

Эквивалентность методов кинетического уравнения и флукутуирующей частоты в теории уширения спектральных линий

Л. А. Буреева, М. Б. Кадомцев⁺, М. Г. Левашова⁺, В. С. Лисица¹⁾⁺, А. Калисти^{2)*}, Б. Талин^{2)*}, Ф. Розми^{2)∇}

Учреждение Российской академии наук Институт спектроскопии РАН, 142190 Троицк, Московская обл., Россия

⁺ ИЯС РНЦ “Курчатовский институт”, 123182 Москва, Россия

^{*} PIIM, UMR 6633 Université de Provence / CNRS, Centre de St. Jérôme, F-13397 Marseille, France

[∇] Université Pierre et Marie Curie, LULI, Paris, France

Поступила в редакцию 8 октября 2009 г.

Методом кинетического уравнения (МКУ) получено новое выражение для штарковских контуров спектральных линий в плазме с учетом эффектов динамики плазменного микрополя. Полученный результат выражает динамический контур линии в виде простых функционалов от статического контура. Исследована связь нового решения с известным методом флукутуирующей частоты. Показано, что последний является дискретным аналогом МКУ и переходит в него при переходе к непрерывному распределению флукутуаций. Получающиеся при этом простые формулы (4), (5), (21) для динамических контуров линий открывают возможности сверхбыстрых расчетов контуров спектральных линий с учетом эффектов динамики плазменного микрополя.

PACS: 32.30.-г, 32.60.+i, 32.70.Jz

1. Метод флукутуирующей частоты (МФЧ) в теории уширения линий в плазме является в настоящее время наиболее быстрым численным кодом расчета эффектов ионной динамики, основанным на разбиении контура линии в статическом поле на отдельные спектральные участки, между которыми происходит обмен интенсивностями вследствие теплового движения ионов (флукутуаций частоты штарковского расщепления) [1]. Эффективность МФЧ проверена многократным тестированием путем сравнения его результатов с расчетами методом молекулярной динамики (ММД) для широкой области плазменных параметров [2, 3].

Метод кинетического уравнения (МКУ) широко использовался для расчетов контуров линий при доплеровском механизме уширения, в частности, для описания так называемого эффекта сужения Дикке при увеличении частоты столкновений излучающих атомов с окружающими частицами, см. [4]. С более общей точки зрения переход от гауссова к лоренцевскому контуру в эффекте Дикке является переходом от однородного к неоднородному уширению в доплеровском уширении. К этому же классу явлений принадлежит, очевидно, и переход от статического (неоднородного) к ударному (однородному) контурам линий при штарковском механизме уширения.

В этой связи представляется уместным применить МКУ к описанию штарковских контуров линий. При этом возникает вопрос о соответствии методов МФЧ и МКУ. Целью настоящей работы является доказательство идентичности обоих методов, при которых МФЧ оказывается дискретным аналогом МКУ. Более того, использование МКУ позволяет, как показано ниже, получить простые аналитические формулы для штарковских контуров линий с учетом динамических эффектов. Это резко уменьшает время расчетов контуров с учетом динамики плазменного микрополя по сравнению с МФЧ.

2. Основой МКУ служит кинетическое уравнение для корреляционной функции дипольного момента атома:

$$\Phi(\tau) = \left\langle \exp \left(iC \int_0^\tau F(t) dt \right) \right\rangle, \quad (1)$$

где $\langle \rangle$ обозначают усреднение по стохастическим флукутуациям уширяющего электрического поля F (C – постоянная линейного эффекта Штарка). Кинетическое уравнение для корреляционной функции имеет вид

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \tau} + iCF\Phi = \left(\frac{\partial \Phi}{\partial \tau} \right)_{\text{coll}}, \quad (2)$$

правая часть этого кинетического уравнения представляет собой “интеграл столкновений”,

¹⁾ e-mail: lisitsa@nfi.kiae.ru

²⁾ A. Calisti, B. Talin, F. Rosmej.

ответственный за изменения (флуктуации) электрического поля F вследствие теплового движения ионов. Этот интеграл выбирается, как и в эффекте доплеровского уширения, в виде так называемого интеграла сильных столкновений [4]:

$$\left(\frac{\partial \Phi}{\partial \tau}\right)_{\text{coll}} = -\nu \Phi + \nu W(F) \int \Phi(F, \tau) dF. \quad (3)$$

Здесь частота ν является частотой флуктуаций (скачков) электрического поля и полагается ниже равной той же величине, что и в МФЧ: $\nu = N^{1/3}v$, N , v – плотность и тепловая скорость уширяющих частиц). Функция распределения статических электрических полей $W(F)$ определяет вероятность данной величины штарковского сдвига энергии уровня. Ниже она принимается равной распределению Хольцмарка, см. [4].

Следует отметить, что термин “столкновение” в (3) носит условный характер: он означает полное изменение величины поля вследствие теплового движения возмущающих частиц, после чего атомная система “забывает” первоначальное значение поля. При этом сами возмущающие частицы движутся по прямолинейным траекториям и не испытывают каких-либо столкновений друг с другом (приближение Хольцмарка).

Контур спектральной линии определяется фурье-компонентой корреляционной функции (1), которая с учетом соотношений (2), (3) приобретает вид

$$I(\omega) = \frac{1}{\pi} \text{Re} \left\{ \left[\int \frac{W(\omega') d\omega'}{\nu + i(\omega - \omega')} \right] \times \left[1 - \nu \int \frac{W(\omega') d\omega'}{\nu + i(\omega - \omega')} \right]^{-1} \right\}. \quad (4)$$

Это уравнение является основой для расчетов по методу МКУ. Для проведения численных расчетов удобно выделить действительные и мнимые части в уравнении (4) в явном виде, что дает окончательное выражение для расчетов:

$$J(\omega) = \frac{\nu J_0 J_2 - J_1^2}{\pi J_2^2 + \nu J_1^2}; \quad (5)$$

$$J_k(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{W(\omega') (\omega - \omega')^k}{\nu^2 + (\omega - \omega')^2} d\omega'; \quad k = 0, 1, 2.$$

Формула (5) является решением задачи о влиянии динамики возмущающего микрополя на контуры спектральных линий. В ней эффекты ионной (или электронной) динамики выражены в виде функционалов

от статического контура с единственным параметром ν , описывающим динамические эффекты. Укажем, что соотношение (5) применимо не только к уширению вследствие линейного эффекта Штарка (что использовалось при выводе выше), но и к любому типу штарковского уширения, характеризуемого статическим контуром (см. также ниже).

3. Исследуем взаимосвязь нового МКУ с известным ранее МФЧ. Для этого запишем формулу для распределения интенсивности в линии в виде фурье-преобразования корреляционной функции дипольных моментов атома [5]:

$$I(\omega) = \text{Im} \ll d^+ |G(\omega)| d \rho_0 \gg, \quad (6)$$

где ρ_0 – матрица плотности начального состояния излучающего атома, d – дипольный момент излучающего атома, $G(z)$ – функция отклика атома, определяющаяся односторонним фурье-преобразованием оператора эволюции атома $U(t)$:

$$G(z) = i \int_0^{+\infty} U(t, 0) e^{-izt} dt = (z - L)^{-1}. \quad (7)$$

Оператор L является оператором Лиувилля для эволюции излучающей системы. Этот оператор определяется стохастическими дифференциальными уравнениями, учитывающими динамику движения многочастичного плазменного микрополя, создаваемого заряженными частицами.

В МФЧ эволюция спектра под воздействием флуктуаций электрического поля рассматривается как эволюция двухуровневых систем, на которые произвольно разбивается статический спектр атома [1]. Эволюция таких систем состоит в перескоках между различными участками спектра (двухуровневыми системами) с частотой ν , описывающей временную эволюцию плазменного микрополя. Эти перескоки имеют характер переходов столкновительного типа, описывающихся марковским процессом.

Если рассматриваемый марковский процесс стационарен, то можно ввести в оператор эволюции стационарную матрицу переходов \underline{W} ³⁾, определяющую вероятность переходов $\underline{P}(t)$ между двумя состояниями x_1 и x_2 рассматриваемой системы, согласно соотношению

$$\underline{P}(t) e^{\underline{W}t}. \quad (8)$$

Выделяя далее из матрицы \underline{W} диагональную часть $\underline{\Gamma}$, определяющую время жизни состояний, и недиа-

³⁾Здесь и далее подчеркивание обозначает матрицу.

гональную часть \underline{W} , определяющую вероятности переходов в виде

$$W_{x_2, x_1} = -\Gamma_{x_1} \delta_{x_2, x_1} + W_{x_2, x_1}, \quad (9)$$

можно записать уравнение для эволюции вероятности $\underline{P}(t)$ в следующей форме:

$$\begin{aligned} \partial_{t_2} P(x_2 t_2 | x_1 0) = \\ = -\Gamma_{x_2} P(x_2 t_2 | x_1 0) + \sum_{x'} W_{x_2, x'} P(x' t_2 | x_1 0). \end{aligned} \quad (10)$$

Для вероятности распадов имеем

$$\Gamma_{x_1} = \sum_{x_2} W_{x_2, x_1}. \quad (11)$$

Умножая далее уравнение (10) на вероятность одночастичного состояния $\Phi_1(x_1, 0)$ и суммируя по x_1 , получим связь временной эволюции Φ_1 с вероятностью переходов W_{x_1, x_2} :

$$\partial_t \Phi_1(x_2, t) = -\Gamma_{x_2} \Phi_1(x_2, t) + \sum_{x'} W_{x_2, x'} \Phi_1(x', t). \quad (12)$$

Стационарное решение этого уравнения $P_1(x)$ имеет вид

$$\Gamma_x P_1(x) = \sum_{x'} W_{x, x'} P_1(x'). \quad (13)$$

Используя введенные матричные обозначения, можно найти одностороннее фурье-преобразование функции $\underline{P}(t)$, имеющее вид

$$\underline{P}(z) = -i(z + i\underline{W} - i\underline{\Gamma})^{-1}. \quad (14)$$

Используя описанный метод решения стохастических уравнений, можно записать выражение для фурье-преобразования оператора эволюции (так называемый пропагатор) в виде

$$\underline{\mathcal{G}}(z) = (z + i\underline{W} - i\underline{\Gamma} - \underline{L})^{-1}. \quad (15)$$

Предположим далее, что скорость переходов из x_1 в x_2 не зависит от x_1 , что дает

$$W_{x_2, x_1} = \Gamma P_1(x_2), \quad (16)$$

где Γ – постоянная скорость флуктуаций.

Такое приближение соответствует приближению интеграла сильных столкновений в доплеровском уширении, использованном также выше при расчетах эффектов ионной динамики в штарковском уширении. Это же приближение используется в МФЧ, где изменение флуктуирующего электрического поля аппроксимируется марковским процессом, при котором

система в конечном состоянии полностью теряет память о ее значении в начальном состоянии.

В рамках указанных приближений выражение для распределения интенсивности в спектральной линии приобретает вид

$$I(\omega) = \text{Re} \frac{1}{\pi} \sum_{kj} i \langle D_k | (\omega - \underline{L} - i\underline{\Gamma} + i\underline{W})^{-1} | D_j \rangle p_j. \quad (17)$$

Здесь \underline{L} – оператор эволюции атомного состояния в лиувилевском представлении, D_i – дипольный момент атомного перехода, $p_i = a_i/r$ – относительная вероятность излучения на соответствующем переходе в двухуровневой системе, на которые разбит статический спектр излучающего атома, определяемая отношением интенсивности излучения на данном переходе к полной интенсивности излучения $r = \sum_k a_k$,

$\Gamma_{kj} = \Gamma \delta_{kj} = v N^{1/3} \delta_{kj}$ – скорость релаксации рассматриваемого перехода, определяемая частотой тепловых флуктуаций электрического поля в системе частиц с тепловой скоростью v и плотностью N , \underline{W} – матрица переходов (перескоков) между различными двухуровневыми системами с матричными элементами $W_{kj} = \Gamma p_k$.

Уравнение (17) в МФЧ представляет собой конечную дискретную матрицу, размерность которой зависит от разбиения системы на двухуровневые переходы. Ее обращение зависит от количества таких разбиений, определяющих точность метода МФЧ. Ясно, что с увеличением точности возрастает время, необходимое для расчетов. Поэтому ниже предлагается новая процедура, позволяющая избежать указанной трудности. Для этого введем оператор эволюции (пропагатор) в статическом поле

$$\underline{\mathcal{G}}^s(z) = (z - \underline{L} - i\underline{\Gamma})^{-1}, \quad (18)$$

который имеет только диагональные матричные элементы. С помощью этого оператора можно записать уравнения для полного пропагатора (типа уравнения Дайсона):

$$\underline{\mathcal{G}}(z) = \underline{\mathcal{G}}^s(z) - i \underline{\mathcal{G}}^s(z) \cdot \underline{W} \cdot \underline{\mathcal{G}}(z). \quad (19)$$

Используя далее ранее введенные обозначения в уравнении (17), получаем выражение для распределения интенсивности в линии в следующем виде:

$$I(\omega) = \frac{r^2}{\pi} \text{Re} \frac{\sum_k \frac{a_k/r^2}{i(\omega - \omega_k) + \Gamma}}{1 - \Gamma \sum_k \frac{a_k/r^2}{i(\omega - \omega_k) + \Gamma}}. \quad (20)$$

Это уравнение все еще является дискретным, отвечающим МФЧ. Его можно, однако, легко преобразовать для случая, когда изменение $x(t)$ становится непрерывным. При этом дискретные вероятности перехода $P(x_2 t_2 | x_1 t_1)$ и $\Phi(x, t)$ заменяются плотностями вероятностей $p(x_2 t_2 | x_1 t_1)$ и $\phi(x, t)$, а суммы в уравнении (20) заменяются интегралами. Вероятности излучения на данной частоте p_i заменяются на величины $W(\omega)d\omega$, выражающие эти вероятности через функцию распределения вероятности излучения данной частоты в статическом поле, характеризуемом функцией распределения полей W . Осуществляя переход от дискретного к непрерывному распределению в уравнении МФЧ (20) приходим к результату:

$$I(\omega) = \frac{r^2}{\pi} \operatorname{Re} \frac{\int \frac{W(\omega') d\omega'}{\Gamma + i(\omega - \omega')}}{1 - \Gamma \int \frac{W(\omega') d\omega'}{\Gamma + i(\omega - \omega')}}}, \quad (21)$$

где $W(\omega)d\omega$ – нормированное распределение интенсивности в статическом поле.

Формула (21) в точности совпадает с формулой (4), полученной выше методом кинетического уравнения (с очевидной заменой Γ на ν). Тем самым доказывается эквивалентность методов МФЧ и МКУ.

4. В заключение отметим еще раз указанную выше аналогию между доплеровским и штарков-

ским механизмами уширения с более общей точки зрения перехода между неоднородным и однородными механизмами, позволяющую применить МКУ к штарковским механизмам уширения. Получающиеся при этом простые формулы (4), (5), (21) для динамических контуров линий открывают возможности сверхбыстрых расчетов контуров спектральных линий с учетом эффектов динамики плазменного микрополя.

Работа проведена при поддержке гранта Российского фонда фундаментальных исследований # 08-02-00294а и в рамках реализации ФЦП “Научные и педагогические кадры инновационной России” на 2009–2012 г.

1. B. Talin, A. Calisti, L. Godbert et al., *Phys. Rev. A* **51**, 1918 (1995).
2. B. Talin, E. Dufour, A. Calisti et al., *J. Phys. A : Math. Gen.* **36**, 6049 (2003).
3. E. Stambulchik, D. V. Fisher, Y. Maron, et al., *High Energy Density Phys.* **3**, 272 (2007).
4. Л. А. Вайнштейн, И. И. Собельман, Е. А. Юков, *Возбуждение атомов и уширение спектральных линий*, М.: Наука, 1979.
5. H. Griem, *Principles of Plasma Spectroscopy*, Cambridge University Press, Cambridge, 1997.