

УДК 533.933

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СЕЧЕНИЙ ФОТОИОНИЗАЦИИ ПО СИЛАМ ОСЦИЛЛЯТОРОВ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ

Г. А. Кобзев, Г. Э. Норман, К. И. Серяков

Предлагается оценивать сечения фотоионизации в припороговой области с помощью экстраполяции плотности измеренных сил осцилляторов за предел спектральной серии (получены результаты для Al, Ga, In, Sr) и указывается, что если сечение фотоионизации и соответствующие силы осцилляторов измерены, то взаимное соответствие сечения и плотности сил осцилляторов служит критерием надежности измерений. Из анализа имеющихся экспериментальных данных найдено, что в условиях плазмы (когда наблюдается сдвиг порога) сечение фотоионизации оказывается продолженным в длинноволновую сторону в соответствии с невозмущенной плотностью сил осцилляторов соответствующей спектральной серии.

Непрерывные спектры плазмы и горячих газов в значительной мере, а иногда и полностью, определяются в поглощении процессами фотоионизации (и соответственно процессами рекомбинации — в излучении). Теоретические методы нахождения сечений фотоионизации разработаны еще недостаточно, не учитываются ряд тонких, но существенных для фотоионизации эффектов и в ряде случаев дают резкое расхождение с результатами измерений. Число экспериментальных работ весьма ограничено, и результаты некоторых из них вызывают сомнения. Таким образом, имеется потребность в дополнительных способах оценки и проверки сечений как для основных, так и для возбужденных состояний.

В настоящем сообщении обращается внимание на то, что, используя накопившиеся в литературе сведения по силам осцилляторов спектральных линий, можно путем экстраполяции вдоль серии определить ряд неизвестных сечений фотоионизации в припороговой области.

1. Из теории известно, что для водорода фотометрические плотности дискретного спектра какой-либо серии и соответствующего фотоионизационного спектра непрерывно продолжают друг друга [1]. Этот результат справедлив и для других атомов или ионов, и его можно использовать для определения сечений, экстраполируя плотность сил осцилляторов.

Сечение фотоионизации $\sigma_m(\nu)$ из состояния m выражается через силу осциллятора f перехода в непрерывный спектр соотношением

$$\sigma_m(\nu) = C \frac{df}{d\varepsilon}; \quad C = \frac{\pi e^2}{mcRy} = 8,07 \cdot 10^{-18} \text{ см}^2,$$

где ν — частота; ε — энергия вырванного электрона, выраженная в ридбергах. Для связанных электронов $\varepsilon = -n^{*-2}$, где n^* — эффективное квантовое число n -го уровня. Таким образом, аналитическим продолжением сечения $\sigma_m(\nu)$ на связанные состояния является «размазанное» сечение фотовозбуждения, которое при значениях частоты, равных ν_{mn} , оказывается равным

$$\sigma_m(\nu_{mn}) = C \frac{f_{mn}}{\Delta\varepsilon} \approx C n^{*3} f_{mn} / 2,$$

где ν_{mn} и f_{mn} — частота и сила осциллятора перехода из состояния m в состояние n ; при этом рассматриваются переходы в различные n -е состояния, образующие спектральную серию.

Располагая силами осцилляторов для группы линий какой-либо спектральной серии, мы можем нанести на график соответствующие точки

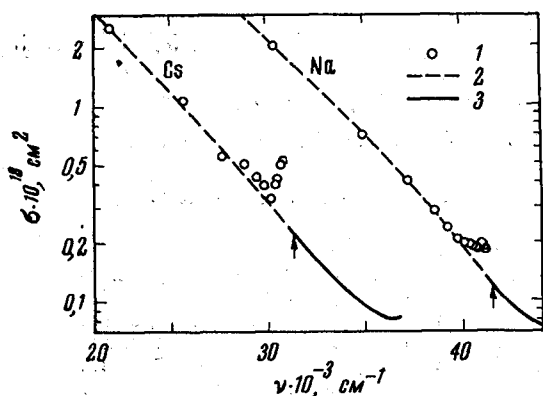


Рис. 1. Сечения фотоионизации и фотовозбуждения из основного состояния атомов щелочных металлов:

1 — значения $\sigma(\nu_{mn})$, найденные по силам осцилляторов из [2] для цезия и из [3] для натрия; 2 — сечение $\sigma(\nu)$, проведенное по этим точкам; 3 — экспериментальные сечения фотоионизации Cs и Na [4]. Стрелки здесь и далее — положения пределов серий

$\sigma_m(\nu_{mn})$, по этим точкам провести плавную кривую и, проэкстраполировав ее в область больших частот, определить таким образом в припороговой области сечение фотоионизации $\sigma_m(\nu)$ из m -го состояния. На рис. 1 справедливость такой процедуры иллюстрируется на примере атомов щелочных металлов, для основных состояний которых измерены как сечения фотоионизации, так и силы осцилляторов значительного числа переходов в возбужденные состояния. Видно, что для самых высших членов спектральных серий (очень слабые линии) измерения могут иметь систематическую погрешность, поэтому их следует сглаживать. Вместе с

тем некоторые отклонения могут быть закономерными, как показывает пример таллия, результаты для которого представлены на рис. 2. Сечение фотоионизации таллия испытывает возмущение, обусловленное наложением автоионизационной линии; отметим, что это возмущение проявляется в узком спектральном интервале и величины $\sigma(\nu_{mn})$ и $\sigma(\nu)$ вне области возмущения соответствуют друг другу. Такой характер частотной зависимости сечения в случае наложения автоионизационной линии был получен также и при теоретическом рассмотрении [10] и объяснен взаимодействием конфигураций.

Проверив надежность экстраполяции, применим ее для нахождения сечений фотоионизации из основного состояния Al, Ga, In и Sr. На рис. 2 проводится требуемое построение. Оптический электрон атомов Al, Ga, In (и Tl) находится в p -состоянии, поэтому для нахождения сечений нужно проэкстраполировать в отдельности $\sigma(\nu_{mn})$, соответствующие резкой и диффузной серии; при этом, как правило, основную роль играет $p-d$ -переход (для Al вклад $p-s$ -перехода в припороговой области на два порядка меньше вклада $p-d$ -перехода).

Для Al экстраполяция оказывается достаточно надежной. Небольшое возмущение высших членов, сглаженное при экстраполяции, возможно, и закономерно, но не влияет на экстраполяцию, так как локализовано в узком интервале (ср. обсуждение для Tl). Обращает на себя внимание большая величина полученного сечения (10^{-16} cm^2). Этот факт может быть полезен в связи с астрофизической задачей [11].

Для Ga удалось провести экстраполяцию только для $p-s$ -перехода, поскольку имеющиеся данные для $\sigma(\nu_{mn})$ $p-d$ -перехода попадают на участок резкого спада, аналогичный рассмотренному для Tl, но смещенный влево и захватывающий больший частотный интервал. Поэтому сечение $\sigma(\nu)$, экстраполированное по $p-s$ -переходу, дает нижнюю границу сечения фотоионизации галлия (ср. с Tl, где минимум экспериментального сечения соответствует точкам $\sigma(\nu_{mn})$, построенным для $p-s$ -

перехода). Аналогичная картина получается для индия; используя силы осцилляторов, полученные в [12], находим $\sigma(\nu) \geq 1 \cdot 10^{-18} \text{ см}^2$.

Для Al, Ga, In и Tl основная конфигурация имеет два уровня: $2P_{3/2}$ и $2P_{1/2}$. Экстраполяцией можно находить сечение для каждого из них. Для Al точки практически сливаются; для Ga на рис. 2 приводятся оба на-

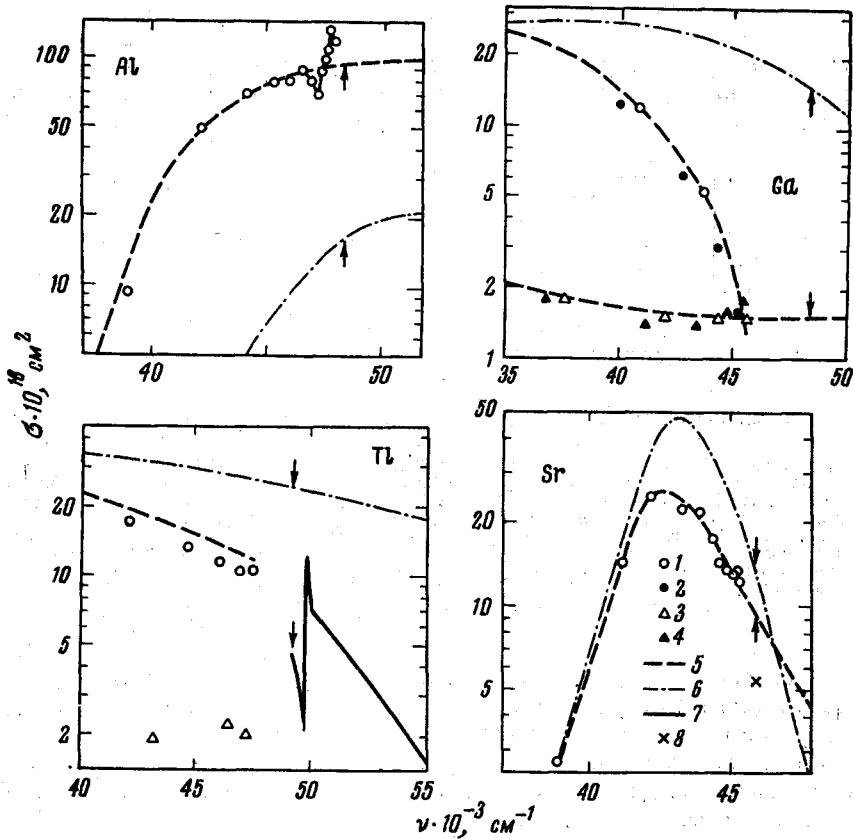


Рис. 2. Сечения фотоионизации и фотовозбуждения из основного состояния Al, Ga, Tl и Sr. Значения $\sigma(\nu_{mn})$ для серий:

1 — $3^2P^0 - n^2D$ Al [5], $4^2P_{1/2}^0 - n^2D$ Ga [5], $6^2P_{1/2}^0 - n^2D$ Tl [6]; $5s^1S_0 - np^1P^0$, Sr [7], 2 — $4^2P_{3/2}^0 - n^2D$ Ga [5]; 3 — $4^2P_{3/2}^0 - n^2S$ Ga [5], $6^2P_{3/2}^0 - n^2S$ Tl [6]; 4 — $4^2P_{1/2}^0 - n^2S$ Ga [5]; 5 — суммарное сечение фотовозбуждения (для Ga проведены кривые для обеих серий в отдельности); 6 — расчет по Вёрджесу — Ситону; 7 — экспериментальное сечение фотоионизации (и автоионизационная линия) для Tl [8]; 8 — пороговое значение $\sigma(\nu)$ стронция из предварительных измерений [9]

бора точек (кривые сечений проведены для основного состояния); для Tl сечение $2P_{1/2}$ смещено влево на $\sim 8000 \text{ см}^{-1}$, при этом величины $\sigma(\nu_{mn})$ для $2P_{3/2}$, не показанные на рис. 2, сходны с точками для $2P_{1/2}$.

Стронций принадлежит к другой группе периодической системы. Экстраполяция также оказывается достаточно уверенной, несмотря на отличную от предыдущих частотную зависимость. Полученное сечение согласуется с предварительным значением сечения в пороге, измеренным в [9].

В случае, когда известны и сечения, и отдельные силы осцилляторов, можно использовать интерполяцию величины $\sigma(\nu)$ для определения остальных сил осцилляторов. Например, для He и Ne недавно были измерены силы осцилляторов резонансных линий [13]; проведя интерполяцию по соответствующей величине $\sigma(\nu_{mn})$ и известным сечениям фотоионизации [14, 15], можно найти остальные значения $\sigma(\nu_{mn})$, а следовательно, и силы осцилляторов переходов с основного состояния (для Ne

получим суммарную величину для $p-d$ и s -переходов). Надежность интерполяции косвенно можно проверить с помощью правила сумм. Из имеющихся правил сумм линии и околопороговая область континуума играют определяющую роль в равенстве [15]

$$4 \sum_n f_{mn} E_{mn}^{-2} = \alpha_m,$$

где суммирование распространяется на все уровни и включает интегрирование по континууму; α_m — поляризуемость (в атомных единицах); E_{mn} — энергии переходов (в риддбергах). Для He и Ne получаем $\alpha = 1,41$

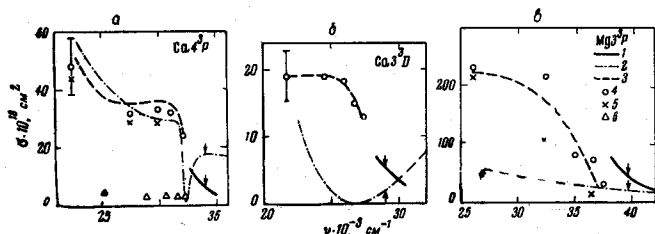


Рис. 3. Сечения фотоионизации и фотовозбуждения из возбужденных состояний Ca и Mg:

1 — сечение фотоионизации из состояний 4^3P и 3^3D для кальция [16] и из 3^3P — для магния [17]; 2 — расчет по Бёрджесу — Ситону; 3 — суммарные сечения фотовозбуждения, проведенные по точкам $\sigma(\nu_{mn})$ для серий: а — 4 [18] и 5 [19] — $4^3P - n^3D$, б [18] — $4^3P - n^3S$ (суммарная кривая проведена по данным [18]); в — 4 [18] — $3^3D - n^3F$; г — 4 [20] и 5 [7] — $3^3P - n^3D$. В работах [7, 18, 20] проведены относительные измерения; для кальция они были нормированы по среднему значению силы осциллятора первой линии серии, по которой имеется ряд абсолютных измерений [19, 21—23], на графике указан разброс результатов различных авторов; для магния результаты [20] нормированы по значению f для линии $3^1S_0 - 3^3P_1$, взятой из [24], а результаты [7] — по $3^3P_0 - 4^3S$, взятой из [22]

и 2,71 в согласии с результатами прямых измерений: 1,39 и 2,68 [14, 15]. Экстраполяцию и интерполяцию можно использовать и в обратной задаче, например при вычислении неизвестной поляризуемости.

Соответствие между сечениями фотовозбуждения и фотоионизации использовалось выше для проведения экстраполяции. Другим важным применением этого соответствия является проверка экспериментальных данных. В ряде измерений получены величины сечений, резко противоречащие имеющимся теоретическим оценкам. Поэтому необходимы какие-либо критерии, позволяющие судить о достоверности результатов. Для выяснения надежности экспериментальных данных можно сопоставить полученные сечения и величину $\sigma(\nu_{mn})$, построенную по экспериментальным же значениям f_{mn} линий соответствующих серий.

На рис. 3 проводится такое сопоставление для трех сечений Ca и Mg. В случае Ca 3^3D имеет место удовлетворительное согласие, что говорит о разумности экспериментальных данных и о непригодности формул Бёрджеса — Ситона для данного случая. Для Ca 4^3P ход кривой менее плавный, однако имеющаяся крайняя точка обеспечивает соответствие сечения фотовозбуждения измеренному сечению фотоионизации. Несколько странным кажется то, что теория неплохо согласуется с $\sigma(\nu_{mn})$, но расходится с измеренным сечением.

Весьма неясным оказывается положение с Mg 3^3P . Значения сил осцилляторов не согласуются с измеренным сечением (расхождение станет еще более значительным, если учесть, что фактически в [17] измерялось отношение сечения фотоионизации к силе осциллятора перехода $3^3P - 5^3S$, величина которой бралась из теории и оказалась в 2—4 раза заниженной по сравнению со значениями, полученными в более поздних измерениях [20, 22—24]). Чтобы картина стала ясной, необходимы более тщательные измерения вероятностей переходов с уровня 3^3P . Отметим, что теорети-

ческая кривая противоречит имеющимся результатам как по силам осцилляторов, так и по сечению фотоионизации.

На рис. 2—5 наряду с экспериментальными данными нанесены кривые, построенные по формулам Бёрджеса — Ситона (частично по таблицам Бейтса — Дамгард) *. Формулы БС являются универсальными и широко используются в литературе. Но, как видно из рис. 2, 3, в ряде случаев они дают результаты, не согласующиеся с экспериментальными данными ни по абсолютной величине, ни по частотной зависимости. Причем это имеет место не только для основных, но и для возбужденных состояний. Приближение БС достаточно грубое и не учитывает ряда важных факторов, в частности взаимодействия конфигураций, отклонения от $L - S$ -связи и др. [29], что может быть причиной обнаруженных расхождений. На связь возмущений в поведении сил осцилляторов и взаимодействия конфигураций указывается также в [28].

Таким образом, когда имеется достаточно данных по величинам f_{mn} , оценка сечений фотоионизации в припороговой области с помощью экстраполяции, предлагаемой в настоящей статье, дает более надежный результат, чем вычисления по формуле БС.

2. В условиях плазмы происходит смещение наблюдаемого порога фотоионизации в длинноволновую сторону, обусловленное взаимодействием частиц в плазме. Это явление имеет сложную природу; наиболее простое его истолкование заключается в том, что верхние члены спектральных серий оказываются настолько уширенными, что перекрываются друг с другом, сливаются и образуют таким образом непрерывный спектр. Это объяснение не вполне точно, поэтому мы будем говорить не о слиянии, а о преобразовании линий в непрерывный спектр.

Для приближенного учета смещения порогов фотоионизации можно допустить, что влияние взаимодействия на непрерывные спектры сводится только к тому, что высшие члены спектральных серий преобразуются в непрерывный спектр в соответствии с невозмущенной плотностью своих сил осцилляторов. Таким образом сечение фотоионизации с отдельного m -го уровня оказывается продолженным в длинноволновую сторону за идеальную пороговую частоту ν_m^0 на некоторую величину, обозначаемую $\Delta\nu$. Для частот, больших ν_m^0 , сечение фотоионизации считается неизменившимся. Такие допущения являются распространением принципа спектроскопической устойчивости на высшие члены спектральных серий и непрерывный спектр [30].

Известно, что для основных линий взаимодействие приводит к уширению, но практически не меняет силы осциллятора. Однако неясно, насколько это остается справедливым при переходе к высшим дискретным уровням и к непрерывному спектру. Взаимодействие может, вообще говоря, изменить само сечение фотоионизации и плотность сил осцилляторов. Представляет интерес провести анализ имеющихся экспериментальных данных по отдельным сечениям.

Необходимо сравнить следующие величины: плотность сил осцилляторов и сечение фотоионизации, измеренные в условиях малого сдвига, и сечения фотоионизации, измеренные при различных сдвигах $\Delta\nu$. Однако набора таких измерений ни для одного сечения пока не имеется. Наиболее полные результаты можно получить для фотоионизации кислорода из состояния 3^5P и аргона $4s$ и s' (рис. 4, 5). Для переходов с этих уровней измерены как силы осцилляторов, позволяющие получить в двух точках

* а) Было учтено, что дефекты d^3D термов Са возмущены и изменяют свою величину на единицу в районе $27\,000\text{ см}^{-1}$, чем объясняется необычный вид кривой, полученной по формуле БС (аналогичную кривую можно, вообще говоря, получить и для Tl). б) Для состояния Са 3^3D величина $n^* \simeq 2$, поэтому нормировочный множитель $\xi = 1 + (2/n^{*3})(d\mu/d\varepsilon)$ брался в линейном приближении [25] $\xi = (n^* - 2) \cdot (n^* + 4) / n^*(n^* + 2)$; μ — квантовый дефект. в) Квантовые дефекты получены по данным [26], а для Al, Ga, In, Tl и Sr бралась из работ [27, 28].

суммарное сечение фотовозбуждения, так и величины смещенных пороговых скачков.

Суммарная плотность сил осцилляторов для переходов из состояния 3^5P атома кислорода определяется двумя спектральными сериями:

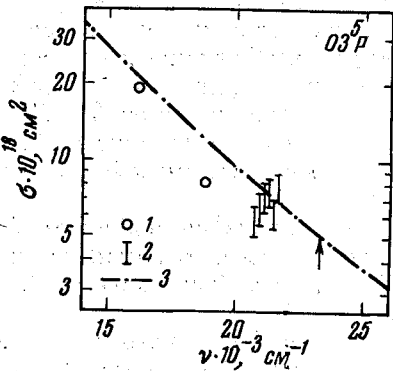


Рис. 4. Сечение фотоионизации и фотовозбуждения из состояния 3^5P кислорода:

1 — средние суммарные значения сечения фотовозбуждения $3^5P - n^5D$ ($n = 4, 5$), n^5S ($n = 5, 6$) [31]; 2 — пороговые значения сечений в условиях плазмы с указанием возможной погрешности обработки данных [32]; 3 — расчет по Ситону — Бёрджесу

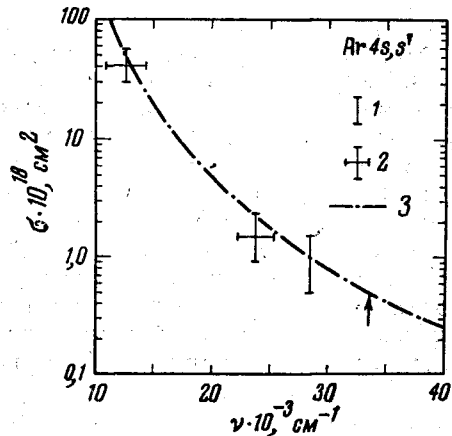


Рис. 5. Сечения фотоионизации и фотовозбуждения из состояний $4s$ и s' аргона

1 — пороговое значение сечения в условиях плазмы с указанием погрешности измерения [33]; 2 — суммарные, усредненные значения $\sigma(\nu_{mn})$ для переходов $4s, s' - np, p'$ ($n = 4, 5$); указаны спектральный интервал, который занимают различные линии для перехода с данным n , и разброс результатов измерений разных авторов [34]; 3 — расчет по Ситону — Бёрджесу

$3^5P - n^5S^0$ и n^5D^0 (последняя является определяющей). Более сложно обстоит дело для переходов из состояния $4s$ атома аргона. Каждому из четырех s (или s') уровней соответствует несколько серий, например, $4s[3/2]_1^0 \rightarrow np[1/2]_1, np[5/2]_2, np'[3/2]_2$ и т. д. Для каждой из серий нужно построить свою зависимость $\sigma(\nu_{mn})$ и затем сложить результаты, полученные для одного и того же начального s -уровня. Оказалось, что для всех четырех s -уровней получаются близкие суммарные результаты. На рис. 5 приводятся средние значения.

Смещенные значения пороговых скачков для кислорода можно получить из работы [32]. В этой работе получены спектры, в которых отдельные континуумы налагаются на сильный фон, поэтому результаты измерений позволяют выделить только пороговые величины сечений. Но поскольку измерения проведены для нескольких условий, которым соответствуют различные значения сдвига $\Delta\nu$, то можно определить величину сечения для нескольких значений частоты. К сожалению, полученные точки имеют сильный разброс и не дают информации о частотном ходе, но по абсолютной величине они хорошо согласуются с точками для сечения фотовозбуждения (см. рис. 4).

Пороговая величина сечения фотоионизации для перехода из $4s$ -состояния аргона оценена в измерениях [33] для одного значения $\Delta\nu$. Эта величина, как видно из рис. 5, также соответствует плотности измеренных сил осцилляторов.

Наконец, оказывается, что полученные величины (как и следует ожидать для таких атомов) неплохо согласуются с теоретической кривой, построенной по Бейтсу — Дамгард — Бёрджесу — Ситону. Мы можем считать, что теоретическая кривая служит нам около порога в качестве реального сечения фотоионизации и фотовозбуждения изолированного атома.

Из рис. 4 и 5 можно заключить о разумности предположения о спектрокопической устойчивости высших членов спектральных серий при их

преобразовании в непрерывный спектр. Напомним также, что обсуждавшиеся в пункте первом сечения σ_a также получены в условиях, когда порог фотоионизации оказывается смещенным. И в этом случае сечения оказываются продолженными в соответствии с плотностью сил осцилляторов. Резкий частотный ход сечений на рис. 3—5 позволяет сделать вывод, что в пределах ошибки эксперимента сечения оказываются именно продолженными в соответствии с $\sigma(\nu_{mn})$, во всяком случае в условиях не очень плотной плазмы, исследовавшейся в [16, 32, 33].

В заключение отметим, что сложность в теоретическом рассмотрении преобразования линий в непрерывный спектр заключается в том, что линии не только сливаются и образуют, таким образом, кажущийся непрерывный спектр, но часть из них и фактически переходит в непрерывный спектр, так как верхние уровни не реализуются (последнее соображение, как известно, используется для обрезания статистической суммы).

Выражаем признательность Л. М. Биберману за внимание и интерес к работе.

Московский энергетический
институт
Научно-исследовательский
институт высоких температур

Поступила в редакцию
19 VII 1965

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Зоммерфельд. Строение атома и спектры. Гостехиздат, 1956.
2. Г. С. Кватер, Т. Г. Мейстер. Вестн. ЛГУ, № 9, 137, 1952.
3. А. Н. Филиппов, В. К. Прокофьев. Z. Phys., 56, 458, 1929.
4. Р. Дитчбёрн, У. Опик. Атомные и молекулярные процессы (под ред. Д. Бейтса). Изд-во «Мир», 1964.
5. Н. П. Пенкин, Л. Н. Шабанова. Оптика и спектроскопия, 18, 896, 1965.
6. A. Gallagher, A. Lurio. Phys. Rev., 136, A87, 1964.
7. Н. П. Пенкин, Л. Н. Шабанова. Оптика и спектроскопия, 12, 3, 1962.
8. G. V. Magg. Proc. Roy. Soc., A224, 83, 1954.
9. R. D. Hudson, P. A. Young. Bull. Amer. Phys. Soc., 7, 457, 1962.
10. U. Fano. Phys. Rev., 124, 1866, 1961.
11. A. Burgess, G. B. Field, R. W. Mische. Astrophys. J., 131, 529, 1960. K. Kodaira, Z. Astrophys., 60, 240, 1965.
12. Н. П. Пенкин. J.Q.S.R.T., 4, 41, 1964.
13. Ф. А. Королев, В. И. Одинцов. Оптика и спектроскопия, 18, 968, 1965; Ф. А. Королев, В. И. Одинцов, Е. В. Фурсов. Оптика и спектроскопия, 16, 555, 1964; H. R. Griem, R. Lincke, Bull. Amer. Phys. Soc., 10, 202, 1965.
14. J. F. Lowry, D. H. Tomboulian, D. L. Ederer. Phys. Rev., 137, A1054, 1965.
15. D. L. Ederer, D. H. Tomboulian. Phys. Rev., 133, A1525, 1964; J. A. R. Samson, T. L. Kelly. Phys. Rev., 138, A418, 1965.
16. S. Keilm, D. Schlüter. Z. Astrophys., 56, 78, 1962.
17. W. Böttcher. Z. Phys., 150, 336, 1958.
18. K. H. Olsen, P. M. Routly, R. V. King. Astrophys. J., 130, 688, 1959.
19. Ю. Н. Островский, Н. П. Пенкин. Оптика и спектроскопия, 10, 429, 1961.
20. J. A. M. Kersten, L. S. Ornstein. Physica, 8, 1124, 1941.
21. H. Köstlin. Z. Phys., 178, 200, 1964; J. Schuttevaer, M. de Bout, H. von den Brock. Physica, 10, 544, 1943.
22. C. W. Allen. Monthly Notices Roy. Astron. Soc., 117, 653, 1957.
23. C. H. Corliss, W. R. Vozman. NBS Monograph, 53, 1962.
24. G. Boldt. Z. Phys., 150, 205, 1958.
25. Г. Э. Норман. Оптика и спектроскопия, 14, 593, 1963.
26. Ch. Moore. Atomic energy levels, N.B.S., vol. I, 1949; vol. II, 1952; vol. III, 1958.
27. Н. П. Пенкин, Л. Н. Шабанова. Оптика и спектроскопия, 18, 749, 1965.
28. Н. П. Пенкин, Л. Н. Шабанова. Оптика и спектроскопия, 18, 941, 1965.
29. Г. Э. Норман. Оптика и спектроскопия, 19, 657, 1965.
30. Л. М. Биберман, В. С. Воробьев, Г. Э. Норман, И. Т. Якубов. Космические исследования, 2, 441, 1964; Astronautica Acta, 10, 238, 1964.
31. G. Jürgens. Z. Phys., 138, 613, 1954; E. W. Foster. Proc. Phys. Soc., 79, 94, 1962; I. E. Solarzky, W. L. Wiese. Phys. Rev., 135, A1236, 1964.
32. G. Boldt. Z. Phys., 154, 319, 1959.
33. Э. И. Асиновский, В. М. Батенин. Теплофизика высоких температур, 3, 530, 1965.
34. H. Drawin. Z. Phys., 146, 295, 1956; W. E. Gericke. Z. Astrophys., 53, 68, 1961; P. I. Dickerman, J. Alpiner. J.Q.S.R.T., 2, 305, 1962; H. N. Olsen, L. Doherty. J.Q.S.R.T., 3, 59, 1963; A. Perry-Thorne, J. E. Chamberlain. Proc. Phys. Soc., 82, 133, 1963.