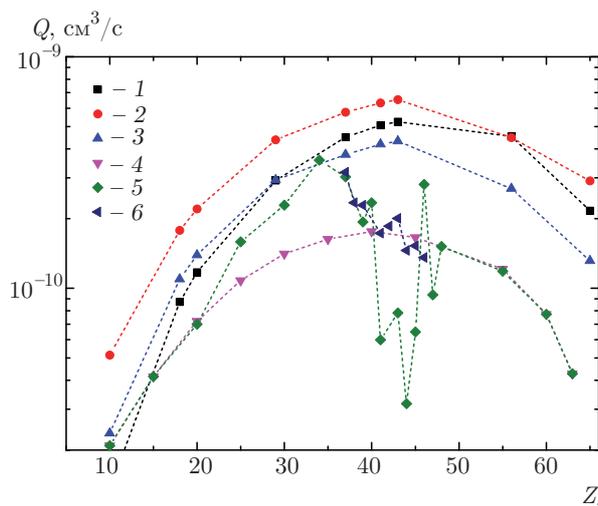


Рис. 11. Сравнение зависимостей скорости ДР от заряда иона вольфрама при температуре 2.5 кэВ. Обозначения те же, что и на рис. 10

двух до четырех раз при изменении температуры на два порядка величины. На рис. 9 приведены также результаты расчетов по полуэмпирической формуле Берджесса–Мерца (БМ) [1, 2, 4, 5] из [18]. В области низких температур эти результаты на много порядков меньше данных других расчетов [18]. Однако при более высоких температурах, начиная с  $T > 200\text{--}300$  эВ, формула БМ хорошо согласуется расчетными данными HULLAC [18] (с точностью  $\leq 20\text{--}30\%$ ) и ADPAK [21], хотя соответствующая кривая и имеет меньший угол наклона. В этой области температур такое же соответствие с данными БМ обнаруживается и в других расчетах кодами FAC [28] и HULLAC [57]. Согласно рис. 9, результаты статистического подхода во всем интервале температур заметно превышают ход данных БМ. При этом в области относительно невысоких температур статистический подход дает более надежные оценки ДР, чем формула БМ.

На рис. 10 и 11 приведено сравнение зависимостей скоростей ДР от величины заряда иона  $Z_i$ , полученных для двух характерных значений температуры 1.1 кэВ и 2.5 кэВ с помощью описанных выше статистических моделей, а также с помощью поуровневых квантовомеханических кодов ADPAK [21, 24] и FAC [23, 28, 30, 33]. Как следует из проведенного анализа, данные квантовомеханических кодов демонстрируют очень резкие скачки значений скоростей ДР даже для ионов соседней кратности (см. также [14, 15, 19, 20]). Поведение таких скачков мож-

но в принципе проследить в поуровневых расчетах по изменению вкладов различных открытых каналов при изменении температуры [14, 15, 19–21, 23, 24, 28, 30, 33], при этом ионы разной кратности имеют разную локализацию таких экстремумов на температурной шкале [14, 15, 19–21, 23, 24, 28, 30, 33]. Однако опубликованные данные расчетов, выполненных с помощью различных кодов, заметно различаются в предсказании скачков в скоростях ДР для ионов и одинаковой кратности. Более того, заметное различие результатов выявляется и при сравнении разных версий одного и того же кода, например, ADPAK [21, 24] (см. рис. 10). Первая из них [21] представляет собой результаты разработчиков этого кода, вторая же [24] представляет код, в котором введены подгоночные коэффициенты для скоростных коэффициентов различных элементарных процессов, чтобы удовлетворить результатам довольно сложных масштабных экспериментов на установках по исследованию термоядерного синтеза с магнитным удержанием. Очевидно, что проблема определения таких коэффициентов представляет собой некорректную многопараметрическую обратную задачу, решение которой с наперед заданной точностью зачастую невозможно получить. Это отчетливо обнаруживается в значительном различии скоростей ДР этих версий кода ADPAK, которое сосредоточено в основном в области скачков ДР в [24]. Возможно, что характер скачков значений ДР в [24] обусловлен в том числе и привязкой расчетных данных к экспериментальным значениям, наблюдаемым для конкрет-

ных условий (см. обсуждение в работе [58]). Зависимость от  $Z_i$  данных статистических моделей довольно плавная и предсказуемая на основе полученных для них выше аналитических выражений. На рис. 10, 11 данные статистических моделей идут заметно выше усредненных по скачкам значений квантовомеханических кодов. В то же время видно, что масштаб этого превышения по порядку величины не отличается от характерного разброса значений скоростей ДР поуровневых кодов в местах скачков [21, 24, 28, 30, 33]. Отметим также, что статистический метод позволяет получать необходимые данные существенно быстрее и с меньшими затратами вычислительных ресурсов, чем поуровневые квантовомеханические коды. Таким образом, приведенные результаты и их сравнение демонстрируют по меньшей мере разумность применения статистического подхода для оценки скоростей ДР.

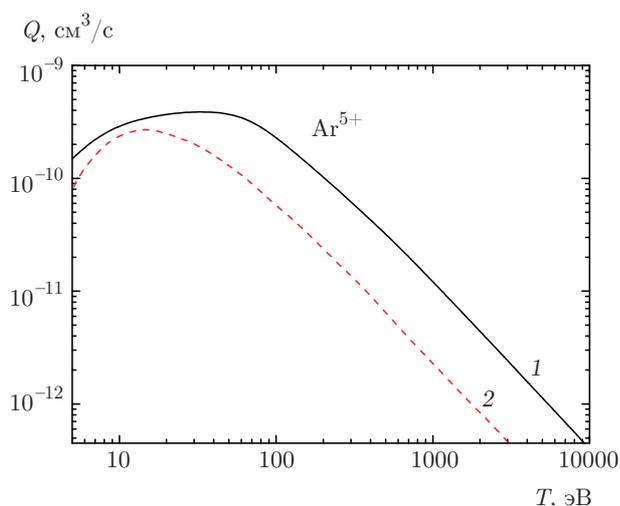
Скоростные коэффициенты ДР медленно уменьшаются с ростом заряда иона  $Z_i$ , что отчетливо прослеживается по данным [21, 24, 28, 30, 33], в которых приведены зависимости от температуры для ряда значений  $Z_i$ . При этом зависимости от температуры имеют разную степень немонотонности и подобия между собой для различающихся фиксированных величин  $Z_i$ . Уменьшение значений скоростных коэффициентов ДР в работах [28, 30] обусловлено в основном известным подавлением скоростей оже-распадов и автоионизации по мере роста  $Z_i$  [38]. В статистических моделях также прослеживается довольно резкое падение эффективных частот с ростом  $Z_i$ , пока энергетический спектр ионного остова достаточно существенно отличается от водородоподобного. По-видимому, нечто подобное происходит и в поуровневых вычислениях [14, 15, 28, 30]. Как видно из сравнения, приведенного на рис. 10, 11, скоростные коэффициенты ДР сильно уменьшаются в предельных случаях очень малой и очень большой обдирки как в поуровневых вычислениях, так и согласно статистическим моделям. Такое поведение полностью соответствует качественным физическим соображениям.

## 10. ОБСУЖДЕНИЕ

Как указывалось нами в предыдущих работах, посвященных описанию возбуждения, ионизации и радиационных потерь в плазме с многоэлектронными ионами тяжелых элементов [36–40], статистический подход оперирует с представлениями о коллективных возбуждениях электронной плотности. Это позволяет получить достаточно надежные уни-

версальные характеристики элементарных процессов в среднем, не претендуя на описание резонансных явлений. Диэлектронная рекомбинация же в этом контексте выделяется на фоне уже рассмотренных процессов тем, что она начинается с резонансного безрадиационного захвата электрона плазмы ионом [1–9]. Естественно поэтому, что этот процесс особенно чувствителен к строению электронной конфигурации рассматриваемого иона. Именно с этим и связаны скачки значений скоростей ДР в результатах поуровневых кодов HULLAC и FAC, когда основной вклад (по крайней мере для температур в области 100–500 эВ) вносят переходы с  $\Delta n = 0$  между разными значениями  $L$ , имеющие большие силы осцилляторов. В этой связи исследование возможного дополнения статистического результата вкладом от таких переходов представляется физически оправданным. В то же время статистический подход демонстрирует важность учета коллективного характера возбуждений атомных осцилляторов (см., например, [59]), отображаемый, в первую очередь, описанием в его рамках сил осцилляторов и их частоты в терминах функционалов атомной электронной плотности, что и приводит к некоторому завышению результатов по сравнению с поуровневыми кодами даже в области, где их результаты испытывают скачки. То же самое происходит и с результатами работы [3], в которой, согласно работе [9], впервые было использовано приближение усреднения по  $l$ , а проведенное в [9] сравнение продемонстрировало заметное превышение результатов [3] над данными, использующими более детальное поуровневое описание факторов ветвления в терминах угловых моментов в отличие от поуровневых расчетов по  $n$  в работе [3].

Статистическая модель применима для многоэлектронных систем. Для тестирования возможностей ее применения для более легких ионов были проведены расчеты скоростей ДР для иона  $\text{Ar}^{5+}$ . Сравнение результатов для скорости ДР иона  $\text{Ar}^{5+}$ , полученных в модели Томаса – Ферми – Брандта – Лундквиста с усреднением по  $l$  (27), с аналитической аппроксимацией компиляции различных численных расчетов [17] представлено на рис. 12. Как и ожидалось, отклонение результатов статистической модели при уменьшении числа связанных электронов и заряда ядра от поуровневых расчетов возрастает и составляет в данном примере в области температур до 100 эВ от двух до четырех раз, а в области температур 1 кэВ до шести раз. Отметим, что данные [17] включают также и приближение Берджесса – Мерца [1, 2, 4, 5].



**Рис. 12.** Сравнение зависимостей скорости ДР для иона аргона  $\text{Ar}^{5+}$  от температуры: 1 — статистическая модель Томаса – Ферми и Брандта – Лундквиста с усреднением по  $l$ ; 2 — расчет согласно работе [17]

Итак, показано, что статистический подход дает универсальное описание процесса ДР для сложных многоэлектронных ионов в диапазоне изменения температуры более чем на два порядка. Сравнение с известными поуровневыми кодами ADPAK [21, 24], FAC [23, 28, 30, 33], HULLAC [13, 18] обнаруживает превышение данных статистической модели в 1.5–4 раза для различных ионов вольфрама, причем расхождение между данными различных кодов может также быть значительным для определенных ионов и интервалов температур. Такие значения скоростей ДР в статистическом подходе по-видимому обусловлены завышением числа дважды возбужденных состояний.

В силу существенно меньших затрат вычислительных ресурсов по сравнению с поуровневыми квантовомеханическими кодами и ввиду своей универсальности статистический подход может использоваться для оценок скоростей ДР в сложных комплексных расчетах по определению параметров горячей термоядерной и астрофизической плазмы. Проведенный анализ показывает, что из рассмотренных статистических моделей, наиболее оптимальные результаты дает модель Роста [48], в основе которой лежат принципы крамерсовской электродинамики [50]. Полученные результаты справедливы для произвольного распределения атомной электронной плотности и поэтому допускают, помимо использованного нами статистического распределения Томаса – Ферми [35, 42, 44, 45], обобщение на распределение электронной плотности Хартри – Фока [35, 42] и др.

Один из соавторов (А. В. Д.) выражает искреннюю признательность Драгану Николичу (Dragan Nikolic) за многочисленные ценные обсуждения.

## ЛИТЕРАТУРА

1. A. Burgess, *Astrophys. J.* **139**, 776 (1964).
2. A. Burgess, *Astrophys. J.* **141**, 1588 (1965).
3. W. H. Tucker and R. J. Gould, *Astrophys. J.* **144**, 244 (1966).
4. A. Burgess and H. Summers, *Astrophys. J.* **157**, 1007 (1969).
5. A. L. Mertz, R. D. Cowan, and N. H. Magee, *LAMS-6220* (1976).
6. В. П. Жданов, *ЖЭТФ* **75**, 1214 (1978).
7. Л. А. Вайнштейн, И. И. Собельман, Е. А. Юков, *Возбуждение атомов и уширение спектральных линий*, Наука, Москва (1979).
8. И. Л. Бейгман, Л. А. Вайнштейн, Б. Н. Чичков, *ЖЭТФ* **80**, 964 (1981).
9. В. П. Жданов, *Вопросы теории плазмы*, Вып. 12, Энергоатомиздат, Москва (1982), с. 79–93.
10. M. Arnaud and R. Rothenflug, *Astr. Astrophys. Suppl. Ser.* **60**, 425 (1985).
11. R. M. More, G. B. Zimmerman, and Z. Zinamon, *AIP Conf. Proceed.* **168**, 33 (1988).
12. M. Arnaud and J. Raymond, *Astrophys. J.* **398**, 394 (1992).
13. E. Behar, P. Mandelbaum, J. L. Schwob, A. Bar-Shalom, J. Oreg, and W. H. Goldstein, *Phys. Rev. A* **52**, 3770 (1995).
14. K. B. Fournier, M. Cohen, W. H. Goldstein, A. L. Osterheld, M. Finkenthal, M. J. May, J. L. Terry, M. A. Graf, and J. Rice, *Phys. Rev. A* **54**, 3870 (1996).
15. K. B. Fournier, M. Cohen, and W. H. Goldstein, *Phys. Rev. A* **56**, 4715 (1997).
16. Л. А. Буреева, В. С. Лисица, *Возмущенный атом*, ИздАТ, Москва (1997).
17. P. Mazzotta, G. Mazzitelli, S. Colafrancesco, and N. Vittorio, *Astr. Astrophys. Suppl. Ser.* **133**, 403 (1998).
18. A. Peleg, E. Behar, P. Mandelbaum, and J. L. Schwob, *Phys. Rev. A* **57**, 3493 (1998).

19. K. B. Fournier, Atomic Data and Nuclear Data Tables **68**, 1 (1998).
20. K. B. Fournier, M. Cohen, W M. J. May, and H. Goldstein, Atomic Data and Nuclear Data Tables **70**, 231 (1998).
21. K. Asmussen, K. B. Fournier, J. M. Laming, J. F. Seely, R. Dux, W. Engelhardt, and J. C. Fuchs, Asdex upgrade team, Nucl. Fusion **38**, 967 (1998).
22. L. A. Bureyeva, T. Kato, V. S. Lisitsa, and C. Namba, Phys. Rev. A **65**, 032702 (2002).
23. M. F. Gu, Astrophys. J. **590**, 1131 (2003); Can. J. Phys. **86**, 675 (2008); <http://kipactree.stanford.edu/fac>.
24. T. Pütterich, R. Neu, R. Dux, A. D. Whiteford, and M. G. O'Mullane, ASDEX Upgrade Team, Plasma Phys. Contr. Fusion **50**, 085016 (2008).
25. S. N. Nahar, JQSRT **109**, 2731 (2008).
26. F. Robicheaux, S. D. Loch, M. S. Pindzola, and C. P. Ballance, Phys. Rev. Lett. **105**, 233201 (2010).
27. S. Schippers, D. Bernhardt, A. Müller, C. Krantz, M. Grieser, R. Repnow, A. Wolf, M. Lestinsky, M. Hahn, O. Novotný, and D. W. Savin, Phys. Rev. A **83**, 012711 (2011).
28. B. W. Li, G. O'Sullivan, Y. B. Fu, and Z. Dong, Phys. Rev. A **85**, 052706 (2012).
29. N. R. Badnell, C. P. Ballance, D. C. Griffin, and M. O'Mullane, Phys. Rev. A **85**, 052716 (2012).
30. Z. Wu, C. Dong et al., Report at 3d Research Coordination Meeting on Spectroscopic and Collisional Data for Tungsten from 1 eV to 20 keV, 7 October 2014, IAEA, Vienna (2014).
31. K. Spruck, N. R. Badnell, C. Krantz, O. Novotný, A. Becker, D. Bernhardt, M. Grieser, M. Hahn, R. Repnow, D. W. Savin, A. Wolf, A. Müller, and S. Schippers, Phys. Rev. A **90**, 032715 (2014).
32. K. Spruck, Thesis for degree of Doctor of the Natural Science, Institut für Atom- und Molekülphysik, Justus-Liebig-Universität, Gießen (2015).
33. Z. Wu, Y. Fu, X. Ma, M. Li, L. Xie, J. Jiang, and C. Dong, Atoms **3**, 474 (2015).
34. N. R. Badnell, G. J. Ferland, T. W. Gorczyca, D. Nikolić, and G. A. Wagle, Astrpophys. J. **804**, 100 (2015).
35. П. Гамбош, *Статистическая теория атома и ее применения*, Изд-во иностр. лит., Москва (1951).
36. А. В. Демура, М. Б. Кадомцев, В. С. Лисица, В. А. Шурыгин, Письма ЖЭТФ **98**, 886 (2013).
37. A. V. Demura, M. B. Kadomtsev, V. S. Lisitsa, and V. A. Shurygin, Pis'ma v Zh. Eksp. Teor. Fiz. **101**, 90 (2015).
38. A. V. Demura, M. B. Kadomtsev, V. S. Lisitsa, and V. A. Shurygin, J. Phys. B **48**, 055701 (2015).
39. A. V. Demura, M. B. Kadomtsev, V. S. Lisitsa, and V. A. Shurygin, High Energy Density Phys. **15**, 49 (2015).
40. A. V. Demura, M. B. Kadomtsev, V. S. Lisitsa, and V. A. Shurygin, Atoms **3**, 162 (2015).
41. С. П. Гореславский, Н. Б. Делоне, В. П. Крайнов, ЖЭТФ **82**, 1789 (1982).
42. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Курс теоретической физики том III. Квантовая механика (нерелятивистская теория)*, Физматлит, Москва (2004).
43. Г. Бете, Э. Солпитер, *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*, Изд-во иностр. лит., Москва (1960).
44. Э. Ферми, *Научные труды том I*, Наука, Москва (1971), с. 284.
45. А. Б. Мигдал, В. П. Крайнов, *Приближенные методы квантовой механики*, Наука, Москва (1966).
46. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, Наука, Москва (1971).
47. W. Brandt and S. Lundqvist, Phys. Rev. **139**, 3A, 612 (1965).
48. J. M. Rost, J. Phys. B **28**, L601 (1995).
49. A. Jablonski, Phys. Rev. **68**, 78 (1945).
50. V. I. Kogan, A. B. Kukushkin, and V. S. Lisitsa, Phys. Rep. **213**, 1 (1992).
51. L. A. Wittwer and S. D. Bloom, Phys. Rev. A **8**, 2249 (1973).
52. А. Д. Уланцев, В. П. Шевелько, Опт. спектр. **65**, 588 (1988).
53. <http://www.numpy.org/>.
54. <https://scipy.org/>.
55. N. R. Badnell, K. Spruck, C. Krantz, O. Novotny, A. Becker, D. Bernhardt, M. Grieser, M. Hahn, R. Repnow, D. W. Savin, A. Wolf, A. Müller, and S. Schippers, Phys. Rev. A **93**, 052703 (2016).

56. C. Krantz, N. R. Badnell, A. Müller, S. Schippers, and A. Wolf, J. Phys. B **50**, 052001 (2017).
57. E. Behar, R. Doron, P. Mandelbaum, and J. L. Schwob, Phys. Rev. A **57**, 3493 (1998).
58. S. P. Preval, N. R. Badnell, and M. G. O'Mullane, J. Phys. B **50**, 105201 (2017).
59. М. Я. Амусья, *Коллективные эффекты в изолированном атоме*, Изв. АН СССР, сер. физич. **45**, 2242 (1981).