

# Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

С. П. Ветчинин, Ю. К. Куриленков, Распределение сил осцилляторов атома водорода в плотных средах и плазме, *ТВТ*, 1980, том 18, выпуск 2, 225–229

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 18.97.9.173

22 января 2025 г., 21:28:24



УДК 533.082.5

РАСПРЕДЕЛЕНИЕ СИЛ ОСЦИЛЛЯТОРОВ АТОМА ВОДОРОДА  
В ПЛОТНЫХ СРЕДАХ И ПЛАЗМЕ*Ветчинин С. П., Куриленков Ю. К.*

Расчитано сечение фотоионизации и распределение сил осцилляторов атома водорода в плотной плазме на основе простого модельного потенциала, учитывающего влияние на электрон в атоме полей окружающих частиц. Показано появление «окна прозрачности» вблизи порога фотоионизации атома и перераспределение энергии в спектрах поглощения (излучения) в области больших частот. При этом сумма сил осцилляторов по спектру близка к единице, если в область возмущения не попадает первое возбужденное состояние. Обсуждаются границы применимости результатов.

При описании спектров слабонеидеальной плазмы вблизи границ спектральных серий обычно широко используется предположение о невозможности плотности сил осцилляторов  $df/dE$  [1, 2]. В [3, 4] было указано на принципиальную возможность появления провала в распределении  $df/dE$  вблизи порога фотоионизации атомов в неидеальной плазме. Разработанный в [3, 4] подход позволил предсказать и качественно пояснить возникновение в спектрах поглощения плотной плазмы «окон прозрачности» вблизи порогов, что нашло и экспериментальное подтверждение [4, 5].

В данной работе сделана попытка расчета  $df/dE$  или сечения фотоионизации в условиях плотной среды исходя из простых модельных представлений. Различные физические задачи (в частности, в оптике), возникающие при рассмотрении атома в неидеальной плазме, в плотном газе и твердом теле (атом внедрения), по-видимому, могут решаться с помощью близких модельных потенциалов. Действительно, кулоновский потенциал, в котором движется оптический электрон атома в неидеальной плазме, заметно искажается на больших расстояниях микрополем и фактически становится короткодействующим [3, 4]. В плотном газе [6] перекрытие потенциалов ведет к образованию области энергий, соответствующей состояниям непрерывного спектра, от  $E=0$  и ниже до вершины потенциального барьера между соседними атомами (рис. 1, а). Близкое рассмотрение используется и при описании потенциала кристаллической решетки, где вводится так называемый  $MT$ -потенциал [7]. Последний представляет собой центрально-симметрическую функцию внутри сферы фиксированного радиуса (с центром в узле решетки), а междоузельный потенциал ( $MT$ -нуль) в простейшем приближении принимается постоянным.

При фотоионизации атома в плотной плазме оптический электрон попадает в поле, создаваемое совокупностью окружающих частиц. Поля электронов и ионов действуют на атом по-разному. Электрические микрополя, создаваемые электронами с энергией  $\sim 1$  эВ, являются быстропеременными и атом, вследствие инерционности электронных оболочек, не успевает следить за ними. В то же время ионные микрополя являются квазистатическими и искажают атомный потенциал. Поэтому для определения сечения фотоионизации атома в плотной плазме в качестве модельного потенциала выберем потенциал  $\varphi(r)$ , напоминающий *MT*-потенциал,

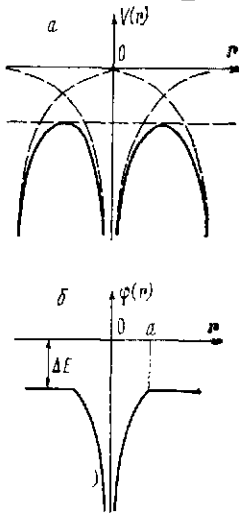


Рис. 1

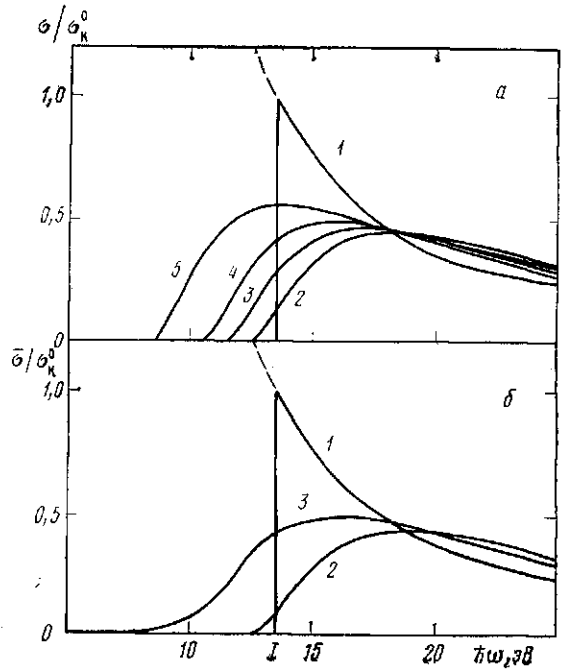


Рис. 2

Рис. 1. Схема образования области перекрытия потенциалов (а) и модельный потенциал (б)

Рис. 2. Сечения фотоионизации основного состояния атома водорода (1 — кулоновское сечение  $\sigma_k(\omega)$ ,  $\sigma_k^0$  — значение  $\sigma_k$  в пороге [8]); а — по (5) при фиксированных значениях  $\Delta E$ : 2 — 1 эВ, 3 — 2, 4 — 3, 5 — 5; б — в плотной плазме при: 2 —  $n_i = 10^{18}$  см $^{-3}$ ; 3 —  $10^{20}$

который совпадает с кулоновским при  $r < a$ , а при  $r \geq a$   $\varphi(r) = -\Delta E = \text{const}$  (рис. 1, б). Таким образом,  $\varphi(r)$  представляет собой кулоновский потенциал с видоизмененной дальнедействующей частью при  $r > a$ .

**Сечение фотоионизации.** Вычислим сечение фотоионизации атома водорода из основного состояния, учитывая, что электрон теперь движется в видоизмененном кулоновском потенциале  $\varphi(r)$ . При поглощении фотона с энергией  $\hbar\omega$  электрон из основного состояния переходит в состояние непрерывного спектра. Его кинетическая энергия в конечном состоянии определяется соотношением

$$p^2/2m = \hbar\omega - E_0, \quad (1)$$

где  $E_0 = I - \Delta E$  — энергия ионизации;  $I$  — потенциал ионизации изолированного атома водорода.

Состояние электрона в непрерывном спектре с энергией  $E > \Delta E$  будем описывать в простейшем случае плоской волной

$$\psi_f = (1/\sqrt{V}) \exp(-ipr/\hbar), \quad (2)$$

где  $p$  — импульс электрона, определяемый соотношением (1);  $\psi_f$  нормиро-

вана на объем  $V$ . Эта волновая функция отличается от точной волновой функции непрерывного спектра, описывающей движение в потенциале  $\varphi(r)$ , лишь на малых расстояниях  $r < a$  (рис. 1, б). Основной вклад в сечение фотоионизации вблизи порога вносят большие расстояния  $r > a$ , поэтому плоская волна (2) точно описывает поведение сечения в припороговой области. Волновая функция  $\psi_f$  (2) также правильно описывает поведение сечения фотоионизации и при больших энергиях  $\hbar\omega \gg E_0$ , что является следствием применимости борновского приближения.

В дипольном приближении сечение фотоионизации может быть вычислено исходя из формулы

$$\sigma = \frac{2}{3} \left( \frac{e^2}{\hbar c} \right) \frac{p}{m\omega} |\mathbf{r}_{if}|^2, \quad (3)$$

где  $\mathbf{r}_{if}$  — матричный элемент импульса электрона, соответствующий переходу между начальным и конечным состояниями [8]. Если конечное состояние описывается плоской волной  $\psi_f(r)$ , то  $\mathbf{r}_{if} = \mathbf{p}(\psi_0)_p$ , где  $(\psi_0)_p$  — фурье-образ волновой функции основного состояния. Данное соотношение может быть получено интегрированием по частям выражения для матричного элемента. В этом случае

$$\sigma \sim (p^3/\omega) (\psi_0)_p^2. \quad (4)$$

Фурье-образ волновой функции основного состояния конечен при  $p \rightarrow 0$  вне зависимости от вида самой волновой функции, поэтому  $\sigma \sim p^3$  при  $p \rightarrow 0$ . Эта зависимость соответствует пороговому поведению сечения фотоионизации [9]  $\sigma \sim p^{2l+1}$ , характерному для любого вида потенциала, убывающего с расстоянием быстрее, чем кулоновский ( $l$  — орбитальный момент электрона в конечном состоянии).

В рассматриваемом случае при фотоионизации из  $s$ -состояния орбитальный момент электрона в непрерывном спектре  $l=1$ . В дальнейшем нас в основном будут интересовать возмущения  $\Delta E \ll I$ . Такие возмущения практически не искажают волновую функцию основного состояния атома водорода. Поэтому для описания основного состояния в потенциале  $\varphi(r)$  используем невозмущенную водородную волновую функцию

$$\psi_0(r) = (\pi a_0^3)^{-1/2} \exp(-r/a_0),$$

где  $a_0$  — борковский радиус. Тогда для сечения фотоионизации из (3) получаем следующее выражение:

$$\sigma = \frac{2^7 \pi}{3} \left( \frac{e^2}{\hbar c} \right) a_0^3 \frac{p^3}{\hbar^2 m \omega (1 + p^2 a_0^2 / \hbar^2)^4}. \quad (5)$$

При больших энергиях  $\hbar\omega \gg E_0$ , что отвечает борновскому приближению, полученное сечение (5) совпадает с асимптотикой кулоновского сечения фотоионизации атома водорода из основного состояния [8]

$$\sigma_{\kappa} = \frac{2^8 \pi}{3} \left( \frac{e^2}{\hbar c} \right) a_0^2 \left( \frac{I}{\hbar\omega} \right)^{1/2}.$$

На рис. 2, а приведена зависимость  $\sigma(\omega)$  (5) для ряда значений  $\Delta E$ . Для сравнения показано кулоновское сечение фотоионизации  $\sigma_{\kappa}(\omega)$ . Видно, что кроме принципиального изменения порогового закона поведения сечения происходит также смещение порога фотоионизации на величину  $\Delta E$ . Максимумы функций  $\sigma(\omega)$  расположены примерно при  $\hbar\omega \approx 10(E_0 + \Delta E)/7$ .

**Распределение сил осцилляторов.** Как видно из рис. 2, а, при  $\hbar\omega \leq I$  полученные результаты оказываются заметно меньше  $\sigma_{\kappa}$ . В то же время на больших частотах в широком диапазоне  $\omega$  значения  $\sigma(\omega) \sim df/dE$  превышают  $\sigma_{\kappa}$  ( $\sigma(\omega) \rightarrow \sigma_{\kappa}(\omega)$  при  $\omega \rightarrow \infty$ ). Таким образом, в рассматриваемой модели имеет место перераспределение поглощаемой (излучаемой) энергии по спектру: вблизи порога есть провал по сравнению с невозмущенным

значением  $df/dE$ , а, начиная с  $\hbar\omega \approx 2E_0$ , полученное распределение сил осцилляторов превышает невозмущенное. В то же время сумма сил осцил-

ляторов по спектру  $S = \sum_n f_n + \int_{E_0}^{\infty} (df/dE) dE$  оказывается близкой

к единице до тех пор, пока в область  $\Delta E$  не попадает первое возбужденное состояние атома водорода (главное квантовое число  $n=2$ ) (см. таблицу). Силы осцилляторов для переходов в дискретном спектре, приведенные в таблице, соответствуют невозмущенным значениям. Отметим, что вели-

$\Delta E, \text{эВ}$	$\sum_n f_n$	$\int_{E_0}^{\infty} (df/dE) dE$	$S$
1	0,495	0,516	1,011
3	0,416	0,56	0,976
5	—	0,617	0,617

чины  $f_n$  для рассматриваемого потенциала будут несколько меньше невозмущенных из-за уменьшения интеграла перекрытия волновых функций дискретных состояний. Действительно, волновые функции дискретных состояний, следующие из решения уравнения Шредингера с потенциалом  $\phi(r)$ , при  $r > a$  затухают медленнее, чем кулоновские волновые функции. Из условия сшивки при  $r=a$  и нормировки следует уменьшение волновых функций по сравнению с кулоновскими при  $r < a$  (более заметное с ростом  $n$ ), что и приведет к уменьшению интегралов перекрытия. Физически это соответствует увеличению вероятности пребывания электрона вне кулоновской ямы. Оценку уменьшения  $f_n$  можно провести и с помощью численных данных по силам осцилляторов в дебаевском поле [10].

В плазме величина  $\Delta E$  определяется полями, создаваемыми вблизи атома окружающими заряженными частицами. Поэтому величину  $\Delta E$  в потенциале  $\phi(r)$  можно выбрать близкой к классическому снижению потенциального барьера  $\Delta E = 2e\sqrt{eF}$  под действием квазистатических микрополей  $F$ . Для анализа поглощения (излучения) плазмы представляют интерес значения сечений фотоионизации или распределений сил осцилляторов, усредненные по микрополям. На рис. 2, б приведены усредненные сечения  $\bar{\sigma}(\omega)$  фотоионизации в плазме для концентраций ионов  $n_i = 10^{18} \text{ см}^{-3}$  и  $n_i = 10^{20} \text{ см}^{-3}$

$$\bar{\sigma}(\omega) = \int \sigma(\omega, \Delta E(\epsilon)) P(\epsilon) d\epsilon,$$

где  $P(\epsilon)$  — распределение микрополя [11];  $\epsilon = F/F_0$ ,  $F_0 \approx 2,6en_i^{1/2}$ . На рис. 3 показаны распределения сил осцилляторов для тех же концентраций зарядов с учетом связанно-связанных переходов. Уменьшение вероятности последних учтено по данным [10] с использованием соотношения  $e\hbar^2/2 = F$  для обратного дебаевского радиуса  $\lambda$  и напряженности микрополя. Штарковское расщепление и сдвиг реализующихся дискретных уровней незначительны и при построении  $df/dE$  не учитывались. Интеграл по спектру от усредненного по микрополям распределения сил осцилляторов оказывается меньше единицы. Это отличие мало при концентрации зарядов  $\sim 10^{18} \text{ см}^{-3}$  и становится существенным ( $\approx 30\%$ ) при  $n_i \sim 10^{20} \text{ см}^{-3}$ .

**Обсуждение результатов.** Сечение фотоионизации, полученное в рамках используемых приближений, оказывается точным как в припороговой области, так и в области больших частот  $\hbar\omega \gg E_0$ . В промежуточной области частот полученные сечения являются приближенными, поскольку волновая функция непрерывного спектра (2) в этом случае требует уточнения. Точная волновая функция содержит кулоновскую добавку при  $r < a$ , что должно привести к увеличению сечения фотоионизации за порогом (пс

сравнению с (5)) при энергиях  $\hbar\omega \sim I$ , особенно заметному при  $\Delta E \rightarrow 0$ . Отметим, что с увеличением  $\Delta E$  область применимости формулы (5) увеличивается как со стороны малых, так и больших частот. Первое связано с тем, что использование плоской волны оправдано при  $r > a$ , т. е. для  $p < \hbar/a = \hbar\Delta E/e^2$ , второе — с расширением границы применимости борновского приближения ( $\hbar\omega \gg I - \Delta E$ ).

В широкой области частот  $\hbar\omega \geq 10E_0$ , где заведомо справедливо борновское приближение, полученные сечения превышают кулоновское значение. Поскольку сечение фотоионизации в пороге обращается в нуль, вывод о перераспределении сил осцилляторов по спектру из припороговой области в область больших частот является обоснованным и не связан с используемыми приближениями.

Усредненное по микрополям распределение сил осцилляторов (рис. 3) указывает на наличие «окна прозрачности» в спектрах плотной плазмы вблизи порога фотоионизации, а также на увеличение поглощения (излучения) на больших частотах. Как видно из рис. 3,  $df/dE$  в припороговой области может отличаться от распределения сил осцилляторов изолированного атома в несколько раз.

Экспериментальные результаты, указывающие на наличие «окон прозрачности» в плотной плазме водорода, лития, аргона и ртути, обсуждались в [4]. Данные для водорода имеются лишь для области вблизи границы бальмеровской серии [12]. Качественно вид спектра в этом случае согласуется с распределением  $df/dE$  на рис. 3. Расчет распределения  $df/dE$  вблизи границы бальмеровской серии в рамках выбранной модели и, в частности, с использованием формулы (4) не представляет принципиальных трудностей, поскольку фурье-образы волновых функций дискретных кулоновских состояний известны [9]. Однако этот вопрос требует более детального рассмотрения и явится предметом отдельного сообщения.

Авторы выражают благодарность Г. А. Кобзеву и Г. Э. Норману за полезные обсуждения.

Институт высоких температур  
Академии наук СССР

Поступила в редакцию  
4 IV 1979

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Л. М. Биберман, Г. Э. Норман. УФН, 91, 193, 1967.
2. У. Фано, Дж. Купер. Спектральные распределения сил осцилляторов в атомах. «Наука», 1972.
3. Г. А. Кобзев, Ю. К. Куриленков, Г. Э. Норман. ТВТ, 15, 193, 1977.
4. Г. А. Кобзев, Ю. К. Куриленков. ТВТ, 16, 458, 1978.
5. Ю. К. Куриленков, П. В. Минаев. ЖЭТФ, 74, 563, 1978.
6. Ш. Чен, М. Такео. УФН, 66, 394, 1958.
7. Дж. Займан. Вычисление блоховских функций. «Мир», 1973.
8. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский. Релятивистская квантовая теория, ч. 1. «Наука», 1968.
9. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. «Наука», 1971.
10. J. C. Weisheit, B. W. Shore. Astrophys. J., 194, 519, 1974.
11. Ю. К. Куриленков, В. С. Филинов. ТВТ, 14, 886, 1976.
12. А. А. Кон'ков, А. V. Vorontsov, S. G. Kulagin, A. P. Ryazin. High Temp.— High Press., 5, 405, 1973; А. А. Кон'ков. ТВТ, 17, № 4, 1979.

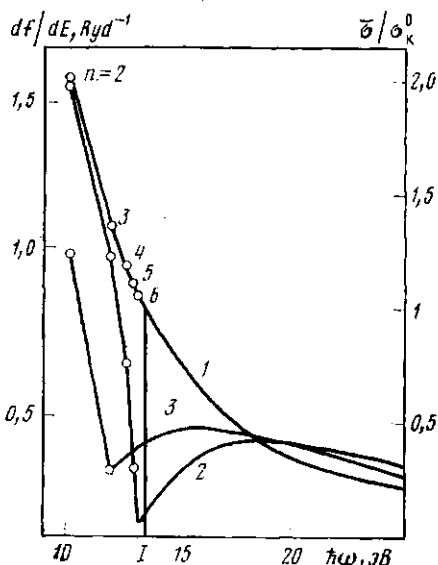


Рис. 3. Распределение сил осцилляторов в дискретном и непрерывном спектре: 1 — изолированный атом водорода; 2 и 3 — в плазме при  $n_e = 10^{18}$  и  $10^{20}$  см<sup>-3</sup> соответственно