

# Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Л. Г. Дьячков, Г. А. Кобзев, П. М. Панкратов, Ква-  
зиклассическое приближение в расчетах непрерыв-  
ного поглощения плазмы методом квантового де-  
фекта, *ТВТ*, 1991, том 29, выпуск 3, 409–417

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

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

Параметры загрузки:

IP: 18.97.14.91

15 января 2025 г., 09:08:25



УДК 533.93:535.343 © 1991 г.

*Л. Г. Дьячков, Г. А. Кобзев, П. М. Панкратов*

### КВАЗИКЛАССИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ В РАСЧЕТАХ НЕПРЕРЫВНОГО ПОГЛОЩЕНИЯ ПЛАЗМЫ МЕТОДОМ КВАНТОВОГО ДЕФЕКТА

Предложен квазиклассический подход к расчету фотоионизационного и обратного тормозного континуумов низкотемпературной плазмы в рамках метода квантового дефекта. Получено аналитическое выражение для коэффициента поглощения, которое в частном случае водородоподобного атома сводится к известной формуле Крамерса — Унзольда. Исследованы пределы применимости. Проведено сопоставление с численным расчетом Пич и приближением Бибермана — Нормана.

При расчетах коэффициента непрерывного поглощения плазмы вклад фотоионизации высоковозбужденных состояний и обратного тормозного эффекта вычисляется обычно в квазиклассическом приближении по формуле Крамерса — Унзольда, а неводородоподобие сложных атомов и ионов учитывается введением  $\xi$ -функции Бибермана — Нормана [1, 2]

$$\kappa(\omega, T) = \kappa_H(\omega, T) \xi(\omega, T). \quad (1)$$

При этом отдельно могут быть рассмотрены вклады свободно-связанных и свободно-свободных переходов и соответствующие им функции  $\xi^{bf}$  и  $\xi^{ff}$ . Эти вклады также могут рассматриваться вместе с введением общей  $\xi^t$ -функции.

В [1, 2]  $\xi$ -функции вычислялись на основе аппроксимации численных данных Берджесса — Ситона [3, 4] по сечениям фотоионизации, полученным методом квантового дефекта (МКД). В результате становилось возможным аналитическое интегрирование по спектру электронов (как и в формуле Крамерса — Унзольда сумма по связанным состояниям приближенно заменяется интегралом). Для учета вклада свободно-свободных переходов аппроксимированные сечения экстраполировались через границу континуума и интегрирование распространялось на положительные энергии. Более строгое вычисление  $\xi$ -функций, но только для свободно-свободных переходов, выполнила Пич [5, 6]. Она провела численное интегрирование матричных элементов [7], а затем опять же численное интегрирование по максвелловскому распределению электронов [5, 6]. Попытка получить аналитическое выражение  $\xi$ -функции, более точное, чем в [1, 2], сделана в [8] путем аппроксимации простыми аналитическими формулами численных данных Пич для свободно-свободных [7] и связанно-свободных [9] переходов.

В данной работе предлагается квазиклассический подход к расчету непрерывного коэффициента поглощения неводородоподобных атомов в рамках МКД. В водородоподобном случае он приводит к формуле Крамерса — Унзольда, таким образом можно говорить об обобщении этой формулы на неводородоподобные атомы. Заметим, что при рассмотрении фотоионизации высоковозбужденных уровней с  $|E| \ll Z^2 R_y$  (энергия отсчитывается от порога континуума,  $Z$  — заряд атомного остова) квазиклассическое приближение естественным образом вписывается в рамки МКД. Действительно, в основе МКД лежат кулоновское приближение [10] и экстраполяция квантовых дефектов в область положительных энергий для определения некулоновской части сдвига фазы кулоновской волновой функции непрерывного спектра. Такая экстраполяция возможна, очевидно, только вблизи порога, как правило, для  $E \ll Z^2 R_y$ . Таким образом, имеет место энергетический интервал, который в кулоновском потенциале как раз и составляет область квазиклассичности.

В данной работе в квазиклассическом приближении вычисляются радиальные интегралы

$$M_{E'l'}^{E'l'} = \int_0^{\infty} R_{E'l}(r) r R_{E'l'}(r) r^2 dr, \quad l' = l \pm 1, \quad (2)$$

через которые выражаются вероятности дипольных переходов, исследуются пределы применимости развитого подхода, в случае линейной зависимости квантовых дефектов от энергии выводятся формулы для  $\xi^{l'}$ ,  $\xi^{l'l}$  и  $\xi^l$  и проводится сравнение с результатами [4, 6].

**Радиальные интегралы в квазиклассическом приближении.** Будем предполагать, что основной вклад в (2) дают достаточно большие расстояния, где потенциал взаимодействия электрона с ионом можно считать кулоновским. Тогда волновые функции могут быть записаны в кулоновском приближении [10], а влияние конечного размера иона учитывается некулоновской частью сдвига фазы, которая в случае связанного состояния равна  $\pi\mu$ , где  $\mu = n - \nu$  — квантовый дефект ( $\nu$  — эффективное главное квантовое число). Легко проверить, что только с учетом этого сдвига правило квантования Бора — Зоммерфельда дает правильное значение энергии  $E = -Z^2 Ry/\nu^2$ . Для состояний непрерывного спектра соответствующий сдвиг фазы в МКД получают экстраполяцией квантового дефекта  $\mu(E)$  в область  $E > 0$ . С учетом сказанного радиальная волновая функция  $R_{E'l}$  в квазиклассическом приближении имеет следующий вид (здесь и далее единицы атомные):

$$R_{E'l}(r) = \frac{A}{r\sqrt{p_{E'l}(r)}} \cos\left(\int_a^r p_{E'l}(r') dr' + \pi\mu - \frac{\pi}{4}\right), \quad (3)$$

$$p_{E'l}(r) = \left(2E + \frac{2Z}{r} - \frac{\lambda^2}{r^2}\right)^{1/2}, \quad \lambda = l + \frac{1}{2},$$

где  $a$  — левая точка поворота. Для состояний непрерывного спектра  $A = \sqrt{2/\pi}$  при нормировке на  $\delta(E - E')$ , для связанных состояний

$$A = \sqrt{\frac{2}{\pi dn/dE}}, \quad (4)$$

где  $dn/dE$  — плотность  $nl$ -уровней (такой вид нормировочного множителя следует из правила квантования [11]).

Допустим, что состояния  $El$  и  $E'l'$  достаточно близки в том смысле, что интеграл (2) квазиклассически велик. Подставляя (3) в (2), получим

$$M_{E'l'}^{E'l'} = \frac{AA'}{2} \int_{a_m}^b \cos\left(\int_{a_m}^r [p_{E'l'}(r') - p_{E'l}(r')] dr' + \pi(\mu' - \mu)\right) \frac{r dr}{\sqrt{p_{E'l}(r)p_{E'l'}(r)}}. \quad (5)$$

Здесь  $a_m = \max\{a, a'\}$ ,  $b$  — правая точка поворота (для свободно — свободных переходов  $b = \infty$ ). В (5) опущен член, содержащий косинус суммы фаз. Он быстро осциллирует и дает малый вклад в интеграл по сравнению с оставшимся, поскольку в области существенного интегрирования  $p_{E'l'} - p_{E'l} \ll p_{E'l}$  (в противном случае весь интеграл был бы мал, что противоречит сделанному допущению).

Введем некоторое среднее состояние  $E_c l_c$  и, разложив подынтегральное выражение в (5) около  $p_{E_c l_c}$  по малому параметру  $(p_{E'l'}^2 - p_{E'l}^2)/p_{E_c l_c}^2$ , ограничимся главным членом. Имеем

$$M_{E'l'}^{E'l'} = \frac{AA'}{2} \int_{a_c}^{\infty} \cos\left(\int_{a_c}^r \left(\omega - \frac{\lambda'^2 - \lambda^2}{2r'^2}\right) \frac{dr'}{p_{E_c l_c}(r')} + \pi(\mu' - \mu)\right) \frac{r dr}{p_{E_c l_c}(r)} \quad (6)$$

где  $\omega = E' - E$ . Верхний предел интегрирования для всех типов переходов может быть отнесен на бесконечность, поскольку, как будет ясно в дальнейшем, классически разрешенная область значительно шире области существенного интегрирования.

В литературе вопрос о введении средних величин при использовании квазиклассических и классических формул довольно широко обсуждается [12, 13]. Расчеты показывают, что подстановка некоторых средних величин вместо начальных или конечных приводит к лучшему согласию с результатами более сложных квантовомеханических расчетов и экспериментов, позволяет расширить диапазон применения этих формул. Положим, как обычно,  $l_c = (l + l')/2$ . По поводу  $E_c$  заметим, что в конечном выражение эта величина не входит, поэтому нет необходимости ее конкретизировать (для определенности можно полагать, например,  $E_c = (E + E')/2$ ).

Сделаем еще одно важное предположение, которое в случае водородоподобия соответствует переходу к приближению Крамерса и которое позволит получить в аналитическом виде формулу для  $\xi$ -функции. Допустим, что в (6) можно пренебречь величиной  $E_c$ . Формально это означает, что классическая траектория электрона со средними параметрами  $E_c$ ,  $l_c$  в области кулоновского взаимодействия аппроксимируется параболой. Тогда

$$M_{E'l'}^{E'l'} = \frac{AA'}{2} \int_{\lambda_c^2/2Z}^{\infty} \cos\left(\frac{\omega}{3Z^2} (Zr + \lambda_c^2) \sqrt{2Zr - \lambda_c^2} - 2\Delta\lambda \arctg \sqrt{\frac{2Zr}{\lambda_c^2} - 1} + \pi(\mu' - \mu)\right) \frac{r^2 dr}{\sqrt{2Zr - \lambda_c^2}}, \quad (7)$$

где  $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \pm 1$ . После замены переменной  $r = \lambda_c^2(1 + t^2/x)/2Z$ , где  $x = (\lambda_c^3 \omega / 2Z^2)^{2/3}$ , и интегрирования по частям получим

$$M_{E'l'}^{E'l'} = AA' \pi \left(\frac{Z}{2\omega^3}\right)^{1/3} [S(x) \cos(\pi(\mu' - \mu)) - T(x) \sin(\pi(\mu' - \mu))], \quad (8)$$

$$S(x) = \Delta\lambda \sqrt{x} \overline{Ai}(x) - \frac{d}{dx} Ai(x),$$

$$T(x) = \Delta\lambda \sqrt{x} \overline{Gi}(x) - \frac{d}{dx} Gi(x) + \frac{x}{2\pi}, \quad (9)$$

где

$$Ai(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \cos\left(\frac{t^3}{3} + xt\right) dt, \quad Gi(x) = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \sin\left(\frac{t^3}{3} + xt\right) dt \quad (10)$$

— функции Эйри [14].

Предлагаемый подход к расчету (2) близок к методу работы [15], в которой рассматривались переходы между высоковозбужденными уровнями водородоподобного атома<sup>1</sup>. При  $\mu = \mu' = 0$  в (8) остается только первый член, который, если пренебречь различием  $l$  и  $\lambda_c$  (при  $l=0$  это различие является существенным), эквивалентен выражению [15] для связанных-связанных переходов при условии  $l \ll n, n'$ . Соответствующее ограничение присутствует и в полученных формулах. Условием аппроксимации точки поворота  $a_c$  величиной  $\lambda_c^2/2Z$  в (7) является неравенство  $\lambda_c^2 E_c / Z^2 \ll 1$ .

**Пределы применимости.** Матричный элемент (8) квазиклассически велик, если  $x \ll 1$ . В этом случае в (10) (а также в интегральных представлениях производных  $Ai$  и  $Gi$ ) область  $t \sim 1$ , где фаза изменяется как  $t^3$ ,

<sup>1</sup> Авторы [15] утверждают, что результаты их работы применимы и к неводородоподобным атомам, если  $n$  заменить на  $v$ . Однако этого недостаточно. Необходимо также в волновую функцию (3) ввести некулоновский сдвиг фазы при

определяет величину этих интегралов. В противном случае подынтегральные выражения быстро осциллируют и интегралы малы. Таким образом, критерий близости состояний имеет вид

$$\omega \lesssim Z^2/\lambda_c^3. \quad (11)$$

Необходимость условия (11) можно усмотреть и непосредственно из (7). Действительно, главный вклад в этот интеграл дает область

$$r \sim (Z/\omega^2)^{1/2}, \quad (12)$$

а расположена она справа от точки поворота  $\lambda_c^2/2Z$ .

Пусть  $r_0$  — радиус иона. На расстояниях, больших по сравнению с  $r_0$ , потенциал электрон-ионного взаимодействия — кулоновский. Из (12) сразу получаем условие применимости кулоновского приближения

$$\omega \ll \sqrt{Z}/r_0^3. \quad (13)$$

Заметим, что это условие существенно только для малых  $l$ , для которых квантовый дефект отличен от нуля. Для больших  $l$   $\mu \rightarrow 0$  и кулоновское приближение всегда применимо, так как из-за мощного центробежного потенциала некулоновская область  $r \lesssim r_0$  классически недоступна. Наоборот, наличие существенно ненулевых  $\mu$  при малых  $l$  означает, что в этом случае некулоновская область классически доступна,

$$r_0 > \lambda_c^2/2Z. \quad (14)$$

Из (14) следует, что (11) всегда выполняется, если имеет место (13), т. е. в случае существенности квантовых дефектов ограничение на частоту излучения сверху связано с условием применимости кулоновского приближения, более жестким в данном случае, чем (11). Такой вывод еще раз подтверждает отмеченную выше целесообразность использования квазиклассического подхода в МКД.

Рассмотрим теперь возможность пренебрежения  $E_c$  в (6). Для этого необходимо, чтобы в области существенного интегрирования (12)  $|E_c| \ll \ll Z/r$ . Отсюда имеем ограничение со стороны малых частот излучения

$$\omega \gg |E_c|^{1/2}/Z, \quad (15)$$

которое соответствует приближению Крамерса. Условие (15) одновременно означает, что и в том случае, когда  $E_c < 0$ , классически разрешенная область движения значительно шире области существенного интегрирования.

Рассмотренные критерии применимости не зависят от квантовых дефектов, через которые проявляются индивидуальные свойства конкретных атомов. Отметим влияние квантовых дефектов на точность расчетов, которое проявляется не только в предлагаемом квазиклассическом подходе, но и вообще в МКД. Существенную погрешность МКД имеет вблизи куперовского минимума, когда  $\text{tg}(\pi(\mu' - \mu)) \simeq S(x)/T(x)$  [2]. В этом случае вклады от различных интервалов по  $r$  в области  $r > r_0$  «гасят» друг друга, и неизвестный вклад от  $r < r_0$  может оказаться важным. Однако, поскольку эта погрешность проявляется при определенных сочетаниях  $\omega$  и  $E$ , в интегральной формуле для  $\xi$ -функции она, по-видимому, будет не столь существенна.

**Интегральная формула.** Рассмотрим процесс поглощения фотона нейтральным атомом или положительным ионом с зарядом  $Z-1$  в состоянии  $SL$  и отрыва от него  $nl$ -электрона, в результате чего образуется ион с зарядом  $Z$  в состоянии  $S_1L_1$  и свободный  $E'l'$ -электрон. В данном случае интерес представляет фотоионизация высоковозбужденных ридберговских состояний, поэтому можно полагать, что на внешней  $nl$ -оболочке находится единственный электрон. Сечение такого процесса имеет следующий вид [16]:

$$\sigma = \frac{4\pi^2\omega}{3c} \sum_{l'L'} (2L'+1) \left\{ \begin{matrix} l & L & L_1 \\ l' & l' & 1 \end{matrix} \right\}^2 l_{>} (M_{E_1SL}^{E'l'SL'})^2, \quad (16)$$

где  $c$  — скорость света,  $l_{>} = \max\{l, l'\}$ ,  $L'$  — орбитальный момент системы ион плюс электрон в конечном состоянии. Радиальный интеграл  $M$  в приближении (8) зависит от  $E, E', S, L, L'$  только через квантовые дефекты  $\mu = \mu(E, l, S, L)$ ,  $\mu' = \mu(E', l', S, L')$ . Поэтому удобно выразить  $M$  через амплитудную  $G$  и фазовую  $\chi$  функции (определенные согласно [7]), которые зависят только от  $\lambda_c = l_{>}$ ,  $\Delta\lambda = l' - l$  и  $\omega$ ;

$$M_{ElSL}^{E'l'SL'} = AA' \frac{Z}{4\omega^2} G_{El}^{E'l'} \cos[\pi(\mu' - \mu + \chi_{El}^{E'l'})], \quad (17)$$

$$G_{El}^{E'l'} = 2\pi \left(\frac{4\omega}{Z^2}\right)^{1/2} \sqrt{S^2(x) + T^2(x)}, \quad \chi_{El}^{E'l'} = \frac{1}{\pi} \operatorname{arctg} \frac{T(x)}{S(x)}. \quad (18)$$

Чтобы получить коэффициент поглощения, подставим (17), (4) и  $A' = \sqrt{2}/\pi$  в (16), умножим сечение на заселенность начального состояния и просуммируем по уровням  $|E| < \omega$ . Сумму по  $n$  для большого числа высоковозбужденных состояний заменим интегралом. Граничную энергию, выше которой вклад в коэффициент поглощения выражается интегральной формулой, обозначим через  $E_0$ . Тогда для этого вклада от уровней  $E_0 < E < 0$  при равновесном распределении с температурой  $T$  получим

$$\begin{aligned} \kappa^{bf}(\omega, T) &= \frac{N}{\Sigma_0} e^{-1/T} \sum_{lSL} (2S+1)(2L+1) \int_{-\omega_0}^0 \sigma \frac{dn}{dE} dE = \\ &= \frac{N}{\Sigma_0} e^{-1/T} \frac{Z^2}{3c\omega^3} \sum_{l'l'SL'} (2S+1)(2L+1)(2L'+1) \left\{ \begin{matrix} l & L & L_1 \\ L' & l' & 1 \end{matrix} \right\}^2 l_{>} \cdot \\ &\quad (G_{EL}^{E'l'})^2 \int_{-\omega_0}^0 e^{-E/T} \cos^2(\pi(\mu' - \mu + \chi_{El}^{E'l'})) dE, \end{aligned} \quad (19)$$

где  $N, \Sigma_0$  — концентрация и статсумма атома (иона с зарядом  $Z-1$ ),  $I$  — энергия ионизации его основного состояния,  $\omega_0 = \min\{\omega, |E_0|\}$ .

Рассмотрим вначале случай водородоподобного атома ( $\mu = \mu' = 0$ ). Поскольку

$$\sum_{lSL'} (2S+1)(2L+1)(2L'+1) \left\{ \begin{matrix} l & L & L_1 \\ L' & l' & 1 \end{matrix} \right\}^2 = 2(2S_1+1)(2L_1+1) = 2g_1,$$

после подстановки (18), (9) в (19) и замены суммы по  $l$  интегралом получим

$$\kappa_H^{bf}(\omega, T) = \frac{Ng_1}{\Sigma_0} e^{-1/T} \frac{32\pi^2 Z^2 T}{3c\omega^3} (e^{\omega_0/T} - 1) \int_0^{\infty} \left[ x A i^2(x) + \left(\frac{dA i}{dx}\right)^2 \right] dx.$$

Используя уравнение Эйри  $x A i(x) = A i''(x)$ , это выражение легко проинтегрировать. В результате приходим к формуле Крамерса — Унзольда

$$\kappa_H^{bf}(\omega, T) = \frac{Ng_1}{\Sigma_0} e^{-1/T} \frac{16\pi Z^2 T}{3\sqrt{3} c\omega^3} (e^{\omega_0/T} - 1). \quad (20)$$

Квантовый дефект отличен от нуля обычно для небольшого числа парциальных волн ( $l \leq 3$ ), что связано, как отмечалось выше, с вытеснением центробежным потенциалом левой точки поворота в область кулоновского взаимодействия. Обозначим максимальное из всех  $l$ , для которых  $\mu \neq 0$ , через  $l_m$ . Таким образом, в разности  $\kappa - \kappa_H$  сумма по  $l$  имеет конечное

число членов. Интегральную формулу принято записывать в виде (1) [1, 2]. Тогда

$$\xi^{bj} = 1 + \sum_{l=0}^{i_m} \sum_{l'SLL'} D_{ll'SLL'}^{bj}, \quad (21)$$

$$D_{ll'SLL'}^{bj} = \frac{\sqrt{3}}{8\pi T} (e^{\omega_0/T} - 1)^{-1} B_{ll'SLL'} l_{>} (G_{E1}^{E'l'})^2 \times \\ \times \int_{-\omega_0}^0 e^{-E/T} \{ \cos^2(\pi(\mu' - \mu + \chi_{E1}^{E'l'})) - \cos^2(\pi\chi_{E1}^{E'l'}) \} dE, \quad (22)$$

$$B_{ll'SLL'} = \frac{(2S+1)(2L+1)(2L'+1)}{2(2S_1+1)(2L_1+1)} \left\{ \begin{matrix} l & L & L_1 \\ L' & l' & 1 \end{matrix} \right\}^2. \quad (23)$$

При аппроксимации энергетической зависимости квантовых дефектов линейной функцией

$$\mu = \alpha + \beta E$$

(22) легко проинтегрировать. В результате получим

$$D_{ll'SLL'}^{bj} = \frac{\sqrt{3}}{16\pi} B_{ll'SLL'} l_{>} (G_{E1}^{E'l'})^2 \left\{ \frac{\cos \psi}{e^{\omega_0/T} - 1} \times \right. \\ \left. \times [e^{\omega_0/T} \cos(W - 2\pi(\beta' - \beta)\omega_0) - \cos W] - \cos(2\pi\chi_{E1}^{E'l'}) \right\}, \quad (24)$$

$$\psi = \arctg[2\pi(\beta' - \beta)T], \quad W = \psi + 2\pi(\alpha' - \alpha + \beta'\omega + \chi_{E1}^{E'l'}). \quad (25)$$

Аналогичным образом можно рассмотреть коэффициент поглощения, обусловленный переходами между состояниями непрерывного спектра. Он будет иметь такой же вид, как правая часть (19), но с другими пределами интегрирования: от 0 до  $\infty$ . Оба выражения можно объединить, как это делалось в [1, 2]. Для водородоподобного атома коэффициенты поглощения  $\kappa_H^{jj}$  и  $\kappa_H^i$  будут отличаться от (20) последним множителем; в первом случае вместо  $e^{\omega_0/T} - 1$  появится 1, во втором  $-e^{\omega_0/T}$ . Согласно (1), вводятся соответствующие функции  $\xi^{jj}$  [17] и  $\xi^i$  [1, 2]. Запишем их в виде (21). Тогда вместо (24) получим

$$D_{ll'SLL'}^i = \frac{\sqrt{3}}{16\pi} B_{ll'SLL'} l_{>} (G_{E1}^{E'l'})^2 \{ \cos \psi \cos[W - 2\pi(\beta' - \beta)\omega_0] - \cos(2\pi\chi_{E1}^{E'l'}) \}. \quad (26)$$

Чтобы найти  $D^{jj}$ , достаточно в (26) подставить  $\omega_0 = 0$ .

Поскольку формула Крамерса — Унзольда является частным случаем полученной интегральной формулы, последнюю можно рассматривать как обобщение формулы Крамерса — Унзольда на случай неводородоподобного атома.

Если атомный остаток имеет нулевой орбитальный момент ( $L_1 = 0$ ), то  $L = l$ ,  $L' = l'$  и (23) обращается в

$$B_{ll'S} = \frac{2S+1}{2(2S_1+1)}. \quad (27)$$

В простейшем случае одного электрона, находящегося вне заполненных оболочек ( $S_1 = L_1 = 0$ ),  $S = 1/2$  и  $B_{ll'S} = 1$ . Если расщепление атомных уровней по  $SL$  невелико и можно пренебречь различием соответствующих квантовых дефектов, то после суммирования (23) по  $SLL'$  также получим единицу, и расчет будет эквивалентен случаю одного электрона сверх заполненных оболочек. При учете расщепления только по  $S$  следует исполь-

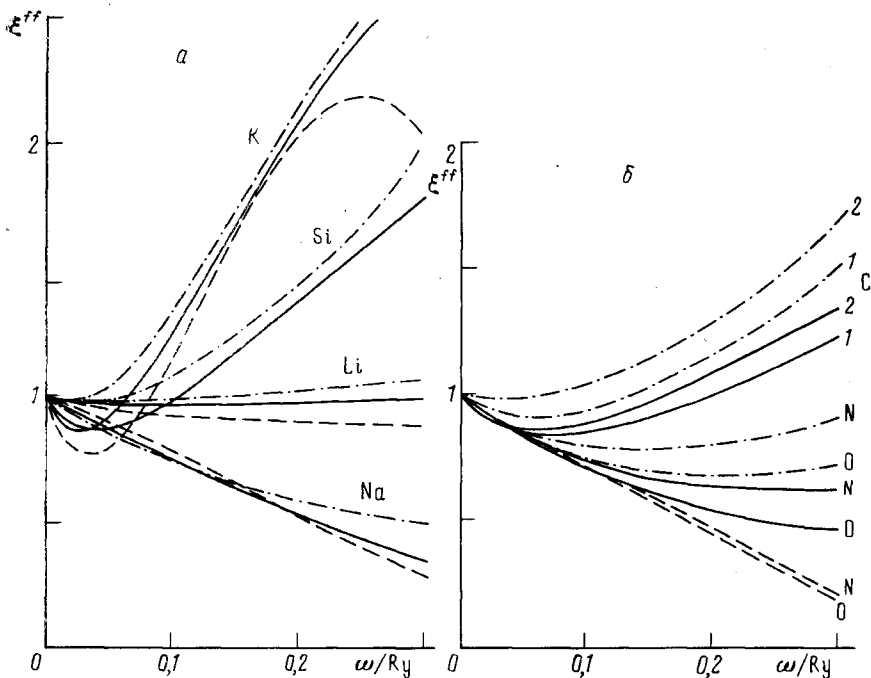


Рис. 1. Сопоставление  $\xi^{ff}$ -функции, рассчитанной в квазиклассическом приближении (сплошные кривые), с приближением Бибермана – Нормана [1, 2] (штриховые) и численным расчетом Пич [6] (штрихпунктир): для Li, Na, K –  $T=6000$  K; Si, N, O – 10 000; C – 10 000 (1), 20 000 (2)

зывать коэффициенты (27). Вопрос усреднения квантовых дефектов по  $L$  и  $S$  рассматривался в [8].

Структура полученной интегральной формулы подобна [1]. Приближение [1] получим, если пренебрежем переходами  $l \rightarrow l' = l - 1$ , а для  $l' = l + 1$  амплитудную и фазовую функции аппроксимируем следующим образом:

$$\frac{\sqrt{3}}{8\pi} (G_{Zl}^{E'l'})^2 = K_{ll'} \left( \frac{2\omega}{Z^2} \right)^{m_{ll'}}$$

$$\chi_{E'l'}^{E'l'} = a_{ll'} + b_{ll'} \sqrt{\frac{2\omega}{Z^2}} + c_{ll'} \frac{2\omega}{Z^2},$$

где  $K_{ll'}$ ,  $m_{ll'}$ ,  $a_{ll'}$ ,  $b_{ll'}$ ,  $c_{ll'}$  – численные константы.

**Результаты расчета.** На рис. 1–3 приведены рассчитанные по приведенным выше формулам  $\xi$ -функции для ряда атомов и ионов. Линейная аппроксимация квантовых дефектов взята из [5] для Li, Na, K, N, O,  $Mg^+$  и из [6] для C, Mg, Si,  $C^+$ ,  $N^+$ ,  $O^+$ ,  $Si^+$ , т. е. та же самая, которая использовалась в численных расчетах [6]. При этом так же, как и в [6], учитывались переходы с участием парциальных волн не выше  $l=3$ . Вопрос о выборе граничной энергии  $E_0$  подробно рассматривался в [1, 2, 8], поэтому не будем на нем останавливаться. Примем для всех случаев одинаковое условие  $E_0 = -0,1Z^2 Ry$ .

На рис. 1 функция  $\xi^{ff}$ , соответствующая свободно-свободным переходам, сравнивается с [1, 6]. Для корректного сравнения с [1] был проведен пересчет  $\xi^{ff}$  по формулам этой работы с квантовыми дефектами [5, 6], поэтому данные несколько отличаются от приведенных в [1, 2], где использовалась другая аппроксимация  $\mu(E)$ . Для всех элементов квазиклассическое приближение лучше согласуется с численным расчетом [6], чем [1]. Функция  $\xi^{ff}$  незначительно меняется с температурой, что обусловлено слабой зависимостью квантовых дефектов от энергии. Из (24)–(26) видно, что при  $\beta = \beta' = 0$   $\xi$ -функции не зависят от  $T$  и  $E_0$ , более того,



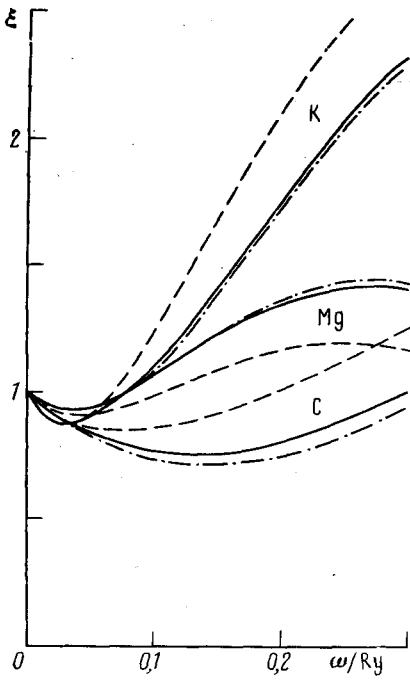


Рис. 2

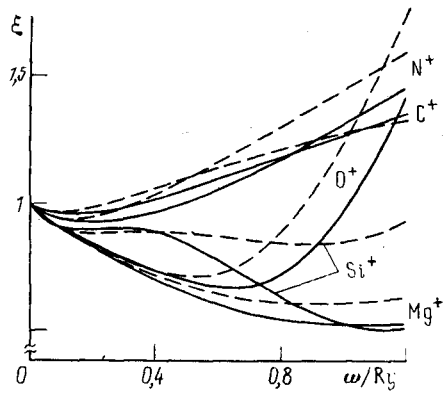


Рис. 3

Рис. 2.  $\xi$ -функции, учитывающие различные типы переходов, для атомов калия, магния ( $T=6000$  К) и углерода ( $10\,000$  К): штриховая линия —  $\xi^{ff}$ , штрихпунктир —  $\xi^{bf}$ , сплошная —  $\xi^t$

Рис. 3.  $\xi$ -функции, учитывающие различные типы переходов, для ряда ионов при  $T=20\,000$  К: сплошная кривая —  $\xi^t$  и совпадающая с ней  $\xi^{bf}$ , штриховая —  $\xi^{ff}$

$\xi^{ff}=\xi^{bf}=\xi^t$  (это отмечалось в [1, 2]). Для примера  $\xi^{ff}$ -функция углерода показана на рис. 1, б при двух существенно различных значениях  $T$ , в остальных случаях температурная зависимость оказалась более слабой.

Зависимость от пределов интегрирования в интегральной формуле демонстрируется на рис. 2, 3. Для Li, Na, N, O, Si функции  $\xi^{bf}$  и  $\xi^t$  близки к  $\xi^{ff}$ , показанным на рис. 1, и отдельно не приводятся. В остальных случаях (рис. 2, 3)  $\xi^{ff}$  и  $\xi^{bf}$  несколько отличаются друг от друга, но последняя при этом практически совпадает с  $\xi^t$  (для ионов на рис. 3 они показаны одной кривой). Это означает, что при рассматриваемых температурах вклад фотоионизации возбужденных уровней с  $E>E_0$  в коэффициент поглощения значительно превышает вклад свободно-свободных переходов. С ростом температуры различие между  $\xi^{bf}$  и  $\xi^t$  увеличивается.

При незначительной величине расщепления на  $SL$ -термы квантовые дефекты, соответствующие различным сериям  $SL$ -термов, могут быть усреднены. В этом случае расчет упрощается, так как в несколько раз уменьшается число членов в (21) и отпадает необходимость вычисления  $b_j$ -символов. Среди рассмотренных выше атомов и ионов такое приближение дает хорошие результаты для C, N, O,  $N^+$ ,  $O^+$ , но неприемлемо для Mg и Si.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Биберман Л. М., Норман Г. Э. // JQSRT. 1963. V. 3. N 3. P. 221.
2. Биберман Л. М., Норман Г. Э. // УФН. 1967. Т. 91. № 2. С. 193.
3. Burgess A., Seaton M. J. // Rev. Mod. Phys. 1958. V. 30. P. 992.
4. Burgess A., Seaton M. J. // Mon. Not. R. Astr. Soc. 1960. V. 120. N 2. P. 121.
5. Peach G. // Mem. R. Astr. Soc. 1967. V. 71. P. 1.
6. Peach G. // Mem. R. Astr. Soc. 1970. V. 73. P. 1.
7. Peach G. // Mon. Not. R. Astr. Soc. 1965. V. 130. N 5. P. 361.
8. Кобзев Г. А. Оптические свойства воздушной плазмы при высоких температурах. 1. Непрерывный спектр: основные процессы, методы расчета. Препринт ИВТАН № 1-112. М., 1983.

9. *Peach G.* // Mem. R. Astr. Soc. 1967. V. 71. P. 13.
10. *Фано У., Купер Дж.* Спектральные распределения сил осцилляторов в атомах. М.: Наука, 1972. С. 62.
11. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Квантовая механика. М.: Наука, 1974. С. 205.
12. *Альдер К., Бор О., Хус Т. и др.* // Деформация атомных ядер. М.: ИЛ, 1958. С. 31.
13. *Nassache P. F.* // J. Phys. B. 1972. V. 5. N 7. P. 1308.
14. Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. М.: Наука, 1979. С. 264.
15. *Гореславский С. П., Делоне Н. Б., Крайнов В. П.* // ЖЭТФ. 1982. Т. 82. № 6. С. 1789.
16. *Собельман И. И.* Введение в теорию атомных спектров. М.: Наука, 1977. С. 254.
17. *Норман Г. Э.* // Опт. и спектр. 1963. Т. 14. № 4. С. 521.

Институт высоких температур  
Академии наук СССР

Поступила в редакцию  
18.01.90