

# Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Г. А. Кобзев, В. М. Сергеев, К расчету сечений фотоионизации,  
*ТВТ*, 1969, том 7, выпуск 3, 566–570

<https://www.mathnet.ru/tvt6886>

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: 18.97.14.90

24 мая 2025 г., 21:54:59



КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 537.56

К РАСЧЕТУ СЕЧЕНИЙ ФОТОИОНИЗАЦИИ

Г. А. Кобзев, В. М. Сергеев

В последние годы значительно возрос интерес к изучению оптических свойств горячих газов. Это связано прежде всего с необходимостью учета лучистого теплообмена в ряде задач газодинамики [1] и с решением других задач. Процессы фотоионизации атомов и положительных ионов в значительной степени определяют непрерывный спектр поглощения плазмы в широком частотном интервале. Спектр же в ультрафиолетовой области полностью определяется фотоионизацией основных и первых возбужденных состояний атомов и ионов [1].

В последнее время появляется много работ, как теоретических, так и экспериментальных, посвященных определению сечений фотоионизации. Обширную библиографию можно найти в обзоре [2]. Однако в литературе нет достаточно удобных для расчета оптических свойств и одновременно надежных в интервале от пороговых до борновских энергий способов расчета сечений фотоионизации.

Расчет припороговых значений сечений фотоионизации при наличии надежных значений энергетических уровней атома (иона), а следовательно, и квантовых дефектов достаточно удобно и надежно производится с помощью метода квантового дефекта (МКД) [3]. Однако этот расчет, основанный на использовании экстраполированных квантовых дефектов, ненадежен при средних (энергия оторванного электрона  $k^2$  порядка нескольких  $z^2$ , где  $z$  — заряд остаточного иона и высоких ( $k^2 \gg z^2$ ) энергиях.

Борновское приближение хорошо работает при высоких (нерелятивистских) энергиях, но ненадежно при средних, а в припороговой области дает результаты, непригодные даже качественно.

Расчет сечений фотоионизации по методу Хартри — Фока (МХФ) является в настоящее время наиболее надежным в широком интервале энергий, но в силу своей трудоемкости не пригоден для массового вычисления оптических свойств. Волновые функции связанного и свободного состояний определяются в МХФ численным интегрированием системы интегро-дифференциальных уравнений самосогласованного поля. В последние годы выполнено большое число расчетов аналитических волновых функций связанного состояния атомов и ионов по МХФ [4]. Использование этих функций позволяет получить достаточно простой и надежный способ расчета сечений фотоионизации. Первые попытки в этом направлении были сделаны в [5—7]. В качестве волновой функции оторванного электрона берется плоская волна, а выражение для сечения взято с матричным элементом ускорения, что при больших энергиях эквивалентно второму борновскому приближению. Ниже будет показано, что эта методика расчета не дает надежных результатов и неудовлетворительна.

В данной работе предлагается метод расчета сечений фотоионизации, в котором волновой функцией свободного состояния является кулоновская, а связанного — аналитическая функция самосогласованного поля (метод «кулон — самосогласованное поле», сокращенно МКС), приводятся результаты для ряда атомов и ионов.

Сечение фотоионизации в одноэлектронном приближении записывается в виде [8]

$$\sigma = \left(\frac{4}{3}\pi^2\alpha E/2\right)a_0^2 N |G_{n,l_1 l_1}|^2 (2L_1 + 1)/(2L + 1) \times \sum_{l'=l \pm 1} \sum_{L'} Q(L_1 l L, L_1 l' L') J_{\text{матр}} (W_{n l L}^{k l' L'})^2 \text{ см}^2, \quad (1)$$

с матричным элементом радиус-вектора

$$W_{n l L}^{k l' L'} = \int_0^\infty R_{n l L}(r) r R_{k l' L'}(r) r^2 dr, \quad (2)$$

где  $R_{n l L}(r)$ ,  $R_{k l' L'}(r)$  — радиальные волновые функции активного электрона в связанном и свободном состояниях,  $n$  — главное квантовое число,  $l, l'$  — орбитальные квантовые числа;  $L, L'$  — моменты количества движения системы электрон — остов в начальном и конечном состояниях,  $L_1$  — момент остова; энергия поглощаемого ф-

тона  $E = |E_{nl}| + k^2$ ,  $E_{nl}$  и  $k^2$  — выраженные в ридбергах энергии электрона в начальном и конечном состояниях;  $N$  — число эквивалентных электронов в оболочке,  $G$  — генеалогический коэффициент,  $l_{\max} = \max\{l, l'\}$ , коэффициенты  $Q$  затабулированы, например, в [8],  $\alpha$  — постоянная тонкой структуры,  $a_0$  — радиус Бора.

Радиальные волновые функции связанного состояния, аналитические волновые функции самосогласованного поля представляются в виде

$$R_{nlL}(r) = \sum_i C_i r^{\beta_i} e^{-\xi_i r}, \quad (3)$$

где  $C_i$ ,  $\beta_i$ ,  $\xi_i$  — затабулированные коэффициенты, причем  $\beta_i$  — целые.

В качестве волновой функции свободного движения возьмем кулоновскую волновую функцию с  $z$ , равным заряду атомного остатка. Нормированная на энергию, она имеет вид [9]

$$\begin{aligned} R_{kl'}(r) = & (-1)^{l'+1} 2\sqrt{z/1 - \exp(-2\pi z/k)} \times \\ & \times \prod_{s=1}^{l'} \sqrt{s^2 + z^2/k^2} \cdot 2kr^{-(l'+1)} \times \\ & \times \frac{1}{2\pi} \oint e^{-\rho\eta} \left( \eta + \frac{1}{2} \right)^{-i(z/k) - l' - 1} \times \\ & \times \left( \eta - \frac{1}{2} \right)^{i(z/k) - l' - 1} d\eta, \quad (4) \end{aligned}$$

где  $\rho = 2ikr$ .

Интеграл берется по контуру, охватывающему точки ветвления подынтегральной функции  $\eta = \pm 1/2$ . Подставляя в (2) волновые функции (3) и (4) и интегрируя сначала по  $r$ , а затем по  $\eta$ , получаем для матричного элемента перехода  $nlL \rightarrow kl'$  выражение

$$W_{nlL}^{kl'} = k^{l'} \cdot 2^{l'+1} \sqrt{z/1 - \exp(-2\pi z/k)} \cdot \prod_{s=1}^{l'} \sqrt{s^2 + z^2/k^2} \sum_i C_i \cdot A_i^{l'}(k), \quad (5)$$

где

$$A_i^{l'}(k) = (\partial^{\beta_i - l' + 2} / \partial \xi_i^{\beta_i - l' + 2}) \left[ \exp\left(-2 \frac{z}{k} \arctg \frac{k}{\xi_i}\right) \right] / (\xi_i^2 + k^2)^{l' + 1}.$$

В частном случае переходов  $l - l'$  имеем

$$\begin{aligned} 1 - 0 \quad A_i^{l0}(k) &= [3(\xi_i - z)(\xi_i^2 + k^2) + (6\xi_i z - 3\xi_i^2 + k^2 - 2z^2)(3\xi_i - z)] \cdot \\ & \cdot \left[ \exp\left(-\frac{2z}{k} \arctg \frac{k}{\xi_i}\right) \right] / (\xi_i^2 + k^2)^4; \\ 1 - 2 \quad A_i^{l2}(k) &= (3\xi_i - z) \left[ \exp\left(-\frac{2z}{k} \arctg \frac{k}{\xi_i}\right) \right] / (\xi_i^2 + k^2)^4. \end{aligned}$$

Волновая функция (4) и матричный элемент (5) не зависят от момента количества движения системы электрон — остов в конечном состоянии  $L'$ . Суммируя в (1) по  $L'$ , для перехода  $nl^N L \rightarrow kl^{(N-1)}$  имеем окончательно

$$\sigma = 1,34 \cdot 10^{-18} (E/Ry) [N |G_{\gamma, S, L}^{\nu S L}|^2 / (2l + 1)] \sum_{l'=l \pm 1} l_{\max} |W_{nlL}^{kl'}|^2 \text{ см}^2, \quad (6)$$

$W_{nlL}^{kl'}$  определяется формулами (5).

Так как при  $k \gg z$  волновая функция (4) переходит в плоскую волну, то сечение по МРС при  $k \rightarrow \infty$  стремится к борновскому, но около порога в отличие от борновского не обращается в нуль, а имеет конечное значение.

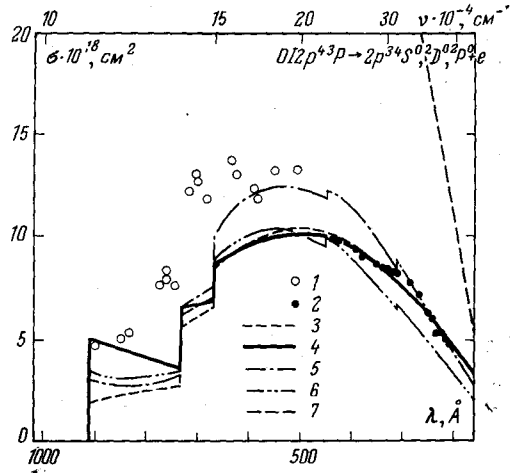


Рис. 1. Сечение фотоионизации основного состояния атома кислорода.

Экспериментальные точки: 1 — [13, 14]; 2 —  $1/2\sigma(\text{O}_2)$  [13]. Расчет: 3 — по МРС; 4 — по (7) для перехода  $^3P \rightarrow ^4S^o$ , МРС для  $^3P \rightarrow ^2D^o$ ,  $^2P^o$ ; 5 — [11] с матричным элементом радиус-вектора; 6 — [11] с матричным элементом скорости; 7 — по формулам работы [5], переход  $^3P \rightarrow ^4S^o$  (пороговое значение — нуль, в точке  $\lambda = 457 \text{ \AA}$  сечение  $10^{-18} \text{ см}^2$ )

На рис. 1—4 представлены результаты расчетов по МКС для переходов с основных состояний атомов азота и кислорода и одно- и двукратных ионов азота. Параметры волновых функций связанного состояния взяты по [10]. На рис. 1 и 2 приведены также результаты экспериментов и расчеты по МХФ. Из приведенного сравнения видно хорошее согласие в области средних и больших энергий с расчетами по МХФ [11, 12] и экспериментальными данными [13—17] (с учетом погрешности последних).

В припороговой области, где существенна некулоновость потенциала, имеется расхождение данных эксперимента, с одной стороны, и расчета по МКС — с другой. Но, как отмечалось выше, в этой области при наличии надежных данных по квантовым дефектам разумно использовать МКД. Чтобы полу-

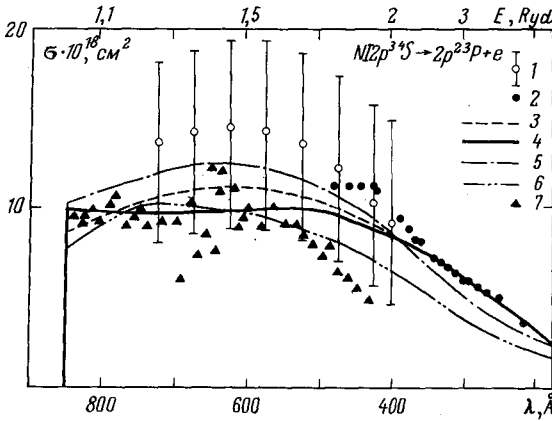


Рис. 2. Сечение фотоионизации основного состояния атома азота.

Экспериментальные точки: 1 — [15]; 2 —  $1/2\sigma(N_2)$  [16]; 7 — [17].  
Расчет: 3 — по МКС; 4 — по (7); 5 — [12] с матричным элементом радиус-вектора; 6 — [12] с матричным элементом скорости

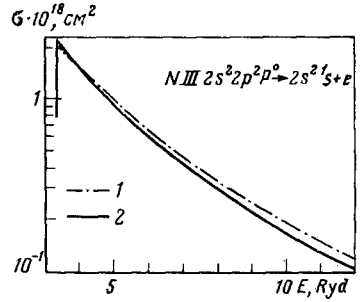


Рис. 4. Сечение фотоионизации основного состояния двукратного иона азота:

1 — расчет по МКС; 2 — по МКД

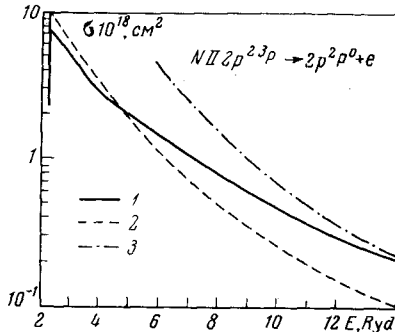


Рис. 3. Сечение фотоионизации основного состояния однократного иона азота:

1 — расчет по МКС; 2 — по МКД; 3 — по [5]

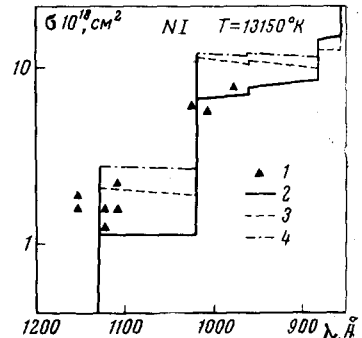


Рис. 5. Просуммированное сечение фотоионизации атома азота,  $T = 13150^\circ K$ .

1 — Эксперимент [23], пороги фотоионизации сдвинуты вследствие взаимодействия частиц в плазме. Расчет: 2 — по МКС; 3 — по (7); 4 — по МКД

чить надежное во всем интервале энергий сечение, естественно сплечь сечения по МКД и МКС. Сечение фотоионизации при этом определяется выражением:

$$\sigma = \sigma_{KD} \exp(-ak^2/z^2) + \sigma_{KC}(1 - \exp(-ak^2/z^2)), \quad (7)$$

где  $\sigma_{KD}$  — сечение по МКД,  $\sigma_{KC}$  — по МКС, численное значение множителя  $a$  определяется областью надежной экстраполяции квантового дефекта. На рис. 1 и 2 приводятся также сечения, полученные по формуле (7),  $a = 2$ . Для фотоионизации атома

кислорода с образованием иона в возбужденных  $2D^{\circ}$  и  $2P^{\circ}$  состояниях сечения и в припороговой области энергий рассчитывались по МКС.

Надежность полученных сечений можно косвенно проверить с помощью правил сумм. В [2] показано, что для проверки сечений фотоионизации удобно использовать следующее правило:

$$\sum_n f_{mn} / (E_n - E_m)^2 = a_m / 4,$$

где  $\Sigma$  включает суммирование по линиям и интегрирование по непрерывному спектру,  $a_m$  — поляризуемость в ат. ед.,  $E_n, E_m$  — в *Ryd*. Расчетные значения  $a_m$  для основных состояний *OI* и *NI* составляют 0,77 и 1,08  $\text{\AA}^3$  [18], экспериментальные соответственно  $0,77 \pm 0,06$  и  $1,13 \pm 0,06$  [19]. С использованием сечений, рассчитанных по формуле (7), получены значения: для *NI* 1,05  $\text{\AA}^3$  и для *OI* 0,65  $\text{\AA}^3$ . При этом силы осцилляторов резонансных линий *NI* взяты по [20], а *OI* — по [21]. Силы осцилляторов спектральных линий соответствующих серий определены путем экстраполяции сечений МКД в длинноволновую область [22].

На рис. 5 приведены результаты измерений сечения фотоионизации атома азота в ультрафиолетовой области при  $T = 13\,150^{\circ}\text{K}$  из работы [23], а также рассчитанные нами для этих условий сечения фотоионизации возбужденных состояний  $2p^3\,2P^{\circ}$  и  $2p^3\,2D^{\circ}$ . Расчет по МКС и по формуле (7) в данном случае согласуется с экспериментом даже лучше, чем расчет по МКД.

Таким образом, сравнение с расчетами по МХФ, экспериментом и проверка по правилу сумм показывают надежность рассчитанных по МКС и (7) сечений атомов. Следует отметить, что для ионов с увеличением  $z$  влияние некулоновости потенциала должно уменьшаться и расчет по МКС должен давать более надежные результаты. На рис. 3 и 4 нанесены сечения фотоионизации основных состояний *NI* и *NI* III, рассчитанные по МКД и МКС. В припороговой области отличие МКС от МКД незначительно, поэтому для ионов использование (7), по-видимому, излишне.

На рис. 1 и 3 приведены также сечения фотоионизации, рассчитанные по формулам работы [5] с учетом  $p-s$  и  $p-d$  переходов. В области средних энергий эти кривые проходят значительно выше сечений по МКС, МХФ и эксперимента. Такое расхождение не случайно. Как отмечалось выше, расчет в [5] соответствует второму борновскому приближению. Однако Бете и Солпитер [9] на примере атома водорода показали, что второй член ряда теории возмущений не мал, если связанное состояние не есть  $s$ -состояние. Если же второй член не мал, то для получения правильного результата надо, вообще говоря, суммировать весь ряд. Волновая функция (4) в МКС является, согласно [9], суммой ряда теории возмущений, первыми членами которого являются использованные в [5] плоская волна и поправка к ней. Неадекватность сечений из работы [5] в средней области делает сомнительной и использованную тем же автором в [6, 7] сшивку сечений из [5] с сечением по МКД.

В заключение приносим благодарность Л. М. Биберману за интерес к работе, Г. Э. Норману и Л. И. Подлубному за полезные обсуждения.

Институт высоких температур  
Академии наук СССР

Поступило в редакцию  
2 X 1968

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Л. М. Биберман, В. С. Воробьев, Г. Э. Норман, И. Т. Якубов. Космические исслед., 2, 441, 1964; И. В. Авилова, Л. М. Биберман, В. С. Воробьев, В. М. Замалин, Г. А. Кобзев, А. Н. Лагарьков, А. Х. Мнацаканян, Г. Э. Норман. JQSRT 9, 89, 1969; 9, 113, 1969.
2. Л. М. Биберман, Г. Э. Норман. Успехи физ. наук, 91, 193, 1967.
3. A. Burgess, M. J. Seaton. Rev. Mod. Phys., 30, 992, 1958; M. J. Seaton. Month. Not. Roy. Astr. Soc., 118, 504, 1958.
4. C. S. S. Roothaan et al. Rev. Mod. Phys., 32, 186, 1960; E. Clementi, C. S. S. Roothaan. Phys. Rev., 127, 1618, 1962; E. Clementi. Tables of Atomic Functions, Suppl. to IBM J. Res. and Dev., № 1, 1965.
5. R. R. Johnston. Phys. Rev., 136, A958, 1964.
6. D. R. Churchill, B. H. Armstrong, R. R. Johnston, K. G. Müller. JQSRT, 6, 371, 1966.
7. B. H. Armstrong, R. R. Johnston, P. S. Kelly, H. DeWitt, S. G. Brush. Progress in High Temperature Physics and Chemistry, 1, Pergamon Press, 1967.
8. И. И. Собельман. Введение в теорию атомных спектров. Физматгиз, 1963.
9. Г. Бете, Э. Солпитер. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. Физматгиз, 1960.
10. C. S. S. Roothaan, P. S. Kelly. Phys. Rev., 131, 1177, 1963.
11. A. Dalgarno, R. J. W. Henry, A. L. Stewart. Planet. Space Sci., 12, 235, 1964.
12. R. J. W. Henry. J. Chem. Phys., 44, 4357, 1966.
13. R. B. Cairns, J. A. R. Samson. Phys. Rev., 139, A1403, 1965.
14. R. E. Huffman, J. C. Larrabee, Y. Tanaka. J. Chem. Phys., 46, 2213, 1967.
15. A. W. Ehler, G. L. Weissler. J. Opt. Soc. Amer., 45, 1035, 1955.

16. J. A. R. Samson, R. B. Cairns. J. Opt. Soc. Amer., 55, 1035, 1965.
17. F. J. Gomes, A. E. Elzer. Z. Naturforsch., 23A, 133, 1968.
18. W. R. Garrett. BAPS, 11, 532, 1966.
19. A. B. Dalgarno. Adv. Phys., 11, 281, 1962.
20. A. B. Prag, C. E. Fairchild, K. C. Clark. Phys. Rev., 137, A1358, 1965.
21. W. L. Wiese, M. W. Smith, B. M. Glennon. Atomic Transition Probabilities 1, NBS. Washington, 1964.
22. Г. А. Кобзев, Г. Э. Норман, К. И. Серяков. Теплофизика высоких температур, 4, 493, 1966.
23. J. C. Morris, R. L. Garrison. JQSRT, 6, 899, 1966.

УДК 533.9.07:537.523.74

## КОЛЕБАНИЯ КАНАЛА РАЗРЯДА В ТРУБЧАТЫХ ИМПУЛЬСНЫХ ЛАМПАХ

*Л. В. Бабин, А. Я. Балагуров, М. А. Плышевский*

Заполнение трубчатой импульсной лампы разрядом сопровождается колебаниями границы свечения [1—3], что связывается [3] с акустическими колебаниями газа в лампе, вызываемыми расширением канала разряда.

Цель настоящей работы — изучение модуляции излучения стандартных импульсных ламп типа ИФП-800, ИФП-2000 и ИФП-5000. Исследована зависимость периода колебаний от времени, электрических параметров разрядного контура и размеров разрядной трубки. Схема эксперимента приведена на рис. 1. Емкость конденсаторной батареи 400 мкф, начальное напряжение изменялось от 1,0 до 2,2 кВ, индуктивность контура — от 5 до 90 мкГн.

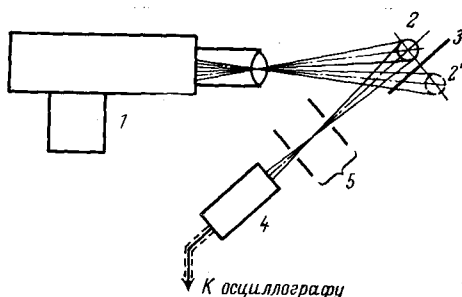


Рис. 1. Схема эксперимента: 1 — камера СФР-2М; 2 — исследуемая лампа; 3 — плоское зеркало; 4 — фотоэлемент; 5 — щелевые диафрагмы

Колебания яркости канала разряда регистрировались при помощи фотоэлемента типа Ф-13, причем введением щелевых диафрагм выделялись лишь неаксиальные типы колебаний.

Типичные СФР-грамма и осциллограмма света приведены на рис. 2 и 3 соответственно. Частота колебаний на осциллограмме хорошо совпадает с частотой колебаний границы свечения, измеренной по СФР-граммам. Расширение канала разряда носит колебательный характер. Скорость расширения канала разряда (скорость увеличения видимого размера канала в плоскости «электрод поджига — ось лампы») непосредственно после пробоя в зависимости от скорости нарастания тока  $dI/dt =$

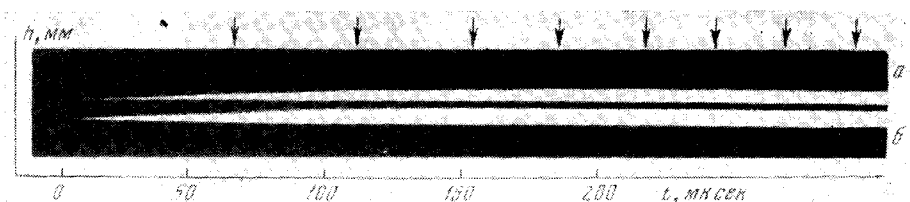


Рис. 2. СФР-грамма развития канала разряда в ксеноновой импульсной лампе типа ИФП-5000 ( $c = 400$  мкф;  $U_0 = 1,8$  кВ;  $L = 50$  мкГн):

*a* — вертикальная и *b* — горизонтальная проекции разряда. 1 деление на оси  $h = 6$  мм. Стрелки сверху указывают на максимумы колебаний канала