

**ВЛИЯНИЕ ДЕБАЕВСКОГО ЭКРАНИРОВАНИЯ НА ЭНЕРГИЮ
ИОНИЗАЦИИ КОМПОНЕНТ ВОЗДУШНОЙ ПЛАЗМЫ***Г. А. Ковальская**(Новосибирск)*

В работе произведен расчет влияния кулоновского взаимодействия на сдвиг энергетических уровней компонент воздушной плазмы. Для отработки методики расчета дан расчет сдвига энергетических уровней водорода. Предложен упрощенный метод расчета сдвига энергетических уровней, который дает возможность сократить машинное время в 10—30 раз. Получена зависимость сдвига основного уровня атомов водорода, аргона, азота и кислорода от дебаевского радиуса D для $20 \leq D \leq 2000$ атомных единиц.

1. Кулоновское взаимодействие приводит к сдвигу уровней и к переходу верхних термов в непрерывный спектр. Особенно важную роль играет сдвиг основного состояния, который приводит к изменению энергии ионизации атомов.

Изменение энергии ионизации влияет прежде всего на сдвиг ионизационного равновесия, т. е. на изменение состава плазмы, что в свою очередь сказывается на всех остальных свойствах плазмы. Кроме того, изменение энергии электронных уровней может сказываться на теплофизических свойствах плазмы и непосредственно, а не только через влияние на состав. Так, сдвиг уровней электронного возбуждения в атомах и обрезание верхних термов приводят к сдвигу пороговых частот фотоионизации в коэффициенте поглощения.

К расчету сдвига энергии основного состояния атома, находящегося в окружении заряженных частиц, можно подойти двумя путями: во-первых, рассматривая задачу многих тел, во-вторых, рассматривая изолированную частицу, находящуюся во внешнем эффективном поле, которое связано с суммарным влиянием всех заряженных частиц. Первый путь приводит к большим математическим трудностям и для практических расчетов мало пригоден. Сведение задачи многих тел к описанию движения одной частицы в некотором поле, созданном другими частицами, позволяет значительно упростить математический аппарат. Ввиду этого для расчетов сдвигов уровней атомов было избрано одночастичное приближение, основанное на введении эффективного результирующего поля.

2. Для определения собственных значений энергии атома решается уравнение Шредингера с потенциальной энергией, зависящей от параметров окружающей плазмы.

Для водорода и одноэлектронных ионов такие расчеты были проведены [1-3] для дебаевских радиусов $D \leq 25$ (здесь и в дальнейшем все величины выражены в атомной системе единиц), в [3] даны отдельные точки для больших D . Для расчетов эти результаты мало пригодны, так как в практически интересных областях изменения температур и давлений дебаевские радиусы гораздо больше. Например, для водородной плазмы при температуре $10000 \div 50000^\circ \text{K}$ и давлении от 10 до 100 атм дебаевский радиус попадает в область от 25 до 600.

В работе [4] уравнение Шредингера для водорода с экранированным кулоновским потенциалом решено с помощью теории возмущений. Отмечено, что расчеты относятся только к верхним состояниям и справедливы для достаточно больших дебаевских радиусов. Для многоэлектронных атомов известны две работы. В [5] обсуждается расчет сдвигов энергетических уровней многоэлектронных атомов с помощью диаграммного метода. Численных расчетов не проводится. В [6] дан расчет сдвигов энергетических уровней железа для потенциала Томаса — Ферми для дебаевских радиусов $D \leq 50$.

3. В связи с тем что в литературе отсутствуют данные о сдвиге основного уровня водорода для практически интересного диапазона изменений дебаевского радиуса, а также для отработки методики численного счета, которая в дальнейшем могла бы быть применена к многоэлектронным атомам, был проведен расчет сдвига основного уровня водорода для дебаевских радиусов от 20 до 2000.

Атом водорода рассматривается в виде стационарной системы электрон — протон, находящейся во внешнем дебай-хюккелевском поле. Для определения собственных значений энергии атомов решается уравнение Шредингера с потенциальной энергией в виде экранированного кулоновского потенциала. Уравнение Шредингера для радиальной составляющей $P(r)$ волновой функции атома водорода имеет вид [7]

$$\frac{d^2 P}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} P - 2[u(r) - \varepsilon] P = 0 \quad (3.1)$$

$$(U(r) = -r^{-1} \exp(-r/D))$$

Задача сводится к нахождению значений ε_n , при которых решение уравнения (3.1) удовлетворяет условиям

$$P(0) = 0, \quad P(r) \rightarrow 0 \text{ при } r \rightarrow \infty$$

$$\int_0^{\infty} P^2(r) dr = 1$$

Как показали оценки, второе краевое условие $P(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$ можно заменить на $P(R) = 0$, где для основного состояния водорода $R = 10$.

Так как при расчете основного состояния максимальное значение r принимается равным 10, что значительно меньше D в рассматриваемой области, то с достаточной степенью точности можно принять

$$U(r) = -\frac{1}{r} \exp\left(-\frac{r}{D}\right) \approx -\frac{1}{r} + \frac{1}{D} \quad (3.2)$$

После подстановки (3.2) в (3.1) получим

$$\frac{d^2 P^*}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} P^* - 2\left[-\frac{1}{r} + \frac{1}{D} - \varepsilon^*\right] P^* = 0 \quad (3.3)$$

где P^* — волновая функция атома водорода, находящегося в экранированном дебай-хюккелевском поле. Очевидно, что для выбранного диапазона дебаевского радиуса волновая функция практически не меняется, так как в области, где волновая функция еще значительна, изменение напряженности электрического поля в результате дебаевского экранирования весьма мало. Это видно из фиг. 1, на которой дана зависимость радиальной волновой функции состояния $1s$ атома водорода и отношения E^*/E_0 (где E^* — напряженность поля с учетом экранирования для $D = 20$ и E_0 — напряженность поля изолированного атома) от r — расстояния от центра атома. Рассмотрим уравнение (3.3) и уравнение Шредингера для изолированного

атома водорода

$$\frac{d^2P}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} P - 2 \left[-\frac{1}{r} - \varepsilon \right] P = 0 \quad (3.4)$$

При выполнении предположения равенства волновых функций P^* и P уравнения (3.3) и (3.4) будут эквивалентны при условии смещения собственных значений энергии на $1/D$, т. е.

$$\Delta \varepsilon_{1s} = 1/D \quad (3.5)$$

Для проверки приведенных выше предположений был произведен численный расчет зависимости $\Delta \varepsilon = f(D)$ для состояния $1s$ атома водорода. Уравнение (3.4) с учетом краевых условий было решено численно методом В. Б. Нумерова [8, 9].

Было получено, что при изменении дебаевского радиуса от 20 до 2000 радиальная часть волновой функции $P(r)$ в точке $r = 0.235$ изменяется лишь на 0.001%, в точке $r = 1.284$ — на 0.1%. Зависимость (3.5) выполняется с точностью до $\pm 1\%$ для $20 \leq D \leq 2000$. На основании вышеизложенного можно надеяться значительно упростить расчет $\Delta \varepsilon$ для основного состояния сложных атомов, исходя из условия постоянства волновой функции. Был проведен расчет величины $\Delta \varepsilon_{1s}$ для водорода упрощенным методом: последовательным изменением ε добивались, чтобы волновая функция атома в плазме совпадала с волновой функцией изолированного атома в области $0 \leq r \leq r^*$, где r^* было выбрано равным 0.5. В результате получена зависимость $\Delta \varepsilon_{1s} = f(D)$. На всем диапазоне изменения D значения $\Delta \varepsilon$, рассчитанные методом В. Б. Нумерова, совпали с результатами упрощенного метода до четвертой значащей цифры. Время машинного счета уменьшилось примерно на порядок.

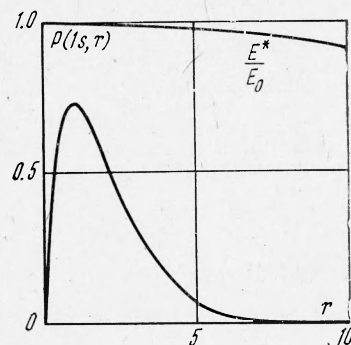
4. Были рассчитаны сдвиги энергии основных состояний азота, кислорода и аргона (основных компонент воздуха) при изменении дебаевского радиуса от 20 до 2000.

Многоэлектронные атомы рассматривались в одноэлектронном приближении методом самосогласованного поля с обменом Хартри — Фока [10]. Взаимодействие атома с окружающей плазмой учитывается в дебай-хюккелевском приближении.

При выводе системы уравнений для радиальных составляющих одноэлектронных волновых функций атома рассматривалось взаимодействие электрона с ядром и со всеми остальными электронами. Взаимодействие электронов между собой сводится к взаимодействию объемных сферически симметричных зарядов, которое можно свести к взаимодействию электрона с некоторым эффективным точечным зарядом $z_e(r)$. Следовательно, потенциальной энергией электрона является энергия взаимодействия электрона с некоторым точечным зарядом, который определяется следующим образом:

$$z(r) = N - z_e(r) \quad (4.1)$$

Очевидно, что при увеличении r заряд $z_e(r)$ приближается к $N - 1$. В дебай-хюккелевском приближении потенциальная энергия электрона в



Фиг. 1

поле ядра, всех остальных электронов и окружающей плазмы имеет вид

$$U(r) = \frac{N - z_e(r)}{r} \exp\left(-\frac{r}{D}\right) \quad (4.2)$$

Система уравнений для радиальных составляющих одноэлектронных волновых функций [10] с учетом (4.2) может быть записана в форме

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} Y(nl, r) \exp\left(-\frac{r}{D}\right) - 2\varepsilon_{nl, nl} - \frac{l(l+1)}{r^2} \times \\ \times P(nl, r) = X(nl, r) \exp\left(-\frac{r}{D}\right) + 2 \sum_{n \neq n'} \varepsilon_{nl, n'l} P(n'l, r) \end{aligned} \quad (4.3)$$

где функции $Y(nl, r)$ и $X(nl, r)$ определяются для каждой конкретной электронной конфигурации.

Так, для терма 4S атома азота (электронная конфигурация $1s^2 2s^2 2p^3$) система уравнений (4.3) имеет вид

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{d^2}{dr^2} + [2N - 2Y_0(1s, 1s, r) - 4Y_0(2s, 2s, r) - 6Y_0(2p, 2p, r)] \times \right. \\ \left. \times r^{-1} \exp(-r/D) - 2\varepsilon_{1s} \right\} P(1s, r) = - [2P(2s, r) Y_0(1s, 2s, r) + \\ + P(2p, r) Y_1(1s, 2p, r)] r^{-1} \exp(-r/D) \end{aligned} \quad (4.4)$$

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{d^2}{dr^2} + [2N - 2Y_0(2s, 2s, r) - 4Y_0(1s, 1s, r) - 6Y_0(2p, 2p, r)] \times \right. \\ \left. \times r^{-1} \exp(-r/D) - 2\varepsilon_{2s} \right\} P(2s, r) = - [2P(1s, r) Y_0(2s, 1s, r) + \\ + P(2p, r) Y_1(2s, 2p, r)] r^{-1} \exp(-r/D) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \left\{ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{2}{r} + [2N - 4Y_0(1s, 1s, r) - 4Y_0(2s, 2s, r) - 4Y_0(2p, 2p, r) + \right. \\ \left. + 0.8Y_2(2p, 2p, r)] r^{-1} \exp(-r/D) - 2\varepsilon_{2p} \right\} P(2p, r) = \\ = - \frac{2}{3} [Y_1(1s, 2p, r) P(1s, r) + Y_1(2s, 2p, r) P(2s, r)] r^{-1} \exp(-r/D) \end{aligned}$$

где для азота $N = 7$

$$Y_k(nl, nl, r) = r \int_0^\infty U_k(r, s) P(nl, s) P(n'l, s) ds$$

$$U_k(r, s) = \begin{cases} r^k/s^{k+1} & \text{для } r < s \\ s^k/r^{k+1} & \text{для } r > s \end{cases}$$

Для атома азота были рассчитаны сдвиги энергии терма 4S путем численного решения системы (4.4) методом В. Б. Нумерова [9] на ЭВМ М-220 для трех значений дебаевского радиуса — $D = 20, 200$ и 2000 . В качестве исходных значений взяты волновые функции [11].

Расчет упрощенным методом (см. п. 3) дал значения сдвигов $\Delta\varepsilon$, до 0.5% совпадающие с результатами, полученными при решении полной системы уравнений (4.4).

Сдвиг основного уровня кислорода и аргона был рассчитан только упрощенным методом.

Установлено, что зависимость сдвига основного уровня от дебаевского радиуса хорошо аппроксимируется выражением

$$\Delta\epsilon = z/D \quad (4.5)$$

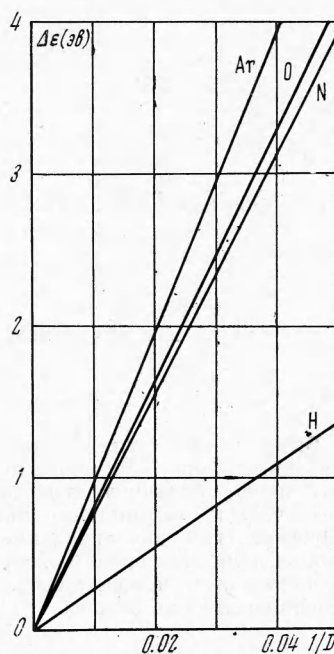
где для азота $z = 2.88$, для кислорода $z = 3.03$, для аргона $z = 3.64$.

Результаты расчетов сдвигов энергетических уровней в зависимости от D для $20 \leq D \leq 2000$ даны на фиг. 2.

5. В результате произведенных расчетов видно, что сдвиг ионизационного равновесия из-за далеких кулоновских взаимодействий определяется не только концентрацией электронов и температурой газа, но и сортом газа. С увеличением заряда ядра атома влияние кулоновского взаимодействия на потенциал ионизации увеличивается.

В [12] приведены экспериментальные данные для смещения порога фотоионизации с уровня $4s$ атома аргона. Непосредственное сравнение полученных в данной работе результатов с результатами эксперимента затруднено. Но необходимо отметить, что данные эксперимента превышают результаты расчета по Эккеру — Вайцелю, что справедливо и для приведенных выше расчетов.

В заключение автор благодарит В. Г. Севастьяненко за руководство работой, советы и замечания и Н. М. Кузнецова за полезную дискуссию.



Фиг. 2

Поступила 24 IV 1972

ЛИТЕРАТУРА

- Harris G. M. Attractive two-body interactions in partially ionized plasmas. Phys. Rev., 1962, vol. 125, No. 4.
- Бонч-Бруевич В. Л., Гласко В. Б. Энергетические уровни в дебаевском поле. Оптика и спектроскопия, 1963, т. 14, вып. 4.
- Rouse Carl A. Screened Coulomb Solutions of the Schrödinger Equation. Phys. Rev., 1967, vol. 159, No. 1.
- Smith C. R. Bound States in a Debye-Hückel Potential. Phys. Rev., 1964, vol. 134, No. 5A.
- Давидович Б. М., Левич В. Г., Толмачев В. В. Вычисление сдвигов энергий для вырожденных уровней многоэлектронных атомов. Докл. АН СССР, 1969, т. 186, № 1.
- Rouse Carl A. Screening of many-electron atoms. Phys. Rev. A, 1971, vol. 4, No. 1.
- Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика, т. 3. Квантовая механика. М., Физматгиз, 1963.
- Нумеров В. Б. Nou meroff V. Methode nouvelle de la détermination des orbites et le calcul des éphémérides entenant compte des perturbations. Тр. Главн. российск. астрофиз. обсерв., 1923, т. 2.
- Froese Charlotte. Numerical solution of the Hartree-Fock equations. Canad. J. Phys., 1963, vol. 41, No. 11.
- Хартри Д. Расчеты атомных структур. М., Изд-во иностр. лит., 1960.
- Братцев В. Ф. Таблицы атомных волновых функций. М.—Л., «Наука», 1966.
- Асиновский Э. И., Батенин В. М. Экспериментальное исследование непрерывного спектра плазмы аргона. Теплофизика высоких температур, 1965, т. 3.