Г. А. Кобзев, В. М. Сергеев, К расчету сил осцилляторов верхних членов спектральных серии, *ТВТ*, 1969, том 7, выпуск 5, 1012–1014

https://www.mathnet.ru/tvt7598

Можно заключить, что используемая нами кинетика заселения возбужденных состояний, ответственных за линейчатое излучение плазмы в процессе распада и нарастания ионизации, в общих чертах объясняет наблюдаемые факты.

Институт высоких температур
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
20 XII 1968

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. М. Биберман, В. С. Воробьев, И. Т. Якубов. Теплофизика высоких температур, 5, № 2, 1967; сб. Магнитогидродинамический метод получения электроэнергии, «Энергия», 1968, стр. 209.
2. Ю. М. Алесковский. Ж. эксперим. и теор. физики, 44, 480, 1963.
3. В. С. Егоров, Ю. Г. Козлов, А. М. Шухтин. Оптика и спектроскопия, 17, 154, 1964.
4. В. С. Егоров, В. Н. Скребов, А. М. Шухтин. Оптика и спектроскопия, 22, 9, 1967.
5. Н. А. Кружилин, И. Т. Якубов. Междунар. симпозиум по производству электроэнергии с помощью МГД-генераторов, Варшава, 1968, SM-107/140.
6. T. A. Cool, E. E. Zukoski. Phys. Fluids, 9, 780, 1964.

УДК 533.9.01

К РАСЧЕТУ СИЛ ОСЦИЛЛЯТОРОВ ВЕРХНИХ ЧЛЕНОВ СПЕКТРАЛЬНЫХ СЕРИЙ

Г. А. Кобзев, В. М. Сергеев

В работах последних лет было обращено внимание на необходимость учета лучистого теплообмена в ряде газодинамических и других задач. В связи с этим значительно возрос интерес к исследованию оптических свойств горячих газов. В [1] было показано, что при этом важную роль играет излучение линейчатого спектра, соответствующее переходам между дискретными уровнями в атомах и ионах. Особенно важны переходы с основной и первых возбужденных конфигураций, причем не только на ближайшие возбужденные уровни, но и на высоковозбужденные, соответствующие верхним членам спектральных серий. Однако силы осцилляторов этих переходов известны недостаточно хорошо, методы расчета развиты слабо и мало пригодны для массовых вычислений оптических свойств. Единственным способом, пригодным для этих целей, можно считать расчет плотностей сил осцилляторов спектральных серий по модифицированным для этого формулам метода квантового дефекта; этот способ дает по большей части лишь оценочные значения, поскольку использование кулоновской волновой функции для состояний основной конфигурации не всегда оправдано. В литературе имеются данные лишь для ряда атомов. С повышением температуры начинают играть роль переходы в ионах, однако силы осцилляторов соответствующих серий отсутствуют.

В данном сообщении предлагается использовать для расчета сил осцилляторов переходов с уровней основной и первых возбужденных конфигураций на верхние возбужденные уровни метод «кулон — самосогласованное поле» (МКС) [2], дающий неплохие результаты для сечений фотоионизации атомов и ионов различной кратности. При этом получены компактные аналитические выражения и приводятся результаты расчетов для ряда атомов и ионов.

Сила осциллятора перехода $i - k$ рассчитывается по формуле [3]:

$$f_{ik} = \frac{1}{3}\frac{\max(l, l')}{2l+1} N|G|^2 \nu (r_{ik})^2, \tag{1}$$

где ν — частота перехода $i - k$ в ридбергах, l и l' — орбитальные квантовые числа начального состояния i и конечного k, N — число эквивалентных электронов в оболочке, G — генеалогический коэффициент.

В качестве волновой функции нижнего состояния возьмем аналитическую волновую функцию самосогласованного поля вида:

$$R_i(r) = \sum_j C_j e^{-\xi_j r_j^{\beta_j}}, \tag{2}$$

где C_j, ξ_j, β_j — постоянные коэффициенты, причем β_j — целые.

Ион	Переход	E_{I}, $см^{-1}$	φ			
			$n^*=4$	$n^*=5$	$n^*=6$	$n^*=7-12$
OI	$2s^22p^4$ $^3P - 2s^22p^3(^2D^\circ)$ nd	136650	0,537	0,584	0,608	0,64
	$^3P - (^2P^\circ)$ nd	150300	0,356	0,386	0,402	0,42
	$^3P - (^4S^\circ)$ nd	109837	0,34	0,37	0,39	0,42
NI	$2s^22p^3$ $^4S^\circ - 2s^22p^2$ (^3P) nd	117214	1,56	1,68	1,74	1,83
	$^2D^\circ -$ (^3P) nd	97989	0,820	0,882	0,912	0,95
	$^2D^\circ -$ (^1D) nd	113298	0,955	1,02	1,05	1,11
	$^2P^\circ -$ (^3P) nd	88374	0,86	0,92	0,96	1,00
	$^2P^\circ -$ (^1D) nd	103689	0,57	0,61	0,63	0,66
OII	$2s^22p^3$ $^4S^\circ - 2s^22p^2$ (^3P) nd	283244	1,85	1,88	1,88	1,88
	$^2D^\circ -$ (^3P) nd	256424	0,93	0,94	0,94	0,94
	$^2P^\circ -$ (^3P) nd	242778	0,95	0,95	0,94	0,94
	$2s2p^4$ $^4P - 2s2p^3$ $(^5S^\circ)$ nd	223656	0,71	0,72	0,72	0,72
NII	$2s^22p^2$ $^3P - 2s^22p\,(^2P^\circ)$ nd	238751	1,86	1,83	1,80	1,76
	$^1D -$ $(^2P^\circ)$ nd	223436	1,94	1,88	1,84	1,80
	$^1S -$ $(^2P^\circ)$ nd	203094	2,06	1,96	1,91	1,83
	$2s2p^3$ $^3D^\circ - 2s2p^2$ (^4P) nd	203793	1,29	1,26	1,24	1,21
	$^3P^\circ -$ (^4P) nd	186813	1,25	1,22	1,19	1,17
	$^3S^\circ -$ (^4P) nd	140804	1,72	1,72	1,71	1,70
OIII	$2s^22p^2$ $^3P - 2s^22p$ $(^2P^\circ)$ nd	442807	1,24	1,16	1,12	1,05
	$^1D -$ $(^2P^\circ)$ nd	422920	1,25	1,17	1,12	1,04
	$^1S -$ $(^2P^\circ)$ nd	400010	1,28	1,18	1,12	1,02
NIII	$2s^22p$ $^2P^\circ - 2s^2$ (^1S) nd	382626	0,86	0,81	0,78	0,74
	$2s2p^2$ $^2S - 2s2p$ $(^3P^\circ)$ nd	338923	1,53	1,32	1,21	1,09
	$^2P -$ $(^3P^\circ)$ nd	307925	0,78	0,70	0,67	0,60
	$^2D -$ $(^3P^\circ)$ nd	348850	1,5	1,32	1,23	1,11
	$^2P -$ $(^1P^\circ)$ nd	367930	1,08	1,00	0,96	0,90

В качестве волновой функции верхнего состояния k с эффективным квантовым числом n^* и орбитальным l' берется кулоновская волновая функция [3] вида

$$R_k(r) = (-1)^{-l'+1} \sqrt{\frac{\Gamma(n^*+l'+1)}{\Gamma(n^*-l')2n^*}} \left(\frac{2z}{n^*}\right)^{3/2} \rho^{-l'-1} \times$$

$$\times \frac{1}{2\pi} \int e^{-\rho\eta} \left(\eta + \frac{1}{2}\right)^{n^*-l'-1} \left(\eta - \frac{1}{2}\right)^{-n^*-l'-1} d\eta, \qquad (3)$$

где $\rho = 2zr/n^*$, z — заряд остаточного иона.

Квадрат матричного элемента радиуса $(r_{ik})^2$ с волновыми функциями (2), (3) после интегрирования по η и r имеет вид

$$(r_{ik})^2 = n^{*2l'} 2^{2l'+2} z^{2l'+3} (\Gamma(n^*+l'+1)/\Gamma(n^*-l')) \times$$

$$\times \left[\sum_j C_j \frac{\partial^{\beta_j - l' + 2}}{\partial \xi_j^{\beta_j - l' + 2}} (\xi_j^2 n^{*2} - z^2)^{-l'-1} \left(\frac{\xi_j n^* - z}{\xi_j n^* + z}\right)^{n^*} \right]^2 . \qquad (4)$$

В конкретных расчетах удобно пользоваться плотностью сил осцилляторов φ, связанной с f соотношением:

$$\varphi = f_{ik} n^{*3} / z^2.$$

Для величины φ нетрудно получить довольно простые аналитические выражения. Для переходов из нижнего состояния $2\,p^N$ в s — состояние

$$\varphi = \frac{256}{9} zN \mid G \mid^2 \nu \left[\sum_j C_j \left(\frac{\xi_j n^* - z}{\xi_j n^* + z}\right)^{n^*} \times \right.$$

$$\left. \times \frac{(z-\xi_j)(z-2\xi_j)(z-3\xi_j) + (\xi_j^2 - z^2 n^{*-2})(3\xi_j - 2z)}{(\xi_j^2 - z^2 n^{*-2})^4} \right]^2 . \qquad (5)$$

Для переходов $2p^N - nd$

$$\varphi = \frac{512}{9} N |G|^2 \nu z^5 n^{*-5} \prod_{j=0}^{4} (n^* - 2 + j) \left[\sum_j C_j \times \right.$$
$$\left. \times \left(\frac{\xi_j n^* - z}{\xi_j n^* + z} \right)^{n^*} (z - 3\xi_j)(\xi_j^2 - z^2 n^{*-2})^{-4} \right]^2. \quad (6)$$

Для переходов $2s^N - np$:

$$\varphi = \frac{64}{3} z^2 N |G|^2 \nu (1 - n^{*-3}) \left[\sum_{j=1}^{3} C_j (z - 2\xi_j) \times \right.$$
$$\times (\xi_j^2 - z^2 n^{*-2})^{-3} \left(\frac{\xi_j n^* - z}{\xi_j n^* + z} \right)^{n^*} + 2 \sum_{j=4}^{5} C_j \left(\frac{\xi_j n^* - z}{\xi_j n^* + z} \right)^{n^*} \times$$
$$\left. \times \frac{2(z - 2\xi_j)(z - 3\xi_j)(z - 4\xi_j) + (\xi_j^2 - z^2 \cdot n^{*-2})(18\xi_j - 7z)}{(\xi_j^2 - z^2 \cdot n^{*-2})^5} \right]^2. \quad (7)$$

Рассчитанные по этим формулам плотности сил осцилляторов важнейших для переноса лучистой энергии спектральных серий атомов и ряда ионов азота и кислорода приведены в таблице (E_{I} — предел серии). Параметры C_j, ξ_j, β_j взяты из [4].

Прямое сравнение с экспериментом нельзя провести ввиду отсутствия соответствующих измерений. Однако возможна косвенная проверка по сечениям фотоионизации. Дело в том, что плотности сил осцилляторов переходов в непрерывный и в дискретный спектр непрерывно продолжают друг друга. Плотности сил осцилляторов, полученные продолжением в сторону дискретного спектра экспериментальных сечений фотоионизации атомов азота и кислорода (см. ссылки в [2]), хорошо согласуются с рассчитанными нами плотностями сил осцилляторов.

В реальных условиях сечения фотоионизации оказываются продолженными в длинноволновую сторону и при расчете оптических свойств сечения фотоионизации необходимо вычислять для частот, меньших пороговых. По формулам [2] этого сделать нельзя. Для расчета продленных сечений следует воспользоваться результатами данной работы. Сечение фотоионизации при этом вычисляется как

$$\sigma(\nu) = 4{,}03 \cdot 10^{-18}\, \varphi(\nu)\ \text{см}^2.$$

При этом n^* в формулах (5), (6), (7) связано с ν соотношением

$$\nu = E_{\mathrm{I}}(Ry) - z^2 \cdot n^{*-2}.$$

Полученные в работе аналитические выражения и результаты расчетов можно использовать и для оценки сил осцилляторов переходов на нижние возбужденные почти водородоподобные уровни (например, $3d$).

Авторы выражают благодарность Г. Э. Норману и И. Т. Якубову за полезные обсуждения.

Институт высоких температур
Академии наук СССР

Поступило в редакцию
20 XII 1968

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. М. Биберман, В. С. Воробьев, Г. Э. Норман, И. Т. Якубов. Космические исследования, 2, 441, 1964.
2. Г. А. Кобзев, В. М. Сергеев. Теплофизика высоких температур, 7, 566, 1969.
3. Г. Бете, Э. Солпитер. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. Гос. издат. физ.-мат. лит., 1960.
4. C. C. S. Roothaan, P. S. Kelly. Phys. Rev., 131, 1177, 1963.