

Л. А. ВАЙНШТЕЙН и Б. М. ЯВОРСКИЙ

**ФОТОИОНИЗАЦИЯ СЛОЖНЫХ АТОМОВ**

(Представлено академиком Г. С. Ландсбергом 10 II 1953)

В предыдущем сообщении<sup>(1)</sup> предложен метод вычисления вероятностей переходов оптического электрона между дискретными уровнями атома. В настоящем сообщении проведено вычисление вероятности перехода в непрерывный спектр. Процессы фотоионизации, а также обратные процессы рекомбинации с излучением существенны в ряде проблем астрофизики и физики газового разряда. Эффективные сечения этих процессов, связанные с формулой Милна, до сих пор вычислялись только по методу Хартри — Фока с помощью огромной вычислительной работы.

Эффективное сечение фотоионизации определяется следующим образом:

$$a_{\nu} = \frac{8\pi^3 e^2}{3c} \nu \sum \left| \int \psi_i \psi_f \mathbf{r} d\tau \right|^2. \quad (1)$$

Здесь  $\psi_i$  — волновая функция валентного электрона в исходном состоянии атома, нормированная на единицу;  $\psi_f$  волновая функция электрона в непрерывном спектре, нормированная на  $\delta(E - E')$ ;  $\nu$  — частота падающего кванта. Суммирование производится по всем возможным состояниям верхнего и нижнего уровней.

Волновую функцию представим в виде

$$\psi = R(r) P_l^m(\cos \vartheta) e^{i m \varphi}. \quad (2)$$

Если орбитальное число электрона в дискретном спектре  $l$ , то, вообще говоря, возможны переходы в непрерывный спектр с орбитальными числами  $l - 1$  и  $l + 1$ . После интегрирования по  $\theta$  и  $\varphi$  и суммирования по  $m$  получим:

$$a_{\nu} = 2,7 \cdot 10^{-18} (E + k^2) \sum \left[ \frac{Q_{l,l+1}}{4(l+1)^2 - 1} \rho_{l+1}^2 + \frac{Q_{l,l-1}}{4l^2 - 1} \rho_{l-1}^2 \right]. \quad (3)$$

Здесь  $E$  — энергия ионизации в единицах Ридберга;  $k^2 = \varepsilon$  — энергия электрона в непрерывном спектре в тех же единицах;  $Q$  — множитель, появляющийся от суммирования по  $m$ <sup>(1)</sup>;

$$\rho = \int R_{in} R_{fnl} r^3 dr. \quad (3')$$

Радиальные волновые функции дискретного спектра принимаем в виде<sup>(1)</sup>:

$$R_{in} = A r^{\frac{n^*}{0}-1} (r^{n-n_0} + a_1 r^{n-n_0-1} + \dots) e^{-\alpha n r}. \quad (4)$$

Коэффициенты  $a_j$  подбирались так, чтобы ортогонализировать  $R_{ln}$  со всеми более низкими состояниями валентного электрона с тем же значением  $l$ .

Функции  $R_{fkl}$  принимались в виде

$$R_{fkl} = [2z(r)]^{n_0'^* - 1} \frac{\prod_{s=1}^{n_0'^* - 1} \left( \frac{s^2 k^2}{z^2(r)} + 1 \right)^{1/2}}{(1 - e^{-2\pi z(r)/h})^{1/2}} r^{n_0'^* - 1} e^{-ikr} \frac{1}{\Gamma(2n_0'^*)} F\left(n_0'^* + \frac{iz(r)}{k}, 2n_0'^* 2ikr\right). \quad (5)$$

где  $n_0'^*$  — минимальное эффективное квантовое число оптического электрона с орбитальным квантовым числом  $l'$ .

Для построения функции  $z(r)$  рассмотрим ряд состояний дискретного спектра с орбитальным числом  $l'$  и различными  $n$ .  $R_{ln}$  достигает максимума в точке, удовлетворяющей уравнению

$$n_0'^* + \sum_j \frac{r}{r - a_j} - \alpha_n r = 0. \quad (6)$$

Обозначив через  $r_n$  максимальный из корней уравнения (6), положим

$$z(r_n) = n^* \alpha_n. \quad (7)$$

По ряду точек  $r_n$  можно построить функцию  $z(r)$ , монотонно убывающую от некоторого максимального значения до  $Z$ , где  $Z$  — заряд

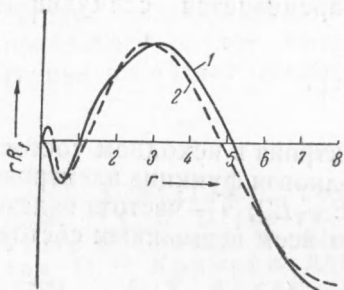


Рис. 1. Радиальная функция непрерывного спектра  $rR_{fkl}(r)$  для Ne при  $k=0$ . 1 — функция, вычисленная по (5); 2 — функция, вычисленная по методу Хартри — Фока

полученного в результате фотоионизации иона. Функцию  $z(r)$  не следует смешивать с эффективным зарядом, получающимся по методу Хартри — Фока. В отличие от этого заряда, функция  $z(r)$  существенно зависит от  $l'$  оптического электрона (для  $d$ - и  $f$ -электронов она близка к  $\text{const} = Z$ ). На рис. 1 приведена кривая  $rR_{fkl}$  для  $s$ -электрона Ne при  $k=0$ . Для сравнения приведена также кривая, полученная по методу Хартри — Фока (2). Для аналитического вычисления  $\rho$  в дальнейшем принято  $z(r) = z(r_m) = z_m = \text{const}$ . В качестве  $r_m$  выбрана точка, в которой  $R_{ln}$  достигает главного максимума. После интегрирования по  $r$  для основного состояния дискретного спектра (все  $a_j=0$ ) получаем:

$$\rho^2(k) = \rho^2(0) \Phi(k), \quad (8)$$

где

$$\rho^2(0) = 2^{2(n_0'^* + n_0'^* + 1)} \left( \frac{z_m}{\alpha_n} \right)^{2n_0'^* - 1} \frac{(n_0'^*)^2}{\Gamma(2n_0'^* + 1)} \frac{F_p^2}{\alpha_n^4} e^{-4z_m/\alpha_n}, \quad (9)$$

$$\Phi(k) = \frac{1}{1 - e^{-2\pi z_m/h}} \prod_{s=1}^{n_0'^* - 1} \left( \frac{s^2 k^2}{z_m^2} + 1 \right) \frac{e^{\frac{4z_m}{\alpha_n} \left( 1 - \frac{\alpha_n}{k} \text{arctg} \frac{k}{\alpha_n} \right)}}{\left( 1 + \frac{k^2}{\alpha_n^2} \right)^{2n_0'^* + 4}} \left( 1 - g_p \frac{k^2}{\alpha_n^2} \right)^2,$$

$$p = n_0'^* - n_0'^* + 2.$$

При  $p < 0$

$$F_p = g_p = 0.$$

При  $p \geq 0$

$$F_0 = \frac{1}{2n_0^{*}}; \quad g_0 = 0; \quad F_1 = 1 - \frac{z_m}{n_0^{*}\alpha_n}; \quad g_1 = 0;$$

$$F_2 = (2n_0^{*} + 1) \left( 1 - \frac{z_m}{n_0^{*}\alpha_n} \right)^2 - \left( \frac{z_m}{n_0^{*}\alpha_n} \right)^2; \quad g_2 = \frac{1}{F_2};$$

$$F_3 = 2 \left[ 2(n_0^{*} + 1) n_0^{*} \left( 1 - \frac{z_m}{n_0^{*}\alpha_n} \right)^3 + \right. \quad (10)$$

$$\left. + 2n_0^{*} \left( \frac{z_m}{n_0^{*}\alpha_n} \right)^3 - (n_0^{*} + 1) \left( \frac{3z_m}{n_0^{*}\alpha_n} - 1 \right) \right];$$

$$g_3 = \frac{1}{F_3} \left[ 3(n_0^{*} + 1) \left( 1 - \frac{z_m}{n_0^{*}\alpha_n} \right) + 2 \frac{z_m}{n_0^{*}\alpha_n} \right].$$

С помощью приведенных формул были вычислены значения  $a_\nu$  при  $k=0$  для основного состояния различных атомов. Результаты приведены в табл. 1. Для сравнения приведены значения  $a_\nu$ , полученные по методу Хартри — Фока (2). Следует заметить, что в работе (2) содержится ошибка, связанная с использованием неверных значений для коэффициентов  $Q_{l,l+1}$  и  $Q_{l,l-1}$ , приведенных в (3). В таблице приведены исправленные значения.

Таблица 1

Эффективные сечения фотоионизации  $a_\nu$  для некоторых элементов (при  $k=0$ )

Элемент	$a_\nu \cdot 10^{18}$ , в см <sup>2</sup>	
	вычисленные по (8)	вычисленные по методу Хартри — Фока
V . . . . .	59	64
C . . . . .	40	92
N . . . . .	9,8	38
Na . . . . .	0,05	0,1

Для атомов с небольшим числом валентных электронов получается достаточно хорошее согласие с расчетами по методу Хартри — Фока. При большом числе валентных электронов получаются сильно заниженные значения  $a_\nu$ , так как функция (4) в этом случае слишком быстро затухает. Для атомов, радиальные функции основного состояния которых вычислены по методу Хартри — Фока, можно получить достаточно правильные значения  $a_\nu$ , используя вместо (4) функцию

$$R_{in} = Ar^{n_0^{*}-1} (e^{-\alpha_n r} + be^{-\beta_n r}) \quad (11)$$

(параметры  $\alpha_n$ ,  $\beta_n$ ,  $b$  подбираются так, чтобы (11) возможно лучше совпадала с точной функцией). Для возбужденных состояний дискретного спектра в большинстве случаев достаточно использовать функцию  $R_{in}$  в виде (4).

Зависимость  $a_\nu$  от частоты  $\nu$  дается множителем  $\left( 1 + \frac{k^2}{E} \right) \Phi(k)$ .

Для очень больших  $k$   $a_\nu \sim \frac{1}{k}$  при  $p=1$  и  $a_\nu \sim \frac{1}{k}$

при  $p > 1$ . Характер зависимости  $a_\nu(k)$  при небольших  $k$  определяется соотношением  $z_m$  и  $\alpha_n$ .

С помощью формулы Милна<sup>(4)</sup> можно вычислить эффективное сечение рекомбинации с излучением:

$$a_e = 2 \left( \frac{h\nu}{m\nu c} \right)^2 a_\nu \quad (12)$$

или

$$a_e = 2,67 \cdot 10^{-5} (E + k^2) \frac{1}{k^2} a_\nu \quad (12')$$

При этом использовано, что  $k = \varepsilon^{1/2}$  может быть выражено в виде  $k = 137 v/c$ , где  $v$  — скорость электрона,  $c$  — скорость света.

Число актов рекомбинации с излучением в единице объема положительного столба плазмы газового разряда за единицу времени равно  $N_0 N_e S$ , где  $N_0$  — концентрация нейтральных атомов,  $N_e$  — концентрация электронов и  $S$  — величина, определяемая следующим образом:

$$S = \int_0^\infty a_e(v) v f(v) dv, \quad (13)$$

$f(v)$  — функция распределения электронов по скоростям, нормированная на единицу.

Переходя к атомным единицам и используя формулы (3), (8), (12), получим

$$S = 2,2 \cdot 10^{-6} E^3 T^{3/2} \left[ \rho_{l-1}^2(0) q_{l-1} \int \left( 1 + \frac{k^2}{E} \right) \Phi_{l-1}(k) e^{-k^2/\gamma T} k dk + \right. \\ \left. + \rho_{l+1}^2(0) q_{l+1} \int \left( 1 + \frac{k^2}{E} \right) \Phi_{l+1}(k) e^{-k^2/\gamma T} k dk \right]; \quad (14)$$

$$\gamma = 6,37 \cdot 10^{-6}; \quad q_{l-1} = \sum \frac{Q_{l,l-1}}{4l^2 - 1}; \quad q_{l+1} = \sum \frac{Q_{l,l+1}}{4(l+1)^2 - 1};$$

$T$  — электронная температура.

Всесоюзный заочный институт  
текстильной и легкой промышленности

Поступило .  
10 II 1953

#### ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- <sup>1</sup> Л. А. Вайнштейн, Б. М. Яворский, ДАН, 87, 919 (1952). <sup>2</sup> M. Sheaton, Proc. Roy. Soc., A 208, 408, 418 (1951). <sup>3</sup> D. Bates, Mon. Not. Roy. Astr. Soc., 106, 432 (1946). <sup>4</sup> В. Л. Грановский, Электрический ток в газах, 1952, стр. 273.