Письма в ЖЭТФ, том 40, вып. 9, стр. 391 – 395 *10 ноября 1984 г.*

КВАЗИКЛАССИЧЕСКИЙ МЕТОД РАСЧЕТА КИНЕТИКИ РАДИАЦИОННЫХ ПЕРЕХОДОВ В АТОМЕ

А.Б.Кукушкин, В.С.Лисица

Развит аналитический метод расчета двумерных (по n и l) населенностей высоковозбужденных состояний атома с учетом всевозможных радиационных каскадов. Полученные решения выявляют законы подобия для населенностей и хорошо согласуются с квантовыми численными расчетами.

1. В последнее время в целом ряде практически важных задач возникает необходимость расчета радиационного каскада между высоковозбужденными (ридберговскими) состояниями (расчеты населенностей уровней атомов, возбуждаемых ступенчатыми лазерными переходами, светимостей линий многозарядных ионов в высокотемпературной разреженной плазме и др., см., например, [1]). Аналитические методы расчета радиационного каскада развиты только для одномерного (по главному квантовому числу n) случая [2,3], в котором предполагается статвесовое заселение по орбитальному моменту l. Для двумерных (по n и l) населенностей имеются квантовые численные расчеты в случае фоторекомбинационного источника заселения [4], которые с увеличением числа учитываемых в каскаде уровней становятся слишком громоздкими и, как видно из [4], менее точными. Использование же чисто классического аналитического описания радиационного каскада [5] оказывается здесь недостаточным (см. ниже).

В настоящей работе развит квазиклассический метод расчета населенностей $f(n, l)$ уровней атома с учетом всевозможных радиационных каскадов. Полученные аналитические решения позволяют установить универсальные параметры задачи и тем самым выявить законы подобия для населенностей, которые хорошо согласуются с численными расчетами [4]. Отметим, что полученные результаты справедливы для разреженной плазмы. В случае плотной плазмы, когда доминируют столкновительные процессы, одномерные (по n) населенности атомных уровней рассчитаны в [6].

2. Исходим из стандартного уравнения баланса населенностей [2-4]

$$\sum_{n'=n+1}^{\infty} \sum_{l'=l\pm1} f(n', l')\, W(n', l' \to nl) - A(n, l) f(n, l) + q(n, l) = 0, \qquad (1)$$

где $W(n'l' \to nl)$ вероятность излучательного перехода $n'l' \to nl$, q — внешний источник заселения, $A \equiv \sum_{n'=l+1}^{n-1} \sum_{l'=l\pm1} W(nl \to n'l')$ — полная скорость радиационного распада уровня nl.

При $n \gg 1$ суммирование по n в (1) можно заменить интегрированием, а при $l \gg 1$ — разложить $f(n', l')$ вблизи точки $l' = l$, что в итоге приводит (1) к уравнению, интегральному по n и дифференциальному по l. Это интегро-дифференциальное уравнение, в свою очередь, "распадается" на приводимые ниже одномерное интегральное уравнение (2) в области $x_m \equiv (l + 1/2)^3 / 6n^2 \lesssim 1$ (включая и $x_m \ll 1$) и двумерное дифференциальное уравнение (5) в области $x_m \gg 1$, причем на границе областей осуществляется однозначная сшивка этих решений.

3. При $x_m \lesssim 1$ и $l \gg 1$ для W справедливо приближение Крамерса ($l \ll n$). В этом случае переменная l (в силу малости скорости потери момента при излучении по сравнению со скоростью потери энергии) выступает в роли параметра в интегральном (по энергии) уравнении для $f(E, M)$ ($G_0(x) = x\,(K_{1/3}^2(x) + K_{2/3}^2(x))$, K_ν — функции Макдональда):

$$\int_0^{x_m} G_0(x)\, f\!\left(E\left(1 - \frac{x}{x_m}\right), M\right) dx - f(E, M) \int_0^{\infty} G_0(x)\, dx = Q \equiv \pi q(n, l) / \sqrt{3} A(n, l), \qquad (2)$$

где $E_{\text{ат. ед.}} = 1/2n^2 > 0$, $M = \hbar\,(l + 1/2)$, $A_{\text{ат. ед.}} = 4[\sqrt{3}\,\pi n^3 c^3 (l + 1/2)^2]^{-1}$. При малых x_m интегральный член в (2), описывающий каскадное заселение, не существен, и населенность определяется только прямым заселением, $f = q / A$. Решая уравнение (2) методом Лапласа ($\bar{f}(s) = \bar{Q}(s) / sG_2(s)$, s — сопряженная x_m лапласовская переменная) и аппроксимируя

$$G_2(x) \equiv \int_x^{\infty} G_0(x')\, dx' = x K_{1/3}(x) K_{2/3}(x) \approx \alpha e^{-2x}, \quad \alpha = \frac{\pi^2}{6} \div \frac{\pi}{\sqrt{3}} \approx 1,7, \qquad (3)$$

с точностью не хуже 10%, получаем

$$f_{nl} = q_{nl}/A_{nl} + \int\limits_{n+1}^{\infty} q(n', l) / |\dot{n}(n', l)| dn', \quad \dot{n}_{\text{ат. ед.}} = -[c^3 (l+{}^1/2)^5]^{-1}, \qquad (4)$$

где функция $\dot{n}$ связана со скоростью потери энергии на излучение классической частицей. Из (4) видно, что в случае применимости аппроксимации (3) (см. ниже п. 6) каскадное заселение оказывается чисто классическим.

4. При $x_m \gg 1$ уравнение (1), после разложения $f(n', l')$ под интегралом вблизи точки nl, переходит в соответствующее чисто классическое кинетическое уравнение [5]:

$$\dot{E}\, \partial f / \partial E + \dot{M}\, \partial f / \partial M - \dot{M} f / M = q\,, \qquad (5)$$

где $\dot{E}$, $\dot{M}$ – скорости потери энергии и момента на излучение. При этом для получения (5) оказывается необходимым удержать наряду с классическим пределом функции W также и первую квантовую поправку к нему (ср. [7]), поскольку вклады от главных членов компенсируют друг друга (см., например, уравнение (2) при $x_m \gg 1$). Рассматриваемый классический случай отвечает непрерывному течению электронов по атомным уровням, в котором роль фазовых траекторий играют характеристики уравнения (5), задаваемые соотношением

$$\tau(E, M) \equiv M^{-3} (1 - 2EM^2/mZ^2e^4) \equiv M^{-3} \epsilon^2 = \text{const}\,, \qquad (6)$$

где ϵ – эксцентриситет орбиты. Решение уравнения (5) методом характеристик позволяет обобщить классическое каскадное заселение на некрамерсовскую область ($l \sim n$) и построить квазиклассическое решение уравнения (1) при произвольном l/n:

$$f_{nl} = q_{nl}/A_{nl} + M \int\limits_{n+1}^{\infty} q(n', M(\tau, n')) / (M(\tau, n') |\dot{n}(n', M(\tau, n'))|) dn', \qquad (7)$$

где $M(\tau, n)$ находится из (6).

5. Использование результатов п.п. 3, 4 для случая фоторекомбинационного заселения из континуума с максвелловской функцией распределения свободных электронов приводит окончательно к результату для населенности b_{nl} уровня nl (в единицах термодинамически равновесного распределения):

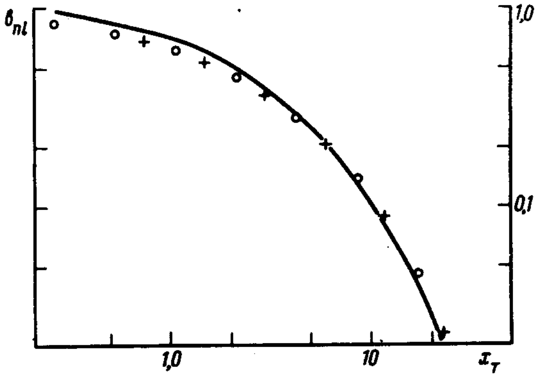
$$b_{nl} = \frac{2}{2 + x_T \epsilon^2} e^{-E/T} + \frac{1}{\alpha} \int\limits_{x_m}^{\infty} e^{-yx_T} y (K^2_{1/3}(y) - K^2_{2/3}(y))\, dy,$$
$$x_T = \frac{3}{(T M^3)_{\text{ат.ед.}}} \qquad (8)$$

(обозначения – в (2), (3), (6)). Приближенный характер формулы (8) ($\lesssim 10\%$) при $n, l \gg 1$ связан только с аппроксимацией (3) в функции Грина уравнения (2); в самом источнике, имеющем в данном случае ту же природу, что и сам радиационный каскад, аппроксимация (3) не использовалась (последним и обусловлено наличие второго члена (8)).

Из (8) вытекают следующие законы подобия для населенности. При $x_m \ll 1$, $x_T \gg 1$ f_{nl} зависит только от двух переменных, x_m и x_T (лишь в этой области существен второй член в (8)). Когда же x_m или $1/x_T$ достигает значения ~ 1, остается только первый член, и f_{nl} зависит от одного параметра, $x_T \epsilon^2$.

Сравнение распределения (8) с результатами численных расчетов [4] показывает, что оно применимо также и для малых $l \sim 1$. Справедливость соотношения подобия по переменной x_T подтверждается при перестройке в зависимости от x_T данных [4] с близкими значениями

x_m и ϵ (рис. 1). Отличие получаемой кривой от рассчитанной по (8) не превышает 20%. В таблице проведено сравнение населенностей из [4] и (8) для $n = 6$, $l = 1 \div 5$ (максимальное отличие – 30% для $l = 1$).



Универсальная зависимость населенностей уровней b_{nl} от параметра x_T, следующая из (8) и подтверждаемая численными данными [4] для состояний $n = 10$, $l = 3$ (точки) и $n = 6$, $l = 2$ (крестики), ($x_m = 0,072$)

Населенности уровней $n = 6, l = 1 - 5$ для $T = 10^4$ °K, рассчитанные по (8) и [4]

b_{nl} \ l	1	2	3	4	5
(8)	0,060	0,20	0,38	0,53	0,62
[4]	0,0842	0,214	0,372	0,524	0,599

Распределение (8) заметно отличается от статвесового ($b_{nl} = \phi(n)$), особенно при малых температурах ($x_T >> 1$). Укажем, что интегральная по l населенность f_n, рассчитанная по (8), зависит от параметра Tn^3, а не Tn^2, как в одномерной задаче, см. [2].

6. Описанный квазиклассический метод расчета населенностей дает алгоритм суммирования бесконечного числа членов в квантовой каскадной матрице и в общем квантовом случае. Этот алгоритм основан на классичности каскадного заселения многоквантовыми (многоступенчатыми) переходами. Ответ на вопрос о том, с какого числа ступенчатости перехода N применимо квазиклассическое описание, зависит от конкретного вида источника и конкретных значений n и l. Точность конечного результата определяется величиной его относительного изменения при выделении из классического каскада еще одного члена, соответствующего заселению $(N + 1)$ – ступенчатыми переходами. Так выделение одноквантовых переходов дает:

$$f = q/A + \langle q \rangle / A + M \int \frac{\langle q \rangle \, dn'}{|\dot{n}| M(\tau, n')}, \qquad (9)$$

$$\langle q \rangle = \sum_{n' = n+1}^{\infty} \sum_{l' = l \pm 1} q(n', l') \frac{W(n' l' \to nl)}{A(n', l')}.$$

Использование (9) наиболее существенно для уровней, находящихся вблизи селективного источника ($q \propto \delta(n - n_0)\, \delta(l - l_0)$). Для фоторекомбинационного источника результаты (8) и рассчитанный по (9) отличаются менее, чем на 10%.

Авторы благодарны И.Л.Бейгману и И.И.Собельману за ценные обсуждения и замечания.

Литература

1. *Смирнов Б.М.* УФН, 1980, **131**, 577; *Бейгман И.Л., Буреева Л.А., Зон Б.А., Крайнов В.П.* Изв. АН СССР, сер. физическая, 1984, **48**, 651.
2. *Seaton M.J.* Mon. Not. Roy. Astron. Soc., 1959, **119**, 90; *Бейгман И.Л., Гайсинский И.М.* Препринт ФИАН, 1979, № 181.
3. *Вайнштейн Л.А., Собельман И.И., Юков Е.А.* Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. М.: Наука, 1979.
4. *Pengelly R.M.* Mon. Not. Roy. Astron. Soc., 1964, **127**, 145.
5. *Беляев С.Т., Будкер Г.И.* Кн. Физика плазмы и проблема УТР, 1958, **3**, 46.
6. *Питаевский Л.П.* ЖЭТФ, 1962, **42**, 1326; *Гуревич А.В., Питаевский Л.П.* ЖЭТФ, 1964, **46**, 1281.
7. *Коган В.И., Кукушкин А.Б.* ЖЭТФ, 1984, 87, 1164.

Институт атомной энергии им. И.В.Курчатова

Научно-производственное объединение "Энергия"

Поступила в редакцию 4 октября 1984 г.