

К. В. Бычков, А. Ф. Холтыгин

ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ
ПРОЦЕССЫ В
АСТРОФИЗИЧЕСКОЙ
ПЛАЗМЕ

МОСКВА — 2008

УДК 52-64
ББК 22-632

Р е д а к т о р

д.ф.м.н., проф. каф. астрофизики СПбГУ

В.А.Гаген-Торн

Р е ц е н з е н т ы

д.ф.м.н., проф. каф. астрофизики СПбГУ

Д.И.Нагирнер

к.ф.м.н., ст. научн. сотр. астрон. обс. СПбГУ

Т.Е.Дервиз

*Печатается по постановлению
Редакционно-издательского совета
Санкт-Петербургского государственного университета*

Бычков К.В., Холтыгин А.Ф.

БХ25

Элементарные процессы в астрофизической плазме: Учебное пособие.
Издание второе. М, Изд-во ГАИШ МГУ, 2008 (199 стр.)

В пособии дано введение в атомную спектроскопию и теорию столкновений для студентов астрофизических специальностей. Изложены основы спектроскопии водородоподобных атомов и многоэлектронных атомных систем. Дано введение в теорию столкновений атомов и ионов с электронами. Описаны фотопроцессы, процессы диэлектронной рекомбинации и перезарядки в астрофизической плазме. Изложены методы анализа свечения плазмы низкой плотности, как однородной, так и не однородной. Описаны методы диагностики плазмы.

Пособие предназначено для студентов и аспирантов астрофизических специальностей университетов и может быть полезно научным сотрудникам, работающим в различных областях астрофизики, атомной спектроскопии и физики плазмы. Во втором издании исправлены замеченные опечатки, обновлен список баз атомных данных и более подробно изложены вопросы диагностики плазмы в § 7.5.

Библиография 140 назв. Табл. 38, Илл. 59

Темплан 2008 г.

ББК 22-632

© К.В.Бычков, А.Ф.Холтыгин, 2008

© Издательство ГАИШ МГУ, 2008

ISBN 5-9900380-4-X

Оглавление

1	Астрофизическая плазма	9
1.1	Астрофизическая плазма	9
1.2	Элементарные процессы в плазме	11
1.3	Скорости и сечения элементарных процессов	12
1.3.1	Сечения процессов столкновения	12
1.3.2	Скорости процессов столкновения	13
2	Атом водорода и водородоподобные ионы	15
2.1	Уравнение Шредингера для частицы в кулоновском поле	15
2.2	Уровни энергии и волновые функции	16
2.2.1	Волновые функции	20
2.3	Тонкая структура уровней	21
2.3.1	Зависимость массы электрона от скорости	21
2.3.2	Спин-орбитальное взаимодействие	22
2.3.3	Расщепление уровней nl	23
3	Спектры неводородоподобных атомов и ионов	27
3.1	Приближение центрального поля	27
3.1.1	Волновые функции атома в приближении центрального поля	28
3.1.2	Чётность атомных состояний	31
3.1.3	Состояния электрона в центральном поле. Электронные конфигурации	32
3.2	Общее описание атомных состояний неводородоподобных ионов	33
3.2.1	LS -связь. Термы и уровни	34
4	Фотопроцессы	41
4.1	Радиационные переходы между дискретными уровнями	41
4.1.1	Электромагнитное излучение. Типы радиационных переходов	41
4.1.2	Мультиплеты и линии. Правила отбора	49
4.1.3	Радиационные переходы в атоме водорода и водородоподобных ионов	51
4.2	Фотоионизация и фоторекомбинация	53
4.2.1	Сечения фотоионизации	53
4.2.2	Скорости фотоионизации	66
4.2.3	Скорости фоторекомбинации	70
4.3	Фотонагрев и рекомбинационное охлаждение	74

4.3.1	Фотоионизационный нагрев	74
4.3.2	Рекомбинационные потери энергии	78
4.3.3	Полные скорости рекомбинационного охлаждения	82
4.4	Масштабные соотношения для скоростей фотопроцессов	83
4.5	Излучение плазмы в непрерывном спектре	85
4.5.1	Излучение при рекомбинациях и свободно-свободных переходах	85
4.5.2	Двухфотонное излучение	87
5	Столкновения атомов и ионов с электронами и другими частицами	89
5.1	Рассеяние в центральном поле	90
5.1.1	Упругое рассеяние	90
5.1.2	Сечение упругого рассеяния	93
5.1.3	Неупругое рассеяние	95
5.2	Приближения Борна, Кулона-Борна и искажённых волн. Аппроксимации сечений	96
5.2.1	Приближения Борна и Кулона-Борна	96
5.2.2	Приближение искажённых волн	101
5.3	Методы сильной связи и R -матрицы. Резонансы в сечениях возбуждения	102
5.3.1	Метод сильной связи	103
5.4	Результаты расчета сечений возбуждения. Силы столкновений	104
5.5	Возбуждение атомов при столкновениях с протонами и другими частицами	107
5.6	Ионизация атомов и ионов	109
6	Диэлектронная рекомбинация и перезарядка	115
6.1	Диэлектронная рекомбинация	115
6.1.1	Скорость диэлектронной рекомбинации	116
6.1.2	Формула Берджеса и ее модификации	120
6.1.3	Диэлектронная рекомбинация при низких температурах	121
6.2	Сечения и скорости реакций перезарядки	124
7	Излучение и диагностика астрофизической плазмы	129
7.1	Ионизационное состояние плазмы	129
7.1.1	Уравнения ионизационного баланса	129
7.1.2	Распределение атомов по стадиям ионизации	132
7.2	Механизмы излучения плазмы в линиях	132
7.2.1	Рекомбинационный механизм	136
7.2.2	Образование линий при столкновениях с электронами	138
7.2.3	Селективные механизмы образования линий	142
7.3	Излучение астрофизической плазмы	147
7.3.1	Мера эмиссии плазмы	147
7.3.2	Дифференциальная мера эмиссии плазмы	149
7.3.3	Рентгеновские спектры звезд	150
7.3.4	Спектры газовых туманностей	152
7.4	Высвечивание плазмы. Функция высвечивания	156
7.4.1	Стационарная функция высвечивания	158
7.5	Диагностика астрофизической плазмы	160

7.5.1	Общая постановка задачи о диагностике плазмы	160
7.5.2	Элементарные методы диагностики	161
7.5.3	Диагностика горячей плазмы по рентгеновским линиям гелиеподобных ионов	165
7.5.4	Диагностика неоднородной плазмы	169
8	Каталоги и базы атомных данных	173
8.1	Базы данных	173
8.2	Проекты и персональные WWW страницы	175
A	Единицы физических величин	183
A.1	Системы физических величин и атомные константы	183
A.2	Основные физические константы, связанные с атомной спектро- скопией	183
A.3	Система атомных единиц	183
A.3.1	Переводные множители и вспомогательные соотношения	185
B	Радиационные параметры водорода и гелия	187
B.1	Радиационные параметры водорода и водородоподобных ионов	187
B.2	Радиационные параметры для атома гелия	192
C	Параметры неводородоподобных ионов	195
C.1	Сечения фотоионизации	195
C.2	Параметры для расчета скоростей ионизации электронным уда- ром атомов и ионов	196
C.3	Скорости перезарядки	197

ПРЕДИСЛОВИЕ

Настоящее учебное пособие посвящено изложению основ спектроскопии и теории столкновений для студентов астрофизических специальностей университетов. Рассмотрены основные элементарные процессы, определяющие состояние астрофизической плазмы. Описаны процессы с участием атомов и ионов, фотонов и электронов. Предполагается также получение сведений о поиске атомных данных в сети INTERNET и их использования при анализе свечения и диагностике астрофизической плазмы.

В значительной степени настоящая книга представляет собой переработанный вариант книги *Теоретическая атомная спектроскопия* [118], а также включает в себя материалы каталога [137] и курса *Элементарные процессы в астрофизической плазме*, предназначенного для студентов астрономов старших курсов, специализирующихся по специальности *Астрофизика* и читаемого в разные годы авторами настоящего пособия в ГАИШе и на астрономическом отделении математико-механического факультета СПбГУ.

В книге большинство формул не выводится, а приводится в готовом виде, за исключением главы 5, в которой описан вывод стандартных формул теории рассеяния на силовом центре. Однако к большинству формул даются пояснения, позволяющие проанализировать физику элементарных процессов в плазме и выяснить, насколько важны те или иные из них в зависимости от условий в плазме.

Источниками изложения материала пособия послужили известные учебники Ландау и Лифшица [109, 110], Собельмана [120, 121] и Левича [112], а также монографии Юциса и Савукина [126], Юциса и Бандзайтиса [125], Никитина и Рудзикаса [115]. Содержание настоящей книги дополняет материал учебных пособий Нагирнера [113, 114] и может быть использовано совместно с ними при изучении теории атома и атомных спектров.

В книге используется система единиц СГС, как наиболее удобная для теоретической физики и астрофизики. Для удобства читателя в приложении А к книге даются основные физические константы, связанные с теорией атома, описана система атомных единиц Хартри и дана таблица переводных множителей для единиц энергии, используемых в атомной спектроскопии.

Пособие дополнено приложениями В и С, позволяющими рассчитывать скорости атомных процессов для водорода, и ионов гелия, а также ряда неводородоподобных ионов. Книга снабжена обширной библиографией, дающей возможность рассчитать или найти результаты уже выполненных расчетов сечений и скоростей элементарных процессов, в том случае, если для их расчета нет готовых формул, приведенных в пособии. Библиография сгруппирована по четырем разделам: А. Ори-

гинальные статьи (ссылки 1-96), В. Монографии, учебники и учебные пособия (ссылки 97-128), С. Каталоги и справочники (ссылки 129-139), D. Обзорные статьи (ссылки 140-144).

Во втором издании исправлены замеченные опечатки, обновлен список баз атомных данных и более подробно изложены вопросы диагностики плазмы в § 7.5.

Книга предназначена для студентов и аспирантов астрофизических специальностей и может быть также полезна научным сотрудникам, работающим в различных областях астрофизики, атомной спектроскопии и физики плазмы.

Авторы благодарны сотрудникам кафедры астрофизики СПбГУ и Астрономического института СПбГУ за внимание к содержанию рукописи и сделанные ими полезные замечания.

Настоящая книга написана при поддержке ведущей научной школы НШ-8542.2006.2 и грантов РФФИ 05-02-16695 и 06-02-17096а.

Глава 1

Астрофизическая плазма

1.1 Астрофизическая плазма

ss.AstrPlasma

Большинство астрофизических объектов (звёзды, туманности, галактики и т.д.) состоят из плазмы, т.е. из полностью или частично ионизованного газа. Прежде чем перейти к описанию свойств плазмы, введем используемые в дальнейшем обозначения атомов и ионов. Произвольные атомы в плазме будем обозначать большими буквами латинского алфавита: X, Y, Z и т.д. Однократно ионизованный ион какого-либо элемента X будем обозначать X^+ . Многократно ионизованный атом — X^{n+} , где n — число оторванных электронов.

Состояние плазмы характеризуется концентрациями составляющих её частиц: атомов, ионов, электронов и протонов. Концентрация атома (иона) с номером i традиционно обозначается n_i и численно равна числу данных атомов (ионов) в единичном объёме — одном кубическом сантиметре. Иногда для ясности явно указывают, концентрация какого атома или иона рассматривается. Концентрацию атомов водорода обозначают $n(\text{H})$, гелия — $n(\text{He})$, ионизованного гелия — $n(\text{He}^+)$, 10-кратно ионизованного магния $n(\text{Mg}^{10+})$ и т.д. Концентрация электронов обозначается n_e , протонов — n_p . Буквой n будем обозначать полную концентрацию всех атомов в плазме:

$$n = \sum_X \sum_{j=0} n(X^{j+}) = n(\text{H}) + n(\text{He}) + n(\text{He}^+) + n(\text{Li}) + \dots \quad (1.1.1) \quad \boxed{\text{Eq.n_total}}$$

где суммирование выполняется по всем химическим элементам X и всем ионам данных элементов, присутствующим в плазме.

Астрофизическая плазма обычно электрически нейтральна, т.е., концентрации положительных и отрицательных зарядов одинаковы. В этом случае

$$n_e = \sum_X \sum_{j=1} j n(X^{j+}) = n(\text{H}^+) + n(\text{He}^+) + 2n(\text{He}^{2+}) + n(\text{Li}^+) + \dots \quad (1.1.2) \quad \boxed{\text{Eq.n_e}}$$

Суммирование производится по всем ионам ($j \geq 1$) химических элементов X.

В данном пособии рассматривается *разреженная* плазма, или *плазма низкой плотности*. Она удовлетворяет следующим критериям:

- Плотность плазмы достаточно низка ($n < 10^{14} \text{ см}^{-3}$), поэтому роль процессов с участием трех и более частиц (например, тройной рекомбинации) пренебрежимо мала.
- Оптическая толщина плазмы в континууме и частотах большинства линий мала.

Для разреженной плазмы при определении её излучательных свойств необходимо знать только полную массу излучающего газа, его химический состав и распределение газа по температуре и плотности. Для астрофизической плазмы почти всегда можно полагать, что распределение частиц с массой m по модулю скорости v является максвелловским:

$$f(v)dv = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi k_B T} \right)^{3/2} v^2 e^{-mv^2/2k_B T} dv. \quad (1.1.3) \quad \boxed{\text{Eq.MaxDistr}}$$

Здесь T — температура, k_B — постоянная Больцмана (см. приложение A.1).

В простейшем случае однородной по температуре и плотности плазмы для её описания достаточно задания средней температуры $\langle T \rangle$, средней концентрации $\langle n \rangle$ и электронной концентрации n_e плазмы. Для неоднородной плазмы необходимо знание распределения температуры и плотности плазмы во всем её объеме: $T(\mathbf{R})$, $n_e(\mathbf{R})$ и $n(\mathbf{R})$, где \mathbf{R} — координаты рассматриваемого элементарного объема плазмы.

Атомы и ионы в плазме могут находиться не только в основном состоянии, которому традиционно присваивается номер $k = 1$ и характеризуем минимально возможной энергией данного атома E_1 , но и в возбужденных состояниях с номерами $k > 1$ и с энергиями $E_k > E_1$. Будем обозначать через X_k возбужденное состояние с номером k атома (иона) X. Концентрация атомов в возбужденном состоянии k обозначается n_k и обычно называется *населённостью* уровня. Для большей ясности можно указать к какому атому или иону относится данное возбужденное состояние, заменив n_k на $n(X_k)$.

Населённости уровней для плазмы, находящейся в состоянии *термодинамического равновесия* могут быть описаны формулой Больцмана:

$$\frac{n_k}{g_k} = \frac{n_1}{g_1} \exp\left(-\frac{\Delta E_k}{k_B T}\right), \quad \Delta E_k = E_k - E_1, \quad (1.1.4) \quad \boxed{\text{Eq.BoltsmDistr}}$$

где g_k — статистический вес уровня (число квантовых состояний, имеющих одну и ту же энергию), а ΔE_k — его энергия возбуждения.

1.2 Элементарные процессы в плазме

В данном пособии мы будем рассматривать *атомно-ионную* плазму. Анализ процессов с участием молекул или молекулярных комплексов можно найти, например, в монографии [119].

Излучение плазмы образуется при радиационных переходах в дискретном или непрерывном спектрах атомов и ионов. Возбужденные состояния атомов и ионов, радиационные переходы с которых или на которые формируют спектр излучения, образуются при элементарных процессах столкновения атомов (ионов) с фотонами, электронами, протонами и другими частицами (см. рис. 1.1):



Eq.ElemColl

Здесь Y^* — состояние атома (иона) X , образующееся в результате столкновения с частицей A (фотоном, электроном, протоном и т.д.), в ходе которого могут образовываться и другие частицы (фотоны, электроны, ионы и нейтральные атомы).

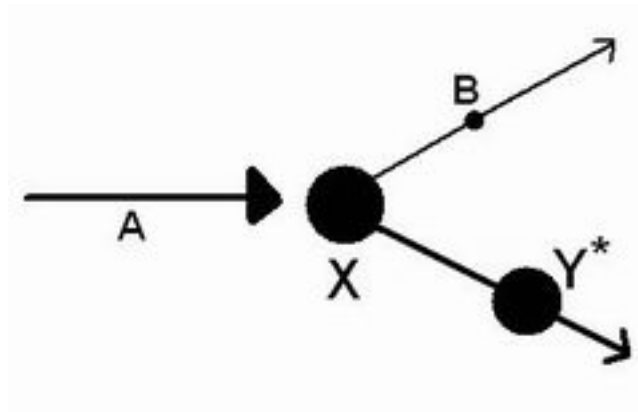


Рис. 1.1. Общая картина процесса столкновения

Fig.ScatProc

Если суммарная кинетическая энергия соударяющихся частиц не меняется и только перераспределяется между частицами, а изменяются направления движения частиц, то столкновение называется *упругим*. В *неупругом* столкновении изменяется внутреннее состояние и энергия сталкивающихся частиц (они переходят на другие уровни энергии).

Упругие столкновения приводят к перераспределению скоростей частиц, участвующих в процессе столкновения, и установлению равновесного распределения частиц по скоростям и не меняют их состояние возбуждения.

В ходе неупругого столкновения могут быть оторваны один (иногда несколько) электронов от атома X . В этом случае $Y = X^+$ или X^{n+} , а про-

цесс столкновения называется *ионизацией*. Возможно также, что ионизационное состояние атома X при столкновении не меняется (т. е. $X=Y$), тогда процесс столкновения называется *возбуждением* (при энергии состояния атома до столкновения $E(X)$, меньшей энергии атома после столкновения $E(X^*)$). В случае, если $E(X) > E(X^*)$, процесс столкновения называется *деактивацией*. Если в результате процесса столкновения атом (ион) присоединяет электрон (электроны), процесс столкновения является *рекомбинацией*.

В условиях астрофизической плазмы важны процессы с поглощением или излучением квантов электромагнитного излучения (фотонов) $h\nu$ (*фотопроцессы*), процессы *столкновения* с электронами, протонами и атомами водорода и процессы обмена электронами между атомами или ионами (процесс *перезарядки*). Эти процессы описаны в соответствующих главах книги.

1.3 Скорости и сечения элементарных процессов

1.3.1 Сечения процессов столкновения

Основными характеристиками процесса столкновения являются его *сечение* и *скорость*. Рассмотрим процесс столкновения частиц типа A с атомами (ионами) мишени X (формула (1.2.1) на предшествующей странице) в цилиндре с сечением 1 см^2 (рис. 1.2). Число частиц типа A , проходящих за одну секунду через единичную площадку площадью

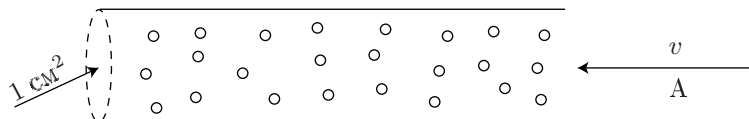


Рис. 1.2. Столкновения в элементарном объеме.

Fig. Targets

1 см^2 (плотность потока частиц) равно

$$j_A(v)dv = n_A(v) v dv,$$

где

$$n_A(v)dv$$

есть концентрация частиц сорта A , имеющих скорости в интервале от v до $v + dv$.

Эффективным поперечным сечением столкновения¹ называется величина, характеризующая вероятность перехода сталкивающихся частиц в результате их рассеяния (упругого или неупругого) в какое-либо

¹Ещё *сечением столкновения* или *сечением рассеяния*.

конечное состояние. Численно сечение столкновения равно отношению числа $dN_{\text{coll}}(v)$ таких переходов за 1 с, приходящихся на один атом мишени, вызываемых частицами со скоростями в интервале $(v, v + dv)$ к плотности потока рассеиваемых частиц:

$$\sigma = \sigma(v) = \frac{dN_{\text{coll}}(v)}{j_A(v)dv}. \quad (1.3.1) \quad \boxed{\text{Eq. SigmaColl}}$$

Величина $dN_{\text{coll}}(v)$ — число переходов в единицу времени — имеет размерность обратной секунды (с^{-1}). Поэтому сечение столкновения характеризуется размерностью площади и измеряется в квадратных сантиметрах. Обычно сечение столкновения сильно зависит от взаимной скорости v (энергии $E = mv^2/2$) рассеиваемых частиц и его рассматривают в системе центра масс сталкивающихся частиц.

В часто встречающихся случаях, когда массы частиц сильно различаются (например, при столкновениях атомов и ионов с электронами) различают относительно медленно движущийся атом-мишень и сталкивающуюся с ним быструю частицу. В этом случае можно рассматривать медленно движущиеся атомы как неподвижные мишени, сталкивающиеся с возбуждающими частицами со скоростью v (энергией E).

1.3.2 Скорости процессов столкновения

Число процессов неупругого рассеяния в единичном объеме в единицу времени $dN_{\text{coll}}(v)$, в результате которого происходит переход атома мишени X в состояние Y^* определяется зависимостью сечения рассеяния от скорости рассеиваемых частиц и от функции $f(v)$ их распределения по скоростям. Концентрация частиц типа A , имеющих скорости в интервале $(v, v+dv)$ равна

$$n_A(v)dv = n(A)f(v)dv,$$

где $n(A)$ — полная концентрация частиц данного типа.

Для вычисления $N_{\text{coll}}(v)$ рассмотрим число переходов $X \rightarrow Y^*$ при столкновениях с частицами типа A , проходящими через единичную площадку, перпендикулярную их скорости. За единицу времени через единичную площадку пройдут $n_A(v)v dv$ рассеиваемых частиц. Число столкновений с атомом мишени, приходящихся на один атом (ион) мишени X , равно

$$dN(v) = \sigma(v) v n_A(v).$$

Тогда полное число столкновений $X \rightarrow Y^*$ в единичном объеме равно

$$dN_{\text{coll}}^{\text{tot}}(v) = n(A) n(X) \sigma(v) f(v) v dv.$$

Скорость процесса столкновения $R_{X \rightarrow Y^*}(v)$ частицами со скоростями в интервале $(v, v + dv)$ равна числу актов столкновения в единичном объеме в единицу времени, приходящихся на один атом мишени и одну рассеиваемую частицу. Из вышеприведенных соотношений легко получить, что

$$R_{X \rightarrow Y^*}(v)dv = \sigma(v)f(v)v dv.$$

Для получения полной скорости столкновения необходимо выполнить интегрирование по всем возможным скоростям рассеиваемых частиц. Тогда

$$R_{X \rightarrow Y^*} = \int_{v_{\min}}^{\infty} R_{X \rightarrow Y^*}(v)dv = \int_{v_{\min}}^{\infty} \sigma(v)f(v)v dv. \quad (1.3.2) \quad \boxed{\text{Eq. CollRate}}$$

Здесь v_{\min} — минимальная скорость возбуждающей частицы, при которой еще возможен рассматриваемый переход. Величина $R_{X \rightarrow Y^*}(v)$ имеет размерность $[\text{см}^3\text{с}^{-1}]$.

При максвелловском распределении скоростей рассеиваемых частиц функция $f(v)$ зависит только от массы частиц и от их температуры T , поэтому скорость процесса столкновения $R_{X \rightarrow Y^*} = R_{X \rightarrow Y^*}(T)$.

Число столкновений с атомами мишени X , приходящихся на одну сталкивающуюся частицу, имеющую скорость v , за 1 с в элементарном объеме 1см^3 , равно $N_{\text{coll}}^{(1)}(v) = \sigma(v)vn(X)$. За это время частица проходит расстояние $L^{(1)} = v$. Отношение

$$\lambda_v = \frac{N_{\text{coll}}^{(1)}(v)}{L^{(1)}} = \frac{1}{\sigma(v)n(X)},$$

равно отношению числу столкновений, которые претерпевает частица, к пройденному ей расстоянию. То есть λ_v — это среднее расстояние, проходимое частицей между столкновениями. Эта величина традиционно называется *длиной свободного пробега* частицы A , движущейся со скоростью v .

Длина свободного пробега тем меньше, чем больше сечение рассеяния и концентрация плазмы. В плотных атмосферах звезд длины свободного пробега частиц исчисляются сантиметрами, тогда как в разреженных газовых туманностях и межзвездной среде могут достигать астрономических единиц.

Глава 2

Атом водорода и водородоподобные ионы

s.H-like

В изложении материала настоящей главы мы будем следовать, главным образом, монографиям [\[118, 121\]](#), опуская несущественные для астрофизиков детали расчетов.

2.1 Уравнение Шредингера для частицы в кулоновском поле

s.EqShrC1Fld

Простейшей атомной системой является атом водорода, состоящий из атомного ядра (в данном случае протона) с зарядом $+e$ и массой $M = m_p$ и электрона с зарядом $-e$ и массой m_e . К подобному типу простейших атомных систем относятся водородоподобные ионы, с ядром, имеющим заряд $+Ze$ и массу $M = M_Z \approx 2Zm_p$, и одним электроном. К таким ионам принадлежат ионизованный атом гелия He^+ , 11-кратный ион магния Mg^{11+} и т.п. Задача об относительном движении электрона и ядра водорода или водородоподобного иона сводится к задаче о движении частицы с эффективной (приведённой) массой

$$\mu = \frac{m_e M}{m_e + M} \quad (2.1.1) \quad \text{Eq.EffMass}$$

в кулоновском поле ядра $-Ze^2/r$. Уравнение Шредингера для частицы в поле $-Ze^2/r$ имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}}\psi = \left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta - \frac{Ze^2}{r} \right) \psi = E\psi. \quad (2.1.2) \quad \text{Eq.ShrCoulField}$$

Здесь $\hat{\mathcal{H}}$ – оператор Гамильтона (гамильтониан) атома, Δ – оператор Лапласа, волновая функция $\psi = \psi(r, \theta, \varphi)$, где r, θ, φ – сферические координаты радиус-вектора \mathbf{r} . Волновая функция ψ , являющаяся решением

уравнения [\(Eq.ShrCoulField 2.1.2\)](#), описывает стационарное состояние атомной системы с определенным значением энергии E .

При движении в центрально-симметричном поле сохраняется момент количества движения частицы, поэтому среди стационарных состояний имеются такие, которые характеризуются также определенным значением квадрата момента количества движения и значением одной из компонент момента. В качестве этой компоненты обычно выбирается z -компонента момента, т.е. рассматриваются стационарные состояния с определенными значениями энергии E , квадрата момента l^2 и z -компоненты момента l_z .

В квантовой механике квадрат момента количества движения может принимать лишь дискретный ряд значений $\hbar^2 l(l+1)$, где $\hbar = h/2\pi$; h — постоянная Планка, $l = 0, 1, 2, \dots$, z -компонента момента может иметь значения $\hbar m$, где $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ при дополнительном условии $|m| \leq l$. Размерность постоянной Планка $[г \cdot см^2/с]$ совпадает с размерностью момента количества движения $\mathbf{l} = m[\mathbf{r}, \mathbf{v}]$.

Переменные в уравнении [\(Eq.ShrCoulField 2.1.2\)](#) разделяются. Решение уравнения ищется в виде

$$\psi = R(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (2.1.3) \quad \boxed{\text{Eq. psiRY}}$$

где $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ — сферические функции. Функция $R_{nl}(r)$ называется радиальной частью волновой функции, или просто радиальной волновой функцией, или радиальной орбиталью. О функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ говорят как об угловой части волновой функции. Для удобства функцию $R_{nl}(r)$ представляют в виде:

$$R_{nl}(r) = \frac{1}{r} P_{nl}(r),$$

что позволяет упростить уравнение для радиальной части волновой функции. Функция $P_{nl}(r)$ часто также называется радиальной волновой функцией. При подстановке выражения [\(Eq.psiRY 2.1.3\)](#) в [\(Eq.ShrCoulField 2.1.2\)](#) уравнение для $P(r)$ примет следующий вид:

$$\frac{\hbar^2}{\mu} \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{Ze^2}{r} \right) P(r) = EP(r). \quad (2.1.4) \quad \boxed{\text{Eq.RadShrEq}}$$

Первое слагаемое в левой части уравнения соответствует оператору кинетической энергии электрона, второе — его центробежной энергии, последнее — энергии электрона в кулоновском поле атомного ядра с зарядом Ze .

2.2 Уровни энергии и волновые функции

Значение $E \geq 0$ соответствует ситуации, когда полная энергия системы положительна. Уравнение Шредингера [\(Eq.ShrCoulField 2.1.2\)](#) при $E \geq 0$ имеет конечные и непрерывные решения при любых значениях E и l , при этом

состояния атома называются состояниями *непрерывного спектра*. При $E < 0$ решения уравнение Шредингера существуют лишь при некоторых дискретных отрицательных значениях

$$E = E_n = -\frac{1}{2} \frac{Z^2 \mu e^4}{n^2 \hbar^2} = -\frac{Z^2 \text{Ry}}{n^2}, \quad (2.2.1) \quad \boxed{\text{Eq. HZ-En}}$$

где n – целое число. Число n носит название главного квантового числа. Величина

$$\text{Ry} = \frac{\mu e^4}{2\hbar^2}$$

называется постоянной Ридберга. Используя определение эффективной массы μ (2.1.1), получим выражение для энергии связанных состояний в кулоновском поле:

$$E_n = -\frac{Z^2 \text{Ry}_\infty}{n^2} \cdot \frac{1}{1 + m_e/M}. \quad (2.2.2) \quad \boxed{\text{Eq. RyZ}}$$

В формуле (2.2.2) первый множитель — энергия уровня n водородоподобного иона в предположении бесконечно большой массы ядра. Второй — поправка, учитывающая конечность массы ядра. Значение $\text{Ry}_\infty = 109737 \text{ см}^{-1}$ — постоянная Ридберга для бесконечной массы M ядра. Величина $m_e e^4 / \hbar^2 = 2\text{Ry}_\infty$ ($\approx 27.07 \text{ эВ}$) принята в качестве атомной единицы энергии.

При заданном значении n квантовое число l может принимать n различных значений: $0, 1, 2, \dots, n-1$. Каждому значению l соответствует $(2l+1)$ состояний, отличающихся значениями квантового числа m , называемого магнитным квантовым числом. Число m определяет величину проекции $m\hbar$ орбитального момента $l\hbar$ на ось z и принимает значения $m = -l, -(l-1), \dots, l-1, l$.

Энергия атома в состоянии, характеризуемом квантовыми числами nlm , определяется только главным квантовым числом n и не зависит от l и m . К уровню n относятся n^2 различных состояний с одинаковыми энергиями, отличающихся квантовыми числами l и m . Таким образом, для частицы в кулоновском поле имеет место n^2 -кратное вырождение уровня.

Независимость энергии от m имеет простой физический смысл. В поле, обладающем центральной симметрией, энергия не может зависеть от ориентации момента количества движения в пространстве. Независимость энергии уровней от l является спецификой кулоновского поля и в общем случае центрально-симметричного поля не имеет места. Схема уровней энергии атома водорода, соответствующая формуле (2.2.2), изображена на рис. 2.1 на следующей странице.

Кроме орбитального момента, каждый электрон имеет собственный момент количества движения называемый *спином* электрона, имеющий

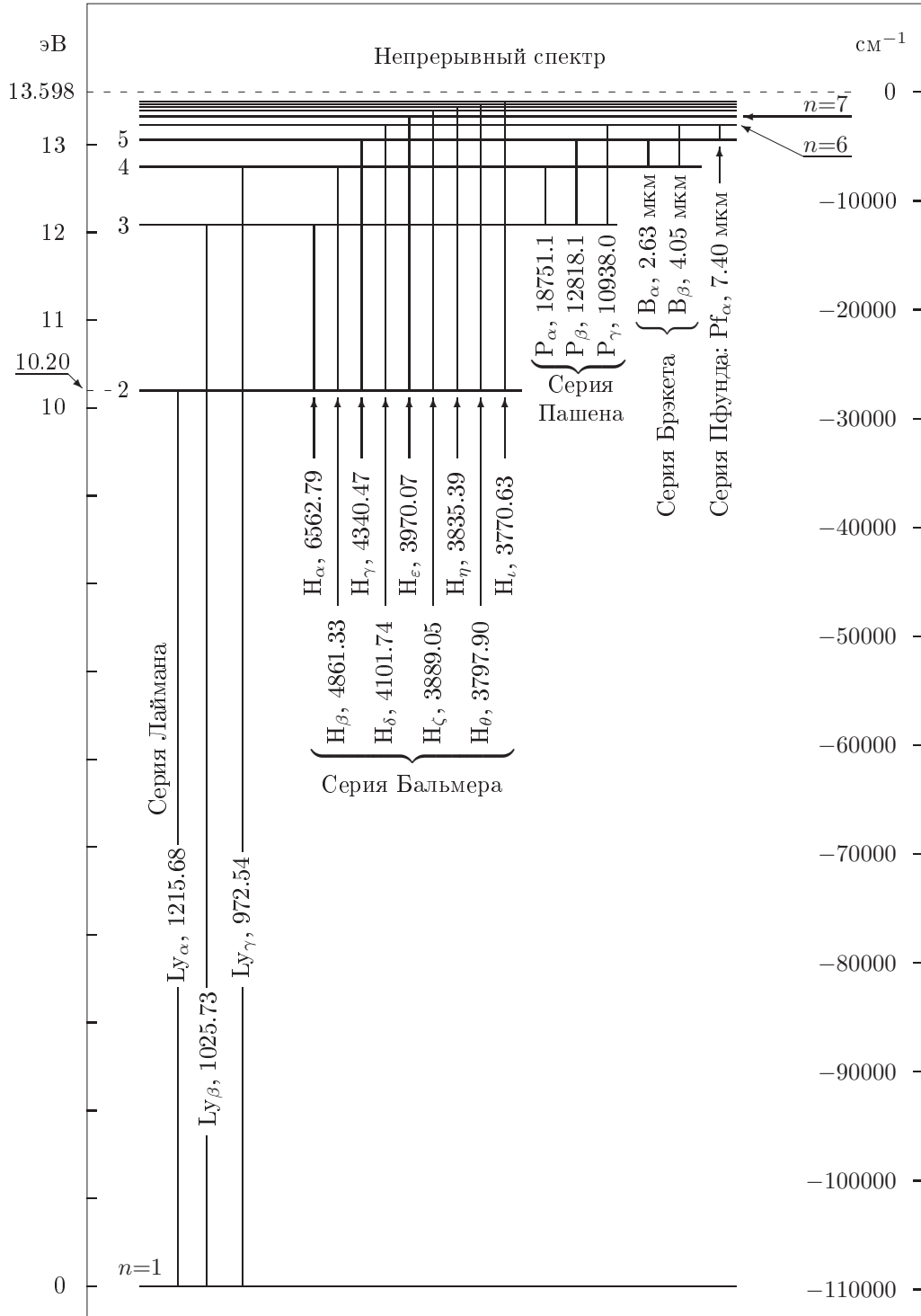


Рис. 2.1. Схема уровней энергии атома водорода по [Sobelman1977, 121]. Левая шкала — энергии возбуждения уровней относительно основного состояния в электронвольтах, правая шкала — выраженные в обратных сантиметрах энергии уровней относительно границы ионизации.

квантовую природу и не связанный с движением электрона. Спин электрона s в единицах \hbar равен $1/2$, поэтому возможны только два значения проекции спина электрона: $m_s = 1/2$ и $m_s = -1/2$. В пренебрежении слабыми спин-орбитальными взаимодействиями (см. пункт 2.3.2) энергия атома водорода и водородоподобных ионов не зависит от величина проекции спина m_s . Таким образом, к уровню энергии n относится всего $2n^2$ близких по энергии состояний, отличающихся значениями квантовых чисел l , m и m_s . Число атомных состояний, относящихся к тому или иному уровню энергии называется *статистическим весом уровня*. Статистический вес уровня n равен $2n^2$, уровня nl (с учетом двух возможных проекций спина электрона) — $2(2l + 1)$ и т.д.

В спектроскопии принято обозначать состояния, соответствующие значениям $l = 0, 1, 2, \dots$ буквами латинского алфавита

$$s, p, d, f, g, h, i, k, \dots$$

Состояние с $n = 1, l = 0$ обозначается $1s$, состояние ($n = 2, l = 2$) — $2p$ и т. д. Таким образом, к уровню $n = 1$ относится только состояние $1s$, к уровню $n = 2$ — состояния $2s, 2p$, к уровню $n = 3$ — состояния $3s, 3p, 3d$ и т.д.

Для ионизации атома водорода (отрыва электрона от ядра) необходимо сообщить атому энергию $E_\infty - E_1 = R_{\text{H}} \approx R_{\text{y}}$. Эта величина называется энергией ионизации, а если она измеряется в электронвольтах, то называется потенциалом ионизации и обозначается I_1 . Потенциал ионизации водорода равен приблизительно 13.6 эВ . Используемые в атомной спектроскопии единицы, в том числе единицы энергии описаны в приложении А.3.

Уровень $n=1$ получил название *основного*. Уровень с $n=2$, ближайший к основному, называется *резонансным*, а переход с него на основной уровень называется *резонансным переходом*. Энергия, необходимая для возбуждения резонансного уровня, называется резонансным потенциалом и обозначается E_{r} . Для атома водорода

$$E_{\text{r}} = E_2 - E_1 = \frac{3}{4} R_{\text{y}} \approx 10.20 \text{ эВ}.$$

В атомной спектроскопии вместо уровней энергии E_n часто используются величины $\sigma_n = E_n / 2\pi\hbar c$, имеющие размерность см^{-1} . О значениях E_n в единицах см^{-1} говорят как об энергиях уровней в обратных сантиметрах. Шкала величин σ_n для уровней энергии атома водорода приводится на рис. 2.1 на противоположной странице. Формулы для перехода от энергий переходов, выраженных в см^{-1} к длинам волн и обратно дается соотношениями (А.3.1) и (А.3.2) приложения А.3.1.

2.2.1 Волновые функции

Угловые функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ выражаются через присоединенные функции Лежандра $P_l^m(\cos \theta)$:

Eq. Ylm

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Theta_{lm}(\theta)\Phi_m(\varphi), \quad (2.2.3a) \quad \text{Eq. Ylm_a}$$

$$\Theta_{lm}(\theta) = (-1)^m \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{2(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta), \quad (2.2.3b) \quad \text{Eq. Ylm_b}$$

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}. \quad (2.2.3c) \quad \text{Eq. Ylm_c}$$

Здесь предполагается, что $m \geq 0$. Для отрицательных значений m имеет место:

$$\Theta_{l,-|m|} = (-1)^m \Theta_{l,|m|}.$$

Функции Y_{lm} взаимно ортогональны и нормированы:

$$\int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{l'm'}^* Y_{lm} \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}. \quad (2.2.4) \quad \text{Eq. Ylm-ort}$$

Явные выражения для функции Y_{lm} при $l = 0, 1$ таковы:

$$Y_{00} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}, \quad Y_{10} = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{4\pi}} \cos \theta, \quad Y_{1,\pm 1} = \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{8\pi}} \sin \theta e^{\pm i\varphi}.$$

Радиальные функции дискретного спектра выражаются через обобщенные полиномы Лагерра

Eq. Rnl(r)

$$L_n^m(x) = (-1)^m \frac{n!}{(n-m)!} e^x x^{-m} \frac{d^{n-m}}{dx^{n-m}} e^{-x} x^n, \quad (2.2.5a) \quad \text{Eq. Rnl(r)_a}$$

$$R_{nl}(r) = -\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)! 3^{2n}}} \left(\frac{2Z}{n}\right)^{3/2} \times \\ \times \exp(-Zr/n) \left(\frac{2Zr}{n}\right)^l L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2Zr}{n}\right). \quad (2.2.5b) \quad \text{Eq. Rnl(r)_b}$$

Радиальные волновые функции выражены в атомных единицах (см. § [A.3](#) ^{ss.AtomUnits}).

Для перехода к обычным единицам СГС достаточно сделать замену $r \rightarrow r/a_0$, где $a_0 = \hbar^2/(m_e e^2) = 0.529 \cdot 10^{-8}$ см – атомная единица длины (боровский радиус).

Функции $R_{nl}(r)$ и $P_{nl}(r)$ взаимно ортогональны и нормированы:

$$\int R_{nl}(r) R_{n'l}(r) r^2 dr = \int P_{nl}(r) P_{n'l}(r) dr = \delta_{nn'}. \quad (2.2.6) \quad \text{Eq. OrtNorm}$$

Из формулы [\(2.2.5\)](#) ^{Eq. Rnl(r)} видно, что при больших r функции $R_{nl}(r)$ экспоненциально затухают. В атомных единицах $R_{nl} \sim e^{-\frac{Zr}{n}} \sim e^{-\sqrt{|E_n|}r}$.

Радиальные функции $R_{El}(r)$ непрерывного спектра ($E \geq 0$) выражаются не через полиномы, а через вырожденные гипергеометрические функции мнимого аргумента. Различные представления этих функции приводятся в [105, 110]. Асимптотическое выражение функции $R_{El}(r)$ при $r \gg 1$ дается формулой (4.2.11).

2.3 Тонкая структура уровней

2.3.1 Зависимость массы электрона от скорости

Для атома водорода и водородоподобных ионов с не очень большим зарядом Z релятивистские эффекты невелики и могут быть учтены в рамках теории возмущений. Этими эффектами являются зависимость массы электрона от скорости и расщепление уровней, обусловленное взаимодействием орбитального и собственного моментов количества движения электрона. Разлагая релятивистское выражение для энергии электрона

$$\mathcal{E} = U + \sqrt{c^2 p^2 + 2m_e^2 c^4}$$

по степеням малого параметра

$$\frac{p^2}{m_e^2 c^2} \approx \left(\frac{v}{c}\right)^2,$$

получим поправку к нерелятивистской энергии $E = \mathcal{E} - m_e c^2$:

$$E = \mathcal{E} - m_e c^2 \approx \frac{p^2}{2m_e} + U - \frac{p^4}{8m_e^3 c^2}.$$

Последнее слагаемое в этой формуле, представленное в операторной форме, является искомым возмущением:

$$V = -p^4 / (8m_e^3 c^2) \approx -(\frac{1}{2}m_e c^2)(E^{(0)} - U)^2.$$

Здесь $E^{(0)} = \frac{p^2}{2m} + U$ — энергия нулевого приближения. Возмущение приводит к сдвигу уровня и к появлению зависимости энергии от орбитального квантового числа:

$$\Delta E'_{nl} = -(\frac{1}{2}m_e c^2)\{E_n^2 + 2E_n Z e^2 \langle r^{-1} \rangle_{nl} + Z^2 e^2 \langle r^{-2} \rangle_{nl}\}.$$

Используя формулу (2.2.1) и выражения (1.14) в [121] для средних значений величин

$$\langle r^k \rangle = \int P_{nl}^2(r) r^k dr$$

в [121], найдём:

$$\Delta E'_{nl} = -\alpha^2 \left\{ \frac{1}{l+1/2} - \frac{3}{4n} \right\} \frac{Z^4}{n^3} \text{Ry}. \quad (2.3.1) \quad \boxed{\text{Eq. Energ:Mass-Vel}}$$

Безразмерная константа $\alpha = e^2/\hbar c \approx 1/137$ носит название постоянной тонкой структуры.

ss.SpOrbInt

2.3.2 Спин-орбитальное взаимодействие

Электрон имеет собственный внутренний момент \mathbf{s} и связанный с ним магнитный момент

$$\boldsymbol{\mu} = -\frac{e\hbar}{m_e c} \mathbf{s} = -2\mu_0 \mathbf{s}, \quad (2.3.2) \quad \boxed{\text{Eq. SpinMagnMom}}$$

где

$$\mu_0 = e\hbar/(2m_e c) \text{ — магнетон Бора.}$$

Это приводит к дополнительному взаимодействию между электроном и ядром. Оно имеет вид $\boldsymbol{\mu}\mathbf{H}$, где $\boldsymbol{\mu}\mathbf{H}$ — магнитное поле, возникающее в системе координат электрона при его движении в электростатическом поле ядра. Поскольку

$$\boldsymbol{\mu}\mathbf{H} = -\frac{1}{c} [\boldsymbol{\mu}, [\boldsymbol{\mu}\mathbf{E}\mathbf{v}]],$$

где $\mathbf{E} = \frac{\partial U}{\partial \mathbf{r}} \cdot \frac{\mathbf{r}}{r}$, а $m[\mathbf{r}\mathbf{v}] = \hbar\mathbf{l}$, то дополнительное взаимодействие $V \sim \mathbf{l}\mathbf{s}$. Поэтому об этом взаимодействии обычно говорят как о взаимодействии спин – орбита или спин-орбитальном взаимодействии. Окончательное выражение для V имеет вид

$$V = \frac{\hbar^2}{2m_e^2 c^2} \frac{\partial U}{\partial r} \frac{1}{r} \mathbf{l}\mathbf{s}. \quad (2.3.3) \quad \boxed{\text{Eq. PorSp-Orb}}$$

Зависимость спин-орбитального взаимодействия от j можно выразить в явном виде. Поскольку $\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}$,

$$\mathbf{j}^2 = \mathbf{l}^2 + 2\mathbf{l}\mathbf{s} + \mathbf{s}^2, \quad \mathbf{l}\mathbf{s} = \frac{1}{2} (\mathbf{j}^2 - \mathbf{l}^2 - \mathbf{s}^2). \quad (2.3.4) \quad \boxed{\text{Eq. j^2-1s}}$$

Учитывая также, что $U = -Ze^2/r$, получим

$$V = \frac{Ze^2\hbar^2}{2m_e^2 c^2} \frac{1}{r^3} \frac{1}{2} (\mathbf{j}^2 - \mathbf{l}^2 - \mathbf{s}^2). \quad (2.3.5) \quad \boxed{\text{Eq. Vspin-orb(jls)}}$$

Среднее значение возмущения $\frac{\boxed{\text{Eq. Vspin-orb(jls)}}}{(2.3.5)}$ в состоянии nlj равно

$$\frac{Ze^2\hbar^2}{2m_e^2 c^2} \left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle \{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)\}, \quad (2.3.6) \quad \boxed{\text{Eq. MeanVspOrb}}$$

а для поправки к энергии, обусловленной спин-орбитальным взаимодействием, получим (значение матричного элемента $\langle r^{-3} \rangle_{nl}$ приведено в [121]):

$$\langle V \rangle = \Delta E''_{nlj} = \alpha^2 \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2l(l+1)(l+1/2)} \frac{Z^4}{n^3} \text{Ry}. \quad (2.3.7) \quad \boxed{\text{Eq. DeltaE''nlj}}$$

2.3.3 Расщепление уровней nl

Сравнение формул (2.3.1) и (2.3.7) показывает, что оба эффекта, собственно релятивистский, связанный с зависимостью массы электрона от скорости, и спин-орбитальный, определяемый взаимодействием магнитного момента электрона с магнитным полем, возникающим при движении электрона в поле ядра, имеют один порядок величины. В обоих возможных случаях $j = l + 1/2$ и $j = l - 1/2$ суммарная поправка к энергии $\Delta E' + \Delta E''$ определяется одним и тем же выражением

$$\Delta E''_{nlj} = \Delta E' + \Delta E'' = \alpha^2 \left(\frac{3}{4n} - \frac{1}{j + 1/2} \right) \frac{Z^4}{n^3} \text{Ry}. \quad (2.3.8) \quad \boxed{\text{Eq. DeltaEnli}}$$

При $l = 0$ формула (2.3.7) теряет смысл, так как и числитель (в этом случае $j = s = 1/2$), и знаменатель обращаются в нуль, однако формула (2.3.8) справедлива при всех значениях l .

Таким образом, вследствие релятивистских эффектов уровень nl расщепляется на две компоненты, $j = l + 1/2$ и $j = l - 1/2$, в соответствии с двумя возможными ($\pm 1/2$) проекциями спина электрона. Это расщепление носит название *тонкого* или *мультиплетного расщепления*.

Каждая из поправок $\Delta E'$ и $\Delta E''$ по отдельности зависит от l , но суммарная поправка ΔE от l не зависит. Таким образом, для всех уровней nl , отличающихся лишь значением l , компоненты тонкой структуры с одним и тем же значением j совпадают. На рис. 2.2 показано тонкое расщепление уровней $n = 1, 2, 3$. Как следует из (2.3.8), величина тонкого расщепления уменьшается с увеличением n примерно как $1/n^3$, поэтому тонкое расщепление особенно существенно для нижних уровней.

Согласно (2.3.8) расстояние между уровнями $j' = l + 1/2$ и $j'' = l - 1/2$ равно

$$\delta E_{j'j''} = \frac{\alpha^2 Z^4}{n^3 l(l+1)} \text{Ry}. \quad (2.3.9) \quad \boxed{\text{Eq. DeltaEjj'}}$$

Так, расщепление уровней атома водорода

$$j = 1/2 \quad \text{и} \quad j = 3/2$$

при $n=2, 3, 4$ составляет соответственно 0.36, 0.12 и 0.044 cm^{-1} .

Совокупность линий, образованных переходами между компонентами тонкой структуры уровней nl и $n'l'$ (переходы $nlj \rightarrow n'l'j'$), называется мультиплетом. Правило отбора по квантовым числам j , определяющее какие переходы с излучением фотона разрешены, а какие – нет, имеет вид

$$\Delta j = 0, \pm 1. \quad \text{Eq.DeltajDipTrans}$$

С помощью этого правила легко найти характер тонкого расщепления линий водородного спектра. Например, мультиплет $nd - n'p$, состоит из трех компонент. Для переходов, ответственных за серию Лаймана, правилами отбора по j разрешены переходы

$$1s_{1/2} - np_{1/2} \quad \text{и} \quad 1s_{1/2} - np_{3/2}. \quad \text{Eq.FineStrLalpha}$$

В случае бальмеровской серии разрешено 7 переходов. Схема разрешенных переходов для линий H_α дана на рис. 2.3.

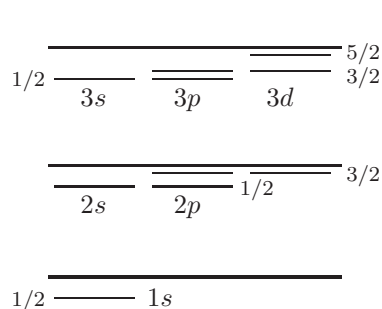


Рис. 2.2. Тонкая структура уровней $n = 1, 2, 3$ водородоподобных ионов.

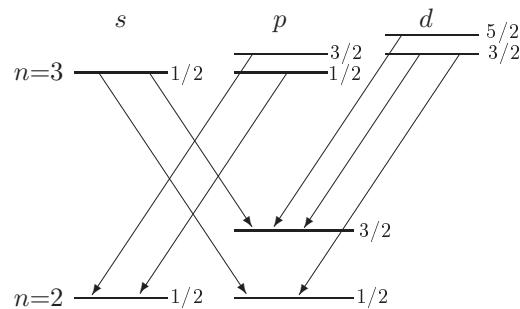


Рис. 2.3. Схема переходов тонкой структуры линии H_α .

Eq.FineStrHalf

Лэмбовский сдвиг

В квантовой электродинамике показано, что энергии уровней $2s_{1/2}$ и $2p_{1/2}$ атома водорода за счёт так называемых эффектов поляризации вакуума различаются. В 1947 г. Лэмб и Ризерфорд обнаружили предсказанное теоретически расщепление этих уровней водорода, равное 0.034 см^{-1} (1057 МГц). Оно получило название лэмбовского или радиационного сдвига (см. [105]). Лэмбовские сдвиги уровней $2s_{1/2}$, $2p_{1/2}$ и $2p_{3/2}$ составляют 1040 МГц, 17 МГц и 8 МГц соответственно, поэтому расщепление уровней водорода $2p_{1/2}$ и $2p_{3/2}$ равно 0.0008 см^{-1} (25 МГц).

Теоретическое значение сдвига хорошо согласуется с экспериментальным. Теория предсказывает значительно больший сдвиг ($\sim Z^4$) для водородоподобных ионов, что также находится в согласии с экспериментом.

Экспериментальные длины волн всех компонентов тонкой структуры линии H_α , согласно каталогу [136], даны в табл. 2.1. Приведены длины волн в воздухе (λ_{air}), определённые в приложении А.3.1.

Длины волн компонентов тонкой структуры $2p_{3/2}-3d_{3/2}$ и $2p_{3/2}-3d_{5/2}$ с точностью до 0.0001 Å совпадают.

Таблица 2.1. Длины волн компонентов тонкой структуры линии H_α

Переход	$j - j'$	$\lambda_{\text{air}}, \text{Å}$
$2s - 3p$	1/2 - 1/2	6562.7720
	1/2 - 3/2	6562.7526
$2p - 3s$	1/2 - 1/2	6562.7520
	3/2 - 1/2	6562.9099
$2p - 3d$	1/2 - 3/2	6562.7101
	3/2 - 3/2	6562.8520
	3/2 - 5/2	6562.8520

Величина расщепления уровней тонкой структуры для водородоподобных ионов $\Delta E \sim Z^4$, поэтому компоненты тонкой структуры хорошо различимы в спектрах многозарядных ионов с большими значениями Z .

Глава 3

Спектры неводородоподобных атомов и ионов

В данной главе изложены основы систематики спектров многоэлектронных атомов и ионов, необходимые для понимания содержания следующих глав настоящей книги. В изложении способов описания спектров атомов и ионов будем следовать, главным образом, монографиям [115, 120, 121, 126, 125].

3.1 Приближение центрального поля

s.TsField

Для атомов или ионов с более чем одним электроном уравнение Шредингера не может быть решено аналитически. По этой причине систематика спектров многоэлектронных атомов основывается на какой-либо приближенной модели описания атома.

Наиболее удобно использовать для описания атомных спектров предположение, что каждый электрон движется в некотором эффективном центрально-симметрическом поле, создаваемом ядром и всеми остальными электронами. Это приближение, получившее название приближения *центрального поля*, широко используется для расчета параметров атомов.

Для более точного описания спектров требуется учет нецентральной части электростатического взаимодействия электронов, а также магнитных взаимодействий, в первую очередь спин-орбитального взаимодействия. В теории атомных спектров эти взаимодействия обычно рассматриваются в рамках теории возмущений, как малые поправки к центрально-симметричному полю.

3.1.1 Волновые функции атома в приближении центрального поля

В приближении центрального поля волновая функция системы N невзаимодействующих электронов может быть построена из одноэлектронных волновых функций $\psi(\gamma_i, \xi_i)$, где γ_i – совокупность квантовых чисел электрона с номером i , ξ_i – набор координатных и спиновых переменных электрона. Однако волновая функция атома не может быть построена как произведение одноэлектронных волновых функций

$$\Psi = \psi(\gamma_1, \xi_1) \psi(\gamma_2, \xi_2) \dots \psi(\gamma_N, \xi_N) . \quad (3.1.1) \quad \boxed{\text{Eq.Psi-AtomSimm}}$$

Так как электроны обладают спином $1/2$, то волновая функция атома должна быть антисимметричной относительно перестановки электронов.

Условия антисимметричности волновой функции будут удовлетворены, если волновая функция будет построена как определитель:

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi(\gamma_1, \xi_1) & \psi(\gamma_1, \xi_2) & \dots & \psi(\gamma_1, \xi_N) \\ \psi(\gamma_2, \xi_1) & \psi(\gamma_2, \xi_2) & \dots & \psi(\gamma_2, \xi_N) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \psi(\gamma_N, \xi_1) & \psi(\gamma_N, \xi_2) & \dots & \psi(\gamma_N, \xi_N) \end{vmatrix} , \quad (3.1.2) \quad \boxed{\text{Eq.Psi-AtomAntiSimm}}$$

Перестановка электронов соответствует перестановке строк определителя, в результате которой он меняет знак. Если среди состояний $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_N$ окажутся одинаковые, то окажутся одинаковыми соответствующие строки определителя, который обратится в ноль. В этом случае соблюдается принцип Паули о невозможности присутствия в системе фермионов частиц, находящихся в двух одинаковых состояниях.

В частном случае двух электронов

$$\Psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi(\gamma_1, \xi_1) \psi(\gamma_2, \xi_2) - \psi(\gamma_1, \xi_2) \psi(\gamma_2, \xi_1) \} \quad (3.1.3) \quad \boxed{\text{Eq.Psi-TwoElAtom}}$$

Антисимметричность волновых функций приводит к так называемым *обменным эффектам*. Продемонстрировать роль обменных эффектов можно на примере вычисления матричного элемента оператора межэлектронного взаимодействия

$$\hat{U}_{12} = e^2 \frac{1}{|r_1 - r_2|}$$

для двухэлектронного атома. Этот матричный элемент определяет поправку к энергии атомных уровней, рассчитанных в приближении центрального поля, за счет нецентральной части межэлектронного взаимодействия.

Если использовать симметричные атомные функции [\(Eq.Psi-AtomSimm 3.1.1\)](#) для атома с двумя электронами, то матричный элемент межэлектронного взаимодействия для состояниями $\Gamma = \gamma'\gamma''$ атома, где γ' и γ'' квантовые числа атомных электронов, равен

$$\langle \Gamma | \hat{U}_{12} | \Gamma \rangle = \langle \gamma'\gamma'' | \hat{U}_{12} | \gamma'\gamma'' \rangle = \langle \gamma'_1\gamma''_2 | \hat{U}_{12} | \gamma'_1\gamma''_2 \rangle . \quad (3.1.4) \quad \text{Eq.U12Simm}$$

Здесь используется обычное обозначение матричного элемента оператора \hat{O} между состояниями a и b атомной системы:

$$\langle a | \hat{O} | b \rangle = \int \Psi_a \hat{O} \Psi_b d\tau ,$$

где τ обозначает совокупность всех координатных и спиновых переменных волновых функций Ψ_a и Ψ_b начального и конечного состояний атомной системы.

В выражении [\(Eq.U12Simm 3.1.4\)](#) нижние индексы у квантовых чисел атомных электронов явно указывают, какой из электронов находится в данном состоянии. Однако, если использовать правильные антисимметричные волновые функции двухэлектронного атома [\(Eq.Psi-TwoElAtom 3.1.3\)](#), то

$$\langle \gamma'\gamma'' | \hat{U}_{12} | \gamma'\gamma'' \rangle = \langle \gamma'_1\gamma''_2 | \hat{U}_{12} | \gamma'_1\gamma''_2 \rangle - \langle \gamma'_1\gamma''_2 | \hat{U}_{12} | \gamma'_2\gamma''_1 \rangle . \quad (3.1.5) \quad \text{Eq.U12AntiSimm}$$

Первый матричный элемент в правой части выражения [\(Eq.U12AntiSimm 3.1.5\)](#) обычно называется *прямым*, а второй матричный элемент, входящий в это выражение со знаком минус, носит название *обменного*. Это название связано с тем, что в правой части обменного матричного элемента переставлены (обменены) электроны состояний γ' и γ'' .

Одноэлектронные волновые функции

Пригодность приближения центрального поля для целей систематики спектров в значительной степени определяется тем, что возмущение не меняет числа возможных состояний системы [\[110\]](#). Состояния атома в приближении центрального поля определяются видом одноэлектронных волновых функций. Уравнение Шредингера для электрона в произвольном центрально-симметрическом поле $U(r)$ имеет вид

$$\hat{\mathcal{H}}\psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta - U(r) \right] \psi = E\psi . \quad (3.1.6) \quad \text{Eq.ShrU(r)}$$

Это уравнение отличается от уравнения [\(Eq.ShrCoulField 2.1.2\)](#) для атома водорода тем, что вместо кулоновского потенциала $-Ze^2/r$ в нем стоит произвольный потенциал $U(r)$. Поэтому при получении волновых функций электронов в центральном поле можно использовать ряд результатов, полученных для водорода и водородоподобных атомов в [§ 2.1](#). При движении в произвольном центрально-симметрическом поле сохраняется угловой момент,

поэтому каждое стационарное состояние можно характеризовать заданием квадрата орбитального момента электрона и его z -компоненты, т.е. заданием квантовых чисел l, m . Волновые функции для стационарных состояний будут иметь вид $\psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi)$.

Радиальная часть функции $P(r) = rR(r)$ определяется уравнением

$$\left[\frac{\hbar^2}{\mu} \left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + U(r) \right) \right] P(r) = EP(r). \quad (3.1.7) \quad \text{Eq.RadShr(U)}$$

Данное уравнение имеет такой же вид, что и уравнение $\left[\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + U(r) \right) \right] R(r) = ER(r)$ для радиальной части волновой функции атома водорода с подстановкой вместо кулоновского потенциала $-Ze^2/r$ потенциала центрального поля $U(r)$. Отметим, что для целей систематики спектров малое различие между массой электрона m_e и приведённой массой частицы в центральном поле μ (см. параграф 2.1) несущественно, поэтому в дальнейшем мы можем заменить μ на m_e .

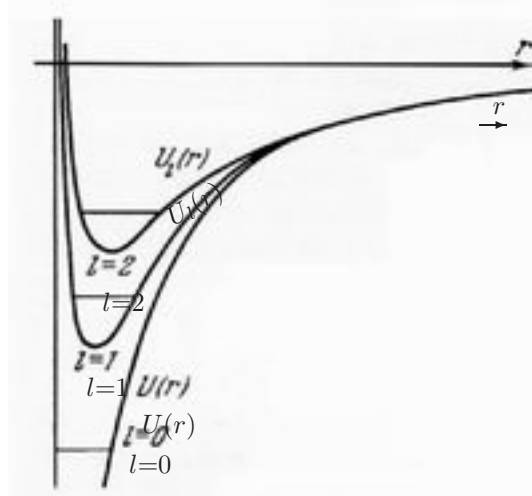


Рис. 3.1. Потенциальная энергия $U_l(r)$ в приближении центрального поля.

Fig.U1(r)

Уравнение $\left[\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + U(r) \right) \right] R(r) = ER(r)$ имеет конечные и непрерывные решения лишь при определенных значениях E . Совокупность этих значений определяется эффективной потенциальной энергией

$$U_l(r) = U(r) + \frac{\hbar^2}{m_e} \frac{l(l+1)}{2r^2}. \quad (3.1.8) \quad \text{Eq.U1(r)}$$

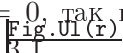
Типичный вид зависимости $U_l(r)$ от r представлен на Рис. 3.1. Функция $U_l(r)$ зависит от l и не зависит от проекции орбитального момента m и проекции спина m_s . Поэтому энергия частицы не зависит ни от m , ни от m_s . Это означает, что уровни энергии атома (иона) вырождены по m и

m_s , т. е. не зависят от направления моментов \mathbf{l} и \mathbf{s} . Заданному значению l соответствует $2l + 1$ различных значений m и 2 значения m_s . Таким образом, $2(2l + 1)$ состояний, отличающихся ориентацией орбитального момента и спина электрона, соответствуют одному и тому же уровню энергии.

Определение радиальных функций $P(r)$ и нахождение уровней энергии требует конкретизации зависимости $U(r)$. При этом для дискретных состояний ($U(r) < 0$) имеют место асимптотические соотношения:

$$U(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0, \quad U(r) \xrightarrow{r \rightarrow 0} -\frac{Ze^2}{r}. \quad (3.1.9) \quad \boxed{\text{Eq. CondU}(r)}$$

Характер движения частицы в центрально-симметрическом поле $U(r)$ определяется значениями E и l . Так же как для кулоновского поля, при $E < 0$ спектр энергии дискретен, а при $E > 0$ – непрерывен. В общем случае спектр значений энергии E различен для различных значений l .

Наименьшее, возможное при данном l , значение энергии E тем меньше, чем меньше l . Это связано с тем, что при отличном от $l > 0$ эффективная потенциальная энергия (Eq. U(r)) растёт с увеличением l , поскольку центробежная энергия $\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{l(l+1)}{r^2}$ положительна. Основным состоянием атома, т. е. состоянием с наименьшим возможным значением энергии при движении в центрально-симметрическом поле является состояние с $l = 0$, так как величина $U_l(r)$ минимальна при $l = 0$, что видно из Рис. B.1. 

3.1.2 Чётность атомных состояний

Волновые функции $\Psi_{Elm} = R_{El}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$, соответствующие различным значениям момента частицы l , по-разному ведут себя при преобразовании инверсии $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$. Это преобразование для сферических координат (r, θ, φ) имеет вид

$$r \rightarrow r, \quad \theta \rightarrow \pi - \theta, \quad \varphi \rightarrow \varphi + \pi. \quad (3.1.10) \quad \boxed{\text{Eq. invR}}$$

Функции R_{El} при таком преобразовании не меняются. При замене φ на $\varphi + \pi$ в функции $Y_{lm} \sim P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}$ множитель $e^{im\varphi}$ умножается на $(-1)^m$. Замена θ на $\pi - \theta$ приводит к умножению $\cos \theta$ на -1 , поэтому $P_l^m[(\cos(\pi - \theta))] = P_l^m(-\cos \theta) = P_l^m(\cos \theta)(-1)^{l-m}$. Следовательно $Y_{lm}(\pi - \theta, \varphi + \pi) = Y_{lm}(\theta, \varphi)(-1)^l$.

Функции ψ_{Elm} , соответствующие состояниям с четными значениями l , не меняются. Такие состояния, а также функции называются четными. Для нечетных l функции ψ_{Elm} при преобразовании инверсии меняют знак. В этом случае состояние нечетно. Четность состояния целиком определяется значением l и не зависит ни от E , ни от m . При инверсии

функция Гамильтона $H = \frac{p^2}{2m} + U(r)$ для частицы в центральном поле $U(r)$ не меняется. Таким образом, четность волновой функции стационарного состояния не меняется с течением времени. Это означает, что каждое состояние частицы в центрально-симметрическом поле характеризуется определенной четностью π .

Волновая функция Ψ системы n невзаимодействующих частиц в центрально-симметрическом поле, может быть записана в виде сумм произведений функций ψ_{Elm} (см. формулу [Eq. Psi-AtomAntiSym](#) в гл. 1.2). Четность волновой функции Ψ определяется множителем $(-1)^{l_1}(-1)^{l_2} \dots (-1)^{l_n}$, т. е., где l_i – орбитальный момент электрона с номером i . Состояние системы частиц четно, если сумма моментов $\sum_i l_i$ – четна, и нечетно для нечетных значений суммы моментов l_i .

3.1.3 Состояния электрона в центральном поле. Электронные конфигурации

ss.ElConf

О распределении электронов в атоме по состояниям с различными значениями n и l говорят как об *электронной конфигурации*. Задание электронной конфигурации требует перечисления значений n и l для всех электронов атома. Если имеется несколько электронов с одинаковыми значениями n и l , то их обозначают $(nl)^k$, например $(3p)^3$, $(3d)^5$ и т.д. или просто $3p^3$, $3d^5$.

У электрона, спин которого $s = 1/2$, состояния с одинаковыми значениями E, l, m могут отличаться еще значениями z -компоненты спина m_s . Полная характеристика состояния электрона осуществляется заданием четырех чисел n, l, m, m_s , причем энергия определяется лишь значениями n и l .

При заданном l число m_l может принимать $2l + 1$ значений, а m_s принимает лишь два значения $\pm 1/2$. Таким образом, имеется $2(2l + 1)$ состояний с одинаковыми значениями n и l , но различными значениями m_l и m_s . Состояния электронов с одинаковыми значениями n и l называются эквивалентными. Обычно говорят об *эквивалентных электронах*, подразумевая под ними электроны, находящиеся в эквивалентных состояниях. Если хотя бы одно из значений n или l у электронов различаются, то электроны считаются *неэквивалентными*.

Согласно принципу Паули в каждом состоянии $nlmm_s$ не может находиться больше, чем один электрон. Таким образом, в атоме могут иметь одинаковые значения n и l не более чем $2(2l + 1)$ электронов. Совокупность $2(2l + 1)$ эквивалентных электронов называется *замкнутой* или *заполненной оболочкой*. К такой оболочке невозможно больше присоединить ни одного электрона с теми же значениями квантовых чисел n и l .

В рентгеновской спектроскопии пользуются другим определением оболочек: *K*-оболочка (состояния $1s$ с $n = 1$), *L*-оболочка (состояния

$2s, 2p$ с $n = 2$), M -оболочка (состояния $3s, 3p, 3d$ с $n = 3$). Оболочки N, O и P обозначают совокупности электронов с $n = 4, 5$ и 6 соответственно.

3.2 Общее описание атомных состояний неводородоподобных ионов

В приближении центрального поля энергия атома (иона) полностью определяется заданием его *электронной конфигурации*, т. е. заданием значений n, l всех электронов атома. Каждой электронной конфигурации $n_1l_1, n_2l_2, n_3l_3, \dots$, соответствуют $2(2l_1 + 1)2(2l_2 + 1)2(2l_3 + 1) \dots$ состояний, отличающихся значениями квантовых чисел m, m_s , определяющими взаимную ориентацию орбитальных моментов и спинов электронов. Например, 6 электронов атома иона O^{2+} могут образовывать конфигурации $1s^22s^22p^2$, или $1s^22s2p^3$, или $1s^22p^4$.

Отнесение всех этих состояний к одному и тому же энергетическому уровню атома возможно до тех пор, пока мы пренебрегаем несферичностью потенциала атома и спин-орбитальным взаимодействием.

Учет той части электростатического взаимодействия между электронами, которая не учитывается в приближении центрального поля, а также учет спин-орбитального взаимодействия приводит к расщеплению уровней $n_1l_1, n_2l_2, n_3l_3, \dots$ на подуровни. Совместное рассмотрение обоих взаимодействий представляет собой крайне сложную вычислительную задачу. Поэтому обычно используется более простой подход, при котором одно из взаимодействий считается малым по сравнению с другим.

Экспериментальные данные показывают, что в целом ряде случаев электростатическое взаимодействие имеет гораздо большее значение, чем спин-орбитальное. Электростатическое взаимодействие приводит к расщеплению уровня, соответствующего данной электронной конфигурации, на целый ряд уровней, характеризующихся различными значениями полного орбитального момента электронов L и полного спина S . В этом случае говорят, что для уровней атома (иона) справедливо приближение Рессела–Саундерса или приближение $R - S$ -связи. Употребляется также термин LS -связь или *нормальная связь*.

Зависимость энергии расщепления от L при справедливости LS -связи объясняется тем, что различным значениям L соответствует различная взаимная ориентация орбитальных моментов электронов и различная ориентация электронных орбит. В состояниях с различными значениями L электроны в среднем находятся на разных расстояниях друг от друга, что приводит к различию в энергии электростатического отталкивания. Зависимость энергии от S связана с принципом Паули и вытекающей из него антисимметричностью волновой функции атома, составленной из

волновых функция отдельных электронов (см. § 17 в [Sobelman1977, 121]).

Экспериментально было установлено, что для основных конфигураций и для конфигураций с эквивалентными электронами, электростатическое расщепление подчиняется так называемому правилу Гунда. Согласно этому правилу наименьшей энергией обладает уровень с наибольшим возможным для данной электронной конфигурации значением S и наибольшим (возможным при данном S) значением L .

3.2.1 LS -связь. Термы и уровни

Совокупность уровней энергии, соответствующих определенным значениям L и S , называется спектральным термом, или просто *термом*. Для обозначения термов обычно используются заглавные буквы латинского алфавита. Термы со значением $L = 0$ обозначаются как S -термы, со значениями $L = 1$ — P -термы, $L = 2$ — D -термы. Значениям $L = 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9$ и 10 соответствуют F, G, H, I, K, L, M и N термы, соответственно.

Тонкая структура термов

Как и для атома водорода, спин-орбитальное взаимодействие и релятивистские эффекты приводят к расщеплению терма LS на ряд компонентов, соответствующих различным значениям полного момента атома $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$. Это расщепление называется тонким или мультиплетным.

В соответствии с квантовомеханическим правилом сложения моментов полный момент атома J может принимать значения в интервале $|L - S| \leq J \leq L + S$. В случае $L \geq S$ возможны $2S + 1$ различных значений J , каждое из которых соответствует состояниям атома, отличающимся по энергии. Таким образом терм LS расщепляется на $2S + 1$ различных компонентов. Число $2S + 1$, определяющее при $S \leq L$ число компонент терма, называется мультиплетностью терма.

Если $L \leq S$, то число компонентов терма с различными значениями полного момента J равно $2L + 1$, однако и в этом случае число $2S + 1$ называется мультиплетностью. Термы с мультиплетностью $2S + 1 = 1$ называются синглетными, $2S + 1 = 2$ — дублетными, $2S + 1 = 3$ — триплетными, $2S + 1 = 4$ — квартетными и т.д.

Значение мультиплетности терма указывается слева сверху от символа терма. Справа внизу обозначения терма указывается значение числа J . Таким образом, полное обозначение терма имеет вид $^{2S+1}L_J$. Например, терм с $L = 2, S = 1/2, J = 5/2$ обозначается как $^2D_{5/2}$. В тех случаях, когда необходимо указывать чётность состояний, относящихся к данному терму, нечетные термы отмечаются индексом o (odd — нечетный), который ставится справа сверху от L . Например, нечетный терм $^3D_3^o$. Отсутствие индекса o в записи терма указывает на чётность терма.

Иногда чётные термы отмечают индексом *e* (even – чётный), т. е. чётный терм ${}^4P_{3/2}$ можно также обозначать ${}^4P_{3/2}^e$.

К терму LS относятся $g(LS) = (2L + 1)(2S + 1)$ состояний, отличающихся значениями z -компонент орбитального и спинового моментов $M_L M_S$. Величина $g(LS)$ называется статистическим весом терма (число уровней, относящихся к данному терму). Энергия изолированного атома не зависит от того, каким образом ориентирован полный угловой момент атома. Поэтому $g(J) = 2J + 1$ состояний атома, соответствующие различным возможным значениям z -компоненты полного момента M , имеют одну и ту же энергию.

Таким образом, каждая J -компонента терма вырождена с кратностью $g(J)$. Величина $g(J)$ – статистический вес уровня. Очевидно, что

$$\sum_{J=|L-S|}^{L+S} g(J) = \sum_{J=|L-S|}^{L+S} (2J + 1) = g(LS) = (2L + 1)(2S + 1). \quad (3.2.1) \quad \boxed{\text{Eq. } g(LS)}$$

Это означает, что учет спин-орбитального взаимодействия не меняет числа состояний, относящихся к терму LS .

Вырождение уровней по M снимается и каждая J -компонента уровня расщепляется на $2J + 1$ составляющих при наложении магнитного (эффект Зеемана) или электрического (эффект Штарка) поля (см., например, [Sobelman1963, Sobelman1977, I20, I21]).

Мультиплетное расщепление подчиняется правилу интервалов Ланде. Согласно этому правилу расщепление уровней $J, J - 1$ пропорционально J :

$$\Delta E_J - \Delta E_{J-1} = \Delta E_{J, J-1} = A_{LS} J. \quad (3.2.2) \quad \boxed{\text{Eq. SplLande}}$$

Постоянная мультиплетного расщепления A_{LS} различна для разных термов. При $A_{LS} > 0$ наименьшим значением энергии обладает компонента мультиплета с наименьшим возможным значением $J = |L - S|$. Такие мультиплеты называются *нормальными*. При $A_{LS} < 0$ наименьшим значением энергии обладает компонента мультиплета с наибольшим возможным значением $J = L + S$. Такие мультиплеты называются *обращенными*.

Эмпирически было установлено, что конфигурациям, содержащим n эквивалентных электронов при $n < 2l + 1$ (оболочки заполнены менее чем наполовину), соответствуют нормальные мультиплеты, а при $n > 2l + 1$ (оболочки заполнены более чем наполовину) – обращенные мультиплеты. При $n = 2(2l + 1)$ (для заполненных оболочек) мультиплетное расщепление отсутствует.

Группировка уровней, типичная для нормальных мультиплетов приводится на Рис. 3.2. Fig. MultSpl

Расстояние между термами LS одной конфигурации значительно меньше, чем между одинаковыми термами различных конфигураций.

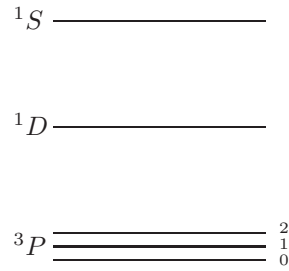
Рис. 3.2. Тонкая структура уровней термов конфигурации $2p^2$ при LS связи.

Fig.MultSpl

Каждый терм, за исключением синглетных термов и S -термов, имеет тонкую структуру, причем расстояние между компонентами этой структуры значительно меньше, чем расстояние между отдельными термами.

Определение термов многоэлектронных конфигураций

Для конфигураций, состоящих из неэквивалентных электронов (см. пункт 3.1.3), все возможные термы легко получить на основании общего квантово-механического правила сложения моментов. При сложении моментов \mathbf{L}_1 и \mathbf{L}_2 абсолютная величина результирующего момента может принимать одно из значений

$$L = L_1 + L_2, L_1 + L_2 - 1, \dots, |L_1 - L_2|. \quad (3.2.3) \quad \text{Eq.sumL}$$

При сложении спинов

$$S = S_1 + S_2, S_1 + S_2 - 1, \dots, |S_1 - S_2|. \quad (3.2.4) \quad \text{Eq.sumS}$$

Процедура сложения моментов производится таким образом: сначала складываются орбитальные и спиновые моменты двух электронов, затем добавляются моменты третьего электрона, затем четвертого и т.д.

Для иллюстрации рассмотрим сложение моментов в конфигурации $npn'l'p$ при $n \neq n'$. Используя правила (3.2.3, 3.2.4) получим: $L = 0, 1, 2$; $S = 0, 1$. Данным значениям LS соответствуют термы $^1S, ^1P, ^1D, ^3S, ^3P$ и 3D . На Рис. 3.3 (слева) представлена схема уровней термов конфигурации $2p3p$ иона C^{2+} . Видно, что расщепление уровней триплетных термов 3P и 3D данной конфигурации много меньше расстояния между термами, поэтому можно сделать вывод, что LS -связь хорошо описывает уровни конфигурации $2p3p$. На Рис. 3.3 (справа) показана часть уровней рассматриваемой конфигурации в увеличенном масштабе, что позволяет наглядно видеть малость расщепления уровней тонкой структуры термина 3P .

Рассмотрим сложение моментов в конфигурации $2s2p3p \equiv n_1l_1 n_2l_2 n_3l_3$. Будем исходить из термов конфигурации $2s2p \equiv n_1l_1 n_2l_2$. Складывая моменты $l_1 = 0, l_2 = 0$ и $s_1 = s_2 = 1/2$, получим два терма: $L_1 = 1, S_1 = 0$

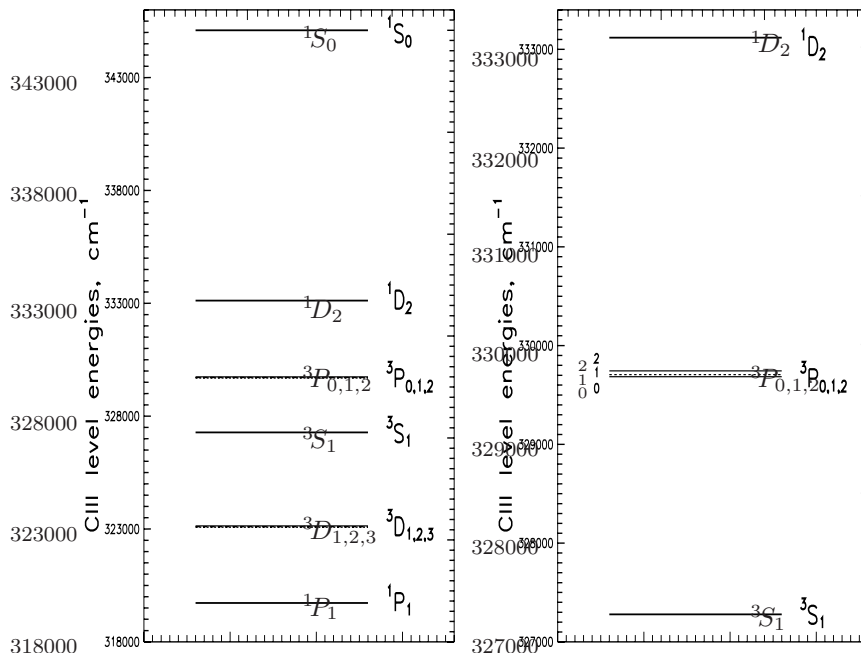


Рис. 3.3. Слева: уровни конфигурации $2p3p$ иона C^{2+} по [Moore70, Moore71, Moore73]; справа: то же, что на левом рисунке, но для области энергий $327000-333400 \text{ см}^{-1}$.

Fig.CIII2p3pEnerg

(терм $1P^\circ$) и $L_1 = 1, S_1 = 1$ (терм $3P^\circ$). Дальнейший результат сложения моментов зависит от того, к какому из двух наборов моментов L_1 и S_1 добавляются моменты третьего электрона. Добавление $3p$ -электрона к терму $1P^\circ$ дает термы $2S, 2P, 2D$, а добавление этого электрона к терму $3P^\circ$ дает термы $2,4S, 2,4P$ и $2,4D$.

Таким образом, мы видим, что в конфигурации $2s2p3p$ существует 2 терма $2S$, 2 терма $2P$ и 2 терма $2D$. Для того, чтобы различить термы с одинаковыми значениями LS , они записываются в рамках так называемой *генеалогической схемы*, т.е. указываются промежуточные моменты L_1 и S_1 . В рамках генеалогической схемы одинаковые по LS термы будут обозначаться $2s2p(3P^\circ)3p^2S$ и $2s2p(1P^\circ)3p^2S$, $2s2p(3P^\circ)3p^2P$ и $2s2p(1P^\circ)3p^2P$, а также $2s2p(3P^\circ)3p^2D$ и $2s2p(1P^\circ)3p^2D$.

Для иллюстрации важности учета генеалогии термов приведем на Рис. 5.4 схему уровней термов $2s2p(3P^\circ)2P_{1/2,3/2}$ и $2s2p(1P^\circ)2P_{1/2,3/2}$ иона N^{2+} , отличающихся только генеалогией.

Отметим, что указанные уровни образуются при добавлении $3p$ электрона к иону N^{3+} , находящегося в состояниях $2s2p^3P^\circ$ и $2s2p^1P^\circ$ соответственно, отличающихся по энергии на 7.9 эВ [Moore71, Moore73, Moore74, Moore75]. Среднее расстояние между $2s$ и $2p$ электронами значительно меньше, чем между $2p$ и $3p$ электронами, поэтому разность энергий термов $(3P^\circ)2P$ и $(1P^\circ)2P$, равная 8.5 эВ , определяется, главным образом, взаимодействием между

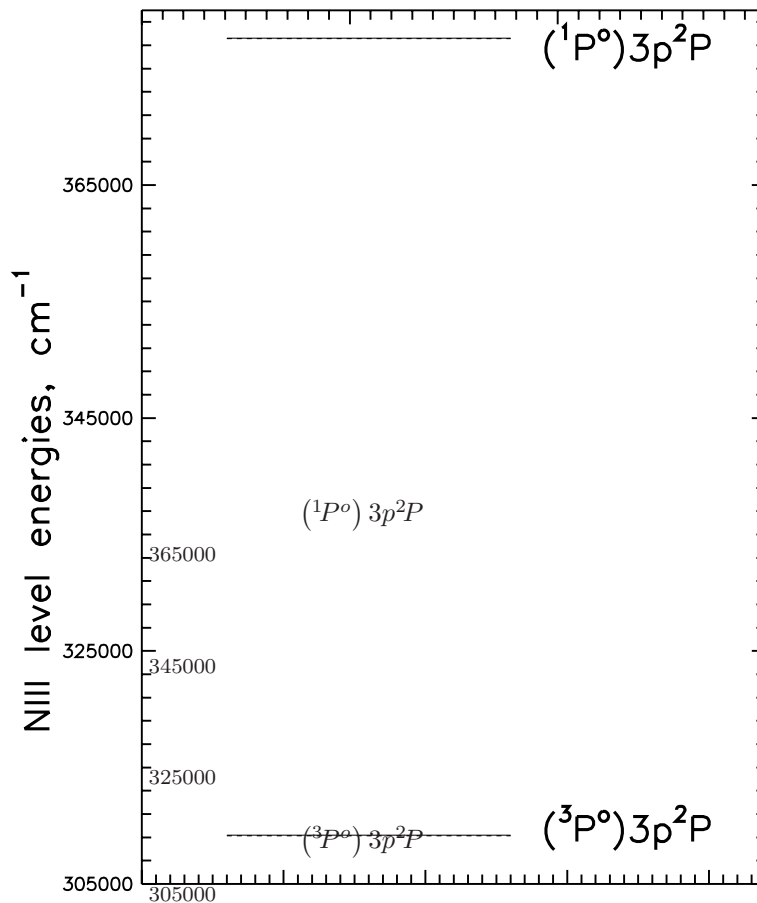
Рис. 3.4. Уровни конфигурации $2s2p(^1,^3P^\circ)3p^2P$ иона N^{2+} .

Fig.NIII2s2p3p

$2s$ и $2p$ электронами.

Термы и уровни оболочек эквивалентных электронов

Для конфигураций с эквивалентными электронами (см. пункт [3.1.3](#) ^{ss.ElConf}) методика, описанная в предыдущем пункте, напрямую неприменима, так как среди значений L и S , полученных по общему правилу сложения моментов, могут оказаться состояния, запрещенные принципом Паули.

Так, например, для конфигурации np^3 возможны лишь три терма, 2D , 2P , 4S , тогда как для конфигурации из трех неэквивалентных p -электронов возможен 21 терм. Термы конфигураций эквивалентных электронов s^n , p^n и d^n приводятся в табл. [3.1](#) ^{table.inshells}.

Нижний индекс (в круглых скобках) у значения L указывает число различных термов данной конфигурации с одинаковыми значениями L и S . Для различения таких термов конфигураций l^n необходимы дополни-

Таблица 3.1. Термы конфигураций l^n

Table.lnshells

Конфигурация	Термы		Полный статистический вес $g(l^n)$
s	2S		2
s^2	1S		1
p p^5	$^2P^\circ$		6
p^2 p^4	1SD	3P	15
p^3	$^2PD^\circ$	$^4S^\circ$	20
d d^9	2D		10
d^2 d^8	1SDG	3PF	45
d^3 d^7	$^2PD_{(2)}FGH$	4PF	120
d^4 d^6	$^1S_{(2)}D_{(2)}FG_{(2)}I$	$^3P_{(4)}DF_{(2)}GH$ 5D	210
d^5	$^2SPD_{(3)}F_{(2)}G_{(2)}HI$	4PDFG 6S	210

тельные квантовые числа. В отличие от конфигураций неэквивалентных электронов для этой цели нельзя использовать моменты L' , S' конфигурации l^{n-1} , так как термы конфигурации l^n невозможно связать с определенными термами конфигурации l^{n-1} .

По этой причине для различения термов конфигураций l^n используется классификация, предложенная Рака (G.Rakah) [12]. Для этого используется так называемое *число старшинства* v (seniority number), указывающее, что классифицируемый терм LS впервые появляется в конфигурации l^v в том смысле, что он не может быть получен из какого-то терма конфигурации l^{v-2} добавлением замкнутой пары электронов l^2 с $L = 0$, $S = 0$, которую будем в дальнейшем обозначать $l^2[00]$. Говорят, что терм vSL конфигурации l^n с определенным значением числа старшинства v порождается термом vSL конфигурации l^{n-2} . Значение v традиционно указывается впереди внизу от обозначения терма, то есть терм vSL обозначается $^{2S+1}_vL$.

В качестве иллюстрации рассмотрим термы конфигурации d^n , для различения которых требуется использовать число старшинства. При $n = 1$ возможен только один терм 2D . Этому терму в соответствии с общим правилом приписывается число $v = 1$, а терм обозначается 2_1D . Этот терм порождает цепочку таких же термов конфигураций d^3 и d^5 . При этом достаточно рассматривать оболочки с $n \leq 2l + 1$, так как конфигурациям l^m и l^n , таким, что $m + n = 2(2l + 1)$ т.е. конфигурациям, взаимно дополняющим друг друга до заполненной оболочки, соответствуют одни и те же термы, как показано в табл. 3.1.

При $n = 2$ в конфигурации d^2 появляются термы 1S , 1D , 1G , 3P , 3F . Терм 1S может быть получен добавлением пары $l^2[00]$ к конфигурации l^0 , поэтому терму 1S приписывается значение $v = 0$. Остальные термы конфигурации d^2 появляются впервые и им приписывается значение $v = 2$, т.е. они обозначаются 1_2S , 1_2D , 1_2G , 3_2P , 3_2F .

При $n = 3$ впервые в конфигурации d^3 появляются одинаковые тер-

мы 2D . Один из них получается добавлением пары $l^2[00]$ к терму 2_1D конфигурации d , то есть это тоже терм 2_1D . Второй терм 2D встречается впервые в конфигурации d^3 , поэтому ему присваивается значение $v = 3$ и он обозначается 2_3D . В спектроскопической литературе используются и старые обозначения: термы 2_1D и 2_3D обозначаются 2_aD и 2_bD соответственно. Аналогичным вышеописанному образом можно классифицировать и термы конфигураций d^4 и d^5 .

В последнем столбце таблицы [Table.inshells](#) указывается полное число состояний, относящихся к данной конфигурации (статистический вес конфигурации). Для конфигурации l^n статистический вес определяется числом возможных комбинаций, которые можно составить из квантовых чисел m_l, m_s с учетом принципа Паули. Число таких комбинаций равно числу сочетаний из $n_l = 2(2l + 1)$ по n , т.е. $\frac{n_l!}{n!(n_l - n)!}$.

Для заполненных оболочек (т.е. конфигураций с наибольшим возможным числом эквивалентных электронов) возможен лишь один терм 1S . Действительно, в этом случае M_L есть просто сумма всех возможных значений $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, которая, очевидно, равняется нулю. Аналогично $M_S = 0$.

Если электронная конфигурация содержит и эквивалентные и неэквивалентные электроны, то необходимо сначала найти возможные термы для эквивалентных электронов, а затем, по правилу сложения моментов, добавить к оболочке эквивалентных электронов, как к целому, остальные электроны данной конфигурации.

Рассмотрим, например, конфигурацию p^2d . Для конфигурации p^2 согласно табл. [Table.inshells](#) возможны термы ${}^1SD, {}^3P$. Комбинируя их со значениями $l = 2, s = 1/2$ электрона d , получим: из термина 1S терм 2D , из термина 1D термы 2SPDFG , термина 3P — термы ${}^2PDF, {}^4PDF$. Таким образом, конфигурации p^2d соответствуют 12 термов, из них 2 термина 2P , 3 термина 2D , 2 термина 2F и термы ${}^2SG, {}^4PDF$.

Если электронная конфигурация содержит две группы эквивалентных электронов, то необходимо сначала найти термы каждой группы в отдельности, а затем по правилу сложения моментов найти термы суммарной конфигурации. Так как у заполненных оболочек полный орбитальный момент $L = 0$ и полный спин $S = 0$, то заполненные оболочки не влияют на состояния электронных конфигураций атома и при определении возможных термов и уровней какой-либо электронной конфигурации заполненные оболочки можно не учитывать.

Глава 4

Фотопроцессы

Ch.PhotPr

Фотопроцессами называются процессы столкновения с поглощением или излучением квантов электромагнитного излучения (фотонов) $h\nu$. Частота фотона $\nu = \omega/2\pi$ определяет его энергию $E = h\nu = \hbar\omega$, где $h = 2\pi\hbar$ – постоянная Планка. Длина волны излучения фотонов с энергией $h\nu$ определяется из соотношения $\lambda = c/\nu$, где c – скорость света. В данной главе мы будем рассматривать фотопроцессы, связанные с переходами между уровнями дискретного или непрерывного спектра атома или иона.

4.1 Радиационные переходы между дискретными уровнями

s.RadTrans

4.1.1 Электромагнитное излучение. Типы радиационных переходов

ss.ElMagnEmiss

Излучение и поглощение квантов электромагнитного поля

В изложении материала настоящего параграфа будем следовать, главным образом, монографии [Sobelman1977](#) [Г21].

Произвольное поле излучения в свободном от зарядов пространстве ($\varphi = 0$, где φ – скалярный потенциал электромагнитного поля) может быть представлено в виде разложения векторного потенциала поля $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ по плоским волнам $e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)}$:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\rho=1,2} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\rho} \left\{ a_{\mathbf{k}\rho} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)} + a_{\mathbf{k}\rho}^* e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r}+\omega t)} \right\}. \quad (4.1.1) \quad \text{Eq. A}(\mathbf{r}, t)$$

Здесь \mathbf{k} – волновой вектор фотона с абсолютной величиной $k = \omega/c = 2\pi\nu/c = 2\pi/\lambda$, $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\rho}$ – единичный вектор поляризации, перпендикулярный направлению распространения фотона \mathbf{k} . Как обычно, звездочка обозначает комплексное сопряжение. Таким образом, поле излучения

представляется совокупностью плоских волн с различными значениями волнового вектора \mathbf{k} .

Напряженности электрического и магнитного полей для поля излучения могут быть найдены из разложения векторного потенциала $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ по формулам [109]:

$$\mathbf{H} = \text{rot} \mathbf{A}, \quad \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}. \quad \text{Eq. H-E}$$

Взаимодействие поля излучения (Eq. A(r,t) (H.I.I)) с атомом приводит к излучению или поглощению квантов электромагнитного излучения. Наиболее адекватным методом описания этого процесса является квантование поля излучения (см., например, [112]).

Однако в силу того, что взаимодействие электромагнитного поля с атомом является слабым по сравнению с кулоновским взаимодействием электронов атома между собой и с атомным ядром, это взаимодействие можно рассматривать в рамках более простого подхода, основанного на теории возмущений.

Взаимодействие атомного электрона, имеющего импульс \mathbf{p} , с каждой из плоских волн в разложении (Eq. A(r,t) (H.I.I)) имеет следующий вид:

$$H' = -\frac{e}{mc} \mathbf{p} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\rho} \left(a_{\mathbf{k}\rho} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} + a_{\mathbf{k}\rho}^* e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}} \right). \quad \text{Eq. Atom-Field}$$

В случае нескольких электронов следует заменить $\mathbf{p} \rightarrow \sum_i \mathbf{p}_i$, где \mathbf{p}_i — импульс электрона с номером i . Матричный элемент возмущения H' по волновым функциям системы атом+поле излучения $\Psi_a U_n$, где Ψ_a — волновая функция атома в состоянии a , U_n волновая функция системы n фотонов, отличен от нуля только для переходов, в которых число фотонов n увеличивается или уменьшается на единицу.

Перейдем к вычислению радиационных характеристик переходов. Рассмотрим переходы между двумя уровнями атома (см. Рис. 4.1): верхним (u) и нижним (l).

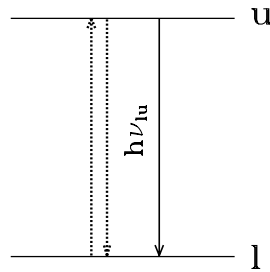


Рис. 4.1. Радиационные переходы между дискретными уровнями атома. Сплошной линией показаны спонтанные переходы, Пунктиром — вынужденные переходы.

Fig.UtoL

Для переходов между данными состояниями, в которых число фотонов увеличивается или уменьшается на единицу, матричный элемент H'

равен:

$$\begin{aligned} \langle un|H'|ln+1 \rangle &= -\frac{e}{mc} \sqrt{\frac{2\pi c^2(n+1)\hbar}{\omega V}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\rho} \langle u|\mathbf{p}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}|l \rangle, \\ \langle ln|H'|un-1 \rangle &= -\frac{e}{mc} \sqrt{\frac{2\pi c^2 n\hbar}{\omega V}} \mathbf{e}_{\mathbf{k}\rho} \langle u|\mathbf{p}e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}|l \rangle. \end{aligned} \quad (4.1.4) \quad \boxed{\text{Eq.MatrEl-RadTr}}$$

Здесь V — излучающий объем.

Вероятность перехода $u \rightarrow l$, сопровождающегося излучением фотона с волновым вектором в интервале $[\mathbf{k}, \mathbf{k} + d\mathbf{k}]$ и поляризацией $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\rho}$, рассчитанная на единицу времени, согласно теории возмущения [110], равна:

$$dA_{ul}^{(\rho)} = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle un|H'|ln+1 \rangle|^2 \delta(E_u - E_l + \hbar\omega) \frac{V d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}. \quad (4.1.5) \quad \boxed{\text{Eq.Au1}}$$

Дифференциал $d\mathbf{k} = k^2 dk d\Omega$, а $dk = d\omega/c$. Если обозначить через $\nu_{ul} = (E_u - E_l)/\hbar$ частоту атомного перехода $u \rightarrow l$ и проинтегрировать выражение (4.1.5) по $d\Omega$, то для вероятности излучения фотона с поляризацией $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\rho}$ в элементе телесного угла $d\Omega$, рассчитанной на единицу времени, то получится следующее выражение¹:

Comm.TransProb

$$dA_{ul}^{(\rho)} = \frac{e^2 \nu_{ul}}{\hbar c^3 m^2} |\mathbf{e}_{\mathbf{k}\rho} \langle u|\mathbf{p}e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}|l \rangle|^2 (\bar{n}_{\mathbf{k}\rho} + 1) d\Omega. \quad (4.1.6) \quad \boxed{\text{Eq.AabrhoEmiss}}$$

Здесь $\bar{n}_{\mathbf{k}\rho}$ — среднее число фотонов данной поляризации ρ с волновыми векторами в области $[\mathbf{k}, \mathbf{k} + d\mathbf{k}]$. Величина $\bar{n}_{\mathbf{k}\rho}$ называется *числом заполнения* для фотонов и численно равна среднему числу фотонов в ячейке фазового пространства объема \hbar^3 [112]:

$$\bar{n}_{\mathbf{k}\rho} = \frac{J_{\mathbf{k}\rho} c^2}{2h\nu^3}, \quad (4.1.7) \quad \boxed{\text{Eq.PhotFillNumb}}$$

где $J_{\mathbf{k}\rho}$ — интенсивность излучения с волновым вектором \mathbf{k} и поляризацией ρ .

Вероятность перехода $u \rightarrow l$ с поглощением фотона равна

$$dA_{ul}^{(\rho)} = \frac{e^2 \nu_{ul}}{\hbar c^3 m^2} |\langle u|\mathbf{p}e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}|l \rangle|^2 \bar{n}_{\mathbf{k}\rho} d\Omega. \quad (4.1.8) \quad \boxed{\text{Eq.AabrhoAbs}}$$

¹Размерность величины $dA_{ul}^{(\rho)}$ равна с^{-1} , то есть она является не вероятностью, а *скоростью* процесса излучения фотона заданной поляризации в единице телесного угла $d\Omega$, тогда как вероятностью излучения является только произведение $dA_{ul}^{(\rho)} \Delta t$, где Δt — малый промежуток времени. Тем не менее, как сама величина $dA_{ul}^{(\rho)}$, так и связанные с ними величины $A_{ul}^{(\rho)}$ и A_{ul} часто по традиции называют вероятностями излучения (вероятностями перехода $u \rightarrow l$). В дальнейшем мы, следуя традиции, сохраним за указанными величинами термин вероятности излучения (перехода), не забывая, однако, что это размерные величины с размерностью с^{-1} .

Анализ соотношений (4.1.6) и (4.1.8) показывает, что взаимодействие атома и иона приводит к трем типам дискретных радиационных переходов. Первый из них называется *спонтанным излучением* и соответствует второму слагаемому в множителе $(\bar{n}_{\mathbf{k}\rho} + 1)$. Присутствие этого слагаемого означает возможность радиационного перехода $u \rightarrow l$ (как в линиях, так и в непрерывном спектре) с вышележащего уровня атома на более низкий даже в отсутствие квантов внешнего поля излучения. Первое слагаемое $\bar{n}_{\mathbf{k}\rho}$ в формуле (4.1.6) определяет интенсивность *вынужденного излучения* в линии $u \rightarrow l$. Формула (4.1.8) определяет вероятность поглощения фотона в линии перехода $l \rightarrow u$.

Дипольное излучение

Формулы (4.1.6) и (4.1.8) справедливы для любой длины волны излучения $\lambda = c/\nu$. В то же время длина волны обычно анализируемого УФ, оптического и ИК излучения $\lambda \gg \langle L \rangle$, где $\langle L \rangle$ - размер излучающей системы. В этом случае $\mathbf{k}\mathbf{r} \ll 1$ и $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \approx 1$. Тогда $\langle u | \mathbf{p} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} | l \rangle \approx m \langle u | \mathbf{v} | l \rangle = -i\omega m \langle u | \mathbf{r} | l \rangle$. При выводе данного соотношения использована формула перехода от матричного элемента оператора производной оператора к матричному элементу самого оператора: $\langle u | d\hat{O}/dt | l \rangle = -i\omega \langle u | \hat{O} | l \rangle$, где $\omega = \omega_{ul} = 2\pi\nu_{ul} = (E_u - E_l)/\hbar$ [114, Nagirner 2004].

Величина $\mathbf{D} = e\mathbf{r}$ — дипольный момент системы, поэтому приближение $\mathbf{k}\mathbf{r} \ll 1$ носит название *дипольного приближения*.

Вероятность перехода $u \rightarrow l$ в телесном угле $d\Omega$ для спонтанного излучения

$$dA_{ul}^{(\rho)} = \frac{\omega_{ul}^3}{2\pi\hbar c^3} |\mathbf{e}_{\mathbf{k}\rho} \mathbf{D}_{ul}|^2 d\Omega, \quad (4.1.9) \quad \text{Eq. AabDipdOmega}$$

где $\mathbf{D}_{ul} = \langle u | \mathbf{D} | l \rangle$ — матричный элемент дипольного момента излучающей системы (атома или иона). Для выполнения интегрирования в формуле (4.1.9) перейдем к сферической системе координат, тогда $d\Omega = \sin\theta d\theta d\varphi$. Выберем ось z направленной вдоль вектора дипольного момента \mathbf{D} , а векторы поляризации $\mathbf{e}_{\mathbf{k}\rho}$ так, что вектор $\mathbf{e}_{\mathbf{k}2}$ будет перпендикулярен оси z , а $\cos(\widehat{\mathbf{e}_{\mathbf{k}2}\mathbf{D}}) = 0$. Тогда косинус угла между вектором $\mathbf{e}_{\mathbf{k}1}$ и осью z $\cos(\widehat{\mathbf{e}_{\mathbf{k}1}\mathbf{D}}) = \sin\theta$.

Полная вероятность спонтанного перехода $a \rightarrow b$ получается после интегрирования и суммирования по всем направлениям поляризации ρ . Сумма

$$\sum_{\rho=1,2} \int_{4\pi} |\mathbf{e}_{\mathbf{k}\rho} \mathbf{D}_{ab}|^2 \sin\theta d\theta d\varphi = \frac{8\pi}{3} |\mathbf{D}_{ul}|^2, \quad (4.1.10) \quad \text{Eq. AabDipAuxInt}$$

тогда

$$A_{ul} = \frac{4\omega_{ul}^3}{3\hbar c^3} |\mathbf{D}_{ul}|^2. \quad (4.1.11) \quad \text{Eq. AabDip}$$

Мультипольное излучение

В большинстве практически важных случаев дипольное излучение дает основной вклад в свечение астрофизических объектов. Однако, в ряде случаев, дипольное излучение запрещено *правилами отбора* (см. пункт 4.1.2). При этом становится важным квадрупольное, магнитодипольное, магнитоквадрупольное и т.д. излучение, объединяемые общим названием *мультипольное излучение*.

Разложение $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ по степеням $\mathbf{k}\mathbf{r}$ дает мультипольное излучение высших электрических и магнитных мультипольных моментов. При этом, однако, трудно разделить поля электрических и мультипольных моментов. Более удобно для анализа мультипольного излучения использовать волновые уравнения, которым вдали от зарядов удовлетворяют напряженности электрического и магнитного поля:

$$\Delta E + k^2 E = 0, \quad \Delta H + k^2 H = 0. \quad (4.1.12) \quad \text{Eq. HE-WaveEq}$$

Решение данного уравнения может быть представлено в виде разложения напряженностей поля по полям мультиполей [121]:

$$\mathbf{E} = \sum_{\kappa} \sum_{m_{\kappa}=-\kappa}^{\kappa} (\mathbf{E}_{\kappa m}^{\text{э}} + \mathbf{E}_{\kappa m}^{\text{м}}), \quad \mathbf{H} = \sum_{\kappa} \sum_{m_{\kappa}=-\kappa}^{\kappa} (\mathbf{H}_{\kappa m}^{\text{э}} + \mathbf{H}_{\kappa m}^{\text{м}}). \quad (4.1.13) \quad \text{Eq. PhotonFiledExpans}$$

Каждому слагаемому в разложениях (4.1.13) соответствует фотон с определенным моментом κ , проекцией момента m_{κ} и четностью π относительно операции инверсии $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$.

При этом принято следующее соглашение. Если при переходе $u \rightarrow l$ излучается фотон с моментом κ относительно атома (в единицах \hbar), где $\kappa = 1, 2, 3, \dots$, и четностью $\pi = (-1)^{\kappa}$, то говорят об электрическом (э) излучении мультипольности κ ($E\kappa$ -излучении), а при четности $\pi = (-1)^{\kappa+1}$ – магнитном (м) излучении мультипольности κ ($M\kappa$ -излучении).

Вероятности $M\kappa$ и $E\kappa + 1$ излучения по порядку величины в силу обычно выполняющегося условия $\mathbf{k}\mathbf{r} \ll 1$ в $10^{-4} - 10^{-6}$ раз меньше, чем вероятности $E\kappa$ излучения, поэтому наибольшую вероятность имеют электрические дипольные ($E1$) переходы, если они разрешены правилами отбора (см. ниже) и матричные элементы $\langle u | \mathbf{D} | l \rangle$ отличны от нуля.

Согласно [121] вероятность спонтанного радиационного перехода $\gamma J \rightarrow \gamma' J'$ между уровнями тонкой структуры γJ и $\gamma' J'$ атома, сопровождающегося излучением электрического мультипольного $E\kappa$ излучения, определяется следующим выражением:

$$A_{\kappa}^{\text{э}}(\gamma J - \gamma' J') = \frac{2(2\kappa + 1)(\kappa + 1)}{[(2\kappa + 1)!!]^2} \frac{k^{2\kappa+1}}{\hbar} \frac{1}{2J + 1} S_{\kappa}(\gamma J, \gamma' J'). \quad (4.1.14) \quad \text{Eq. Ek-prob}$$

Здесь γ и γ' означают совокупности квантовых чисел атома, описывающих уровни, между которыми происходит переход, \varkappa – мультипольность перехода.

Величина

$$S_{\varkappa}(\gamma J, \gamma' J') = \sum_{MM'm} \left| \langle \gamma JM | \hat{Q}_{\varkappa m} | \gamma' J' M' \rangle \right|^2, \quad (4.1.15) \quad \text{Eq.LineStr}$$

называется *силой линии* электрического мультипольного перехода порядка \varkappa . Оператор $\hat{Q}_{\varkappa m} \propto E_{\varkappa m}^{\varkappa}$ в разложении [Eq.PhotonFiledExpanis](#) (4.1.13).

Силы линии связаны с радиальными интегралами перехода. Обычно при радиационных переходах меняются квантовые числа только одного электрона, который называется *оптическим*, тогда как состояние остальных электронов атома (атомного остатка или атомного остова) не меняется. Если обозначить через γ_0 набор квантовых чисел, описывающих состояние атомного остова, то в приближении *LS*-связи радиационный переход между уровнями J и J' атома можно представить как $\gamma_0 n'l'L'S'J' \rightarrow \gamma_0 n'lLSJ$. Для этого перехода сила линии

$$S_{\varkappa}(\gamma J, \gamma' J') = S_{\varkappa}(\gamma_0 n'lLSJ, \gamma_0 n'l'L'S'J') = C_{l'l'} (R_{n'l,n'l'}^{\varkappa})^2. \quad (4.1.16) \quad \text{Eq.LineStr-LSJ}$$

Радиальный интеграл перехода

$$R_{n'l,n'l'}^{\varkappa} = \int_0^{\infty} P_{nl}(r) r^{\varkappa} P_{n'l'}(r) dr. \quad (4.1.17) \quad \text{Eq.Rnln'l'}$$

Формулы для угловых множителей $C_{l'l'}$ даны, например в [Sobelman1977](#) [121]. Значения этих множителей в простейших случаях приведены в пункте [ss.SigmaPhi](#) 4.2.1.

Перейдем к излучению магнитных мультиполей. Для атомной спектроскопии основной интерес представляет магнитное дипольное излучение $\varkappa = 1$, так как интенсивность излучения высших магнитных мультиполей быстро убывает с ростом \varkappa .

Вероятность магнитного дипольного *M1* перехода $\gamma J \rightarrow \gamma' J'$ между уровнями тонкой структуры γJ и $\gamma' J'$ атома, сопровождающегося излучением электрического мультипольного *Ek* излучения определяется следующим выражением:

$$A_1^m(\gamma J - \gamma' J') = \frac{4\omega^3}{3\hbar c^3} \frac{1}{2J+1} S_1^m(\gamma J, \gamma' J'), \quad (4.1.18) \quad \text{Eq.M1-prob}$$

где ω – угловая частота перехода, а сила линии магнитного дипольного перехода

$$S_1^m(\gamma J, \gamma' J') = \sum_{MM'} \left| \langle \gamma JM | \mathfrak{m} | \gamma' J' M' \rangle \right|^2. \quad (4.1.19) \quad \text{Eq.M1-S}$$

Здесь

$$\mathfrak{M} = -\frac{e\hbar}{2mc} \sum_i (\mathbf{l}_i + 2\mathbf{s}_i) - \quad (4.1.20) \quad \boxed{\text{Eq. OperMagnMom}}$$

оператор магнитного момента. В LS -связи магнитные дипольные переходы возможны только между уровнями одного терма. Для перехода $J \rightarrow J' = J - 1$

$$S_1^m(\gamma SLJ, \gamma SLJ') = \left(\frac{e\hbar}{2m_e c} \right)^2 \frac{(L + S + J + 1)(L + S - J + 1)(S + J - L)(J + L - S)}{4J}. \quad (4.1.21) \quad \boxed{\text{Eq. M1-SJJ-1}}$$

Формулы для вероятности магнитодипольных переходов не содержат радиальных интегралов, как для электрических мультипольных переходов. Вместо радиального интеграла в формулу для силы линии входит магнетон Бора $e\hbar/2mc = (1/2)\alpha e a_0$. Для дипольного излучения радиальный интеграл перехода $R_{nl,n'l'}^1$ по порядку величины равен $e a_0$. Таким образом, вероятность магнитодипольного излучения примерно в α^2 раз меньше вероятности электрического дипольного излучения.

Силы осцилляторов и времена жизни уровней

Величина A_{ki} в сильной степени зависит от типа радиационного перехода. Для астрофизических условий наиболее важны электрические дипольные (E1), электрические квадрупольные (E2) и магнитные дипольные (M1) переходы. Вероятности² электрических дипольных переходов составляют $\simeq 10^8 - 10^9 \text{ с}^{-1}$. Вероятности электрических квадрупольных и магнитных дипольных переходов по порядку величины равны $\simeq 10^2 - 10 \text{ с}^{-1}$.

Подставляя в выражения $\boxed{\text{Eq. Ek-prob}}$ и $\boxed{\text{Eq. M1-prob}}$ для вероятностей E1, E2 и M1-переходов численные значения атомных констант, получим:

$$g_l A_{li}^{E1, M1} = 2.67 \cdot 10^9 \Delta e^3 S_{li}, \quad g_l A_{li}^{E2} = 1.78 \cdot 10^3 \Delta e^5 S_{li}, \quad (4.1.22) \quad \boxed{\text{Eq. Aik-Sik}}$$

где $\Delta e = E_{li}/Ry$ — энергия перехода в ридбергах ($Ry = 13.606 \text{ эВ}$), g_l — статистический вес уровня l .

Силы линий связаны с безразмерными силами осцилляторов f_{il} :

$$g_l f_{il}^{E1, M1} = \frac{1}{3} \Delta e S_{li}, \quad g_l f_{il}^{E2} = 2.22 \cdot 10^{-7} \Delta e^3 S_{li}. \quad (4.1.23) \quad \boxed{\text{Eq. Sik-fik}}$$

Используя соотношения $\boxed{\text{Eq. Aik-Sik}}$ и $\boxed{\text{Eq. Sik-fik}}$, можно установить связь между вероятностями переходов и соответствующими силами осцилляторов:

$$g_l A_{li}^{E1, E2, M1} = 8.01 \cdot 10^9 \Delta e^2 g_l f_{il}. \quad (4.1.24) \quad \boxed{\text{Eq. Aik-fik}}$$

² см. сноску на стр. $\boxed{\text{Comm. TransProb}}$ 43

Вероятность перехода A_{ki} определяет скорость перехода атомов из состояния n_k в состояние n_i . Полная вероятность всех радиационных переходов с уровня k равна $A_k = \sum_{j < k} A_{kj}$ и определяет скорость уменьшения населенности уровня n_k в результате радиационных переходов. В условиях разреженной астрофизической плазмы радиационные переходы на нижележащие уровни являются основным способом опустошения уровней, тогда скорость опустошения уровней

$$\frac{dn_k}{dt} = -n_k A_k. \quad (4.1.25) \quad \boxed{\text{Eq. dnk/dt}}$$

Решение этого уравнения $n_k(t) = n_k(0)e^{-t/\tau_k}$ определяет зависимость населенности уровня k от времени. Величина

$$\tau_k = \frac{1}{A_k} = \frac{1}{\sum_{j < k} A_{kj}} - \quad (4.1.26) \quad \boxed{\text{Eq. tau(k)}}$$

называется *временем жизни уровня k* (точнее *радиационным* временем жизни, так как оно определяется скоростью радиационных переходов с уровня k). Для большинства атомных (ионных) уровней значение τ_k очень мало и составляет $10^{-8} - 10^{-10}$ с.

Однако для ряда атомов и ионов дипольные радиационные переходы с низколежащих уровней, принадлежащих основной конфигурации атома, запрещены правилами отбора. Все переходы с этих уровней на нижележащие являются запрещенными, поэтому времена жизни этих уровней достигают $10^{-2} - 10^2$ с. Такие уровни называются *метастабильными*. В разреженной плазме населенности этих уровней могут быть велики, поэтому запрещенные переходы с этих уровней имеют большую интенсивность и в значительной степени определяют свечение газовых туманностей, корон Солнца и звезд, межзвездной и межгалактической среды и других астрофизических объектов низкой плотности.

Вероятности радиационных переходов

Как было отмечено выше, возможны три типа радиационных переходов между дискретными уровнями атома или иона.

Скорости радиационных переходов указанных типов традиционно выражаются через так называемые *эйнштейновские вероятности переходов*³, определяемые таким образом, что в единичном объеме среды с концентрацией n_k атомов в состоянии k за единицу времени происходит

$$\begin{cases} n_k A_{ki} & \text{спонтанных переходов} & k \rightarrow i, \\ n_k B_{ki} \overline{J_{ki}} & \text{вынужденных переходов} & k \rightarrow i, \\ n_i B_{ik} J_{ki} & \text{поглощений фотона в линии} & i \rightarrow k, \end{cases} \quad (4.1.27) \quad \boxed{\text{Eq. RateRadTrans}}$$

³ см. сноску на стр. 43 Comm. TransProb

где $\overline{I_{ki}}$ — средняя интенсивность излучения в линии $k \rightarrow i$ (см., например [122, 106]).

Эйнштейновские вероятности переходов имеют размерность s^{-1} и могут быть выражены друг через друга:

$$B_{ki} = \frac{c^2}{2h\nu_{ik}^3} A_{ki}, \quad B_{ki} = \frac{g_i}{g_k} B_{ik} A_{ki}. \quad (4.1.28) \quad \text{Eq. Aik-Bik-Bki}$$

Вывод формул (4.1.28) из соотношений детального баланса представлен, например, в учебниках [113, 122]. Вместо термина вероятность перехода часто используется термин *коэффициент вероятности перехода*.

4.1.2 Мультиплеты и линии. Правила отбора

s.SelRules

Силы линий электрических и магнитных мультипольных переходов отличны от нуля только при выполнении определенных условий, накладываемых на квантовые числа перехода и называемых *правилами отбора*. Эти правила определяются угловыми коэффициентами $C_{l\omega}$, связывающими радиальные интегралы перехода и силы линий, и могут быть получены из выражений для сил линий, приведенных в [118, 121]. Правила отбора определяются законами сохранения угловых моментов и чётности состояний при радиационных переходах.

Правила отбора для полного момента для переходов между уровнями $J - J'$ не зависят от типа связи:

$$|\Delta J| = |J' - J| = \kappa, \kappa - 1, \dots, 0; \quad J + J' \geq \kappa. \quad (4.1.29) \quad \text{Eq. SelRules-J}$$

Для компонентов $JM - J'M'$ справедливы правила отбора для проекции момента M :

$$|\Delta M| = |M' - M| = -\kappa, -\kappa + 1, \dots, \kappa. \quad (4.1.30) \quad \text{Eq. SelRules-M}$$

Эти правила отбора важны при анализе компонентов линии $J - J'$, которая расщепляется в присутствии внешнего электрического или магнитного полей.

Кроме правил отбора по моменту имеются правила отбора по чётности начального и конечного состояний перехода. Чётность операторов электрических и магнитных мультипольных моментов порядка κ равна $(-1)^\kappa$ и $-(-1)^\kappa$ соответственно. Таким образом, при электрическом мультипольном переходе порядка κ (переход $E\kappa$) чётность должна меняться на $(-1)^\kappa$, а при магнитном переходе $M\kappa$ — на $-(-1)^\kappa$.

Это означает, что электрические дипольные переходы происходят между уровнями разной чётности, а электрические квадрупольные переходы — между уровнями одной чётности и т.д. Магнитные дипольные переходы могут происходить только между уровнями одной чётности.

Правила отбора по чётности и полному моменту (4.1.29) являются абсолютно строгими. При условии справедливости какого-либо типа связи (например LS -связи) выполняются дополнительные правила отбора.

Будем считать, что исходное и конечное атомные состояния могут быть описаны в LS -связи в одноконфигурационном приближении. Рассмотрим переходы $\gamma nlLSJ \rightarrow \gamma' n'l'L'S'J'$, где γ и γ' — дополнительные наборы квантовых чисел состояний $nlLSJ$ и $n'l'L'S'J'$ соответственно, описывающие состояния остальных электронов атома.

Для $E\kappa$ переходов в LS -связи справедливы следующие правила отбора:

$$\begin{aligned} \Delta J &= 0, \pm 1, \dots, \pm \kappa, \quad J + J' \geq \kappa; \\ \Delta L &= 0, \pm 1, \dots, \pm \kappa; \quad L + L' \geq \kappa; \quad \Delta S = 0; \quad \gamma = \gamma'. \end{aligned} \quad (4.1.31) \quad \boxed{\text{Eq.Se1Rules}}$$

При этом изменяются квантовые числа только одного электрона, а состояния остальных электронов атома не меняются. Для $E1$ переходов $\Delta l = \pm 1$ и для $E2$ переходов $\Delta l = 0, \pm 2$. Правила отбора для $M1$ переходов $LSJ \rightarrow L'S'J'$ таковы:

$$\Delta J = 0, \pm 1; \quad \Delta L = 0; \quad \Delta S = 0; \quad \Delta l = 0. \quad (4.1.32) \quad \boxed{\text{Eq.Se1RulM1}}$$

Магнитодипольные переходы происходят только между уровнями одного терма ($\Delta L = 0, \Delta S = 0$).

Вследствие приближенности LS -связи и одноконфигурационного приближения возможны переходы с нарушениями этих правил, которые называются *запрещенными* переходами. Классификация запрещенных переходов определяется тем, какие именно правила отбора нарушаются. Так например, переходы, в которых нарушается правило отбора $\Delta S = 0$, т. е. переходы между уровнями термов разной мультиплетности, называются *интеркомбинационными*. Примером интеркомбинационного перехода является переход иона C^{2+} ($2s^2 1S_0 - 2s2p^3 P_1^o$). Линия этого перехода с длиной волны $\lambda 1908.734$ наблюдается в спектрах планетарных туманностей, областей НII, оболочек новых звезд и других объектов.

В Табл. 4.1 представлена принятая в астрофизике классификация радиационных переходов, отличающаяся от используемой в атомной спектроскопии. В частности, все электрические квадрупольные $E2$ переходы считаются запрещенными вне зависимости от того, соблюдаются или нет для них правила отбора. В первой колонке отмечен вид перехода: электрический (E) или магнитный (M). Во второй колонке обозначен тип перехода: r - разрешенный, f - запрещенный, i - интеркомбинационный, $2e$ - двухэлектронный. В колонке 3 указано, какие правила отбора нарушены для данного типа переходов. В последней колонке приведены типичные значения вероятностей переходов различных типов для линий переходов в видимой и ближней инфракрасной областях спектра элементов с небольшими значениями заряда ядра Z и их ионов.

Отметим, что разрешенные дипольные переходы наиболее важны в образовании спектров астрофизических объектов. Запрещенные переходы (в том числе квадрупольные и магнитодипольные переходы) су-

Таблица 4.1. Классификация типов переходов

Переход	Тип перехода	Нарушения правила отбора	$A_{ki}(\text{s}^{-1})$
$E1$	r	нет	$10^7 - 10^9$
$E1$	i	$\Delta S \neq 0$	$10^2 - 10^4$
$E1$	$2e$	изменение главных квантовых чисел двух или трех электронов	$10^6 - 10^8$
$E2$	f	нет	$1 - 10^2$
$E2$	f	$\Delta S \neq 0$	$10^{-4} - 1$
$M1$	f	нет	$1 - 10$
$M1$	f	переходы между уровнями различных термов	$10^{-4} - 1$

tableTransType

щественны, главным образом, для переходов с метастабильных уровней атомов и ионов, населенности которых (в условиях астрофизической плазмы низкой плотности), могут быть весьма велики.

4.1.3 Радиационные переходы в атоме водорода и водородоподобных ионов

Радиационные переходы водорода

Переход атома из возбужденного состояния с энергией E_k в состояние с энергией $E_i < E_k$ сопровождается излучением фотона с энергией $h\nu_{ik} = E_k - E_i$. Обратный переход $i \rightarrow k$ может произойти при поглощении фотона с энергией $h\nu_{ik}$.

Радиационные переходы между состояниями nlm , $n'l'm'$ возможны лишь в том случае, если квантовые числа l, m изменяются на величины

$$\Delta l = l' - l = \pm 1, \quad \Delta m = m' - m = 0, \pm 1. \quad (4.1.33) \quad \text{Eq.SelRule}$$

На квантовые числа n и n' никаких ограничений не накладывается.

Соотношения (4.1.33) являются правилами отбора для дипольного излучения водорода и водородоподобных ионов и соответствуют общим правилам отбора для мультипольного излучения, описанным в пункте 4.1.2. Переходы, удовлетворяющие условиям (4.1.33), называются, как и в общем случае, разрешенными переходами. Вероятности дипольных радиационных переходов для атома водорода и формулы для их расчета даны в приложении Б.1.

Если условия (4.1.33) не выполняются, то дипольное излучение невозможно. В этом случае может оказаться возможным квадрупольное или магнитодипольное излучение. Вероятность таких переходов, однако, примерно в 10^5 раз меньше вероятности дипольных переходов.

Правила отбора (4.1.33) позволяют выяснить, с какими переходами связаны серии линий в спектре водорода, длины волн которых удовле-

Таблица 4.2. Длины волн головных линий и пределы серий линий в спектре водорода

Серия	k	$\lambda_{k,k+1}$	предел серии
Лаймана	1	1215.67 Å	911.8 Å
Бальмера	2	6562.79 Å	3646.0 Å
Пашена	3	1.8751 мкм	8203.6 Å
Брэкета	4	4.0511 мкм	1.46 мкм
Пфундта	5	7.4578 мкм	2.28 мкм

творяют соотношению:

$$\frac{1}{\lambda_{k,n}} = R_{\text{УН}} (1/k^2 - 1/n^2) . \quad (4.1.34) \quad \text{Eq. HI-ser}$$

Здесь $R_{\text{УН}}$ – постоянная Ридберга для водорода, равная $109677.581 \text{ см}^{-1}$. Значению $k = 1$ и $n = 2, 3, 4, \dots$ соответствуют линии серии Лаймана, $k = 2$ и $n = 3, 4, 5, \dots$ – серии Бальмера и т.д. К коротковолновой границе серии ($n \rightarrow \infty$) примыкает непрерывный спектр, связанный с переходами из состояний непрерывного спектра ($E > 0$) в состояния дискретного спектра.

Длины волн головных членов серий $\lambda_{k,k+1} = 911.763 k^2(k+1)^2/(2k+1)$. Характеристики основных серий линий водорода приведены в табл. 4.2. Отметим, что для линий с длиной волны $\lambda > 2000 \text{ Å}$ используются длины волн в воздухе, которые примерно на 0.03% меньше длины волн в вакууме (см. § А.3.1).

Для линий спектра водорода приняты специальные обозначения. Линии серии Лаймана в порядке убывания длин волн обозначаются $L_\alpha, L_\beta, L_\gamma$ и т. д.; линии серии Бальмера — H_α, H_β и т. д.

Переходы водородоподобных ионов

Системы уровней одноэлектронных ионов $\text{He}^+, \text{Li}^{++}$ и т.п. подобны той, которая имеет место для водорода. Такие ионы называются водородоподобными. Постоянная Ридберга $R_{\text{УМ}} = R_{\text{У}\infty} (\mu/m_e) = R_{\text{У}\infty}/(1 + m_e/M)$ зависит от приведенной массы $\mu = m_e M/(m_e + M)$ и, следовательно, от массы ядра M . Здесь $R_{\text{У}\infty}$ – постоянная Ридберга для бесконечной массы ядра, приведенная в табл. 4.3.

Поскольку $m_e \ll M$, отличие постоянной $R_{\text{У}}$ для двух разных масс, M_1 и M_2 , невелико, хотя и лежит в пределах точности эксперимента. Так, для спектров H и He^+ отношение $R_{\text{УH}}/R_{\text{УHe}} = 0.999593$, что хорошо согласуется с экспериментом. В табл. 4.3 приводятся экспериментальные значения постоянной Ридберга для водорода, дейтерия, изотопов He^3 и He^4 иона гелия. Значение $R_{\text{У}\infty}$ часто обозначается просто $R_{\text{У}}$.

Таблица 4.3. Значения постоянной Ry для водородоподобных ионов

Ry	значение в см^{-1}
Ry_∞	109737.311 ± 0.012
Ry_H	109677.575 ± 0.012
Ry_D	109707.420 ± 0.012
Ry_{He^3}	109717.346 ± 0.012
Ry_{He^4}	109722.268 ± 0.012

Table.RyHlike

В соответствии с принятой в спектроскопии системой обозначений спектры нейтральных атомов обозначаются римской цифрой I, следующей за символом химического элемента, спектры однократных ионов - цифрой II, двукратных - цифрой III и т.д. т.е., например, резонансная линия водородоподобного иона O^{7+} обозначается $O\text{VIII } \lambda 18.969 \text{ \AA}$

4.2 Фотоионизация и фоторекомбинация

s.PhotIonPhRec

Процесс поглощения атомом (ионом) фотона, при котором энергия фотона передается одному из атомных электронов и происходит его отрыв от атома, называется *фотоионизацией*:



В результате фотоионизации образуется ион X^+ и свободный электрон e . Фотоионизация происходит только в случае, если энергия фотона больше значения I_k - потенциала ионизации с уровня k . Это означает, что существует *пороговая* частота ионизации ν_0 , такая, что фотоионизация может быть произведена только фотоном с энергией $h\nu \geq I_k$.

Обратный к фотоионизации процесс



при котором атом (ион) захватывает свободный электрон на дискретный уровень k и происходит излучение фотона $h\nu$ в непрерывном спектре с энергией $h\nu = E + I_k$, где $E = mv^2/2$ - энергия свободного электрона, v - его скорость, называется фоторекомбинацией.

4.2.1 Сечения фотоионизации

ss.SigmaPhi

Определение скоростей фотоионизации и фоторекомбинации требует знания сечений фотоионизации. Число актов фотоионизации в единичном объеме 1 см^3 в единицу времени определяется сечением процесса $\sigma^{\text{phi}}(E) = \sigma_X^{\text{phi}}(E)$, где X - ионизуемый атом (ион), E - энергия оторванного фотоэлектрона. В астрофизических задачах угловое распределение фотоэлектронов обычно несущественно, поэтому будем рассматривать

усредненные по углам сечения. В одноконфигурационном приближении фотоионизацию можно рассматривать как переход атома из состояния дискретного спектра $\gamma nl\Gamma$ в состояние непрерывного спектра $\gamma E'l'\Gamma'$. Здесь γ — совокупность квантовых чисел атомного остатка; E — энергия фотоэлектрона; Γ — совокупность квантовых чисел, описывающих состояние атома с оптическим электроном nl , Γ' — состояние непрерывного спектра. Сечение фотоионизации (обычно используется суммарное по всем возможным значениям $l'\Gamma'$ сечение) описывается следующим образом [70]:

$$\sigma^{\text{phi}}(E) = \sum_{l'} \sigma_{l'}^{\text{phi}}(E) = \frac{4}{3} \pi^2 k^2 e^2 \sum_{l'} C_{ll'} R_{nl,El'}^2, \quad C_{ll'} = \sum_{\Gamma'} C_{\Gamma, l'l'\Gamma'}. \quad (4.2.3) \quad \boxed{\text{Eq. sigmaPhi}}$$

Здесь $k = \omega/c = 2\pi/\lambda$ — волновое число фотона; $C_{ll'} = C_{\Gamma, l'l'\Gamma'}$ — коэффициенты, зависящие от способа связи угловых моментов атомного остова и оптического электрона и от набора квантовых чисел Γ . Как видно из формулы (4.2.3), полное сечение $\sigma(E)$ складывается из парциальных сечений $\sigma_{ll'}(E)$, соответствующих определенным наборам квантовых чисел фотоэлектрона. В астрофизических приложениях нас будут интересовать только полные сечения фотоионизации. Радиальный интеграл перехода

$$R_{nl,El'} = (nl|r|El') = \int_0^\infty P(nl|r) r P(El'|r) dr. \quad (4.2.4) \quad \boxed{\text{Eq. Rnlnl'}}$$

Здесь $P(nl|r) = rR(nl|r)$, $P(El'|r) = rR(El'|r)$ — радиальные волновые функции связанного (nl) и свободного (El') электронов соответственно. Угловые коэффициенты $C_{ll'}$ определяются только способом связи моментов атомного остова и оптического электрона независимо от его принадлежности непрерывному или дискретному спектру, поэтому они такие же, как и для переходов между дискретными уровнями, с теми же значениями l и l' . Соответствующие формулы приведены в монографиях [115, 121, 126], здесь же мы дадим выражения для коэффициентов $C_{ll'}$ в простейших случаях при справедливости приближения LS -связи. Для переходов $\gamma nlLS - \gamma E'l'S_1$ ($\gamma = L_1 S_1$ — полные орбитальный момент и спин атомного остатка; LS — их значения для атома)

$$C_{ll'} = (2S+1) \sum_{L'} (2L'+1) \left\{ \begin{matrix} l & L & L_1 \\ L' & l' & 1 \end{matrix} \right\}^2 l_>, \quad (4.2.5)$$

где $l_> = \max(l, l')$; если $L_1 = 0$, то $C_{ll'} = l_>/(2l+1)$. Величина в фигурных скобках называется $6j$ -коэффициентом, формулы для расчета которого приведены, например, в книге [121].

При фотоотрыве электрона из оболочки эквивалентных электронов:
 $l^N \gamma LS \rightarrow l^{N-1} \gamma_1 L_1 S_1 E l'$

$$C_{l'w} = N \sum_{L'} (l^{N-1} (\gamma_1 L_1 S_1) l \parallel l^N \gamma LS)^2 (2L' + 1) \left\{ \begin{matrix} l & L & L_1 \\ L' & l' & 1 \end{matrix} \right\}^2 l_{>}, \quad (4.2.6) \quad \boxed{\text{Eq. C11'}}$$

Генеалогические коэффициенты оболочек s^2 и l^2 ($l^{N-1} (\gamma_1 L_1 S_1) l \parallel l^N \gamma LS$), связывающие волновые функции термов оболочек эквивалентных электронов l^{N-1} [\(Eq. sigmaPhi\)](#), равны 1 и $(1 + (-1)^{L+S})/2$ соответственно. Преобразуем выражение [\(4.2.3\)](#), выделяя в явном виде зависимость от борковского радиуса a_0 и выражая энергию фотона в ридбергах. Для перехода к атомным единицам достаточно положить $a_0 = 1, R_y = 1$. Тогда

$$\sigma(E) = \frac{4}{3} \pi^2 \alpha a_0^2 \left(\frac{\Delta E}{2R_y} \right) \sum_{l'} C_{l'w}(nl|r|El')^2, \quad (4.2.7) \quad \boxed{\text{Eq. sigmaE}}$$

где $\Delta E = h\nu$ — энергия ионизирующего фотона. Сечение фотоионизации связано со спектральным распределением силы осциллятора перехода $nl - E l'$ в непрерывном спектре:

$$\frac{df}{d[E/2R_y]} = \frac{df(nl - E l')}{[E/(2R_y)]} = \frac{2}{3} \left(\frac{\Delta E}{2R_y} \right) \sum_{l'} C_{l'w}(nl|r|El')^2, \quad (4.2.8) \quad \boxed{\text{Eq. df/dE}}$$

тогда

$$\sigma(E) = 2\pi^2 \alpha a_0^2 \frac{df}{d[E/2R_y]} = \frac{\pi e^2}{mc} \frac{df}{d\nu}. \quad (4.2.9) \quad \boxed{\text{Eq. sigma-fik}}$$

Методы расчета сечений фотоионизации различаются в зависимости от способа вычисления радиальных интегралов перехода. Величина радиального интеграла $(nl|r|El')$ определяется выбором волновых функций [§ 3.1](#) непрерывного спектра. В приближении центрального поля (см. [§ 3.1](#)) для расчета величины $(nl|r|El')$ используются: водородоподобное приближение, метод квантового дефекта, методы модельного потенциала и Хартри-Фока и метод экстраполяции сил осцилляторов дискретного спектра.

В водородоподобном приближении радиальная часть волновой функции свободного электрона El определяется решением уравнения Шредингера [\(2.1.4\)](#). [Eq. RadShrEq](#) Перейдя к атомным единицам ($e = \hbar = m_e = 1$), получим:

$$\left\{ -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r} + U(r) - E \right\} P^{\text{Hz}}(El|r) = 0, \quad (4.2.10) \quad \boxed{\text{Eq. ShredRadial}}$$

где $U(r) = -Z/r$ — потенциал кулоновского поля, в котором находится электрон, Z — заряд водородоподобного иона: He^{2+} , Li^{3+} и т.д. При применении этого приближения к неводородоподобным ионам $Z = Z_{\text{ост}}$ ($Z_{\text{ост}}$ — заряд атомного остатка). Функция $P^{\text{Hz}}(El|r)$ выражается через

гипергеометрическую функцию многого аргумента, ее асимптотическое выражение при $r \gg 1$ следующее [13]:

$$P^{\text{HZ}}(El|r) = \frac{1}{\sqrt{kZ}} \sin(x), \quad (4.2.11) \quad \text{Eq.ShredRadialSol}$$

где

$$x = kr - l\pi/2 + Z \ln(2kr)/k + \delta_l, \quad \delta_l = \arg \Gamma(l + 1 - iZ/k). \quad (4.2.12) \quad \text{Eq.xdelta}$$

Радиальные интегралы $(nl|r|El')$ для водородоподобных ионов были вычислены Берджесом (цитируются в [11]) и преобразованы к удобной для расчетов форме в работе [26].

От сечений фотоионизации $\sigma^{\text{HI}}(\varepsilon')$ ($\varepsilon' = E/Z^2$ - приведенная энергия фотоэлектрона в ридбергах) можно перейти к соответствующим сечениям для водородоподобного иона с зарядом Z : $\sigma^{\text{HZ}}(\varepsilon') = \sigma^{\text{HI}}(\varepsilon')/Z^2$. Переход к длинам волн ионизирующего фотона производится по формуле $\lambda = \lambda_0/(1 + \varepsilon'n^2)$, где λ_0 - пороговое значение λ . Водородоподобные сечения могут использоваться и для состояний nl неводородоподобных ионов с $l > 3$. Таблицы значений $\sigma_{nl}^{\text{HI}}(\varepsilon')$ для $n = 4 \div 6$ приведены в работе [13].

Суммарные по l сечения хорошо описываются формулой Крамерса:

$$\sigma_n^{\text{Kp}}(\nu) = \frac{1}{n^2} \sum_l (2l + 1) \sigma_{nl}^{\text{Kp}}(\nu) = \frac{2^6}{3\sqrt{3}} \alpha [\pi a_0^2] \frac{n}{Z^2} \left(\frac{\nu_0}{\nu}\right)^3 g_n(\nu). \quad (4.2.13) \quad \text{Eq.SigmaKramers}$$

Здесь $\sigma(\nu)$ - сечение фотоионизации, рассчитанное на единичный интервал частот $d\nu$ и связано с сечением фотоионизации $\sigma(E)$ соотношением $\sigma(\nu)d\nu = \sigma(E)dE = \sigma(E)d(h\nu)$. Величина $g_n(\nu)$ - поправочный множитель порядка единицы, называемый *фактором Гаунта*. Удобные аппроксимационные выражения для фактора Гаунта даны в работах [47, 85], согласно последней из них

$$g_n(u) = 1 + 0.1728n^{-2/3}(1+u)^{-2/3}(u-1) - 0.0496n^{-4/3}(1+u)^{-4/3}(u^2 + \frac{4}{3} + 1), \quad (4.2.14) \quad \text{Eq.g_n(u)}$$

где $u = (h\nu - I_n)/I_n$ - энергия оторванного электрона в единицах I_n (пороговых единицах), I_n - потенциал ионизации атома в состоянии n . Функция $g_n(u)$ получается при постановке выражения $\nu = I_n(u + 1)/h$ в формулу для $g_n(\nu)$ и является, вообще говоря, другой функцией. Однако мы сохраним для удобства для этой функции то же имя g_n , так как это не приводит к ошибкам в вычислениях сечений. Аналитические выражения для фактора Гаунта, предложенные в работе [47], приводятся в формуле В.1.13 на странице 191.

Сравним в табл. 4.4 пороговые значения сечений фотоионизации (полученные при пороговой частоте фотоионизации $\nu = \nu_0$ такой, что $h\nu_0 =$

I_n), рассчитанные по формуле Крамерса, с точными значениями суммы $\sigma_n(\nu) = n^{-2} \sum_l (2l+1) \sigma_{nl}(\nu)$. Можно сделать вывод, что оба аналитических представления фактора Гаунта дают достаточно точные результаты с ошибкой не более 1-3%.

Таблица 4.4. Сечения фотоионизации с уровней водорода с $n = 1 - 6$ в порого ионизации, рассчитанные в различных приближениях

n	$\sigma^{\text{phi}}(\nu_0) \cdot 10^{17}, \text{cm}^2$			
	точное значение	$g_n = 1$	g_n по [85]	g_n по [47]
1	0.6297	0.7907	0.6148	0.6304
2	1.384	1.581	1.378	1.385
3	2.150	2.372	2.112	2.069
4	2.921	3.163	2.888	2.852
5	3.696	3.954	3.666	3.633
6	4.472	4.744	4.446	4.415

Table.HIphi(0)Kr

Простейшим обобщением водородоподобного приближения является введение экранировочного потенциала: замена Z на ζ — в формуле (4.2.14), где $\zeta = Z_{\text{ост}} - \sigma$. Величина $Z_{\text{ост}} = Z - N + 1$ — заряд атомного остатка, где N — число электронов атома, σ — параметр экранировки, который определяется по экспериментальным уровням энергии. Введение экранировки несколько уточняет сечение и улучшает согласие с экспериментом [124], но не позволяет описать более сложные случаи: ионизацию из оболочек l^N и т.д.

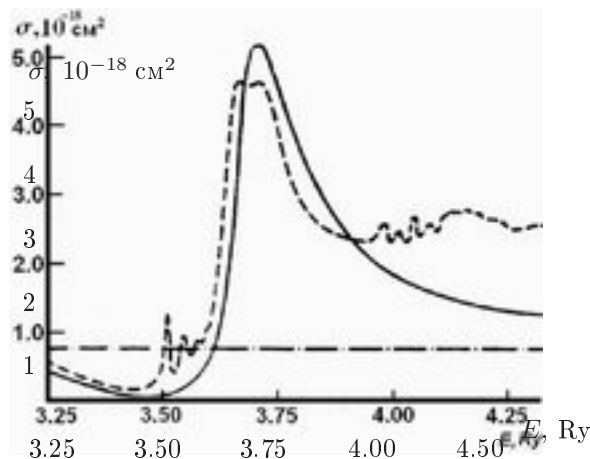


Рис. 4.2. Сечение фотоионизации $\sigma(\omega)$ атома Mn в основном состоянии $3d^5 4s^2$. Штрихпунктирная линия — расчет в приближении Хартри-Фока, сплошная — в приближении случайных фаз с обменом, пунктирная — экспериментальное сечение.

Fig.SigmaPhiMnI

Уточнение водородоподобного приближения. Методы квантового дефекта, Хартри-Фока и полуэмпирические

Водородоподобное приближение предсказывает следующую частотную зависимость сечения фотоионизации: сечение достигает максимума в пороге ионизации и монотонно убывает с ростом энергии фотоэлектрона (частоты ионизирующего фотона ν), т. е. $\sigma(\nu) \sim \nu^{-\alpha}$, где $\alpha = 2 \div 4$. Реальные же сечения (см. Рис. 4.2) имеют значительно более сложную зависимость от энергии фотона $h\nu$. Для многих атомов и ряда ионов кривая сечения имеет минимум вблизи порога, связанный с обращением в нуль матричного элемента $\langle nl|r|El' \rangle$ при неводородоподобных волновых функциях $P(nl|r)$ и $R(El|r)$ (куперовский минимум [124]). Максимальное значение сечения достигается вдали от порога, а в пороге ионизации сечение мало.

Одним из наиболее употребительных методов расчета сечений фотоионизации с учетом неводородоподобности потенциала атомного остатка является метод одноканального квантового дефекта (КД, слово одноканального обычно опускается) [99, III, 28]. В этом методе радиальная волновая функция свободного электрона является решением уравнения (4.2.10) с потенциалом $U(r)$, таким, что при $r \gg 1$ $U(r) = -Z_{\text{ост}}/r$, где $Z_{\text{ост}}$ – заряд атомного остатка.

Решение уравнения (4.2.10) при $r \gg 1$ имеет, согласно [28] вид $P(El|r) = \frac{1}{\sqrt{kZ_{\text{ост}}}} \sin(x + \delta(E))$, где величина x определена соотношением (4.2.12) и отличается от соответствующей водородной функции (4.2.11) наличием фазового сдвига $\delta(E)$, определяемого поведением потенциала $U(R)$ при малых r . Согласно [28] при малых значениях r , если $\exp(-2\pi Z_{\text{ост}}) \ll 1$, $\delta(E) = \pi\mu(E)$, причем $\mu(E)$ – экстраполированный в область $E > 0$ квантовый дефект $\mu_{\gamma nl}$, где γ – набор квантовых чисел атомного остатка.

В области $E < 0$ квантовый дефект $\mu_{\gamma nl} = n - n^*$, где эффективное квантовое число уровня $n^* = Z_{\text{ост}}/\sqrt{I_{\gamma nl}}$, а $I_{\gamma nl}$ – энергия ионизации атома с уровня γnl , измеренная в ридбергах. Для уровней γnl квантовый дефект $\mu_{nl}(E) = \mu_{nl}(-Z_{\text{ост}}^2/(n^*)^2)$. При необходимости учитывается зависимость квантового дефекта от дополнительных квантовых чисел (например, полного орбитального момента L и полного спина S атома), описывающие состояния атома с оптическим электроном nl , если энергии уровней γnl зависят от этих квантовых чисел.

Волновая функция непрерывного спектра метода КД с энергией $E = k^2$ (в ридбергах), имеющая правильный асимптотический вид, представляется суммой:

$$G_{kl}(R) = Z_{\text{ост}}^{-1/2} \{ F(\varepsilon'l, rZ_{\text{ост}}) \cos(\pi\mu(E)) - H(\varepsilon'l, rZ_{\text{ост}}) \sin(\pi\mu(E)) \} \quad (4.2.15) \quad \text{Eq. SolQD}$$

где $H(\varepsilon'l, rZ_{\text{ост}}) = (1 - e^{-\tau r})^{2l+1} H_0(\varepsilon'l, rZ_{\text{ост}})$, $\tau_l = 12 \div 14$, $F(\varepsilon'l, rZ_{\text{ост}})$ и $H(\varepsilon'l, rZ_{\text{ост}})$ – регулярное и нерегулярное решение уравнения (4.2.10). Множитель перед H_0 введен для устранения расходимости функции $H_0(\varepsilon'l, rZ_{\text{ост}})$ при $r \rightarrow 0$.

Основное приближение метода КД – замена точного решения уравнения (4.2.10) приближенной функцией (4.2.15), асимптотически стремящейся к точной функции $P(El|r)$ при $r \rightarrow \infty$. Так как величина радиального интеграла ($nl|r|El'$) зависит в основном от значений $r \gg 1$, то погрешность такой замены относительно мала, что обеспечивает для сечений фотоионизации не слишком сложных атомов и ионов (ионов С, N, O и т. д.), рассчитанных методом КД, отличие не более чем 10 - 20% от экспериментальных данных, по крайней мере в области частот, близких к порогу ионизации [Butler-1984, Raman-Attia-1986, 33, 80].

Для иллюстрации точности метода сравним на Рис. 4.3 сечения фотоионизации иона СIII, полученные методом КД и в приближении Хартри - Фока, а также описанным далее методом экстраполяции сил осцилляторов. Видно хорошее соответствие расчетов методом КД и более точными методами и неводородоподобность зависимости сечения фотоионизации от длины волны. В методе КД согласно уточненным формулам работы [Peach1967, 73]

$$\sigma^{\text{phi}}(\varepsilon') = \frac{8}{3} \alpha a_0^2 \frac{n^*(I_{nl}/Ry)}{(1 + \varepsilon'(n^*)^2)^3} \sum_l \frac{C_{ll'}}{\beta(n^*, l)} \times \left[G^{ll'}(n^*, \varepsilon') \cos(\pi(n^* + \mu(\varepsilon') + \chi^{ll'}(n^*, \varepsilon'))) \right]^2. \quad (4.2.16)$$

Eq.SigPhiQDPeach

Функции $G^{ll'}(n^*, \varepsilon')$ и $\chi^{ll'}(n^*, \varepsilon')$ табулированы в работе [Peach1967, 73] при $0 \leq \varepsilon' \leq 1$, $0.6 \leq n^* \leq 11$. Функция $\beta(n^*, l) \approx 1$. Использование приведенных там таблиц для вычислений не вполне удобно из-за необходимости хранения их в памяти компьютера и интерполяции по ε' и n^* для нахождения значений функций G и χ при промежуточных значениях параметров. Удобнее пользоваться аппроксимационными формулами для этих функций. Представим их в виде

$$G^{ll'}(n^*, \varepsilon') = \sum_{i,j=1}^3 g_{ij}(\varepsilon')^i (n^*)^{\alpha j};$$

$$\chi^{ll'}(n^*, \varepsilon') = \sum_{i,j=1}^3 \chi_{ij}(\varepsilon')^i (n^*)^{\alpha j}. \quad (4.2.17)$$

Eq.QD-Gxi

Коэффициенты аппроксимации g, χ, α для переходов $ns - \varepsilon'p$ приведены в табл. 4.5. Использование соотношений (4.2.17) обеспечивает точность вычисления функций G и χ не менее 0.01, что превышает точность самого метода КД. В случае больших главных квантовых чисел n расчет

по формулам метода КД требует знания соответствующих функций G и χ , вычисление которых затруднено из-за быстрых осцилляций функций $P(E|r)$. В этом случае можно использовать выражения, полученные в работе [DavydkinZoni1981](#) [6].

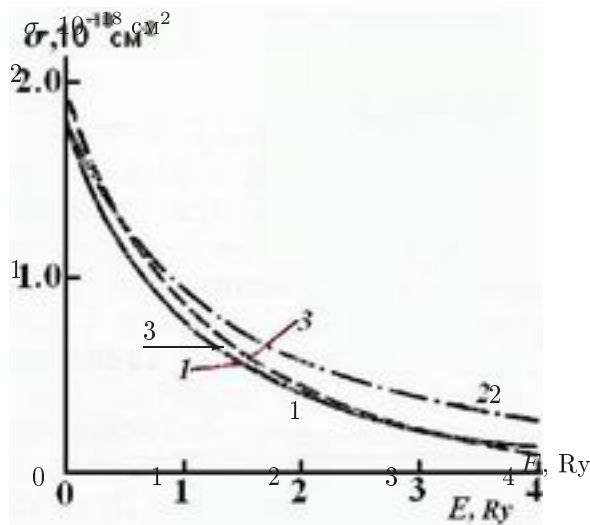


Рис. 4.3. Сечение фотоионизации $2s2p^1P^o - 2sEd$ иона C^{++} . 1 – расчет сделан методом квантового дефекта, 2 – методом экстраполяции сил осцилляторов, 3 – методом Хартри - Фока.

fig.SigmaPhiCIII

Модификацией метода КД является метод модельного потенциала. В этом методе потенциал атомного остатка представляется в виде аналитической функции с параметрами, определяемыми по экспериментальным значениям энергии уровней. Например, в работе [AvilovaPodlubnyi1975](#) [1] используется потенциал Фюсса $U(r) = -Z/r + B_l/r^2$ для получения волновой функции $P(E|r)$. Параметры B_l определяются по экспериментальным данным энергии термов $\gamma n l \Gamma$. При использовании потенциала Фюсса величина фазового сдвига [AvilovaPodlubnyi1975](#) [1]

$$\delta(E) = \arg \Gamma \left(1 + a_l - \frac{iZ}{k} \right) - \arg \Gamma \left(1 + l - \frac{iZ}{k} \right) + \frac{\pi}{2} (l - a_l) \quad (4.2.18)$$

Eq.PhSh_delta

дает поправки к методу КД. Другая разновидность метода модельного потенциала – метод орбитального квантового числа – изложена в работе [GruzdevSherstyk1976](#) [5].

Наиболее точным из одноконфигурационных приближений является метод Хартри-Фока, поэтому наиболее точный одноэлектронный потенциал атомного остатка получается при решении соответствующих уравнений Хартри-Фока. Обширные расчеты сечений фотоионизации методом Хартри-Фока даны в работе [VehLindaul1985](#) [97].

Таблица 4.5. Коэффициенты G^{sp} и χ^{sp}

Функция	Коэффициенты	i	α	$j = 0$	$j = 1$	$j = 2$	$j = 3$
G	g_{ij}	0	-1	0.5295	2.0475	1.5081	-0.6702
		1	0.5	-8.8226	15.2497	-7.5630	1.6229
		2	0.5	-1.4224	6.9869	-6.3424	0.9982
		3	0.5	2.2829	-6.1148	4.3287	-0.6395
χ	χ_{ij}	0	0.5	-0.1682	-0.1381	-0.0218	-0.0011
		1	0.5	0.2439	-0.4456	0.0286	0.0009
		2	0.5	0.0581	0.3091	-0.0385	0.0018
		3	0.5	-0.1662	0.2431	-0.0188	0.0005

Table.Gij_CHIij

Интересную возможность определения сечений фотоионизации представляет экстраполяция сил осцилляторов дискретного спектра на положительные значения энергии. Основа этой экстраполяции — принцип соответствия для состояний дискретного и непрерывного спектров. Согласно [141] справедлив предельный переход:

$$\frac{a_0 \sqrt{m}}{Zn} \frac{P(nl|r)}{n^{3/2}} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} P(0l|r), \quad (4.2.19) \quad \text{Eq.DiscrContRel}$$

где $P(nl|r)$ — кулоновская волновая функция (4.2.15) дискретного спектра, $P(0l|r)$ — радиальная кулоновская функция непрерывного спектра с нулевой энергией электрона. Соотношение между силами осцилляторов дискретного спектра и распределением сил осцилляторов непрерывного спектра можно получить заменой $1/n$ на ik ($k^2 Z_{\text{ост}}^2$ — энергия фотоэлектрона в ридбергах) в радиальных интегралах переходов между состояниями дискретного спектра.

Удобнее для экстраполяции сил осцилляторов дискретного спектра использовать соотношение (4.2.8). Заменяем $df/d[E/(2Ry)]$ на $\Delta f/\Delta[E/(2Ry)]$. Величина

$$\Delta[E/(2Ry)] \simeq \left(-\frac{Z_{\text{ост}}^2}{2(n^*)^2} \right) \Delta n^* = \frac{Z_{\text{ост}}^2}{(n^*)^3} \Delta n^*. \quad (4.2.20) \quad \text{Eq.DeltaE/2Ry}$$

Сглаживая распределение сил осцилляторов дискретного спектра, положим $\Delta n^* = 1$, тогда $\Delta f = f_{n_0 n} - f_{n_0 n-1}$ — сила осциллятора дискретного перехода $n_0 - n$. Подставив $\Delta f/[E/(2Ry)]$ в соотношение (4.2.8), найдем

$$\sigma_{n_0 l_0, n l'}(E_{n l'}) = 2\pi^2 \alpha a_0^2 \frac{(n^*)^3 f_{n_0 n}}{Z_{\text{ост}}^2}. \quad (4.2.21) \quad \text{Eq.SigmaPHI_EOF}$$

Экстраполяция величин $\sigma_{n_0 l_0, n l'}(E_{n l'})$, соответствующих отрицательным энергиям (в ридбергах) $E_{n l'} = -Z_{\text{ост}}^2/(n^*)^2$ в область $E > 0$ дает значения сечений фотоионизации вблизи порога ионизации. На Рис. 4.4 показаны сечения фотоионизации, полученные описанным методом экстраполяции сил осцилляторов (ЭСО) и рассчитанные более точным методом

fig.UVsigPHI

случайных фаз с обменом [CherepkovChernysheva1977, 16]. Видно хорошее согласие сечений вблизи порога ионизации.

Расчеты сечений фотоионизации одноэлектронными методами довольно часто не позволяют достичь количественного согласия с экспериментальными данными. В ряде случаев они не могут передать и качественного характера зависимости сечений от энергий фотонов (см. Рис. 4.2),

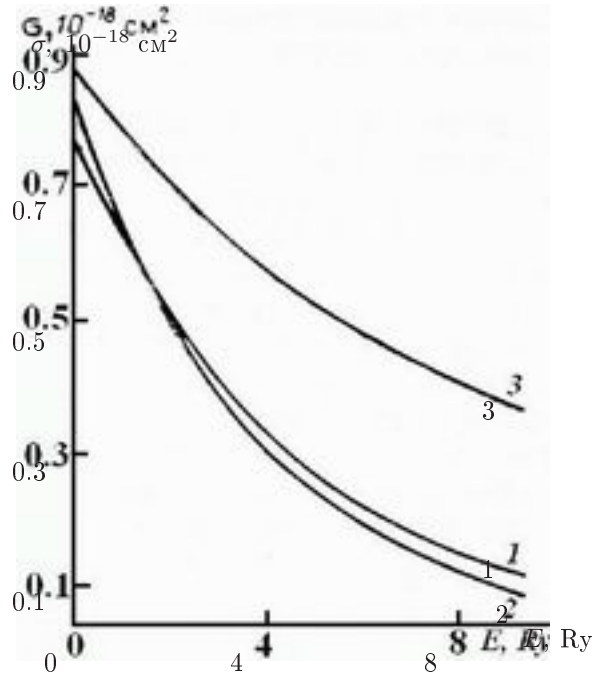


Рис. 4.4. Сечения фотоионизации иона O^{4+} в основном состоянии $2s^2 1S$. 1 — расчет методом приближения случайных фаз с обменом [86]; 2, 3 — методом ЭСО с силами осцилляторов, вычисленными соответственно в многоконфигурационном (2) и одноконфигурационном (3) приближениях.

fig.0VsigPHI

Улучшение экспериментальной техники позволило зарегистрировать особенности реальных сечений фотоионизации, которые не укладываются в одноэлектронную модель: немонотонность зависимости $\sigma(e)$, наличие большого числа резонансов в сечениях и т.д. Необходимость улучшить согласие экспериментальных данных и теоретических расчетов привела к созданию на рубеже 60-х годов многоэлектронных методов расчета сечений [Amusia1987, AtomsAstr1986, Lendjel-1987, 98, 99, 143].

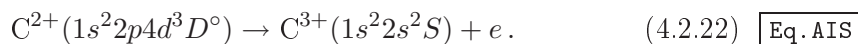
Наиболее эффективными из них являются метод сильной связи, описанный ниже в § 5.3, метод многоканального квантового дефекта и приближение случайных фаз с обменом. Их основной особенностью является учет многоэлектронных корреляций как для состояний дискретного, так и непрерывного спектров. Для непрерывного спектра требует-

ся учесть наложение волновых функций дискретных автоионизационных состояний и волновых функций непрерывного спектра с различным асимптотическим поведением.

page. AIS

Автоионизационное состояние чаще всего образуются при одновременном возбуждении сразу *двух* электронов какого-либо иона X^{n+} . При этом оба электрона остаются *связанными*, так как энергия такой системы отрицательна и меньше потенциала ионизации иона $X^{(n+1)+}$. Но она выше потенциала ионизации атома (иона) X^{n+} . Закон сохранения энергии разрешает распад иона с двумя возбужденными электронами на свободный электрон и возбуждённый ион $X^{(n+1)+}$, т. е. происходит безызлучательная ионизация иона X^{n+} , с чем и связано название *автоионизационное состояние*.

Проиллюстрируем процесс автоионизации на примере ионов углерода. Пусть в результате каких-либо процессов столкновения образовалось автоионизационное состояние $2p4d^3D^\circ$ иона C^{2+} . Энергия этого состояния, отсчитываемая от основного состояния $2s^2^1S$ иона C^{2+} , равна 48.07 эВ, что на 0.18 эВ больше потенциала ионизации иона — 47.89 эВ. Из этого состояния возможен автоионизационный переход



Наложение функций непрерывного спектра и дискретного автоионизационного состояния приводит к появлению в сечении фотоионизации так называемых профилей Бойтлера-Фано в области энергий фотона, соответствующих энергии автоионизационного состояния (автоионизационных резонансов в сечениях), как показано на Рис. 4.5. Fig. PHiresFano

Одним из наиболее эффективных методов расчета сечений фотоионизации с учетом многоэлектронных корреляций является метод сильной связи [143], описанный в § 5.3. Часто используемой модификацией метода сильной связи является метод R -матрицы (см. [143]), в котором решение уравнений сильной связи заменяется решением системы нелинейных алгебраических уравнений. Fig. SiIIIsigPHires

Для иллюстрации приведем на Рис. 4.6 результаты расчета сечений фотоионизации иона Si^{2+} в основном состоянии $3s^2^1S$ [33] методом R -матрицы. Хорошо видны контуры автоионизационных линий, соответствующие захватам в автоионизационные состояния $3pnl$ и $3dn'l'$, описываемые профилями Бойтлера-Фано. Butler-1984

Эффективным методом учёта многоэлектронных корреляций служит метод многоканального квантового дефекта (МКД), описанный в работе [99]. В разложении полной волновой функции системы атомный остаток плюс электрон в отличие от метода сильной связи используются кулоновские радиальные волновые функции (4.2.15). Их асимптотическое поведение определяется по экспериментальным энергиям уровней. По сравнению с методом сильной связи МКД на два-три порядка менее трудоёмок. Eq. So100

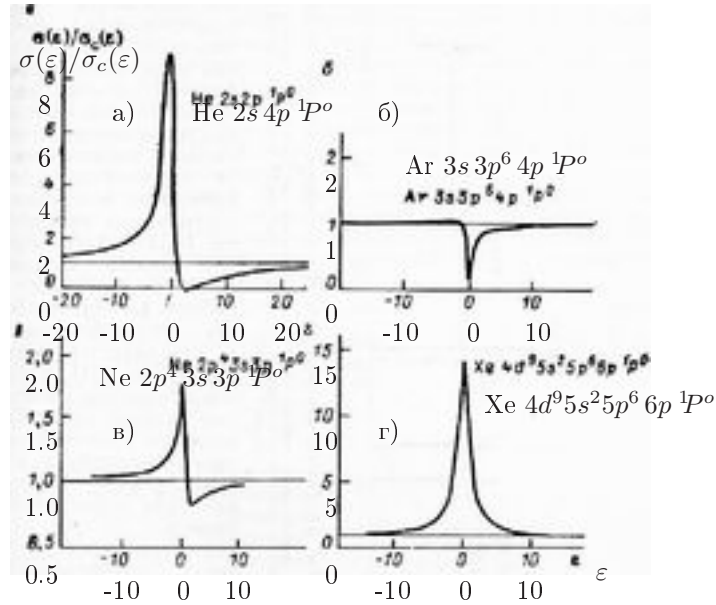


Рис. 4.5. Сечения фотоионизации атомов инертных газов вблизи автоионизационных состояний, построенные по экспериментальным данным, согласно [124]. FanoCooper1972
Fig.PHiresFano

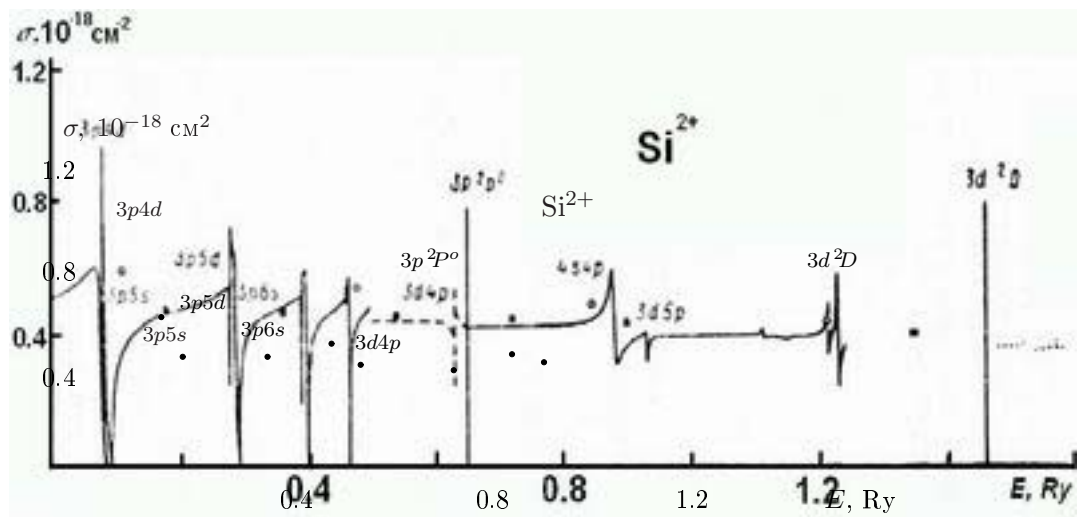
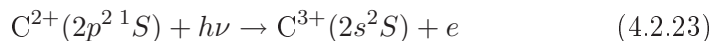


Рис. 4.6. Сечения фотоионизации Si^{2+} в основном состоянии $3s^2 1S$. Сплошные линии – рассчитанные сечения, пунктир – усреднённые по резонансам, кружки – расчёты [159], квадраты – расчёты методом многоканального квантового дефекта; отмечены также положения автоионизационных резонансов $3pnl$ и $3dn'l'$. Fig.SiIIIsigPHIRes

В вычислениях сечений фотоионизации используется также приближение случайных фаз с обменом (ПСФО) [198]. Этот метод позволяет учитывать корреляционные эффекты, связанные с наложением волно-

вых функций дискретного и непрерывного спектров. Расчеты в ПСФО позволили согласовать экспериментальные и теоретические сечения для атомов инертных газов. Однако применение этого метода до недавнего времени ограничивалось атомами и ионами с заполненными или полузаполненными ($N = 2l + 1$) оболочками.

В заключение этого раздела отметим, что учет наложения конфигураций для дискретных состояний показывает возможность двухэлектронных фотоионизационных переходов типа $n_0l_0n_l \rightarrow n_1l_1\epsilon l'$. Например, корреляция $2s^2 + 2p^2$ приводит к фотоионизационным переходам



Eq.2e1PHI

и аналогичным переходам для ионов N^{3+} , O^{4+} и других элементов. Сечение фотоионизации (4.2.23), определенное экстраполяцией сил осцилляторов двухэлектронных переходов $2p^2\ ^1S - 2snp\ ^1P^\circ$ [12], приведено на Рис. 4.7.

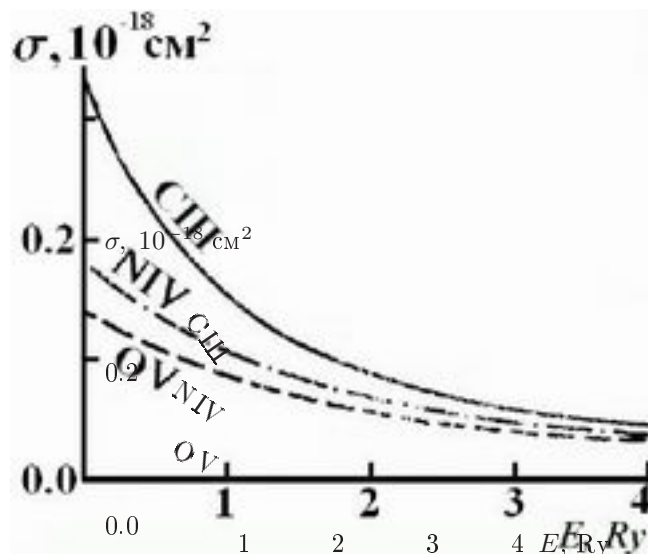
Рис. 4.7. Сечения фотоионизационных переходов $2p^2\ ^1S - 2sEp$.

Fig.TwoElPHI.eps

Аналитические аппроксимации сечений фотоионизации

Для вычисления скоростей фотоионизации и фоторекомбинации требуется знание сечений фотоионизации в широком интервале значений энергии фотонов. Задание их в виде таблицы значений весьма громоздко и неудобно, особенно в расчетах ионизационного и теплового равновесия газов сложного химического состава. По этой причине употребительны различные аналитические представления сечений, позволяющие

с помощью трёх-четырёх параметров достаточно точно описать энергетическую (частотную) зависимость сечений.

Для водорода и водородоподобных ионов чаще всего используется формула Крамерса (Eq. SigmaKramers (4.2.13)), а для фактора Гаунта – аппроксимации типа (Eq. g_n(u) (4.2.14)). Для сечений, подобных сечениями фотоионизации водородоподобных ионов, монотонно убывающих с ростом энергии фотона E , используется следующая аппроксимация:

$$\sigma(E) = \sigma_0 \left(\frac{B}{(1+u)^s} + \frac{1-B}{(1+u)^{(s+1)}} \right), \quad (4.2.24) \quad \text{Eq. SigmaPhiAnal_2}$$

где σ_0 – значение сечения в пороге ионизации, пороговые единицы фотоэлектрона u определены в пояснениях к формуле (Eq. g_n(u) (4.2.14)). Параметры B, s находятся методом наименьших квадратов по рассчитанным или экспериментальным сечениям. Эти формулы позволяют аппроксимировать $\sigma(E)$ с точностью 5-10% и выше в интервале энергий фотонов, достаточном для расчета скоростей фотоионизации и фоторекомбинации при $0 \leq T_e \leq 10^6$ К и $T_* \leq 10^6$ К, где T_* – планковская температура источника внешнего поля излучения. Особый интерес представляет аппроксимация немонотонно зависящих от энергии сечений фотоионизации. Общих стандартных формул в этом случае нет, обобщая соотношение (Eq. SigmaPhiAnal_2 (4.2.24)), напомним:

$$\sigma(E) = \sigma_0 \sum_{k=0}^N \frac{B_k}{(1+u)^{s_k}}. \quad (4.2.25) \quad \text{Eq. SigmaPhiAnalTot}$$

Здесь сумма всех значений B_k не обязательно равна единице, а σ_0 – не пороговое значение сечения фотоионизации, а параметр аппроксимации сечения фотоионизации. При $N = 2$, $B_0 + B_1 = 0$ и $B_2 = 0$ сечение обращается в нуль в пороге и имеет максимальное значение вдали от порога. Если же $B_2 > 0$, то можно представить зависимость $\sigma(E)$ типа приведённой на Рис. Fig. SigmaPhiAnal (4.2).

Параметры B_k, s_k и N подбираются по рассчитанным или экспериментальным сечениям фотоионизации. Например, используя экспериментальные сечения фотоионизации с основного уровня He^+ можно получить: $s_0 = 2, B_0 = 8.86, s_1 = 2, B_1 = 0.44, s_2 = 2, B_2 = -1.83$ [Golovatyj-1997]. Значения констант B_k для элементов с $I_p < 13.6$ эВ представлены в Табл. C.1 приложения C. Точность аппроксимации составляет 10–20%. Сводка значений параметров s_k и B_k дана в каталоге [Golovatyj-1997]. Обширные таблицы параметров аппроксимаций сечений фотоионизации даны в работе [YVT93 (95)].

4.2.2 Скорости фотоионизации

Процесс фотоионизации определяет ионизационное состояние астрофизической плазмы. В случае оптически толстой для ионизирующего из-

лучения среды интенсивность ионизирующего излучения в частотах выше первого порога ионизации уменьшается, поэтому следует учитывать фотоионизации с возбужденных уровней. Перед тем, как рассчитывать скорости фотоионизации, конкретизируем модель среды. Будем считать, что сферический источник излучения находится внутри сферически-симметричной однородной газовой оболочки. Такая модель может быть использована для описания газовых туманностей (в этом случае источник излучения — центральная звезда туманности) и для оболочек звезд ранних спектральных классов. В последнем случае центральный источник излучения — ядро (фотосфера) звезды — окружено сферически-симметричной расширяющейся оболочкой — атмосферой звезды.

Интенсивность ионизирующего излучения определяется как прямым излучением внешнего источника, ослабленным поглощением в оболочке звезды (в туманности), так и диффузным излучением самой оболочки (туманности). В данном параграфе будем рассматривать только прямое излучение.

Предположим, что интенсивность источника ионизирующего излучения можно описать функцией Планка $B_\nu(T_*)$, где T_* — соответствующая температура излучения. В этом случае средняя интенсивность прямого излучения в рассматриваемой точке оболочки (туманности) представляется выражением

$$\bar{J}_\nu = W B_\nu(T_*) e^{-\tau_\nu}, \quad (4.2.26) \quad \boxed{\text{eqJ}}$$

где W - коэффициент дилуции излучения, а τ_ν - оптическое расстояние в частоте ν между источником ионизирующего излучения и ионизируемым атомом (ионом).

Оптическая толщина τ_ν связана со значением τ_i^0 этой величины в частоте $\nu = \nu_i^0$, соответствующей порогу ионизации, соотношением:

$$\tau_\nu = \tau_i^0 \frac{\sigma_i^{\text{phi}}(\nu)}{\sigma_i^0} = \tau_i^0 f_i(\nu), \quad (4.2.27) \quad \boxed{\text{eqTau}}$$

где

$$\tau_i^0 = \int_{R_*}^R \sigma_i^0 n_i(R) dR.$$

Здесь R_* - радиус источника ионизирующего излучения, R - расстояние до точки, где происходит акт ионизации, σ_i^0 - пороговое значение сечения фотоионизации с уровня i .

Будем обозначать: s - состояние непрерывного спектра; g_i - и g^+ - статистические веса состояний i ионизируемого атома (иона) и состояния непрерывного спектра; I_i - потенциал ионизации атома с уровня i . Энергии фотона и оптического электрона выразим в безразмерных пороговых единицах: $u = (h\nu - I_i)/I_i = E/I_i$, где $h\nu$ — энергия фотона, $E = mv^2/2$ — энергия фотоэлектрона. В пороге ионизации $u = 0$. Справедливо соотношение $\nu = \nu_i^0(1 + u)$.

Ионизация в оптически тонкой плазме

Скорости фотоионизации определяются сечениями фотоионизации $\sigma(\nu)$, интенсивностью ионизирующего излучения и распределением электронов по скоростям. Скорость фотоионизации атома в состоянии i :

$$B_{ic} = \int_{\nu_i^0}^{\infty} \sigma_i^{\text{phi}}(\nu) \cdot \frac{4\pi\bar{J}_\nu}{h\nu} d\nu, \quad [c^{-1}], \quad (4.2.28) \quad \boxed{\text{Eq.Bic}}$$

где \bar{J}_ν – средняя интенсивность ионизирующего излучения в частоте ν . Переходя к пороговым единицам и используя планковскую аппроксимацию средней интенсивности излучения (4.2.26), получим:

$$B_{ic}(T_*) = \frac{c\alpha^3}{8\pi^2 a_0^3} \left[\frac{I_i}{Ry} \right]^3 \mathcal{F}(\beta_i^*), \quad (4.2.29) \quad \boxed{\text{Eq.BicAnal}}$$

где $\alpha = 1/137.06$ – постоянная тонкой структуры, $a_0 = 5.29 \cdot 10^{-9}$ см – борковский радиус, c – скорость света, $\beta_i^* = I_i/k_B T_*$, а

$$\mathcal{F}(\beta) = \int_0^{\infty} \frac{(1+u)^2 \sigma^{\text{phi}}(u)}{e^{\beta(1+u)} - 1} du. \quad (4.2.30) \quad \boxed{\text{Eq.calF(beta)}}$$

В данном выражении сделана замена $\sigma^{\text{phi}}(u) = \sigma^{\text{phi}}(\nu) d\nu/du = \sigma^{\text{phi}}(\nu)(I_i/h)$ и сохранено обозначение сечения σ^{phi} (хотя $\sigma^{\text{phi}}(\nu)$ и $\sigma^{\text{phi}}(u)$ – это, вообще говоря, разные функции), так как это не приводит к ошибкам в вычислениях.

Наибольший интерес для астрофизических приложений представляют сечения фотоионизации с уровней водорода и водородоподобных ионов. В достаточно плотных атмосферах звёзд ($n_e = 10^{11} - 10^{13}$ см $^{-3}$) подуровни nl водородоподобных ионов заселены пропорционально их статистическим весам $2l + 1$, поэтому все подуровни nl можно объединить в эффективный уровень n . Сечения фотоионизации с уровня n представляют собой суммарные по l сечения фотоионизации с уровней nl :

$$\sigma_n(\nu) = \frac{1}{n^2} \sum_l (2l + 1) \sigma_{nl}(\nu). \quad (4.2.31) \quad \boxed{\text{Eq.SigPhiH-likeExact}}$$

Точное выражение для сечений $\sigma_{nl}(\nu)$ дано в [RNK1990, П18]. Усреднённые же по l сечения для водородоподобных ионов с зарядом Z описываются формулой Крамера (Eq.SigmaKramers (4.2.13)).

Для фактора Гаунта $g_n(\nu)$ обычно используются различные аналитические аппроксимации (см, например, [RNK1990, BS87, П18, З1]). Результаты расчетов показали, что наилучшей является аппроксимация, предложенная в работе [Johnson1972] и описанная формулой (Eq.GauntFactJohnson (B.1.13) приложения B.1. Используя эту

аппроксимацию, представим сечение фотоионизации с уровня n в виде

$$\sigma_n(\nu) = \sigma_n^0 \frac{1}{(1+u)^3} \sum_{k=0}^2 \frac{B_k^{(n)}}{(1+u)^k}. \quad (4.2.32) \quad \boxed{\text{Eq.Sig.phi}}$$

Здесь $\sigma_n^0 = n \cdot \mathcal{G}_n \cdot 7.930 \cdot 10^{-18} \text{см}^2 / Z^2$ - пороговое значение сечения фотоионизации с уровня n , где Z - заряд ядра водородоподобного иона. На практике используются в основном значения $Z = 1$ для H и $Z = 2$ для иона He^+ . Коэффициенты $B_k^{(n)} = g_k(n) / \mathcal{G}_n$. Сумма $\mathcal{G}_n = g_0(n) + g_1(n) + g_2(n)$.

Сечения фотоионизации неводородоподобных ионов представляются с помощью более общей формулы [\(Eq.SigmaPhiAnalTot\)](#).

Аппроксимации [\(4.2.32\)](#) для водородоподобных и [\(4.2.25\)](#) для неводородоподобных ионов являются хорошими приближениями в области как малых, так и больших энергий.

Подставив разложение [\(4.2.32\)](#) в интеграл [\(4.2.30\)](#), получим:

$$\mathcal{F}(\beta) = \sigma_0 \sum_{k=0}^2 B_k \mathcal{F}_{2-k}(\beta). \quad (4.2.33) \quad \boxed{\text{Eq.Fbeta}}$$

а

$$\mathcal{F}_i(\beta) = \int_0^\infty \frac{(1+u)^i}{e^{\beta(1+u)}} du. \quad (4.2.34) \quad \boxed{\text{Eq.Fi(beta)}}$$

При расчете скоростей фотоионизации по формулам [\(4.2.29\)](#) следует подставить β_i^* вместо β в выражения [\(4.2.33\)](#) и [\(4.2.34\)](#).

Учёт поглощения ионизирующего излучения

Для учета поглощения ионизирующего излучения в среде в подынтегральное выражение [\(4.2.28\)](#) необходимо внести множитель $e^{-\tau_\nu}$, где τ_ν — оптическая толщина среды между источником ионизирующего излучения и местом, где происходит фотоионизация, в частоте ионизации ν ,

$$\tau_\nu = \int_1^r \sigma_i(\nu) n_i(r) dr = \tau_0 f_i(\nu), \quad r = R/R_*, \quad (4.2.35) \quad \boxed{\text{eq_tau_nu}}$$

а n_i — населенность i -го уровня рассматриваемого элемента.

При подстановке в интеграл $\mathcal{F}(\beta)$, определенный соотношением [\(4.2.30\)](#), значений $\beta_i^* \gg 1$ можно использовать полученную в работе [\[RNK1990\]](#) асимптотику интегралов $\mathcal{F}(\beta)$ при $\beta \gg 1$. Тогда

$$B_{ic}(\tau) = 9.98 \cdot 10^{26} \cdot \left[\frac{I_i}{Ry} \right]^3 \sigma_0 \frac{e^{-(\beta_i^* + k\tau_0)}}{\beta_i^*}. \quad (4.2.36) \quad \boxed{\text{Eq.BicTauAnal}}$$

Параметр k при малых значениях τ близок к единице, а при $\tau \gg 1$ может быть аппроксимирован выражением $k = 1/(1 + \gamma \ln \tau)$. Для иона He^+ параметр $\gamma = 0.04$ при $T_* = 10000 \text{ K}$ и $\gamma = 0.10$ при $T_* = 100000 \text{ K}$. При промежуточных значениях T_* значения γ можно получить линейной интерполяцией.

На Рис. 4.8 представлены скорости фотоионизации с уровней $n = 1$ и $n = 2$ водорода в зависимости от оптического расстояния τ до источника ионизации. Из рисунка наглядно видно, что при больших значениях τ ионизация с высоких уровней более эффективна.

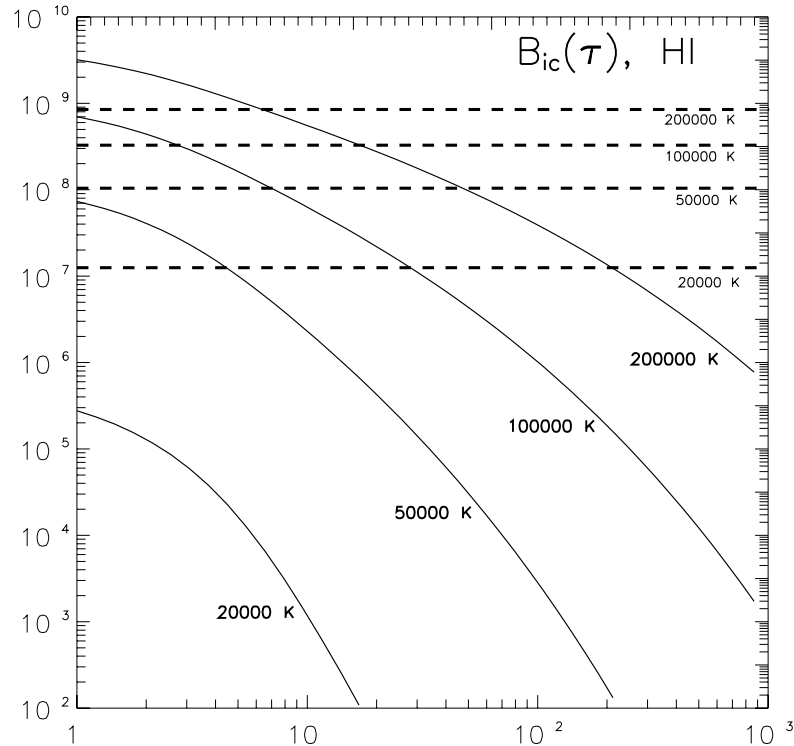


Рис. 4.8. Скорости фотоионизации HI внешним недилутированным планковским излучением в сферически симметричной атмосфере в зависимости от ее оптической глубины. Сплошные линии: основной уровень $n = 1$, пунктир: уровень $n = 2$. Планковские температуры излучения указаны у соответствующих прямых и кривых.

fig.PhiRateHI

ss.PhRecRates

4.2.3 Скорости фоторекомбинации

Обозначим через α_i скорость спонтанной фоторекомбинации на уровень i . Введем безразмерный параметр $\beta_i = I_i/k_B T_e$. Скорость фоторекомбинации на уровень i равна

$$\alpha_i(T_e) = \int_0^\infty \sigma_i^{\text{phr}}(v) v f(v) dv. \quad (4.2.37) \quad \text{Eq.alpha}_i$$

Функцию распределения электронов по скоростям $f(v)$ будем считать максвелловской, характеризуемой электронной температурой T_e . Выразим ее через пороговые единицы $u = (h\nu/I_i) - 1$:

$$f(u) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \beta_i^{\frac{3}{2}} e^{-\beta_i u} \sqrt{u} du.$$

Сечение фоторекомбинации σ_i^{phr} определяется по сечению фотоионизации через соотношение Милна:

$$\sigma_i^{\text{phr}}(u) = \frac{\alpha^2}{4} \cdot \frac{g_i}{g^+} \cdot \frac{(u+1)^2}{u} \cdot \left[\frac{I_i}{\text{Ry}} \right] \cdot \sigma_i^{\text{phi}}(u). \quad (4.2.38) \quad \text{Eq. MilnRel}$$

Переходя к пороговым единицам, найдем:

$$\alpha_i(T_e) = \frac{c \alpha^3}{2 \sqrt{\pi}} \cdot \frac{g_i}{g^+} \cdot \left[\frac{I_i}{\text{Ry}} \right]^{\frac{3}{2}} \cdot \beta_i^{\frac{3}{2}} \mathcal{I}(\beta_i), \quad (4.2.39) \quad \text{Eq. RecRate}$$

где

$$\mathcal{I}(\beta_i) = \int_0^\infty (1+u)^2 \cdot e^{-\beta_i u} \sigma_i^{\text{phi}}(u) du, \quad (4.2.40) \quad \text{Eq. intCall}$$

остальные обозначения обычные.

Подставив в это выражение разложение (Eq. SigmaPhiAnalTot), получим:

$$\mathcal{I}(\beta_i) = \sigma_i^0 e^{\beta_i} \sum_k B_k E_{s_k-2}(\beta_i). \quad (4.2.41) \quad \text{Eq. I(betaA)}$$

Здесь $E_q(\beta)$ – интегральная экспонента (интегральная показательная функция):

$$E_q(\beta) = \int_1^\infty e^{-\beta x} x^{-q} dx. \quad (4.2.42) \quad \text{Eq. Eqbeta}$$

Для иллюстрации зависимостей скоростей фоторекомбинации от n и T_e приведем в Табл. 4.6 скорости спонтанной фоторекомбинации на уровни $n = 1 - 20$ водорода и ионизованного гелия, вычисленные по формулам (Eq. RecRate) и (Eq. intCall).

При значениях параметра $\beta_i \gg 1$ можно получить простые аналитические формулы для расчета скорости фоторекомбинации на уровень i . Используя асимптотику $E_q(\beta)$ [118] и ограничиваясь первыми тремя членами разложения, получим:

$$E_q(\beta) = \frac{e^{-\beta}}{\beta} \left(1 - \frac{q}{\beta} + \frac{q(q+1)}{\beta^2} \right).$$

Подставив это выражение в формулу (Eq. I(betaA)), а результат – в выражение (Eq. RecRate), найдем:

$$\alpha_i(T_e) = 5.215 \cdot 10^{-14} Z \sqrt{\beta_i} \left(C_0 - \frac{C_1}{\beta_i} + \frac{C_2}{\beta_i^2} \right), \quad [\text{cm}^3 \text{c}^{-1}], \quad (4.2.43) \quad \text{Eq. RecRateappr}$$

Таблица 4.6. Скорости фоторекомбинации (в единицах $\text{см}^3\text{см}^{-1}$) H и He^+ на уровнях $n = 1 - 20$

T_e	10^4 K		10^5 K		10^6 K		10^7 K	
	H	He^+	H	He^+	H	He^+	H	He^+
1	1.58E-13	6.54E-13	3.90E-14	1.90E-13	5.28E-15	3.83E-14	3.90E-16	3.97E-15
2	7.70E-14	3.46E-13	1.31E-14	8.24E-14	1.15E-15	1.07E-14	6.66E-17	7.69E-16
3	4.69E-14	2.35E-13	6.06E-15	4.52E-14	4.38E-16	4.50E-15	2.29E-17	2.78E-16
4	2.99E-14	1.64E-13	3.27E-15	2.68E-14	2.12E-16	2.31E-15	1.05E-17	1.31E-16
5	2.05E-14	1.21E-13	1.98E-15	1.74E-14	1.20E-16	1.35E-15	5.73E-18	7.29E-17
6	1.48E-14	9.35E-14	1.30E-15	1.20E-14	7.46E-17	8.63E-16	3.48E-18	4.48E-17
7	1.10E-14	7.41E-14	9.00E-16	8.69E-15	4.98E-17	5.88E-16	2.28E-18	2.97E-17
8	8.50E-15	6.00E-14	6.52E-16	6.50E-15	3.50E-17	4.19E-16	1.58E-18	2.07E-17
9	6.70E-15	4.93E-14	4.89E-16	5.00E-15	2.56E-17	3.11E-16	1.14E-18	1.50E-17
10	5.38E-15	4.12E-14	3.77E-16	3.94E-15	1.93E-17	2.37E-16	8.51E-19	1.13E-17
11	4.40E-15	3.48E-14	2.97E-16	3.16E-15	1.50E-17	1.85E-16	6.54E-19	8.72E-18
12	3.64E-15	2.97E-14	2.38E-16	2.58E-15	1.19E-17	1.48E-16	5.14E-19	6.88E-18
13	3.05E-15	2.55E-14	1.95E-16	2.14E-15	9.55E-18	1.20E-16	4.11E-19	5.53E-18
14	2.59E-15	2.22E-14	1.61E-16	1.79E-15	7.82E-18	9.88E-17	3.35E-19	4.51E-18
15	2.22E-15	1.94E-14	1.35E-16	1.52E-15	6.49E-18	8.24E-17	2.76E-19	3.73E-18
16	1.91E-15	1.70E-14	1.15E-16	1.30E-15	5.45E-18	6.95E-17	2.31E-19	3.13E-18
17	1.66E-15	1.51E-14	9.79E-17	1.12E-15	4.62E-18	5.92E-17	1.95E-19	2.65E-18
18	1.46E-15	1.34E-14	8.45E-17	9.73E-16	3.95E-18	5.09E-17	1.66E-19	2.26E-18
19	1.28E-15	1.20E-14	7.34E-17	8.52E-16	3.41E-18	4.40E-17	1.43E-19	1.95E-18
20	1.14E-15	1.08E-14	6.42E-17	7.50E-16	2.97E-18	3.84E-17	1.24E-19	1.69E-18

tablePHRRates

где $C_1 = B_0 + B_1 + B_2$, $C_2 = B_0 + 2B_1 + 3B_2$, $C_3 = 2B_0 + 6B_1 + 12B_2$. Значения коэффициентов C_0 , C_1 и C_2 для $n=1$ можно получить, используя разложение фактора Гаунта (Eq. GauntFactJohnson (B.1.13)): $C_0 = 0.7942$, $C_1 = 0.5316$, $C_2 = 0.3917$. Сравнение с точными значениями α_1 показало, что использование разложения (Eq. RecRateappr (4.2.43)) позволяет получать скорости фоторекомбинации с ошибкой $\approx 0.3\%$ при $\beta_i > 10$ и меньше 3% при $\beta_i > 1$. Значения $\beta_i = 157809/i^2 T_e$ для H и $\beta_i = 631572/i^2 T_e$ для He^+ , поэтому это соотношение позволяет вычислять с приемлемой точностью скорости фоторекомбинации при $T_e \leq 1.6 \cdot 10^5/i^2$ K и $T_e \leq 6.3 \cdot 10^5/i^2$ K для H и He^+ соответственно. Следует отметить, что представленная аппроксимация величины α_i применима в значительно более широком интервале температур, чем используемая обычно для этой цели степенная (Eq. alpha_1 (4.2.37)).

Для получения скорости вынужденной фоторекомбинации подынтегральное выражение в формуле (Eq. alpha_1 (4.2.37)) необходимо умножить на число заполнения фотонных состояний

$$N_\nu = \frac{c}{2h\nu^3} \bar{J}_\nu = (e^{h\nu/kT_*} - 1)^{-1},$$

тогда скорость вынужденной фоторекомбинации

$$B_{ci} = \int_0^\infty \sigma_i^{\text{phr}}(v) v f(v) N_\nu dv. \quad (4.2.44) \quad \text{Eq. Bci}$$

Перейдя к пороговым единицам и проделав простые преобразования,

получим

$$B_{ci} = \frac{c\alpha^3}{2\sqrt{\pi}} \cdot \frac{g_i}{g^+} \cdot \left[\frac{I_i}{Ry} \right]^{\frac{3}{2}} \cdot \beta_i^{\frac{3}{2}} \mathcal{J}(\beta_i, \beta_i^*, \tau_i^0), \quad (4.2.45) \quad \boxed{\text{Eq. Bci Anal}}$$

где интеграл

$$\mathcal{J}(\beta, \beta^*, \tau_i^0) = \int_0^\infty \frac{(1+u)^2 e^{-\beta u} \sigma^{\text{phi}}(u) e^{-\tau_i^0 f_i(u)}}{e^{\beta^*(1+u)} - 1} du. \quad (4.2.46) \quad \boxed{\text{Eq. J(beta)}}$$

При $\beta_i^* \gg 1$ и $\tau_i^0 \ll 1$ в знаменателе подынтегрального выражения (4.2.46) можно отбросить единицу, тогда этот интеграл выразится суммой интегральных экспонент $E_q(\beta + \beta^*)$. Используя их асимптотику, получим связь между скоростями спонтанной и вынужденной фоторекомбинации в оптически тонкой плазме:

$$B_{ci}(T_e) \approx \frac{T_e}{T_e + T_*} e^{-\beta_i^*} \alpha_i(T_e). \quad (4.2.47) \quad \boxed{\text{Eq. Bci (Te)}}$$

Важное значение при решении уравнений ионизационного баланса играет величина p – доля рекомбинаций на первый уровень рассматриваемого иона:

$$p = \frac{\alpha_1}{\alpha_{\text{tot}}} = \frac{\alpha_1}{\sum_{i>1} \alpha_i}. \quad (4.2.48) \quad \boxed{\text{Eq. p(Te)}}$$

Данная величина была рассчитана для ионов H и He⁺ при $T_e = 10^3 - 10^6$ K. Для удобства величина $p(T_e)$ представлена в виде:

$$p(T_e) = p(t) = p = \frac{p_0 + p_1 A t^\delta}{1 + A t^\delta}. \quad (4.2.49) \quad \boxed{\text{eq16}}$$

Здесь $t = T_e/10^4$ K, p_0 – значение $p(T_e)$ при $T_e \rightarrow 0$, p_1 – при $T_e \rightarrow \infty$.

Величины A и δ являются медленно меняющимися функциями T_e . Из соотношения (4.2.49) легко получить, что

$$A t^\delta = \frac{p - p_0}{p_1 - p}.$$

Логарифмируя, а затем дифференцируя это соотношение, найдем:

$$\delta = \frac{(p_1 - p_0) p' t}{(p - p_0)(1 - p)}, \quad A = \frac{p - p_0}{(p_1 - p) t^\delta}.$$

Производная $p' = dp/dt$ вычисляется при численном дифференцировании функции $p(t)$. Используя вышеописанную процедуру, найдем для H значения: $A = 0.429$, $\delta = 1.27$, $p_0 = 0.33$, $p_1 = 0.59$. Формула (4.2.49) с найденными значениями параметров A , δ , p_0 и p_1 позволяет получить величину p при произвольных значениях электронных температур с точностью до 1%. Полную скорость рекомбинации легко найти из соотношения $\alpha_{\text{tot}} = \alpha_1/p$, используя аппроксимации (4.2.43) и (4.2.49).

Фоторекомбинация неводородоподобных ионов

Скорости фоторекомбинации неводородоподобных ионов с зарядом ядра Z и зарядом атомного остатка $Z_{\text{ост}}$ могут быть аппроксимированы следующей зависимостью [91]:

$$\alpha_{Z, Z_{\text{ост}}}(T) = A_{\text{rad}} \left(\frac{T}{10^4} \right)^{-X_{\text{rad}}}, \quad [\text{см}^3 \text{ с}^{-1}]. \quad (4.2.50) \quad \text{Eq. arad}$$

Параметры A_{rad} , X_{rad} для всех элементов, существенных для расчета спектров газовых туманностей и звезд ранних спектральных классов, содержатся в каталоге [132].

4.3 Фотонагрев и рекомбинационное охлаждение

4.3.1 Фотоионизационный нагрев

Скорости фотонагрева электронного газа при фотоионизации атомов и ионов в значительной мере определяют тепловое состояние плазмы. Нагрев электронного газа происходит при фотоионизациях с основного и возбужденных уровней атомов и ионов. Населенности возбужденных уровней водородоподобных ионов в условиях газовых туманностей крайне малы, поэтому для них достаточно учитывать фотонагрев при ионизациях только с основного состояния $n = 1$. В атмосферах звезд следует учитывать и фотонагрев при ионизации с возбужденных уровней.

Имеющиеся в литературе значения этих величин относятся главным образом к фотонагреву при ионизации из основного состояния H (см., например [108]). По этой причине представляется целесообразным расчет скоростей фотонагрева для большого числа значений главных квантовых чисел n уровней H и He^+ — основных источников фотоэлектронов в астрофизической плазме.

Средняя энергия, приобретаемая электронным газом в 1 см^3 за 1 секунду при фотоионизациях с уровня i , определяется интенсивностью ионизирующего излучения и сечением фотоионизации с этого уровня $\sigma_i^{\text{phi}}(\nu)$:

$$n_i \Gamma_{ic} = n_i \int_{\nu_i^0}^{\infty} \sigma_i^{\text{phi}}(\nu) \frac{4\pi \bar{J}_{\nu}(T_*)}{h\nu} (h\nu - h\nu_i^0) d\nu. \quad (4.3.1) \quad \text{eqGic}$$

Здесь Γ_{ic} — скорость фотонагрева.

Подставим в соотношение (4.3.1) выражение (4.2.26) для средней интенсивности ионизирующего излучения и перейдем к пороговым единицам, и, используя планковскую аппроксимацию средней интенсивности излучения, найдем

$$\Gamma_{ic} = W G_{ic} = W \frac{1}{8\pi^2} \cdot \frac{c\alpha^3}{a_0^3} \left[\frac{I_i}{\text{Ry}} \right]^3 I_i \mathcal{J}(\beta_i^*, \tau_i^0), \quad (4.3.2) \quad \text{Eq. Gamma_ic}$$

где τ_i^0 определено формулой (4.2.35), а

$$\mathcal{J}(\beta_i^*, \tau_i^0) = \int_0^\infty \frac{u(1+u)^2 \sigma_i^{\text{phi}}(\nu) e^{-\tau_i^0 f_i(u)}}{e^{\beta_i^* (u+1)} - 1} du. \quad (4.3.3) \quad \boxed{\text{eqCalJ}}$$

Подставим в выражение (4.3.3) разложение (4.2.32), тогда

$$\mathcal{J}(\beta_i^*, \tau_i^0) = \sigma_0 \sum_{k=0}^2 B_k^{(i)} \left[\mathcal{Q}_k^f(\beta_i^*, \tau_i^0) - \mathcal{Q}_{k+1}^f(\beta_i^*, \tau_i^0) \right]. \quad (4.3.4) \quad \boxed{\text{eq3v}}$$

Здесь интеграл

$$\mathcal{Q}_k^f(\beta_i^*, \tau_i^0) = \int_1^\infty \frac{e^{-\tau_i^0 f_i(x)}}{x^k (e^{\beta_i^* x} - 1)} dx, \quad (4.3.5) \quad \boxed{\text{eqQ}}$$

где $x = 1 + u = h\nu/I_i$. Функция $f_i(x)$ описывает частотную зависимость сечения фотоионизации с уровня i и получается при подстановке $\nu = xI_i/h$ в соотношение (4.2.27). Индекс f указывает, что интеграл \mathcal{Q} является функционалом, зависящим от вида функции $f(x)$. Рис. 4.9 иллюстрирует зависимость скорости фотонагрева при фотоионизациях с уровней He^+ от номера уровня n . Аналогичная зависимость имеет место и для H .

Зависимости скоростей фотонагрева от n ясно демонстрируют, что фотонагрев электронного газа при ионизации H и He^+ в атмосферах относительно холодных звезд спектрального класса В с $T_{\text{eff}} \leq 2 \cdot 10^4 \text{ K}$ происходит преимущественно при ионизациях с возбужденных уровней с $n > 2$, в то время как нагрев электронного газа в атмосферах горячих звезд Вольфа-Райе типа OVI и в планетарных туманностях с высокотемпературными ядрами ($T_{\text{eff}} \geq 10^5 \text{ K}$) происходит главным образом при ионизациях H и He^+ с их основных уровней.

В Табл. 4.7 представлены полученные численным интегрированием сечений фотоионизации скорости фотоионизационного нагрева при ионизациях с первых четырех уровней водорода и ионизованного гелия излучением с планковским спектром без учета поглощения излучения в среде ($\tau_i(\nu) = 0$).

Поступление энергии к электронному газу удобно выражать через среднюю энергию, приобретаемую фотоэлектронами при фотоионизации:

$$\bar{\varepsilon}_{ic} = \frac{G_{ic}}{B_{ic}} = \varphi_{ic} k_B T_*,$$

где φ_{ic} - безразмерный параметр порядка единицы. В приближении низких температур при $\beta_i^* \gg 1$ и $\tau_i^0 \ll 1$ легко получить, что

$$G_{ic} \approx B_{ic} k_B T_*, \quad \bar{\varepsilon}_{ic} \approx k_B T_*.$$

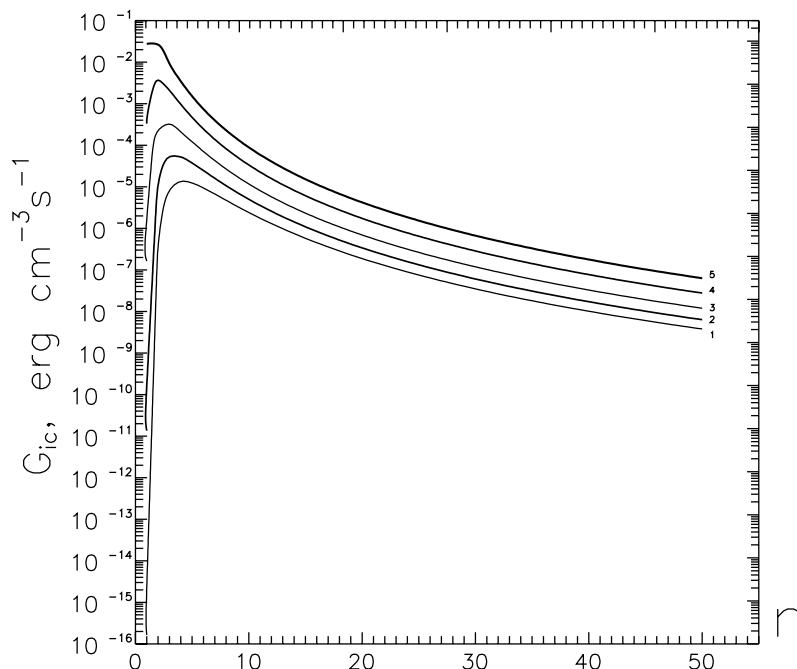


Рис. 4.9. Скорости фотонагрева при фотоионизации с уровней He^+ в зависимости от главного квантового числа уровня внешним недилутированным планковским излучением с температурами: $T_* = 20\,000\text{ K}$ (1), $30\,000\text{ K}$ (2), $50\,000\text{ K}$ (3), $100\,000\text{ K}$ (4) и $200\,000\text{ K}$ (5).

fig.HeIIheat-Gic

Таким образом, в области низких температур ($k_B T_* \ll I_i$) скорость фотонагрева пропорциональна T_* . Для определения полной скорости фотонагрева электронного газа требуется просуммировать выражение (4.3.1) по всем уровням.

Тепловое состояние электронного газа в областях HII и HeIII , где H и He почти полностью ионизованы и $\tau_i^0 \ll 1$ для всех уровней i , определяется скоростями фотонагрева, представленными в Табл. 4.7. Для определения электронной температуры в переходных зонах HI/III и HeII/III , требуется знание зависимости скорости фотонагрева от оптической толщины среды в частоте ионизации.

Зависимость величины $\varphi_{ic} = \varphi_{ic}(\tau) = G_{ic}(\tau)/[B_{ic}(\tau)k_B T_*]$ для первого уровня ($i=1$) He^+ , полученной численным вычислением интегралов Q_k^f в выражении (4.3.5), показана на Рис. 4.10. Этот рисунок иллюстрирует важную особенность фотонагрева в оптически плотной плазме, обнаруженную в результате численных расчетов: значения $\varphi_{ic}(\tau)$ быстро возрастают с ростом оптического расстояния τ между источником ионизирующего излучения и ионизуемым атомом. Это означает, что скорость фотонагрева уменьшается значительно медленнее, чем происходит падение интенсивности ионизирующего излучения в частоте порога ионизации (пропорционально $e^{-k\tau}$, (см. формулу (4.2.36))).

Таблица 4.7. Скорость нагрева электронного газа Γ_{ic} (эрг/с) при фотоионизациях Н и He^+ излучением с планковским спектром ($\bar{J}_\nu = B_\nu(T_*)$) при нулевой оптической толщине среды в пороге ионизации первого уровня и значении коэффициента дилуции $W = 1$.

$T_*/10^4 K$	Н				He^+		
	$n=1$	$n=2$	$n=3$	$n=4$	$n=1$	$n=2$	$n=3$
0.10	0.00E+00	0.00E+00	5.36E-15	4.52E-12	0.00E+00	0.00E+00	0.00E+00
0.50	2.57E-18	5.94E-09	1.27E-07	2.12E-07	0.00E+00	1.40E-18	1.75E-11
1.00	7.09E-11	1.08E-06	2.43E-06	1.85E-06	0.00E+00	3.83E-11	7.05E-08
2.00	7.09E-07	2.63E-05	1.89E-05	9.54E-06	1.64E-16	3.80E-07	8.10E-06
3.00	2.08E-05	1.02E-04	4.97E-05	2.15E-05	1.35E-11	1.11E-05	5.28E-05
4.00	1.31E-04	2.33E-04	9.18E-05	3.66E-05	4.53E-09	6.91E-05	1.55E-04
5.00	4.30E-04	4.13E-04	1.43E-04	5.41E-05	1.63E-07	2.26E-04	3.23E-04
6.00	1.01E-03	6.40E-04	2.02E-04	7.36E-05	1.90E-06	5.27E-04	5.57E-04
7.00	1.93E-03	9.07E-04	2.68E-04	9.49E-05	1.14E-05	1.01E-03	8.54E-04
8.00	3.24E-03	1.21E-03	3.40E-04	1.18E-04	4.53E-05	1.68E-03	1.21E-03
9.00	4.97E-03	1.55E-03	4.17E-04	1.42E-04	1.36E-04	2.57E-03	1.63E-03
10.00	7.12E-03	1.92E-03	4.98E-04	1.67E-04	3.33E-04	3.68E-03	2.09E-03
12.00	1.27E-02	2.75E-03	6.74E-04	2.20E-04	1.33E-03	6.55E-03	3.18E-03
15.00	2.44E-02	4.17E-03	9.65E-04	3.07E-04	5.73E-03	1.25E-02	5.14E-03
20.00	5.21E-02	6.95E-03	1.51E-03	4.65E-04	2.75E-02	2.64E-02	9.16E-03
30.00	1.34E-01	1.37E-02	2.75E-03	8.19E-04	1.62E-01	6.75E-02	1.94E-02
50.00	3.81E-01	3.03E-02	5.66E-03	1.63E-03	9.23E-01	1.90E-01	4.61E-02
100.00	1.31E+00	8.27E-02	1.44E-02	4.00E-03	5.69E+00	6.49E-01	1.35E-01

tableHeatRates

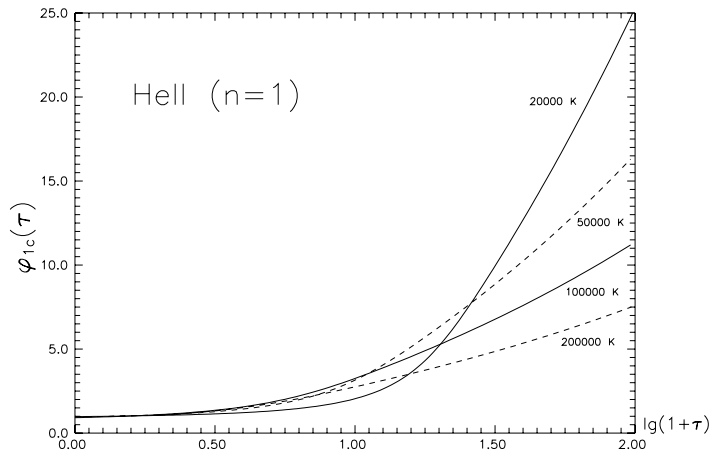


Рис. 4.10. Скорость приобретения энергии электронным газом (φ_{ic}) в 1см^3 на один акт фотоионизации в единицах $k_B T_*$, где T_* — планковская температура поля излучения, для уровня $n = 1$ He^+ в зависимости от оптического расстояния τ до источника ионизирующего излучения.

fig.PhHeatRate-Tau

Этот эффект может объяснить относительно высокую температуру электронного газа в областях НI и HeII . Анализ рассчитанных скоростей фотонагрева показывает, что часто используемое приближение, когда в выражениях для скоростей фотоионизации и фотонагрева множитель $\exp(-\tau)$ выносится за знак интеграла, дает существенно зани-

женные значения указанных скоростей. Так, например, при значении $T_* = 3 \cdot 10^4$ К действительное значение скорости фотонагрева при ионизациях Н с основного состояния $n = 1$ ($8.02 \cdot 10^{-7}$ эрг/с) при $\tau = 9$ в 313 раз больше вычисленного при вынесении множителя $\exp(-\tau)$ за знак интеграла (4.3.3). При $\tau \approx 10^2$ эта разница достигает 39 порядков величины.

Как показывают результаты расчетов населенности второго и более высоких уровней Н и He^+ даже в плотных оболочках звезд малы, поэтому малы и оптические толщины в соответствующих порогах ионизации ($\tau_i^0 < 0.01$) при $i \geq 2$. Величины $G_{ic}(\tau)$ при $i \geq 2$ можно считать равными $G_{ic}(0)$.

Для оптически плотных сред (например, оптически толстых в L_c континуумах Н и He^+ атмосфер звезд ранних спектральных классов) интенсивность излучения в L_c континууме сильно ослаблена, и следует учитывать поступление энергии к электронному газу при ионизациях с возбужденных уровней. Как показывают расчеты, при типичных для звезд ранних спектральных классов величинах T_e и T_* достаточно учитывать фотоионизацию с первых трех-четырех уровней.

4.3.2 Рекомбинационные потери энергии

Потери энергии при рекомбинациях являются одним из основных механизмов охлаждения электронного газа. В то же время удобные для расчета этих величин соотношения в литературе отсутствуют. Используемые обычно в астрофизических расчетах формулы в справочниках [Boch92, KP79, AllenAstQuant 101, 108, 130] для расчета скоростей охлаждения весьма приближены и охватывают узкий температурный интервал. Важными процессами охлаждения электронного газа при спонтанных фоторекомбинациях и диэлектронных рекомбинациях часто пренебрегают. По этой причине представляется важным получение необходимых для вычисления скоростей соотношений и выполнение расчетов в широком интервале температур вплоть до 10^7 К, представленных в данном параграфе.

Охлаждение при спонтанных фоторекомбинациях

Средняя энергия, теряемая электронным газом при спонтанных фоторекомбинациях на уровень i в 1 см^3 за 1 с, равна

$$n_e L_i(T_e) = n_e \int_0^\infty \sigma_i^{\text{phr}}(v) v f(v) \frac{mv^2}{2} dv. \quad (4.3.6) \quad \boxed{\text{eq6va}}$$

Здесь $L_i(T_e)$ - скорость потери энергии при рекомбинации на уровень i (скорость рекомбинационного охлаждения). Функцию распределения электронов по скоростям $f(v)$ будем, как и ранее, считать максвелловской, характеризуемой электронной температурой T_e .

Перейдя к сечению фотоионизации через соотношение [\(Eq.MilnRel \(4.2.38\)\)](#), получим

$$L_i(T_e) = \frac{c\alpha^3}{2\sqrt{\pi}} \cdot \frac{g_i}{g^+} \left[\frac{I_i}{Ry} \right]^{3/2} \beta_i^{3/2} I_i \mathcal{L}(\beta_i), \quad (4.3.7) \quad \boxed{\text{Eq.LRec}}$$

где

$$\mathcal{L}(\beta_i) = \int_0^\infty u(1+u)^2 e^{-\beta_i u} \sigma_i^{\text{phi}}(u) du.$$

Для аналитического представления сечений [\(Eq.Sig.phi \(4.2.32\)\)](#)

$$\mathcal{L}(\beta_i) = \sigma_0 e^{\beta_i} \sum_k B_k [E_k(\beta_i) - E_{k+1}(\beta_i)]. \quad (4.3.8) \quad \boxed{\text{Eq.LRecHI}}$$

Подставляя в [\(Eq.LRecHI \(4.3.8\)\)](#) асимптотическое разложение интегральной экспоненты, получим при $\beta_i \gg 1$

$$\mathcal{L}(\beta_i) \approx \sigma_i^0 \frac{1}{\beta_i^2},$$

что означает, что в приближении низких температур ($k_B T_e \ll I_i$) скорость рекомбинационного охлаждения не зависит от способа аппроксимации сечений фотоионизации.

Полную энергию, теряемую электронным газом при рекомбинации, можно представить в виде

$$L(T_e) = \mu \alpha k_B T_e,$$

где α — полная скорость рекомбинации, μ — безразмерный коэффициент пропорциональности.

Определим также величину

$$q = q(T_e) = \frac{L_1(T_e)}{L(T_e)}$$

— долю скорости охлаждения при рекомбинации на 1-й уровень в полной скорости рекомбинационного охлаждения. Величина $q(T_e)$, так же как и отношение скорости рекомбинации на первый уровень к полной скорости рекомбинации [\(Eq.p\(Te\) \(4.2.48\)\)](#), определяет роль диффузного излучения в процессах фотоионизации и фотонагрева.

Зависимость величин p , q и μ от температуры дана на Рис. [\(fig.pqmu-Te \(4.3.9\)\)](#). При низких температурах величины p и q стремятся к одному асимптотическому значению $p_0 \approx 0.2$, в то время как асимптотическое значение множителя $\mu = 1$. Асимптотические значения для H и He⁺ совпадают. В табл. [\(table.pqmu \(4.3.10\)\)](#) приведены значения параметров p , q и μ . При промежуточных значениях T_e они могут быть легко получены, например, сплайн-интерполяцией.

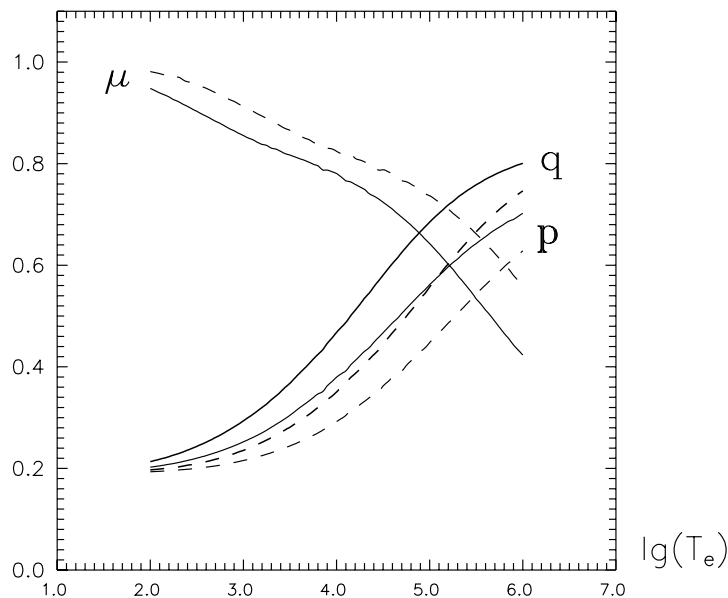


Рис. 4.11. Зависимость величин p , q и μ от температуры. Сплошная линия — H, пунктир — He^+ .

fig.pqmu-Te

Вычисленные значения величины $L(T_e)$ и, соответственно, параметры p , q и μ значительно точнее обычно используемых в астрофизике (см., например [AllenAstQuant, Boch92, KP79] [130, 101, 108]) и охватывают большой интервал температур от 10^2 до 10^7 К. Точность рассчитанных величин $L(T_e)$ находится в пределах 1%, что вполне достаточно для задач астрофизики.

Таблица 4.8. Параметры p , q и μ для H и He^+

$\lg(T_e)$	H			He^+		
	p	q	μ	p	q	μ
2.00	0.202	0.213	0.947	0.193	0.197	0.981
2.50	0.220	0.243	0.903	0.200	0.209	0.955
3.00	0.252	0.293	0.856	0.216	0.236	0.912
3.50	0.306	0.369	0.819	0.244	0.282	0.865
4.00	0.380	0.467	0.781	0.292	0.351	0.824
4.50	0.467	0.580	0.725	0.362	0.445	0.788
5.00	0.562	0.684	0.643	0.448	0.557	0.737
5.50	0.643	0.759	0.534	0.543	0.665	0.663
6.00	0.702	0.812	0.423	0.629	0.746	0.559
6.50	0.752	0.846	0.345	0.691	0.802	0.480
7.00	0.775	0.872	0.278	0.730	0.841	0.418

tablePQMu

Охлаждение при вынужденных фоторекомбинациях

Рассмотрим роль вынужденной рекомбинации и связанные с ней потери энергии электронным газом. Для получения скорости потери энергии при вынужденной фоторекомбинации подынтегральное выражение в формуле (4.3.6) необходимо умножить на число заполнения фотонных состояний N_ν (см. формулу (4.1.7)), тогда скорость охлаждения при вынужденной фоторекомбинации на уровень i

$$L_{ci}^{\text{st}} = \int_0^\infty \sigma_i^{\text{phr}}(v) v f(v) N_\nu dv.$$

Подставив в выражение для чисел заполнения формулу (4.2.26) для средней интенсивности \bar{J}_ν , получим

$$N_\nu = W e^{-\tau_\nu} \frac{1}{e^{h\nu/k_B T_*} - 1}. \quad (4.3.9) \quad \text{eqN}$$

Используя соотношение Милна (4.2.38) и проделав простые преобразования с учетом аппроксимации (4.2.32), представим скорость потери энергии при вынужденной рекомбинации в виде

$$R_{ci}^{\text{st}} = W L_{ci}^{\text{st}} = W \frac{c \alpha^3}{2 \sqrt{\pi}} \cdot \frac{g_i}{g^+} \cdot \left[\frac{I_i}{\text{Ry}} \right]^{3/2} \cdot \beta_i^{3/2} I_i e^\beta \sum_k B_k \cdot \mathcal{H}(\beta_i, \beta_i^*, \tau_i^0). \quad (4.3.10) \quad \text{eq14v}$$

Здесь

$$\mathcal{H}(\beta_i, \beta_i^*, \tau_i^0) = \int_0^\infty \frac{u(u+1)^2 \sigma_i^{\text{phi}}(u) e^{-[\beta_i u + \tau_i^0 f_i(u)]}}{e^{\beta_i^* (u+1)} - 1} du. \quad (4.3.11) \quad \text{eq15v}$$

Подставляя в это выражение аналитическую аппроксимацию сечений фотоионизации (4.2.32), получим:

$$\mathcal{H}(\beta_i, \beta_i^*, \tau_i^0) = \sigma_i^0 \sum_{k=0}^2 B_k^{(i)} \left(\mathcal{S}_k^f(\beta_i, \beta_i^*, \tau_i^0) - \mathcal{S}_{k+1}^f(\beta_i, \beta_i^*, \tau_i^0) \right), \quad (4.3.12) \quad \text{eqCalR}$$

где

$$\mathcal{S}_k^f(\beta_i, \beta_i^*, \tau) = e^{\beta_i} \int_1^\infty \frac{e^{-[\beta_i x + \tau f_i(x)]}}{x^k (e^{\beta_i^* x} - 1)} dx.$$

Индекс f , как было сказано выше, указывает, что интеграл \mathcal{S} — функционал, определяемый при $\tau \neq 0$ зависимостью $f(x)$ сечения фотоионизации от частоты. При $\beta_i^* \gg 1$ в знаменателе подынтегрального выражения можно пренебречь единицей, тогда при $\tau \ll 1$

$$\mathcal{S}_k^f(\beta_i, \beta_i^*, \tau) \approx E_k(\beta_i + \beta_i^*),$$

где интегральная экспонента $E_k(\beta_i)$ определена формулой [Eq.Eqbeta](#) (4.2.42).

Используя асимптотику интегральной экспоненты при $\beta_i^* \gg 1$ и учитывая первые два члена в разложении $E_k(\beta_i + \beta_i^*)$ по степеням $1/(\beta_i + \beta_i^*)$, получаем связь между скоростями потери энергии на спонтанную и вынужденную фоторекомбинации:

$$L_{ci}^{\text{st}}(T_e, T_*) \approx \frac{T_*^2}{(T_e + T_*)^2} e^{-\beta_i^*} L_i(T_e). \quad (4.3.13) \quad \boxed{\text{eq16v}}$$

Для первых уровней H и He⁺ условие $\beta_i^* \gg 1$ обычно выполняется, что означает, во-первых, что скорость охлаждения при вынужденной рекомбинации на первый уровень из-за наличия множителя $e^{-\beta_i^*}$ в соотношении [\(4.3.13\)](#) много меньше соответствующей величины для спонтанной рекомбинации и, во-вторых, мала по сравнению со скоростями охлаждения в результате вынужденной рекомбинации на возбужденные уровни. Таким образом, в полной скорости охлаждения вследствие вынужденной рекомбинации

$$R^{\text{st}}(T_e, T_*) = W \cdot L^{\text{st}}(T_e, T_*) = W \sum_{i=1}^{\infty} L_i^{\text{st}}(T_e, T_*) \quad (4.3.14) \quad \boxed{\text{eqLstTot}}$$

вклад рекомбинаций на первый уровень мал (не более 1%) и полная скорость охлаждения определяется рекомбинациями на уровни $i \geq 2$.

Как уже отмечалось нами ранее, атмосферы звезд ранних спектральных классов оптически тонки в континуумах этих уровней. Таким образом, мы можем сделать вывод, что *полная скорость рекомбинационного охлаждения практически не зависит от оптической толщины атмосферы в L_c континуумах H и He⁺.*

4.3.3 Полные скорости рекомбинационного охлаждения

Полная скорость рекомбинационного охлаждения складывается из вклада рекомбинационного охлаждения в результате спонтанной фоторекомбинации и охлаждения при вынужденной фоторекомбинации:

$$L_{\text{tot}}(T_e) = L(T_e) + W \cdot L^{\text{st}}(T_e, T_*). \quad (4.3.15) \quad \boxed{\text{eqLtot}}$$

Как отмечалось выше, зависимость L^{st} от τ_i^0 можно не учитывать. Из этой формулы видно, что в газовых туманностях, в которых ионизирующее излучение сильно дилутировано ($W \approx 10^{-14} - 10^{-9}$), вклад вынужденной рекомбинации в полную скорость рекомбинационного охлаждения пренебрежимо мал. В условиях, характерных для атмосфер звезд ранних спектральных классов, вынужденная рекомбинация, как можно видеть на Рис. [4.12](#), вносит значительный вклад в полную скорость рекомбинационного охлаждения, по крайней мере в областях близких к границе фотосферы, где значение W – коэффициента дилуции не мало.

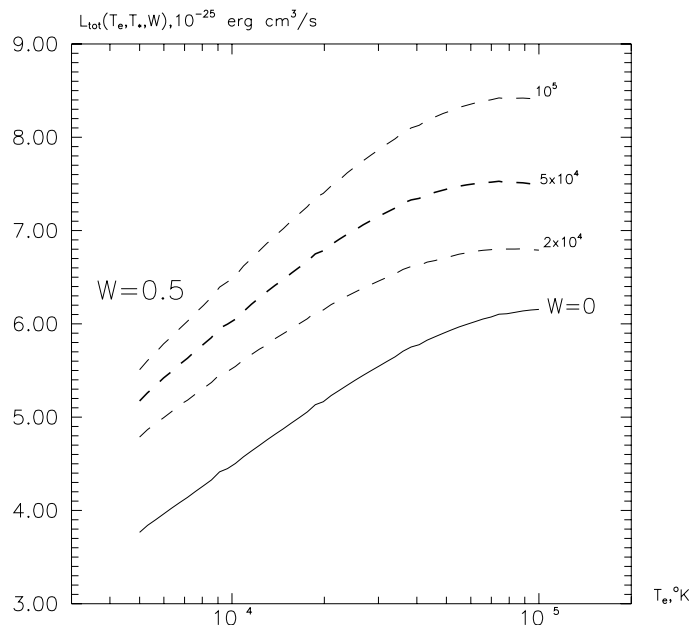


Рис. 4.12. Полная скорость рекомбинационного охлаждения с учетом (пунктир, $W = 0.5$) и без учета (сплошная линия, $W = 0$) вклада вынужденной рекомбинации. Планковские температуры внешнего источника излучения указаны у соответствующих кривых.

fig.TootRecCoolRate

Для расчета полной скорости охлаждения можно воспользоваться данными табл. [tableTotalCool](#) 4.9. Для промежуточных значений T_e и T_* величины $L(T_e)$ и $L^{st}(T_e, T_*)$ легко могут быть найдены интерполяцией.

4.4 Масштабные соотношения для скоростей фотопроцессов

Зависимость сечения фотоионизации с произвольного уровня i водородоподобного иона от заряда ядра Z может быть представлена следующей формулой:

$$\sigma_i^{\text{phi}}(Z, \nu) = Z^{-2} \sigma_i^{\text{phi}}(1, \nu/Z^2), \quad (4.4.1) \quad \text{Eq.SigPhi}(Z)$$

где $\sigma_i^{\text{phi}}(1, \nu)$ - соответствующее сечение фотоионизации для H. Это выражение принимает особенно простой вид при использовании пороговых единиц для энергий ионизирующих атом (водородоподобный ион) квантов:

$$\sigma_i^{\text{phi}}(Z, u) = Z^{-2} \sigma_i^{\text{phi}}(1, u) \quad u = (h\nu - I_i)/I_i. \quad (4.4.2) \quad \text{Eq.SigPhi}(Z) \text{ tr}$$

Потенциал ионизации иона с зарядом Z с уровня i : $I_i(Z) = \text{Ry} Z^2/i^2$. Постоянная Ридберга для водородоподобного иона с массой ядра M_Z :

Таблица 4.9. Полные скорости охлаждения при спонтанной и вынужденной рекомбинациях H и He⁺ в единицах 10⁻²⁵ эрг см³ /с.

T _e , K	H					
	Спонтанная		Вынужденная			
	T _* /10 ⁴ K :	1.00	2.00	5.00	10.00	
5000	3.78	1.48	2.03	2.81	3.48	
10000	4.49	1.40	2.07	3.10	4.02	
15000	4.90	1.30	2.03	3.20	4.30	
20000	5.18	1.22	1.96	3.23	4.47	
25000	5.39	1.14	1.89	3.23	4.57	
30000	5.55	1.08	1.82	3.21	4.64	
He ⁺						
5000	20.26	6.03	8.30	11.56	13.98	
10000	24.95	5.67	8.43	12.75	16.06	
15000	27.96	5.26	8.25	13.15	17.08	
20000	30.33	4.93	7.97	13.27	17.68	
25000	31.98	4.63	7.67	13.25	18.03	
30000	33.48	4.38	7.45	13.16	18.24	

$R_{yZ} = 109737.06 \text{ cm}^{-1} / (1 + m_e/M_Z)$. Здесь m_e - масса электрона. Разность постоянных Ридберга для водородоподобных ионов с разными Z не превышает 0.1% , поэтому можно приближенно положить $I_i(Z) \propto Z^2$.

Подставляя выражение (4.4.2) для сечений фотоионизации в формулы (4.2.39) и (4.3.11), получаем соотношения между скоростями спонтанной фоторекомбинации и рекомбинационного охлаждения водородоподобных ионов с зарядом Z :

$$\alpha_i(T_e) = \alpha_i(Z, T_e) = Z \cdot \alpha_i(1, T_e/Z^2), \quad (4.4.3) \quad \text{eqScAlpha}$$

а также

$$L_i(T_e) = L_i(Z, T_e) = Z^3 \cdot L_i(1, T_e/Z^2). \quad (4.4.4) \quad \text{eqScL}$$

Аналогичные соотношения легко могут быть получены и для вынужденной фоторекомбинации:

$$\alpha_i^{\text{st}}(T_e, T_*) = \alpha_i^{\text{st}}(Z, T_e) = Z \cdot \alpha_i^{\text{st}}(1, T_e/Z^2, T_*/Z^2), \quad (4.4.5) \quad \text{eqScAlphaSt}$$

$$L_i^{\text{st}}(T_e, T_*) = L_i^{\text{st}}(Z, T_e, T_*) = Z^3 \cdot L_i^{\text{st}}(1, T_e/Z^2, T_*/Z^2). \quad (4.4.6) \quad \text{eqScLSt}$$

Такие же соотношения справедливы и для полных скоростей рекомбинации и рекомбинационного охлаждения.

Формулы (4.4.4) и (4.4.6) показывают, что скорость рекомбинационного охлаждения с ростом заряда ядра увеличивается $\propto Z^3$. Это означает, что вклады рекомбинаций H и He⁺ в охлаждение электронного газа в атмосферах звезд ранних спектральных классов и газовых туманностях сравнимы по порядку величины.

Используя выражения Γ_{ic} (Eq. SigPhi(Z)) или Γ_{ic} (Eq. SigPhi(Z)tr) для сечений фотоионизации и подставляя их в формулы (Eq. Gamma_1eqCalJ) и (Eq.3.2) и (Eq.3.3), получаем следующие масштабные соотношения для скоростей фотонагрева:

$$\Gamma_{ic} = G_{ic}(Z, T_*, \tau_i^0) = Z^6 \cdot G_{ic}(1, T_*/Z^2, \tau_i^0). \quad (4.4.7) \quad \text{Eq.ScGic}$$

Здесь $G_{ic}(1, T_*/Z^2, \tau_i^0)$ - скорость фотонагрева для H. Используя соотношения B_{ic} (Eq. BicAnal) и (Eq. calF(beta)) для скоростей фотоионизации с уровня i - B_{ic} , также находим:

$$B_{ic} = B_{ic}(Z, T_*, \tau_i^0) = Z^4 \cdot B_{ic}(1, T_*/Z^2, \tau_i^0). \quad (4.4.8) \quad \text{Eq.ScBic}$$

Данные формулы показывают, что скорость фотонагрева быстро растет с ростом заряда ядра (если величина $\beta_i^* \approx 1$). Это означает, что нагрев электронного газа в атмосферах звезд ранних спектральных классов, для которых условие $\beta_i^* \approx 1$ выполнено по крайней мере для возбужденных уровней, происходит главным образом при ионизации He^+ и ионов с более высоким зарядом, в частности, C^{2+} , C^{3+} , N^{2+} , O^{2+} и др.

4.5 Излучение плазмы в непрерывном спектре

s.ContEmiss

Свободный электрон с энергией $E > 0$, находящийся в кулоновском поле иона X^+ , может перейти в состояние с положительной энергией $E' > 0$. Если $E > E'$, то такой процесс называется свободно-свободным излучением:



При этом излучается фотон непрерывного спектра с энергией $h\nu = E - E'$. В процессе свободно-свободного поглощения (при $E < E'$)



фотон передает энергию $h\nu$ фотоэлектрону. При этом энергия свободного электрона увеличивается.

Основной вклад в излучение в непрерывном спектре дают свободно-свободное (тормозное) излучение, излучение при рекомбинациях (свободно-связанное излучение) и двухфотонное излучение.

4.5.1 Излучение при рекомбинациях и свободно-свободных переходах

Энергия, излучаемая при свободно-свободном излучении в поле иона X^{n+}

$$E_{\text{ff}} = N(X^{n+}) n_e \eta^{\text{ff}}(\nu), \quad (4.5.3) \quad \text{Eq.Eff}$$

где коэффициент свободно-свободного излучения иона X^{n+} в состоянии γ , рассчитанный на единичный интервал частот,

$$\eta^{\text{ff}}(\nu) = \int_{\sqrt{2h\nu/m}}^{\infty} 4(v/v')^2 \sigma_{\nu}(\gamma, E, E') v' f(v') dv'. \quad (4.5.4) \quad \boxed{\text{Eq. epsff}}$$

Здесь $E = mv^2/2$, $E' = mv'^2/2$.

Для неводородоподобного иона с зарядом Z в одноконфигурационном приближении

$$\sigma_{\nu}(\gamma, E, E') = \frac{2^4 \pi^2 \alpha a_0^5 Z \Delta \varepsilon}{3\sqrt{\varepsilon}} \sum_{l'=l\pm 1} C_{ll'} \left[\int_0^{\infty} P(\varepsilon l | r) r P(\varepsilon' l' | r) dr \right]^2, \quad (4.5.5) \quad \boxed{\text{Eq. sigmaff}}$$

где $P(\varepsilon l | r)$ и $P(\varepsilon' l' | r)$ — радиальные волновые функции фотоэлектронов с кулоновскими энергиями $\varepsilon = (E/Z^2)/Ry$, $\varepsilon' = (E'/Z^2)/Ry$. Параметр $\Delta \varepsilon = \varepsilon' - \varepsilon$.

При нормальном химическом составе вклад теплового тормозного излучения электронов в поле ионов металлов в функцию потери энергии не превышает 15%. Для теплового тормозного излучения имеет место следующее приближенное выражение:

$$P_{\text{ff}}(T) = C_{\text{ff}} n_e T^{-1/2} \sum_{X,j} n(X^{z+}) z^2 \int_0^{\infty} e^{-h\nu/k_B T} \bar{g}_{\text{ff}}(z, \nu, T) d\nu, \quad (4.5.6) \quad \boxed{\text{Eq. Pff1}}$$

где суммирование выполняется по всем элементам X и всем стадиям их ионизации $j \geq 1$, а

$$C_{\text{ff}} = 4\pi \frac{16}{3} \left(\frac{\pi}{6} \right)^{1/2} \frac{e^6}{c^3 m_e^{1/2} k^{1/2}} \approx 6.841 \cdot 10^{-38} \left[\text{эрг см}^3 \text{К}^{1/2} \right]. \quad (4.5.7) \quad \boxed{\text{Eq. Cff}}$$

В предельном случае высокотемпературной плазмы усредненный гаунтовский множитель можно представить в виде:

$$\bar{g}_{\text{ff}}(z, \nu, T) = \frac{\sqrt{3}}{\pi} e^{u/2} K_0 \left(\frac{u}{2} \right), \quad (4.5.8) \quad \boxed{\text{Eq. Gau}}$$

где $K_0(x)$ — функция Бесселя второго рода. Интегрирование в уравнении (4.5.6) дает:

$$P_{\text{ff}}(T) = \bar{C}_{\text{ff}} T^{1/2} n_e \sum_{X,j} n(X^{z+}) z^2. \quad (4.5.9) \quad \boxed{\text{Eq. Pff3}}$$

Скорость потерь энергии на рекомбинационное излучение можно рассчитать по формуле (4.5.9). Для водородоподобных ионов используется

соотношение (Eq.LRecH1) (4.3.8). Для расчета скорости потери энергии на рекомбинацию для неводородоподобных ионов можно использовать следующее приближение. Потери энергии при переходах на основной уровень вычисляются точно с использованием соотношения (Eq.LRec) (4.3.7), а для возбужденных уровней — в водородоподобном приближении (Eq.LRecH1) (4.3.8). Как показывают оценки, данное приближение обеспечивает точность расчета скоростей рекомбинационного охлаждения порядка 3-5%. Аналитические формулы расчета коэффициентов излучения в непрерывном спектре для рекомбинационного и свободно-свободного излучения даны в работе [Kholtygin-1997].

4.5.2 Двухфотонное излучение

Важным источником излучения в непрерывном спектре является двухфотонное излучение. Согласно [Sobolev1985, BrownMathews70] [122, 27] коэффициент излучения при двухфотонных переходах с метастабильного уровня $2s$ водорода:

$$\varepsilon_{\nu}^{2q} d\nu = (4\pi)^{-1} n_{2s} A(y) y dy, \quad (4.5.10) \quad \text{Eq. 2qEmCoeff}$$

где n_{2s} — населенность уровня $2s$, $y = \nu/\nu_{12}$ — безразмерная частота излучения, ν_{12} — частота перехода $2s \rightarrow 1s$. Функция $A(y)$ отлична от нуля только при $y \in [0, 1]$. В работе [Nussbaumer-84] [68] дана ее удобная аналитическая аппроксимация:

$$A(y) = C \left[y(1-y) \cdot (1 - (4y(1-y))^{\alpha} + \alpha(y(1-y))^{\beta} \cdot (4y(1-y))^{\gamma} \right], \quad (4.5.11) \quad \text{Eq. 2qA(y)}$$

где $\alpha = 0.88$, $\beta = 1.53$, $\gamma = 0.8$ и $C = 202.0 \text{ c}^{-1}$, обеспечивающая точность не менее 0.6%.

Формула (Eq. 2qEmCoeff) (4.5.10) может быть использована и для водородоподобных ионов с зарядом ядра Z . В этом случае величина ν_{12} заменяется на $\nu_{12}^Z = \nu_{12}/Z^2$, а величина C в формуле (Eq. 2qA(y)) (4.5.11) на $C^Z = 202 \times \text{Ry}/\text{Ry}_H$, где постоянная Ридберга для водорода $\text{Ry}_H = 109677.576 \text{ см}^{-1}$. Полная вероятность двухфотонного перехода $2s - 1s$ составляет

$$A_{2q}^Z = \frac{1}{2} \int_0^1 A^Z(y) dy = 8.2249 Z^6 \frac{\text{Ry}}{\text{Ry}_H} \text{ c}^{-1}. \quad (4.5.12) \quad \text{Eq. A(2q)}$$

Интенсивность двухфотонного излучения пропорциональна величине n_{2s} . Для оценки населенности n_{2s} уровня $2s$ можно использовать соотношения, приведенные в книгах [BrownMathews70, Sobolev1985] [27, 122].

Глава 5

Столкновения атомов и ионов с электронами и другими частицами

s.CollProc

При неупругих столкновениях атома с электроном происходит обмен энергией в системе атом плюс электрон. Наиболее важным является процесс возбуждения атома электронным ударом:



При этом электрон передает часть своей энергии атому или иону X^{n+} , который переходит из состояния i (основное или возбужденное) в возбужденное состояние k . Процесс возбуждения электронным ударом происходит только для электронов с энергиями большими энергии перехода $\Delta E_{ki} = E_k - E_i$.

При столкновении электрона с атомом (ионом) в возбужденном состоянии X_k возможна передача энергии атома электрону. В результате потери энергии атом переходит на энергетически более низкий уровень i :



Если энергия электрона превышает ионизационный потенциал атома, то результатом столкновения атома с электрона может быть отрыв связанного атомного электрона. Такой процесс называется *ионизацией электронным ударом*:



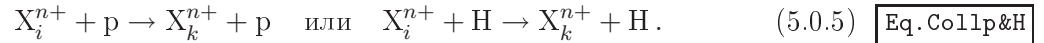
Таким образом, в результате данного процесса появляются 2 электрона с положительной энергией: оторванный и налетающий, столкновение которого с атомом привело к отрыву атомного электрона.

Обратный процесс:



называется *тройной рекомбинацией*. При этом электрон, сталкивающийся с атомом, захватывается в одно из связанных состояний, а избыток энергии передается другому электрону. Таким образом, в процессе тройной рекомбинации участвуют три частицы: атом и два электрона. Это означает, что тройная рекомбинация эффективна только при высокой плотности плазмы $n > 10^{14} \text{ см}^{-3}$ и редко имеет значение для астрофизических объектов.

Важное значение в перераспределении населённостей уровней могут играть столкновения атомов и ионов с протонами и атомами водорода.



Возбуждение атомов и ионов электронным ударом является основным механизмом формирования излучения в линиях большого числа астрофизических объектов: планетарных и диффузных туманностей, корон Солнца и звезд, межзвездной и межгалактической среды. Для расчета спектров этих объектов требуется знание сечений и скоростей возбуждения электронным ударом уровней атомов и ионов, как в низко ($n = 2 - 3$), так и в высоколежащие ($n = 4 - 10$) состояния в широком интервале электронных температур ($10^4 - 10^8 \text{ K}$).

5.1 Рассеяние в центральном поле

5.1.1 Упругое рассеяние

Рассмотрим задачу о рассеянии частицы массы m атомом (ионом или другой частицей) массы M . Задача об относительном движении двух взаимодействующих частиц с массами M и m сводится к задаче о движении одной частицы с приведённой массой $\mu = mM/(m+M)$ (см. § 2.1). Для общности обозначим потенциал взаимодействия между частицами через $U(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$, что позволяет описать не только рассеяние в кулоновском поле, но и более сложные типы взаимодействия, учитывающие экранировку заряда ядра электронами атома, не участвующими в процессе столкновения, рассеяние атомов на атомах или молекулах и т.п.

Потенциал $U(r)$ предполагается центрально-симметричным, тогда уравнение Шредингера для частицы в поле $V(r)$ имеет вид, аналогичный уравнению (2.1.2), с заменой кулоновского потенциала на потенциал $U(r)$:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta + U(r) \right) \psi = E\psi. \quad (5.1.1) \quad \boxed{\text{Eq.ShrCoulFieldU}(r)}$$

Переменные в уравнении разделяются: $\psi = \frac{1}{r} P_{El}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$ (см. § 2.1). Уравнение для радиальной части волновой функции имеет вид (5.1.7).

При анализе волновых функций непрерывного спектра $E > 0$ удобно вместо энергии E электрона использовать понятие волнового числа

$$k = |k| = p/\hbar = \frac{\sqrt{2\mu E}}{\hbar}. \quad (5.1.2) \quad \boxed{\text{Eq.WaveVect}}$$

При столкновениях атома с электронами $\mu \approx m_e$, тогда $k = \frac{1}{a_0} \sqrt{\frac{E}{Ry}}$, где a_0 — борковский радиус. В атомной системе единиц ($e = m_e = \hbar = 1$) величина $a_0 = 1$, то есть энергия электрона в ридбергах $E/Ry = k^2$.

Радиальные волновые функции непрерывного спектра $P_{kl}(r)$ с заданным волновым числом нормированы условием

$$\int_0^\infty P_{kl}(r)P_{k'l}(r)dr = 2\pi\delta(k' - k) \quad (5.1.3) \quad \boxed{\text{Eq.NormPsiCont}}$$

и отличаются только множителем $\frac{1}{\hbar} \sqrt{m/2\pi k}$ от функций $P_{El}(r)$. Решение уравнения (Б.1.1) в случае кулоновского поля $U(r) = -Z/r$ выражается через гипергеометрическую функцию мнимого аргумента [LL74]. Для произвольного поля $U(r)$ аналитического выражения волновых функций непрерывного спектра не существует, однако для наиболее важных для теории столкновений далеких от рассеивающего центра областей $r \gg a_0$ можно получить асимптотическое выражение для P_{kl} при $r \rightarrow \infty$ (см. ниже).

Сферические волны

Наиболее простое выражение для волновой функции $P_{kl}(r)$ можно получить для свободной частицы с заданными энергией $E/Ry = k^2$, импульсом $\mathbf{p} = \mathbf{k}\hbar$, квадратом момента количества движения $l(l+1)\hbar$ и проекцией момента $m\hbar$. Уравнение Шредингера для радиальной части волновой функции такой частицы в атомной системе единиц имеет следующий вид:

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2}\right) P_{kl}(r) = k^2 P_{kl}(r). \quad (5.1.4) \quad \boxed{\text{Eq.RadShrP(R)-U0}}$$

Это уравнение может быть получено из уравнения (Б.1.7) при замене $U(r) = 0$ и $\hbar = m_e = 1$.

Уравнение (Б.1.4) имеет аналитическое решение (см. [LL74]):

$$P_{kl}(r) = (-1)^l \frac{2r^{l+1}}{k^l} \left(\frac{d}{rdr}\right)^l \frac{\sin kr}{r}. \quad (5.1.5) \quad \boxed{\text{Eq.RadShrP(R)-U0sol}}$$

Функции $P_{kl}(r)$ можно выразить через функции Бесселя полуцелого порядка:

$$P_{kl}(r) = 2krj_l(kr) = \sqrt{2\pi kr}J_{l+1/2}(kr). \quad (5.1.6) \quad \boxed{\text{Eq.SferBessel}}$$

Функции $j_l(x) = \sqrt{\pi/2x}J_{l+1/2}(x)$ являются элементарными и называются *сферическими функциями Бесселя*. Функции $j_0(x) = \frac{\sin x}{x}$, $j_1(x) = \frac{\sin x}{x^2} - \frac{\cos x}{x}$, $j_2(x) = \left(\frac{3}{x^3} - \frac{1}{x}\right)\sin x - \frac{3\cos x}{x^2}$.

Асимптотическое выражение для функций $P_{kl}(r)$ может быть получено из того соображения, что слагаемое с наименьшей степенью $1/r$ будет получено при l -кратном дифференцировании синуса. Так как дифференцирование синуса эквивалентно добавлению слагаемого $-\pi/2$ в его аргументе, то асимптотическое выражение примет вид:

$$P_{kl}(r) \sim 2 \sin \left(kr - \frac{\pi l}{2} \right). \quad (5.1.7) \quad \boxed{\text{Eq.Pk1-asimpt}}$$

В области малых $r \ll a_0$

$$P_{kl}(r) \approx \frac{2k^{l+1}}{(2l+1)!!} r^{l+1}. \quad (5.1.8) \quad \boxed{\text{Eq.Pk1-r-1l-1}}$$

Асимптотическое поведение волновой функции частицы с положительной энергией $E/Ry = k^2$ в центральном поле $U(r)$ зависит от скорости убывания потенциала. Если $U(r)$ убывает быстрее, чем $1/r$, то по [110]

$$P_{kl}(r) \sim 2 \sin \left(kr - \frac{\pi l}{2} + \eta_l \right), \quad (5.1.9) \quad \boxed{\text{Eq.Pk1-U(r)_asimpt}}$$

где постоянная η_l (фаза рассеяния или фазовый сдвиг) определяется решением радиального уравнения Шредингера (5.1.7) при граничном условии $P_{kl}(0) = 0$ (см. формулу (5.1.8)) и не может быть вычислена в общем виде. Фазы $\eta_l = \eta_l(k)$ зависят от значения волнового числа k .

В кулоновском поле $U(r) = -Z/r$ асимптотическое поведение радиальной части волновой функции отличается от определяемого соотношением (5.1.9). Согласно [110]

$$P_{kl}(r) \sim 2 \sin \left(kr + \frac{1}{k} \ln 2kr - \frac{\pi l}{2} + \eta_l \right), \quad (5.1.10) \quad \boxed{\text{Eq.Pk1-U(r)_asimpt}}$$

где фазовый сдвиг

$$\eta_l = \arg \Gamma \left(l + 1 - \frac{i}{k} \right). \quad (5.1.11) \quad \boxed{\text{Eq.Pk1-U(r)eta}}$$

5.1.2 Сечение упругого рассеяния

Эффективность рассеяния частиц атомами или ионами зависит от угла, на который отклоняется от своего первоначального направления рассеиваемая частица (угла рассеяния). Эту эффективность принято характеризовать отношением числа частиц, рассеянных в элементе телесного угла $d\Omega$ в 1 с, к плотности потока падающих частиц, т. е. к числу частиц, падающих в 1 с, на площадку в 1 см^2 . Это отношение $d\sigma/d\Omega$ имеет размерность площади и называется *дифференциальным эффективным сечением* рассеяния.

Пусть частицы падают на рассеивающий центр вдоль оси z со скоростью v . Свободное движение таких частиц описывается волновой функцией $\psi = e^{ikz}$ (плоская волна). Эта волновая функция нормирована таким образом, что плотность потока равна $v|\psi|^2 = v$. Рассеянными частицам вдали от рассеивающего центра соответствует расходящаяся сферическая волна $\frac{f(\theta)}{r}e^{ikr}$, где угол θ отсчитывается от направления оси z . На больших расстояниях $r \gg a_0$

$$\psi = e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r}e^{ikr}. \quad (5.1.12) \quad \boxed{\text{Eq.ScattPsi-asimpt}}$$

Согласно [Eq.ScattPsi-asimpt](#) (5.1.12) число частиц, рассеиваемых в 1 с в элементе телесного угла $d\Omega$ равно

$$vr^2 d\Omega \left| \frac{f(\theta)}{r}e^{ikr} \right|^2 = v|f(\theta)|^2 d\Omega. \quad (5.1.13) \quad \boxed{\text{Eq.NumbScatt}}$$

Отсюда для дифференциального эффективного сечения рассеяния получаем

$$d\sigma/d\Omega = |f(\theta)|^2. \quad (5.1.14) \quad \boxed{\text{Eq.DiffSectRass}}$$

Для вычисления сечения $d\sigma/d\Omega$ необходимо определение функции $f(\theta)$, называемой амплитудой рассеяния.

[L74](#) Разложение плоской волны e^{ikz} по сферическим функциям согласно [\[10\]](#) имеет вид:

$$e^{ikz} = \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) j_l(kr). \quad (5.1.15) \quad \boxed{\text{Eq.exp(ikz)-Bessel}}$$

Из асимптотического разложения сферических функций Бесселя можно найти асимптотику функции ψ :

$$\begin{aligned} \psi \sim e^{ikz} + \frac{f(\theta)}{r}e^{ikr} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} & -\frac{1}{2ik} \left[\sum_l i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) \right] \frac{e^{-i(kr-l\pi/2)}}{r} \\ & + \frac{1}{2ik} \left[\sum_l i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) + 2ikf(\theta) \right] \frac{e^{ikr}}{r}. \end{aligned} \quad (5.1.16) \quad \boxed{\text{Eq.AssPsiScatt}}$$

Пусть потенциал $U(r)$ убывает быстрее, чем $1/r$, тогда можно использовать асимптотику (Eq. Pkl-U(r)-asimpt (б.1.9)) волновой функции $P_{kl}(r)$. Волновая функция (б.1.12) не зависит от угла φ , поэтому ее можно представить в виде разложения по полной системе функций $P_l(\cos \theta)P_{kl}(r)$:

$$\begin{aligned}\psi &= \sum_l A_l P_l(\cos \theta) \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{kr} P_{kl}(r) \sim \sum_l A_l P_l(\cos \theta) \frac{\sin(kr - l\pi/2 + \eta_l)}{kr} = \\ &= \frac{e^{ikr}}{2ikr} \sum_l A_l P_l(\cos \theta) e^{i\eta_l - il\pi/2} \\ &\quad - \frac{e^{-ikr}}{2ikr} \sum_l A_l P_l(\cos \theta) e^{-i\eta_l + il\pi/2}.\end{aligned}\quad (5.1.17) \quad \text{Eq. Eq. AssPsiScattA1}$$

Сравнивая (Eq. AssPsiScattA1 (б.1.16)) и (Eq. AssPsiScattA1 (б.1.17)), получаем $A_l = i^l (2l + 1) e^{i\eta_l}$. Тогда

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_l (2l + 1) [e^{2i\eta_l} - 1] P_l(\cos \theta) \quad (5.1.18) \quad \text{Eq. f(theta)}$$

и

$$\psi = \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{kr} \sum_l (2l + 1) e^{i\eta_l} P_l(\cos \theta) P_{kl}(r). \quad (5.1.19) \quad \text{Eq. psi-etal}$$

В случае кулоновского поля в аргументе синуса появляется дополнительное слагаемое $(\ln 2kr)/k$ (см. формулу (Eq. Pkl-U(r)-asimpt (б.1.10))). Обобщение всех результатов на этот случай не представляет труда.

При больших r , используя вышеприведенное выражение для коэффициентов A_l , из формулы (Eq. AssPsiScattA1 (б.1.17)) найдем

$$\begin{aligned}\psi &= \sum_l \psi_l = \frac{1}{2ik} \sum_l i^l (2l + 1) P_l(\cos \theta) \times \\ &\quad \times \left[\frac{e^{-i(kr - l\pi/2)}}{r} + e^{2i\eta_l} \frac{e^{i(kr - l\pi/2)}}{r} \right].\end{aligned}\quad (5.1.20) \quad \text{Eq. psi-etalAs}$$

Каждый член суммы (Eq. psi-etalAs (б.1.20)) соответствует частицам с угловым моментом l . Такое представление называется разложением по *парциальным волнам*.

Подставив выражение (Eq. f(theta) (б.1.18)) в формулу (Eq. DiffSectRass (б.1.14)), выполнив интегрирование по всем телесным углам Ω и использовав ортонормированность функций $P_l(\cos \theta)$, получим полное эффективное сечение упругого рассеяния

$$\sigma(k) = \frac{4\pi}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) \sin^2 \eta_l. \quad (5.1.21) \quad \text{Eq. SigmaElastTot}$$

Подставив значение $\theta = 0$ в формулу (Eq. f(theta) (б.1.18)), выразим эффективное сечение упругого рассеяния

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \text{Im} f(0) = -\frac{2\pi i}{k} [f(0) - f^*(0)]. \quad (5.1.22) \quad \text{Eq. OptTheorem}$$

Соотношение [\(5.1.22\)](#) ^{Eq.OptTheorem} носит название оптической теоремы. Оно имеет общий характер и справедливо также в общем случае нецентрального поля.

Приведенные выше формулы для сечений относятся к системе центра инерции сталкивающихся частиц. Не представляет труда перейти к лабораторной системе (L), в которой частица с массой M до столкновения покоится. Полные сечения в обеих системах одинаковы $\sigma_L = \sigma$.

5.1.3 Неупругое рассеяние

В общем случае, когда имеет место как упругое, так и неупругое рассеяние, волновая функция, помимо падающей плоской волны, должна содержать целый ряд расходящихся волн, соответствующих различным типам или, как говорят, каналам рассеяния. Если в случае чисто упругого рассеяния интенсивности сходящихся и расходящихся парциальных l -волн одинаковы, то в случае неупругого рассеяния интенсивность расходящейся волны, описывающей вклад упругого рассеяния, должна быть меньше, чем сходящейся. Учитывая это обстоятельство и используя соотношение [\(5.1.20\)](#) ^{Eq.psi-etalaS}, волновую функцию ψ , описывающую упругое рассеяние, в общем случае можно записать (для больших $r \gg a_0$) в виде

$$\psi = \sum_l (\psi' + \psi'') \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{1}{2ik} \sum_l i^l (2l+1) P_l(\cos \theta) \left[-\frac{e^{-i(kr-l\pi/2)}}{r} + e^{-2\beta_l+2i\eta_l} \frac{e^{i(kr-l\pi/2)}}{r} \right]. \quad (5.1.23) \quad \text{Eq.psiUnElast}$$

Первое слагаемое в этом выражении (функция ψ') соответствует сходящейся сферической волне, тогда как второе (функция ψ'') — расходящейся волне. Сравнивая это выражение с формулой [\(5.1.20\)](#) ^{Eq.psi-etalaS}, получаем

$$f(\theta) = \frac{1}{2ik} \sum_l (2l+1) \left[e^{-2\beta_l+2i\eta_l} - 1 \right] P_l(\cos \theta). \quad (5.1.24) \quad \text{Eq.f(theta)-total}$$

Это выражение отличается от [\(5.1.18\)](#) ^{Eq.f(theta)} только тем, что вместо действительной фазы η_l входит комплексная фаза $\eta_l + i\beta_l$. Подставляя выражение [\(5.1.24\)](#) ^{Eq.f(theta)-total} в формулу [\(5.1.14\)](#) ^{Eq.DiffSectClass}, найдем

$$\sigma_{\text{упр}} = \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \left| 1 - e^{-2\beta_l+2i\eta_l} \right|^2. \quad (5.1.25) \quad \text{Eq.sigmaElast-tot}$$

С помощью [\(5.1.23\)](#) ^{Eq.psiUnElast} можно найти также эффективное сечение неупругих столкновений. Согласно [\(5.1.23\)](#) ^{Eq.psiUnElast} за 1 секунду в сферу большого радиуса $r \gg a_0$ входит

$$\int v |\psi_l|^2 r^2 d\Omega = v \frac{\pi}{k^2} (2l+1) \quad (5.1.26) \quad \text{Eq.NumbIn}$$

частиц с моментом l и выходит

$$\int v |\psi_l''|^2 r^2 d\Omega = v \frac{\pi}{k^2} (2l+1) |1 - e^{-2\beta_l + 2i\eta_l}|^2 \quad (5.1.27) \quad \text{Eq. NumbOut}$$

частиц. Разница между величинами $\frac{\text{Eq. NumbIn}}{(5.1.26)}$ и $\frac{\text{Eq. NumbOut}}{(5.1.27)}$ дает число неупругого рассеянных частиц:

$$v \frac{\pi}{k^2} (2l+1) \left[1 - |e^{-2\beta_l + 2i\eta_l}|^2 \right]. \quad (5.1.28) \quad \text{Eq. NumbUnElast}$$

Просуммировав выражение $\frac{\text{Eq. NumbUnElast}}{(5.1.28)}$ по l и поделив на плотность потока падающих частиц v , получим полное сечение неупругого рассеяния

$$\begin{aligned} \sigma_{\text{неупр}} &= \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \left(1 - |e^{-2\beta_l + i2\eta_l}|^2 \right) \\ &= \frac{\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \left(1 - e^{-4\beta_l} \right), \end{aligned} \quad (5.1.29) \quad \text{Eq. sigmaUnElast}$$

а также полное сечение (упругого плюс неупругого) рассеяния

$$\sigma = \sigma_{\text{упр}} + \sigma_{\text{неупр}} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_l (2l+1) \left(1 - e^{-2\beta_l} \cos 2\eta_l \right). \quad (5.1.30) \quad \text{Eq. Eq. sigmaTotal}$$

Из формулы $\frac{\text{Eq. sigmaUnElast}}{(5.1.29)}$ следует, что парциальное эффективное сечение неупругого рассеяния не может превышать максимального значения $\frac{\pi}{k^2} (2l+1)$. Упругое рассеяние всегда сопутствует неупругому. Если $e^{-2\beta_l} \neq 1$, то при любых значениях η_l сечение $\sigma_{\text{упр}} \neq 0$.

5.2 Приближения Борна, Кулона-Борна и искажённых волн. Аппроксимации сечений

5.2.1 Приближения Борна и Кулона-Борна

Для расчета и анализа астрофизических спектров требуется получение большого числа сечений для различных атомов и ионов, в том числе, и многоэлектронных. Для массовых расчетов сечений целесообразно использовать относительно простые методы, дающие приемлемую для астрофизических приложений точность и применимые не только к простым, но и к сложным атомам и ионам. Одним из таких методов является приближение Борна, в котором предполагается, что энергия рассеиваемого атомом электрона много больше энергии атома. Во многих случаях приближение Борна позволяет достичь точности расчета сечений в среднем $\pm 50\%$ [131].

Рассмотрим условия применимости борновского приближения. При выполнении любого из двух условий

$$|U(r)| \ll \frac{\hbar}{\mu r^2} \quad \text{или} \quad |U(r)| \ll \frac{\hbar v}{r} \quad (5.2.1) \quad \boxed{\text{Eq. BornCond}}$$

взаимодействие $U(r)$ в уравнении (5.1.1) можно рассматривать как малое возмущение. В этом случае оказывается возможным получить общие формулы для эффективных сечений упругого и неупругого рассеяния, не прибегая к разложению на парциальные волны ψ_l .

Борновское приближение применимо не только для центрально-симметричных взаимодействий, но и для возмущений с нарушениями центральной симметрии. Согласно соотношению (5.2.1) борновское приближение применимо при любых типах взаимодействий, если скорости возмущающих частиц достаточно велики. Эффективное сечение процесса рассеяния может быть получено как отношение вероятности перехода, вызываемого взаимодействием $U(r)$, к плотности потока вызывающих столкновение частиц.

Согласно теории возмущений (например, [17]), вероятность перехода атома между состояниями дискретного спектра γ_0 и γ , сопровождающегося изменением волнового вектора возмущающей частицы $\mathbf{k}_0 \rightarrow \mathbf{k}$, определяется выражением

$$dW_{\gamma_0 \mathbf{k}_0; \gamma \mathbf{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} |U_{\gamma_0 \mathbf{k}_0; \gamma \mathbf{k}}|^2 \delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}_0) d\mathbf{k}. \quad (5.2.2) \quad \boxed{\text{Eq. Wgamm0-gamma}}$$

Здесь $\mathcal{E}_0 = E_{\gamma_0} + \frac{\hbar^2 k_0^2}{2\mu}$; $\mathcal{E} = E_{\gamma} + \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu}$, а матричный элемент перехода $\gamma_0 \mathbf{k}_0 \rightarrow \gamma \mathbf{k}$

$$U_{\gamma_0 \mathbf{k}_0; \gamma \mathbf{k}} = \int \psi_{\mathbf{k}_0}^*(\mathbf{r}) U_{\gamma_0 \gamma}(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (5.2.3) \quad \boxed{\text{Eq. MatrElemBorn}}$$

Усредняемый по состояниям электронов потенциал взаимодействия сталкивающейся с атомом (ионом) частицы (электрона, протона и т.д.)

$$U_{\gamma_0; \gamma}(\mathbf{r}) = \int \psi_{\gamma_0}^*(\mathbf{r}_i) U(\mathbf{r}) \psi_{\gamma}(\mathbf{r}_i) d\boldsymbol{\tau}, \quad (5.2.4) \quad \boxed{\text{Eq. UBorn}}$$

где ψ_{γ_0} , ψ_{γ} — атомные волновые функции; \mathbf{r}_i — координаты атомных электронов; $\psi_{\mathbf{k}_0}$, $\psi_{\mathbf{k}}$ — волновые функции свободного движения возмущающей частицы.

Интегрирование по $d\boldsymbol{\tau}$ означает интегрирование по совокупности всех координатных переменных \mathbf{r}_i и суммирование по всем спиновым переменным в волновых функциях $\psi_{\gamma_0}^*(\mathbf{r}_i)$ и $\psi_{\gamma}(\mathbf{r}_i)$ начального и конечного состояний атома.

Волновая функция конечного состояния сталкивающейся с атомом частицы $\psi_{\mathbf{k}_0}$ должна быть нормирована на δ -функцию $\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$. При

этом $\psi_{\mathbf{k}} = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$. Если волновая функция $\psi_{\mathbf{k}_0}$ начального состояния нормирована на единичную плотность потока $\left(\psi_{\mathbf{k}_0} = \frac{1}{\sqrt{v}} e^{i\mathbf{k}_0\mathbf{r}}\right)$, то дифференциальное эффективное сечение $d\sigma$ совпадает с dW .

Подставив в формулу (5.2.2) соотношение

$$\delta(\mathcal{E} - \mathcal{E}_0) = \frac{\mu}{\hbar^2 k} \delta\left(k - \sqrt{\frac{2\mu}{\hbar^2}(E_{\gamma_0} - E_{\gamma}) + k_0^2}\right)$$

и интегрируя по $d\mathbf{k}$, получим

$$d\sigma_{\gamma_0\mathbf{k}_0;\gamma\mathbf{k}}/d\Omega = \frac{\mu^2 k}{4\pi^2 \hbar^4 k_0} \left| \int e^{-i(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k})\mathbf{r}} U_{\gamma_0\gamma}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \right|^2, \quad (5.2.5) \quad \text{Eq. FormBorn}$$

где $k^2 = \frac{2\mu}{\hbar^2}(E_{\gamma_0} - E_{\gamma}) + k_0^2$.

Формула (5.2.5) носит название формулы Борна. Случай $\gamma_0 = \gamma, k_0 = k$ соответствует упругому рассеянию; случай $\gamma_0 \neq \gamma, k_0 \neq k$ — неупругому.

Столкновения быстрых электронов с атомами

Для применимости борновского приближения к электронам достаточно, чтобы скорость налетающего электрона была велика по сравнению со скоростями атомных электронов. При рассмотрении столкновений с электронами можно принять, что система координат с началом отсчета в центре атома совпадает с системой координат центра инерции системы, и положить $\mu = m_e$, где m_e — масса электрона. Энергия взаимодействия налетающего электрона с ядром и N -электронами атома имеет вид (в случае иона $N \neq Z$)

$$U(\mathbf{r}) = -\frac{Ze^2}{r} + \sum_{i=1}^N \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|}. \quad (5.2.6) \quad \text{Eq. Atom-elekt}$$

Подставив это выражение в формулу Борна (5.2.5), и, выполнив интегрирование по $d\mathbf{r}$ с помощью формулы

$$\int \frac{e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} d\mathbf{r} = \frac{4\pi}{k^2} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_i}, \quad (5.2.7) \quad \text{Eq. intE-ikr}$$

получим

$$\int \frac{e^{-i(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k})\mathbf{r}}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_i|} d\mathbf{r} = \frac{4\pi e^2}{q^2} \left[-Z\delta_{\gamma_0\gamma} + \int \psi_{\gamma_0}^* \psi_{\gamma} \sum_i e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}_i} d\tau \right] \quad (5.2.8) \quad \text{Eq. intE-ikrU}$$

и

$$d\sigma_{\gamma_0\mathbf{k}_0;\gamma\mathbf{k}}/d\Omega = 4 \frac{m_e e^2 k}{\hbar^2 k_0} \frac{1}{q^4} |F_{\gamma_0\gamma}(q) - Z\delta_{\gamma_0\gamma}|. \quad (5.2.9) \quad \text{Eq. sigmaEl-Atom}$$

Здесь

$$F_{\gamma_0\gamma}(q) = \int \psi_{\gamma_0}^* \psi_{\gamma} \sum_i e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}_i} d\tau, \quad (5.2.10) \quad \text{Eq. AtomFormFact}$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}, \quad q^2 = k_0^2 - k^2 - 2k_0k \cos \theta_{\mathbf{k}_0\mathbf{k}}, \quad d\Omega = \frac{2\pi}{k_0k} q dq. \quad (5.2.11) \quad \text{Eq. ParamQkOk}$$

Формулу (5.2.9) можно переписать в следующем виде:

$$d\sigma_{\gamma_0\gamma} = 8\pi \left(\frac{m_e e^2}{\hbar^2 k_0} \right)^2 |F_{\gamma_0\gamma}(q) - Z\delta_{\gamma_0\gamma}|^2 \frac{dq}{q^3} \quad (5.2.12) \quad \text{Eq. sigBornFormFact}$$

Величина $F_{\gamma_0\gamma}(q)$ называется атомным фактором рассеяния или *форм-фактором*.

Вычисление интеграла $F_{\gamma_0\gamma}(q)$ представляет собой весьма сложную задачу. В случае упругого рассеяния эта задача существенно облегчается в двух предельных случаях: $q \ll 1/a$, где параметр a – величина порядка атомных размеров (рассеяние на малые углы), и $q \gg 1/a$ (рассеяние на большие углы, сводящееся к Резерфордскому рассеянию на атомном ядре).

Формулы для расчета сечений возбуждения в Борновском приближении упрощаются в случае разрешенных переходов $n_0 l_0 - n l$, описываемых в приближении генеалогической схемы: $\gamma_0 n_0 l_0 - \gamma_0 n l$, то есть для переходов, в которых не меняется состояние атомного остова γ_0 . Соответствующие выражения приведены в [103].

Сравнение с экспериментом

Несмотря на простоту приближения Борна, получаемые с его помощью сечения столкновения возбуждения атомов электронным ударом удовлетворительно согласуются с экспериментальными сечениями, что иллюстрируется на Рис. 5.1.

Сечения возбуждения атомов электронным ударом, рассчитанные в приближении Борна, тем точнее, чем больше энергия возбуждающего атомный переход электрона. При меньших энергиях, близких к порогу возбуждения, ошибки в рассчитанных сечениях возрастают. Характерной особенностью приближения Борна, как видно из рисунка 5.1, является завышение теоретического сечения в области порога. Для уточнения расчета сечений в припороговой области вводятся различные уточнения приближения Борна (см. [131]).

В монографии [120] предложено при возбуждении одноэлектронных систем рассчитывать сечения с помощью поправочного множителя $[f(\mathbf{q})]^2$, на который умножается подынтегральное выражение в формуле Борна. Как видно из Рис. 5.1, использование указанного поправочного множителя позволяет существенно уточнить сечения.

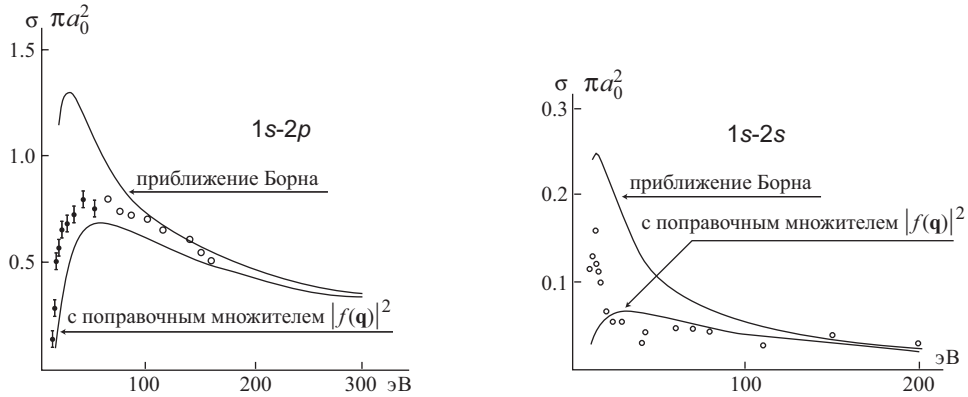


Рис. 5.1. Сечения возбуждения переходов $1s - 2p$ (слева) и $1s - 2s$ (справа) в атоме водорода по [120], точки — экспериментальные сечения

Fig. H1s-2pBorn

При выводе формул борновского приближения (Eq. FormBorn, б.2.5) не были учтены обменные эффекты. Вариант борновского приближения, в котором учтено обменное взаимодействие, носит названия приближения Борна-Оппенгеймера. Вместе с тем расчеты в данном приближении показали, что учет обмена в рамках борновского приближения приводит не к улучшению, а к существенному ухудшению результатов. В максимуме сечения рассеяния метода Борна-Оппенгеймера, на порядок и более превосходят экспериментальные [120] (см. также § б.2.2).

Метод Кулона-Борна

В методе Борна волновая функция частицы, сталкивающейся с возбуждаемой мишенью (атомом или ионом), заменяется плоской волной $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$. При возбуждении атомов такое приближение оправдано, однако при рассмотрении столкновений с положительными ионами дает даже качественно неверные результаты. Метод Борна дает нулевое значение сечения в пороге возбуждения, тогда как сечения возбуждения электронами положительных ионов в пороге конечны.

При анализе столкновений электрона и других частиц с ионами применяется модификация метода Борна, в которой вместо плоских волн $e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ в качестве волновых функций электрона, рассеиваемого ионом Z с числом электроном $N < Z$, рассматриваются решения уравнения Шредингера в поле атомного остатка $-Z_{\text{ост}}e^2/r$, где $Z_{\text{ост}} = Z - N + 1$ — заряд атомного остатка. Такая модификация называется методом Кулона-Борна и позволяет получить значительно более точные сечения возбуждения. Результаты многочисленных расчетов в этом приближении представлены в монографиях [131, 103].

ss.DWappr

5.2.2 Приближение искажённых волн

Более точным, чем методы Борна и Кулон-Борна, является метод искажённых волн (DW — Distorted Wave), учитывающий искажение волновых функций атомного остова взаимодействием с оптическим электроном и позволяющий получить необходимую точность для большинства из важных для анализа астрофизической плазмы характеристик столкновений атомов с электронами и другими частицами.

В методе искажённых волн учитывается также изменение волновых функций падающего и рассеянного электронов (падающей и искаженной волн) полем атома в начальном и конечном состояниях процесса рассеяния.

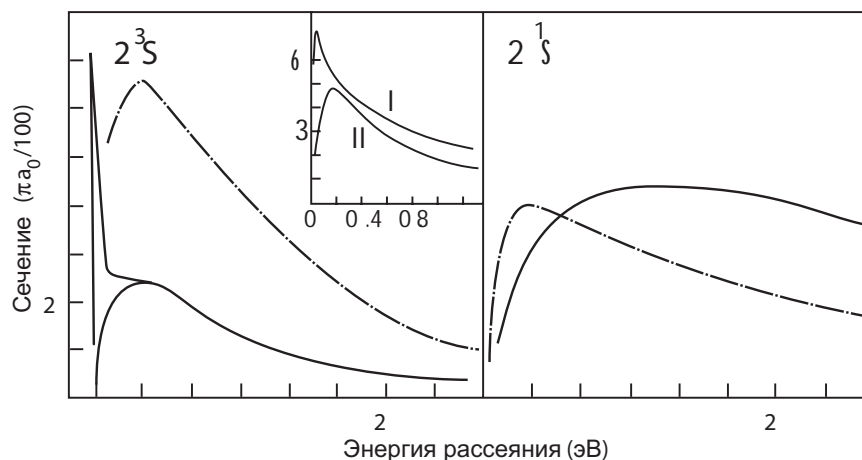


Рис. 5.2. Сечения возбуждения переходов $1s^2 1S \rightarrow 1s2s 3S$ (слева) и $1s^2 1S \rightarrow 1s2s 1S$ (справа) He электронным ударом по [144]. I, II — разные варианты приближения искажённых волн, III — приближение Борна-Оппенгеймера ($\times 1/20$). Во вставке на левом рисунке кривая II обозначает экспериментальное сечение

Fig. He3S1S

На Рис. 5.2 сравниваются сечения возбуждения уровней $1s2s 3S$ и $1s2s 1S$ He с основного состояния $1s^2 1S$, рассчитанные разными вариантами метода искажённых волн и метода Борна-Оппенгеймера, с экспериментальными сечениями возбуждения [144]. Видно, что метод искажённых волн хорошо описывает сечение как вблизи порога возбуждения, так и в области больших энергий. Как отмечалось выше, приближение Борна-Оппенгеймера дает сильно завышенные сечения. Однако существует модификация метода Борна-Оппенгеймера, предложенная Очкуром [10], позволяющая получить сечения возбуждения для интеркомбинационных переходов с изменением спина $\Delta S = 1$ с той же точностью, что и метод Борна для разрешенных переходов без изменения спина.

5.3 Методы сильной связи и R -матрицы. Резонансы в сечениях возбуждения

s.StrCouplMeth

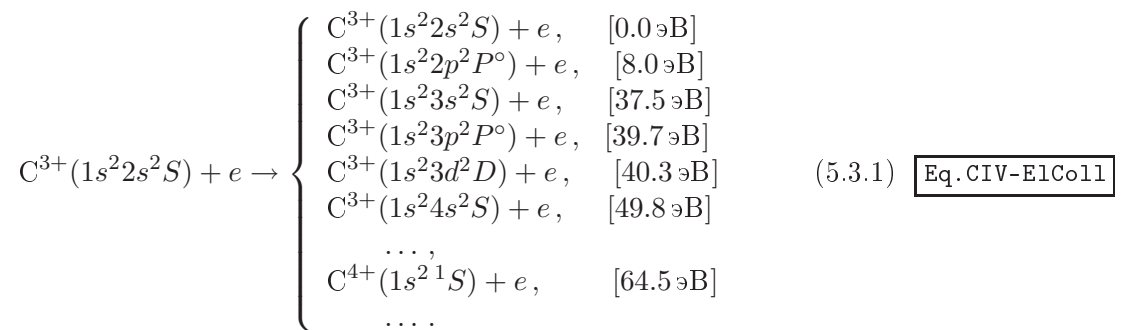
Теоретические и экспериментальные исследования процесса столкновения атомов и ионов с электронами показали, что зависимость сечений рассеяния и возбуждения и ионизации атомов и ионов часто немонотонна, в сечениях присутствуют многочисленные резонансы и т. д. Первым экспериментально обнаруженным резонансом был 2S резонанс в упругом рассеянии электрона атомом гелия, лежащий на 0.5 эВ ниже порога возбуждения состояния $1s2s\ ^3S$ He [Lendjel-1987]. В дальнейшем были найдены и другие резонансы как в сечениях рассеяния, так и в сечениях возбуждения и ионизации атомов и ионов электронами.

Наиболее адекватным методом расчета сечений возбуждения и ионизации, позволяющим определить положение и форму резонансов в сечениях, является метод *сильной связи* (сильной связи каналов рассеяния) [Massey1958, Sobelman1963, Lendjel-1987] [144, 120, 143].

Прежде чем перейти к описанию метода сильной связи, введем понятие *каналов рассеяния*. Результат столкновения двух атомных систем (например, столкновения атома или иона A с электроном e) зависит от энергии сталкивающихся частиц. Если при этом внутреннее состояние частиц не меняется, то происходит упругое рассеяние. Если же происходит изменение внутреннего состояния сталкивающихся частиц (образуются состояния X^* или X^+ и т. п., где X^* — возбужденное состояния атома X , X^+ — ион атома X), то происходит процесс возбуждения, ионизации и т. п.

О каждом из результатов процесса столкновения говорят как об отдельном *канале реакции*, т. е. для столкновения атома с электроном возможны: канал упругого рассеяния, каналы возбуждения, каналы ионизации и т. п. Разделяют *открытые* и *закрытые* каналы рассеяния. В том случае, если данный канал рассеяния энергетически разрешен, то его называют *открытым*, в противном случае говорят о *закрытом* канале.

Для иллюстрации рассмотрим столкновения иона C^{3+} в основном состоянии $1s^22s^2S$ с электроном. При этом возможны следующие реакции:



В скобках указан порог реакции для каждого из каналов. При энергии электрона $E < 8.0$ эВ открыт только канал упругого рассеяния, все остальные каналы являются закрытыми. Для энергий $8.0 \leq E < 37.5$ эВ открывается канал возбуждения в состояние $2p^2S$, а при $37.5 \leq E < 49.8$ эВ становятся открытыми каналы возбуждения в состояния $3l^2L$, тогда как каналы возбуждения в состояния nl^2L с $n \geq 4$ – закрыты. При достижении энергии электрона $E \geq 64.5$ эВ открывается канал ионизации S^{4+} , а также каналы возбуждения в автоионизационные состояния $1snln'l'$, лежащие выше порога ионизации. Таким образом, число открытых каналов обычно конечно, тогда как число закрытых каналов – бесконечно.

5.3.1 Метод сильной связи

В методе сильной связи волновая функция системы атом (ион) X плюс электрон представляется в виде комбинации волновой функции ионизуемого атома и волновых функций свободного электрона для различных каналов реакции:

$$\begin{aligned} & \Psi(\Gamma X, x_{N+1}) = \\ & = \frac{1}{\sqrt{(N+1)}} \sum_{p=1}^{N+1} (-1)^{N+1-p} \times \sum_{\Gamma'}^N \Psi(\Gamma' X \mathbf{r}_p \sigma_p) \frac{F_{\Gamma\Gamma'}(\mathbf{r}_p)}{r_p}, \end{aligned} \quad (5.3.2) \quad \boxed{\text{Eq.PsiStronCoupl}}$$

где N – число учитываемых каналов реакции; Γ – совокупность квантовых чисел, характеризующих начальное состояние системы. При LS -связи $\Gamma = \gamma l L S M_L M_S$. Здесь $\gamma = \alpha L_T S_T$ – набор квантовых чисел атома, L, S, M_L, M_S – полные моменты системы и их проекции на ось z . Функция Ψ включает в себя волновую функцию атома и спин-орбитальную часть волновой функции внешнего электрона, $\mathbf{X} = (x_1, x_1, \dots, x_N)$, $x_i = (\mathbf{r}_i, \sigma_i)$ – совокупность пространственных и спиновых координат электрона с номером i , Γ' – набор квантовых чисел учитываемых каналов реакции; $F_{\Gamma\Gamma'}$ – радиальные волновые функции свободного электрона для канала реакции Γ' .

В разложение (5.3.2) включены все открытые каналы и конечное число закрытых каналов из полного их бесконечного числа. На основании вариационного принципа [120] при использовании для описания процесса рассеяния волновых функций (5.3.2) получается система интегродифференциальных уравнений сильной связи для функций $F_{\Gamma\Gamma'}$ – аналог уравнений Хартри-Фока-Юциса для дискретного спектра. В качестве волновых функций атома используются волновые функции с учетом наложения конфигураций (см. § 6 гл. 1 в [118]). Число учитываемых каналов определяет число уравнений сильной связи.

Вследствие крайней трудоёмкости решений этих уравнений обычно берется не слишком большое (от двух до пяти) число каналов. Поэтому

достаточно точные результаты получаются при низких энергиях, когда число открытых каналов невелико. Точность расчета ограничена также невозможностью учесть бесконечное число закрытых каналов. Не включенные в разложение (5.3.2) закрытые каналы учитываются эффективно с использованием так называемых псевдосостояний [99].

В настоящее время разработаны высокоточные методы получения характеристик процесса рассеяния электронов на атомах и ионах, основанные на методе сильной связи. Это прежде всего методы R -матрицы [23] и сходящейся сильной связи (ССС) [43], использующие большие базисы волновых функций псевдосостояний.

5.4 Результаты расчета сечений возбуждения. Силы столкновений

К настоящему времени выполнено большое число расчетов сечений и скоростей возбуждения атомов и ионов электронным ударом. Многие из этих расчетов цитируются в каталоге [137]. Сечения возбуждения $\sigma_{ij}(E)$ перехода $i \rightarrow j$ сложным зависят от энергии и немонотонны. Однако усредненные по энергии сечения возбуждения обычно $\sim 1/E$, где E — энергия возбуждающего переход электрона, поэтому произведение $\sigma_{ij}(E)E$ — маломеняющаяся функция энергии.

По этой причине обычно рассчитывается не только само сечение возбуждения, а связанное с ним безразмерное эффективное сечение (обычно порядка единицы), часто называемое *силой столкновения*:

$$\Omega_{ij} = \frac{g_i k_i^2 \sigma_{ij}(E)}{\pi} = \frac{g_i \sigma_{ij}(E)}{\pi a_0^2} (E/Ry), \quad (5.4.1) \quad \text{Eq.CollStr}$$

где g_i — статистический вес нижнего состояния i , k_i — волновое число электрона, a_0 — боровский радиус.

Скорость возбуждения перехода $i \rightarrow j$ (энергия $E_i < E_j$) электронным ударом может быть выражена через усредненную по максвелловскому распределению скоростей электронов силу столкновений $\langle \Omega_{ij} \rangle$, обычно называемую *эффективной силой столкновения*. Для нее часто используется обозначение Υ_{ij} :

$$\Upsilon_{ij} = \langle \Omega_{ij} \rangle = \int_0^\infty \Omega_{ij} \exp(-\beta_{ij}u) d(\beta_{ij}u). \quad (5.4.2) \quad \text{Eq.Upsilon}$$

Здесь $\beta_{ij} = E_{ij}/k_B T_e$, а энергия рассеянного электрона E выражена в так называемых *пороговых* единицах $u = E/E_{ij} - 1$, где $E_{ij} = E_j - E_i$ — энергия возбуждения перехода. Тогда

$$q_{ij} = \frac{8.6287 \cdot 10^{-6}}{g_i T_e^{1/2}} \Upsilon_{ij} \exp(-\beta_{ij}). \quad (5.4.3) \quad \text{Eq.ExcRate-Upsilon}$$

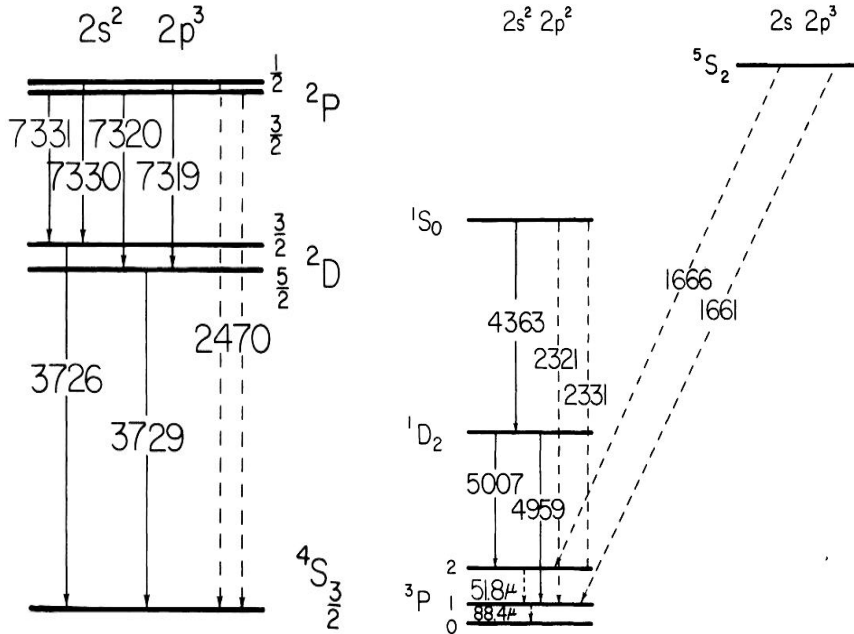


Рис. 5.3. Схемы уровней основных конфигураций ионов OII и OIII по [127].

Fig. OII-OIIIlev

Скорость деактивации электронным ударом (переход $j \rightarrow i$) также выражается с помощью величины Υ_{ij}

$$q_{ji} = \frac{8.6287 \cdot 10^{-6}}{g_j T_e^{1/2}} \Upsilon_{ij}. \quad (5.4.4)$$

Eq. DeActRate-Upsilon

Скорости столкновительного возбуждения и деактивации связаны следующим соотношением:

Eq. Exc-DeAct

$$q_{ij} = \frac{g_j}{g_i} \exp(-\beta_{ij}) q_{ji}, \quad (5.4.5)$$

В астрофизических приложениях атомной спектроскопии важнейшими параметрами являются сечения и скорости запрещенных переходов между метастабильными уровнями основных конфигураций ионов C, N, O, Ne, Ar, S, Fe и других элементов. На Рис. 5.3 приведены схемы уровней основных конфигураций ионов O⁺ и O²⁺, на которых показаны важнейшие линии переходов между этими уровнями, наблюдаемые в спектрах газовых туманностей, областей HII, оболочек новых звезд и других объектов.

Силы столкновений для переходов между уровнями иона O²⁺ рассчитанные методом сильной связи, представлены на Рис. 5.4. Взаимодействие волновых функций автоионизационных состояний и состояний

Fig. OII-OIIIlev

Fig. OIII-CollStr

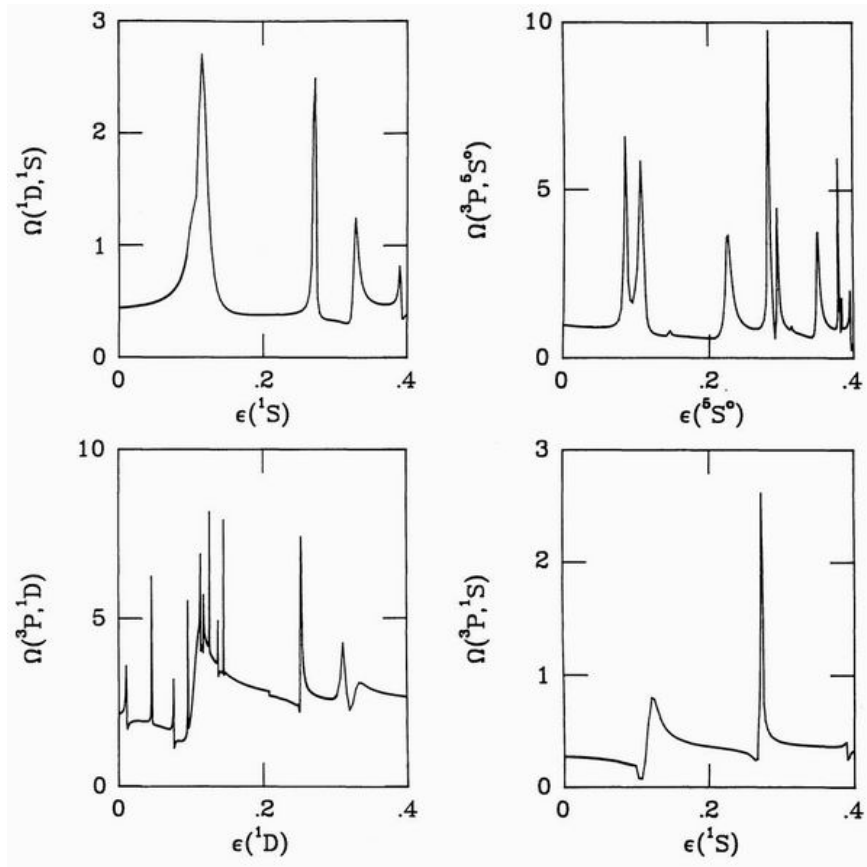


Рис. 5.4. Силы столкновений переходов между уровнями основной конфигурации иона OIII по [127].

Fig. 0III-CollStr

непрерывного спектра, входящих в разложение (5.3.2), приводит к появлению большого числа автоионизационных резонансов в сечениях, хорошо заметных на Рис. 5.4.

Современные методы теории столкновений, основанные на методе сильной связи позволяют достичь беспрецедентно высокой точности расчета сечений возбуждения атомов и ионов, что иллюстрируется на Рис. 5.5. Тем самым можно сделать вывод, что точность расчета характеристик процесса рассеяния электронов атомами и ионами достигла точности расчета сил осцилляторов и вероятностей соответствующих атомных переходов.

Fig. 0IIIExp-Th

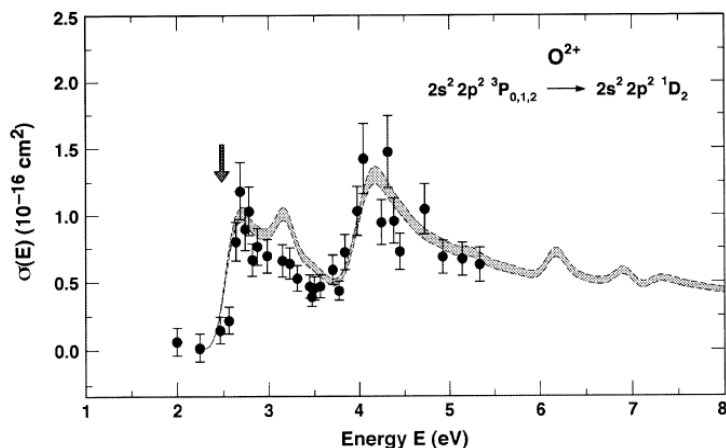


Рис. 5.5. Сравнение экспериментальных сечений перехода $2p^2\ ^3P_{0,1,2} - 2p^2\ ^1D_2$ иона O^{2+} [66] (жирные точки) с результатами расчетов методом сильной связи [17] (сплошная линия). Энергетическое разрешение теоретических сечений уменьшено до значения $\Delta E = 0.1$ эВ, равного разбросу энергий электронов в возбуждающем переход пучке электронов. Заштрихованная область показывает разброс теоретических значений сечений для декларируемой в [17] ошибке в $\pm 5\%$ сечениях. Показаны ошибки экспериментальных сечений на уровне 1.7σ , где σ — стандартное отклонение для измерений при какой-либо конкретной энергии электронов. Вертикальная стрелка отмечает порог реакции.

Fig. 0.IIIExp-Th

5.5 Возбуждение атомов при столкновениях с протонами и другими частицами

Процесс возбуждения атома или иона столкновениями со значительно более тяжелыми, чем электрон, частицами существенно отличается от процесса возбуждения электронным ударом. Частицы больших масс движутся значительно медленнее, чем электроны, и находятся вблизи частицы, с которой они сталкиваются, значительно большее время. Если энергия возбуждаемого при столкновении перехода ΔE в атоме (ионе) мишени сравнима с кинетической энергией E сталкивающейся частицы, тогда сечение возбуждения мало из-за быстрых осцилляций волновой функции возбуждаемого атома с фазой $(\Delta E/h)t$. В том же случае, если $\Delta E \ll E$, эта фаза мала и полное сечение возбуждения не мало.

Столкновения с протонами, в соответствии с общим правилом, наиболее эффективны при переходах с $\Delta E \ll E$. Для таких переходов скорости возбуждения нейтральных атомов столкновениями с протонами в $(M_p/m_e)^{1/2}$ раз больше скоростей возбуждения этих переходов электронным ударом [99, 84] и при столкновениях $nl \rightarrow nl'$ переходов между уровнями с одинаковым главным числом уровня n приводящие к перераспределению орбитального момента l электронов атома для вы-

соковозбуждённых (ридберговских) состояний с $n \gg 1$:

$$p + \text{H}(nl) \rightarrow p + \text{H}(n'l). \quad (5.5.1) \quad \boxed{\text{Eq. p-H}}$$

Сечения возбуждения таких процессов были вычислены в работе [PengellySeaton1964](#) [75] в рамках полуклассической теории возмущений. Вследствие большой величины сечения процесса (5.5.1) столкновения с протонами приводят к равновесному заселению подуровней nl атома, при котором населенности уровней пропорциональны их статистическим весам $(2l + 1)$. Для ридберговских уровней при значениях $n, n' \gg 1$ переходы

$$p + \text{H}(n) \rightarrow p + \text{H}(n'), \quad (5.5.2) \quad \boxed{\text{Eq. p:n-n'coll}}$$

возбуждаемые столкновениями с протонами, также эффективны [BurgessSummer1976](#) [30].

Кроме столкновений протонов с атомами должны быть приняты во внимание столкновения протонов с положительными ионами. Кулоновское взаимодействие приводит к уменьшению сечений столкновения с протонами из-за взаимного отталкивания протонов и положительно заряженных ионов и, наоборот, к увеличению сечений электрон-ионных столкновений. Однако роль кулоновского отталкивания быстро падает с ростом главного квантового числа n и для ридберговских состояний с $n \gg 1$ при типичных для астрофизической плазмы значениях $T_e \approx 10^4 \text{K}$ столкновения с протонами и для ионов также могут быть более эффективны, чем столкновения с электронами.

Таблица 5.1. Скорости возбуждения ($\text{см}^3/\text{с}$) переходов между уровнями тонкой структуры $J = 0, 1, 2$ атома углерода протонным ударом

Table. C1excPrImp

T, K	Переход		
	$0 \rightarrow 1$	$0 \rightarrow 2$	$1 \rightarrow 2$
100	$1.8 \cdot 10^{-9}$	$8.1 \cdot 10^{-10}$	$2.6 \cdot 10^{-9}$
200	$2.7 \cdot 10^{-9}$	$2.0 \cdot 10^{-9}$	$5.4 \cdot 10^{-9}$
300	$3.3 \cdot 10^{-9}$	$3.5 \cdot 10^{-9}$	$8.0 \cdot 10^{-9}$
500	$4.1 \cdot 10^{-9}$	$6.4 \cdot 10^{-9}$	$1.2 \cdot 10^{-8}$
700	$4.6 \cdot 10^{-9}$	$9.1 \cdot 10^{-9}$	$1.5 \cdot 10^{-8}$
1000	$5.2 \cdot 10^{-9}$	$1.2 \cdot 10^{-8}$	$1.7 \cdot 10^{-8}$
2000	$6.1 \cdot 10^{-9}$	$1.9 \cdot 10^{-8}$	$2.1 \cdot 10^{-8}$
3000	$6.6 \cdot 10^{-9}$	$2.3 \cdot 10^{-8}$	$2.3 \cdot 10^{-8}$
5000	$7.2 \cdot 10^{-9}$	$2.6 \cdot 10^{-8}$	$2.4 \cdot 10^{-8}$
7000	$7.6 \cdot 10^{-9}$	$2.7 \cdot 10^{-8}$	$2.5 \cdot 10^{-8}$
10000	$7.9 \cdot 10^{-9}$	$2.8 \cdot 10^{-8}$	$2.5 \cdot 10^{-8}$
20000	$8.5 \cdot 10^{-9}$	$3.0 \cdot 10^{-8}$	$2.6 \cdot 10^{-8}$

В условиях, характерных для разреженной плазмы межзвездной среды и газовых туманностей, столкновения с протонами эффективны при возбуждении уровней тонкой структуры C, C⁺, N⁺, O и многих других

атомов и ионов. Ссылки на расчеты скоростей возбуждения с протонами представлены в каталоге [Golovatyj-1997].

В табл. 5.1 представлены скорости возбуждения уровней тонкой структуры атома углерода столкновениями с протонами [RoueffLeBourlot1990]. При низких температурах ($T \leq 10^3 K$) скорости возбуждения этих уровней протонными столкновениями более чем на порядок превышают скорости возбуждения этих уровней электронным ударом (см. Рис. 5.6).

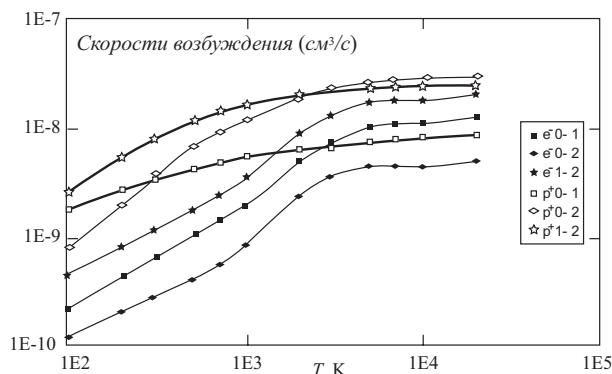


Рис. 5.6. Скорости возбуждения переходов тонкой структуры атома углерода с $J = 0, 1, 2$ с протонами по [RoueffLeBourlot1990] (незаполненные квадратики, ромбы и звездочки для переходов $0 \rightarrow 1$, $0 \rightarrow 2$ и $1 \rightarrow 2$ соответственно) и электронным ударом по [Johnson-1987] (заполненные фигуры).

Fig.CIexcPrImp.eps

Столкновения с атомами водорода могут быть эффективны при возбуждении уровней тонкой структуры атомов и ионов в плазме низкой степени ионизации. Столкновения же атомов и ионов с **более тяжелыми**, чем атом водорода, частицами менее эффективны вследствие их меньшего содержания в астрофизической плазме. Ссылки на расчеты и измерения сечений и скоростей подобных процессов приведены в каталоге [Golovatyj-1997].

В плазме могут происходить и **другие процессы столкновения**, кроме рассмотренных выше. В плотной плазме могут быть важны столкновения атомов и ионов с атомами или ионами в возбужденных состояниях, при которых происходит перенос возбуждения от одного атома к другому или его ионизация. Полное описание этих и некоторых других процессов столкновения можно найти в монографии [Smirnov1968]. В астрофизической плазме низкой плотности подобные процессы несущественны.

5.6 Ионизация атомов и ионов

В процессе ионизации энергия сталкивающейся с атомом частицы (электрон, протон, атом водорода и т.п.) передается одному из атомных электронов. При этом может быть оторван как оптический электрон, так

и электроны внутренних оболочек.

Наиболее важным в условиях астрофизической плазмы является ионизация электронным ударом. Для расчета сечений ионизации используются как методы Борна и Кулона-Борна, так и более точные методы искажённых волн, сильной связи и R -матрицы.

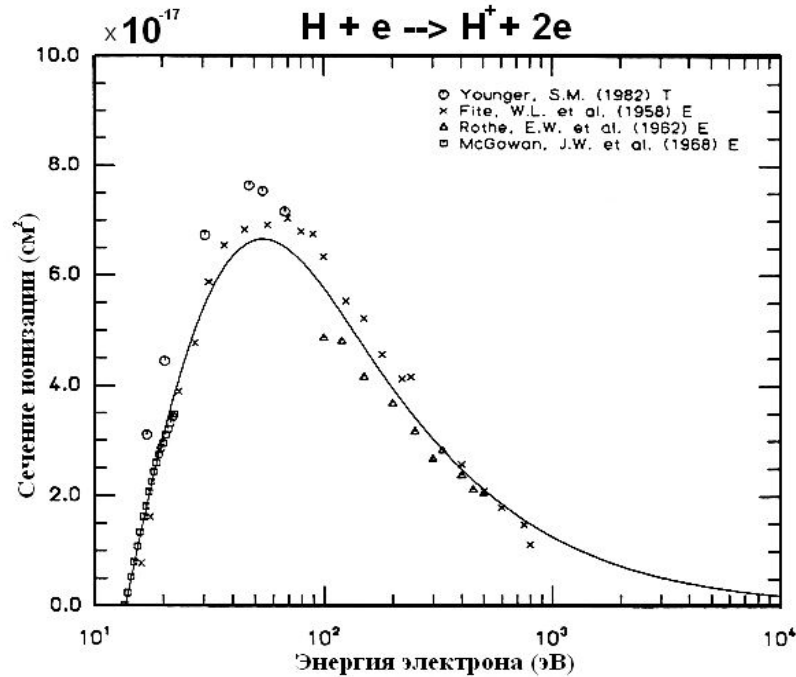


Рис. 5.7. Сечение ионизации атома Н электронным ударом по [TawaraKato1987, 194]. E – экспериментальные значения сечения, T – результаты расчетов, сплошная линия – аппроксимация Лотца [Lotz1967, 62].

Fig.HI-Ioniz

Результаты измерений и расчетов сечений ионизации $\sigma_{\text{ion}}(E)$ показали, что зависимость сечений от энергии ионизирующего электрона может быть аппроксимирована с помощью достаточно простых аналитических формул. Одной из наиболее употребительных в астрофизических исследованиях является формула Лотца:

$$\sigma_{\text{ion}}(E) = \sum_i a_i q_i \frac{\ln\left(\frac{E}{I_i}\right)}{EI_i} \left[1 - b_i e^{-c_i(E/I_i-1)}\right], \quad (5.6.1) \quad \text{Eq.LotzForm}$$

где E – энергия ионизирующего электрона, I_i – энергия ионизации из оболочки i , q_i – число электронов в оболочке, в которой находится отрываемый электрон, a_i , b_i и c_i – аппроксимационные коэффициенты, данные в статье [Lotz1967, 62].

Формула Лотца достаточно хорошо описывает сечения ионизации ионов и атомов с небольшим числом электронов, что видно из Рис. 5.7 для Н и Рис. 5.8 для C^+ . Fig.HI-Ioniz

Fig.CII-ioniz

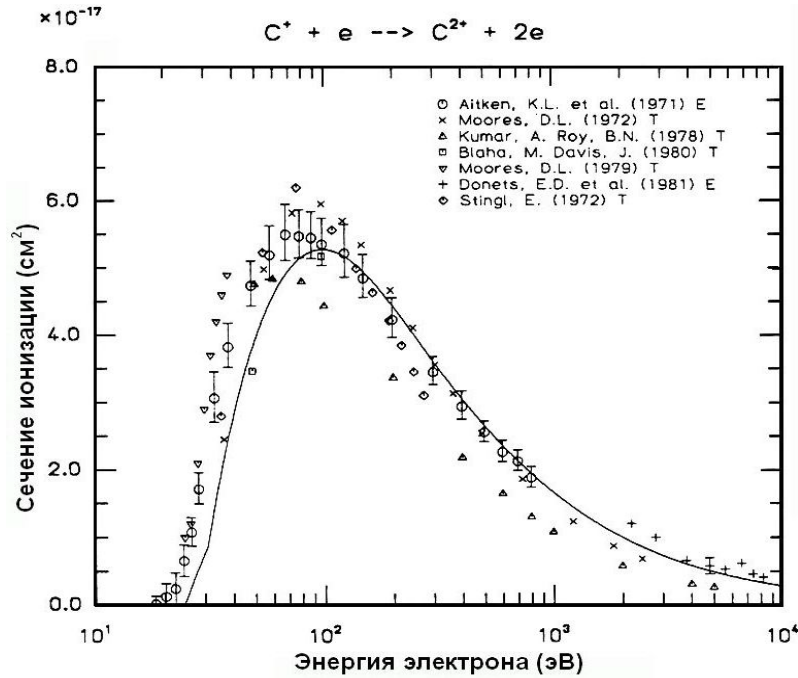


Рис. 5.8. То же, что на Рис. 5.7, но для иона C⁺.

Fig.CII-ioniz

Для ионов с большим числом электронов формула (5.6.1) может давать значительные расхождения с экспериментальными сечениями ионизации, как показано на Рис. 5.9.

Для расчета скорости ионизации электронным ударом предложены и другие аналитические формулы. Одна из наиболее часто используемых формул такого типа предложена в работе [20]:

$$C_{Z,Z_{ост}}(T) = \frac{6.69 \cdot 10^{-7} e^{-\beta Z_{ост}}}{(k_B T)^{3/2} \beta_{Z,Z_{ост}}} F(\beta_{Z,Z_{ост}}), \quad \text{см}^3 \text{с}^{-1}, \quad (5.6.2) \quad \text{Eq.CZz}$$

где $\beta_{Z,Z_{ост}} = \frac{I_{Z,Z_{ост}}}{k_B T}$. Здесь $I_{Z,Z_{ост}}$ — потенциал ионизации атома (иона), T — кинетическая температура газа в рассматриваемой области. Индекс $(Z, Z_{ост})$ означает, что данная величина относится к иону с зарядом атомного остатка $Z_{ост}$ атома (иона) с зарядом ядра Z . Функция

$$F(x) = A(1 - \beta f_1(\beta)) + B(1 + \beta - \beta(2 + \beta)f_1(\beta)) + C f_1(\beta) + D \beta f_2(\beta). \quad (5.6.3) \quad \text{Eq.Fion}$$

Здесь A, B, C и D — аппроксимационные коэффициенты, определяемые по экспериментальным или теоретическим сечениям ионизации.

Функции

$$f_1(x) = e^x \int_1^{\infty} e^{-tx} \frac{dt}{t}, \quad f_2(x) = e^x \int_1^{\infty} e^{-tx} \ln(t) \frac{dt}{t}. \quad (5.6.4) \quad \text{Eq.f1f2(x)}$$

Формулы для приближенного вычисления функций $f_1(x)$ и $f_2(x)$ содержатся в работе [20]. В табл. C.2 приложения C.2 содержатся потенциалы ионизации $I_{Z,Z_{\text{ост}}}$ и коэффициенты A, B, C, D , используемые в формуле (5.6.3), для атомов и ионов элементов от водорода до железа.

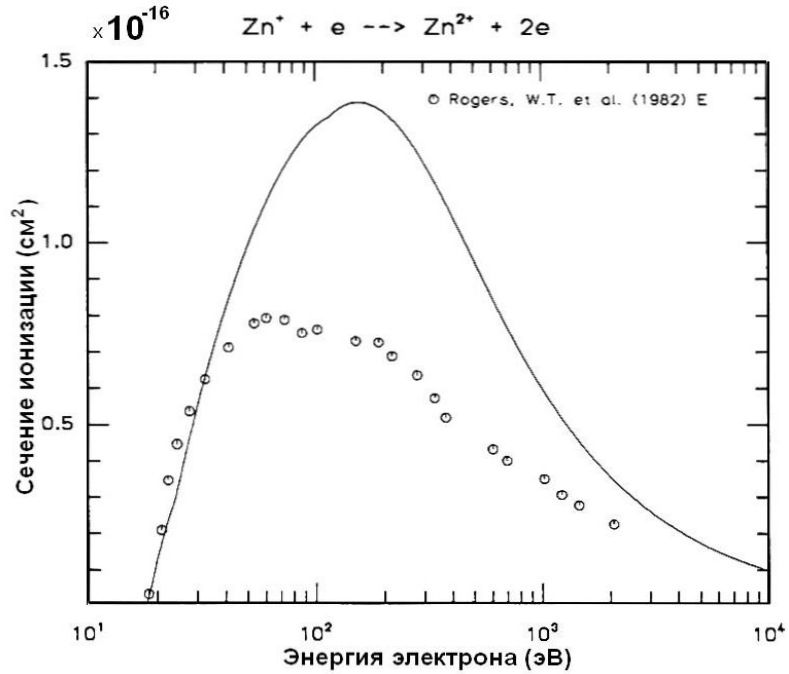


Рис. 5.9. То же, что на Рис. 5.7, но для иона Zn^+ .

Fig.ZnII-ioniz

Скорость ионизации $q_{1c}(T_e)$ для электронной оболочки nl^q может быть оценена с помощью следующей формулы:

$$q_{1c}(T_e) = A \frac{10^{-8} q [I_H/I]^{3/2} \sqrt{\beta}}{\beta + \xi} e^{-\beta}. \quad (5.6.5) \quad \text{Eq.q1cShevelko1983}$$

Здесь I — потенциал ионизации рассматриваемого атома или иона, I_H — потенциал ионизации атома водорода, $\beta = I/kT_e$. Параметры A и ξ , вычисленные в работе [89] (см. также [137]), приведены в таблице 5.2.

Для слабоионизованной плазмы с низкой степенью ионизации водорода в ионизацию атомов могут вносить существенный вклад ионизации при столкновениях атомов и ионов с нейтральными атомами водорода. Оценки скоростей этих процессов, сделанные по формулам, данным

Таблица 5.2. Параметры A и ξ в формуле [Eq.g1cShevelko1983](#) (5.6.5) для ионизации атомов и ионов электронным ударом

Tab.AxiCollIon

Тип оболочки				Тип оболочки			
Тип оболочки	Оболочка	A	ξ	Тип оболочки	Оболочка	A	ξ
Открытая	$1s^q$	5.08	0.477	Внутренняя (замкнутая)	$1s^2$	4.81	0.393
	$2s^q$	5.23	0.594		$2s^2$	5.13	0.562
	$2p^q$	6.23	0.697		$2p^6$	6.33	0.666
	$3s^q$	4.85	0.640		$3s^2$	4.98	0.652
	$3p^q$	5.33	0.738		$3p^6$	5.33	0.734
	$4s^q$	4.15	0.720				

в каталоге [Golovatyj-1997](#) [137], показывают, что в условиях астрофизической плазмы вкладом этих процессов в ионизацию атомов и ионов можно пренебречь.

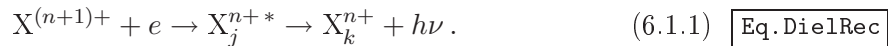
Глава 6

Диэлектронная рекомбинация и перезарядка

6.1 Диэлектронная рекомбинация

ss.DielRecomb

Диэлектронная рекомбинация – рекомбинация положительного иона и электрона через образование промежуточных автоионизационных состояний – процесс, давно известный в атомной физике. Но, только начиная с работы А.Берджеса [29] осознана значительная (иногда определяющая) роль диэлектронной рекомбинации в установлении ионизационного равновесия горячей ($T = 10^5 \div 10^7$ К) плазмы, в частности плазмы солнечной короны [141], в образовании сателлитов линий многозарядных ионов в спектрах солнечных вспышек, лазерной плазмы, плазмы токамаков и т.д. [117]. На *первом этапе* процесса диэлектронной рекомбинации



образуется автоионизационное состояние X_j^{n+*} (см. стр. [page.AIS](#) 63). Электрон захватывается ионом $X^{(n+1)+}$ в основном состоянии m_0 (см. рис. [Fig.SchemDielRec](#) 6.1). При этом электрон попадает на возбужденный уровень $k = nl$ и одновременно происходит переход $m_0 \rightarrow m$ иона $X^{(n+1)+}$: $X^{(n+1)+}(m_0) + e \rightarrow X^{n+}(m)$.

Образовавшееся состояние $j = mk$ иона X^{n+} является автоионизационным. Из этого состояния возможен либо обратный переход в состояние непрерывного спектра: $X^{n+}(mk) \rightarrow X^{(n+1)+}(m') + e$ (автоионизация, где m' – основное либо возбужденное состояние иона $X^{(n+1)+}$ с энергией $E_{m'} < E_m$), либо переход в связанное состояние иона X_k^{n+} (собственно диэлектронная рекомбинация). При этом переходе (*второй этап* процесса диэлектронной рекомбинации) происходит *радиативная стабилизация* автоионизационного состояния. Один из возбужденных электронов атома переходит на более низкую орбиту. При этом образуется связанное

состояние X_k^{n+} иона X^{n+} и излучается квант $h\nu$.

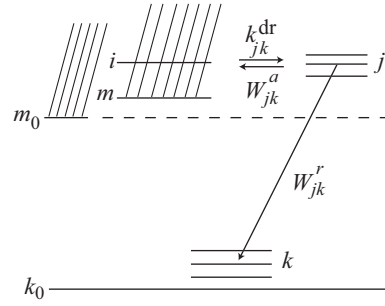


Рис. 6.1. Схема протекания процесса диэлектронной рекомбинации.

Fig.SchemDielRec

Таким образом, диэлектронная рекомбинация — не элементарный процесс, а совокупность захватов во все возможные автоионизационные состояния и последующих переходов в связанные состояния с испусканием электромагнитного излучения (радиативная стабилизация автоионизационных состояний). Захват электрона в автоионизационное состояние имеет резонансный характер. Скорость захвата в j -е состояние с энергией возбуждения ΔE_j :

$$\chi_{jm}^{\text{dr}} = f(\Delta E_j) \sqrt{2m_e \Delta E_j} \int_0^{\infty} \sigma_j^{\text{dr}}(E) dE. \quad (6.1.2)$$

Eq.VaptRateAIonStat

Здесь E — энергия электрона, $f(\Delta E_j)$ — значение функции распределения электронов по энергиям $E = m_e v^2 / 2$ (которую мы считаем максвелловской с электронной температурой T_e) при энергии ΔE_j . Точность расчета сечений захвата в автоионизационное состояние — $\sigma_j^{\text{dr}}(E)$ в настоящее время невысока. Различия экспериментальных и теоретических сечений для ионов других элементов могут достигать порядка величины [39]. Показанные на Рис. 6.2 рассчитанные и экспериментальные сечения для иона C^+ расходятся в полтора раза.

6.1.1 Скорость диэлектронной рекомбинации

Скорость рекомбинации через захват в определенное автоионизационное состояние j равна

$$\alpha_{mjk}^{\text{dr}} = \chi_{jm}^{\text{dr}} \frac{W_{jk}^{\text{r}}}{\sum_{m'} W_{jm'}^{\text{a}} + \sum_{k'} W_{jk'}^{\text{r}}} = \chi_{jm}^{\text{dr}} B_{jk}, \quad (6.1.3)$$

Eq.RateDr-j

Здесь $W_{jm'}^{\text{a}}$ скорость автоионизации с образованием состояния m' иона $X^{(n+1)+}$; $W_{jk'}^{\text{r}}$ — скорость радиационного перехода в связанное состояние k' . Множитель B_{jk} — вероятность того, что переход $j \rightarrow k$ приведет

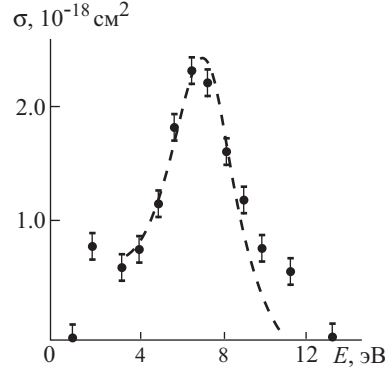


Рис. 6.2. Сечения автоионизационного захвата $C^{2+}(1s^2 2s) + e \rightarrow C^+(1s^2 2pnl)$ по [Dunn-1984](#) [39].
Пунктир — расчет, точки — экспериментальные сечения, умноженные на 1.5.

Fig.SigmaAutCaptCIII

к радиативной стабилизации. Для плазмы с максвелловским распределением скоростей электронов из принципа детального баланса следует:

$$\begin{aligned} \kappa_{jm}^{\text{dr}} &= \frac{h^3}{2(2\pi m_e k T_e)^{3/2}} \frac{g_j W_{jm}^a}{g_m} e^{-(\Delta E_j / k_B T_e)} = \\ &= \frac{4\pi^{3/2} a_0^3}{(k_B T_e / R_y)^{3/2}} \frac{g_j W_{jm}^a}{g_m} e^{-\Delta E_j / k_B T_e}. \end{aligned} \quad (6.1.4) \quad \text{Eq.DrCaptRate}$$

Полная скорость диэлектронной рекомбинации определяется суммированием по всем возбужденным состояниям m иона $X^{(n+1)+}$ и всем автоионизационным состояниям j для каждого уровня m :

$$\alpha^{\text{dr}}(T_e) = \sum_{jk} \alpha_{jk}^{\text{dr}}(T_e) = \sum_{jkm} x_m \alpha_{mjk}^{\text{dr}}(T_e), \quad (6.1.5) \quad \text{Eq.DrCaptRate-tot}$$

где $x_m = n_m / \sum_{m'} n_{m'}$ — отношение населенности уровня m к полной концентрации иона $X^{(n+1)+}$. Обычно можно ограничиться только нижним уровнем m_0 иона $X^{(n+1)+}$.

Скорость заселения уровня j при диэлектронной рекомбинации иона $X^{(n+1)+}$ (эффетивная скорость рекомбинации на уровень j) составляет

$$\alpha_i^{\text{dr}}(T_e) = \sum_{ki} Q_{ki} \alpha_{jk}^{\text{dr}}. \quad (6.1.6) \quad \text{Eq.alphaDR-level}$$

Здесь Q_{ki} — элемент каскадной матрицы радиационных переходов, определяемой рекуррентным соотношением

$$Q_{ik} = \sum_{m=k}^{i-1} P_{im} Q_{mk}, \quad Q_{kk} = 1, \quad (6.1.7) \quad \text{Eq.CascadeMatr}$$

где $P_{im} = \tau_i A_{im}$ — вероятность того, что атом, находящийся в возбужденном состоянии i , излучит квант в линии $i \rightarrow m$. Для астрофизических

объектов (газовых туманностей, оболочек звезд и т. д.) может быть существенна непрозрачность в линиях переходов на основной уровень иона X^{n+} , что приводит к изменению элементов матрицы Q .

Температурная зависимость скорости диэлектронной рекомбинации определяется множителями $\exp[-\Delta E_j/k_B T_e]$, связанными с максвелловским распределением скоростей электронов. При малых значениях T_e заселяются только низколежащие автоионизационные уровни. При высоких $T_e \geq 10^6$ К множители $\exp[-\Delta E_j/k_B T_e]$ близки к единице для всех уровней, и диэлектронная рекомбинация происходит, в основном, через уровни с большими значениями главного квантового числа уровней ($n \sim 100$) [141]. Beigman-1968

Для расчета скоростей диэлектронной рекомбинации прежде всего требуется знание скоростей радиационного (W^r) и автоионизационного (W^a) переходов с автоионизационного состояния (часто говорят о скорости его распада). Значения W^r рассчитываются стандартными методами теории атомных переходов. Обычно используются различные варианты многоконфигурационного приближения. При этом в отличие от дискретных состояний следует, вообще говоря, учесть наложение волновых функций непрерывного и дискретного спектров.

Автоионизация же представляет собой безызлучательный переход, обусловленный кулоновским взаимодействием между электронами. В первом порядке теории возмущений вероятность автоионизации, рассчитанная на единичный интервал времени,

$$W_{jm}^a = \frac{2\pi}{h} \int \Psi_j(\tau) \hat{V} \Psi_m^*(\tau) d\tau, \quad (6.1.8) \quad \text{Eq.Wauto_jm}$$

где $\Psi_j(\tau)$ и $\Psi_m(\tau)$ - волновая функция атома в автоионизационном состоянии j и волновая функция системы ион - свободный электрон соответственно; $\hat{V} = \sum_{i<j} e^2/r_{ij}$ - оператор кулоновского взаимодействия электронов. Вычисления W_{jm}^a по формуле (6.1.8) весьма трудоёмки, поэтому обычно используются соотношения, связывающие эту величину с пороговым значением сечения возбуждения $\sigma_{m_0 m}(l)$ при переходе $m_0 \rightarrow m$ вследствие электронного удара [67]. Nussbaumer-83

$$W_{jm}^a = \frac{g_{m_0}}{g_m} [\pi a_0^2]^{-1} \frac{\Delta E_j}{\pi \hbar n^3} Z_{\text{ост}}^2 \frac{\sigma_{m_0 m}(l)}{2l+1} = 1.316 \cdot 10^{16} Z_{\text{ост}}^2 \frac{\Omega_{m_0 m}^l}{g_m n^3} (\text{с}^{-1}). \quad (6.1.9) \quad \text{Eq.Wauto_jm-1}$$

Здесь $j = (m, nl)$. Сила столкновения $\Omega_{m_0 m}^l$ определена соотношением (5.4.1). Eq.CollStr

Другие приближенные выражения для W^a даны в работах [141, 117]. Типичные значения: $W^a \approx 10^{14} \text{с}^{-1}$. К настоящему времени выполнено большое число расчётов скоростей диэлектронной рекомбинации ионов Beigman-1968, Presn-1986

изоэлектронных последовательностей He, Li, Be, C, N, O, Ne Na, Ca и т. д. Большое число ссылок на опубликованные расчёты содержится в работах [117, 20]. Presn-1986, AR85

В области температур $10^4 \div 10^6$ К скорость диэлектронной рекомбинации экспоненциально возрастает пропорционально увеличению множителей $\exp[-\Delta E_j/(k_B T_e)]$. При больших значениях T_e и достижении условия $\exp[-\Delta E_j/(k_B T_e)] \approx 1$ для всех автоионизационных уровней она медленно убывает пропорционально $T_e^{-3/2}$ согласно Eq. DrCaptRate (6.1.4).

Процесс радиативной стабилизации автоионизационных состояний сопровождается испусканием квантов в линиях переходов $mk \rightarrow m_0k$. Эти линии обычно называют диэлектронными спутниками (спутниками) линии $m \rightarrow m_0$. Спутники (обычно резонансной линии) имеют длины волн, близкие к длинам волн соответствующей линии иона X^{n+} . Для иллюстрации на Рис. 6.3 Fig. SatellFeXXIV приведен спектр спутнитных линий резонансной $1s^2\ ^1S - 1s2p\ ^1P^o$ и интеркомбинационной $1s^2\ ^1S - 1s2p\ ^3P^o$ линий гелиеподобного иона железа, принадлежащих переходам $1s^2nl - 1s2pnl$. Интенсивность спутников определяется как скоростью диэлектронной рекомбинации, так и их возбуждением электронным ударом. Отношение интенсивностей линии $m \rightarrow m_0$ иона и суммарной интенсивности ее спутников сильно зависит от значения T_e и может служить для определения электронной температуры горячей плазмы, например, плазмы солнечных вспышек.

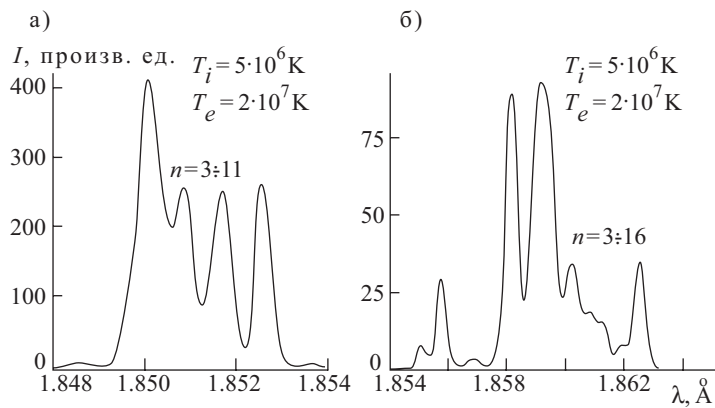


Рис. 6.3. Спектр спутников резонансной ($1s^2\ ^1S - 1s2p\ ^1P^o$) (а) и интеркомбинационной ($1s^2\ ^1S - 1s2p\ ^3P^o$) (б) линий гелиеподобного иона Fe^{23+} при ионной температуре $T_i = 5 \cdot 10^6$ К и электронной температуре $T_e = 2 \cdot 10^7$ К.

Fig.SatellFeXXIV

Отметим, что кроме интенсивных спутников резонансных линий, соответствующих стабилизирующим переходам $mnl \rightarrow m_0nl$ в спектрах ионов C, N, O и других элементов, присутствуют и слабые спутники рекомбинационных линий $m \rightarrow m'$, соответствующие переходам $mnl \rightarrow m'nl$. Многочисленные спутники такого типа наблюдаются в спектрах

планетарных туманностей.

6.1.2 Формула Берджеса и ее модификации

Прямой расчет скорости диэлектронной рекомбинации по формуле (6.1.5) требует трудоёмких квантовомеханических вычислений. Из-за этого широкое распространение получили различные полужемпирические формулы. Наиболее известна из них формула Берджеса [29]:

$$\alpha^B(T_e) = 3.3 \cdot 10^{-3} T_e^{-3/2} B(z) \sum_m f_{m_0 m} A(x) e^{-q^* E_{m m_0} / [a(z) T_e]}, \quad (6.1.10) \quad \text{Eq. BurgFormDR}$$

где $f_{m m_0}$ - сила осциллятора перехода $m_0 - m$ иона $X^{(z+1)+}$, где $m = \gamma n l$, $m_0 = \gamma n_0 l_0$, γ - набор квантовых чисел, описывающих состояние атомного остатка, $z + 1 = Z_{\text{ост}}$ - заряд атомного остатка, а

$$\begin{aligned} A(x) &= x^{1/2} (1 + 0.105x + 0.015x^2)^{-1/2}, \\ a(z) &= 1 + 0.015z^3 / (z + 1)^2, \\ B(z) &= z^{1/2} (z + 1)^{5/2} (z + 13.4)^{-1/2}, \\ E_{m m_0} &= E_m - E_{m_0} = (z + 1)^2 \text{Ry} \varepsilon_{m m_0} \\ x &= (z + 1) \varepsilon_{m m_0}. \end{aligned} \quad (6.1.11) \quad \text{Eq. BurgFormDR-param}$$

Здесь T_e измеряется в кельвинах; $E_{m m_0}$ - в обратных сантиметрах; $\varepsilon_{m m_0}$ - разность обратных квадратов эффективных главных квантовых чисел состояний m и m_0 , $q^* = 1.43883$.

Для оценки скоростей автоионизации в формуле Берджеса использованы экстраполированные сечения электронного захвата в приближении ван Режемортера [106]. Неоднократно предпринимались попытки уточнения формулы Берджеса (см. например, работы [96, 115]). Чаще всего используемое уточнение - формула Берджеса-Мертца, в которой на основании уточнения приближения ван Режемортера при $\Delta n > 0$ сделана следующая замена [115]:

$$A(x) = 0.5x^{-1/2} (1 + 0.210x + 0.030x^2)^{-1/2}, \quad \Delta n = n - n_0, \quad (6.1.12) \quad \text{Eq. A(x)}$$

Несмотря на то, что в ряде случаев формула Берджеса дает ошибку в значении скорости диэлектронной рекомбинации, достигающую порядка величины, она продолжает широко использоваться. Обширная сводка расчетов по этой формуле приведена в работе [19].

В работе [142] результаты численных расчетов скоростей диэлектронной рекомбинации представлены в аналитической форме:

$$\alpha^{\text{dr}} = 10^{-13} B_d \beta^{3/2} e^{-\beta \xi_d} \quad (6.1.13) \quad \text{Eq. alphaDrAnalFit}$$

При этом $\beta = (z + 1) \text{Ry} / (k_B T_e)$. В табл. 6.1 приведены параметры B_d и ξ_d для скоростей диэлектронной рекомбинации Li- и Be-подобных ионов

Таблица 6.1. Параметры аппроксимации скоростей диэлектронной рекомбинации литие и бериллие-подобных ионов

$Z + 1$	Ион	B_d	ξ_d
4	Be	0.075	33.6
	Be ⁺	0.038	6.75
7	N ³⁺	0.040	13.4
	N ⁴⁺	0.021	2.73
10	Ne ⁶⁺	0.028	7.33
	Ne ⁷⁺	0.015	1.43
15	P ¹¹⁺	0.018	3.27
	P ¹³⁺	0.010	0.65
20	Ca ¹⁶⁺	0.014	2.08
	Ca ¹⁷⁺	0.007	0.37
25	Mn ²¹⁺	0.012	1.14
	Mn ²²⁺	0.005	0.24
30	Zn ²⁶⁺	0.012	1.41
	Zn ²⁷⁺	0.004	0.16

через возбуждение резонансного перехода $2s - 2p$ и $2s^2 - 2s2p$ соответственно, рассчитанные в [Vainshtein1980](#) [142].

В заключение этого раздела остановимся на влиянии конкурирующих процессов на скорость диэлектронной рекомбинации. Такие процессы (к ним относится фотоионизация или фотовозбуждение автоионизационных уровней) уменьшают населенности автоионизационных состояний и, следовательно, снижают скорости диэлектронной рекомбинации. При этом множитель $W^r/(W^r + W^a)$ в формуле (6.1.4) заменяется множителем $W^r/(W^r + W^a + W^k)$, где W^k – скорость ухода электрона с автоионизационного уровня в результате конкурирующих процессов.

Роль конкурирующих процессов для высокотемпературных переходов при диэлектронной рекомбинации рассмотрена в обзоре [Beigman-1968](#) [141]. При $T_e \leq 10^6$ К и $n_e \leq 10^{13}$ см⁻³ конкурирующие процессы практически не влияют на скорость диэлектронной рекомбинации. В плотной плазме скорость диэлектронной рекомбинации следует рассчитывать путем решения уравнений баланса населенностей автоионизационных состояний.

6.1.3 Диэлектронная рекомбинация при низких температурах

В работе [Storey1981](#) [90] было обращено внимание на важность диэлектронной рекомбинации при относительно низких электронных температурах ($T_e = 10^3 \div 10^5$ К) ионов С, N, O, Ne и других элементов, имеющих низлежащие автоионизационные уровни.

При таких температурах диэлектронная рекомбинация проходит главным образом через указанные уровни. Существование низлежащих

автоионизационных уровней у ионов С, N, O, Al, Mg и других элементов с потенциалами возбуждения порядка 0.1 – 1 эВ обеспечивает значительное увеличение скорости диэлектронной рекомбинации при низких электронных температурах. Скорости диэлектронной рекомбинации в низкотемпературном пределе определяются формулой (6.1.5), причем суммирование распространяется только на низковозбуждённые автоионизационные уровни, для которых множитель $\exp(-\Delta E_j / (k_B T_e))$ не мал.

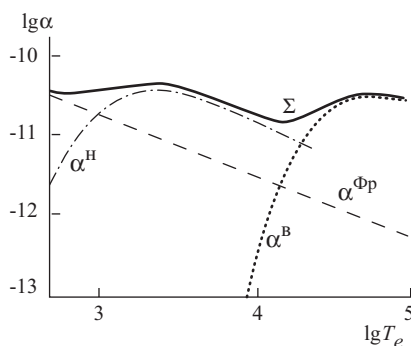


Рис. 6.4. Скорости рекомбинации иона C^{2+} . Пунктир — скорость фоторекомбинации; штрих-пунктир — низкотемпературная часть скорости диэлектронной рекомбинации [149]; точечная кривая — высокотемпературная часть скорости диэлектронной рекомбинации, рассчитанная по формуле Берджеса из работы [106], сплошная кривая — суммарная скорость рекомбинации.

Fig.CIIIdrTot

В работах [Nussbaumer-83, Nussbaumer-84, Nussbaumer-86, Nussbaumer-87, 67, 68, 70, 71] приведены результаты расчетов скоростей α^{dr} для ионов С, N, O, Ne, Mg, Al, Si при температурах $10^3 \div 6 \cdot 10^4$ К. Рассчитаны как полные скорости α^{dr} , так и значения скоростей диэлектронной рекомбинации для отдельных метастабильных уровней, а также эффективные коэффициенты рекомбинации α_{ki}^{dr} для наиболее интенсивных линий, образуемых при этом процессе. Полная скорость диэлектронной рекомбинации представлялась аппроксимационной формулой (в $см^3/с$):

$$\alpha^{low} = 10^{-12} \left(\frac{a}{t} + b + ct + dt^2 \right) \frac{e^{-f/t}}{t^{3/2}}, \quad t = T_e / 10^4 \text{ К.} \quad (6.1.14) \quad \text{Eq.DRlowTemp}$$

Точность представления α^{dr} формулой (6.1.14) составляет в среднем 5% [Nussbaumer-83, 67], максимальная ошибка аппроксимации не превосходит 17%. В табл. 6.2 даны параметры аппроксимации полных скоростей диэлектронной рекомбинации согласно [Nussbaumer-83, Nussbaumer-84, Nussbaumer-86, Nussbaumer-87, 67, 68, 70, 71].

Суммарная скорость рекомбинации (фото и диэлектронной)

$$\alpha_{tot} = \alpha^{low} + \alpha^{high} + \alpha^{phr} \quad (6.1.15) \quad \text{Eq.AlphaDRtot}$$

где α^{low} — низкотемпературная часть скорости диэлектронной рекомбинации (6.1.14), α^{high} — высокотемпературная часть скорости диэлектронной рекомбинации, определяемая формулой Берджеса [19], α^{phr} —

скорость радиационной рекомбинации. На Рис. [Fig.CIIIdrTot](#) 6.4 приведены кривые суммарной скорости рекомбинации и ее составляющих для иона C^{2+} .

Таблица 6.2. Параметры аппроксимации полной скорости диэлектронной рекомбинации ионов C, N, O, Ne, Al и Mg, $t_1 - t_2$ — интервал значений $t = T_e/10^4$ К, в котором справедлива аппроксимация (6.1.14), Y — скорость диэлектронной рекомбинации (cm^3/c) при $T_e = 10^4$ К.

Ион	$t_1 - t_2$	a	b	c	d	f	$Y \cdot 10^{12}$
C^+	0.2-6.0	0.11	0.104	0.281	0.019	0.113	6.03
C^{2+}	0.1-6.0	1.827	-1.101	4.844	0.226	0.596	5.57
C^{3+}	0.1-6.0	2.320	10.733	6.883	-0.182	0.410	-
N^+	0.1-6.0	0.000	0.631	0.199	-0.020	0.440	1.99
N^{2+}	0.1-6.0	0.062	-0.662	4.319	-0.000	0.595	21.51
N^{3+}	0.1-6.0	-0.881	11.241	30.707	-1.172	0.613	5.46
N^{4+}	0.1-0.0	0.413	-4.632	25.917	-2.229	0.236	-
O^+	0.1-6.0	0.000	-0.024	0.066	0.035	0.533	0.04
O^{2+}	0.1-6.0	-0.004	0.752	1.525	-0.084	0.277	9.54
O^{3+}	0.2-6.0	0.000	21.879	16.273	-0.702	0.190	43.55
O^{4+}	0.1-6.0	0.006	0.227	32.142	1.994	-0.065	1.89
Ne^+	0.1-6.0	0.013	-0.178	0.935	-0.068	0.452	0.447
Ne^{2+}	0.1-6.0	14.148	17.118	-0.502	0.231	0.231	7.330
Ne^{3+}	0.1-6.0	-0.025	5.536	17.073	-0.722	0.170	18.440
Ne^{4+}	0.1-6.0	-0.014	33.848	43.161	-1.607	0.194	62.081
Ne^{5+}	0.1-6.0	19.928	235.054	152.510	9.141	0.128	366.502
Ne^{6+}	0.2-6.0	5.475	203.975	89.902	-7.457	2.515	28.372
Al	0.1-6.0	0.022	-0.453	2.543	-0.108	0.228	1.548
Mg	0.1-6.0	1.204	-4.684	7.662	-0.593	1.626	0.706

TotLowTeDrRates-appx

В работе [BeigmanChyhcow1980](#) [24] обращено внимание на вклад запрещенных при LS -связи автоионизационных захватов в скорость диэлектронной рекомбинации. При автоионизационном захвате сохраняется полный момент системы "атом плюс электрон". При условии справедливости LS -связи сохраняются также моменты L и S .

Рассмотрим, например, автоионизационные захваты иона N^{2+} . Среди автоионизационных состояний этого иона, имеющих энергии ниже энергии первого возбужденного уровня $2s2p^3P^o$, есть как дублетные: $2s2p(^3P^o)nl^2L$, так и квартетные: $2s2p(^3P^o)nl^4L$. В то же время все состояния континуума $2s^2El^2L$, из которых возможны захваты на эти состояния, — дублеты. Переходы между дублетами 2L и квартетами 4L при LS -связи запрещены по спину, поэтому в условиях справедливости приближения LS -связи квартетные уровни не населяются при автоионизационных захватах, и диэлектронная рекомбинация происходит только через дублетные термы $2s2p(^3P^o)nl^2L = n'l^2L$.

Приближённость LS -связи приводит к тому, что реальная волновая функция $\Psi(nl^2L) = \alpha\Psi(nl'^2L) + \beta\Psi(nl'^4L)$ содержит вклад как квартетных, так и дублетных состояний чистой LS -связи. Скорость автоионизационного захвата $2s^2El^2L \rightarrow (^3P^o)nl^4L \sim \beta^2W$, где W — скорость

разрешённого перехода $2s^2El^2L \rightarrow ({}^3P^{\circ})nl^2L$. Хотя обычно $\beta \ll 1$, но так как для низколежащих автоионизационных уровней $W^a \gg W^r$, то и для запрещенных переходов $El^2L - nl^4L$, может сохраниться условие $W^a > W^r$.

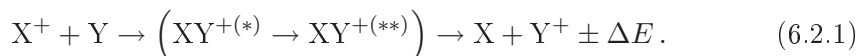
Предположение $W^a > W^r$ для всех запрещенных автоионизационных захватов названо авторами работы [Nussbaumer-83] приближением WI (weak interaction). Вклад запрещенных автоионизационных переходов в приближении WI может в два-четыре раза увеличить скорость диэлектронной рекомбинации [Nussbaumer-84]. В этом приближении рассчитаны скорости диэлектронной рекомбинации для ионов Mg, Al, Si (см. табл. Table. TotLowTdrRates-appr 6.2).

Интересная возможность диэлектронной рекомбинации через автоионизационные ридберговские состояния иона C^+ рассмотрена в работе [Watson-1980]. Нижний терм ${}^2P^{\circ}$ этого иона состоит из основного $J = 1/2$ и возбужденного $J = 3/2$ уровней с энергией возбуждения 63.42 см^{-1} . Возбужденные состояния $2p({}^2P_{3/2}^{\circ})nl^1,3L$ иона C^+ при $n > 25$ лежат выше первого ионизационного предела $2p^2P_{1/2}^{\circ}$ и являются, поэтому, автоионизационными. Диэлектронная рекомбинация через такие автоионизационные состояния протекает при крайне низких значениях $T_e = 10 \div 100 \text{ К}$ и, по-видимому, ответственна за появление в спектрах областей межзвездной среды, в которых углерод находится в ионизованном состоянии C^+ (областей СII), рекомбинационных радиолиний CI с $n \approx 600$.

6.2 Сечения и скорости реакций перезарядки

ss.ChTransf

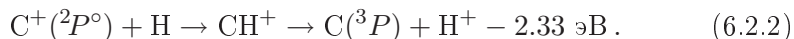
Процесс перезарядки происходит при столкновении атома (или иона) X с ионом Y и протекает через образование промежуточного состояния молекулярного иона XY^+ :



Eq.ChTr

Молекулярный ион XY^+ в состоянии $XY^{+(*)}$ может безызлучательно (без излучения или поглощения фотона) перейти в отталкивательное состояние $XY^{+(**)}$ иона XY^+ . При этом молекулярным ионом XY^+ теряется (или приобретает) энергия ΔE . Возбужденное состояние $XY^{+(**)}$ является нестабильным и распадается на атом X и ион Y^+ . Таким образом, процесс перезарядки приводит к переносу электрона от атома (иона) Y к иону X^+ .

Для иллюстрации рассмотрим процесс перезарядки иона углерода на нейтральном атоме водорода:



Eq.ChTrC-H

Схема уровней молекулярного иона CH^+ , через образование которого протекает процесс перезарядки, представлена на Рис. Fig.ChplusPotEn 6.5. При перезарядке (6.2.2) должен произойти переход с молекулярного уровня $1^3\Sigma^+$

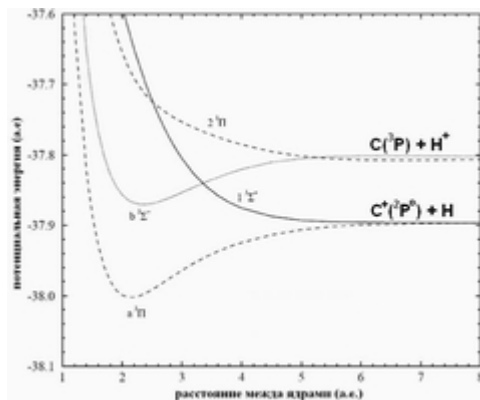


Рис. 6.5. Энергии (в атомных единицах) уровней молекулярного иона CH^+ в зависимости от межъядерного расстояния (в атомных единицах) согласно [86].

на уровень $2^3\Pi^+$. Энергия последнего выше энергии уровня $1^3\Sigma^+$ на ≈ 2.33 эВ, поэтому реакция (6.2.2) — эндотермическая, и ее сечение вблизи порога $E = 2.33$ эВ мало.

Сечение реакции, рассчитанное вблизи порога возбуждения методом сильной связи, а при энергиях, больших 5 кэВ на атомную единицу массы (а.е.м.), методом классических траекторий [86], показано на Рис. 6.6.

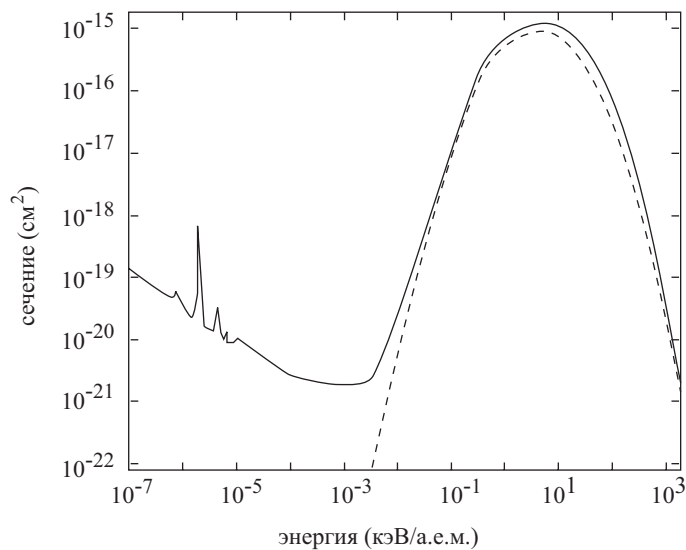
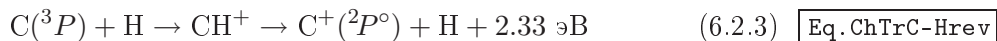


Рис. 6.6. Сечения реакций (6.2.2) — пунктир и обратной реакции (6.2.3) — сплошная линия, согласно [86].

Обратная реакция перезарядки



является экзотермической с конечным значением сечения при $E = 0$ (Рис. 6.6).

Скорости реакций (6.2.2) и (6.2.3), рассчитанные по этим сечениям, даны на Рис. 6.7. Результаты сравнения экспериментальных и теоретических скоростей реакции перезарядки показывают, что точность расчёта сечений и скоростей реакции перезарядки мала [32, 77].

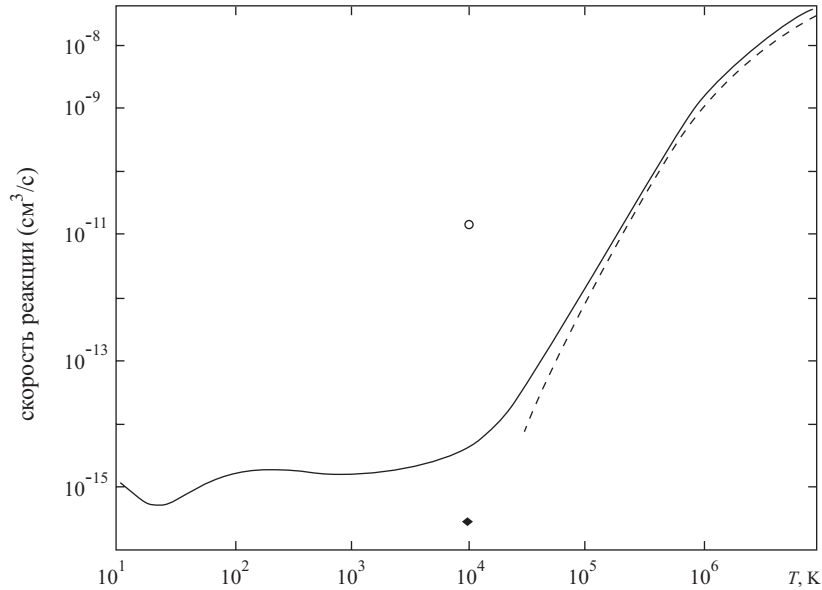
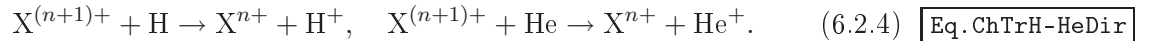


Рис. 6.7. Скорости реакций (6.2.2) — пунктир и обратной реакции (6.2.3) — сплошная линия, согласно [86]. Заполненный ромб — расчёт [32] для реакции (6.2.3), белый кружок — данные из компиляции [77].

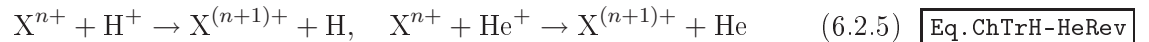
Fig.ChTrC-HRate

При относительно малых энергиях сталкивающихся частиц ($\Delta E \leq 100$ эВ) перезарядка протекает через захват электрона внешней оболочки. При больших энергиях возможен захват электрона внутренних оболочек атома. Для атомов щелочных металлов такой захват возможен уже при $E > 20$ эВ.

В астрофизической плазме доминируют реакции перезарядки в столкновениях с нейтральными атомами H и He:



При этом происходит рекомбинация иона $X^{(n+1)+}$, поэтому этот процесс часто называется *рекомбинационной перезарядкой*. Обратный процесс



называется *ионизационной перезарядкой*.

Реакции перезарядки этого типа (например, $O^+ + H \leftrightarrow O + H^+$) важны в установлении ионизационного равновесия в астрофизической плазме низкой плотности и, например, в верхних слоях земной атмосферы.

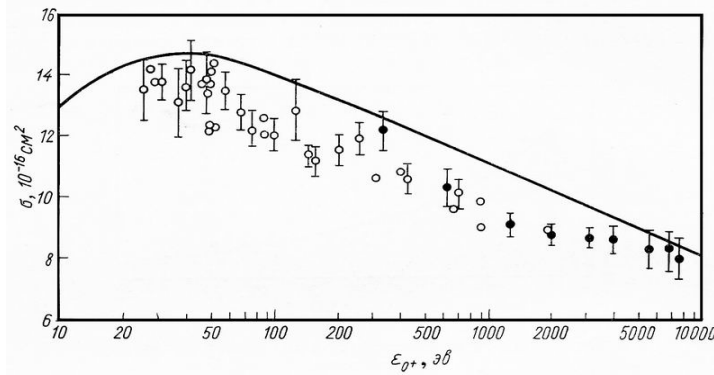
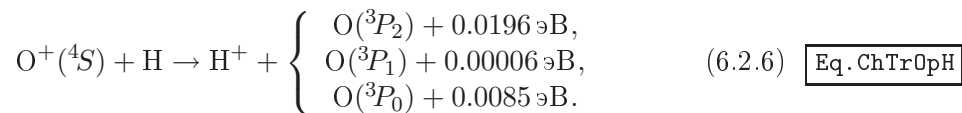


Рис. 6.8. Сечения перезарядки (Eq.ChTrOpH) иона O^+ на атоме H по [Smirnov1968, Fig.ChTrOII-H]. Сплошная линия — расчёт, точки — эксперимент.

Fig.ChTrOII-H

Для иллюстрации рассмотрим процесс перезарядки ионизованного кислорода на атоме водорода. Этот процесс может осуществляться следующим образом:



Сравнение экспериментальных сечений перезарядки (Eq.ChTrOpH) с рассчитанными в [Smirnov1968, Fig.ChTrOII-H, Fig.ChTrOI-HII] дано на Рис. 6.8. На Рис. 6.9 приведен результат сравнения теоретических и экспериментальных сечений для ионизационной перезарядки, обратной к реакции (Eq.ChTrOpH, 6.2.6).

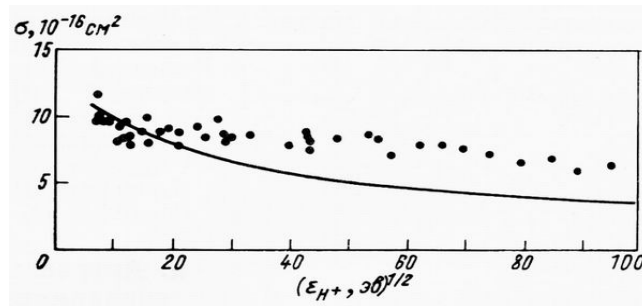


Рис. 6.9. То же, что на Рис. 6.8, но для перезарядки H^+ на атоме кислорода.

Fig.ChTrOI-HII

Число прямых (рекомбинационных) перезарядок (Eq.ChTrH-HeDir, 6.2.4) в единичном объеме за единицу времени

$$\vec{N}_{\text{ChTr}} = n(X^{(n+1)+}) n(Y) \vec{k}(X^n, Y), \quad (6.2.7) \quad \text{Eq.ChTrDirect}$$

а число обратных (ионизационных) перезарядок равно

$$\overleftarrow{N}_{\text{ChTr}} = n(X^i) n(Y^+) \overleftarrow{k}(X^i, Y^+), \quad (6.2.8) \quad \text{Eq.ChTrRev}$$

где обозначение Y соответствует либо атому H, либо атому He, а Y^+ — ионам H^+ или He^+ . Величины \vec{k} и \overleftarrow{k} — скорости реакций прямых и обратных перезарядок соответственно (в $\text{см}^3/\text{с}$).

Скорости прямого (Eq.ChTrH-HeDir (6.2.4)) и обратного процесса (Eq.ChTrH-HeRev (6.2.5)) \vec{k} и \overleftarrow{k} связаны следующим соотношением, зависящим от температуры плазмы $T = T_e$:

$$\vec{k} = \overleftarrow{k} e^{-\Delta E/(k_B T_e)}. \quad (6.2.9) \quad \text{Eq.ChTrDirRevRel}$$

Реакция



называется *резонансной перезарядкой*. При резонансной перезарядке не меняется полная энергия сталкивающихся частиц. Сечение резонансной перезарядки велико, и она, наряду с процессами упругого столкновения атомов и молекул, способствует установлению равновесных (максвелловских) распределений частиц в плазме по скоростям.

В работе [20] собраны сведения о скоростях реакций (Eq.ChTrH-HeDir (6.2.4)) и дана приближенная формула для расчета скоростей реакций перезарядки:

$$\vec{k} = At^B (1 + Ce^{Dt}), \quad \text{см}^3/\text{с}, \quad (6.2.11) \quad \text{Eq.ChTrRateAnalFit}$$

где $t = T_e/10^4 \text{ K}$. Значения параметров A , B , C и D представлены в табл. C.3. В столбце 2 указан интервал значений t , в котором соотношение (6.2.11) справедливо.

В работе [11] скорости реакций перезарядки ионов C, N, O и других элементов с водородом и гелием представлены в виде

$$\vec{k} = k_0 T_e^\alpha. \quad (6.2.12) \quad \text{Eq.ChTrRateSS83}$$

Значения параметров k_0 и α даны в табл. C.4. В работе [76] приведены сведения о скоростях реакции перезарядки между атомами и ионами тяжёлых элементов. Такие реакции важны в условиях межзвездной среды, областей HI и атмосфер холодных звёзд.

Кроме реакции простой перезарядки с переходом электрона от одного атома (иона) к другому, возможна также реакция двойной перезарядки



Влияние этой реакции на ионизационное состояние плазмы исследовано в работе [93]. Показано, что в условиях разреженной плазмы газовых туманностей этими реакциями можно пренебречь.

В результате реакций перезарядки (Eq.ChTrH-HeD (6.2.4)) или (Eq.ChTrH-HeRev (6.2.5)) ионы $X^{(n+1)+}$ или X^{n+} , образовавшиеся в её результате, могут оказаться в возбужденном состоянии. В этом случае реакция перезарядки приводит к дополнительному излучению в линиях. Этот процесс рассмотрен в пункте 7.2.3.

Глава 7

Излучение и диагностика астрофизической плазмы

s.EmissDiagnPl

7.1 Ионизационное состояние плазмы

ss.IonizEquil

Задача расчета ионизационного состояния горячего газа ($T \leq 10^8$ K) низкой плотности ($n_e \leq 10^{14} \text{ см}^{-3}$) является одной из важнейших в астрофизике и была предметом многочисленных исследований (см., например [59]).

Ионизационное состояние такого газа контролируется процессами ударной ионизации, фото и диэлектронной рекомбинации и определяется температурой рассматриваемой области плазмы. В то же время полное число атомов какого-либо элемента в определенной стадии ионизации зависит от распределения электронной температуры во всем объеме газа. При анализе ионизационного состояния и свечения газа, степень ионизации которого контролируется ударными процессами, рассматриваются различные модели излучающей плазмы. В качестве таких моделей чаще всего используются либо модель однокомпонентной плазмы заданной электронной температуры, либо излучающая плазма предполагается состоящей из нескольких компонентов разной температуры [21].

sss.EqIonEquil

7.1.1 Уравнения ионизационного баланса

Методика описания физического состояния и спектра выходящего излучения какого-либо астрофизического объекта, в которой считается, что излучающий объем является разреженной плазмой, обычно называется *корональным приближением* (см., например, [100]). Состояние разреженной плазмы в элементарном объеме определяется ее локальными температурой и концентрациями атомов и ионов. Роль внешних источников излучения и (или) частиц высокой энергии в установлении ионизационного равновесия считается пренебрежимо малой.

В корональном приближении могут быть описаны прежде всего короны Солнца и звезд, газ в планетарных и диффузных туманностях, охлаждающиеся потоки (cooling flows) в скоплениях галактик и области за фронтом галактических ударных волн. Кроме того, указанным условиям удовлетворяют компактные горячие области газа, образующиеся при прохождении ударных волн в расширяющихся атмосферах звезд ранних спектральных классов. По современным представлениям, именно в этих областях формируется рентгеновское излучение этих звезд.

В стационарных условиях плазмы с температурой T распределение атомов по стадиям ионизации может быть найдено из решения системы уравнений ионизационного равновесия:

$$\frac{x_{ij}}{x_{ij+1}} = \frac{\alpha_{ij+1}(T) + n_e Q_{ij+1}^t(T)}{q_{ij}^{ci}}, \quad (7.1.1) \quad \boxed{\text{Eq. IonEq}}$$

где x_{ij} – относительное содержание иона j в полном содержании атома i , α_{ij} – сумма скоростей радиативной и диэлектронной рекомбинации этого иона и q_{ij}^{ci} – полная скорость ударной ионизации данного иона, Q_{ij}^t – скорость тройной рекомбинации.

Величины x_{ij} определяются следующим образом:

$$x_{ij} = n_{ij}/n_i, \quad n_i = A_i n, \quad (7.1.2) \quad \boxed{\text{Eq. Xi j}}$$

где n_{ij} – концентрация иона j элемента с номером i , при этом значению $j = 0$ соответствует нейтральный атом, а A_i – относительное содержание этого элемента в рассматриваемой области плазмы, n – полная концентрация плазмы. Будем далее предполагать, что относительные содержания элементов A_j постоянны по всему излучающему объему плазмы.

Уравнения [\(7.1.1\)](#) должны быть дополнены условиями сохранения частиц и заряда:

$$\sum_i \sum_{j=0}^{Z_i} A_i x_{ij} = 1 \quad \text{и} \quad \frac{n_e}{n} = \sum_i \sum_{j=0}^{Z_i} j A_i x_{ij}, \quad (7.1.3) \quad \boxed{\text{Eq. TotN}}$$

где Z_i – заряд ядра атома с номером i .

Система уравнений [\(7.1.1\)](#) имеет аналитическое решение:

$$x_{ij} = B_j/B, \quad B_j = \prod_{k=0}^j P_k, \quad B = \sum_{j=0}^{Z_i} B_j, \quad (7.1.4) \quad \boxed{\text{Eq. IonEq0Sol}}$$

где $P_j = q_{ij}^{ci}/(\alpha_{ij+1}(T) + n_e Q_{ij+1}^t)$, $P_0 = 1$.

Применимость стационарного приближения

Применимость стационарного приближения для описания ионизационного состояния плазмы определяется соотношением между характерными временами рекомбинации ($\tau_{\text{рек}}$) и охлаждения среды ($\tau_{\text{охл}}$), а также гидродинамическим временем $\tau_{\text{дин}} = R/c_s$, где R — характерный размер рассматриваемой области плазмы, c_s — скорость звука в этой области. Рекомбинационное время $\tau_{\text{рек}} = [n_e \alpha(T_e)]^{-1}$, где $\alpha(T_e)$ — полная скорость рекомбинации рассматриваемого иона, а время охлаждения $\tau_{\text{охл}} = T_e / (dT_e/dt)$. Если $\tau_{\text{охл}} \ll \tau_{\text{рек}} \ll \tau_{\text{дин}}$, то стационарное приближение применимо, а плазма находится в состояниях ионизационного и теплового равновесия.

Оценим условия выполнимости этого приближения для двух типов астрофизической плазмы: ионизованного газа планетарных туманностей и горячей, сильно ионизованной плазмы в атмосферах горячих звезд.

Планетарные туманности являются ионизованными областями сброшенных оболочек звезд промежуточных масс $0.8 - 8 M_{\odot}$ [116]. Электронная температура газа в планетарных туманностях составляет $\approx 10^4$ К, а электронная концентрация $\approx 10^3 \text{ см}^{-3}$. Характерное время охлаждения можно оценить из очевидного соотношения $\tau_{\text{охл}} \approx (3/2) k_B T / (n \Lambda)$. Здесь n — полная концентрация атомов в среде, а Λ — функция высвечивания (см. параграф 7.4). Подставляя в это соотношение параметры туманностей, найдем: $\tau_{\text{охл}} \approx 10$ суток.

Время рекомбинации $\tau_{\text{рек}}$ определяется рекомбинацией водорода. Используя скорости рекомбинации, данные в пункте 4.2.3, получим $\alpha_{\text{H}}(T_e) \approx 4 \cdot 10^{-13} \text{ см}^3 \text{ с}^{-1}$. Тогда время рекомбинации ионизованного газа в планетарных туманностях $\tau_{\text{рек}} \approx 35$ лет. Средний размер туманностей составляет $R_{\text{Neb}} \approx 3 \cdot 10^{17} \text{ см}$, скорость звука для газа туманностей $c_s \approx 10 - 15 \text{ км/с}$, тогда $\tau_{\text{дин}} \approx R/c \approx 10^4$ лет. Тем самым условия применимости стационарного приближения $\tau_{\text{охл}} \ll \tau_{\text{рек}}$ и $\tau_{\text{рек}} \ll \tau_{\text{дин}}$ выполняется. Время жизни туманностей близко к их динамическому времени, поэтому планетарные туманности в течении всей их жизни можно считать находящимися в условиях ионизационного равновесия.

Оценим также условия выполнимости стационарного приближения для горячих областей (горячих зон) в атмосферах горячих звезд ранних спектральных классов, формирующих их рентгеновское излучение. Характерный размер таких областей составляет $\approx 0.1 R_{\odot}$ [2]. При типичных для горячих областей температурах $T_e \approx 10^7$ К значение $\tau_{\text{дин}} \approx 1^h$. При $T_e \approx 10^7$ К и величине $n = 10^{11} \text{ см}^{-3}$ для внешних частей расширяющихся атмосфер горячих звезд $\tau_{\text{охл}} = 1 \text{ с} - 1 \text{ мин}$ в зависимости от химического состава атмосфер. При указанных температурах полная скорость рекомбинации определяется главным образом скоростью диэлектронной рекомбинации. Используя данные каталога [137] найдем: $\tau_{\text{рек}} = (1 - 10) \text{ с}$.

Таким образом, $\tau_{\text{рек}} \ll \tau_{\text{дин}}$, однако $\tau_{\text{охл}} \approx \tau_{\text{рек}}$. По этой причине при-

менимость стационарного приближения для горячих зон в атмосферах звезд ранних спектральных классов зависит от химического состава атмосфер и для звёзд, обеднённых металлами, может не выполняться. В этом случае необходимо вместо уравнений ионизационного равновесия (7.1.1) рассматривать уравнения нестационарной ионизации и рекомбинации (см., например [7]).

Выполнив аналогичные оценки для других объектов, можно заключить, что в большинстве случаев астрофизическая плазма находится в состоянии ионизационного и теплового равновесия. К исключениям из этого правила могут относиться объекты с низкой плотностью $n \ll 10^3 \text{ см}^{-3}$ (межзвездная и межгалактическая среда) или короткоживущие объекты: области короны и хромосферы Солнца и звезд во время вспышек и т.п.

7.1.2 Распределение атомов по стадиям ионизации

sss.AtomIonizState

В работе [Kholtygin2003] рассчитаны относительные содержания ионов наиболее распространенных в космосе элементов (H, He, C, N, O, Ne, Mg и Fe) в стационарной плазме низкой плотности с использованием скоростей ионизации и рекомбинации, данных в каталоге [Golovatyj-1997]. На Рис. 7.1 в качестве иллюстрации представлена зависимость относительного содержания ионов углерода от локальной температуры среды T .

Оказалось, что при $n_e < 10^{19} \text{ см}^{-3}$ скорости тройной рекомбинации малы по сравнению со скоростями фото- и диэлектронной рекомбинации, и относительное содержание ионов не зависит от n_e . Отметим, что рассчитанное относительное содержание находится в согласии с результатами аналогичных расчетов других авторов (см. Рис. 7.1).

При конкретном значении температуры плазмы T только небольшое число степеней ионизации данного элемента будет иметь заметное содержание. На Рис. 7.2 приведены кривые ионизации ионов железа при $T = 10^6 \div 10^7 \text{ K}$, полученные в работе [20] и иллюстрирующие данное утверждение. На ионизационное равновесие оказывают влияние реакции ионизационной перезарядки (6.2.5) в столкновениях ионов железа с ионами водорода и гелия, как видно из Рис. 7.2.

7.2 Механизмы излучения плазмы в линиях

s.MechLineForm

В условиях разреженной плазмы механизмы образования эмиссионных линий обычно классифицируются по типу элементарного процесса, приводящего к образованию атома или иона в данном возбужденном состоянии [118]. В разреженной плазме атомы и ионы находятся главным образом в основном состоянии, поэтому атомы в возбужденных состояниях какого-либо атома иона X^{n+} образуются при неупругом столкнове-

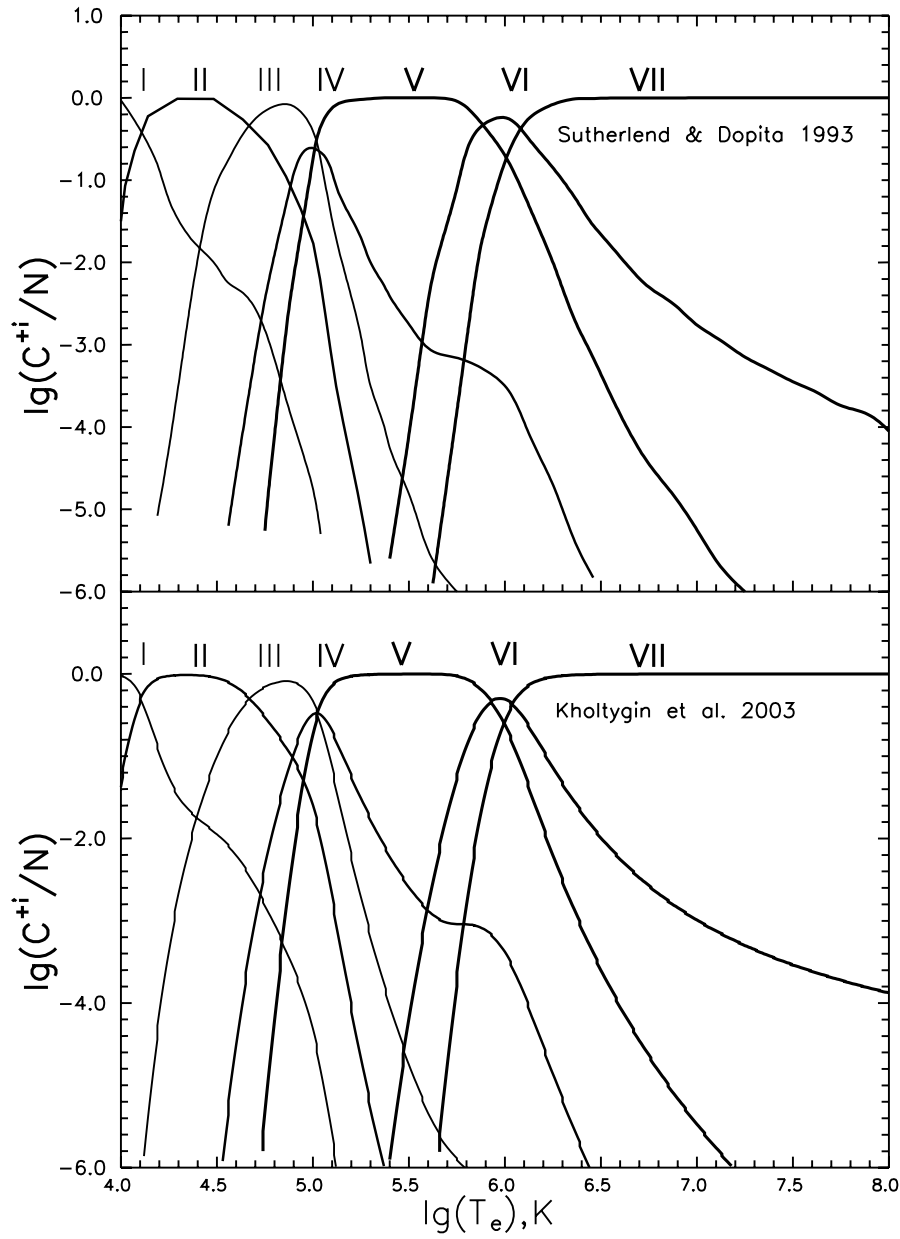
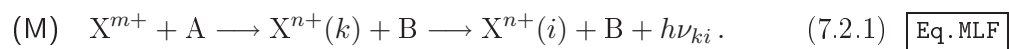


Рис. 7.1. Зависимость относительного содержания ионов углерода от локальной температуры среды T_e . Вверху – данные работы [88], внизу – относительные содержания, полученные в статье [57].

Fig.Cioniz

нии иона X^{m+} в основном состоянии (вообще говоря, $n \neq m$) с возбуждающей частицей A (электрон, фотон, протон, α -частица и т.п.):



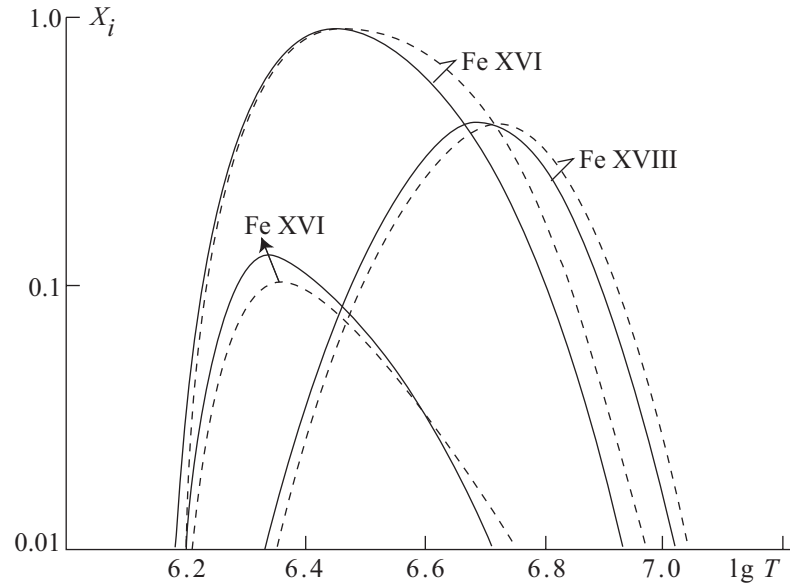


Рис. 7.2. Равновесные содержания ионов железа Fe^{n+} для горячей плазмы солнечного химического состава с температурой T (в логарифмической шкале). Пунктиром показаны ионизационные кривые с учётом реакций перезарядки [20].

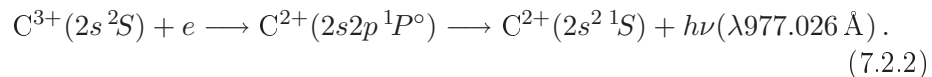
Fig.FeIoniz

Здесь V – частица (фотон, электрон, протон и т.п.), образующаяся в результате элементарного процесса (7.2.1). При реакциях рекомбинации дополнительная частица V не образуется (см. ниже реакцию (7.2.2)).

Через $X^{n+}(k)$ и $X^{n+}(i)$ обозначены верхнее и нижнее состояния иона X^{n+} , переход между которыми дает излучение в линии $k \rightarrow i$. Буквой M для краткости будем обозначать тот конкретный элементарный процесс (механизм образования линий), приводящий к излучению кванта в линии $k \rightarrow i$.

Все механизмы образования линий можно разделить на три группы: *ионизационные*, *рекомбинационные* и *механизмы возбуждения*. Для рекомбинационных механизмов $m > n$, для ионизационных $m < n$ и для механизмов возбуждения $m = n$. Проиллюстрировать действие указанных механизмов можно на примере формирования излучения в резонансной линии $2s^2\ ^1S - 2s2p\ ^1P^\circ$ $\lambda 977.026\ \text{\AA}$ иона C^{2+} .

Образование данной линии *рекомбинационным механизмом* происходит при рекомбинации иона C^{3+} :

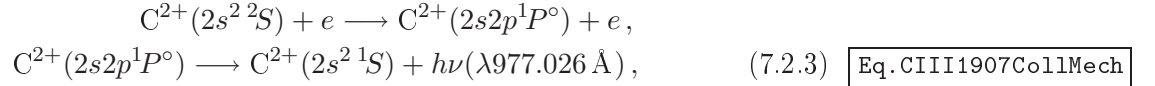


Eq.CIII1907RecMech

В данном случае $m = 3$, $n = 2$ и в соответствии с общим правилом для рекомбинационного механизма $m > n$.

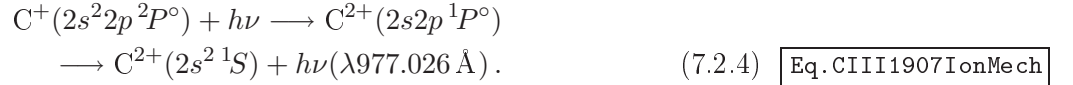
При возбуждении иона C^{2+} в основном состоянии $2s^2\ ^1S$ электронным

ударом:



линия СИИ $\lambda 977.026 \text{ \AA}$ образуется *механизмом возбуждения*. В данном случае $m = n = 2$.

Эта же линия может формироваться и в результате действия *ионизационного механизма* при фотоионизации иона C^+ с фотоотрывом электрона с внутренней оболочки $2s^2$:



В данном процессе $m = 1, n = 2$, т. е. $m < n$, как и должно быть в общем случае образования линии *ионизационным механизмом*.

Определим величины, характеризующие эффективность образования линий при различных механизмах возбуждения. Обозначим через $n_1(X^{m+})$ концентрацию атомов (ионов) X^{m+} в основном состоянии. В плазме низкой плотности $n_1(X^{m+}) \approx n(X^{m+})$ — полной концентрации иона X^{m+} . Пусть n_F — концентрация ионов $X^{m+} \equiv X_F$ (Line **F**orming ions), где индекс **F** указывает, что возбуждение именно иона X_F приводит к излучению фотонов в линии $k \rightarrow i$.

Коэффициент излучения в линии $k \rightarrow i$ можно выразить следующим образом:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{ki} &= \frac{1}{4\pi} n_k A_{ki} h\nu_{ik} = \frac{1}{4\pi} n_k (X^{n+}) A_{ki} h\nu_{ik} \\ &= \frac{1}{4\pi} n_e n(X^{m+}) r_{ki}^{\text{eff}} h\nu_{ik} = \frac{1}{4\pi} n_e n_F r_{ki}^{\text{eff}} h\nu_{ik} = \frac{1}{4\pi} n_e n_F r_{ki}^M h\nu_{ik}, \end{aligned} \quad (7.2.5) \quad \boxed{\text{Eq. eff_exc_coeff}}$$

где n_k — населенность уровня k иона X^{n+} , A_{ki} — вероятность перехода $k \rightarrow i$, $r_{ki}^{\text{eff}} = r_{ki}^M$ — *эффективный коэффициент возбуждения* (образования) линии $k \rightarrow i$ в результате действия механизма **M**, индекс **M** используется чтобы подчеркнуть, что соответствующая величина относится именно механизму возбуждения **M**.

Пусть $W_{1 \rightarrow k}^M$ — скорость заселения уровня k иона X^{n+} под действием механизма заселения **M**, определяемая таким образом, что в 1 см^3 рассматриваемого объема плазмы за 1 секунду происходит $n(X^{m+}) W_{1 \rightarrow k}^M = n_F W_{1 \rightarrow k}^M$ элементарных столкновений, приводящих к заселению уровня k . Скорость заселения уровней (и, соответственно, интенсивность линии) пропорциональна квадрату плотности среды. Такая зависимость является следствием пропорциональности числа элементарных процессов (7.2.1) в элементарном объеме концентрациям участвующих в реакции частиц.

Обозначим через τ_k время жизни уровня k в результате всех возможных процессов депопуляции уровней (спонтанных и вынужденных радиационных переходов с уровня k , переходов с уровня в результате столкновений с электронами и т. д.). Обычно $\tau_k \approx \tau_k^{\text{rad}}$, где τ_k^{rad} – радиационное время жизни уровня (4.1.26), определяемое радиационными переходами с него. Тогда

$$n_F W_{1 \rightarrow k}^M = n(X^{m+}) W_{1 \rightarrow k}^M = n_k / \tau_k, \quad r_{ki}^M = \tau_k A_{ki} W_{1 \rightarrow k}^M / n_e. \quad (7.2.6) \quad \text{Eq. LevBal}$$

В случае одновременного действия нескольких механизмов заселения уровней уравнение (7.2.6) заменяется на уравнение

$$\sum_{m, M} n(X^{m+}) W_{1 \rightarrow k}^M = n_k / \tau_k, \quad (7.2.7) \quad \text{Eq. LevBaltotal}$$

где суммирование выполняется по всем возможным механизмам заселения уровней и по всем ионам рассматриваемого элемента, дающим вклад в заселение уровня k иона X^{n+} . Если время жизни уровня не зависит от его населенности (что справедливо для оптически тонких линий в разреженной плазме), то

$$\varepsilon_{ki} = \frac{1}{4\pi} n_e \sum_{m, M} n(X^{m+}) r_{ki}^M h\nu_{ik}. \quad (7.2.8) \quad \text{Eq. total_EEC}$$

Таким образом, полный коэффициент излучения в линии складывается из вкладов всех различных механизмов возбуждения уровней, а каждый из механизмов можно исследовать независимо от других. В следующих пунктах будут рассмотрены конкретные механизмы образования линий.

7.2.1 Рекомбинационный механизм

ss. RecMech

При действии рекомбинационного механизма заселение уровней иона X^{n+} происходит в результате рекомбинации иона $X^{(n+1)+}$:



В случае неполной прозрачности излучающей плазмы в линиях необходимо решение совместной системы уравнений переноса в линиях и уравнений стационарности. Такая задача для линий водорода решена в работе [4]. Плазма низкой плотности прозрачна почти во всех рекомбинационных линиях и для определения населенностей уровней можно рассматривать следующее простое приближение: среда прозрачна в линиях всех переходов $i \rightarrow k$ при $k \geq l$ и непрозрачна в линиях с $k < l$.

Случай полной прозрачности среды ($l = 1$) традиционно называется моделью прозрачности А, а случай $l = 2$ (непрозрачность в линиях переходов на основной уровень $k = 1$) — моделью В. При $l > 2$ говорят о модели прозрачности V_l .

Населенности уровней при рекомбинационном заселении при заданном значении l определяются решением следующих уравнений стационарности:

$$n_k \sum_{i=l}^{k-1} A_{ki} - \sum_{j=k+1}^N n_j A_{jk} = n_e n^+ \alpha_k,$$

или $\frac{n_k}{\tau_k} - \sum_{j=k+1}^N n_j A_{jk} = n_e n^+ \alpha_k.$ (7.2.10) Eq. EqStatRec

Здесь n_k – населенность уровня k иона X^{n+} , $n^+ = n(X^{n+})$ – полная концентрация ионов $X^{(n+)+}$, N – число учитываемых в уравнениях стационарности уровней, α_k – скорость рекомбинации на уровень k .

Решение системы уравнений (7.2.10) выражается с помощью каскадной матрицы Ситона, определенной соотношениями (6.1.7). Реальный атом в плазме низкой плотности обладает большим числом уровней. У атома углерода наблюдались переходы с главным квантовым числом оптического электрона $n_{\max} > 600$ [123]. Учет расщепления уровней по орбитальным квантовым числам увеличивает число уровней в уравнениях стационарности на 1-2 порядка. Еще большее число уровней реализуется у сложных атомных систем таких, как атомы и ионы C, N, O, Ne и т.д.

Решение системы уравнений стационарности с таким числом уровней практически не осуществимо, поэтому ее решают точно для относительно небольшого числа уровней, а вклад остальных учитывается в виде поправок. Процедура учета поправок за счет влияния высоких уровней описана в работе [8].

Коэффициент излучения в рекомбинационных линиях часто выражают через *эффективный коэффициент рекомбинации* (ЭКР), определенный соотношением

$$\varepsilon_{ki} = \frac{1}{4\pi} n_e n^+ \alpha_{ki}^{\text{eff}} h\nu_{ik}. \quad (7.2.11) \quad \text{Eq. ERC}$$

Используя формулы (7.2.5), можно получить соотношение $r_{ki}^{\text{rec}} = \alpha_{ki}^{\text{eff}}$, связывающее ЭКР с эффективным коэффициентом образования линий для рекомбинационного механизма заселения уровней r_{ki}^{rec} .

Для лучшего понимания физического смысла эффективных коэффициентов рекомбинации рассмотрим упрощенную модель атома, состоящего из 3-х дискретных уровней и состояния непрерывного спектра (континуума). Уравнения стационарности для трёхуровневого атома имеют следующий вид:

$$\begin{cases} n_2 A_{21} - n_3 A_{32} = n_e n^+ \alpha_2, \\ n_3 (A_{31} + A_{32}) = n_e n^+ \alpha_3. \end{cases} \quad (7.2.12) \quad \text{Eq. LevPop-3lev}$$

Определив из данной системы уравнений значения n_2 и n_3 и используя соотношения (7.2.6), получим выражения эффективных коэффициентов

рекомбинации для всех переходов между уровнями атома через скорости рекомбинации:

$$\begin{cases} \alpha_{32}^{\text{eff}} = P_{32}\alpha_3, \\ \alpha_{31}^{\text{eff}} = P_{31}\alpha_3, \\ \alpha_{21}^{\text{eff}} = \alpha_2 + \alpha_3 P_{32}. \end{cases} \quad (7.2.13) \quad \boxed{\text{Eq. ERC-3lev}}$$

Здесь P_{ki} - вероятность того, что атом, находящийся в возбужденном состоянии k , перейдет на уровень i (см. формулы [Eq. CascadeMatr](#) [6.1.7](#)). Из соотношений [\(7.2.13\)](#) [Eq. ERC-3lev](#) можно сделать вывод, что эффективный коэффициент рекомбинации определяется как вкладом рекомбинации на верхний уровень перехода, с которого происходит рассматриваемый переход, так и частичным вкладом рекомбинаций на более высокие уровни.

Эффективные коэффициенты рекомбинации для линий ионов С, N и О, используемые для вычисления интенсивностей линий в спектрах газовых туманностей и рассчитанные для широкой области значений параметров, даны в каталоге [\[Goody et al., 1997\]](#) [\[137\]](#).

7.2.2 Образование линий при столкновениях с электронами

[ss.CollMech](#)

Столкновительный механизм является основным для большинства запрещенных и многих разрешенных линий атомов и ионов от водорода до свинца в спектрах газовых туманностей в видимой, ультрафиолетовой (УФ) и инфракрасной (ИК) областях спектра. Уровни атомов и ионов при столкновительном механизме заселяются, главным образом, возбуждениями электронным ударом из основного состояния, хотя столкновительные переходы с возбужденных уровней также могут быть существенны. Протонные столкновения существенны только для переходов между уровнями одного терма.

Уравнения стационарности, определяющие населенности уровней n_k какого либо атома или иона X^{n+} при учете переходов вследствие столкновений с электронами и рекомбинаций иона $X^{(n+1)+}$ имеют вид:

$$\begin{aligned} & n_k \left\{ \sum_{i=1}^{k-1} A_{ki} + n_e \sum_{i \neq k}^N q_{ki} + n_e q_{kc} \right\} \\ & - \sum_{j=k+1}^N n_j A_{jk} - n_e \sum_{j \neq k}^N n_j q_{jk} = n_e n^+ \alpha_k. \end{aligned} \quad (7.2.14) \quad \boxed{\text{Eq. CollEqSt}}$$

Здесь N - число учитываемых уровней иона X^{n+} , q_{jk} и q_{kj} - скорости возбуждения и деактивации электронным ударом, q_{kc} - скорость ионизации электронным ударом с уровня k , α_k - скорость рекомбинации на уровень k , n^+ - концентрация ионов $X^{(n+1)+}$.

Вклад фоторекомбинации в заселение верхних уровней переходов для запрещенных и резонансных линий большинства атомов и ионов,

линии которых наблюдаются в спектрах разреженной астрофизической плазмы, не превышает 5-10 %. Для ряда подобных линий может быть существенным вклад диэлектронной рекомбинации.

Уравнения (7.2.14) можно записать в компактном матричном представлении:

$$\mathcal{T}\mathbf{n} = n_e n^+ \boldsymbol{\alpha}, \quad (7.2.15) \quad \boxed{\text{Eq.CollEqStMatr}}$$

где $\mathbf{n} = \begin{pmatrix} n_1 \\ \dots \\ n_N \end{pmatrix}$ – вектор населённостей уровней атома, а $\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \dots \\ \alpha_N \end{pmatrix}$ – вектор скоростей рекомбинации.

Матрица \mathcal{T} имеет вид:

$$\mathcal{T}_{ik} = \begin{cases} -(A_{ki} + n_e q_{ki}), & i < k, \\ \sum_{i=1}^{k-1} A_{ki} + n_e \sum_{i \neq k}^N q_{ki} + n_e q_{kc}, & i = k, \\ -n_e q_{ki}, & i > k. \end{cases} \quad (7.2.16) \quad \boxed{\text{Eq.MatrColl}}$$

Нахождение населённостей уровней из решения системы уравнений (7.2.14) ^{Eq.CollEqSt} требует знания концентрации иона $X^{(n+1)+}$ и, тем самым, предварительного решения уравнений ионизационного равновесия для атома X .

Для резонансных линий и линий переходов с низковозбуждённых уровней ионов астрофизически значимых элементов вкладом рекомбинации в населенности уровней, возбуждаемых электронным ударом, можно пренебречь и положить правую часть системы уравнений (7.2.14) ^{Eq.CollEqSt} равной нулю. Также обычно можно пренебречь скоростями ударной ионизации q_{kc} по сравнению со скоростями возбуждения уровня и скоростями радиационных переходов с уровней ^{Eq.CollEqSt}

В этом случае уравнения (7.2.14) ^{Eq.CollEqSt} определяют только относительные населенности уровней $n_k/n(X^{n+})$. Положив правую часть системы уравнений (7.2.15) ^{Eq.CollEqStMatr} равной нулевому вектору $\begin{pmatrix} 0 \\ \dots \\ 0 \end{pmatrix}$ и перейдя к относительным населенностям уровней $x_i = n_i/n_1$, представим уравнения для величин x_i в следующем виде:

$$\mathcal{S}\mathbf{x} = n_e \mathbf{R}, \quad (7.2.17) \quad \boxed{\text{Eq.CollEqStMatrNorm}}$$

где $\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_2 \\ \dots \\ x_N \end{pmatrix}$ – вектор относительных населённостей уровней атома.

Матрица \mathcal{S} имеет элементы S_{ik} с $i = 2, \dots, N$, $k = 2, \dots, N$ и может быть представлена в следующем виде:

$$S_{ik} = \begin{cases} -(A_{ki} + n_e q_{ki}), & i < k, \\ \sum_{i=1}^{k-1} A_{ki} + n_e \sum_{i \neq k}^N q_{ki}, & i = k, \\ -n_e q_{ki}, & i > k. \end{cases} \quad (7.2.18) \quad \boxed{\text{Eq.MatrCollNorm}}$$

Правая часть уравнений (Eq.CollEqStMatrNorm) (7.2.17) $\mathbf{R} = \begin{pmatrix} q_{12} \\ \dots \\ q_{1N} \end{pmatrix}$ представляет собой вектор

скоростей возбуждения электронным ударом с первого уровня.

Уравнение (Eq.MatrCollNorm) (7.2.18) неоднократно решалось исследователями, начиная с Амбарцумяна [Ambar1933a] [18], который получил его приближенное решение в случае атома с тремя дискретными уровнями. Точное решение для трехуровневого атома дано в [Sobolev1988] [122]. Аналитическое решение для атома или иона с пятью уровнями приведено в статье [KafatosLynch1980] [51]. При учете большего числа уровней решения уравнений стационарности получают численно.

Для получения абсолютных значений населённостей необходимо задание величины $n(X^{m+})$ – полной концентрации иона X^{m+} , а система уравнений (Eq.CollEqSt) (7.2.14) должна быть дополнена уравнением:

$$\sum_k n_k = n(X^{n+}), \quad (7.2.19)$$

Eq.BalLevPopol

Для линий, возбуждаемых электронным ударом, эффективный коэффициент образования линии $k \rightarrow i$ при столкновениях с электронами r_{ki}^{coll} согласно общему соотношению (Eq.eff_exc_coef) (7.2.5) определен таким образом, что величина $(4\pi)^{-1} n_e n(X^{n+}) q_{ki}^{\text{coll}}$ равна коэффициенту излучения в линии.

Коэффициент r_{ki}^{coll} называют также эффективным коэффициентом столкновительного возбуждения в линии $k \rightarrow i$ и обозначают q_{ki}^{eff} . Величина q_{ki}^{eff} имеет такую же размерность ($\text{см}^3 \text{с}^{-1}$), как и q_{1k} – скорость возбуждения электронным ударом верхнего уровня перехода $k \rightarrow i$.

Наиболее просто определить величину эффективного коэффициента столкновительного возбуждения для простейшего случая двухуровневого атома. Предполагая, что полная концентрация рассматриваемого иона $n(X^{n+}) = n_1 + n_2$, где n_1 и n_2 – населенности первого и второго уровней соответственно, и решая уравнение (Eq.CollEqStMatr) (7.2.15) при пренебрежении рекомбинационным заселением уровней, легко получить следующее соотношение:

$$q_{21}^{\text{eff}} = q_{12} \frac{A_{21}}{A_{21} + n_e q_{21}} \left(1 + \frac{n_e q_{12}}{A_{21} + n_e q_{21}} \right)^{-1}. \quad (7.2.20)$$

Eq.qeff-2levAtom

При малых значениях n_e , при которых скорости возбуждения $n_e q_{12} \ll A_{21}$ и скорости деактивации $n_e q_{21} \ll A_{21}$, где A_{21} – вероятность радиационного перехода $2 \rightarrow 1$, эффективный коэффициент возбуждения $q_{21}^{\text{eff}} \approx q_{12}$. При больших значениях электронной концентрации следует учитывать приведенные в формуле (Eq.qeff-2levAtom) (7.2.20) поправочные множители. Первый из них (вероятность выживания кванта в линии) учитывает гибель фотонов в резонансной линии за счет деактиваций второго уровня электронным ударом, тогда как второй – уменьшение доли атомов, находящихся на первом уровне с ростом n_e и T_e за счет ударных возбуждений $1 \rightarrow 2$.

В общем случае многоуровневого атома зависимость эффективных коэффициентов столкновительного возбуждения q_{ki}^{eff} произвольной линии $k \rightarrow i$ от температуры и электронной концентрации имеет тот же характер, что и для двухуровневого атома, причем вместо скорости возбуждения второго уровня q_{12} следует использовать скорость возбуждения уровня $k - q_{1k}$.

Эффективные коэффициенты столкновительного возбуждения зависят от температуры главным образом через множитель q_{1k} и являются быстро возрастающими функциями температуры, тогда как их зависимость от n_e является достаточно слабой. Для иллюстрации приведем на Рис. 7.3 зависимость $q_{ki}^{\text{eff}} \equiv q_{ki}^{\text{eff}}(T_e, n_e)$ от n_e для мультиплета СШ $\lambda 1907 (2s^2 1S - 2s2p^3 P^\circ)$ при $T_e = 10^4$ К. Из рисунка видно, что при типичных для туманностей низких электронных концентрациях ($n_e \leq 10^5$ К) величина $q_{ki}^{\text{eff}}(\lambda 1907)$ практически не зависит от n_e в соответствии с формулой (7.2.20).

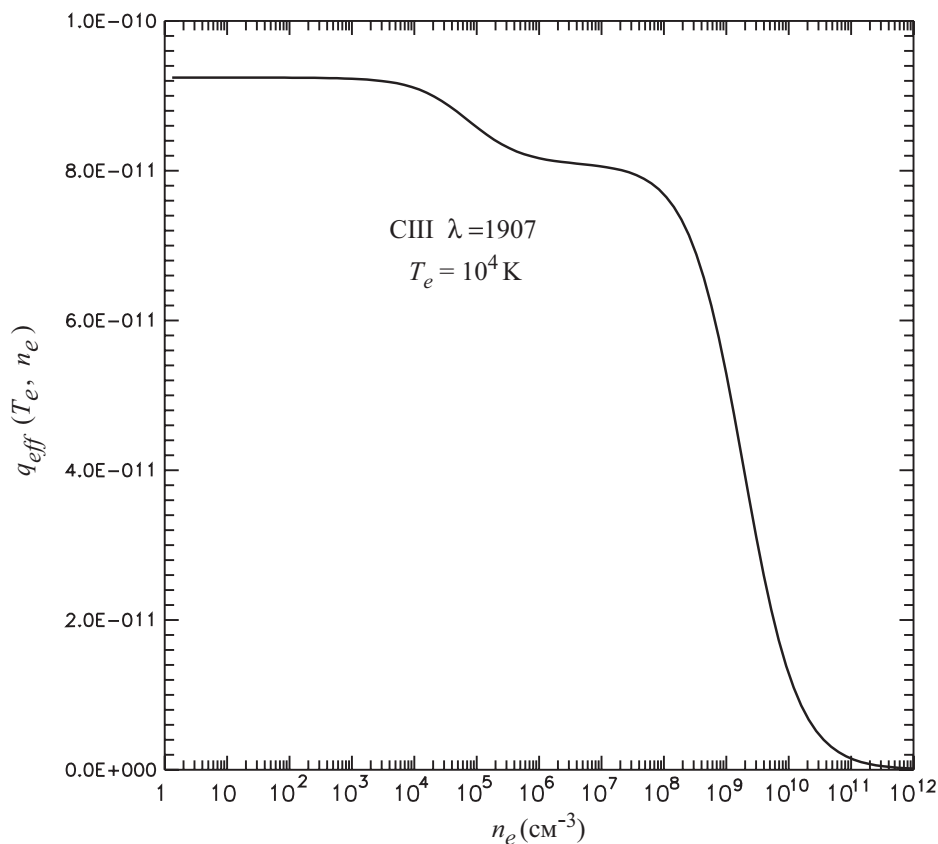


Рис. 7.3. Эффективный коэффициент столкновительного возбуждения $q_{ki}^{\text{eff}}(T_e, n_e)$ УФ дублета СШ $\lambda 1907 (2s^2 1S - 2s2p^3 P^\circ)$ в зависимости от n_e .

Fig.CIII1907EfCfClEx.eps

ss.SelMech

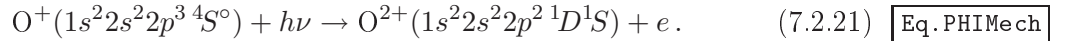
7.2.3 Селективные механизмы образования линий

Рекомбинационный и столкновительный механизмы являются основными для разреженной астрофизической плазмы и, в частности, для газовых туманностей. Интенсивности большинства линий в спектре определяются именно этими механизмами. Однако ряд линий в спектрах усилен по сравнению с их интенсивностью, определяемой в рамках только этих двух механизмов. Ответственными за такое усиления являются *селективные* механизмы, усиливающие не все, а только определенные линии в спектре.

Фотоионизационный механизм

Фотоионизация атомов и ионов может происходить при фотоотрыве не только внешних электронов, но и электронов внутренних электронных оболочек. В этом случае образуется ион более высокой степени ионизации в возбужденном состоянии. В сильном внешнем поле ионизирующего излучения линии переходов с этого состояния будут селективно усилены. Схема образования эмиссионных линий фотоионизационным механизмом проиллюстрирована на Рис. [Fig.SchPhiMech](#) 7.4.

Рассмотрим, например, процесс фотоионизации иона O^+ с отрывом электрона внешней оболочки $2p^3$:



В этом процессе образуется ион O^{2+} в возбужденных состояниях $2p^2 \ ^1D_2$ и $2p^2 \ ^1S_0$. Переходы из состояния $2p^2 \ ^1D_2$ вниз на основное состояние $2p^2 \ ^3P$ дают линии небулярного дублета ОIII $\lambda(4959 + 5007) \text{ \AA}$, а переходы с состояния $2p^2 \ ^1S_0$ приводят к излучению фотонов в авроральной линии ОIII $\lambda 4363 \text{ \AA}$ и УФ линиях ОIII $\lambda(2321 + 2331) \text{ \AA}$, наблюдаемых в спектре газовых туманностей, оболочек новых звезд и многих других объектов. Оценки показывают, что при $T_e < 7 \cdot 10^3 \text{ K}$ фотоионизационный механизм дает основной вклад в интенсивность линий ОIII $\lambda(4959 + 5007) \text{ \AA}$. При больших температурах основной вклад дает возбуждение электронным ударом.

Используя соотношение [Eq.eff_exc_coeff](#) (7.2.5), определим эффективный коэффициент возбуждения линии $k \rightarrow i$ в результате фотоионизационного механизма r_{ki}^{phi} :

$$4\pi\varepsilon_{ki} = n_e n(X) r_{ki}^{\text{phi}} h\nu_{ik}, \quad (7.2.22) \quad \text{Eq.r-ph}$$

где ε_{ki} — коэффициент излучения в линии $k \rightarrow i$ в результате действия фотоионизационного механизма, $n(X)$ — полная концентрация атома (иона) X, $h\nu_{ik}$ — энергия перехода.

Пусть в результате фотоионизации атома (иона) X могут образовываться N возбужденных состояний иона X^+ с населённостями n_j^+

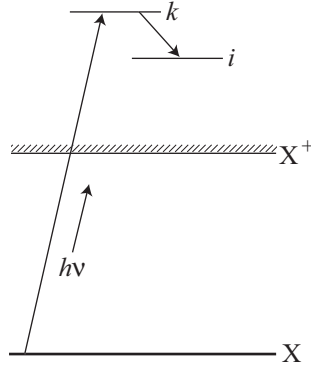


Рис. 7.4. Схема образования эмиссионных линий при фотоотрыве электронов внутренних оболочек.

Fig.SchPhiMech

($j = 1, \dots, N$). Уравнения стационарности, определяющие эти населенности, имеют вид:

$$n_k^+ \sum_{j < k} A_{kj} - \sum_{j = k+1}^N n_j^+ A_{jk} = n_1 W B_k^{\text{phi}}. \quad (7.2.23)$$

Eq.ph-Stat.Eq

Эти уравнения имеют тот же вид, что и уравнения (7.2.10) для населенностей уровней при их рекомбинационном заселении с заменой правой

части на вектор $\{n(X) W \mathbf{B}^{\text{phi}}\} = n(X) W \begin{pmatrix} B_1^{\text{phi}} \\ \dots \\ B_N^{\text{phi}} \end{pmatrix}$, где W – коэффициент

дилуции ионизирующего излучения, а B_k^{phi} – скорость фотоионизации атома (иона) X с образованием возбужденного состояния k иона X^+ , т.е. величина $n(X) W B_k^{\text{phi}}$ равна числу актов фотоионизации в 1 см^3 за 1 с с образованием состояния k .

Решение системы уравнений (7.2.23) находится стандартными методами теории рекомбинационных спектров (см. пункт 7.2.1).

В Табл. 7.1 приведены рассчитанные с использованием уравнений (7.2.23)

вклады различных механизмов возбуждения в интенсивность эмиссионных линий ряда ионов в ионизационной модели газовой туманности [42]

со следующими параметрами: $T_* = 50000 \text{ К}$ – эффективная температура возбуждающей звезды, $L_c = 10^{39} \text{ эрг с}^{-3}$ – светимость возбуждающей звезды за лаймановским пределом, $n_H = 10^3 \text{ см}^{-3}$ – концентрация атомов водорода, $R_1 = 10^{16} \text{ см}$ – внутренний радиус туманности.

При столкновениях атомов (ионов) с рентгеновскими квантами ($h\nu = E \geq 0.1 \text{ кэВ}$) может произойти отрыв электронов внутренней K ($1s^2$) оболочки. Образующиеся при поглощении рентгеновского кванта автоионизационные состояния либо стабилизируются при испускании рентгеновского K_α кванта, либо происходит автоионизация и формируется

возбужденное состояние иона большей кратности ионизации. Механизм образования излучения в линиях при фотоотрыве электронов внутренних оболочек рассмотрен в работе [9].

Для иллюстрации рассмотрим столкновения нейтрального кислорода с квантами рентгеновского излучения с энергией $h\nu > 0.5$ кэВ. Такие столкновения приводят к ионизации нейтрального кислорода: $O + h\nu \rightarrow O^+(1s2s^22p^4) + e$ и образованию автоионизационного состояния иона O^+ с вакансией в K оболочке. Эта вакансия может заполняться при безызлучательном переходе $2p \rightarrow 1s$, причем избыток энергии идет на удаление электрона $2s$ или $2p$ оболочек. Процесс ионизации атома в возбужденном автоионизационном состоянии называется процессом Оже. Для иона O^+ процесс Оже приводит к образованию возбужденных состояний $1s^22s^22p^2\ ^1S, ^1D$ или $1s^22p^4\ ^1S, ^1D, ^3D$ иона O^{2+} .

Распад первой группы состояний дает излучение в запрещенных линиях [ОIII] $\lambda\lambda$ 4363, 4959, 5007, 2321, 2331 и др. и приводит к увеличению интенсивностей этих линий в спектрах газовых туманностей низкой степени возбуждения. Распад состояний второй группы приводит к излучению в УФ линиях переходов $2s2p^3 - 2p^4$ с длинами волн в интервале $\lambda\lambda$ 600 – 1150 Å.

Список линий спектров газовых туманностей, в интенсивности которых дает существенный вклад процесс Оже, и соотношения для вычисления эффективных коэффициентов возбуждения уровней даны в статье [9].

В Табл. 7.2 приведены рассчитанные в указанной статье критические значения электронных температур $T_{кр}$, такие что при $T_e < T_{кр}$ в формировании линий в спектрах газовых туманностей доминирует возбуждение в результате процесса Оже, а при $T_e > T_{кр}$ преобладает возбуждение электронным ударом.

Флуоресцентное возбуждение и возбуждение линий при перезарядке

В условиях газовых туманностей атомы и ионы находятся преимущественно в основном состоянии. Если интенсивность поля излучения

Таблица 7.1. Интенсивности эмиссионных линий в модели газовой туманности [42].

Ион	$\lambda(\text{Å})$	Полный поток	Вклады различных механизмов в интенсивность линии		
			Столкновительный	Рекомбинационный	Фотоионизационный
HI	4861	100	-	100%	-
OII	3727	64.5	99.7%	-	0.3%
SIII	1907	8.8	42%	14%	44%
SIII	1909	1.6	88%	-	12%

Таблица 7.2. Критические значения электронных температур $T_{кр}$

Ион	$\lambda(\text{Å})$	Переход	$T_{кр}$
CIII]*	1907+1909	$2s^2\ ^1S - 2s2p\ ^3P^o$	7400
CIV	1548	$2s^2\ S - 2p^2\ P^o$	9500
OVI	1035	$2s^2\ S - 2p^2\ P^o$	14000
NeVI]	1007	$2p^2\ P^o - 2p^2\ ^4P$	11000

*Знак] после спектроскопического символа иона означает, что линия (линии) иона является интеркомбинационной

tableTcrit

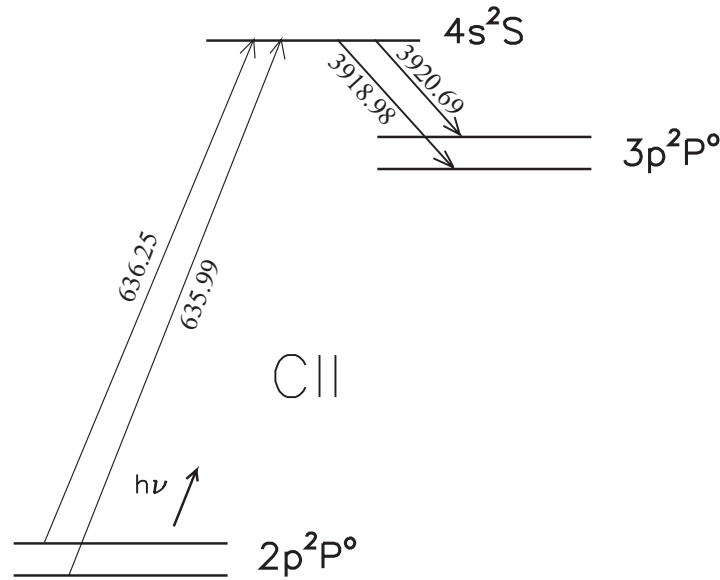


Рис. 7.5. Схема образования эмиссионных линий в результате нерезонансной флуоресценции.

Fig.SchNeResFl

в частотах линий переходов на основной уровень достаточно велика, то фотовозбуждения основного состояния в значительной степени определяют населенность уровней, связанных с основным состоянием разрешенными переходами. Усиление линий при фотовозбуждениях основного состояния называется *флуоресцентным механизмом* образования линий. Приближенные оценки эффективности этого механизма выполнены в работе [44].

По типу возбуждающего излучения можно разделить флуоресценцию на *нерезонансную* и *резонансную*. При нерезонансной флуоресценции фотовозбуждения производятся излучением источника ионизирующего излучения (центральной звезды туманности) в непрерывном спектре. На Рис. 7.5 показана схема образования эмиссионных линий при флуоресцентном возбуждения. В спектрах газовых туманностей нерезонанс-

Fig.SchNeResFl

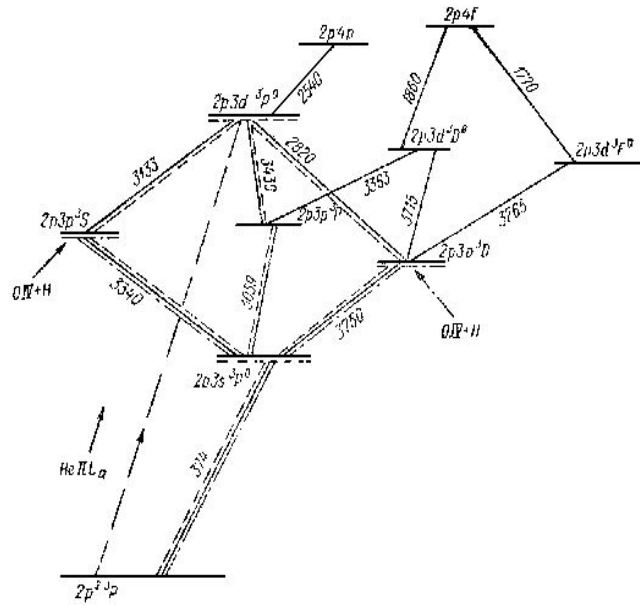


Рис. 7.6. Схема уровней иона O^{2+} и средние по мультиплетам длины волн переходов. Сплошными линиями показаны рекомбинационные линии, штриховыми – боуэновские линии, штрих-пунктирными – линии, образуемые при перезарядке $O^{3+} + H$. Показано заселение верхнего уровня боуэновских переходов $2p3d^3P^o$ квантами в резонансной линии L_{α} He^+ . Стрелками отмечены уровни, для которых существует вклад перезарядки $O^{2+} + H \rightarrow O^{2+} + H^+$ в населённости.

Fig. 0111SchLev

ная флуоресценция определяет интенсивность линий CII λ (3919+3921) и CIV λ (5801+5812).

Таблица 7.3. Теоретические интенсивности линий O^{2+} , для которых существует вклад перезарядки и Боуэновского механизма (I^{theor}), в сравнении с наблюдаемыми в спектре туманности NGC 7662 (I^{obs}) в шкале $I(H_{\beta}) = 100$

tbl. 0111RecBowChTr

$\lambda(\text{\AA})$	I^{theor}			I^{obs}
	Перезарядка	Боуэновский механизм	Суммарная интенсивность	NGC 7662
3757	0.44	0.04	0.48	0.8 ± 0.4
3774	0.34	0.03	0.37	0.4 ± 0.2
3341	0.15	22	22	22 ± 5
3312	0.09	13	13	12 ± 3
3760	0.8	5.9	6.7	7 ± 2
3755	0.6	0.8	1.4	2 ± 1

Нерезонансная флуоресценция действует для всех атомов и ионов с подходящей структурой уровней. В то же время для иона O^{2+} суще-

ствуется специфический механизм возбуждения уровней — резонансная флуоресценция (боуэновский механизм) [25]. Действие этого механизма основано на близости длин волн резонансной линии HeII $\lambda 304\text{\AA}$ и линий мультиплета OIII $2p^2\ ^3P - 2p3d\ ^3P^\circ$. Уровни терма $2p3d\ ^3P^\circ$ O²⁺ заселяются при рекомбинации иона O³⁺ и последующих каскадных радиационных переходах. Поглощение фотонов в резонансной линии He⁺ ионами O²⁺ в основном состоянии $2p^2\ ^3P$ приводит к дополнительному заселению уровней $2p3d\ ^3P_{1,2}^\circ$. Линии переходов с этих уровней и с уровней, связанных с ними каскадными радиационными переходами, оказываются значительно усиленными в спектре астрофизических источников, содержащих достаточно много ионизованного гелия, в частности, в спектрах планетарных туманностей.

Для иллюстрации на Рис. 7.6 представлена схема триплетных термов иона OIII и отмечены линии, заселяемые боуэновским механизмом. Дополнительным источником возбуждения линий может быть процесс перезарядки. Например, перезарядка $O^{3+} + H \rightarrow O^{2+}(2p3p\ ^3S\ ^1,^3D) + H^+ + \Delta E$ происходит с образованием иона O²⁺ в возбужденных состояниях. Уровни иона O²⁺, для которых существенен вклад перезарядки $O^{3+} + H$, отмечены на Рис. 7.6 стрелками.

В Табл. 7.3 приведены относительные вклады перезарядки и боуэновского механизма в интенсивности линий O²⁺ в спектре яркой туманности NGC 7662, оцененные нами на основании данных работы [37].

7.3 Излучение астрофизической плазмы

7.3.1 Мера эмиссии плазмы

Излучение плазмы связано с образованием атомов или ионов в возбужденных состояниях. Интенсивность излучения пропорциональна скорости соответствующего элементарного процесса, приводящего к образованию атома в возбужденном состоянии, концентрации атомов (ионов) и концентрации сталкивающихся с атомами частиц. Таким образом энергия, излучаемая единичным объёмом плазмы в единичном телесном угле (коэффициент излучения ε_ν) в какой-либо линии или интервале частот дискретного спектра ($\nu - \nu + d\nu$), квадратично зависят от электронной концентрации (или полной концентрации среды).

В случае однородной плазмы, температура T и концентрация атомов n в которой одинаковы во всем ее объеме, энергию, излучаемую плазмой в линии $k \rightarrow i$ в единичном телесном угле, можно представить в виде:

$$E_{ki} = 4\pi G_{ki}(T, n)EM. \quad (7.3.1) \quad \text{Eq. EM/dnu}$$

Величина

$$EM = n^2V, \quad [\text{cm}^{-3}], \quad (7.3.2) \quad \text{Eq. EM/global}$$

где V — объем излучающей плазмы, называется *мерой эмиссии* плазмы (см., например, [54]). Используя определение коэффициента излучения $\varepsilon_{ki} = \varepsilon_{ki}(T, n)$ (формула (7.2.5)), можно выразить функцию $G_{ki}(T, n)$ через коэффициент излучения:

$$G_{ki}(T, n) = \frac{\varepsilon_{ki}(T, n)}{n^2}. \quad (7.3.3) \quad \text{Eq.Gki-epsi}$$

Таким образом функция $G_{ki}(T, n)$ представляет собой коэффициент излучения в линии $k \rightarrow i$, рассчитанный на один атом. Стандартного названия этой величины нет, в ряде работ используется термин *функция вклада* (contribution function [54]). В дальнейшем функцию $G_{ki}(T, n)$ будем называть *излучательной способностью* плазмы в линии $k \rightarrow i$.

Используются и другие определения меры эмиссии. В работе [145] мера эмиссии определена следующим образом:

$$EM^* = n_e n_H V, \quad (7.3.4) \quad \text{Eq.EMglobalNeNH}$$

где n_H — концентрация атомов водорода, а согласно, например, [35]

$$EM^{**} = n_e^2 V. \quad (7.3.5) \quad \text{Eq.EMglobalNeNe}$$

В астрофизических объектах водород и гелий составляют свыше 99% по числу атомов, поэтому различные определения меры эмиссии дают близкие величины. Легко получить, что

$$EM^* = A_H EM, \quad EM^{**} = \mu_e^2 EM. \quad (7.3.6) \quad \text{Eq.EM-compare}$$

Здесь $\mu_e = n_e/n$ — отношение электронной концентрации к полной концентрации атомов в плазме, $A_H = n_H/n$ — относительное содержание атомов водорода в плазме. При солнечном содержании элементов [45] и полной ионизации водорода и гелия $\mu_e \approx 1.2$, $A_H \approx 0.9$.

Изменение определения меры эмиссии влечет за собой и изменение в выражениях для излучательной способности плазмы в линии $G_{ki}(T, n)$:

$$G_{ki}^*(T, n) = \frac{G_{ki}(T, n)}{A_H}, \quad G_{ki}^{**}(T, n) = \frac{G_{ki}(T, n)}{\mu_e^2}. \quad (7.3.7) \quad \text{Eq.Gki-compare}$$

Аналогично случаю излучения в линии, энергия $E_\nu d\nu$, излучаемая объемом плазмы V в непрерывном спектре в интервале частот $(\nu - \nu + d\nu)$ может быть представлена как

$$E_\nu d\nu = G_\nu(T, n) EM d\nu, \quad (7.3.8) \quad \text{Eq.EMline}$$

где $G_\nu(T, n)$ — *излучательная способность* плазмы в частоте ν непрерывного спектра. Для функции $G_\nu(T, n)$ и коэффициента излучения плазмы в частоте ν в непрерывном спектре ε_ν справедливо такое же

соотношение (Eq.Gki-epski (7.3.3)), как и для излучательной способности плазмы в линии.

Если плазма неоднородна, т.е. ее плотность и температура зависят от рассматриваемого объема плазмы, следует учитывать зависимости коэффициентов излучения в непрерывном спектре или в линии от положения излучающего объема: $\varepsilon_{ki}(T) = \varepsilon_{ki}(T(\mathbf{r}))$ или $\varepsilon_{ki}(T, n) = \varepsilon_{ki}(T(\mathbf{r}), n(\mathbf{r}))$, где \mathbf{r} – радиус вектор рассматриваемой области плазмы. В этом случае от глобальной меры эмиссии плазмы EM следует перейти к *дифференциальной мере эмиссии*, зависящей от функции распределения температуры и плотности плазмы в излучающей среде.

7.3.2 Дифференциальная мера эмиссии плазмы

sss.DEM

Распределение неоднородной плазмы по температуре во всем излучающем объеме V часто описывается в терминах *дифференциальной меры эмиссии* или меры эмиссии, дифференциальной по температуре [54]. KlimchukCargill2001

Для определения дифференциальной меры эмиссии рассмотрим малый интервал температуры $T^0 \leq T \leq T^0 + \Delta T$. Пусть величина

$$\Delta EM(T^0) = \int_{V(\Delta T)} n^2 dV. \quad (7.3.9) \quad \text{Eq.DeltaEM(Te)}$$

В формуле (Eq.DeltaEM(Te) (7.3.9)) интегрирование выполняется только по той части полного объема плазмы V , температуры в которой находятся в интервале $T^0 \leq T \leq T^0 + \Delta T$. Дифференциальная мера эмиссии плазмы $\zeta(T)$ определяется как предел

$$\zeta(T) = \lim_{\Delta T \rightarrow 0} \frac{\Delta EM(T)}{\Delta T}, \quad [\text{cm}^{-3} \text{K}^{-1}]. \quad (7.3.10) \quad \text{Eq.dEM(Te)}$$

Иными словами, дифференциальная мера эмиссии плазмы $\zeta(T)$ определена таким образом, что произведение $\zeta(T) dT$ определяет, какая доля полной меры эмиссии плазмы соответствуют атомам и ионам, находящимся при температурах от T до $T + dT$. При использовании для определения меры эмиссии соотношений (7.3.4) и (7.3.5) соответствующим образом изменяются и определения дифференциальной меры эмиссии $\zeta(T)$. Eq.EMGlobalNeEqGlobalNe

Поток излучения в линии $k \rightarrow i$ от объекта, находящегося на расстоянии d от наблюдателя может быть выражен через дифференциальную меру эмиссии следующим образом:

$$F_{ki} = \frac{1}{4\pi d^2} \int_{T^1}^{T^2} G_{ki}(T, n) \zeta(T) dT. \quad (7.3.11) \quad \text{Eq.Flux-DEM}$$

Здесь T^1 и T^2 — пределы изменения температуры в рассматриваемом объеме плазмы. Аналогичным образом может быть выражен поток излучения в частотах непрерывного спектра температурно неоднородной плазмы.

Излучательная способность плазмы в линии $G_{ki}(T, n)$ зависит, главным образом, от температуры плазмы, зависимость же излучательной способности от плотности плазмы n значительно слабее. Тем не менее, для сильно неоднородной плазмы эта зависимость может быть существенной для линий, чувствительных к вариациям плотности плазмы.

Для такой плазмы следует перейти к распределению плазмы по температуре и концентрации атомов во всем излучающем объеме V , которое может описываться в терминах *двойной дифференциальной меры эмиссии* $\xi(T, n)$ или меры эмиссии, дифференциальной по температуре и плотности [49, 54].

Двойная дифференциальная мера эмиссии плазмы $\xi(T, n)$ определяет, какая доля атомов и ионов плазмы находится при температуре T и имеет полную концентрации n .

Поток излучения в линии $k \rightarrow i$ от объекта, находящегося на расстоянии d от наблюдателя, может быть выражен через двойную дифференциальную меру эмиссии следующим образом:

$$F_{ki} = \frac{1}{4\pi d^2} \int_{T^1}^{T^2} \int_{n^1}^{n^2} G_{ki}(T, n) \xi(T, n) dT dn, \quad (7.3.12) \quad \text{Eq. Flux-DDEM}$$

где T^1 и T^2 — пределы изменения электронной температуры во всем излучающем в рассматриваемой линии объеме плазмы, а n^1 и n^2 — пределы изменения концентрации плазмы в данном объеме.

7.3.3 Рентгеновские спектры звезд

ss.XRayStellSp

Присутствие в спектрах небесных объектов излучения в рентгеновском диапазоне говорит о наличии в них горячей плазмы с температурой $T > 10^6$ К. Рентгеновская астрономия насчитывает уже свыше 40 лет и добилась за это время впечатляющих результатов.

Для иллюстрации этих достижений на Рис. 7.7 показан спектр звезды солнечного типа — Капеллы, полученный с помощью рентгеновского спутника *Эйнштейн* [65]. Показаны положения рентгеновских линий ионов O^{7+} , Ne^{9+} , Fe^{16+} , Fe^{17+} и Fe^{20+} , которые ранее наблюдались в спектре солнечной короны.

Однако спектральное разрешение и чувствительность рентгеновских телескопов 70-х — начала 90-х годов были малы, поэтому изучение рентгеновских линий в спектрах небесных объектов, за исключением Солнца, было затруднено. Только с конца 90-х годов в связи с запуском рентгеновских спутников Chandra и XMM появилась возможность изучать

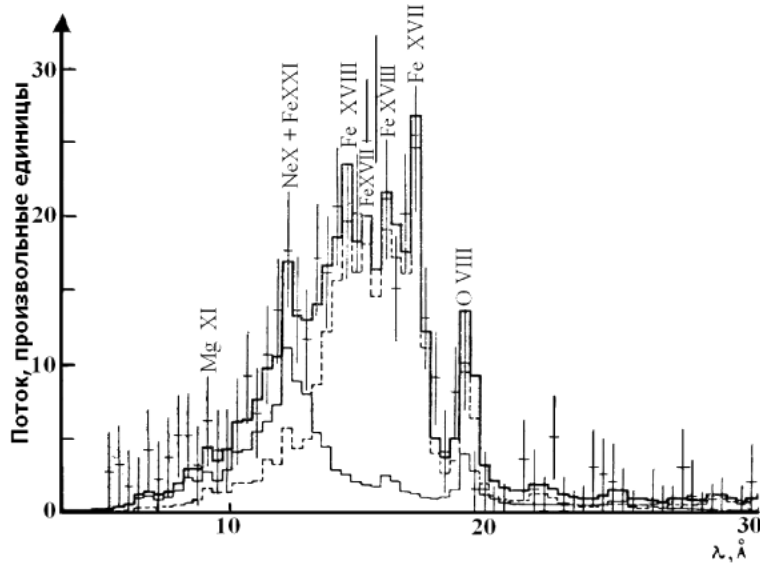


Рис. 7.7. Рентгеновский спектр Капеллы в области 5-30 Å. Вертикальные линии — ошибки наблюдения; тонкой сплошной линией и пунктиром показаны теоретические спектры компонентов с температурами $5 \cdot 10^6$ К и 10^7 К соответственно; жирная сплошная линия — полный теоретический спектр в двухкомпонентной модели короны [65].

Fig.Sp_Capella01d

рентгеновские спектры звезд, галактик и других объектов с высоким для этой области спектра спектральным разрешением $\lambda/\Delta\lambda \leq 1000$.

Недавние наблюдения рентгеновских спектров звезд с помощью рентгеновских телескопов этих спутников показали присутствие в спектрах звезд в области от 1 до 100 Å десятков линий высокоионизованных атомов вплоть до Fe^{25+} [Cohen-03, Kahn01, Mewe03, WC00 [36, 52, 64, 96]]. Высокое спектральное разрешение рентгеновских спектрографов спутников Chandra и XMM позволило детально исследовать профили рентгеновских линий в спектрах звезд.

Для иллюстрации высокого качества спектров на Рис. 7.8 представлен рентгеновский спектр звезды ζ Ori спектрального класса O4Ief, полученный на спутнике Chandra.

При анализе свечения астрофизических объектов в рентгеновском диапазоне используется понятие дифференциальной меры эмиссии, определенной в пункте 7.3.2. Чаще всего дифференциальная мера эмиссии описывается в многокомпонентной модели, в которой предполагается, что излучающая плазма состоит из нескольких компонентов с различными температурами. В этом случае дифференциальная мера эмиссии может быть описана следующим выражением:

$$\zeta(T) = \sum_{k=1}^{N_{\text{comp}}} EM^{(k)} \delta(T - T^k), \quad (7.3.13) \quad \text{Eq.DEM-multi-comp}$$

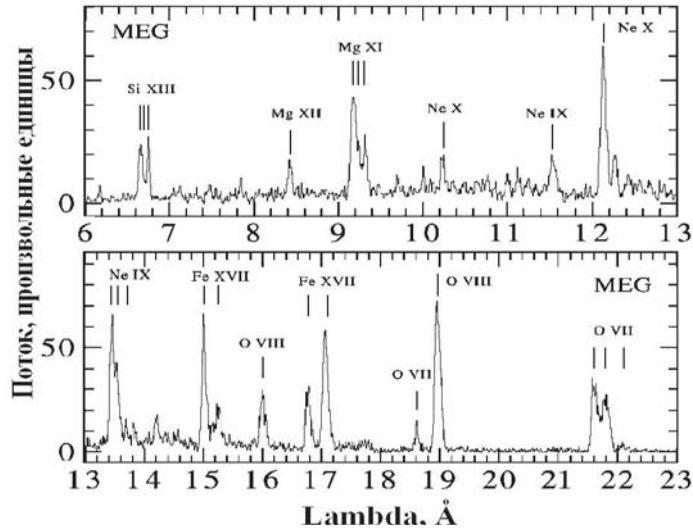


Рис. 7.8. Рентгеновский спектр звезды ζ Ori [WC00].

Fig.ZetaOriXRay

где T^k — температура k -го компонента плазмы, а $EM^{(k)}$ — его мера эмиссии, N_{comp} — число компонентов.

Наблюдения Капеллы, полученные с помощью космической обсерватории Эйнштейн (см. Рис. 7.7), наилучшим образом могут быть описаны в двухкомпонентной корональной модели с температурами компонентов $T_1 = 5 \cdot 10^6$ К и $T_2 = 10^7$ К.

В 2001 г. были выполнены новые наблюдения Капеллы с использованием рентгеновского телескопа RGS на спутнике XMM [Audard2001]. Был получен спектр высокого разрешения звезды в области $\lambda\lambda 4 - 40$ Å. Участок спектра звезды в интервале длин волн $\lambda\lambda 20 - 24$ Å показан на Рис. 7.9. Сравнение с ранее полученным спектром Капеллы (см. Рис. 7.7) показывает, что увеличение разрешающей способности рентгеновского спектрографа, установленного на спутнике XMM, привело к разрешению линий мультиплета $1s - 2p$ Не-подобного иона O^{6+} . Использование линий данного мультиплета для диагностики горячей плазмы в атмосферах звезд описано в пункте 7.5.3.

Рентгеновский спектр Капеллы может быть описан в многокомпонентной модели горячей плазмы с распределением меры эмиссии (используется определение (7.3.4)), представленной на Рис. 7.10.

ss.SpGasNeb

7.3.4 Спектры газовых туманностей

Идеальными объектами для анализа свечения астрофизической плазмы являются газовые туманности. Для этих объектов важен учет флуктуаций температуры и плотности излучающей плазмы в туманностях. Рассмотрим свечение неоднородных туманностей согласно работе [Khotygin00].

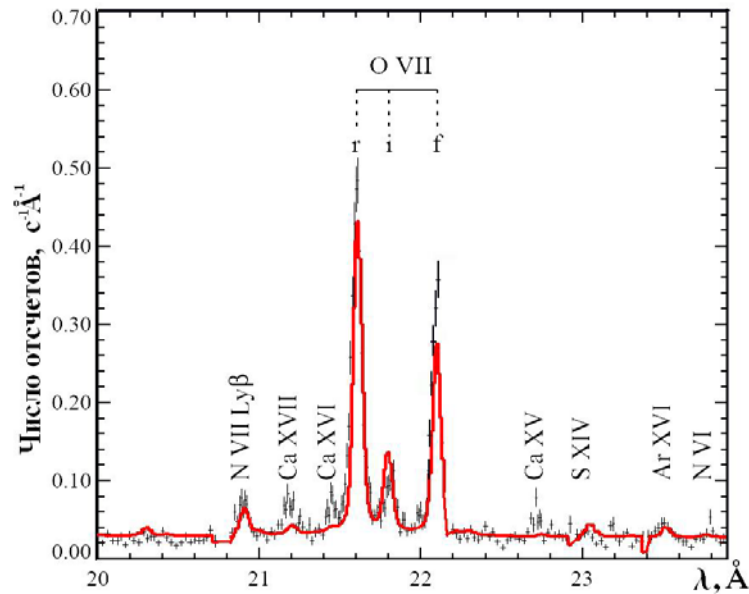


Рис. 7.9. Рентгеновский спектр Капеллы в области 20-24 Å по наблюдениям на спутнике Chandra [21] (тонкая сплошная линия). Жирной линией показан теоретический спектр звезды, рассчитанный для корональной модели с дифференциальной мерой эмиссии, показанной на Рис. 7.10.

Fig.Sp_Capella

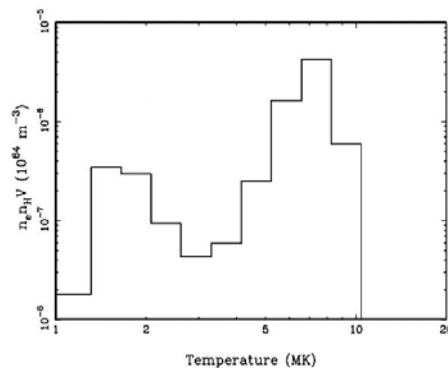


Рис. 7.10. Распределение дифференциальной меры эмиссии в многокомпонентной модели короны Капеллы по [21].

Fig.DEM_Capella

Интенсивности линий в спектрах разреженной плазмы с флуктуациями температуры

В спектрах газовых туманностей наиболее интенсивны возбуждаемые электронным ударом интеркомбинационные и запрещенные линии ионов C, N, O, Ne, Ar и других элементов (столкновительные линии), а также рекомбинационные линии ионов водорода, нейтрального и ионизованного гелия. Туманности прозрачны в таких линиях, поэтому полная

энергия, излучаемая туманностью в какой-либо рекомбинационной или столкновительной линии $k \rightarrow i$ иона X:

$$E_{ki} = h \nu_{ki} \int_V n_e n_F r_{ki}^{\text{eff}} dV. \quad (7.3.14) \quad \boxed{\text{Eq. Eki-PN}}$$

Здесь ν_{ki} — центральная частота линии, V — полный объем газа, излучающего в данной линии, $n_F = n(X_F)$ — концентрация иона X_F , ответственного за образование линии $k \rightarrow i$. Для столкновительных линий $X_F \equiv X$, тогда как для рекомбинационных линий $X_F \equiv X^+$. Величина r_{ki}^{eff} эффективный коэффициент возбуждения линии, определенный соотношением [\(7.2.5\)](#). Eq. eff. exc. coeff

Аналогично дифференциальной мере эмиссии плазмы $\zeta(T_e)$ можно определить *парциальную дифференциальную меру эмиссии* плазмы $\zeta_F(T_e)$ с помощью соотношения $n_e n_F dV = \zeta_F(T_e) dT_e$, где dV — дифференциал объема, соответствующий газу с температурой в промежутке $(T_e, T_e + dT_e)$. Парциальная дифференциальная мера эмиссии определяет долю атомов или ионов при температурах в интервале $(T_e, T_e + dT_e)$, возбуждение или рекомбинация которых приводит к излучению в линии $k \rightarrow i$ иона X.

Используя определение парциальной дифференциальной меры эмиссии энергию, излучаемую туманностью в линии $k \rightarrow i$, можно записать в виде

$$E_{ki} = h \nu_{ki} \int_{T_e^1}^{T_e^2} \zeta_F(T_e) r_{ki}^{\text{eff}} dT_e. \quad (7.3.15) \quad \boxed{\text{Eq. Eki-PN-DEM}}$$

Значения T_e^1 и T_e^2 — минимальная и максимальная электронные температуры плазмы в туманности.

Полные энергии, излучаемые туманностью в линиях, могут быть использованы для нахождения отношений потоков в соответствующих линиях спектров туманностей (исправленных за межзвездное поглощение). Отношения полных энергий E_{ki}/E_{mn} равно отношению потоков излучения в этих линиях F_{ki}/F_{mn} , регистрируемых наземными инструментами. В том случае, когда наблюдается излучение в линиях, приходящее только от части туманности, отношения потоков могут отличаться от отношений соответствующих полных энергий из-за эффектов рассеяния излучения на пылинках в туманности. Однако если ограничиться линиями ионов, формируемых в областях ионизации CIII-V, NIII-IV, OIII-OVI и т.п., в которых пылинки практически отсутствуют, то указанным эффектом можно пренебречь.

В предположении, что коэффициент r_{ki}^{eff} относительно мало меняется внутри объема, излучающего в рассматриваемой линии, он может быть заменен значением $r_{ki}^{\text{eff}}(T_e^0, n_e^0)$, взятым при средних по излучающему объему значениях электронной температуры T_e^0 и электронной кон-

центрации n_e^0 в туманности:

$$E_{ki} \approx E_{ki}^0 = h \nu_{ki} r_{ki}^{\text{eff}}(T_e^0, n_e^0) \int_V n_e n_F dV \approx h \nu_{ki} r_{ki}^{\text{eff}}(T_e^0, n_e^0) n_e^0 N_F, \quad (7.3.16) \quad \boxed{\text{Eq. Eki-Hom}}$$

где N_F - полное число ионов X_F в излучающем объеме. Величина

$$T_e^0 = EM_F^{-1} \int_V T_e n_e n_F dV = EM_F^{-1} \int_{T_e^1}^{T_e^2} T_e \zeta_F(T_e) dT_e. \quad (7.3.17) \quad \boxed{\text{Eq. T0}}$$

Полная парциальная мера эмиссии плазмы

$$EM_F = \int_V n_e n_F dV = \int_{T_e^1}^{T_e^2} \zeta_F(T_e) dT_e \approx n_e^0 N_F. \quad (7.3.18) \quad \boxed{\text{Eq. EM-partsial}}$$

Энергия, излучаемая туманностью в линии $k \rightarrow i$ в предположении, что амплитуда флуктуаций температуры в туманности мала, может быть записана в виде:

$$E_{ki} = E_{ki}^0 (1 + \mu_{tt} \tau^2), \quad (7.3.19) \quad \boxed{\text{Eki0}}$$

где энергия E_{ki}^0 , излучаемая однородной туманностью с $T_e = T_e^0$ определяется выражением (7.3.16), а параметр τ^2 , характеризующий амплитуду флуктуаций температуры, равен

$$\tau^2 = EM_F^{-1} \int_{T_e^1}^{T_e^2} \left(\frac{T_e - T_e^0}{T_e^0} \right)^2 \zeta_F(T_e) dT_e. \quad (7.3.20) \quad \boxed{\text{Eq. 3}}$$

Следует отметить, что величина τ^2 — это единый параметр, а не квадрат величины τ . Коэффициент

$$\mu_{tt} = \left[\frac{1}{2} \frac{\partial^2 r_{ki}^{\text{eff}}}{\partial T_e^2} (r_{ki}^{\text{eff}})^{-1} T_e^2 \right]_{T_e=T_e^0}. \quad (7.3.21) \quad \boxed{\text{Eq. mu}}$$

Применимость формулы (7.3.19) ограничивается предположением о малости величины τ^2 по сравнению с единицей. Вычисления показали, что *малость* может в данном случае толковаться очень широко. Даже при значениях $\tau^2 \approx 0.25$, соответствующих отклонениям от средней температуры в туманности равным 50%, отличия полных энергий, излучаемых туманностями в линиях видимой и УФ областей спектра, вычисленных по точной формуле (7.3.14) и с помощью приближенного соотношения (7.3.19), не превышают 3-5% [14].

Амплитуда изменения интенсивностей линий, как видно из формулы (7.3.19), определяется не самим параметром τ^2 , а произведением

$\mu_{tt} \tau^2$. Из формулы (Eq. mu) видно, что абсолютные значения параметра μ малы для рекомбинационных линий в силу слабой зависимости эффективных коэффициентов рекомбинации от температуры. По этой причине интенсивности рекомбинационных линий слабо зависят от амплитуды флуктуаций T_e в туманности.

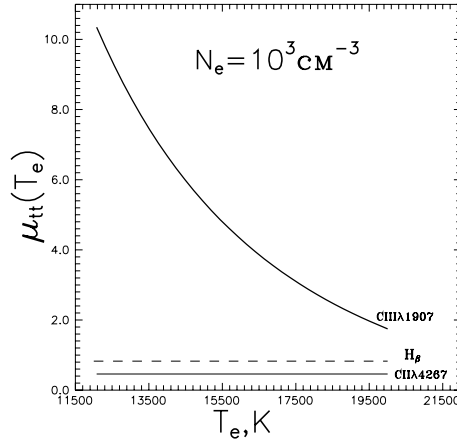


Рис. 7.11. Параметр μ_{tt} для линий CIII λ 1907, CIII λ 4267 и H_β в функции T_e при $n_e = 10^3$ К.

Fig.mu_tt-Te

В то же время значения μ_{tt} могут быть велики для линий, возбуждаемых электронным ударом, так как соответствующие эффективные коэффициенты образования линий экспоненциально быстро растут с ростом электронной температуры в области формирования линий, поэтому интенсивности столкновительных линий могут возрасти в 2 и более раз при переходе от однотемпературной туманности к туманности с той же средней температурой и умеренными значениями параметра $\tau^2 = 0.02 - 0.06$.

Сравнение на Рис. 7.11 значений параметра $\mu_{tt}(T_e)$ для рекомбинационных линий CIII λ 4267 и H_β и возбуждаемой электронным ударом линии CIII λ 1907 подтверждает сделанные выводы.

7.4 Высвечивание плазмы. Функция высвечивания

ss.CoolFunct

Скорость охлаждения плазмы L равна энергии, излучаемой единицей объемом среды за единицу времени, и зависит от кинетической температуры среды T (которую мы полагаем равной электронной температуре T_e) и полной концентрации частиц в среде n , а также от интенсивности источников нагрева и ионизации среды. Для разреженной плазмы скорость охлаждения среды можно выразить через произведение квадрата концентрации частиц n^2 на величину Λ — функцию высвечивания: $L = \Lambda n^2$. В стационарной или квази-стационарной разреженной одно-

температурной плазме функция высвечивания зависит только от температуры плазмы и ее химического состава и практически не зависит от полной концентрации частиц.

Одной из первых публикаций, в которых была рассчитана функция высвечивания, была работа [3]. Расчеты проведены для условий, существующих в оболочке новой звезды, в предположении, что потери энергии определяются излучением наиболее распространенных в космосе химических элементов: H, He и O.

В дальнейшем функция высвечивания неоднократно перевычислялась, причем в расчетах учитывалось все большее число элементов и линий, а сами расчеты выполнялись для более широкого интервала кинетических температур. Одним из наиболее полных исследований функции охлаждения явилась работа [88], в которой выполнены расчеты этой функции для большого набора значений содержания элементов и для температур вплоть до $3 \cdot 10^8$ K. Наиболее удивительным результатом выполненных до настоящего времени расчетов функции охлаждения оказалась стабильность ее общей формы. Увеличение числа атомов и рассматриваемых переходов хотя и уточняет саму функцию высвечивания, но не меняет общий вид ее зависимости от температуры, полученный еще в [3].

Функция высвечивания может быть представлена в виде:

$$\Lambda = \sum_{ij} x_{ij} \lambda_{ij} = \sum_{ij} x_{ij} (\lambda_{ij}^{\text{line}} + \lambda_{ij}^{\text{cont}}), \quad (7.4.1) \quad \boxed{\text{Eq. CoolFunc}}$$

где x_{ij} — парциальное содержание иона X_i^{j+} элемента с номером i в стадии ионизации j , определяемое решением системы уравнений ионизационного равновесия (Eq. IonEq), λ_{ij} — парциальная функция высвечивания этого иона, а $\lambda_{ij}^{\text{line}}$ и $\lambda_{ij}^{\text{cont}}$ — вклады в нее за счет излучения в линиях и континууме соответственно.

Основной вклад в функцию высвечивания плазмы вносит излучение в линиях, которые контролируются столкновениями с электронами. Линии, формируемые другими механизмами, дают пренебрежимо малый вклад в функцию охлаждения.

Парциальная функция высвечивания в линиях

$$\lambda_{ij}^{\text{line}} = \sum_{m,n} \lambda_{ij}^{n \rightarrow m}, \quad (7.4.2) \quad \boxed{\text{Eq.}}$$

выражается через скорости высвечивания в линиях $\lambda_{ij}^{n \rightarrow m}$, а суммирование распространяется на линии $n \rightarrow m$ всех переходов иона X_i^{j+} , дающих вклад в функцию высвечивания. Коэффициент излучения в линии $n \rightarrow m$ согласно (Eq. Gki-epski) выражается через излучательную способность плазмы в линии $G_{ij}^{n \rightarrow m}(T, n)$:

$$\varepsilon_{nm}(X_i^{j+}) = n^2 G_{ij}^{n \rightarrow m}(T, n), \quad (7.4.3) \quad \boxed{\text{Eq. EpsilonLine}}$$

и определяется при решении уравнений стационарности для уровней иона (см. пункт 7.2.2). Используя соотношение (7.4.3) и определение двойной дифференциальной меры эмиссии $\xi(T, n)$ в формуле (7.3.12) можно представить парциальную функцию высвечивания в линии $n \rightarrow m$ следующим выражением:

$$\lambda_{ij}^{n \rightarrow m} = EM^{-1} \int_{T^1}^{T^2} \int_{n^1}^{n^2} G_{ij}^{n \rightarrow m}(T, n) \xi(T, n) dT dn, \quad (7.4.4) \quad \text{Eq.LambdaLine}$$

где пределы изменения T и n определяются так же, как и в соотношении (7.3.12), $\xi(T, n)$ — дифференциальная, а EM — полная мера эмиссии плазмы.

В ряде случаев процесс высвечивания астрофизической плазмы может быть нестационарным. Например, это имеет место, когда вещество остывает при высвечивании после прохождения по среде ударной волны, например, в результате всплеска сверхновых звезд. В этом случае, как было отмечено в работе Kafatos73, ионизационное равновесие элементов при температурах $T \geq 10^5$ К не успевает подстраиваться под изменения температуры. Расчеты функции высвечивания в работах Kirienko1993, SD93 [7, 88] показали, что нестационарная функция высвечивания может быть примерно в два раза ниже стационарной в области температур $T \approx 10^5$ К.

7.4.1 Стационарная функция высвечивания

Рассчитанная в работе Kholtygin-2002 [15] стационарная функция высвечивания в интервале температур $5 \cdot 10^3$ К– 10^8 К для однородной плазмы с солнечным содержанием [45] восьми наиболее распространенных в космосе элементов: H, He, C, N, O, Ne, Mg и Fe приведена на Рис. 7.12 (вверху) в сравнении с результатами расчета в работах Kirienko1993, LandiLandini99 [7, 59].

Парциальные функции охлаждения для излучения в континууме рассчитаны по формулам, приведенным в параграфе 4.5. Относительные вклады различных элементов в парциальные функции высвечивания в линиях ионов He, C, N и O также показаны на Рис. 7.12 (внизу). Приведены также вклады в полную функцию высвечивания процессов охлаждения при свободно-свободных и свободно-связанных переходах (ff+fb).

На Рис. 7.12 (внизу) представлены результаты расчетов функции высвечивания плазмы с аномально высокими содержаниями He и CNO элементов, характерными для звезд типа Вольфа-Райе (WR). В расчетах использовано типичное содержание этих элементов для звезд подтипа WC [46] и солнечное содержание остальных элементов. Вычисления показали значительное (на 1-2 порядка) увеличение функции охлаждения в интервале температур $T_e = (3 \div 10) \cdot 10^4$ К по сравнению с функцией высвечивания для солнечного содержания элементов, хорошо заметное

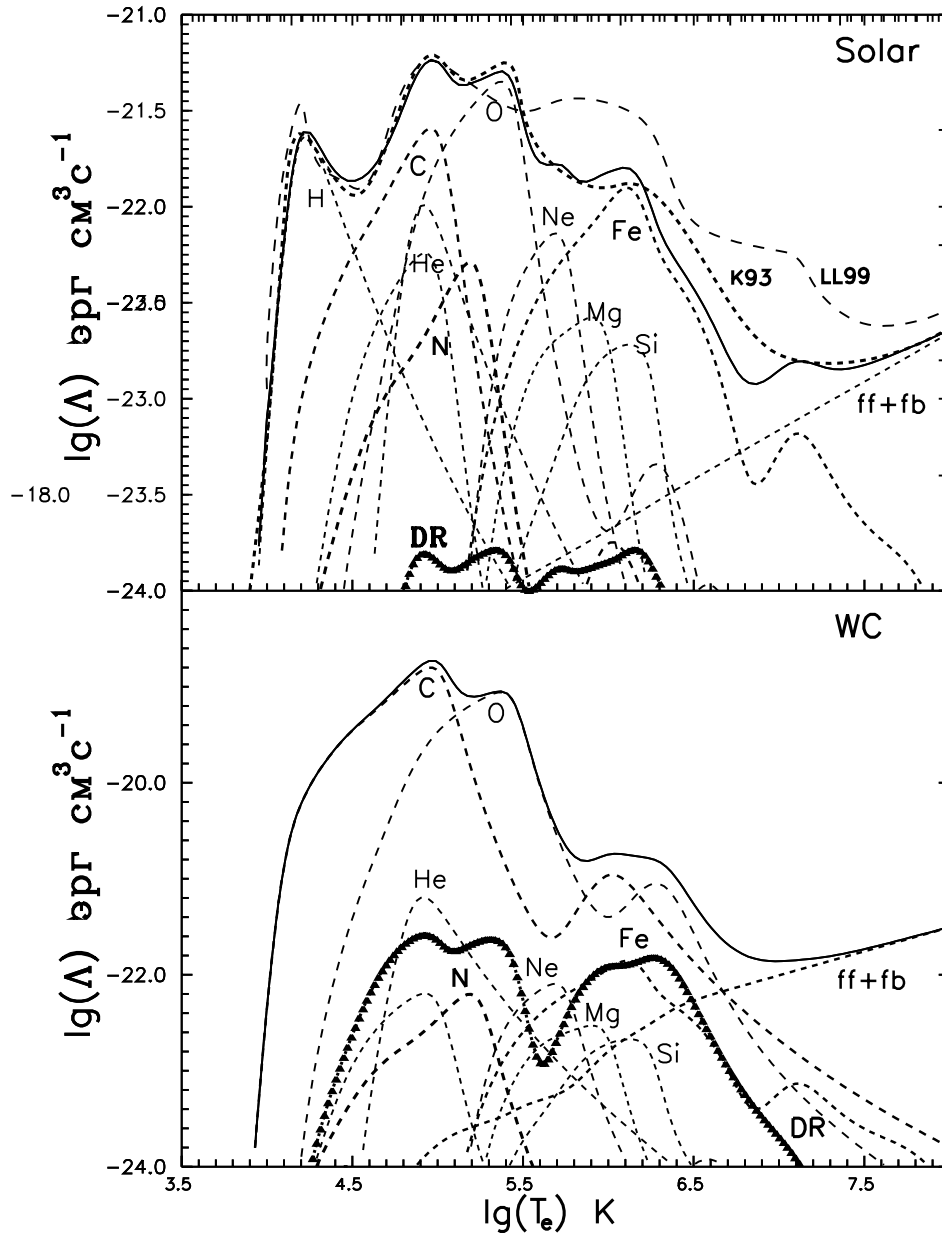


Рис. 7.12. Вверху: функция высвечивания, рассчитанная в [15] в $(\text{эрг см}^3 \text{с}^{-1})$ для солнечного химического состава [45]. Показаны парциальные функции высвечивания. Пунктирная линия с треугольниками – вклад в функцию высвечивания охлаждения при диэлектронной рекомбинации (DR), K93 – функция высвечивания, вычисленная в [7], LL99 – расчеты в [59]. Внизу: то же, что и на верхнем рисунке, но для содержания элементов в атмосферах звезд типа WC [46].

Fig.CoolFunctPart

на Рис. 7.12. При более высоких температурах ($T_e > 10^6 \text{ K}$) функции высвечивания для плазмы с солнечным содержанием элементов и типич-

ным для звезд подтипа WN практически совпадают, тогда как функция высвечивания для содержания He, C, N и O, характерного для звезд подтипа WC, превышает их на порядок величины.

Выполненные в работе [15] расчеты показали, что важный вклад в скорость охлаждения плазмы дает процесс диэлектронной рекомбинации. Для расчета соответствующей скорости охлаждения была использована модифицированная формула Берджеса (6.1.10) и коэффициенты аппроксимаций скорости диэлектронной рекомбинации, данные в каталоге [137]. Роль диэлектронной рекомбинации в охлаждении плазмы с солнечным химическим составом пренебрежимо мала, тогда как для содержания CNO элементов, характерного для звезд типа WR, роль этого процесса становится, как видно из Рис. 7.12, заметной и его следует учитывать при расчете функции охлаждения.

При расчетах функции высвечивания обычно предполагается однородность охлаждающейся плазмы. Однако, как показано в работе [15], присутствие в среде флуктуаций температуры очень сильно изменяет коэффициенты излучения в линиях, а тем самым и функцию высвечивания плазмы.

7.5 Диагностика астрофизической плазмы

7.5.1 Общая постановка задачи о диагностике плазмы

Сформулируем задачу диагностики плазмы. Пусть в результате наблюдений спектра анализируемого объекта получен ряд наблюдаемых потоков в линиях: F_{ij}^{obs} , $i = 1, \dots, N$, $j = 1, \dots, M_i$, где N – число атомов и ионов, линии которых наблюдаются в спектре объекта, индекс j нумерует линии атома или иона с номером i , M_i – число линий этого атома или иона в спектре. Пусть также M_c – число измеренных потоков в частотах континуума $F_c^{\text{obs}}(\lambda_k, \Delta\lambda_k)$, $k = 1, \dots, M_c$, где индекс k нумерует интервалы длин волн ($\lambda_k \leq \lambda \leq \lambda_k + \Delta\lambda_k$), в которых измеряется поток в континууме.

В дальнейшем обозначим для удобства полный набор измеренных потоков в линиях и (или) континууме через F_l где $l = 1 \dots, M$, а $M = \sum_i M_i + M_c$ – полное число измеренных потоков в линиях и в континууме.

Под диагностикой плазмы понимается поиск такого множества параметров $\{\mathcal{P}\}$, описывающих плазму, которое дает наилучшее приближение к наблюдаемым потокам F_l^{obs} . Различные методы диагностики плазмы отличаются, во-первых, способом задания параметров плазмы и, во-вторых, тем, что в данном методе диагностики считается наилучшим приближением. Используя соотношение (7.3.12) можно свести задачу диагностики плазмы к решению системы интегральных уравнений для дифференциальной меры эмиссии плазмы $\xi(T, n)$ и набора значений

содержания элементов $\{A_j\}$:

$$F_l = F_l(T, n) = \frac{1}{4\pi d^2} \int_{T^1}^{T^2} \int_{n^1}^{n^2} G_l(T, n) \xi(T, n) dn dT = F_l^{\text{obs}}, \quad (7.5.1) \quad \boxed{\text{Eq. G1}}$$

где $G_l(T, n)$ — излучательная способность плазмы в линии l или в соответствующем интервале частот континуума, F_l^{obs} — наблюдаемый поток в линии l в спектре диагностируемой плазмы, $h\nu_l$ — энергия перехода, соответствующего данной линии (интервалу частот континуума).

Возможны два подхода к решению задачи диагностики плазмы. Первый — решение обратной задачи: определение дифференциальной меры эмиссии $\xi(T, n)$ путем решения системы уравнений (7.5.1). Второй — решение прямой задачи: расчет теоретических потоков в линиях и континууме в зависимости от параметров плазмы и выбор *оптимальных* параметров, обеспечивающих наилучшее согласие наблюдаемых и рассчитанных потоков.

К сожалению, обратная задача является некорректной и даже при наличии достаточно большого числа достаточно точно измеренных потоков в линии невозможно восстановить реальную меру эмиссии только по этим потокам [49]. К тому же, измеренные потоки часто отягощены значительными ошибками, сильно зависящими от самого значения потока.

По этой причине для диагностики плазмы предпочтительнее использовать прямые методы, требующие принятия какой-либо модели распределения дифференциальной меры эмиссии.

7.5.2 Элементарные методы диагностики

Элементарные методы применяются при анализе свечения однородной или почти однородной плазмы. Под однородной плазмой мы понимаем плазму с постоянными по всему ее объему значениями температуры и плотности, равными, соответственно, средней температуре \bar{T} и средней плотности \bar{n} . В этом случае набор параметров $\{\mathcal{P}\}$, описывающих состояние плазмы, включает в себя только относительное содержание элементов и параметры \bar{T} и \bar{n} . Методика нахождения параметров однородной плазмы, описывающих наблюдаемые спектры газовых туманностей и других объектов, изложена в книгах [116, 118].

Для определения электронной температуры разреженной астрофизической плазмы используются отношения линий переходов между уровнями атомов и ионов, имеющих основные конфигурации np^2 или np^4 , где $n = 2 - 4$. Для выяснения того, как зависят интенсивности линий от n_e и T_e можно рассмотреть простейшую модель атома, включающую 3 уровня: 3P , 1D и 1S , при этом уровни основного терма 3P рассматриваются как единый уровень (см. схему уровней иона O^{2+} на Рис. 5.5).

Используем решение уравнений баланса (7.2.17) для для трехуровневого атома, приведенное в [122]. В пределе малых значений $n_e \ll A_{21}/q_{21}$ отношение интенсивностей линий $2 \rightarrow 1$ и $3 \rightarrow 2$ описывается следующей формулой:

$$\frac{I_{21}}{I_{32}} = \frac{\nu_{12}}{\nu_{23}} \left[1 + \frac{q_{12}}{q_{13}} \left(1 + \frac{A_{31}}{A_{32}} \right) \right]. \quad (7.5.2) \quad \text{Eq. IntRatioSob85}$$

Используя соотношение (5.4.3) для скорости возбуждения электронным ударом представим величину $R = I_{21}/I_{32}$ в виде:

$$I_{21}/I_{32} = A_0 + B_0 e^{h\nu_{23}/T_e}, \quad (7.5.3) \quad \text{Eq. 21/32ratio}$$

где параметры $A_0 = \nu_{12}/\nu_{23}$, $B_0 = (1 + A_{31}/A_{32})(\nu_{12}/\nu_{23})(\Upsilon_{12}/\Upsilon_{13})$, а $h\nu_{23}$ — разность энергий уровней 2 и 3.

Чаще всего для определения температуры применяют отношение интенсивностей небулярных линий [OIII] $\lambda 4959 + 5007 \text{ \AA}$ и авроральной линии [OIII] $\lambda 4363 \text{ \AA}$. Взяв силы столкновения, данные в каталоге [132], и отношение $A_{31}/A_{32} = 0.15$, найдем, что в случае иона O^{2+} :

$$I_{21}/I_{32} = \frac{I(4959 \text{ \AA}) + I(5007 \text{ \AA})}{I(4363 \text{ \AA})} = 0.9 + 7.9 e^{32970/T_e}, \quad (7.5.4) \quad \text{Eq. TeOIII}$$

Определения электронных концентраций астрофизических объектов выполняются обычно исходя из анализа отношения интенсивностей линий I_{21}/I_{31} с близко расположенными верхними уровнями с разностью энергий $\Delta E_{23}/kT_e \ll 1$. К таковым относятся линии [NI] $\lambda 5202/5199$, линии [OII] $\lambda 3729/3736$, [SII] $\lambda 6731/6717$ и линии других ионов, соответствующие переходам с дублетных уровней ${}^2D_{5/2}$ и ${}^2D_{3/2}$ конфигураций np^3 с $n = 2 - 4$.

В силу малости величины ΔE_{23} вероятность перехода $A_{32} \ll A_{31}$, что означает, что атомы в возбужденном состоянии 3 переходят, преимущественно, на основной уровень 1. Из этого следует, что при малых значениях n_e заселение уровней 2 и 3 можно рассматривать независимо, используя для определения эффективных коэффициентов возбуждения в линии формулу (7.2.20).

Тогда отношение интенсивностей линий в предположении, что отношение энергий переходов $h\nu_{12}/h\nu_{13} = 1$, равно

$$\frac{I_{21}}{I_{31}} = \frac{q_{21}^{\text{eff}} \cdot h\nu_{12}}{q_{31}^{\text{eff}} h\nu_{13}} = \left(\frac{g_2 q_{21}}{g_3 q_{31}} \right) \times \frac{1 + n_e q_{31}/A_{31}}{1 + n_e q_{21}/A_{21}}. \quad (7.5.5) \quad \text{Eq. RatNeDiagn}$$

Используя соотношения (5.4.3) и (5.4.4), получим:

$$R = \frac{I_{21}}{I_{31}} \approx R_0 \frac{1 + (n_e/n_e^{(1)}) (T_e/10^4)^{-1/2}}{1 + (n_e/n_e^{(2)}) (T_e/10^4)^{-1/2}}. \quad (7.5.6) \quad \text{Eq. RatNeDiagnAppr}$$

Здесь $R_0 = (\Upsilon_{12}/\Upsilon_{13})$ — предельное значение отношения I_{21}/I_{31} при малых значениях n_e . В случае справедливости LS -связи для уровней конфигурации np^3 , которое практически всегда выполняется, силы столкновений компонентов ${}^2D_J \rightarrow {}^4S_{3/2}$ дублета ${}^2D \rightarrow {}^4S$ пропорциональны статистическим весам верхних уровня 2D_J :

$$\Omega_{ij}(J) = \frac{2J+1}{(2L+1)(2S+1)} \Omega_{ij}. \quad (7.5.7) \quad \boxed{\text{Eq.EffCollStrRatio}}$$

где для дублета ${}^2D \rightarrow {}^4S$ $J = 5/2, 3/2$, $L = 2$ и $S = 1/2$, тогда отношение сил столкновений $\Omega({}^2D_{5/2} \rightarrow {}^4S_{3/2})/\Omega({}^2D_{3/2} \rightarrow {}^4S_{3/2}) = (5/2)/(3/2) = 1.5$. Это означает, что отношение $R_0 = 1.5$,

Концентрация $n_e^{(1)} = 10^2 g_3 A_{31}/(A_0 \Upsilon_{13})$, а $n_e^{(2)} = 10^2 g_2 A_{21}/(A_0 \Upsilon_{12})$. Учитывая слабую зависимость эффективных сил столкновений от T_e , можно считать концентрации $n_e^{(1)}$ и $n_e^{(2)}$ не зависящими от электронной температуры. Пусть $n_e^{\min} = \min(n_e^{(1)}, n_e^{(2)})$ а $n_e^{\max} = \max(n_e^{(1)}, n_e^{(2)})$, тогда при $n_e \ll n_e^{\min}$ отношение $R \approx R_0$, а при $n_e \gg n_e^{\max}$ отношение $R \approx R_\infty g_3 A_{21}/g_2 A_{31}$, что очевидно, так как при высоких электронных концентрациях населенности уровней бoльцмановские, а отношение $n_2/n_3 = g_2/g_3 \exp(\Delta E_{23}/kT_e) \approx g_2/g_3$.

Используя вероятности переходов, приведенные в статье [KafatosLynch1980](#) [51], можно найти, что отношение R_∞ меняется в интервале 0.01 – 0.6, причем с ростом степени ионизации величина R_∞ уменьшается.

В интервале $\approx 0.5 n_e^{\min} < n_e < n_e^{\max}$ отношение R чувствительно к электронной концентрации и может использоваться для ее определения.

Сказанное выше иллюстрируется на Рис. 7.13 (слева), на котором дано отношение интенсивностей линий запрещенного дублета [OII] в зависимости от n_e по [StangeliniKaler1989](#) [87]. Силы столкновений переходов иона O^+ в цитированной работе были взяты из [Pradhan1976](#) [78].

Для определения значения n_e удобно также использовать интенсивности ИК линий тонкой структуры иона O^{2+} и ионов других элементов. Зависимость от электронной концентрации отношения интенсивностей линий OII $\lambda 52$ мкм и OIII $\lambda 88$ мкм согласно [Liu-2001](#) [61] показана на Рис. 7.13 (справа). [Fig.011-0111_NeFeDiagn](#)

При получении интенсивностей линий нескольких ионов можно одновременно определить значения n_e и T_e , что иллюстрируется на Рис. 7.14. По осям графика отложены значения n_e и T_e , а кривые на графике показывают, при каких значениях T_e и n_e отношение интенсивностей указанных на рисунке линий равно полученному по наблюдаемым интенсивностям линий в спектре планетарной туманности NGC 7026. Если n_e и T_e постоянны в излучающей плазме, то все кривые должны пересекаться в одной точке. Реально, в силу неоднородности туманностей, существует [Fig.NeTeDiagn](#)

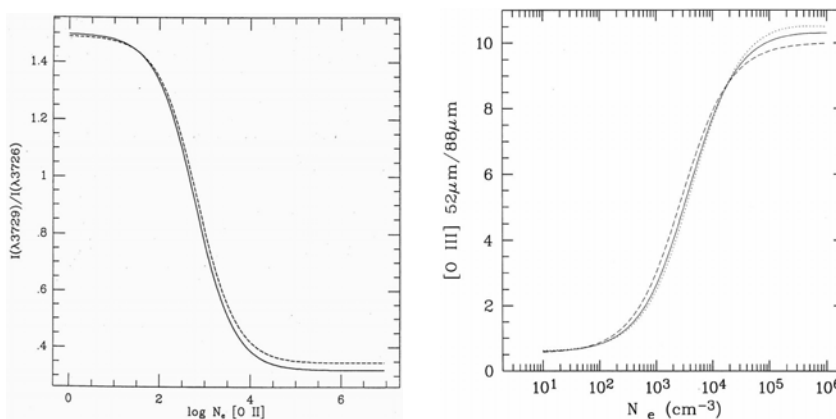


Рис. 7.13. **слева:** отношение интенсивностей линий O^+ согласно [87] в зависимости от n_e для $T_e = 10000$ К. Пунктир — расчет с вероятностями переходов из [128], сплошная линия — из работы [129]. **справа:** отношение интенсивностей ИК линий O^{2+} , в функции n_e по [61]. Пунктир — $T_e = 5000$ К, сплошная линия — $T_e = 10000$ К, точечная линия — $T_e = 15000$ К.

Fig. OII-OIII_NeTeDi

значительный разброс значений T_e и n_e , поэтому данный метод позволяет получить только оценочные значения T_e и n_e .

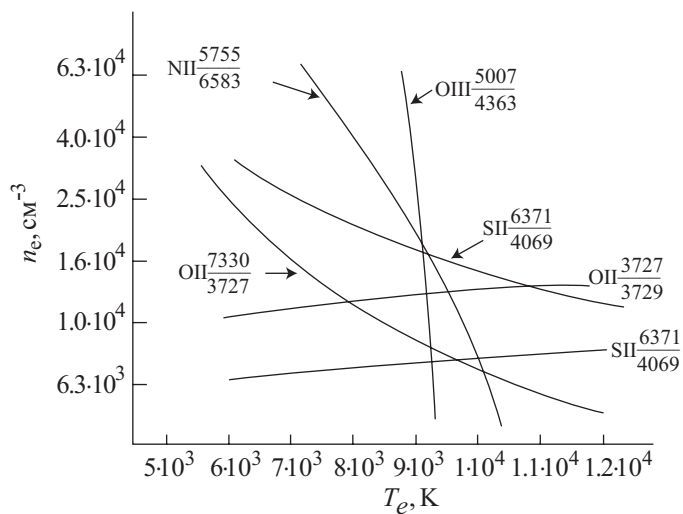


Рис. 7.14. Совместное определение электронной концентрации n_e и электронной температуры T_e для туманности NGC 7026 по [116].

Fig. NeTeDiagn

7.5.3 Диагностика горячей плазмы по рентгеновским линиям гелиеподобных ионов

s.He-LikeDiag

Рентгеновское излучение используется для диагностики горячей плазмы корон Солнца и звезд и других астрофизических объектов. Определение параметров горячей плазмы во многих из этих объектов основывается на анализе относительных интенсивностей запрещенных (f), интеркомбинационных (i) и резонансных (r) линий He-подобных ионов C, N, O, Si, Mg и других элементов (fir ratio) [96].

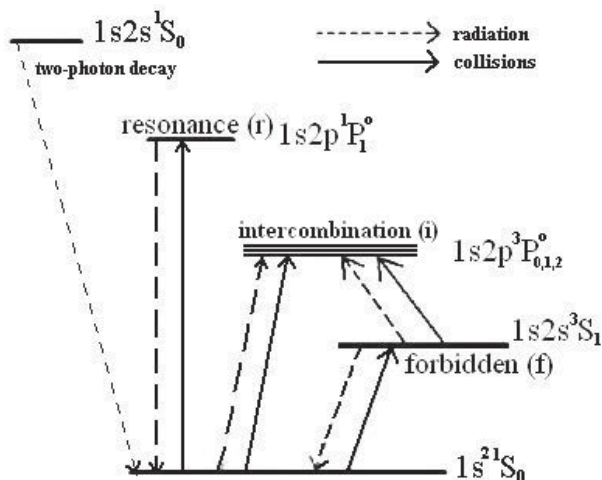


Рис. 7.15. Схема триплетных уровней He-подобных ионов по [Gude12004, 145]

Fig.HeLikeLev

Схема уровней гелиеподобных ионов и указанные выше типы переходов показаны на Рис. 7.15. В табл. 7.4 приведены энергии низколежащих уровней многозарядных гелиеподобных ионов согласно [RadtsigSmirnov1986, 133].

Таблица 7.4. Энергии низколежащих уровней He-подобных ионов. **Полужирное** начертание энергии уровня $1s2s^1S_0$ указывает, что данный уровень лежит ниже уровня $1s2p^3P_2$.

Ион	$E/10^4 \text{ см}^{-1}$					
	$1s2s^3S_1$	$1s2p^3P_0$	$1s2p^3P_1$	$1s2p^3P_2$	$1s2s^1S_0$	$1s2p^1P_1$
C ⁴⁺	241.127	245.516	245.517	245.529	245.501	248.337
N ⁵⁺	338.589	343.830	343.832	343.861	343.930	347.379
O ⁶⁺	452.464	458.562	458.568	458.624	458.850	462.920
Ne ⁸⁺	730.205	738.032	738.062	738.217	738.260	743.660
Mg ¹⁰⁺	1073.64	1083.25	1083.31	1083.66	1083.90	1090.69
Si ¹²⁺	1483.67	1495.05	1495.23	1495.94	1495.95	1504.28
S ¹⁴⁺	1960.2	1973.4	1973.8	1974.6	1975.1	1984.6
Ca ¹⁸⁺	3114.5	3131.6	3132.4	3135.9	3133.1	3147.7
Fe ²⁴⁺	5353	5376	5378	5390	5378	5404

Table.HeLikeEnLev

Длины волн рентгеновских линий переходов между нижними уровнями гелиеподобных ионов, рассчитанные по энергиям уровней, данным в табл. 7.4, приведены в табл. 7.5. Следуя традиции, уровни HeI обозначены соответственно: $1s^2\ ^1S_0 \equiv 1\ ^1S_0$, $1s2s\ ^1S_J \equiv 2\ ^1S_J$, $1s2s\ ^3S_J \equiv 2\ ^3S_J$, $1s2p\ ^1P_J \equiv 2\ ^3P_J$ и $1s2p\ ^3P_J \equiv 2\ ^3P_J$. В той же таблице даны вероятности переходов всех рассматриваемых линий согласно [133].

Таблица 7.5. Длины волн (в Å, верхнее число, выделено **полужирным** начертанием) и коэффициенты вероятности переходов (в с^{-1} , нижнее число) для линий запрещенных, интеркомбинационных и разрешенных переходов между низколежащими уровнями He-подобных ионов. В последней колонке даны интервалы длин волн линий (в Å) разрешенных переходов $1s2s\ ^3S - 1s2p\ ^3P$.

Тип линии	f	i		r	Фотовозбуждение
Переход	$1\ ^1S_0 \leftarrow 2\ ^3S_1$	$1\ ^1S_0 \leftarrow 2\ ^3P_1$	$1\ ^1S_0 \leftarrow 2\ ^3P_2$	$1\ ^1S_0 \leftarrow 2\ ^1P_1$	$2\ ^3S_1 \leftarrow 2\ ^3P_J$
CV	41.472 49	40.730 2.83E7	40.728 2.6E4	40.268 8.87E11	2271 – 2278
NVI	29.534 250	29.084 1.4E8	29.082 1.0E5	28.787 1.81E12	1897 – 1908
OVII	22.101 1.0E3	21.807 5.52E8	21.804 3.3E5	21.602 3.31E12	1623 – 1640
NeIX	13.697 1.1E4	13.549 5.4E9	13.546 2.3E6	13.447 8.88E12	1248 – 1278
MgXI	9.314 7.3E5	9.231 3.4E10	9.228 1.1E7	9.169 1.95E13	997 – 1041
SiXIII	6.740 3.6E5	6.688 1.6E11	6.685 3.9E7	6.648 3.77E13	815 – 879
SXV	5.102 1.4E6	5.066 5.8E11	5.064 1.2E8	5.039 6.61E13	670 – 760
CaXIX	3.211 1.4E7	3.192 4.82E12	3.189 7.6E8	3.177 1.65E14	470 – 580
FeXXV	1.868 2.1E8	1.859 4.3E13	1.855 6.6E9	1.850 4.60E14	270 – 430

Table.HeLikeFIRlines

Отношения интенсивностей рентгеновских линий гелиеподобных ионов могут быть использованы для определения характеристик излучающей плазмы. На Рис. 7.16 (слева) показана зависимость отношения $\mathcal{R} = f/i$ от электронной концентрации плазмы. Указанное отношение может быть использовано для определения электронной концентрации плазмы при $10^{13}\text{ см}^{-3} \leq n_e \leq 10^{16}\text{ см}^{-3}$. Отношение $\mathcal{G} = (f + i)/r$ (Рис. 7.16, справа) чувствительно к значению электронной температуры T_e и может быть использовано для ее определения.

Результаты анализа линий гелиеподобных ионов в спектрах звезд показали, что интенсивность запрещенных линий (и отношение f/i) в спектрах горячих звезд спектральных классов O и B существенно меньше, чем ожидалось бы при предположении, что плотность горячего газа в атмосферах звезд, формирующего рентгеновское излучение, близка к плотности окружающих горячий газ более холодных областей атмосферы.

Fig.HeLikeR-Grat

Fig.HeLikeR-Grat

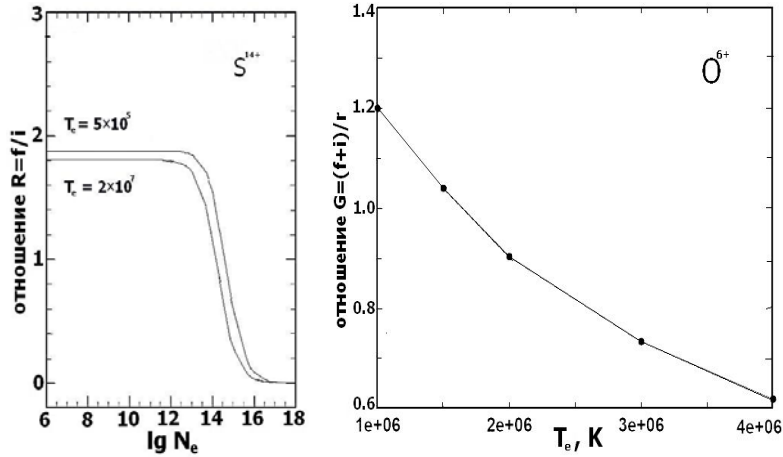


Рис. 7.16. Отношение $\mathcal{R} = f/i$ линий гелиеподобного иона S^{14+} (слева) в зависимости от n_e по [22]. Отношение $\mathcal{G} = (f+i)/r$ для иона O^{6+} в зависимости от T_e по [38].

Fig. HeLikeR-Grat

ры [36, 52, 64, 96]. На Рис. 7.17 приведены профили рентгеновских линий гелиеподобного иона OVI в спектре звезды солнечного типа Капеллы (G5IIIe) и затменной двойной звезды β Per (Algol, B8V). Видно, что в спектре β Per интенсивность запрещенной линии $1^1S_0 \leftarrow 2^3S_1$ сравнима с интенсивностью интеркомбинационного дублета $1^1S_0 \leftarrow 2^3P_J$.

Для объяснения такого необычного поведения интенсивностей рентгеновских линий в спектрах звезд ранних спектральных классов следует предположить, что либо плотность плазмы в области формирования рентгеновских линий очень высока ($n_e \geq 10^{14} \text{ см}^{-3}$), либо существует какой-то селективный механизм уменьшения населенности уровня 2^3S_1 .

Первое предположение считается маловероятным, хотя в работе [2] отмечена возможность образования горячего плотного газа в неоднородных атмосферах горячих звезд при столкновениях неоднородностей в ветрах двойных O+O или O+WR звезд.

Вторая возможность считается более реальной. Предполагается, что ультрафиолетовое излучение звезды в линиях разрешенного УФ мультиплета $2^3S \rightarrow 2^3P$ приводит к уменьшению населенности уровня 2^3S_1 и уменьшению интенсивности запрещенной линии $1^1S_0 \leftarrow 2^3S_1$.

При учете указанного процесса величина

$$\mathcal{R} = \mathcal{R}_0 \frac{1}{1 + \phi/\phi_c + n_e/n_c}, \quad (7.5.8) \quad \text{Eq. phi-ne_crit}$$

где \mathcal{R}_0 — значение отношения \mathcal{R} , полученное без учета дополнительных механизмов опустошения уровня 2^3S , ϕ — скорость фотовозбуждения $2^3S \rightarrow 2^3P$, ϕ_c — критическое значение скорости ϕ , при которой фотовозбуждения уменьшают в два раза величину \mathcal{R} , n_c — критическое значение

электронной концентрации, определенное таким же образом, как и величина ϕ_c . Из рисунка 7.16 видно, что для S^{14+} значение $n_c \approx 10^{14} \text{ см}^{-3}$. С ростом заряда ядра растет и значение n_c . Согласно, например, [22] для Fe^{24+} значение $n_c \approx 5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$. Критические значения n_c для других ионов можно найти в работе [60].

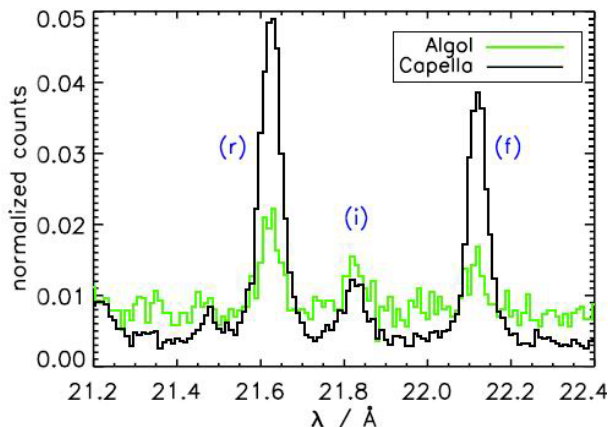


Рис. 7.17. Профили линий гелиеподобного иона O^{6+} в спектрах Капеллы (G5IIIe) и затменной двойной β Per (B8V) по наблюдениям на спутнике Chandra [145]. Отмечены положения резонансных (r), интеркомбинационной (i) и запрещенной (f) линий переходов $1s - 2s$ и $1s - 2p$ (см. табл. 7.5).

Fig.OVIlineProf

Описанный выше эффект радиационного опустошения уровня 2^3S в атмосфере звезды ζ Ori O9.7Ib исследован в работе [96]. На рисунке 7.18 показана зависимость отношения f/i от расстояния r до центра звезды согласно [96].

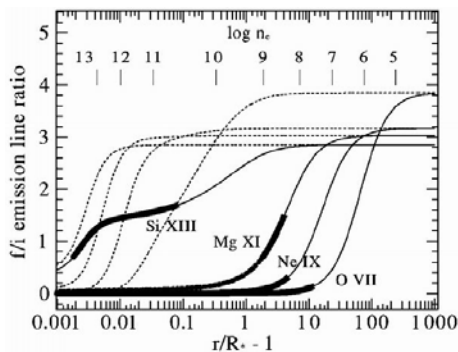


Рис. 7.18. Зависимость отношения f/i от n_e и расстояния излучающей в данной линии области плазмы до центра звезды по [96].

Fig.HeLikeFIRrat

Толстыми жирными линиями выделена область наблюдаемых значений отношения f/i для линий ионов O^{6+} , Ne^{8+} , Mg^{11+} и Si^{12+} . Из рисунка видно, что учет эффекта фотовозбуждения $2^3S \rightarrow 2^3P$ позволяет согласовать наблюдаемые и теоретические значения f/i при предполо-

жении, что горячий газ в атмосфере звезды, нагретый до $\approx 10^7$ К, может формироваться вблизи фотосферы звезды.

7.5.4 Диагностика неоднородной плазмы

Неоднородная плазма

Наиболее простой и чаще всего случающийся тип неоднородности — температурно неоднородная плазма. Если отклонения температуры $|T(\mathbf{r}) - \bar{T}| \ll \bar{T}$, где \mathbf{r} — произвольная точка в объеме плазмы, \bar{T} — средняя температура туманности, то эти отклонения можно рассматривать как малые флуктуации и использовать для расчета потоков излучения в линиях и континууме методику, рассмотренную в пункте [7.3.4](#) [ss.SpGasNeb].

Для полного описания излучательных свойств плазмы достаточно добавить в список параметров модели излучающей плазмы величину τ^2 , характеризующую амплитуду флуктуаций T_e . Результаты использования методики поиска оптимальных параметров для плазмы с малыми амплитудами флуктуаций T_e описаны в работе [\[Эб\]](#) [Kh98a].

Более сложный случай представляет диагностика плазмы с флуктуациями как температуры, так и концентрации атомов. Этот тип неоднородности проанализирован в работе [\[14\]](#) [Kholtygin00].

Если же отклонения температуры и плотности от их средних значений нельзя полагать малыми, то необходимо рассматривать реальные распределения дифференциальной меры эмиссии по объему плазмы. В этом случае набор параметров, описывающих состояние плазмы, необходимо дополнить параметрами, описывающими распределение дифференциальной меры эмиссии. Подобный подход к задаче диагностики неоднородной плазмы описан в работе [\[49\]](#) [JNB97].

Методика диагностики плазмы с флуктуациями температуры

Методика диагностики состоит из двух частей. Первая из них — построение модели излучающей плазмы — зависит от конкретного исследуемого объекта и рассматривалась в параграфах [7.3.3](#) и [7.3.4](#). Предположим, поэтому, что модель изучаемого объекта уже выбрана, и она описывается набором параметров $\{P\}$ [ss.XRaySelSpGasNeb].

Обычно можно предположить, что каждое отдельное измерение из совокупностей наблюдаемых потоков $\{F_l^{\text{obs}}\}$ является независимой случайной величиной, описываемой своей собственной плотностью функции распределения $P_l(F_l)$, определенной таким образом, что $P_l(F_l)dF_l$ — вероятность того, что измеренный поток в линии будет находиться в интервале $(F_l, F_l + dF_l)$. Полная плотность функции распределения всей совокупности наблюдаемых потоков является в случае независимости

случайных величин F_l произведением индивидуальных функций $P_l(F_l)$:

$$P(\{\mathcal{P}\}) = P(F_1, F_2, \dots, F_N) = P(F_1)P(F_2) \dots P(F_N). \quad (7.5.9) \quad \boxed{\text{Eq. TotPDF}}$$

Для нахождения оптимальных величин параметров будем использовать принцип максимального правдоподобия ^{Brandt75} [102], а в качестве функции правдоподобия – функцию ^{Eq. TotPDF} (7.5.9). В этом случае оптимальным набором параметров $\{\mathcal{P}\}^{\text{opt}}$ плазмы является тот, для которого функция правдоподобия достигает максимума:

$$P(F_1(\{\mathcal{P}\}^{\text{opt}}), F_2(\{\mathcal{P}\}^{\text{opt}}), \dots, F_N(\{\mathcal{P}\}^{\text{opt}})) = \max. \quad (7.5.10) \quad \boxed{\text{Eq. MaxPDF}}$$

Здесь $F_l(\{\mathcal{P}\})$ – рассчитанные потоки в линии l для набора параметров модели $\{\mathcal{P}\}$.

Возможен и другой способ построения функции правдоподобия с использованием не плотностей функций распределения, а квантилей распределения

$$Q_m(F_l) = P(|F_l - F_l^{\text{obs}}| \geq |F_l^{\text{calc}} - F_l^{\text{obs}}|). \quad (7.5.11) \quad \boxed{\text{Eq. QPDF}}$$

где F_l^{calc} – рассчитанный в принятой модели поток излучения в линии l . В этом случае функция правдоподобия $Q(F_1, F_2, \dots, F_N) = Q(F_1)Q(F_2) \dots Q(F_N)$ и принцип максимального правдоподобия выражается так:

$$Q(F_1(\{\mathcal{P}\}^{\text{opt}}), F_2(\{\mathcal{P}\}^{\text{opt}}), \dots, F_N(\{\mathcal{P}\}^{\text{opt}})) = \max. \quad (7.5.12) \quad \boxed{\text{Eq. MaxQPDF}}$$

Предположим, основываясь на анализе распределения ошибок измерения потоков в линиях спектров газовых туманностей ^{RP94, RolaStasinska1994} [81, 82], что в большинстве случаев для функции распределения потоков можно использовать либо нормальный закон:

$$P^N(F) = \frac{1}{\sqrt{2\pi} \sigma^N} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{F^{\text{obs}} - F}{\sigma^N} \right)^2 \right], \quad (7.5.13) \quad \boxed{\text{Eq. PdfN}}$$

где стандартное отклонение σ^N зависит от величины наблюдаемого потока F^{obs} , либо нормально-логарифмический закон со смещением:

$$P^{\text{LN}}(J) = \frac{(F^{\text{obs}}/F)}{\sqrt{2\pi} \sigma^{\text{LN}}} \exp \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{J^{\text{obs}} - \mu^{\text{LN}} - J}{\sigma^{\text{LN}}} \right)^2 \right]. \quad (7.5.14) \quad \boxed{\text{Eq. PdfLN}}$$

Здесь $J = \ln(F)$, $J^{\text{obs}} = \ln(F^{\text{obs}})$. Для достаточно ^{RP94, RolaStasinska1994} сильных линий в спектре возможно использование нормального закона [82], тогда как для слабых линий нормально-логарифмический закон является более предпочтительным. В работе ^{RP94} [81] показано, что величины σ^{LN} и μ^{LN} зависят от отношения сигнал/шум (S/N) для рассматриваемых линий и для отношения $S/N \leq 6$ даны в цитированной работе. Для $S/N > 6$ могут быть использованы соотношения $\sigma^{\text{LN}} \approx (S/N)^{-1}$ и $\mu^{\text{LN}} \approx (S/N)^{-2}$.

Для получения оптимальных значений параметров требуется нахождение максимума функции правдоподобия (7.5.10) или (7.5.12). Отметим, что функция правдоподобия имеет много локальных экстремумов и, поэтому, стандартные методы минимизации функций многих переменных, такие, как метод наискорейшего спуска, неприменимы. Поэтому для нахождения экстремума может быть использован метод *случайного поиска* [107].

В окрестности *оптимальных* значений параметров изучаемого объекта функция правдоподобия имеет резкий максимум. При приближении значений параметров к их *оптимальным* значениям точность подгонки наблюдаемых потоков существенно увеличивается, что иллюстрируется на Рис. 7.19 для модели планетарной туманности NGC 7027.

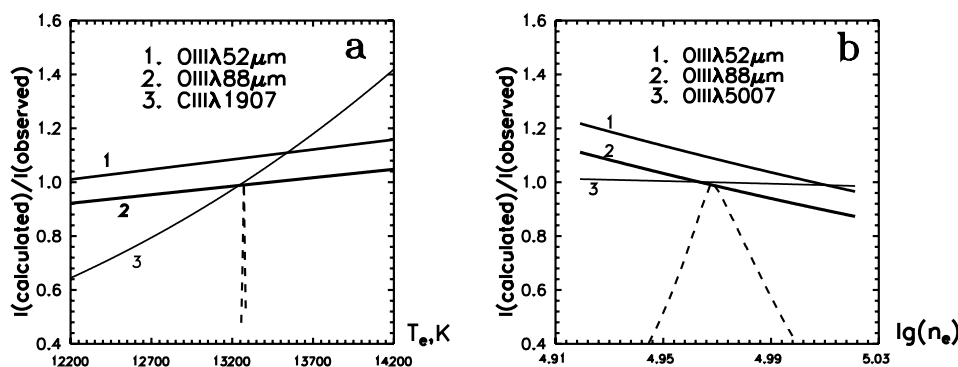


Рис. 7.19. Отношения рассчитанных интенсивностей линий ионов C^{2+} и O^{2+} и наблюдаемых в спектре туманности NGC 7027 в зависимости от параметров модели туманности. Пунктирными линиями показаны значения функции правдоподобия, нормированные на ее максимальную величину.

Fig. NeTeDiagn-NGC7027

Сравнение с наблюдениями

Традиционно относительные потоки в спектрах планетарных туманностей называются интенсивностями линий и измеряются в долях интенсивности линии H_{β} , интенсивность которой принимается за 100.

При сравнении с наблюдениями важно отметить, что интенсивности линий в спектрах туманностей измеряются с ошибкой, которая существенно зависит от самой интенсивности линий. Если ошибка измерения интенсивности сильных линий не превышает 5% (см. статью [41]), то ошибка в измерении интенсивностей слабых линий (интенсивность которых составляет меньше чем 1% от интенсивности линии H_{β}) может составить 30-50% и более. Это обстоятельство обычно не принимается во внимание при определении небулярных параметров.

Для величины стандартного отклонения σ^N в законе (7.5.13) для линий с измеренной интенсивностью I^{obs} используется данное в работе [82]

ss.CompareObs

выражение $\sigma^N = \gamma \sqrt{I^{\text{obs}} I_{N_1+N_2}}$. Здесь $I_{N_1+N_2}$ - суммарная интенсивность небулярных линий OIII λ 4959+5007. Для величины коэффициента γ можно принять значение 0.01, основанное на анализе ошибок большого числа определений интенсивностей в спектрах туманностей (см. [82]). Результаты расчетов показывают, что изменение величины γ на порядок величины в ту или другую сторону практически не влияет на величину находимых параметров туманности.

В табл. 7.6 для иллюстрации представлен результат согласования наблюдаемых и рассчитанных интенсивностей линий для туманности NGC 3918 в соответствии с описанной выше методикой. Наблюдаемые интенсивности линий спектра туманности NGC 3918 были взяты из статей [40, 58].

Таблица 7.6. Интенсивности УФ и оптических линий в спектре NGC 3918.

tab.IcalcIobs

NGC 3918					
Ion	$\lambda, \text{\AA}$	I^{obs}	I^{calc}	$(I^{\text{obs}} - I^{\text{calc}}) / \sigma(I^{\text{obs}})$	$\sigma(I^{\text{obs}})$
HeI	5876	10.80	10.39	0.41	0.99
HeI	6678	2.87	3.22	0.69	0.51
HeII	4686	41.65	41.65	0.00	1.94
CII	4267	0.30	0.30	0.00	0.16
CIII	4650	0.06	0.06	0.00	0.07
CIV	4658	0.33	0.33	0.00	0.17
NII	6548	33.80	29.59	2.41	1.74
NII	6583	83.60	87.13	1.29	2.74
NIII	1750	26.70	26.70	0.00	4.65
NIV	1486	46.40	46.40	0.00	6.13
OII	1663	35.00	46.19	2.10	5.32
OIII	4363	21.60	23.03	1.03	1.39
OIII	4959	528.00	543.26	2.21	6.89
OIII	5007	1583.00	1563.33	1.65	11.94

Глава 8

Каталоги и базы атомных данных

8.1 Базы данных

В настоящее время существует достаточно большое число атомных данных, доступных в сети INTERNET. Список баз данных представлен в табл. 8.1. Изменения в сети INTERNET происходят достаточно быстро, поэтому часть адресов к моменту выхода книги в свет может измениться.

Таблица 8.1. Базы атомных данных

Название	Страна	тип данных	адрес базы
ADA (Atomic Data for Astrophysics)	University of Kentucky, USA	MSCD	www.pa.uky.edu/~verner/atom.html
ADC (Atomic Data Centre)	Astron.Inst.SPb Univers., Russia	MSCD	www.astro.spbu.ru/staff/afk/AtDatCentre/ADC.html
ADRAL (Atomic Data for Res. Abs. Lines)	Herzberg Inst. of Astroph., Canada	WL, TP OS	www.hia-ihp.nrc-cnrc.gc.ca/staff/morton_e.html
AMODS (Atom. Mol. Database)	Taejon, Korea	MSCD OS	amods.kaeri.re.kr/
AMRD (Atom. Mol. React. Database)	Colorado, USA	MSCD OS	www.kinema.com/katie/
ATOM (Coulomb Born Exchange Code)	PHIAN, Moscow	ELEX Progr.	plasma-gate.weizmann.ac.il/~fnralch/ATOM/
ATOMDB (Database for X-ray plasma)	Chandra X-Ray Center, USA	X-Ray, MSCD	cxc.harvard.edu/atomdb/
BIBL (Atomic Bibliography)	ISAN, Troitsk, Russia	Bibl, MSCD	http://plasma-gate.weizmann.ac.il/bibl/html
CAMBD (China At. & Mol. Data)	Beijing, China	Bibl, MSCD	http://www.camdb.ac.cn/e/
CfA (Center for Astrophysics)	Harvard Univers. USA	MSCD	cfa-www.harvard.edu/amp/data/amdata.html
CCC (Conv.-Close-Coupl. DataBase)	Flinders Univers. Curtin Univ., Austr.	ELEX	atom.curtin.edu.au/CCC-WWW/index.html
CCP7 (CCP7 Data Library)	University of St.Andrews, U.K.	EL, WL	http://ccp7.dur.ac.uk/
CFADC (ORNL Contr.Fus. Atom Data Cent. Database)	Oak Ridge Nat. Labor, USA /	BIBL: MSCD	www-cfadc.phy.ornl.gov/
CDS (Centre de Donnés Astron.)	Strasbourg, France	MSCD	cdsweb.u-strasbg.fr/cats/V1.htm
CHIANTI (DataBase for Em. Line Spectr.)	Florence, Italy	MSCD	wwwsolar.nrl.navy.mil/chianti.html
D.R.E.A.M. (DataBase on Rare Earths)	Mons Univers. Mons, Sweden	EL,WL	w3.umh.ac.be/~astro/dream.shtml
GAPHYOR (GAPHYOR Date Centre)	Centre de Donn. Orsay, France	Bibl: MSCD	gaphyor.lpgp.u-psud.fr/
IAEA AMDIS (Atom. Mol. Data Inf. Syst.)	Int. At.En.Ag. Vienna, Austria	ELEX, EIIon, CT, HP, Bibl	www-amdis.iae.org/ALADDIN/

Table.DataBases

Таблица 8.1. продолжение

Kurucz's CD (CD No. 23)	Harvard, USA	EL,WL, TP	cfa-www.harvard.edu/amp/ ampdata/kurucz23/sekur.html
MOLAT (Mol. Atomic Data)	l'Observatoire de Paris, France	DB MSCD	molat.obspm.fr/
NIFS (At. & Mol. Numer. DataBase)	Nat. Inst. for Fusion Sci., Japan	EIEx, EIIon	dbshino.nifs.ac.jp
NIST (Atomic Data)	Nat. Inst. Stand. Techn., USA	CT, HP MSCD	physics.nist.gov/ PhysRefData/
NIST ASD (Atomic Spectr. Database)	Nat. Inst. Stand. Techn., USA	OC, TP EL, OS TP, WL	physics.nist.gov. PhysRefData/ASD1/choice.html
TOPbase (Opacity Project Database)	Centre de Donn. Strasbourg, France	EL, OS, TP Astr. de PHI, WL	cdcweb.u-strasbg.fr/ topbase.html
RTAM (Relativ. Theor. Atoms and Molecules)	Univ. Helsinki, Finland	BIBL: RTAM	rtam.csc.fi/
OP LANL (Astroph. Opacities)	Los Alamos Nat. Lab., USA	OP, Progr.	www.t4.lanl.gov/cgi-bin/ opacity/astro.pl
OOT (Ortog Oper. Techn.)	Amsterdam, Netherlands	EL, TP	www.wins.uva.nl/ pub/orth
SPECTR - W3 (Spectr. Prop. Atoms & Ions)	Snezhinsk, Russia	EL,OC TP, Hfs	spectr-w3.snz.ru /new/index.phtml
X-Ray WWW (X-Ray WWW Server)	Uppsala, Univ., Sweden	X-Ray, MCSL	xray.uu.se/
VALD (Vienna Atom. Line Database)	Inst. für Astron., Austria	EL, OS TP	ams.astro.univie. ac.at/~vald/
WIS (WIS Plasma Laboratory Data)	Weizmann Institute of Science, Israel	EL, OS TP	plasma-gate.weizmann.ac.il/

Обозначения процессов и типов атомных данных в 3-м столбце: *Bibl* – библиографические данные; *CT* – перезарядка; *EL* – уровни энергии; *EIEx* – возбуждение электронным ударом; *EIIon* – ионизация электронным ударом; *DB* – списки баз данных; *DR* – диэлектронная рекомбинация; *HP* – столкновения с тяжелыми частицами; *Hfs* – сверхтонкая структура; *MCSL* – разнообразные атомные данные; *OP* – непрозрачности; *PHI* – фотоионизация; *RTAM* – релятивистская теория атомов и молекул; *TP* – вероятности переходов; *WL* – длины волн; *X-Ray* – данные, относящиеся к рентгеновскому излучению

8.2 Проекты и персональные WWW страницы

Необходимые для астрофизических исследований атомные параметры могут быть найдены не только в указанных выше базах атомных данных, но и на страницах организаций, работающих в данной области, на WEB-страницах различных проектов, посвященных расчету и измерению характеристик атомов и ионов, а также на персональных страницах ученых, работающих в различных областях атомной спектроскопии. Не претендуя в какой-либо степени на полноту обзора данной области, дадим ссылки на отдельные источники атомных данных.

Проект *Opacity*, посвященный расчету сил осцилляторов и вероятностей переходов наиболее распространенных атомов и ионов, находится по адресу URL: <http://cdsweb.u-strasbg.fr/topbase/op.html> и содержит описание используемых методов, формата представления данных и инструкции для пользователей базы данных TopBase и список работ по проекту. Проект *Iron*, расположенный по адресу URL: <http://www.usm.uni-muenchen.de/people/ip/iron-project.html> является продолжением проекта *Opacity* и содержит данные для элементов группы железа и более тяжелых элементов.

Страница *Harvard-Smitsonian centre for Astrophysics* расположена по адресу URL: <http://cfa-www.harvard.edu/> и содержит многочисленные ссылки на базы атомных и молекулярных данных и другие полезные ссылки.

Персональные страницы, труды конференций, каталоги сборники атомных констант

Страница *Anil Pradhan* (<http://www.astronomy.ohio-state.edu/~pradhan>) содержит атомные данные, необходимые для анализа эмиссионного спектра астрофизической плазмы, в том числе данные, относящиеся к столкновительным переходам между уровнями тонкой структуры атомов и ионов. На данной странице открыт доступ к обзорным статьям, посвященным теории атомных столкновений.

На странице *Yuri Ralchenko* [79] представлено множество информации об атомных данных в различных областях атомной спектроскопии. На странице находится постоянно обновляемый список атомных данных и информация о конференциях и симпозиумах, посвященных расчету и анализу атомных данных. На данной странице также содержится список ученых, активно работающих в различных областях атомной спектроскопии.

Большой объем атомных данных можно найти в трудах коллоквиумов, симпозиумов и конференций, посвященных расчету, измерению и анализу атомных данных. В качестве примера можно отметить компиляцию [63], и библиографию атомных данных [34]. Большое число ссылок на расчеты и измерения атомных данных, в том числе и на труды раз-

личных конференций представлено в каталоге Golovatyj-1997 [137] и сборнике атомных констант Spravit fiz ik 1994 [135].

Литература

- ovaPodlubnyi1975 [1] *Авилова И.В., Подлубный Л.И.*, *Опт. Спектр.*, **38**, (1975)
- AB00 [2] *Александрова О.А., Бычков К.В.*, *Астрон.ж.*, **77**, 883 (2000)
- Gorb62 [3] *Горбацкий В.Г.*, *Вестник ЛГУ*, **19**, 112 (1962)
- Grinin69 [4] *Гринин В.П.*, *Астрофизика*, **5**, 371 (1969)
- zdevSherstyki1976 [5] *Груздев П.Ф., Шерстюк А.И.*,
Опт. Спектр. **40** (1976)
- DavydkinZon1981 [6] *Давыдкин В.А., Зон Б.А.*, *Опт. спектр.*, **51**, 13 (1981)
- Kirienko1993 [7] *Кириенко А.Б.*, *Письма в АЖ*, **19**, 27 (1993)
- NFK86 [8] *Никитин А.А., Феклистова Т.Х., Холтыгин А.Ф.*, *Публ. Тарг. Астр. obs.*, **51**,
с. 42-50 (1986)
- NFKh90 [9] *Никитин А.А., Феклистова Т.Х., Холтыгин А.Ф.*, *Публ. Тарг. Астр. obs.*, **53**,
53 (1990)
- Ochkur1963 [10] *Очкур В.И.*, *ЖЭТФ*, **45**, 737 (1963)
- ovShchekinov1983 [11] *Сучков А.А., Щекинов Ю.А.*, *Астрофизика*, **19**, 569 (1983)
- Kholtygin1980 [12] *Холтыгин А.Ф.*, *Астрофизика*, **16**, 115 (1980)
- inFeklistova1986 [13] *Холтыгин А.Ф., Феклистова Т.Х.*, *Публ. Тарг. астр. obs.*, **51**, 51 (1986)
- Kholtygin00 [14] *Холтыгин А.Ф.*, *Астрофизика*, **43**, 463 (2000)
- Kholtygin-2002 [15] *Холтыгин А.Ф., Братцев В.Ф., Очкур В.И.*, *Астрофизика*, **45**, 45 (2001)
- vChernysheva1977 [16] *Черепков Н.А., Чернышева Л.В.*, *Сборник. Спектроскопические константы*
атомов, М. (1977)
- garwalKeenan1999 [17] *Aggarwal K.M., Keenan F.P.*, *ApJSS*, **123**, 311 (1999)
- Ambar1933a [18] *V. Ambarzumian*, *Цирк. Пулк. obs. № 6*, 10, 1933.
- ndiPequignot1973 [19] *Aldrovandi S.M.V., Pequignot S.*, *A&A*, **25**, 137 (1973)
- AR85 [20] *Arnaud M., Rothenflug R.*, *A&ASS*, **60**, 425 (1985)
- Audard2001 [21] *Audard M., Behar E., Güdel M., et. al.* *A&A*, **365**, 329 (2001)
- tistaKallman2000 [22] *Bautista M.A., Kallman T.R.*, *ApJ*, **544**, 581-591(2000)
- Bartschat98 [23] *K. Bartschat*, *Comp. Phys. Commun.*, **114** (1998)
- gmanChyhcow1980 [24] *Beigman I.L., Chyhcow B.W.*, *J.Phys.B.* **13**, 565 (1980)
- Bowen34 [25] *Bowen I.*, *Publ. Astron. Soc. Pacif.*, **46**, 146 (1935)
- Brocklehurst1971 [26] *Brocklehurst M.*, *M.N.R.A.S.* **153**, 471 (1971)
- BrownMathews70 [27] *Brown R.L., Mathews W.G.*, *ApJ*, **160**, 939 (1970)
- urgessSeaton1960 [28] *Burgess A., Seaton M.J.*, *M.N.R.A.S.* **120**, 121 (1960)

- Burgess1965 [29] *Burgess A.*, ApJ, **141**, 1588 (1965)
- BurgessSummer1976 [30] *Burgess A., Summer H.*, M.N.R.A.S. **174**, 345 (1976)
- BS87 [31] *Burgess A., Summers H.P.*, M.N.R.A.S., **226**, 227 (1987)
- ButlerDalgarno1980 [32] *Butler S.E., Dalgarno A.*, A&A, **85**, 144 (1980)
- Butler-1984 [33] *Butler K., Mendoza S., Zeppen C.J.*, M.N.R.A.S, **209**, 343 (1984)
- B93 [34] *Butler K.*, IAU Symp. No. 155, 73, (1993)
- CraigBrown1976 [35] *Craig J.D., Brown J.C.*, ApJSS, **49**, 239 (1976)
- Cohen-03 [36] *Cohen D.H., de Messier C.E., MacFarlane J.J. et al.*, ApJ., **586**, 495 (2003)
- DS82 [37] *Dalgarno A., Sternberg A.*, M.N.R.A.S, **200**, 77 (1982)
- DubauPorquet2002 [38] *Dubau J., Porquet D.*, arXiv:astro-ph/0204049v1 (2002)
- Dunn-1984 [39] *Dunn G.H., Belich D.S., Djurich N., Mueller D.W.*, Atom. Phys. 9 Int. Conf. Washington, July 23-27. 1984 Singapore, 1984.
- EMBSL2003 [40] *Ercolano B., Morisset C., Barlow M.J., Storey P.J. and Liu X.-W.*, Mon. Not. R. Astron. Soc., **340**, 1153 (2003)
- FHA96 [41] *Feibelman W.A., Hyung S., Aller L.H.*, M.N.R.A.S., **278**, 625, 1996.
- Ferland86 [42] *Ferland G.I.*, PASP, **98**, 549-581 (1986)
- FursaBray97 [43] *Fursa V., Bray I.*, J.Phys., **B30**, 757 (1997)
- Grandi76 [44] *Grandi S.A.*, Astroph. J., **206**, 658 (1976)
- Grevesse-1996 [45] *Grevesse N., Noels A., Sanval A.J.*, ASP Conf. Ser., **99**, 117 (1996)
- Hucht1996 [46] *van der Hucht, K.A., Cassinelli, J.P., Williams, P.M.*, A&A, **168**, 111 (1996)
- Johnson1972 [47] *Johnson L.C.*, ApJ, **174** (1972)
- Johnson-1987 [48] *Johnson C.T., Burke P.G., Kingston A.E.*, J Phys.B, **20**, 2553 (1987)
- JHB97 [49] *Judge P.G., Hubeny V., Brown J.C.*, ApJSS, **475**, 275 (1997)
- Kafatos73 [50] *Kafatos M.*, Astroph. J., **182**, 433 (1973)
- KafatosLynch1980 [51] *M.Kafatos, J.P.Lynch*, Astroph. J. Suppl. Ser., **42**, 611, 1980.
- Kahn01 [52] *Kahn S.M., Leutenegger M.A., Cottam J. et al.*, A&A, **365**, 312 (2001)
- KanoHattori1984 [53] *Kano Z., Hattori S.*, Phys.Rev. A. **29A** (1984)
- KlimchukCargill2001 [54] *Klimchuk J.A., Cargill P.J.*, ApJ, **553**, 440 (2001)
- Kholttygin-1997 [55] *Kholttygin A.F., Ilin V.B., Voschinnikov N.V.*, A&A, **323**, 189 (1997)
- Kh98a [56] *Kholttygin A.F.*, Astron. Astrophys., **329**, 691 (1998)
- Kholttygin2003 [57] *Kholttygin A.F., Brown J.C., Cassinelli J.P., Fabrika S.N., Monin D.N., Surkov A.E.*, Astron. Astroph. Trans., **22**, 499 (2003)
- Kwitter-2003 [58] *Kwitter K.B., Henry R.B.C. Milingo J.B.*, Pubp. Astron. Soc. Pacif., **80** (2003)
- LandiLandini99 [59] *Landi E., Landini M.*, Astron. Astroph., **347**, 401 (1999)
- Leutenegger-2006 [60] *Leuteneger M.A., Paerels F.B.S., Kahn S., Cohen D.C.*, ApJ, **650**, 1096 (2006)
- Liu-2001 [61] *Liu X.-W, Barlow M.J., Cohen M. et al.*, MNRAS, **323**, 343 (2001)
- Lotz1967 [62] *Lotz W.*, Z.Phys., **206**, 205 (1967), Z.Phys., **216**, 241 (1968)
- M83 [63] *Mendoza C.*, IAU Symp. No. 103, 143, (1983)
- Mewe03 [64] *Mewe R., Raassen A.J.J., Cassinelli J.P., et al.*, Adv.Space Res., **32**, 1167 (2003)
- MeweGronenschild1982 [65] *Mewe R., Gronenschild E.H.B.M., Westergaard N.J., et al.*, ApJ, **260**, 233 (1982)
- Niimura-2002 [66] *Niimura M., Smith S.J., Chutjian A.*, ApJ, **565**, 645 (2002)

- Nussbaumer-83 [67] *Nussbaumer H., Storey P.J.*, A&A, **126**, 75 (1983)
- Nussbaumer-84 [68] *Nussbaumer H., Schmutz W.*, A&A, **138**, 495 (1984)
- Nussbaumer-84a [69] *Nussbaumer H., Storey P.J.*, A&ASS, **56**, 145 (1984)
- Nussbaumer-86 [70] *Nussbaumer H., Storey P.J.*, Al, Si., A&ASS, **64**, 145 (1984)
- Nussbaumer-87 [71] *Nussbaumer H., Storey P.J.*, A&ASS, **69**, 123 (1987)
- Omidwar1983 [72] *Omidwar K.*, ADNDT, **28**, 215 (1983)
- Peach1967 [73] *Peach G.*, Mem. Roy.Astr.Soc. **71**, 13 (1967)
- Peimbert67 [74] *Peimbert M.*, ApJ, **150**, 825 (1967)
- PengellySeaton1964 [75] *Pengelly R.M., Seaton M.J.*, M.N.R.A.S., **127**, 165 (1964)
- PotAldrovandi1986 [76] *Pequignot D., Aldrovandi S.M.V.*, A&A. **161**, 169 (1986)
- Pequignot-1978 [77] *Pequignot D., Aldrovandi S.M.V., Stasinska G.*, A&A. **63**, 313 (1978)
- Pradhan1976 [78] *Pradhan A.K.*, MNRAS, **177**, 31 (1976)
- R00 [79] *Ralchenko Y.*, <http://plasma-gate.weizmann.ac.il/DBfapp.html>,
<http://plasma-gate.weizmann.ac.il/DBtable.html>
- Raman-Attia-1986 [80] *Raman-Attia M., Jachen M., Laplace G., Rochman A.*, JPhys. B. Atom.Mol.Phys. **19** (1986)
- RP94 [81] *Rola C., Pelat D.*, A&A, **287**, 677 (1994)
- RolaStasinska1994 [82] *Rola C., Stasinska G.*, A&A, **282**, 199 (1994)
- RoueffLeBourlot1990 [83] *Roueff E., Le Bourlot J.*, A&A, **236**, 515 (1990)
- Seaton1955 [84] *Seaton M.J.*, Proc. Phys. Soc. **68A**, 457 (1955)
- Seaton1959 [85] *Seaton M.J.*, M.N.R.A.S. **119**, 81 (1959)
- Stancil-1998 [86] *Stancil P.C., Havener C.C., Krstic P.S. et al.*, ApJ, **502**, 1006 (1998)
- StangelliniKaler1989 [87] *Stangellini L., Kaler J.B.*, ApJ, **343**, 811 (1989)
- SD93 [88] *Sutherland R.S., Dopita M.A.*, ApJSS, **88**, 253 (1993)
- Shevelko-1983 [89] *Shevelko V., Urnov A.M., Vainshtein L.A., Müller A.*, MNRAS, **203**, 45 (1983)
- Storey1981 [90] *Storey P.J.*, M.N.R.A.S., **195**, 27P (1981)
- SvS82 [91] *Shull J.M. and van Steenberg M.*, Astroph. J. Suppl. Ser., **48**, 95 (1982)
- Watson-1980 [92] *Watson W.D., Western L.R., Christensen R.B.*, ApJ, **240**, 956 (1980)
- Tarter1979 [93] *Tarter C.B., Weisheit J.C., Dalgarno A.*, A&A, **71**, 366 (1979)
- TawaraKato1987 [94] *Tawara H., Kato T.*, Atom. Data Nucl. Data Tables, **36**, 167 (1987)
- VYBT93 [95] *Verner D.A., Yakovlev D.G., Band I.M., Trzhaskovskaya M.B.*, ADNDT, **55**, 233 (1993)
- WC00 [96] *Waldron W.L., Cassinelli J.P.*, ApJ., **548**, L45 (2000)
- YehLindau1985 [97] *Yeh J.I., Lindau I.*, ADNDT, **32**, 1 (1985)

МОНОГРАФИИ, УЧЕБНИКИ И УЧЕБНЫЕ ПОСОБИЯ

- Amusia1987 [98] *Амусья М.Я.*, Атомный фотоэффект. М. (1987)
- AtomsAstr1986 [99] *Атомы в астрофизике: сб. статей*, Пер. с англ. под ред. Л. А. Вайнштейна. М. (1986)

- Boiko-1988** [100] *Бойко В.А., Пальчиков В.Г., Скобелев И.Ю., Фаснов А.Я.*, Рентгеновская спектроскопия многозарядных ионов. М. (1988)
- Boch92** [101] *Бочкарев Н.Г.*, Основы физики межзвездной среды, М., изд. МГУ (1991)
- Brandt75** [102] *Брандт З.*, Статистические методы анализа наблюдений, М., изд. Мир (1975)
- VainshteinShevelko1986** [103] *Вайнштейн Л.А., Шевелько В.П.*, Структура и характеристики ионов в горячей плазме. М., Наука, Гл. Ред. Физ.-Мат. Литературы (1986)
- BychkovZemtsov2006** [104] *Земцов Ю.К., Бычков К.В.*, КУРС ЛЕКЦИЙ ПО АТОМНОЙ ФИЗИКЕ, <http://heritage.sai.msu.ru/ucheb/Zemcov/index.html> (2007)
- BS1960** [105] *Бете Г., Солпитер Э.*, Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. М., Мир, (1960)
- Ivanov1969** [106] *Иванов В.В.*, Перенос излучения и спектры небесных тел, М. (1969)
- Kal78** [107] *Калиткин Н.Н.*, Численные методы, М., Наука (1978)
- KP79** [108] *Каплан С.А., Пикельнер С.Б.*, Физика межзвездной среды, М., (1979), §4, 5, 14
- LL73** [109] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.*, Теория поля, Физматгиз, 6-е изд., М. (1973)
- LL74** [110] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.*, Квантовая Механика, Физматгиз, 3-е изд., М. (1974)
- LevinsonNikitin1962** [111] *Левинсон И.Б., Никитин А.А.*, Руководство по теоретическому вычислению интенсивностей линий в атомных спектрах. Л., (1962)
- Levich1971** [112] *Левич В.Г., Вдовин Ю.А., Мямлин В.А.*, Курс теоретической физики, Том II. Квантовая механика. Квантовая статистика и физическая кинетика, М. (1971)
- Nagirner2004** [113] *Нагирнер Д.И.*, Квантовая механика и статистическая физика для астрономов, СПб, Изд. СПбГУ, 308 стр. (2004)
- Nagirner2007** [114] *Нагирнер Д.И.*, Радиационные процессы в астрофизике, СПб, Изд. СПбГУ, 294 стр. (2007)
- NR73** [115] *А.А.Никитин, З.Б.Рудзикас*, Основы теории спектров атомов и ионов, Наука, М., (1973)
- Pott87** [116] *Потташ С.*, Планетарные туманности, М., Мир (1987)
- Presn-1986** [117] *Пресняков Л.П., Шевелько В.П., Янев Р.К.*, Элементарные процессы с участием многозарядных ионов, М. (1986)
- RNK1990** [118] *З.Б.Рудзикас, А.А.Никитин, А.Ф.Холтыгин*, Теоретическая атомная спектроскопия, Изд. ЛГУ, Л., (1990)
- Smirnov1968** [119] *Смирнов Б.М.*, Атомные столкновения и элементарные процессы в плазме, М. (1968)
- Sobelman1963** [120] *И.И.Собельман*, Введение в теорию атомных спектров, Физматгиз, М., (1963)
- Sobelman1977** [121] *И.И.Собельман*, Введение в теорию атомных спектров, Физматгиз, М., (1977)
- Sobolev1985** [122] *Соболев В.В.*, Курс теоретической астрофизики, М., Наука (1985)
- SorochenkoGordon2003** [123] *Сороченко Р.Л., Гордон М.А.*, Рекомбинационные радиолнии, М, Физматлит (2003)
- FanoCooper1972** [124] *Фано У., Купер Джс.*, Спектральные распределения сил осцилляторов в атомах. М. (1972)
- YutsisBandzaitis1977** [125] *Юцис А.П., Бандзайтис А.А.*, Теория момента количества движения в квантовой механике, Вильнюс (1977)
- YutsisSavukinas1973** [126] *Юцис А.П., Савукинас А.Ю.*, Математические основы теории атома, Вильнюс (1973)
- Ost74** [127] *Osterbrock D.E.*, Astrophysics of Gaseous Nebulae. Freeman, San Francisco (1974)

- Zeippen1982** [128] *Zeippen C.J.*, MNRAS, **198**, 111 (1982)
Zeippen1987 [129] *Zeippen C.J.*, A&A, **173**, 410 (1987)

СПРАВОЧНИКИ, КАТАЛОГИ, ТАБЛИЦЫ

- AllenAstQuant** [130] Allen's astrophysical quantities, 4th ed., New York: AIP Press; Springer, Ed. A.N.Cox (2000)
- VSYu1973** [131] *Л.А.Вайнштейн, И.И.Собельман, Е.А.Юков*, Сечения возбуждения атомов и ионов электронами, Наука, М., (1973)
- GSFK91** [132] *Головатый В.В., Сапар А.А., Фежлистова Т.Х., Холтыгин А.Ф.*, Атомные данные для спектроскопии разреженной астрофизической плазмы. Газовые туманности, Таллинн, Валгус (1991)
- dtSigSmirnov1986** [133] *Радциг А.А., Смирнов Б.М.*, Параметры атомов и атомных ионов: Справочник. М. (1986)
- Sena1977** [134] *Сена Л.А.*, Единицы физических величин и их размерности. 2-е изд, М, Наука (1977)
- SpravFizFak1994** [135] Справочник констант элементарных процессов с участием атомов, ионов, электронов, фотонов под ред. А.Г.Жиглинского, СПб, изд. СПбГУ (1994)
- novOdintsova1982** [136] *Стриганов А.Р., Одицова Г.А.*, Таблицы спектральных линий атомов и ионов, М., Энергоиздат (1982)
- Golovatyj-1997** [137] *Golovatyj V.V., Sapar A., Feklistova T., Kholtygin A.F.*, Catalogue of atomic data for low-density astrophysical plasma, Astron.Astroph.Transact., **12**, 85-241, (1997)
- Moore70** [138] *Moore Ch.E.*, Selected Tables of Atomic Spectra, NSRDS-NBS 3, Section 3 (1970)
- Moore71** [139] *Moore Ch.E.*, Selected Tables of Atomic Spectra, NSRDS-NBS 3, Section 4 (1971)
- Moore73** [140] *Moore Ch.E.*, Selected Tables of Atomic Spectra, NSRDS-NBS 3, Section 5 (1975)

ОБЗОРНЫЕ СТАТЬИ

- Beigman-1968** [141] *Бейгман И.Л., Вайнштейн Л.А., Сюняев Р.А.*, Диэлектронная рекомбинация, УФН, **95**, 267 (1968)
- Vainshtein1980** [142] *Вайнштейн Л.А.*, Диэлектронная рекомбинация, Труды ФИАН СССР, **119** (1980)
- Lendjel-1987** [143] *Лендьел В.И., Навроцкий В.Т., Сабад Е.Н.*, Резонансы в рассеянии электронов на атомах и ионах, УФН, **151** (1987)
- Massey1958** [144] *Мессе Г.*, Теория рассеяния медленных электронов, УФН, **64**, 589 (1958)
- Gudel2004** [145] *Gudel M.*, X-ray astronomy of stellar coronae, A&A, **12**, 71-237 (2004)

Принятые обозначения журналов:

A&A — Astronomy and Astrophysics

A&ASS — Astronomy and Astrophysics Suppl. Ser.

ApJ — Astrophysical Journal

ApJSS — Astrophysical Journal Suppl. Ser.

ADNDT — Atomic Data Nucl. Data Tables

M.N.R.A.S. — Monthly Notices of Royal Astr. Society

Приложение А

Единицы физических величин

А.1 Системы физических величин и атомные константы

s.SystPhUn

Система единиц образуется совокупностью нескольких условно выбираемых основных единиц (от трех до семи). Все остальные единицы являются производными и определяются с помощью основных единиц.

На основе перечисленных единиц и их десятичных долей были построены основные системы единиц. Наиболее удобной для физики оказалась гауссова или симметричная система единиц СГС (основные единицы см, г, с). С 1 января 1980 г. в качестве государственного стандарта СССР введена в действие Международная система единиц СИ (основные единицы м, кг, с, А, К, кд, моль) [RadtsigSmirnov1986, Sena1977, I33, I34]. В различных областях науки могут использоваться и другие системы единиц (см. ниже). Перевод единиц из одной системы в другую осуществляется с помощью формул размерности [Sena1977, I34].

А.2 Основные физические константы, связанные с атомной спектроскопией

Для выполнения расчетов скоростей и сечений элементарных процессов необходимо знание физических постоянных. Для удобства читателя значения основных констант, связанных с атомной спектроскопией, приведены в табл. А.1 (в системе СГС). Значения констант в системе СИ могут быть найдены в работах [AllenAstQuant, RadtsigSmirnov1986, I30, I33].

А.3 Система атомных единиц

ss.AtomUnits

Для упрощения записи физических законов и определений, относящихся к области атомной физики, часто прибегают к сокращению числа универсальных постоянных. Этого можно добиться, приравнивая еди-

Таблица А.1. Основные физические константы по [AllenAstQuant, RadtsigSmirnov1986 \[130, 133\]](#)

Обозначение	Числовое значение в системе СГС	Погрешн. посл. цифры	Название
c	$2.99792458 \cdot 10^{10}$ см/с	40	Скорость света в вакууме
e	$4.80324 \cdot 10^{-10}$ ед. СГСЭ	3	Заряд электрона
h	$6.62620 \cdot 10^{-27}$ эрг·с	5	Постоянная Планка
$\hbar = h/2\pi$	$1.05459 \cdot 10^{-27}$ эрг·с	5	
$\alpha = e^2/\hbar c$	$7.297354 \cdot 10^{-3}$	1	Постоянная тонкой структуры
α^{-1}	137.03597	1	
m_e	$9.10956 \cdot 10^{-28}$ г	5	Масса электрона
m_p	$1.67265 \cdot 10^{-24}$ г	5	Масса протона

Table.BasePhysConst

нице основные физические величины, из которых могут быть получены все основные единицы как производные.

Таблица А.2. Система атомных единиц Хартри $e = m_e = \hbar = 1$

Обозначение	В атомн. сист. ед.	В системе СГС	Величина
e	1	$4.8032 \cdot 10^{-10}$ ед. СГСЭ	Заряд (заряд электрона)
m_e	1	$9.1096 \cdot 10^{-28}$ г	Масса (масса электрона)
\hbar	1	$1.0546 \cdot 10^{-27}$ эрг·с	Момент количества движения (постоянная Планка)
$a_0 = \hbar^2/m_e e^2$	1	$5.2918 \cdot 10^{-9}$ см	Длина (боровский радиус)
$v_0 = e^2/\hbar$	1	$2.1877 \cdot 10^8$ см/с	Скорость
$\varepsilon_0 = m_e e^4/\hbar^2$	1	$4.3598 \cdot 10^{-11}$ эрг=2Ry	Энергия
$\tau_0 = \hbar^3/m_e e^4$	1	$2.4189 \cdot 10^{-17}$ см	Время

Table.AtomUnits

Одной из наиболее употребительных естественных систем единиц является система Хартри, часто называемая системой *атомных единиц*. В ней приравнены единице заряд (e) и масса (m_e) электрона, а также постоянная Планка (\hbar). Переход в формулах атомной физики к атомным единицам производится формальным приравниванием $e = m_e = \hbar = 1$. Из этих основных единиц можно построить только одну комбинацию с заданной размерностью для всех производных величин. В системе *атомных единиц* единицей длины служит боровский радиус электрона $a_0 = 0.529 \cdot 10^{-8}$ см, единицей энергии – величина $m_e e^4/\hbar^2 = 27.212$ эВ и т.п.

Удобство атомной системы единиц в том, что параметры атомных объектов в них безразмерны и по порядку величины близки к единице. В этой системе единиц значительно упрощаются основные уравнения и соотношения атомной физики. В табл. А.2 даны значения основных физических величин в атомной системе единиц.

В квантовой электродинамике удобно использовать систему единиц, в которой приравнены единице постоянные c , m_e и \hbar . Такая система

единиц называется *релятивистской*.

Единица энергии в такой системе совпадает с энергией, отвечающей массе покоя электрона $m_e c^2 \approx 8.2 \cdot 10^{-7}$ эрг, единица длины — с комptonовской длиной волны электрона $\lambda_C/2\pi \approx 3.9 \cdot 10^{-11}$ см и т.д. В табл. 1.6 справочника [133] даны значения основных физических величин в релятивистской системе единиц.

А.3.1 Переводные множители и вспомогательные соотношения

ss.EnergFact

В атомной физике используется много несистемных единиц энергии. Для удобства читателя в табл. А.3 содержатся переводные множители для единиц энергии.

Таблица А.3. Переводные множители для единиц энергии

Единица измерения	эВ	эрг	см ⁻¹	°К	Ry	МГц
эВ	1	$1.6022 \cdot 10^{-12}$	8065.48	11604	$7.3498 \cdot 10^{-2}$	$2.4180 \cdot 10^8$
эрг	$6.2415 \cdot 10^{11}$	1	$5.0340 \cdot 10^{15}$	$7.2430 \cdot 10^{15}$	$4.5873 \cdot 10^{10}$	$1.5092 \cdot 10^{20}$
см ⁻¹	$1.23985 \cdot 10^{-4}$	$1.9865 \cdot 10^{-16}$	1	1.4388	$9.1127 \cdot 10^{-6}$	$2.9979 \cdot 10^4$
°К	$8.617 \cdot 10^{-5}$	$1.3807 \cdot 10^{-16}$	0.69502	1	$6.3335 \cdot 10^{-6}$	$2.0836 \cdot 10^4$
Ry	13.606	$2.1799 \cdot 10^{-11}$	$1.0974 \cdot 10^5$	$1.5789 \cdot 10^5$	1	$3.2898 \cdot 10^9$
МГц	$4.1357 \cdot 10^{-9}$	$6.6262 \cdot 10^{-21}$	$3.3356 \cdot 10^{-5}$	$4.7993 \cdot 10^{-5}$	$3.0397 \cdot 10^{-10}$	1

Table.EnFact

В заключение данного пункта приведем несколько полезных формул для расчета длин волн и энергий переходов.

Для определения длины волны перехода $k \rightarrow i$ между уровнями с энергиями E_k и E_i , выраженными в см⁻¹, могут быть использованы следующие соотношения:

$$\lambda_{ik} (\text{см}) = \frac{1}{E_k - E_i}, \quad \lambda_{ik} (\text{мкм}) = \frac{10^4}{E_k - E_i}, \quad \lambda_{ik} (\text{Å}) = \frac{10^8}{E_k - E_i}. \quad (\text{A.3.1})$$

Eq.lambda-Eik

Отметим, что в данном соотношении имеются в виду длины волн в вакууме λ_{vak} . В оптической и ближней УФ области спектра ($\lambda > 2000 \text{ Å}$) часто используются длины волн в воздухе λ_{air} . Для перехода от длины волны в воздухе к длине волны в вакууме используется соотношение $\lambda_{\text{vak}} = n\lambda_{\text{air}}$. Среднее значение коэффициента преломления сухого воздуха при 15° С и 760 мм рт. ст. равно $n = 1.000278$. Для получения более точного значения длины волны в вакууме следует учесть зависимость коэффициента преломления от λ_{air} (см. табл. в § 32 в справочнике [130]).

AllenAstQuant

При известных значениях $\lambda = \lambda_{\text{vak}}$, используя соотношения

$$\Delta E_{ik} = E_k - E_i (\text{см}^{-1}) = \frac{1}{\lambda_{ik} (\text{см})} = \frac{10^4}{\lambda_{ik} (\text{мкм})} = \frac{10^8}{\lambda_{ik} (\text{Å})}, \quad (\text{A.3.2})$$

Eq.Eik-lambda

можно найти разность энергий уровней, между которыми происходит переход с длиной волны λ_{ik} .

Приложение В

Радиационные параметры водорода и гелия

AppHradParam

Водород и гелий являются наиболее распространенными элементами во Вселенной, поэтому в большинстве астрофизических исследований требуется максимально полная и точная спектроскопическая информация об атомах и ионах H, He и He⁺. Расчет сечений фотоионизации и скоростей фоторекомбинации водорода и водородоподобных ионов описан в параграфах 4.2 – 4.5 гл. 4. Обратимся к получению радиационных характеристик переходов между дискретными уровнями: радиальных интегралов переходов, сил осцилляторов и вероятностей переходов.

В.1 Радиационные параметры водорода и водородоподобных ионов

Точные выражения для радиальных интегралов переходов между уровнями nl и $n'l'$ водородоподобных ионов приведены в монографии [105]. При $n \neq n', l \neq l'$

$$\begin{aligned} (nl | r | n'l') &= R_{nl,n'l'} = \frac{(-1)^{\tilde{n}}}{4(2l_{>} - 1)} \times \\ &\times \sqrt{\frac{(n+l)!(n'+l')!}{(n-l-1)!(n-l'-1)!}} x^{l_{>}+1} y^{n_{\text{r}}+n_{\text{r}}^*-1} \times \\ &\times \{F(-n_{\text{r}}, -n'_{\text{r}}, 2l_{>}, -x) - y^2 F(-n_{\text{r}} - 2, -n'_{\text{r}} - 2, 2l_{>}, -x)\}, \\ n_{\text{r}} &= n - l - 1, \quad n'_{\text{r}} = n' - l' - 1, \end{aligned} \quad (\text{B.1.1}) \quad \text{Eq. Rnlprim-Hlike}$$

$\tilde{n} = n_{\text{r}} - 1$ при $l > l'$ и $\tilde{n} = n'_{\text{r}} - 1$ при $l < l'$, а $l_{>} = \max(l, l')$. Здесь $x = 4nn'/(n-n')^2$, $y = (n'-n)/(n'+n)$. Гипергеометрическая функция

$$F(a, b, c, x) = 1 + \frac{ab}{c!} x + \frac{a(a+1)b(b+1)}{c(c+1)2!} x^2 + \dots \quad (\text{B.1.2}) \quad \text{Eq. HypGeomFunct}$$

Радиальные квантовые числа n_r и n'_r целые, поэтому ряд (Eq.Rnlprim-Hlike (B.1.1)) конечен. Так как аргумент x быстро растет с ростом n_r и n'_r , непосредственные вычисления по формуле (Eq.Rnlprim-Hlike (B.1.1)) нецелесообразны. Уже при $n_r, n'_r > 20$ значения слагаемых в формуле (Eq.Rnlprim-Hlike (B.1.1)) превосходят максимально возможные для многих из современных ЭВМ.

Преобразуем, поэтому, выражение (Eq.Rnlprim-Hlike (B.1.1)) к более удобному виду. Пусть, например, $l > l'$ тогда

$$R_{nl,n'l'} = -\frac{1}{4} \sqrt{\frac{(n+l)!(n'+l)!}{(n-l-1)!(n-l'-1)!(n'-n)!(n+2l+1)}} \times \frac{n!n!}{(n-l-1)!(n-l'-1)!(n'-n)!(n+2l+1)} \times x^n y^{n_r+n'_r} \sum_{k=0}^{n_r} g_k. \quad (\text{Eq.Rnlprim-HlikeC})$$

Здесь $g_k = g_k(n_r, n'_r, l, x)$. Рекуррентные соотношения для этой функции следующие:

$$g_{k+1} = \tilde{g}_{k+1} \left(1 + y^2 \frac{(n_r+1)(n_r+2)}{(k+1)(k+2)} \right) \\ \tilde{g}_{k+1} = -\frac{1}{(k+1)x} \frac{(n_r+l-k-1)(n_r-k)}{n'_r - n_r + k + 1} g_k, \quad g_0 = 1.$$

Так как $x \gg 1$, то ряд (Eq.Rnlprim-HlikeCalc (B.1.3)) быстро сходится.

Силы осцилляторов и вероятности дипольных переходов могут быть получены через обычные соотношения, приведенные в § 4.1 гл. IV. Подставив значения энергий уровней атома водорода, имеем

$$f_{nl,n'l'} = \frac{n^{-2} - (n')^{-2}}{6(l+1)} l > R_{nl,n'l'}^2 \quad (\text{Eq.Hlike-f})$$

и

$$A_{nl,n'l'} = \frac{1.399 \cdot 10^9}{2l'+1} l > [n^{-2} - (n')^{-2}]^3 R_{nl,n'l'}^2 \quad (\text{Eq.Hlike-W})$$

Приведем в табл. Table.RadParHI (B.1) значения $R_{nl,n'l'}^2$, $f_{nl,n'l'}$, $A_{nl,n'l'}$ и $\tau_{n'l'}$ для водорода. Отметим, что некоторые из указанных в работе [105] значений $R_{nl,n'l'}^2$ содержат ошибку во втором-третьем знаках после запятой. Радиационные параметры для водородоподобных ионов с зарядом Z можно найти из соответствующих водородных значений через масштабные соотношения:

$$\lambda_{nl,n'l'} = Z^{-2} \lambda_{nl,n'l'}^{\text{HI}}, \quad R_{nl,n'l'} = Z^{-1} R_{nl,n'l'}^{\text{HI}}, \\ f_{nl,n'l'} = f_{nl,n'l'}^{\text{HI}}, \quad A_{nl,n'l'} = Z^4 A_{nl,n'l'}^{\text{HI}}. \quad (\text{Hlike-lambdaScale})$$

Значение $f_{nl,n'l'}$ одинаково для всех водородоподобных ионов. Важными радиационными параметрами являются также времена жизни уровней τ_{nl} (см. формулу Eq.tau(k) (4.1.26)) и коэффициенты ветвления:

$$P_{n'l',nl} = \tau_{n'l',nl} A_{n'l',nl}. \quad (\text{Hlike-BrCoeff})$$

Таблица В.1. Радиационные параметры переходов $nl - n'l'$ атома водорода

Table.RadParHI

$nl - n'l'$	$R_{nl,n'l'}^2$	$f_{nl,n'l'}$	$A_{nl,n'l'}, c^{-1}$	$\tau_{n'l'}, ns$
1s - 2p	1.665	0.4162	$6.269 \cdot 10^8$	1.60
2p - 3s	0.881	0.01360	$6.320 \cdot 10^6$	158
1s - 3p	0.267	0.07911	$1.674 \cdot 10^8$	5.27
2s - 3p	9.393	0.4349	$2.246 \cdot 10^7$	-
2p - 3d	22.543	0.6958	$6.469 \cdot 10^7$	15.5
2p - 4s	0.146	0.003042	$2.577 \cdot 10^6$	226
3p - 4s	5.971	0.03225	$1.836 \cdot 10^6$	-
1s - 4p	0.093	0.02906	$6.839 \cdot 10^7$	12.3
2s - 4p	1.644	0.1028	$9.672 \cdot 10^6$	-
3s - 4p	2.991	0.4847	$3.067 \cdot 10^6$	-
3d - 4p	1.696	0.01099	$3.478 \cdot 10^5$	-
2p - 4d	2.923	0.1218	$2.064 \cdot 10^7$	36.1
3p - 4d	57.235	0.6183	$7.041 \cdot 10^6$	-
3d - 4f	104.659	1.018	$1.380 \cdot 10^8$	72.5
2p - 5s	0.052	0.001213	$1.289 \cdot 10^6$	352
3p - 5s	0.940	0.007427	$9.950 \cdot 10^5$	-
4p - 5s	21.162	0.05290	$6.454 \cdot 10^5$	-
1s - 5p	0.044	0.01408	$3.474 \cdot 10^7$	238
2s - 5p	0.599	0.04193	$4.591 \cdot 10^6$	-
3s - 5p	5.106	0.1210	$1.639 \cdot 10^6$	-
3d - 5p	0.233	0.002209	$1.496 \cdot 10^5$	-
4s - 5p	72.553	0.5441	$7.376 \cdot 10^5$	-
4d - 5p	9.279	0.02784	$1.887 \cdot 10^5$	-
2p - 5d	0.951	0.04438	$9.433 \cdot 10^6$	69.6
3p - 5d	8.811	0.1392	$3.393 \cdot 10^6$	-
4p - 5d	121.858	0.6093	$1.487 \cdot 10^6$	-
4f - 5d	2.760	0.008871	$5.05 \cdot 10^4$	-
3d - 5f	11.014	0.1566	$4.545 \cdot 10^6$	1.40
4d - 5f	197.832	0.8902	$2.586 \cdot 10^6$	-
4f - 5g	314.018	1.3458	$4.256 \cdot 10^6$	235

Величина $P_{n'l',nl}$ равна вероятности того, что атом, находящийся на уровне $n'l'$, совершит радиационный переход на уровень nl .

Таблица В.2. Коэффициент C_{nl} в формуле $\frac{hI_{like-taunl}}{(В.1.8)}$ для τ_{nl} водородоподобных ионов

Table.Cnl

l	s	p	d	f	g	h l=16	...
n							
2	1.99	-	-	-	-	-	-
3	1.95	1.43	-	-	-	-	-
4	1.92	1.31	1.26	-	-	-	-
5	1.90	1.32	1.25	1.18	-	-	-
10	1.86	1.34	1.20	1.13	1.10	-	-
20	1.85	1.32	1.17	1.10	1.06	-	-
∞	1.81	1.26	1.08	0.99	0.93	0.89	0.94

Обширные расчеты величин τ_{nl} и $P_{n'l, nl}$ приведены в работе [Midwar1983]. Там же дано полуэмпирическое выражение для времени жизни уровней

$$\tau_{nl} = C_{nl} \mu^{-1} Z^{-4} n^3 l^2 \cdot 10^{-10} \quad (\text{c}), \quad (\text{B.1.8}) \quad \text{Hlike-taun1}$$

где μ – приведенная масса в единицах массы электрона m_e . Значения медленно меняющихся коэффициентов C_{nl} приведены в Табл. B.2. Соотношение (B.1.8) применимо и для ридберговских ($n \gg 1$) уровней неводородоподобных атомов.

Таблица В.3. Вероятности разрешенных переходов водорода

Table.HI-Wnprim

$n - n'$	$\lambda_{nn'}, \text{Å}$	$A_{nn'}, \text{c}^{-1}$	$n - n'$	$\lambda_{nn'}, \text{Å}$	$A_{nn'}, \text{c}^{-1}$
1-2	1215.67	$4.699 \cdot 10^8$	2-8	3889.05	$2.215 \cdot 10^5$
1-3	1025.72	$5.575 \cdot 10^7$	2-9	3835.38	$1.216 \cdot 10^5$
1-4	972.537	$1.278 \cdot 10^7$	2-10	3797.90	$7.122 \cdot 10^4$
1-5	949.743	$4.125 \cdot 10^6$	2-11	3770.63	$4.397 \cdot 10^4$
1-6	937.803	$1.644 \cdot 10^6$	2-12	3750.15	$2.834 \cdot 10^4$
1-7	930.748	$7.568 \cdot 10^5$	2-13	3734.37	$1.893 \cdot 10^4$
1-8	926.226	$3.869 \cdot 10^5$	2-14	3721.94	$1.303 \cdot 10^4$
1-9	923.150	$2.143 \cdot 10^5$	2-15	3711.97	$9.210 \cdot 10^3$
1-10	920.963	$1.263 \cdot 10^5$	2-16	3703.85	$6.658 \cdot 10^3$
1-11	919.351	$7.834 \cdot 10^4$	2-17	3697.15	$4.910 \cdot 10^3$
1-12	918.129	$5.068 \cdot 10^4$	2-18	3691.55	$3.685 \cdot 10^3$
1-13	917.181	$3.333 \cdot 10^4$	2-19	3686.83	$2.809 \cdot 10^3$
1-14	916.429	$2.341 \cdot 10^4$	2-20	3682.81	$2.172 \cdot 10^3$
1-15	915.824	$1.657 \cdot 10^4$	3-4	18751.0	$8.966 \cdot 10^6$
1-16	915.329	$1.200 \cdot 10^4$	3-5	12818.1	$2.201 \cdot 10^6$
1-17	914.919	$8.858 \cdot 10^3$	3-6	10938.1	$7.783 \cdot 10^5$
1-18	914.576	$6.654 \cdot 10^3$	3-7	10049.4	$3.358 \cdot 10^5$
1-19	914.286	$5.077 \cdot 10^3$	3-8	9545.97	$1.651 \cdot 10^5$
5-20	914.039	$3.928 \cdot 10^3$	3-9	9223.02	$8.905 \cdot 10^4$
2-3	6562.80	$4.414 \cdot 10^7$	3-10	9014.91	$5.156 \cdot 10^4$
2-4	4861.32	$8.419 \cdot 10^6$	3-11	8862.79	$3.156 \cdot 10^4$
2-5	4340.46	$2.530 \cdot 10^6$	3-12	8750.48	$2.021 \cdot 10^4$
2-6	4101.73	$9.732 \cdot 10^5$	3-12	8665.02	$1.343 \cdot 10^4$
2-7	3970.07	$4.389 \cdot 10^5$	3-14	8598.40	$9.211 \cdot 10^3$
			3-15	8545.39	$6.490 \cdot 10^3$

Для достаточно плотной плазмы ($n > 10^9 \text{ см}^{-3}$) населенности уровней пропорциональны их статистическим весам: $g_{nl} = 2(2l + 1)$. В этом случае совокупность состояний nl с разными значениями l можно рассматривать как эффективный уровень n . Вероятности и силы осцилляторов перехода $n' \rightarrow n$ рассчитываются, соответственно, по формулам

$$f_{nn'} = (n)^{-2} \sum_{l, l'} (2l + 1) f_{nl, n'l'}, \quad (\text{B.1.9}) \quad \text{Hlike-fnnprim}$$

Таблица В.4. Коэффициенты $g_i(n)$ в представлении фактора Гаунта

Table.GauntFactJohnson

n			
g_i	1	2	> 3
$g_0(n)$	1.130	1.0785	$0.9935 + 0.2328n^{-1} - 0.1296n^{-2}$
$g_1(n)$	-0.4059	-0.23319	$-(0.6282 - 0.5598n^{-1} + 0.5299n^{-2})n^{-1}$
$g_1(n)$	0.07014	0.02947	$-(0.3887 - 1.181n^{-1} + 1.470n^{-2})n^{-2}$

Таблица В.5. Вероятности переходов $n' - n$ водорода в приближении Крамерса

Table.HIWkr

$n' - n$	A^{Kr}, c^{-1} (Eq. 8-14)	A^{Kr}, c^{-1} (B.1.13)	A^{exact}, c^{-1}
1-2	$4.50 \cdot 10^8$	$4.703 \cdot 10^8$	$4.699 \cdot 10^8$
1-3	$5.41 \cdot 10^7$	$5.577 \cdot 10^7$	$5.575 \cdot 10^7$
1-4	$1.24 \cdot 10^7$	$1.279 \cdot 10^7$	$1.278 \cdot 10^7$
1-5	$4.02 \cdot 10^6$	$4.127 \cdot 10^6$	$4.125 \cdot 10^6$
1-6	$1.60 \cdot 10^6$	$1.645 \cdot 10^6$	$1.644 \cdot 10^6$
1-7	$7.38 \cdot 10^5$	$7.572 \cdot 10^5$	$7.568 \cdot 10^5$
1-8	$3.77 \cdot 10^5$	$3.871 \cdot 10^5$	$3.869 \cdot 10^5$
1-9	$2.09 \cdot 10^5$	$2.143 \cdot 10^5$	$2.143 \cdot 10^5$
1-10	$1.23 \cdot 10^5$	$1.264 \cdot 10^5$	$1.263 \cdot 10^5$

* Примечание. В скобках указаны представления для фактора Гаунта.

$$A_{n'n} = (n')^{-2} \sum_{l,l'} (2l' + 1) A_{n'l',nl}. \quad (\text{B.1.10})$$

В Табл. В.3 дадим значения $A_{n'n}$ при $n \leq 3$, $n' \leq 20$ [172]. В приближении Крамерса [70]

$$f_{nn'}^{\text{Kr}} = \frac{32n}{3\sqrt{3}\pi} \frac{g_{nn'}}{(n')^3(1+u)^3}, \quad (\text{B.1.11})$$

$$A_{n'n}^{\text{Kr}} = \frac{16}{3\sqrt{3}\pi} \frac{\alpha^4 c}{a_0} Z^4 \frac{g_{nn'}}{(n')^5 n (1+u)^3}, \quad (\text{B.1.12})$$

где $g_{nn'}$ — поправочный множитель Гаунта. Для вычисления $g_{nn'}$ можно использовать формулу (Eq. 8-14) с заменой u на $-(n/n')^2$. Выражение для $g_{nn'}$, в которое входят только целые степени $1+u$, получено в работе [47]:

$$g_{nn'} = g_n + \frac{g_1(n)}{1+u} + \frac{g_2(n)}{(1+u)^2}, \quad 1+u = 1 - \left(\frac{n}{n'}\right)^2, \quad (\text{B.1.13})$$

а коэффициенты $g_i(n)$ даны в Табл. В.4.

Для сравнения в табл. В.5 приведены значения $A_{n'n}$ в приближении Крамерса и точные, найденные согласно (B.1.10). Видно, что точность этого приближения достаточна для астрофизических исследований. Для плотной плазмы следует учитывать эффекты дебаевского экранирования. Для больших значений зарядов ядер следует учитывать релятивистские эффекты [100, 133].

Таблица В.6. Вероятности переходов между компонентами резонансной линии

$2p \rightarrow 1s$ водородоподобных ионов				
Z	Ион	$A_{1/2,1/2}, \text{c}^{-1}$	$A_{3/2,1/2}, \text{c}^{-1}$	$A_{\text{H}}Z^4, \text{c}^{-1}$
2	He ⁺	$1.003 \cdot 10^{10}$	$1.003 \cdot 10^{10}$	$1.003 \cdot 10^{10}$
10	Ne ⁹⁺	$6.27 \cdot 10^{12}$	$6.26 \cdot 10^{12}$	$6.269 \cdot 10^{12}$
20	Ca ¹⁹⁺	$1.01 \cdot 10^{14}$	$9.88 \cdot 10^{14}$	$1.00 \cdot 10^{14}$
26	Fe ²⁵⁺	$2.88 \cdot 10^{14}$	$2.84 \cdot 10^{14}$	$2.86 \cdot 10^{14}$
30	Zn ²⁹⁺	$5.10 \cdot 10^{14}$	$5.08 \cdot 10^{14}$	$5.08 \cdot 10^{14}$
40	Zr ³⁹⁺	$1.60 \cdot 10^{15}$	$1.60 \cdot 10^{15}$	$1.60 \cdot 10^{15}$
50	Sn ⁴⁹⁺	$4.00 \cdot 10^{15}$	$3.80 \cdot 10^{15}$	$3.92 \cdot 10^{15}$
56	Ba ⁵⁵⁺	$6.30 \cdot 10^{15}$	$6.00 \cdot 10^{16}$	$6.16 \cdot 10^{15}$
72	Hf ⁷¹⁺	$1.80 \cdot 10^{16}$	$1.60 \cdot 10^{16}$	$1.68 \cdot 10^{16}$
80	Hg ⁷⁹⁺	$2.70 \cdot 10^{16}$	$2.30 \cdot 10^{16}$	$2.57 \cdot 10^{16}$
90	Th ⁸⁹⁺	$4.39 \cdot 10^{16}$	$3.60 \cdot 10^{16}$	$4.11 \cdot 10^{16}$
94	Pu ⁹³⁺	$5.20 \cdot 10^{16}$	$4.30 \cdot 10^{16}$	$4.89 \cdot 10^{16}$

Table.HlikeWRel

При больших значениях Z следует отдельно рассчитывать вероятности компонентов $J - J'$ переходов $nl - n'l'$. Приведем для иллюстрации в Табл. [Table.HlikeWRel](#) вероятности переходов для компонентов $1/2 - 1/2$ и $3/2 - 1/2$ резонансной линии $1s - 2p$ водородоподобных ионов, вычисленные с учетом релятивистских эффектов [\[133\]](#), в сравнении с масштабированными значениями вероятностей для водорода — $A_{\text{H}}Z^4$.

Из таблицы видно, что роль релятивистских поправок к вероятностям относительно невелика даже для очень больших значений Z . Спектры астрофизических объектов определяются ионами с $Z \leq 26 \div 28$, поэтому можно использовать нерелятивистские вероятности переходов $n - n'$ и $nl - n'l'$.

В.2 Радиационные параметры для атома гелия

Уравнение Шредингера для атома He точно не решается, поэтому значения f_{ik} и A_{ik} для гелия и гелиеподобных ионов по необходимости приближенны. Достаточно точные силы осцилляторов переходов $n^{1,3}L - n'^{1,3}L'$ атома He получены в работе [\[53\]](#). Расчеты выполнены вариационным методом с использованием аналитических радиальных волновых функций. Там же приведены значения $f_{nl,n'l'}$ для $n, n' \leq 9$, $l' = s, p$ и d , со средней точностью 1%, для большинства переходов точность выше: 0,1%. Приведем полученные силы осцилляторов для $n, n' \leq 6$ в табл. [Table.HeIWik](#).

Для удобства читателя на Рис. [Fig.Hellines](#) [\[104\]](#) приводится схема триплетных и синглетных уровней He по [\[104\]](#).

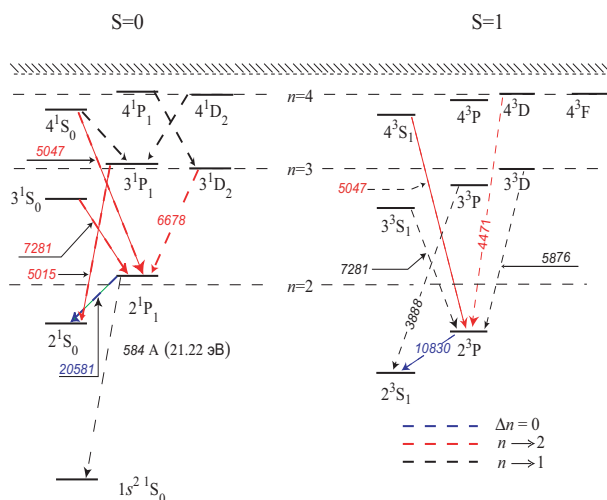


Рис. В.1. Схема триплетных и синглетных переходов He

Fig.HeIlines

Таблица В.7. Силы осцилляторов He

Table.HeIwik

Переход	n	n'				
		2	3	4	5	6
$n^{1,3}S - n^{1,3}P^o$	1	0.2762	0.07344	0.02186	0.01594	0.008628
	2	0.3764	0.1513	0.04916	0.02234	0.01213
		0.5391	0.06446	0.02577	0.01249	0.006982
	3	0.1455	0.6262	0.1439	0.0505	0.02419
		0.2085	0.8909	0.95008	0.02292	0.01199
	4	0.02587	0.3075	0.858	0.1463	0.0528
0.03172		0.4537	1.2153	0.04423	0.02163	
5	0.009652	0.05548	0.476	1.083	0.1526	
	0.01134	0.06761	0.668	1.531	0.0415	
6	0.004769	0.02111	0.0862	0.647	1.305	
	0.05488	0.02470	0.1040	0.903	1.842	
$n^{1,3}P^o - n^{1,3}D$	2	0.7102	0.1205	0.04326	0.02095	
		0.6102	0.1228	0.04701	0.02347	
	3	0.02114	0.6481	0.1413	0.05629	
		0.1121	0.4476	0.1246	0.05301	
	4	0.01531	0.0401	0.648	0.1529	
		0.0370	0.2009	0.439	0.1240	
5	0.00311	0.0393	0.0573	0.670		
	0.00690	0.0883	0.2801	0.430		
6	0.001188	0.00838	0.0684	0.074		
	0.00258	0.0170	0.1470	0.354		

Приложение С

Параметры неводородоподобных ионов

AppAtPar

Параметры аппроксимации сечений фотоионизации атомов и ионов с потенциалами ионизации меньшими потенциала ионизации водорода даны в табл. С.1.

Эти атомы могут ионизовываться и в области HI — зоне нейтрального водорода.

С.1 Сечения фотоионизации

App.ss.PhiCrSect

Таблица С.1. Параметры аппроксимации сечений фотоионизации ионов с низкими потенциалами ионизации $I_p \leq 13.6$ эВ в формуле (4.2.25) по [55]. Приведен только параметр s_0 , так как параметры s_1 и s_2 могут быть найдены по формулам $s_1 = s_0 + 1$, $s_2 = s_0 + 2$

tab.PHIlowIP

Атом (ион)	σ_0 (10^{-18} см ²)	B_0	B_1	B_2	s_0
H	6.30	1.34	-0.34	0.0	2.99
He	7.83	1.66	-0.66	0.0	2.05
He	1.58	1.34	-0.34	0.0	2.99
C	12.2	3.32	-2.32	0.0	2.0
Na	1.56	1.0	-2.55	1.62	1.35
Mg	1.2	3.0	-2.00	0.0	14.0
Al	28.2	0.049	-0.529	1.48	2.05
Si	39.2	4.42	0.094	-3.51	2.05
S	12.6	21.6	-40.1	19.5	2.05
Ca	14.4	1.00	0.0	0.0	4.0
Ca ⁺	0.1	6.68	-3.24	-1.35	1.50

AeBePhiCrossSect

С.2 Параметры для расчета скоростей ионизации электронным ударом атомов и ионов

App.ss.ElImpIon

В данном параграфе приводятся потенциалы ионизации и коэффициенты аппроксимации скоростей ионизации электронным ударом атомов и ионов элементов от водорода до железа, используемые в формуле (Б.6.3), согласно [20].

Таблица С.2. Потенциалы ионизации $I_{Z,Z_{\text{ост}}}$ (эВ) и коэффициенты A, B, C, D для расчета скоростей ионизации электронным ударом по формуле (Б.6.3)

Ион	$I_{Z,Z_{\text{ост}}}$	A	B	C	D	Ион	$I_{Z,Z_{\text{ост}}}$	A	B	C	D
H	13.6	22.8	-12.0	1.9	-22.6	Mg ³⁺	109.0	50.1	-20.2	14.2	-41.7
He	24.6	17.8	-11.0	7.0	-23.2	Mg ⁴⁺	141.0	43.3	-16.3	10.3	-33.4
He ⁺	54.4	14.4	-5.6	1.9	-13.3	Mg ⁵⁺	187.0	35.1	-12.4	6.9	-25.1
C	11.3	6.0	-16.0	12.0	-15.1	Mg ⁶⁺	225.0	25.5	-8.5	4.1	-16.8
C ⁺	24.4	16.0	-9.0	2.5	-10.5	Mg ⁷⁺	266.0	14.5	-4.6	1.8	-8.5
C ²⁺	47.9	23.2	-7.4	2.5	-19.4	Mg ⁸⁺	328.0	17.1	-3.6	2.7	-11.5
C ²⁺	64.5	8.2	-2.7	1.4	-6.6	Mg ⁹⁺	367.0	10.0	-3.0	1.4	-6.8
C ⁴⁺	392.0	20.4	-6.1	4.5	-18.0	Mg ¹⁰⁺	1762.0	22.4	-7.1	4.1	-18.9
C ⁵⁺	490.0	12.2	-3.9	1.9	-10.3	Mg ¹¹⁺	1963.0	12.6	-4.2	1.9	-10.4
N	14.5	19.5	-30.5	15.0	-29.0	Fe	7.9	3.9	-1.3	0.4	-1.9
N ⁺	29.6	21.0	-9.0	5.3	-22.5	Fe ⁺	16.2	90.0	-60.0	0.2	-86.0
N ²⁺	47.4	16.0	-7.5	2.3	-10.0	Fe ²⁺	30.7	32.7	-10.4	1.0	-15.8
N ³⁺	77.5	17.6	-3.8	2.8	-13.6	Fe ³⁺	54.8	39.9	-12.7	1.2	-19.3
N ⁴⁺	97.9	10.5	-3.3	1.4	-7.7	Fe ⁴⁺	75.0	36.5	-11.6	1.1	-17.6
N ⁵⁺	559.0	20.8	-6.3	4.4	-18.2	Fe ⁵⁺	99.0	30.6	-9.7	1.0	-14.8
N ⁶⁺	667.0	12.3	-4.0	1.9	-10.3	Fe ⁶⁺	125.0	22.1	-7.0	0.7	-10.7
O	13.6	9.5	-17.5	12.5	-19.5	Fe ⁷⁺	151.0	11.6	-3.7	0.4	-5.6
O ⁺	35.1	25.0	-8.0	8.4	-29.5	Fe ⁸⁺	235.0	69.9	-23.7	9.5	-51.7
O ²⁺	54.9	25.0	-7.0	5.0	-18.0	Fe ⁹⁺	262.0	57.7	-18.6	7.8	-40.3
O ³⁺	77.4	15.0	-5.0	2.2	-10.5	Fe ¹⁰⁺	290.0	45.6	-13.9	6.2	-30.0
O ⁴⁺	114.0	16.4	-3.0	2.9	-12.0	Fe ¹¹⁺	331.0	33.4	-9.7	4.6	-20.8
O ⁵⁺	138.0	10.4	-3.3	1.4	-7.4	Fe ¹²⁺	361.0	21.3	-5.9	3.0	-12.6
O ⁶⁺	739.0	21.2	-6.5	4.3	-18.4	Fe ¹³⁺	392.0	9.1	-2.6	1.4	-5.6
O ⁷⁺ I	871.0	12.3	-4.0	1.9	-10.3	Fe ¹⁴⁺	457.0	19.8	-5.7	2.1	-11.9
Ne	21.6	40.0	-42.0	18.0	-56.0	Fe ¹⁵⁺	490.0	9.0	-2.6	1.0	-5.4
Ne ⁺	41.1	37.0	-33.0	15.5	-46.0	Fe ¹⁶⁺	1265.0	82.2	-26.4	6.1	-49.8
Ne ²⁺	63.5	33.0	-17.5	11.2	-33.0	Fe ¹⁷⁺	1358.0	68.5	-22.0	5.1	-41.5
Ne ³⁺	97.1	34.0	-10.0	7.5	-25.0	Fe ¹⁸⁺	1456.0	54.8	-17.6	4.1	-33.2
Ne ⁴⁺	126.0	25.5	-8.5	4.5	-16.8	Fe ¹⁹⁺	1582.0	41.1	-13.2	3.1	-24.9
Ne ⁵⁺	158.0	14.5	-4.6	1.9	-8.5	Fe ²⁰⁺	1689.0	27.4	-8.8	2.0	-16.6
Ne ⁶⁺	207.0	16.5	-3.1	2.8	-11.4	Fe ²¹⁺	1799.0	13.7	-4.4	1.0	-8.3
Ne ⁷⁺	239.0	10.1	-3.1	1.4	-7.1	Fe ²²⁺	1950.0	19.2	-5.3	2.7	-12.3
Ne ⁸⁺	1196.0	21.9	-6.8	4.2	-18.7	Fe ²³⁺	2045.0	9.3	-2.6	1.4	-5.8
Ne ⁹⁺	1362.0	12.5	-4.1	1.9	-10.4	Fe ²⁴⁺	8828.0	24.8	-8.4	3.8	-20.0
Mg	7.6	18.0	-1.0	0.6	-4.0	Fe ²⁵⁺	9278.0	13.0	-4.5	1.9	-10.6
Mg ⁺	15.0	9.0	-3.6	0.3	-5.4						
Mg ²⁺	80.1	55.5	-24.1	18.7	-65.0						

tableIpotABCD

С.3 Скорости перезарядки

App.s.ChTransf

Таблица С.3. Параметры аппроксимации A , B , C и D в формуле (Eq.ChTrRateAnalFit) скорости перезарядки с H и He по [20]

Ион	Интервал $t = T_e/10^4 K$	A , cm^3/s	B	C	D
Рекомбинационная перезарядка с H					
He ¹⁺	1	1.9E-15	0.0	0.0	0.0
He ²⁺	1	1.6E-13	0.0	0.0	0.0
C ¹⁺	1	1.4E-17	0.0	0.0	0.0
C ²⁺	0.5-5	1.6E-13	2.8	350.0	-4.2
C ³⁺	0.5-5	3.65E-09	0.25	0.0	0.0
C ⁴⁺	0.1-1	7.6E-10	1.4	0.0	0.0
O ¹⁺	0.01-3	1.0E-09	0.0	-0.66	-9.3
O ²⁺	0.5-5	8.0E-10	0.43	0.0	0.0
O ³⁺	0.5-5	8.5E-10	0.44	0.0	0.0
O ⁴⁺	0.1-3	3.1E-10	0.44	0.0	0.0
Ne ²⁺	1	<1.0E-14	0.0	0.0	0.0
Ne ³⁺	0.5-5	5.7E-09	0.51	0.0	0.0
Ne ⁴⁺	0.1-3	6.6E-09	0.52	3.3	-5.3
Mg ²⁺	0.1-3	9.0E-14	0.0	0.0	0.0
Mg ³⁺	0.1-3	6.6E-09	0.52	2.7	-8.0
Mg ⁴⁺	0.1-3	6.6E-09	0.52	3.3	-5.3
Si ²⁺	0.03-10	5.0E-09	0.28	0.0	0.0
Si ³⁺	0.1-3	4.1E-10	0.0	0.0	0.0
Si ⁴⁺	0.1-3	2.4E-09	0.0	0.0	0.0
S ¹⁺	1	<3.0E-15	0.0	0.0	0.0
S ²⁺	0.1-3	1.0E-14	0.0	0.0	0.0
S ³⁺	0.1-3	2.3E-09	0.0	1.25	-5.8
S ⁴⁺	0.1-3	7.0E-09	0.0	1.25	-5.8
Ar ²⁺	0.1-3	1.0E-14	0.0	0.0	0.0
Ar ³⁺	0.1-3	4.4E-09	0.3	0.0	0.0
Ar ⁴⁺	0.1-3	6.5E-09	0.83	9.4	0.0
Рекомбинационная перезарядка с He					
C ²⁺	1	<1E-10	0.0	0.0	0.0
C ³⁺	0.1-3	4.6E-11	2.0	0.0	0.0
C ⁴⁺	0.1-3	1.0E-14	0.0	0.0	0.0
N ²⁺	0.1-3	3.3E-10	0.29	1.3	-4.5
N ³⁺	0.1-3	1.5E-10	0.0	0.0	0.0
N ⁴⁺	0.1-3	1.7E-09	0.0	2.5	-3.7
O ²⁺	0.5-5	2.0E-10	0.95	0.0	0.0
O ³⁺	0.1-3	1.0E-09	0.0	1.25	-5.8
O ⁴⁺	0.1-3	6.4E-10	0.0	2.0	-5.5
Ne ²⁺	0.1-3	1.0E-14	0.0	0.0	0.0
Ne ³⁺	0.1-3	1.0E-14	0.51	0.0	0.0
Ne ⁴⁺	0.1-3	1.7E-09	0.52	3.3	-5.3

Table.ChTraPar(AR85)

Таблица С.3. Продолжение

Table.ChTraPar (AR85)

Mg ³⁺	0.1-3	7.5E-10	0.0	1.25	-5.8
Mg ⁴⁺	0.1-3	2.2E-09	0.33	0.88	-1.85
Si ³⁺	0.1-3	9.5E-10	0.75	0.0	0.0
Si ⁴⁺	0.1-3	1.2E-09	0.0	0.0	0.0
S ³⁺	0.1-3	1.1E-09	0.56	0.0	0.0
S ⁴⁺	0.1-3	7.6E-13	0.32	3.4	-5.25
Ar ²⁺	0.1-3	1.3E-10	0.0	0.0	0.0
Ar ³⁺	0.1-3	1.0E-14	0.0	0.0	0.0
Ar ⁴⁺	0.1-3	1.0E-09	-0.3	0.0	0.0
Ионизационная перезарядка с H⁺					
O ⁰	0.01-10	9.1E-10	0.0	10	0.0196
Mg ¹⁺	1-30	7.6E-14	0.0	0.0	1.44
Si ⁰	1	1.0E-11	0.0	0.0	0.03
Si ¹⁺	0.50-10	1.7E-09	0.32	0.0	2.74
S ⁰	1	1.0E-09	0.0	0.0	0.0
Ионизационная перезарядка с He⁺					
C ¹⁺	0.50-5	5.0E-12	2.0	0.07	6.29
N ¹⁺	1-30	3.7E-12	2.1	0.063	1.44
Si ¹⁺	1-30	1.5E-10	0.24	0.0	6.91
Si ²⁺	1-30	1.5E-10	0.44	0.0	8.88
S ¹⁺	1-30	2.8E-11	1.2	0.036	9.2
S ²⁺	1-30	1.4E-11	1.6	0.046	10.5
Ar ¹⁺	1-30	1.1E-10	0.0	0.0	3.04

Таблица С.4. Параметры аппроксимации k_0 и α в формуле (5.2.12) скорости перезарядки с Н и He по [11] Eq. ChTrRateSS83
SushkovShechkinov1983

Table.ChTraPar(SS83)

Элемент	Ион							
	X^+		X^{2+}		X^{3+}		X^{4+}	
	k_0	α	k_0	α	k_0	α	k_0	α
$X^{i+1} + H^0 \rightarrow X^i + H^+$								
C	$3.87 \cdot 10^{-19}$	1.64	$1.90 \cdot 10^{-19}$	1.68	$3.20 \cdot 10^{-10}$	0.26	$1.93 \cdot 10^{-15}$	1.4
N	$1.00 \cdot 10^{-12}$	1.4	$2.10 \cdot 10^{-10}$	0.153	$3.56 \cdot 10^{-12}$	0.73	$2.08 \cdot 10^{-16}$	1.73
O	$6.80 \cdot 10^{-10}$	0	$1.09 \cdot 10^{-11}$	0.46	$1.47 \cdot 10^{-10}$	0.44	$1.07 \cdot 10^{-12}$	0.6
Ne	0	0	0	0	$4.90 \cdot 10^{-11}$	0.52	$5.51 \cdot 10^{-11}$	0.52
Mg	0	0	$4.80 \cdot 10^{-11}$	0.53	$4.80 \cdot 10^{-11}$	0.53	$6.60 \cdot 10^{-09}$	0
S	0	0	$5.00 \cdot 10^{-09}$	0	$2.80 \cdot 10^{-10}$	0.041	$6.40 \cdot 10^{-10}$	0.14
S	0	0	$1.00 \cdot 10^{-14}$	0	$1.64 \cdot 10^{-09}$	0.037	$2.07 \cdot 10^{-09}$	0.124
$X^{i+1} + He^0 \rightarrow X^i + H^+$								
C	0	0	0	0	$1.03 \cdot 10^{-17}$	1.67	$1.00 \cdot 10^{-14}$	0
N	0	0.9	$2.30 \cdot 10^{-11}$	0.29	$1.39 \cdot 10^{-12}$	0.48	$7.35 \cdot 10^{-09}$	-0.14
O	0	0	0	0	1.00-09	0	7.40-10	-0.013
Ne	0	0	$1.00 \cdot 10^{-14}$	0	$1.00 \cdot 10^{-14}$	0	$1.39 \cdot 10^{-11}$	0
Mg	0	0	0	0	$5.40 \cdot 10^{-10}$	0.035	$1.10 \cdot 10^{-10}$	0.33
Si	0	0	0	0	$2.70 \cdot 10^{-12}$	0.64	$6.30 \cdot 10^{-10}$	0.07
S	0	0	0	0	$3.00 \cdot 10^{-12}$	0.64	$3.94 \cdot 10^{-14}$	0.32
$X^i + He^+ \rightarrow X^{i+1} + He$								
	k_1	α	ΔE (эВ)					
Mg ⁺	6.65E-14	0.02	1.44					
Si ⁺	1.43E-11	0.26	6.91					
Si ²⁺	7.10E-17	1.54	6.88					
S ⁺	1.80E-15	1.03	9.17					
S ²⁺	3.13E-17	1.40	10.47					