

СЕЧЕНИЕ ФОТОПОГЛОЩЕНИЯ НА АТОМЕ ТОМАСА – ФЕРМИ

С. Ф. Гаранин, Е. М. Палагина*

*Российский федеральный ядерный центр,
Всероссийский научно-исследовательский институт экспериментальной физики
607190, Саров, Нижегородская обл., Россия*

Поступила в редакцию 8 октября 2003 г.

Найдены сечение фотопоглощения $\sigma(\omega)$ и распределение сил осцилляторов $df/d\omega$ (величины, связанные соотношением $\sigma = (2\pi^2 e^2/mc)(df/d\omega)$) для атома с большим Z на основе квазиклассического подхода. Для низких частот эти величины найдены с помощью кинетических уравнений Власова, которые численно решаются методом частиц. С помощью квазиклассических формул для сечения фотопоглощения на электронных оболочках в кулоновском потенциале получена асимптотика распределения сил осцилляторов при высоких частотах. На основе найденных асимптотик предложена интерполяционная формула для распределения сил осцилляторов во всем томас-фермиевском диапазоне частот $27 \text{ эВ} \ll \hbar\omega \ll 27Z^2 \text{ эВ}$. С использованием этой формулы вычислена логарифмическая средняя энергия возбуждения, фигурирующая в задачах об ионизационных потерях заряженных частиц. На основании распределения сил осцилляторов в нейтральном атоме определяются излучательные свойства плотного вещества.

PACS: 31.15.Bs, 32.70.Cs, 32.80.Fb

1. ВВЕДЕНИЕ

Расчеты сечения фотопоглощения как функции частоты, $\sigma(\omega)$, или распределения сил осцилляторов $df/d\omega$ (величин, связанных соотношением

$$\sigma = \frac{2\pi^2 e^2}{mc} \frac{df}{d\omega} \quad (1)$$

[1]) в многоэлектронных атомах весьма сложны и зачастую проводятся в статическом приближении, т. е. предполагается, что потенциал, в котором движется каждый из электронов, является постоянным, а экранировкой поля из-за динамической поляризации других электронов пренебрегается (см., например, [2]). При этом для частот ω , меньших или порядка характерной частоты обращения большинства электронов в тяжелых атомах Zme^4/\hbar^3 [3] (Z — атомный номер), ошибка составляет величину порядка единицы, хотя в задаче имеется малый параметр Z^{-1} , используемый для приближения Томаса–Ферми или Хартри–Фока.

Учет динамической поляризации для расчета сечения фотоэффекта в статистических моделях атома проводился в работе [4], при этом поляризуемость учитывалась с помощью локальной элек-

тронной плотности в атоме, и в работе [5] с помощью гидродинамического подхода Блоха к рассмотрению колебаний пространственного заряда в томас-фермиевском атоме¹). Однако оба этих подхода являются модельными и не имеют последовательного теоретического обоснования, кроме того что они дают разумное поведение $\sigma(\omega)$ и удовлетворяют правилу сумм. В частности, для применимости гидродинамического подхода требовалось бы, чтобы характерные расстояния, которые проходят электроны во время колебаний пространственного заряда (эффективный пробег), были малы по сравнению с характерными расстояниями (расстояние от ядра). Однако область частот, в которую дают вклад электроны, находящиеся на некотором расстоянии r от ядра, определяется соотношением $\omega \sim v/r$ (v — скорость электронов), и, таким образом, их путь при движении с частотой ω порядка характерного расстояния. Поэтому, хотя для предельных случаев низких и высоких по сравнению с Zme^4/\hbar^3 частот эти подходы определяют правильные для томас-фермиевского атома степенные зависимости $\sigma(\omega = 0) = \text{const}$, $\sigma(\omega \rightarrow \infty) \sim 1/\omega^2$, коэф-

¹) Недавно вышел обзор поляризационных эффектов в атомных переходах [6].

*E-mail: sfgar@vniief.ru

коэффициенты при этих зависимостях, вообще говоря, неправильны.

В настоящей работе мы, используя последовательный, основанный на параметре малости Z^{-1} кинетический подход, получим правильные асимптотики в этих предельных случаях.

Следует отметить, что в настоящее время для многих элементов имеются довольно точные экспериментальные и теоретические данные по сечениям фотопоглощения с учетом конкретных деталей электронной структуры этих элементов. Проведенный нами анализ позволяет универсальным образом описывать сечения для любых тяжелых элементов, при этом в конкретных случаях уменьшается точность описания сечений. Полученные результаты могут помочь в оценках сечений в тех диапазонах частот (особенно в диапазоне низких частот), где важную роль играют эффекты поляризации, поскольку их учет в прямых квантовомеханических расчетах довольно затруднителен.

Знание распределения сил осцилляторов для холодного атома позволяет не только находить его сечение фотопоглощения, но также определять излучательные свойства плотного вещества. Это показано в разд. 6.

Точность развиваемого здесь подхода, основанного на модели Томаса–Ферми, можно оценить следующим образом. Индивидуальные свойства того или иного вещества и, соответственно, конкретные переходы могут вносить отклонения от статистического томас-фермиевского описания сечения относительного порядка $1/n$, где n — характерное квантовое число, которое предполагается большим для возможности квазиклассического описания движения электронов и процессов фотопоглощения. При низких частотах, $1 < \omega < Z$ (в атомных единицах), n можно оценить как $n \sim \omega^{1/3}$ и, таким образом, точность описания оценивается как $\omega^{-1/3}$. При высоких частотах $Z^{1.4} < \omega < Z^2$ имеем $n \sim Z/\omega^{1/2}$ (см. разд. 4) и точность описания оценивается²⁾ как $\omega^{1/2}/Z$. Для интегральных по спектру величин, таких как логарифмическая средняя энергия возбуждения (разд. 5) или интенсивность излучения плотного вещества (разд. 6), конкретные детали электронной структуры элементов будут усредняться, и можно ожидать обычной квазиклассической точности описания порядка n^{-2} , которая соответству-

ет квантовой и обменной поправкам относительной величины $Z^{-2/3}$ [7, 8]. Хотя асимптотики сечения фотопоглощения в предельных случаях низких и высоких частот нельзя использовать для определения сечений фотопоглощения конкретных элементов в этих предельных случаях, они необходимы для построения сечения фотопоглощения во всем томас-фермиевском диапазоне $1 < \omega < Z^2$. Кроме того, низкочастотная и высокочастотная асимптотики могут быть полезны для оценок сечений в интервалах, соответственно, $1 \ll \omega \ll Z$ и $Z \ll \omega \ll Z^2$.

2. УРАВНЕНИЯ ДЛЯ ФУНКЦИИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ АТОМНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ В ПОЛЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЫ

Будем использовать далее атомные единицы, $e = \hbar = m = 1$.

Поскольку движение электронов в тяжелом атоме квазиклассично (с точностью $Z^{-2/3}$), их можно описывать классической функцией распределения f и применять для их описания уравнения Власова:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \nabla \varphi \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} &= 0, \\ \Delta \varphi &= -4\pi\rho, \\ \rho &= - \int f d^3p, \end{aligned} \quad (2)$$

где φ — потенциал электрического поля.

Электрическое поле падающей электромагнитной волны считаем малым по сравнению с атомными полями. Линеаризуем уравнения (2) относительно поля падающей волны \mathbf{E} и воспользуемся равновесной функцией распределения электронов, которая для нейтрального атома равна

$$f_0 = \frac{\eta(-\varepsilon)}{4\pi^3}, \quad (3)$$

где

$$\varepsilon = \frac{p^2}{2} - \varphi_0(r)$$

— полная энергия электрона в томас-фермиевском потенциале $\varphi_0(r)$, $\eta(-\varepsilon)$ — ступенчатая функция Хевисайда, учтено, что в каждой ячейке фазового пространства может находиться два электрона. В результате получаем

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} + \mathbf{v} \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{r}} + \nabla \varphi_0 \cdot \frac{\partial f_1}{\partial \mathbf{p}} = -\nabla \varphi_1 \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}}, \quad (4)$$

$$\Delta \varphi_1 = -4\pi\rho_1, \quad (5)$$

²⁾ Мы не будем здесь приводить более сложные оценки точности для промежуточных частот $Z < \omega < Z^{1.4}$. Укажем только, что наибольшая точность получается при частотах порядка $\omega \sim Z^{4/3}$ и составляет величину порядка $Z^{-5/9}$.

$$\rho_1 = - \int f_1 d^3 p, \quad (6)$$

где индекс «0» относится к равновесным величинам, «1» — к возмущенным. Поскольку длина волны падающего излучения велика по сравнению с размерами атома, на бесконечности считаем \mathbf{E} постоянным.

Для реализации численного расчета кинетического уравнения (4) методом частиц можно использовать следующую его интерпретацию: левая часть (4) описывает движение частиц в томас-фермиевском потенциале, а правая соответствует рождению частиц — электронов (если $f_1 > 0$) и дырок (если $f_1 < 0$). Нужно при этом иметь в виду, что, хотя дырки дают положительный вклад в плотность заряда (6), их движение согласно (4) происходит в таком же потенциале, как и у электронов.

Подставляя равновесную функцию распределения (3) в член, описывающий рождение частиц в (4), получаем

$$-\nabla\varphi_1 \cdot \frac{\partial f_0}{\partial \mathbf{p}} = \delta(\varepsilon) \frac{\mathbf{p} \cdot \nabla\varphi_1}{4\pi^3}, \quad (7)$$

что означает, что электроны и дырки рождаются с нулевой энергией, с ламбертовским распределением по углам вылета, дырки вылетают вдоль поля, а электроны — против. Скорость рождения электронов (и дырок) в единице объема при этом равна

$$\frac{dn}{dt} = \frac{|\nabla\varphi_1|}{4\pi^2} p_F^2 = \frac{|\nabla\varphi_1|}{2\pi^2} \varphi_0, \quad (8)$$

где p_F — граничный импульс распределения Ферми.

Поскольку потенциал φ_1 в нашей задаче может зависеть только от двух векторов, \mathbf{E} и \mathbf{r} , а вектор \mathbf{E} должен входить в выражение для φ_1 линейно, φ_1 должен иметь вид

$$\varphi_1 = -(\mathbf{E} \cdot \mathbf{r})\psi(r).$$

При этом $\psi(r \rightarrow \infty) = 1$, поскольку электрическое поле на бесконечности равно \mathbf{E} . В силу уравнения Пуассона (5) плотность заряда ρ_1 также имеет вид

$$\rho_1 = (\mathbf{E} \cdot \mathbf{r})R(r).$$

Тогда, используя (5), можно получить соотношение между суммарным дипольным моментом частиц P внутри некоторого радиуса r и величиной ψ' :

$$P = \frac{E}{3} \int_0^r 4\pi R r^2 dr = \frac{E}{3} r^4 \psi'. \quad (9)$$

При этом полный дипольный момент, наведенный на атоме, будет определять поведение $\psi(r)$ на бесконечности:

$$\psi(r \rightarrow \infty) = 1 - \frac{P}{Er^3}.$$

Интересующее нас сечение фотопоглощения можно найти как отношение поглощенной в атоме энергии q к потоку энергии, прошедшему через единицу площади:

$$\sigma = \frac{q}{\int \frac{cE^2}{4\pi} dt}. \quad (10)$$

Здесь зависимость электрического поля от времени для заданной частоты имеет синусоидальный колебательный характер, а интеграл в знаменателе и числитель следует, вообще говоря, рассматривать за сколь угодно большой промежуток времени, включающий бесконечное число периодов колебаний.

Найдем связь между дипольным моментом и энергией q , поглощенной атомом. Энергия dq , поглощенная атомом за малый промежуток времени dt , состоит из двух частей [9]: работы, совершенной над зарядами,

$$dq_J \equiv dt \int -\nabla\varphi_1 \cdot \mathbf{j} dV,$$

где \mathbf{j} — плотность тока, и изменения электростатической энергии

$$dq_C = \frac{1}{4\pi} \int \mathbf{E}' \cdot d\mathbf{E}' dV, \quad (11)$$

где $\mathbf{E}' = -\nabla\varphi_1 - \mathbf{E}$ — поле наведенных зарядов, $d\mathbf{E}'$ — изменение этого поля за время dt .

Преобразуем dq_J , перенеся знак ∇ на \mathbf{j} :

$$dq_J = dt \int \varphi_1 \operatorname{div} \mathbf{j} dV,$$

после чего, используя уравнение непрерывности, а затем Пуассона, получим

$$dq_J \equiv - \int \frac{\varphi_1}{4\pi} \operatorname{div} d\mathbf{E}' dV. \quad (12)$$

Складывая (11) и (12), получаем энергию, поглощенную атомом за время dt :

$$dq = \frac{1}{4\pi} \int \mathbf{E}' \cdot d\mathbf{E}' dV - \frac{1}{4\pi} \int \varphi_1 \operatorname{div} d\mathbf{E}' dV.$$

Представляя поле \mathbf{E} в виде $\mathbf{E} = \nabla(Ez)$ (\mathbf{E} будем считать направленным вдоль оси z) и используя тождество $\varphi_1 \equiv \varphi_1 + Ez - Ez$, перепишем это выражение:

$$dq = -\frac{1}{4\pi} \int \nabla(\varphi_1 + Ez) \cdot d\mathbf{E}' dV - \frac{1}{4\pi} \int (\varphi_1 + Ez) \operatorname{div} d\mathbf{E}' dV + \frac{E}{4\pi} \int z \operatorname{div} d\mathbf{E}' dV.$$

Объединяя два первых интеграла, получим

$$dq = -\frac{1}{4\pi} \int \operatorname{div} ((\varphi_1 + Ez) d\mathbf{E}') dV + E \int z d\rho_1 dV.$$

Первый интеграл сводится к интегралу по бесконечно удаленной поверхности и на бесконечности исчезает. Второй интеграл дает приращение дипольного момента. Окончательно получаем $dq = E dP$.

Полная энергия, поглощенная атомом за время t , находится по формуле

$$q = \int E dP. \tag{13}$$

Зная зависимость дипольного момента атома от времени, можно с помощью формул (10) и (13) вычислить сечение фотопоглощения.

3. НИЗКОЧАСТОТНЫЙ ПРЕДЕЛ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ СИЛ ОСЦИЛЛЯТОРОВ

3.1. Упрощения в низкочастотном пределе

В случае низких частот $\omega \ll Z$ главный вклад в силы осцилляторов дают электроны, находящиеся на больших расстояниях $r \gg Z^{-1/3}$ от ядра. Асимптотическое поведение функции Томаса–Ферми на больших расстояниях имеет вид $\chi = 144/x^3$, а потенциала, соответственно,

$$\varphi_0 = \frac{81\pi^2}{8r^4}. \tag{14}$$

Движение электронов (и дырок) с нулевой энергией в таком потенциале описывается простыми аналитическими формулами. Их траектории представляют собой окружности, проходящие через центр.

Следующее упрощение, которое можно применить в низкочастотном пределе, связано с тем, что сечение поглощения в этом пределе не зависит от частоты. Следовательно, для определения сечения можно использовать электромагнитную волну с любой зависимостью от времени. Удобно рассматривать волну с прямоугольным профилем, с амплитудой электрического поля E и временем t . В этом случае выражение (13) для энергии q запишется в виде

$$q = EP,$$

а плотность распределения сил осцилляторов —

$$\frac{df}{d\omega} = \frac{2}{\pi} \frac{P}{Et}. \tag{15}$$

Еще одно упрощение, следующее из уравнений (4)–(6), это автомодельная зависимость

$$\psi \left(\frac{r}{t^{1/3}} \right), \tag{16}$$

и, соответственно, линейная зависимость дипольного момента от времени, как и должно быть для получения распределения сил осцилляторов по формуле (15).

3.2. Метод численного расчета

3.2.1. Рождение частиц

Кинетическое уравнение (4) интегрируется методом частиц.

Правая часть уравнения (4) на языке частиц соответствует рождению пар частиц — электронов (если правая часть больше нуля) и дырок (если она меньше нуля). С помощью генератора случайных чисел получаем случайные значения начальных координат дырок и электронов и углы их вылета. Если считать, что рождающиеся частицы имеют вес wE , то согласно (8) число электронов (и дырок), рождающихся в единицу времени, равно

$$\frac{dN}{dt} = \frac{1}{wE} \int \frac{dn}{dt} dV = \frac{81\pi}{4w} \int_0^\infty \frac{\beta(r)}{r^2} dr, \tag{17}$$

где $\beta(r)$ — среднее по углу значение модуля электрического поля (далее будем полагать для упрощения формул $E = 1$):

$$\begin{aligned} \beta(r) &= \int_0^{\pi/2} |\nabla\varphi_1| \sin\theta d\theta = \\ &= \int_0^{\pi/2} \sqrt{\psi^2 + (2r\psi\psi' + r^2\psi'^2) \cos^2\theta} \sin\theta d\theta. \end{aligned}$$

Если $\psi = \text{const}$, что соответствует постоянному по пространству электрическому полю (если экранировки из-за поляризации нет, то поле постоянно, и в начальный момент это так), то $\beta = \text{const}$ и интеграл (17) расходится на малых радиусах. Для сходимости интеграла (17) необходимо, чтобы выполнялось условие $\psi \propto r^\alpha$, где $\alpha > 1$. Однако, как показали наши исследования поведения функции распределения на малых расстояниях, возможны решения с $\psi \propto r^\alpha$, где $\alpha < 1$, а численные расчеты (разд. 3.3) подтвердили, что они действительно реализуются.

Поэтому при численном расчете приходилось работать с расходящимся на малых расстояниях интегралом рождения частиц, обрезая его на некотором радиусе $r = r_0$. Поскольку частицы, рождающиеся на малом радиусе, вносили пренебрежимый вклад в дипольный момент (согласно (9) $P \propto r_0^{3+\alpha}$), это не должно было заметно сказаться на результатах. Фактически в ходе численных расчетов по мере уточнения (проведения расчетов со все большим числом частиц) величина r_0 последовательно уменьшалась от расчета к расчету, обеспечивая предельный переход к $r_0 = 0$. Процедура обрезания потенциала проводилась следующим образом: потенциал $\psi(r_0)$ определялся в результате решения уравнения Пуассона, а при $r < r_0$ полагалось

$$\psi(r) = \psi(r_0) \left(\frac{r}{r_0} \right)^2.$$

В начальный момент считалось, что $\psi(r_0) = 1$.

При численном счете выбирался такой шаг по времени Δt , чтобы за время Δt рождалась одна пара частиц (электрон и дырка).

Плотность вероятности рождения пары частиц в объеме $dV = r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi$ равна

$$p = \frac{dn}{w dN} = \frac{\sqrt{\psi^2 + (2r\psi\psi' + (r\psi')^2) \cos^2 \theta}}{4\pi r^4 \int_0^\infty \frac{\beta(r)}{r^2} dr}.$$

Поскольку p не зависит от φ , вероятность рождения пары частиц в интервалах радиусов от r до $r+dr$ и углов от θ до $\theta + d\theta$ составляет

$$p(r, \theta) dr d\theta = 2\pi r^2 \sin \theta p dr d\theta.$$

Отсюда получим распределение вероятностей рождения частиц по радиусу

$$p_r = \int_0^\pi p(r, \theta) d\theta = \frac{\beta(r)}{r^2 \int_0^\infty \frac{\beta(r)}{r^2} dr}, \quad (18)$$

и по углу (при заданном радиусе):

$$p_\theta = \frac{p(r, \theta)}{p_r} = \frac{\sqrt{\psi^2 + (2r\psi\psi' + (r\psi')^2) \cos^2 \theta}}{2\beta(r)} \sin \theta. \quad (19)$$

В расчетах при рождении частицы разыгрывались вероятности их рождения по радиусу согласно (18) и по углу согласно (19); угол вылета частицы относительно поля разыгрывался по лямбертовскому распределению согласно (7).

3.2.2. Движение частиц

Введем в плоскости движения частицы полярную систему координат. Потенциальная энергия частицы имеет вид $U(r) = -a/r^4$, а полная энергия $\varepsilon = 0$. По формуле, связывающей радиус и угол ϕ при движении в центральном поле [10],

$$\phi + C_1 = \int \frac{\frac{M}{r^2} dr}{\sqrt{2[\varepsilon - U(r)] - \frac{M^2}{r^2}}},$$

где масса частицы $m = 1$, M — момент импульса, $C_1 = \text{const}$, найдем уравнение траектории:

$$r = \frac{\sqrt{2a}}{M} \cos(\phi + C_1).$$

Обозначив $\sqrt{2a}/M = 2R$ и выбрав C_1 таким образом, чтобы $r = 2R$ при $\phi = 0$, перепишем это равенство в виде

$$r = 2R \cos \phi. \quad (20)$$

Это уравнение окружности радиуса R , проходящей через начало координат. После падения частицы на центр из-за кулоновского поведения потенциала на малых расстояниях она вылетает из центра в том же направлении, что и падала, а затем вновь движется по окружности, так что в итоге ее траектория представляет две касающиеся друг друга окружности, образующие восьмерку.

Используя (20) и формулу, связывающую радиус и время для движения в центральном поле, [10]

$$t + C_2 = \int \frac{dr}{\sqrt{2[\varepsilon - U(r)] - \frac{M^2}{r^2}}},$$

для $\varepsilon = 0$ найдем зависимость угла от времени:

$$t = \frac{a}{2M^3}(\chi + \sin \chi) \equiv \frac{T}{2\pi}(\chi + \sin \chi), \quad (21)$$

где $\chi = 2\phi$, угол χ отсчитывается в направлении движения дырки, а период оборота частицы

$$T = \frac{a\pi}{M^3}$$

(фактически при движении по восьмерке период оборота частицы равен $2T$). Период T , выраженный в нашем случае ($\varepsilon = 0$) через радиус окружности R , с учетом того, что $a = 81\pi^2/8$, записывается как

$$T = \frac{8R^3}{9}. \quad (22)$$

По начальным координатам частиц и углам вылета относительно поля, полученным в результате розыгрыша вероятностей, можно найти траекторию частицы в трехмерном пространстве в зависимости от параметра χ . Сам же угол χ для любого заданного момента времени t находится из уравнения (21). Таким образом, в любой момент времени t можно вычислить все координаты частиц.

3.2.3. Решение уравнения Пуассона

Для численного расчета потенциала использовалась сетка по радиусу с шагом h . Радиус обрезания потенциала r_0 обычно в расчетах составлял $r_0 = 2h$.

При вычислении дипольного момента $P(r_i)$ в каждой точке сетки рассматривались вклады от всех частиц. Для частицы, текущий радиус которой находился на отрезке $[r_i, r_{i+1}]$ и составлял $r = r_i + \mu h$ ($0 < \mu < 1$), проецировалась величина zw этой частицы, соответствующая ее вкладу в дипольный момент, на точку r_i с весом $1 - \mu$, а на точку r_{i+1} — с весом μ . Все частицы, спроецированные на точку r_i , создавали в этой точке приращение дипольного момента. Дипольный момент $P(r)$, накопленный к данному радиусу, получался суммированием всех этих приращений до данного радиуса.

Интегрируя уравнение (9) с граничным условием $\psi(r_\infty) = 1$, находили зависимость $\psi(r)$ во всем пространстве с учетом указанной выше интерполяции $\psi(r)$ к граничному условию $\psi(0) = 0$.

3.3. Результаты численного расчета

Зависимости P/t и ψ от автомодельной переменной $\zeta = r/t^{1/3}$, полученные при расчетах с $w = 0.00001$, $r_0 = 0.016$, $h = 0.008$ после рождения 84000 пар частиц (при этом полное время $t = 1.01 \cdot 10^{-3}$), представлены на рис. 1.

Из рис. 1 и формулы (22) видно, что основной вклад в полный дипольный момент дают такие расстояния от ядра, где период оборота частиц, рождающихся в этой области, в несколько раз превышает время t . Расчеты показали также, что при малых радиусах функция $\psi(r)$ ведет себя нерегулярно, но при этом убывает с уменьшением радиуса достаточно медленно, заведомо медленнее, чем r^3 — зависимость, которую дает поляризация потенциала статического уравнения Томаса–Ферми. Таким образом, кинетика существенным образом меняет поведение экранировки на малых радиусах. Оценка, проведенная с помощью зависимости числа рожденных частиц от времени $N \propto t^{1-\alpha/3}$, которая следует из ав-

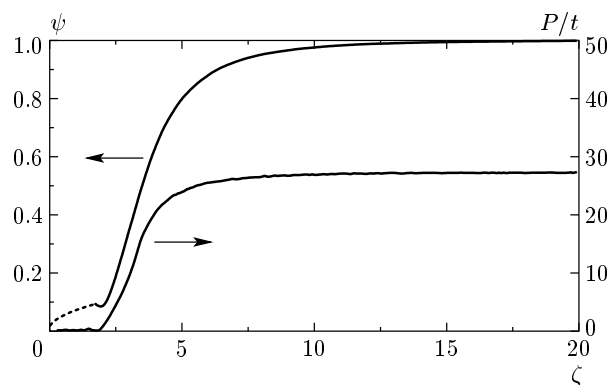


Рис. 1. Полученные при численном расчете зависимости P/t и ψ от автомодельной переменной $\zeta = r/t^{1/3}$

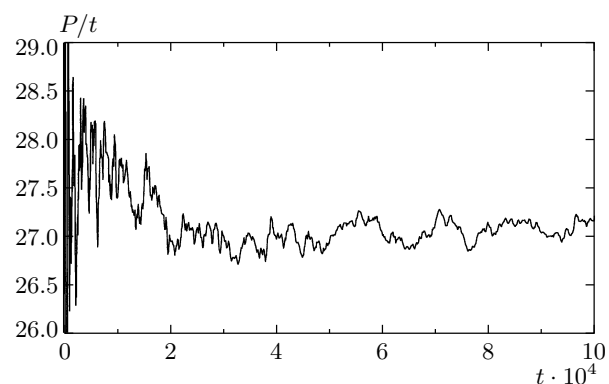


Рис. 2. Зависимость величины P/t от времени

томодельной зависимости (16) и поведения потенциала на малых радиусах, $\psi \propto r^\alpha$, дает показатель $\alpha \approx 0.5$ для степенной зависимости $\psi \propto r^\alpha$ на малых радиусах, который находится в найденном нами интервале допустимых для него значений $0 < \alpha < 1$.

Зависимость величины P/t для всего атома от времени, полученная в этом расчете, показана на рис. 2. С течением времени P/t стремится к постоянной величине, равной 27.11 ± 0.09 (колебания P/t объясняются флуктуациями).

Расчеты показывают, что с увеличением числа частиц, с переходом к более тонкой сетке и одновременным уменьшением сглаживающих параметров происходит уменьшение флуктуаций и уточнение результатов. В таблице собраны некоторые результаты расчетов, проведенных с разным весом частиц w , полученные к моменту времени $t = 0.001$.

Используя данные таблицы для величины P/t , можно оценить ее значение с учетом возможных по-

Вес частиц, w	Число рожденных частиц, N	r_0	Максимальный радиус, на котором наблюдаются флуктуации потенциала ψ , превышающие 30%, R	α	P/t
0.0002	14000	0.025	0.275	0.35	29.0 ± 0.6
0.0001	20500	0.025	0.225	0.23	27.3 ± 0.4
0.00005	36000	0.02	0.26	0.05	26.8 ± 0.3
0.00002	46000	0.016	0.208	0.58	27.13 ± 0.09
0.00001	84000	0.016	0.176	0.5	27.11 ± 0.09

грешностей как

$$\frac{P}{t} = 27.12 \pm 0.09.$$

Низкочастотный предел распределения сил осцилляторов, соответствующий этому значению P/t , равен

$$\frac{df}{d\omega} = 17.3. \quad (23)$$

Это значение меньше величины, вычисленной нами с помощью гидродинамического подхода, развитого в работе [5], в 1.21 раза³⁾. Таким образом, гидродинамический подход [5] завышает предельное значение распределения сил осцилляторов. Можно думать, что и при не равных нулю низких частотах значения $df/d\omega$ [5] также завышены, хотя и не так сильно, как при нулевой частоте, поскольку правило сумм сил осцилляторов, $\int df = Z$, в гидродинамическом подходе выполняется.

4. ВЫСОКОЧАСТОТНЫЙ ПРЕДЕЛ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ СИЛ ОСЦИЛЛЯТОРОВ

В случае высоких частот $\omega \gg Z$ влияние поляризации несущественно, а потенциал, в котором движутся электроны, дающие вклад в силы осцилляторов, можно считать кулоновским. Рассмотрение этого случая проще всего провести с помощью готовых квазиклассических формул для сечений фотопоглощения в кулоновском потенциале [1].

³⁾ В расчетах низкочастотного предела [5] имеется ошибка, в результате которой не учитывается поляризация электронного газа и которая приводит к сильному завышению низкочастотного предела $df/d\omega$ по сравнению с правильными расчетами в гидродинамическом подходе — в 2.3 раза.

Сечение фотоионизации электрона в кулоновском поле с уровня, главное квантовое число которого n , равно [1]

$$\sigma_n = \frac{8\pi}{3\sqrt{3}} \frac{Z^4}{\omega^3 n^5}. \quad (24)$$

Умножим (24) на $2n^2$ (число электронов на оболочке n) и проинтегрируем по n от минимально возможного главного квантового числа при заданном ω

$$\frac{Z^2}{2n^2} = \omega$$

(переходы с меньших n невозможны, поскольку происходили бы на дискретные уровни, которые в нейтральном атоме заняты) до бесконечности. В результате получим полное сечение фотопоглощения

$$\sigma = \frac{16\pi}{3\sqrt{3}} \frac{Z^2}{\omega^2}$$

и, соответственно, асимптотику распределения сил осцилляторов при высоких частотах:

$$\frac{df}{d\omega} = \frac{8}{3\sqrt{3}\pi} \frac{Z^2}{\omega^2}. \quad (25)$$

Надо сказать, что распределение сил осцилляторов (25) по существу уже использовалось ранее [11] для расчета излучения многозарядных ионов, при этом оно было получено другим методом.

Коэффициент в зависимости (25) больше аналогичного коэффициента, полученного в работе [5], в 1.59 раза⁴⁾. Таким образом, учитывая уменьше-

⁴⁾ Отметим близость этого отношения и отношения скорости нулевого звука [12] в ферми-газе к гидродинамической, равного $\sqrt{3}$. Возможно, если учитывать в гидродинамическом подходе упругость электронного газа, определяемую скоростью нулевого звука, что кажется более уместным для бесстолкновительного газа, результаты гидродинамического подхода [5] можно было бы уточнить. Так, например, значение низкочастотного предела $df/d\omega$ при таком изменении будет больше точного значения (23) всего на 4%.

ние величины $df/d\omega$ по сравнению с гидродинамическим приближением в низкочастотном пределе, можно сказать, что учет кинетики движения электронов смещает распределение сил осцилляторов в сторону больших частот.

5. ИНТЕРПОЛЯЦИОННАЯ ФОРМУЛА ДЛЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ СИЛ ОСЦИЛЛЯТОРОВ И ЛОГАРИФИЧЕСКАЯ СРЕДНЯЯ ЭНЕРГИЯ ВОЗБУЖДЕНИЯ

В работе [5] приведены значения сечения фотопоглощения $\sigma(\Omega)$ для частот $\Omega = \omega/Z$ из интервала [0.03, 12], вычисленные на основании гидродинамического подхода; соответствующее распределение сил осцилляторов можно найти по формуле (1). При этом для низких частот полученная в [5] асимптотика распределения сил осцилляторов $df/d\omega$ превышает наше значение (23), а для высоких частот коэффициент в асимптотической формуле

$$\frac{df}{d\omega} = \frac{0.31}{\Omega^2}$$

меньше нашего коэффициента из (25) в 1.59 раза. Таким образом, можно думать, что гидродинамический подход занижает частоты осцилляторов. Введем в рассмотрение величину

$$F = \frac{1}{Z} \int_0^{\omega} \frac{df}{d\omega} d\omega$$

— число осцилляторов ниже заданной частоты. Если бы точные асимптотики отличались от гидродинамических [5] при высоких и низких частотах в одинаковое число k раз, можно было бы, используя сечения [5] и сделав для F , соответствующей [5], преобразование $F(\omega) \rightarrow F(\omega/k)$, получить функцию с правильными асимптотиками. При этом можно было бы надеяться на более точное описание и для промежуточных частот, поскольку были бы исправлены недостатки гидродинамического подхода в предельных случаях. Так как рассчитанные в работе [5] значения сил осцилляторов относятся к интервалу частот, довольно далекому от низкочастотного предела, сделаем попытку улучшить описание функции распределения числа осцилляторов, используя значение k при высоких частотах.

Итак, если нам известна функция $F(\Omega)$ из [5], то при изменении частоты по формуле $\Omega \rightarrow 1.59\Omega$ функция $df/d\omega$ преобразуется как

$$\frac{df}{d\omega}(\Omega) \rightarrow \frac{1}{1.59} \frac{df}{d\omega} \left(\frac{\Omega}{1.59} \right) \quad (26)$$

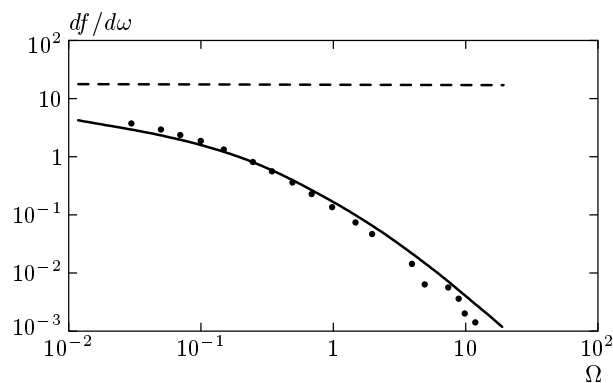


Рис. 3. Распределение сил осцилляторов из работы [5] (точки) и вычисленное по интерполяционной формуле (27) (сплошная линия); штриховая линия — низкочастотная асимптотика, полученная в данной работе

и новые значения $df/d\omega$ будут удовлетворять нашей асимптотике при высоких частотах (25). Поскольку минимальное значение частоты, для которой вычислялось сечение фотопоглощения в работе [5], $\Omega = 0.03$ находится довольно далеко от низкочастотной асимптотики, можно попытаться составить интерполяционную формулу для величины F , используя преобразованные по (26) значения [5] и наши асимптотики при низких и высоких частотах. В качестве такой функции мы выбрали функцию вида

$$F(\Omega) = \frac{17.3\Omega + C_1\Omega^3}{1 + C_2\Omega^{0.4} + C_3\Omega + C_4\Omega^2 + C_1\Omega^3}, \quad (27)$$

где коэффициент 17.3 определяется низкочастотной асимптотикой (23), а высокочастотная асимптотика (25) дает связь $C_1 = 2.04C_4$. При этом величина $df/d\omega$ находится по формуле

$$\frac{df}{d\omega} = F'(\Omega). \quad (28)$$

Коэффициенты C_1, C_2, C_3 в (27) подбирались методом наименьших квадратов, чтобы приблизить значения $df/d\omega = F'(\Omega)$ к преобразованным согласно (26) значениям $df/d\omega$ из [5]. В результате подбора было найдено:

$$C_1 = 55.7, \quad C_2 = 11.2, \quad C_3 = 6.6, \quad C_4 = 27.3.$$

Значения $df/d\omega$ из [5] и вычисленные по интерполяционной формуле (27) представлены на рис. 3 (штриховой линией показана асимптотика при низких частотах).

Логарифмическая средняя энергия возбуждения, фигурирующая в задачах об ионизационных

потерях заряженных частиц [3], находится по формуле

$$\ln I = \ln Z + \int_0^{\infty} \frac{df}{d\omega} \ln \Omega d\Omega. \quad (29)$$

Подставляя в (29) $df/d\omega$ из (27), (28), получим величину $I = 8.3Z$ эВ, которая находится ближе к экспериментально найденному диапазону $I/Z = 9.5-16$ эВ [13], чем результат $I/Z = 4.95$ эВ [5].

6. ПРИМЕНЕНИЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ СИЛ ОСЦИЛЛЯТОРОВ В НЕЙТРАЛЬНОМ АТОМЕ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ИЗЛУЧАТЕЛЬНЫХ СВОЙСТВ ПЛОТНОГО ВЕЩЕСТВА

Степень ионизации плотной плазмы определяется с помощью уравнения Саха с многократной ионизацией [1]:

$$I(z + 0.5) = T \ln \left[\frac{2}{zn_Z} \left(\frac{T}{2\pi} \right)^{3/2} \right], \quad (30)$$

где z — степень ионизации, I — потенциал ионизации, n_Z — плотность ионов, T — температура. В достаточно плотной плазме $I \sim T$. Поэтому для томаса-фермиевского атома при низких температурах $1 \ll T < Z$ главный вклад в интересующий нас диапазон сил осцилляторов $\omega \sim T$ будут давать электроны, пролетающие на таких расстояниях от ядра r , для которых частота обращения порядка ω . Поскольку мы рассматриваем случай $\omega < Z$, частота обращения электронов зависит от r как $\omega \sim 1/r^3$ и главный вклад в эти частоты будут давать области атома

$$r_\omega \sim 1/\omega^{1/3} \sim 1/T^{1/3} \ll r_I \sim 1/I^{1/4}, \quad (31)$$

не затронутых ионизацией, которая сказывается на расстояниях $r_I \sim 1/T^{1/4}$. Таким образом, для этих частот должно быть справедливо распределение сил осцилляторов холодного атома Томаса–Ферми. При высоких температурах $Z \ll T < Z^2$ для оценок r_ω и r_I можно использовать кулоновские формулы

$$\omega \sim \frac{\sqrt{Z}}{r_\omega^{3/2}}, \quad I \sim \frac{Z}{r_I},$$

и тогда главный вклад в диапазон сил осцилляторов $\omega \sim T$ также будут давать электроны, пролетающие на расстояниях от ядра

$$r_\omega \sim Z^{1/3}/T^{2/3} \ll r_I \sim Z/I, \quad (32)$$

не затронутых ионизацией. Значит, для этих частот также должно быть справедливо распределение сил осцилляторов холодного атома Томаса–Ферми. Таким образом, распределение сил осцилляторов холодного атома Томаса–Ферми должно определять коэффициент истинного поглощения κ'_ω (коэффициент поглощения, исправленный на вынужденное испускание) достаточно плотного вещества при любых температурах, что можно записать, используя (1) и переходя к обычным единицам, как

$$\kappa'_\omega = n_Z \sigma = \frac{2\pi^2 e^2 n_Z}{mc} \frac{df}{d\omega}. \quad (33)$$

При этом спектральная интенсивность излучения ионов J_ω связана с κ'_ω формулой (в обычных единицах)

$$J_\omega = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^2 \left(\exp \frac{\hbar\omega}{T} - 1 \right)} \kappa'_\omega \quad (34)$$

и так же, как κ'_ω (33), пропорциональна плотности. При использовании (33), (34) для получения излучательных характеристик вещества надо иметь в виду, что в силу квазиклассичности подхода спектры (33), (34) оказываются непрерывными, сглаженными по большому числу линий. Поэтому, например, при расчете средних росселандовых пробегов, где дискретность спектров существенна, использование (33) может дать только минимальную оценку пробега, так как главный вклад в росселандов пробег дают области наибольшей прозрачности.

В случае высоких температур $T \gg Z$ для распределения сил осцилляторов следует использовать выражение (25), и тогда можно получить излучательные характеристики плазмы, приведенные в работе [11]. В частности, интенсивность излучения ионов в этом пределе будет пропорциональна T^2 .

При низких температурах $T \ll Z$ величина $df/d\omega \rightarrow \text{const}$ и спектральная интенсивность излучения ионов (34) будет по форме совпадать с чернотельной. Соответственно, в этом пределе интенсивность излучения ионов будет пропорциональна T^4 . Надо отметить, что из-за того, что выход к пределу $df/d\omega \rightarrow \text{const}$ происходит лишь при очень низких частотах, переход интенсивности излучения к зависимости T^4 будет также происходить лишь при чрезвычайно низких температурах.

Зависимость полной интенсивности излучения ионов для $df/d\omega$ из (27), (28) от температуры T/Z

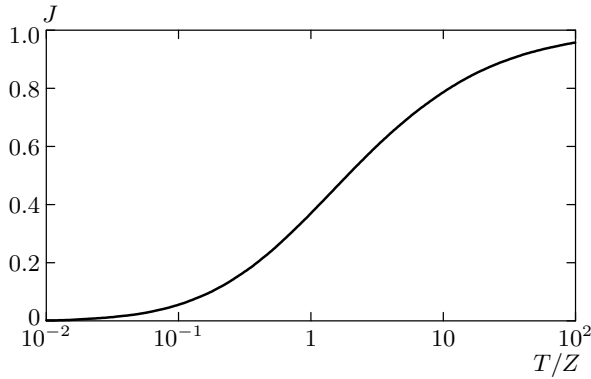


Рис. 4. Интенсивность излучения ионов плотной плазмы как функция температуры

представлена на рис. 4. Интенсивность излучения ионов J выражена в единицах

$$\frac{8\pi}{9\sqrt{3}} \frac{e^6}{\hbar^4 c^3} Z^2 n_Z T^2$$

(обычные единицы).

Следует отметить, что реально для определения излучательных характеристик вещества пользоваться выражением (33) с томас-фермиевским значением $df/d\omega$ можно лишь при очень высоких плотностях. Для этого необходимо, чтобы характерные расстояния r_ω для электронов с частотой обращения $\omega \sim T$ были малы по сравнению с расстояниями r_I , определяемыми потенциалом ионизации (30). Используя формулы (31), (32) при низких и высоких T , формулу (30) и соотношения между I и z для малых и больших z :

$$I \sim z^{4/3} \quad \text{для } z \ll Z,$$

$$I \sim \frac{Z^2}{(Z-z)^{2/3}} \quad \text{для } Z-z \ll Z,$$

можно получить условия применимости (33) с томас-фермиевским $df/d\omega$:

$$\text{для } T < Z \quad T \gg \left(\ln \frac{T^{3/4}}{\sqrt{2} \pi^{3/2} n_Z} \right)^3,$$

$$\text{для } T > Z \quad T \ll \frac{Z^2}{\left(\ln \frac{Z^2}{\sqrt{2} \pi^{3/2} Z n_Z} \right)^3}.$$

Например, для железа при температуре $T = Z = 0.7$ кэВ эти условия будут выполняться, начиная с плотностей, больших 50 г/см^3 .

При более низких плотностях силы осцилляторов из-за ионизации будут в диапазоне $\sim T$ умень-

шаться и «количество» линий также. Таким образом, в этом случае будет существенна дискретность спектра, а интенсивности излучения могут значительно уменьшаться. Рассмотрение этого случая при высоких температурах $T \gg Z$ или $Z-z \ll Z$ (но все же при $T \ll Z^2$) проведено в работе [14].

Используя результаты работы [14], можно предложить удобную интерполяционную формулу для истинных коэффициентов поглощения плазмы, дающую правильные результаты в пределе высоких плотностей, учитывающую дискретность спектра и переходящую в правильные кулоновские формулы при высоких температурах [14]:

$$\kappa'_\omega = n_Z \sigma = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{2\pi^2 e^2 n_Z}{mc} \frac{df}{d\omega} \omega_I \xi_k \delta(\omega - k\omega_I). \quad (35)$$

Здесь

$$\xi_k \equiv \pi \sqrt{3} k J_k(k) J'_k(k) \approx 1 - \frac{0.21775}{k^{2/3}},$$

а ω_I — частота обращения электрона, в кулоновском поле равная $\hbar\omega_I = 2I/n$, где I — потенциал ионизации. Действительно, в пределе больших плотностей, когда величина $\hbar\omega_I = 2I/n \ll I$ и мала по сравнению с характерными частотами излучения $\hbar\omega \sim T \sim I$, сумму (35) можно заменить на интеграл по k и мы приходим к выражению (33). А в случае высоких степеней ионизации $df/d\omega$ можно заменить на высокочастотный предел (25) и мы приходим к результатам работы [11]. Для описания случая холодного вещества и/или сечений фотоэффекта сумму в (35) следует брать не до бесконечности, а до k , соответствующего $\hbar\omega = I$, а далее сумму заменять на интеграл (полагая $\xi_k = 1$), поскольку эти частоты соответствуют переходам в непрерывный спектр.

Если положить

$$I = \frac{(z+1)^2}{2n^2} \frac{me^4}{\hbar^2},$$

можно получить правильное при высоких температурах и верное по порядку величины при низких температурах выражение для $\hbar\omega_I$:

$$\hbar\omega_I = \frac{2I}{z+1} \sqrt{\frac{2I}{me^4/\hbar^2}}. \quad (36)$$

Формулы (35), (36) могут не давать правильных результатов для невысоких температур и не очень плотной плазмы. Однако и в этой области можно получить правильный по порядку величины ответ.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе предложен метод расчета сечения фотопоглощения на сложных атомах, основанный на решении кинетического уравнения методом частиц.

Найдено, что в низкочастотном пределе распределение сил осцилляторов атома Томаса–Ферми стремится к константе, равной

$$\frac{df}{d\omega} = 17.3 \frac{\hbar^3}{me^4}.$$

Получено, что при приложении электрического поля к нейтральному атому в кинетической задаче экранировка поля при малых радиусах оказывается более слабой, чем в стационарном (гидродинамическом) случае.

Получена асимптотика распределения сил осцилляторов при высоких частотах:

$$\frac{df}{d\omega} = \frac{8}{3\sqrt{3}\pi} \frac{Z^2}{\omega^2} \frac{me^4}{\hbar^3}.$$

Используя результаты работы [5], правило сумм и асимптотики (23) и (25), мы предложили интерполяционную формулу для распределения сил осцилляторов во всем диапазоне частот. Логарифмическая средняя энергия возбуждения, фигурирующая в задачах об ионизационных потерях заряженных частиц, вычисленная с использованием этой формулы, $I = 8.3Z$ эВ, находится вблизи экспериментально найденного диапазона.

Показано, что распределение сил осцилляторов в нейтральном атоме можно использовать для определения излучательных свойств плотного вещества.

Авторы выражают благодарность А. И. Голубеву, С. Д. Кузнецову, В. А. Жмайло и В. Б. Якубову за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Я. Б. Зельдович, Ю. П. Райзер, *Физика ударных волн и высокотемпературных гидродинамических явлений*, Наука, Москва (1966).
2. А. Ф. Никифоров, В. Г. Новиков, В. Б. Уваров, *Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы*, Наука, Москва (2000).
3. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Физматгиз, Москва (1963).
4. W. Brandt and S. Lundqvist, *Phys. Rev. A* **139**, 612 (1965).
5. J. A. Ball, J. A. Wheeler, and E. L. Fireman, *Rev. Mod. Phys.* **45**, 333 (1973).
6. В. А. Астапенко, Л. А. Бурева, В. С. Лисица, *УФН* **172**, 155 (2002).
7. А. С. Компанец, Е. С. Павловский, *ЖЭТФ* **31**, 427 (1956).
8. Д. А. Киржниц, *ЖЭТФ* **32**, 115 (1957).
9. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория поля*, Наука, Москва (1967).
10. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Механика*, Наука, Москва (1973).
11. С. Ф. Гаранин, в сб. *Труды РФЯЦ-ВНИИЭФ*, вып. 1, Саров (2001), с. 62.
12. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Физическая кинетика*, Наука, Москва (1979).
13. U. Fano, *Ann. Rev. Nucl. Sci.* **13**, 1 (1963).
14. С. Ф. Гаранин, *ТВТ* **41**, 487 (2003).