

Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Л. Г. Дьячков, К расчету непрерывных радиационных спектров плазмы,
ТВТ, 1992, том 30, выпуск 5, 868–875

<https://www.mathnet.ru/tvt3624>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<https://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 18.97.14.84

15 мая 2025 г., 07:12:19



В идеальной плазме $g(E)D(E) \sim E^{-3/2}$. Поэтому основной вклад в интеграл по энергиям связи E дают подынтегральные функции в районе $E = (3/2) \cdot T$, называемом узким местом. В сверхплотной плазме $g(E)$ и $D(E)$ очень мало зависят от E при E порядка T и изменяются лишь, когда E становится соизмеримой с Ze^2/\bar{r} . Поэтому g и D могут быть приняты постоянными. Узкое место смещается, таким образом, к границе континуума. В результате

$$\frac{dN_e}{dt} = (N_{Z-1} N_e \lambda_e^{-3} \frac{\sum^e \sum^Z}{\sum^{Z-1}} e^{-I_{Z-1}/T} - N_e^2 N_Z) \times$$

$$\times \frac{gD}{\sum^e T N_e} = N_{Z-1} N_e \beta - N_e^2 N_Z \alpha.$$

Заметим, что, поскольку $D \sim N_e$, то коэффициенты ионизации и рекомбинации β и α от N_e не зависят, но содержат степени $\Gamma Z e^2$.

Приближение постоянного стока применимо, пока концентрации возбужденных состояний $N_{Z-1,k}$ много меньше концентраций N_{Z-1} и N_Z в основных состояниях.

Ступенчатая ионизация преобладает над прямой, пока $I_{Z-1} \gg T$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Биберман Л.М., Воробьев В.С., Якубов И.Т. Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы. М.: Наука, 1982.
2. Биберман Л.М., Воробьев В.С., Якубов И.Т. // ДАН СССР. 1987. Т. 296. № 3. С. 576.
3. Гуревич А.В., Пятаевский Л.П. // ЖЭТФ. 1964. Т. 46. № 4. С. 1281.
4. Forton V.E., Yakubov I.T. // Phys. Non-Ideal Plasma. N.Y.: Hemisphere, 1989.
5. Зельдович Я.Б., Райзер Ю.П. Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений. М.: Наука, 1966.
6. Киржниц Д.А., Лозовик Ю.Е., Шпатаковская Г.В. // УФН. 1975. Т. 117. № 1. С. 3.
7. More R.M. // In Atomic and Molecular Physics of Controlled Thermonuclear Fusion (Ed. C.J. Joachin, D.E. Post). N.Y.: Plenum, 1983.
8. Perrot M. // Phys. Rev. 1987. V. 35A. N 3. P. 1235.

ИВТ РАН

Поступила в редакцию
12.02.92

УДК 533.93:535.343

© 1992 г. Л.Г. Дьячков

К РАСЧЕТУ НЕПРЕРЫВНЫХ РАДИАЦИОННЫХ СПЕКТРОВ ПЛАЗМЫ

Предложен новый аналитический метод расчета обратного тормозного и фотоионизационного (по интегральной формуле) коэффициентов поглощения плазмы в рамках теории квантового дефекта. Радиальные интегралы вычисляются в квазиклассическом приближении. Квантовые дефекты, амплитудные и фазовые функции радиальных интегралов аппроксимируются линейными по энергии зависимостями, что позволяет выполнить аналитическое интегрирование по максвелл-больцмановскому распределению электронов. Проведено сравнение с численным расчетом и другими аналитическими приближениями.

К настоящему времени разработаны достаточно точные методы расчета сечений радиационных переходов (например, [1–4]), но они весьма трудоемки и требуют значительных затрат машинного времени. Поэтому при вычислении суммарных непрерывных спектров излучения или поглощения плазмы, когда не требуется высокая точность расчета сечений отдельных переходов, обычно применяются методы теории квантового дефекта (МКД) [5]. В рамках МКД простое аналитическое выражение для коэффициента поглощения получено Биберманом и Норманом [6] путем аппроксимации табличных данных Берджесса – Ситона [7, 8] по сечениям фотоионизации, их экстраполяции на свободно-свободные переходы и интегрирования по спектру электронов (сумма по высоковозбужденным состояниям заменялась интегралом). При этом учитывались

только переходы с изменением орбитального квантового числа l в ту же сторону, что и энергии ($l \rightarrow l + 1$ при поглощении), и пренебрегалось энергетической зависимостью амплитудной и фазовой функций, через которые в МКД выражаются радиальные интегралы. Попытка получить более совершенную интегральную формулу сделана Кобзевым [9]. В целом схема вывода осталась подобной [6], но вместо [7, 8] использовались результаты более корректных численных расчетов Пич свободно-связанных [10] и свободно-свободных [11] переходов, а от части сделанных в [6] упрощений автор [9] отказался. Метод [9] может успешно применяться для расчета оптических свойств плазмы воздуха и некоторых других, но для ряда элементов он сталкивается с техническими трудностями.

Следующий шаг в развитии аналитического подхода сделан недавно в [12]. Интегральная формула для коэффициента поглощения получена в квазиклассическом приближении без привлечения каких-либо табличных данных. При этом пренебрегалось энергетической зависимостью амплитудной и фазовой функций, что соответствует аппроксимации гиперболической или эллиптической траектории квазиклассического электрона в области кулоновского взаимодействия (т.е. на больших расстояниях) параболой. Это эквивалентно тому, что в асимптотическом разложении по большому параметру $\nu = Ze^2 \omega / mv^3 \gg 1$ учитывается только главный член. Интегральная формула [12] является непосредственным обобщением известной формулы Крамерса – Унзольда на неводородоподобные атомы в приближении теории квантового дефекта. Для тормозного излучения в целом она дает результаты, близкие к данным численного расчета [13], но для некоторых элементов, например, таких практически важных, как азот и кислород, имеются существенные расхождения в области вакуумного ультрафиолета.

В данной работе предлагается более строгий подход к расчету коэффициента поглощения. В отличие от [12] учитывается энергетическая зависимость амплитудной и фазовой функций радиальных интегралов. Для этих функций используются выражения [14, 15], которые аппроксимируются линейной по энергии зависимостью. Хотя параметр ν остается большим, но учитывается следующий за главным член в асимптотическом разложении по ν . Учет этого члена существенно улучшает результаты расчета, тогда как включение следующих членов разложения оказывается нецелесообразным.

Общие формулы. Рассмотрим сначала фотопоглощение при свободно-свободных переходах в случае LS -связи, а затем обобщим результат на свободно-связанные переходы и другие типы связи. В дипольном приближении сечение перехода $E \rightarrow E' = E + \omega$ электрона в поле положительного иона, находящегося в состоянии $L_1 S_1$, имеет следующий вид [16] (здесь и далее единицы атомные):

$$\sigma_{\omega} = \frac{4\pi^4 \omega}{3cE} \sum_{ll'l'} B_{ll'l'} M_{E'ISL}^{E'ISL'}{}^2, \quad (1)$$

где c – скорость света, $l_{>} = \max \{ l, l' \}$,

$$B_{ll'l'} = \frac{(2S+1)(2L+1)(2L'+1)}{2(2S_1+1)(2L_1+1)} \left\{ \begin{matrix} l & L & L_1 \\ L' & l' & 1 \end{matrix} \right\}^2, \quad (2)$$

$$M_{E'ISL}^{E'ISL'} = \int R_{E'ISL}(r) r R_{E'ISL'}(r) r^2 dr. \quad (3)$$

Здесь $R_{E'ISL}$ – радиальные волновые функции оптического электрона. В МКД радиальный интеграл (3) выражается через амплитудную G и фазовую χ функции и квантовые дефекты μ , экстраполированные в непрерывный спектр как функции энергии [11]

$$M_{E'ISL}^{E'ISL'} = \frac{Z}{2\pi\omega^2} G_{E'l}^{E'l'} \cos [\pi(\mu_{E'l'SL'} - \mu_{E'ISL} + \chi_{E'l'}^{E'l'})], \quad (4)$$

где Z – заряд иона. Существенно, что G и χ не зависят от квантовых чисел S и L . В [14,

15] G и χ получены в квазиклассическом приближении

$$G_{EI}^{E'I'} = (\omega/E_c)(P^2 + Q^2)^{1/2}, \quad \chi_{EI}^{E'I'} = \pi^{-1} \arctg(Q/P), \quad (5)$$

$$P(\epsilon, \nu, \Delta l) = \Delta l \frac{(\epsilon - 1)^{1/2}}{\epsilon} g_\nu(\epsilon\nu) - g'_\nu(\epsilon\nu), \quad (6)$$

$$Q(\epsilon, \nu, \Delta l) = \Delta l \frac{(\epsilon - 1)^{1/2}}{\epsilon} [h_\nu(\epsilon\nu) + 1/\nu] - h'_\nu(\epsilon\nu) + \epsilon - 1,$$

где $\Delta l = l' - l = \pm 1$, $\nu = Z\omega/2E_c)^{3/2}$, $\epsilon = (1 + 2E_c l_{>}^2/Z^2)^{1/2}$

— эксцентриситет классической гиперболической орбиты со средней E_c и орбитальным моментом $l_{>}$. Проблема улучшения квазиклассических формул введением средних квантовых чисел и способ их выбора неоднократно обсуждался в литературе [17–20]. В данном случае возьмем в качестве E_c среднее арифметическое начальной и конечной энергий

$$E_c = (E + E')/2. \quad (7)$$

Величина $l_{>}$ также является средним арифметическим моментом $l + 1/2$ и $l' + 1/2$ с учетом поправки Лангера. Функции $g_\nu(y)$ и $h_\nu(y)$ в (6) обозначают интегралы

$$g_\nu(y) = \int_0^\infty \cos(y \operatorname{sh} t - \nu t) dt, \quad h_\nu(y) = \int_0^\infty \sin(y \operatorname{sh} t - \nu t) dt.$$

g'_ν и h'_ν — их производные по y .

Коэффициент поглощения определяется интегралом

$$\kappa_{ff} = N_e N_i \int_0^\infty (2E)^{1/2} \sigma_\omega f(E) dE, \quad (8)$$

где N_e , N_i — концентрации электронов и ионов, $f(E)$ — функция распределения электронов по энергиям. При максвелловском распределении с температурой T

$$f(E) = 2(E/\pi T^3)^{1/2} e^{-E/T}.$$

Подставляя (1) и (4) в (8), получим

$$\kappa_{ff} = N_e N_i \frac{2\pi Z^2}{3c\omega^3} \left(\frac{2\pi}{T^3}\right)^{1/2} \sum_{l' SLL'} B_{l' SLL'} \int_0^\infty (G_{EI}^{E'I'})^2 \cos^2 \times \quad (9)$$

$$\times [\pi(\mu_{E'I'SL'} - \mu_{EISL'} + \chi_{EI}^{E'I'})] e^{-E/T} dE.$$

В случае водорода или водородоподобных ионов ($\mu = 0$) вследствие известного соотношения для $6j$ -символов [16]

$$\sum_{l' SLL'} B_{l' SLL'} = 1,$$

подстановка (5) в (9) дает

$$\kappa_{ff} = N_e N_i \frac{2\pi Z^2}{3c\omega} \left(\frac{2\pi}{T^3}\right)^{1/2} \sum_{l_{>}=1}^\infty \int_0^\infty [P^2(\epsilon, \nu, 1) + P^2(\epsilon, \nu, -1)] E_c^{-2} e^{-E/T} dE. \quad (10)$$

Теперь подставим сюда (6). Учитывая, что $g_\nu(y) = (i\pi/2) H_{iv}^{(1)}(iy)$, где $H^{(1)}$ — функция Ганкеля первого рода, и заменяя суммирование по $l_{>}$ интегрированием по ϵ [21], получим

$$\kappa_{ff}^H = \kappa_{ff}^{H(KT)} \langle g_{ff} \rangle,$$

$$\kappa_{ff}^{H(KT)} = N_e N_i \frac{16(2\pi^5)^{1/2} Z^2}{3^{3/2} c\omega^3 T^{1/2}}, \quad (11)$$

$$\langle g_{ff} \rangle = T^{-1} \int_0^\infty g_{ff} e^{-E/T} dE, \quad g_{ff} = \frac{3^{1/2} \pi}{4} iv H_{iv}^{(1)}(iv) H_{iv}^{(1)'}(iv).$$

где $\kappa_{ff}^{H(Kr)}$ – коэффициент поглощения в приближении Крамерса, $\langle g_{ff} \rangle$ – усредненный фактор Гаунта. Фактор Гаунта g_{ff} отличается здесь от известного классического выражения [16] тем, что параметр ν определен через среднюю энергию E_c . Простая формула для усредненного фактора Гаунта получена в [22].

Приближение Крамерса ($g_{ff} = \langle g_{ff} \rangle = 1$) соответствует значениям $\nu \gg 1$. Формула (11) может быть получена из (10), если P заменить главным членом в его асимптотическом разложении по ν .

Вернемся к случаю неводородоподобных атомов ($\mu \neq 0$). Следуя [6, 23], введем ξ_{ff} -функцию

$$\kappa_{ff} = \kappa_{ff}^H \xi_{ff} \quad \xi_{ff} = 1 + \sum_{ll'SLL'} D_{ll'SLL'}^{ff} \quad (12)$$

Тогда из (9) следует

$$D_{ll'SLL'}^{ff} = \frac{3^{1/2}}{16\pi T} \langle g_{ff} \rangle^{-1} B_{ll'SLL'} l_{>} \int_0^{\infty} (G_{E'l'}^{E'l'})^2 \{ \cos [2\pi(\mu_{E'l'SL'} - \mu_{E'lSL} + \chi_{E'l}^{E'l'})] - \cos(2\pi\chi_{E'l}^{E'l'}) \} e^{-E/T} dE \quad (13)$$

С ростом l квантовые дефекты быстро убывают до нуля. Следовательно, сумма в (12) эффективно обрывается при $l \sim l_m$, где l_m таково, что квантовыми дефектами при $l > l_m$ можно пренебречь. Для легких атомов, как правило, $l_m \leq 3$ [13, 24].

Линейное приближение. Если μ , χ и G^2 – линейные функции E , интеграл (13) может быть взят аналитически. Линейное приближение для квантовых дефектов используется довольно часто [6, 9, 13, 24]. Следуя [13, 24], положим

$$\mu_{E'lSL} = \alpha + \beta \mathfrak{E}, \quad \mu_{E'l'SL'} = \alpha' + \beta' (\mathfrak{E} + \sigma), \quad (14)$$

где $\mathfrak{E} = 2E/Z^2$, $\sigma = 2\omega/Z^2$. Амплитудная и фазовая функции имеют достаточно гладкую зависимость от E и ω при $E \leq \omega$ [11], для них также возможна линейная аппроксимация. Чтобы ее получить, разложим $g_\nu(\epsilon\nu)$ и $h_\nu(\epsilon\nu)$ по степеням параметра $\delta = l_{>} (2E_c)^{1/2}/Z = l_{>} \mathfrak{E}_c^{1/2}$, который предполагается малым. Учитывая, что $\epsilon = (1 + \delta^2)^{1/2}$ и $\nu = l_{>}^3 \sigma / 2\delta^3$, из асимптотического разложения $g_\nu(\epsilon\nu)$ и $h_\nu(\epsilon\nu)$ по ν находим

$$g_\nu(\epsilon\nu) = \frac{\pi\delta}{x^{1/2}} \left\{ Ai(x) - \delta^2 \left[\frac{1}{10} Ai(x) + \frac{2x}{5} Ai'(x) \right] + \dots \right\},$$

$$h_\nu(\epsilon\nu) = \frac{\pi\delta}{x^{1/2}} \left\{ Gi(x) - \delta^2 \left[\frac{1}{10} Gi(x) + \frac{2x}{5} Gi'(x) + \frac{1}{20\pi x} \right] + \dots \right\},$$

где $x = l_{>}^2 (\sigma/4)^{2/3}$,

$$Ai(x) = \pi^{-1} \int_0^{\infty} \cos(t^3/3 + xt) dt,$$

$$Gi(x) = \pi^{-1} \int_0^{\infty} \sin(t^3/3 + xt) dt = Bi(x)/3 - \pi^{-1} \sum_{k=0}^{\infty} 3^k k! x^{3k+2} / (3k+2)!.$$

Здесь $Ai(x)$ и $Bi(x)$ – функции Эйри [25]. Аналогичным образом получим разложение производных

$$g'_\nu(\epsilon\nu) = \frac{\pi}{x} \delta^2 \left\{ Ai'(x) - \delta^2 \left[\frac{2}{5} Ai'(x) + \frac{1+4x^3}{10x} Ai(x) \right] + \dots \right\},$$

$$h'_\nu(\epsilon\nu) = \frac{\pi}{x} \delta^2 \left\{ Gi'(x) - \delta^2 \left[\frac{2}{5} Gi'(x) + \frac{1+4x^3}{10x} Gi(x) - \frac{2x}{5\pi} \right] + \dots \right\}.$$

В результате имеем

$$(G_{El}^{E'l'}) \cong G_0^2 + \delta^2 G_1^2, \quad \chi_{El}^{E'l'} \cong \chi_0 + \delta^2 \chi_1, \quad (15)$$

$$G_0^2 = 16\pi^2 x l_{>}^{-2} [S^2(x) + T^2(x)],$$

$$G_1^2 = 32\pi^2 x l_{>}^{-2} [S(x)S_1(x) + T(x)T_1(x)],$$

$$\chi_0 = \frac{1}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{T(x)}{S(x)}, \quad \chi_1 = \frac{S(x)T_1(x) - T(x)S_1(x)}{\pi [S^2(x) + T^2(x)]},$$

$$S(x) = \Delta l x^{1/2} Ai(x) - Ai'(x), \quad T(x) = \Delta l x^{1/2} Gi(x) - Gi'(x) + x/2\pi,$$

$$S_1(x) = \left(\frac{1+4x^3}{10x} - \frac{3}{5} \Delta l x^{1/2} \right) Ai(x) + \frac{2}{5} (1 - \Delta l x^{3/2}) Ai'(x),$$

$$T_1(x) = \left(\frac{1+4x^3}{10x} - \frac{3}{5} \Delta l x^{1/2} \right) Gi(x) + \frac{2}{5} (1 - \Delta l x^{3/2}) Gi'(x) + \frac{18\Delta l - 2lx^{3/2}}{40\pi x^{1/2}}.$$

Из (7) следует

$$\delta^2 = l_{>}^2 (\sigma/2 + \mathfrak{E}). \quad (16)$$

Подставляя (14) – (16) в (13) и обозначая $\theta = 2T/Z^2$, после интегрирования получим

$$D_{ff}^{ff} / \langle g_{ff} \rangle = \frac{3^{1/2} B_{ff}^{SLL'}}{16\pi \langle g_{ff} \rangle} l_{>} \{ (G_0^2 + l_{>}^2 \sigma G_1^2 / 2) (\cos \psi_1 \cos W_1 - \cos \psi_0 \cos W_0) + \\ + l_{>}^2 \theta G_1^2 [\cos^2 \psi_1 \cos(W_1 + \psi_1) - \cos^2 \psi_0 \cos(W_0 + \psi_0)] \}, \quad (17)$$

$$\psi_0 = \operatorname{arctg}(2\pi l_{>}^2 \theta \chi_1), \quad \psi_1 = \operatorname{arctg}[2\pi \theta (l_{>}^2 \chi_1 + \beta' - \beta)],$$

$$W_0 = \psi_0 + 2\pi(\chi_0 + l_{>}^2 \sigma \chi_1 / 2), \quad W_1 = \psi_1 + 2\pi(\chi_0 + l_{>}^2 \sigma \chi_1 / 2 + \alpha' - \alpha + \beta' \sigma).$$

Критерии применимости. Критерии применимости квазиклассического приближения в МКД рассмотрены подробно в [12, 14, 15, 26]. К ним следует добавить условие линейной аппроксимации $\delta \ll 1$. Примем во внимание (16), а также то, что главный вклад в (13) дают значения $E \sim T$. В итоге получим, что развитый метод справедлив для частот излучения, удовлетворяющих условиям

$$\sigma \ll 2/l_m^3, \quad (18)$$

$$\sigma \ll 2/l_m^2, \quad (19)$$

$$\sigma \gg 2\theta^{3/2}. \quad (20)$$

Следует заметить, что условие (20), ограничивающее частоту излучения снизу, практического значения не имеет. На малых частотах основной вклад в коэффициент поглощения дают большие l и роль неводородоподобных состояний ($l < l_m$) с уменьшением ω падает. Поэтому $\xi_{ff} \rightarrow 1$ при $\omega \rightarrow 0$ и в области $\sigma \ll 2\theta^{3/2}$ при не слишком высоких температурах может быть проведена интерполяция.

Обобщение на свободно-связанные переходы и другие типы связи. При вычислении фотоионизационного коэффициента поглощения κ_{bf} , следуя [16], заменим сумму по главному квантовому числу для высоковозбужденных часто расположенных состояний интегралом. Нижнюю границу состояний, учитываемых интегральной формулой, обозначим через E_0 ($E_0 < 0$). Легко показать, что такая интегральная формула может быть записана в виде (9), но с интегралом от E_0 до 0, если $|E_0| < \omega$, или от $-\omega$ до 0, если $|E_0| > \omega$ (снижение потенциала ионизации и оптический сдвиг порога могут быть учтены так же, как в [6]; не будем здесь специально останавливаться на этом вопросе). Удобно записать единую интегральную формулу для свободно-связанных и свободно-свободных переходов. Соответствующий коэффициент поглощения $\kappa_f = \kappa_{bf} + \kappa_{ff}$ будет также иметь вид (9) с интегралом от $-\omega_0$ до ∞ , где $\omega_0 = \min \{ \omega, |E_0| \}$.

Формулы (5), (6) могут быть применены для свободно-связанных переходов, если при этом средняя энергия E_c остается положительной [15], т.е. учитывая (7), при

$E > -\omega/2$. В этом случае "средняя траектория" электрона в области кулоновского взаимодействия остается гиперболической. При $E_c < 0$ "средняя траектория" эллиптическая и радиальный интеграл (его амплитудная и фазовая функции) имеет другой вид [15, 26]. Однако указанные ограничения не относятся к оборванным асимптотическим разложениям (15). Выражения (15) являются аналитическими по E_c и могут быть продолжены в область $E_c < 0$. Действительно, в приближении $E_c = 0$ ($G = G_0$, $\chi = \chi_0$), которое для водорода соответствует кramerсовскому приближению, радиальные интегралы имеют один и тот же вид для связанно-связанных связанно-свободных и свободно-свободных переходов [27, 28]. Можно показать, что асимптотическое разложение амплитудной и фазовой функций при $E_c < 0$ около точки $E_c = 0$ также приводит к приближенным выражениям (15).

Запишем κ_r и κ_{bf} в форме (12). Соответствующие водородные коэффициенты поглощения, заменяя пределы интегрирования в (10), получим в следующем виде:

$$\kappa_r^H = \kappa_{ff}^{H(Kr)} e^{\omega_0/T} \langle g_r \rangle, \quad \kappa_{bf}^H = \kappa_{ff}^{H(Kr)} (e^{\omega_0/T} - 1) \langle g_{bf} \rangle.$$

Для $\langle g_r \rangle$ и $\langle g_{bf} \rangle$ можно воспользоваться формулами из [22]. D^r и D^{bf} найдем аналогично (17) после изменения пределов интегрирования в (13). Для D^r имеем

$$D_{ll'SLL'}^r = \frac{3^{1/2} B_{ll'SLL'}}{16\pi \langle g_r \rangle} l_{>} \{ [G_0^2 + l_{>}^2 (\sigma/2 - \sigma_0) G_1^2] [\cos \psi_1 \cos(W_1 - 2\pi\sigma_0 l_{>}^2 \chi_1 + \beta' - \beta) - \cos \psi_0 \cos(W_0 - 2\pi\sigma_0 l_{>}^2 \chi_1)] + l_{>}^2 \theta G_1^2 [\cos^2 \psi_1 \cos(W_1 + \psi_1 - 2\pi\sigma_0 (l_{>}^2 \chi_1 + \beta' - \beta)) - \cos^2 \psi_0 \cos(W_0 + \psi_0 - 2\pi\sigma_0 l_{>}^2 \chi_1)] \},$$

где $\sigma_0 = 2\omega_0/Z^2$. Очевидно, D^r обращается в D^{ff} при $\sigma_0 = 0$. Не будем приводить здесь громоздкое выражение для D^{bf} . Оно может быть легко получено из соотношения

$$\langle g_{bf} \rangle (e^{\omega_0/T} - 1) D^{bf} + \langle g_{ff} \rangle D^{ff} = \langle g_r \rangle e^{\omega_0/T} D^r.$$

Выше предполагалась схема LS-связи. Но все полученные формулы останутся справедливыми и для любого другого типа связи. От типа связи зависят только коэффициенты (2), которые легко найти, используя стандартные методы теории сложения моментов [16]. Например, в случае jI-связи имеем

$$B_{ll'jKk'} = \frac{(2K+1)(2K'+1)}{(2S_1+1)(2L_1+1)} \left\{ \begin{matrix} l & K & j \\ K' & l' & 1 \end{matrix} \right\}^2.$$

Сравнение с другими расчетами. Наиболее полные и корректные расчеты ξ -функций в рамках МКД выполнены Пич для свободно-свободных переходов [13, 24]. Численно вычислялись радиальные интегралы и затем проводилось численное интегрирование по максвелловскому распределению электронов. Сравним предложенный в данной работе метод с [13] и аналитическими приближениями [6, 12]. Данный метод сводится к [12], если в разложениях (15) ограничиться главным членом или, что тоже самое, во всех формулах положить $G_1 = 0$, $\chi_1 = 0$. В этом случае $\langle g \rangle = 1$. В свою очередь, метод [12] обращается в [6], если пренебречь переходами $El \rightarrow E'l - 1$, а для $El \rightarrow E'l + 1$ амплитудную и фазовую функции аппроксимировать следующим образом:

$$G_0^2 = N\sigma^m, \quad \chi_0 = a + b\sigma^{1/2} + c\sigma,$$

где N, m, a, b, c — численные константы, зависящие от l .

Вычислены ξ_{ff} -функции для Li, Na, C, N, O, Mg, K, Cl, Al, Si, C^+ , N^+ , Mg^+ , O^+ , Al^+ , Si^+ , Ca^+ , C^{+2} , N^{+2} (для атомов $Z = 1$, для одно-зарядных ионов $Z = 2$ и т.д.). Коэффициенты линейной аппроксимации квантовых дефектов (14) взяты из [13, 24]. Усредненный фактор Гаунта рассчитан по формуле [22], в которой отброшен третий член, что соответствует линейному приближению; поскольку ξ -функции вычисляются в линейном приближении, то и фактор Гаунта логично взять в этом же приближении. Как и в [13, 24], в расчете учитывались переходы $s-p$, $p-s$, $p-d$, $d-p$, $d-f$, $f-d$. Для некоторых атомов и ионов результаты показаны на рис. 1-4. Частотный диапазон надеж-

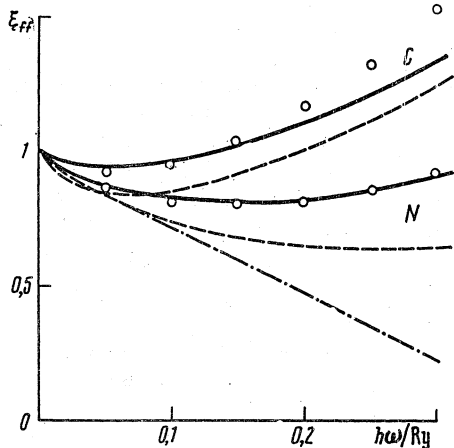


Рис. 1

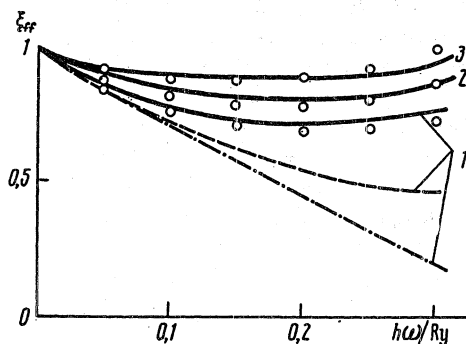


Рис. 2

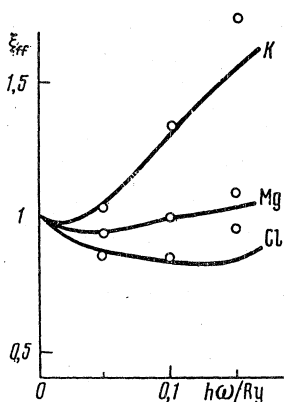


Рис. 3

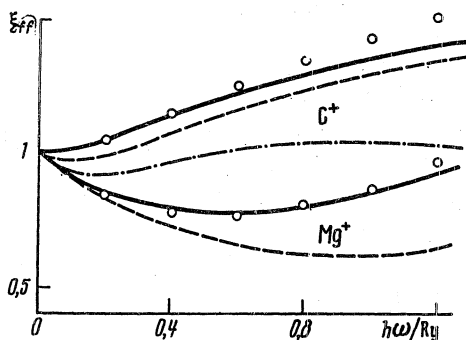


Рис. 4

Рис. 1. Функции ξ_{ff} для азота и углерода при $T = 10\,000$ К. Точки – численный расчет [13], кривые – аналитические методы: сплошная – данная работа, штриховая – [12], штрихпунктир – [6]

Рис. 2. Функции ξ_{ff} для кислорода при $T = 10\,000$ К (1), $20\,000$ (2), $30\,000$ (3). Обозначения, как на рис. 1

Рис. 3. Функции ξ_{ff} для калия и магния при $T = 6\,000$ К и хлора при $10\,000$ К. Обозначения, как на рис. 1

Рис. 4. Функции ξ_{ff} для ионов углерода и магния при $T = 20\,000$ К. Обозначения, как на рис. 1

ных значений ξ -функций определяется условиями (18)–(20). Его верхняя граница зависит от l_m , нижняя – от температуры. Для Li, Na, N, O, C⁺, N⁺, Mg⁺, C⁺², N⁺² l_m не превышает двух, а для C, Mg, K, Cl, Al, Si, O⁺, Al⁺, Si⁺, Ca⁺ следует принять $l_m = 3$. Действительно, как видно из рис. 1 и 3, для C, Mg, K, Cl результаты данного расчета и [13] расходятся уже при $\sigma = 0,15 - 0,2$. Для малых ω расчет некорректен из-за (20), однако возможна интерполяция, так как $\xi_{ff} = 1$ при $\omega = 0$. Поэтому на рисунках ξ -функции не ограничены со стороны малых частот.

Для всех атомов и ионов, для которых выполнены расчеты, в областях, ограниченных условиями (18), (19), имеет место хорошее согласие предложенного метода с численным расчетом [13]. Как видно из сравнения с [12], учет линейных по энергии членов в разложениях амплитудной и фазовой функций существенно улучшает результаты. Для кислорода приведены данные по нескольким заметно различающимся температурам (рис. 2). В этом и во многих других случаях ξ -функции незначительно

изменяются с температурой из-за слабой энергетической зависимости квантовых дефектов, амплитудной и фазовой функций.

Отметим в заключение, что аналитическое интегрирование по E , в принципе, может быть выполнено и в том случае, если в разложении G^2 по энергии оставить не только линейный, но и квадратичный, кубичный и другие члены. Практически, однако, этого делать не требуется, так как, с одной стороны, учет линейного члена уже приводит к хорошему согласию с численным расчетом в рамках МКД. Принимая во внимание приближенный характер теории квантового дефекта, дальнейшее повышение точности аналитического метода, по-видимому, нецелесообразно. С другой стороны, поскольку разложение G^2 и χ является асимптотическим, то увеличение числа членов в разложении приводит к сужению области, где оно применимо. Оценки показывают, что сохранение следующих членов не имеет смысла.

Автор благодарит Г.А. Кобзева за обсуждение работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Амусья М.А., Черепков Н.А., Чернышева Л.В. // ЖЭТФ. 1971. Т. 60. № 1. С. 160.
2. Burke P.G., Taylor K.T. // J. Phys. B. 1975. V. 8. P. 2620.
3. Beck D.R., Nicolaidides C.A. // JQSRT. 1976. V. 16. P. 297.
4. Yu Yan, Seaton M.J. // J. Phys. B. 1987. V. 20. N 23. P. 6409.
5. Мурс Д.Л., Сараф Х.З. // Атомы в астрофизике. М.: Мир, 1986. С. 174.
6. Биберман Л.М., Норман Г.Э. // JQSRT. 1963. V. 3. N 3. P. 221.
7. Burgess A., Seaton M.J. // Rev. Mod. Phys. 1958. V. 30. P. 992.
8. Burgess A., Seaton M.J. // Mon. Not. R. Astr. Soc. 1960. V. 120. N 2. P. 121.
9. Кобзев Г.А. Оптические свойства воздушной плазмы при высоких температурах. 1. Непрерывный спектр: основные процессы, методы расчета. Препринт № 1-112. М.: ИВТАН, 1983. 73 с.
10. Peach G. // Mem. R. Astr. Soc. 1967. V. 71. P. 13.
11. Peach G. // Mon. Not. R. Astr. Soc. 1965. V. 130. N 5. P. 361.
12. Дьячков Л.Г., Кобзев Г.А., Панкратов П.М. // ТВТ. 1991. Т. 29. № 3. С. 409.
13. Peach G. // Mem. R. Astr. Soc. 1970. V. 73. P. 1.
14. Дьячков Л.Г.; Панкратов П.М. // Опт. и спектр. 1990. Т. 68. № 3. С. 711; Т. 68. № 5. С. 994.
15. Дьячков Л.Г., Панкратов П.М. Квазиклассическое приближение в методе квантового дефекта. Препринт № 1-292. М.: ИВТАН, 1990. 34 с.
16. Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. М.: Наука, 1977. 320 с.
17. Тер-Мартirosян К.А. // ЖЭТФ. 1952. Т. 22. С. 284.
18. Альдер К., Бор О., Хус Т. и др. // Деформация атомных ядер. М.: ИЛ, 1958. С. 31.
19. Nassache P.F. // J. Phys. B. 1972. V. 5. N 7. P. 1308.
20. Heit T.A., Trautmann D., Vaur G. // J. Phys. B. 1989. V. 22. N 5. P. 727.
21. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля. М.: Наука, 1967.
22. D'yachkov L.G. // J Phys. B. 1990. V. 23. N 16. P. L 429.
23. Норман Г.Э. // Опт. и спектр. 1963. Т. 14. № 4. С. 521.
24. Peach G. // Mem. R. Astr. Soc. 1967. V. 71. P. 1.
25. Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. М.: Наука, 1979. С. 264.
26. D'yachkov L.G., Pankratov P.M. // J. Phys. B. 1991. V. 24. N 9. P. 2267.
27. Kogan V.I., Kukushkin A.B., Lisitsa V.S. // 19th Int. Conf. on Phenomena in Ionized Gases. Belgrade, 1989. Invited papers. P. 254.
28. D'yachkov L.G., Pankratov P.M. // JQSRT. 1992. V. 47. N 1. P. 75.

НО ИВТ РАН

Поступила в редакцию
10.02.1992