

Теоретическое изучение влияния переменных электрических полей на формирование профилей линий в спектрах излучения аргона

*Е.В. Корюкина**

Национальный Исследовательский Томский Государственный Университет, Томск, Россия

**evk@phys.tsu.ru*

Аннотация. Проведено компьютерное моделирование профилей спектральных линий атома неона в переменном циркулярно поляризованном электрическом поле. Расчеты произведены в рамках теоретического подхода, основанного на численном решении нестационарного уравнения Шредингера. Алгоритм подхода реализован в пакете программ StarkD, написанном на FORTRAN и Maple. Результаты моделирования позволили исследовать механизмы формирования профилей спектральных линий аргона в переменных электрических полях с частотой и напряженностью, меняющихся в широком диапазоне. Зависимости поведения профилей линий от плотности электронов в плазме и от температуры атомов также были рассмотрены.

Ключевые слова: переменные электрические поля, профили спектральных линий аргона.

1. Введение

Развитие теоретических методов исследования воздействия электрических полей на спектры атомов является актуальной задачей современной физики, поскольку результаты расчетов вкупе с экспериментальными данными позволяют решить многие задачи лазерной физики, диагностики лабораторной и космической плазмы. Влияние переменных электрических полей на форму профилей спектральных линий водорода и иона гелия были достаточно хорошо изучены [1 и ссылки там]. Однако изучение механизмов формирования профилей линий для спектров многоэлектронных атомов, возбуждаемых переменным электрическим полем, является более трудоемкой задачей. Во-первых, возрастает сложность расчетов сама по себе, во-вторых, возникают проблемы, связанные с отсутствием достаточно точной формулы для расчета константы уширения спектральных линий при квадратичном эффекте Штарка [2, 3].

В данной работе компьютерное моделирование профилей линий в спектрах излучения аргона в переменном электрическом поле проведено в рамках теоретического подхода, развитого в [4]. Метод основан на численном решении нестационарного уравнения Шредингера. Для расчета штарковской константы уширения предложена формула, позволяющая корректно оценить штарковскую ширину спектральных линий многоэлектронных атомов при динамическом квадратичном эффекте Штарка. Пакет программ StarkD [5], в котором реализован алгоритм предложенного метода, дает возможность быстро и эффективно моделировать профили атомных спектральных линий в переменном электрическом поле.

Проведенные расчеты позволили проанализировать механизмы формирования профилей линий аргона в переменном электрическом поле циркулярной поляризации и зависимость их поведения от параметров электрического поля. Кроме того, была рассмотрена зависимость профилей линий от температуры атомов и плотности электронов в плазме.

2. Метод расчета

Теоретический подход, используемый для расчета профилей линий в спектрах излучения атомов в переменных электрических полях, основан на численном решении нестационарного уравнения Шредингера. В случае циркулярно поляризованного электрического поля нестационарное уравнение Шредингера записывается в виде

$$i \frac{\partial \psi_n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = (H_0(\mathbf{r}) - F(x \cos \omega t \pm y \sin \omega t)) \psi_n(\mathbf{r}, t), \quad (1)$$

где $H_0(\mathbf{r})$ – гамильтониан невозмущенного атома, F и ω – напряженность и частота электрического поля. Чтобы решить уравнение Шредингера численно, необходимо перейти от нестационарного уравнения (1) к стационарному уравнению Шредингера. В приближении вращающейся волны за счет перехода в систему координат, вращающуюся вокруг оси Z с частотой электрического поля ω , уравнение (1) трансформируется в стационарное уравнение Шредингера

$$Q \varphi_n(\mathbf{r}) = \varepsilon_n \varphi_n(\mathbf{r}), \quad Q = (H_0 - \omega J_z \pm F D_x), \quad (2)$$

где J_z есть z -компонента оператора полного углового момента, а ε_n и $\varphi_n(\mathbf{r})$ есть энергия и волновая функция n -того состояния атома в электрическом поле во вращающейся системе координат. Из (2) следует, что Q есть оператор энергии атома в электрическом поле во вращающейся системе координат, не зависящий от времени.

Далее уравнение Шредингера (2) численно решается методом диагонализации матрицы энергии атома в электрическом поле. Элементы матрицы имеют вид

$$Q_{mn} = E_n^{(0)} \delta_{mn} - \omega \langle \varphi_m^{(0)}(\mathbf{r}) | J_z | \varphi_n^{(0)}(\mathbf{r}) \rangle \pm F \langle \varphi_m^{(0)}(\mathbf{r}) | D_x | \varphi_n^{(0)}(\mathbf{r}) \rangle, \quad (3)$$

$$\langle \varphi_m^{(0)} | D_x | \varphi_n^{(0)} \rangle = \langle \gamma J M | D_x | \gamma' J' M' \rangle = \frac{(-1)^{J-M}}{\sqrt{2}} \left[\begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & -1 & M' \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & 1 & M' \end{pmatrix} \right] \langle \gamma J \| D \| \gamma' J' \rangle, \quad (4)$$

где $\varphi_n^{(0)}$ и $E_n^{(0)}$ – волновая функция и энергия n -того состояния атома в отсутствие электрического поля, а D_x – x -компонента оператора дипольного момента. Подробности расчета редуцированных матричных элементов $\langle \gamma J \| D \| \gamma' J' \rangle$ приведены в [6]. После диагонализации матрицы энергии Q мы получаем энергии $\varepsilon_n = \langle \varphi_n(\mathbf{r}) | Q | \varphi_n(\mathbf{r}) \rangle$ и волновые функции $\varphi_n(\mathbf{r})$ атома, возбуждаемого электрическим полем, во вращающейся системе координат. Для возвращения в первоначальную систему координат необходимо провести усреднение по периоду колебаний электрического поля. После усреднения волновые функции и средние энергии атома в электрическом поле в первоначальной системе координат записываются как

$$\psi_n(\mathbf{r}, t) = \exp(-i(\omega J_z + \varepsilon_n)t) \sum_k C_{nk} \varphi_k^{(0)}(\mathbf{r}), \quad (5)$$

$$\bar{E}_n = \langle \psi_n(\mathbf{r}, t) | H(\mathbf{r}, t) | \psi_n(\mathbf{r}, t) \rangle = \varepsilon_n + \omega \langle \varphi_n(\mathbf{r}) | J_z | \varphi_n(\mathbf{r}) \rangle, \quad (6)$$

где C_{nk} – коэффициенты разложения волновых функций рассматриваемого атома, находящегося под воздействием электрического поля, по невозмущенным волновым функциям $\varphi_k^{(0)}(\mathbf{r})$.

Затем волновые функции (5) и энергии (6) используются для расчета спектроскопических характеристик атома, необходимых для моделирования профилей спектральных линий атомов в электрическом поле. К таким характеристикам относятся положения штарковских компонент спектральных линий, вероятности переходов между штарковскими состояниями атомов и интенсивности штарковских компонент. Положения штарковских компонент определяются как

$$\Delta E_{MM'} = (\bar{E}_{JM} - \bar{E}_{JM'}), \quad (7)$$

Вероятности переходов между штарковскими состояниями атома задаются формулой

$$A(JM \rightarrow JM') = \frac{4\omega_{JM,JM'}^3}{3\hbar c^3} \sum_q \left| \sum_{ij} C_i^{(JM)} C_j^{(JM')} (-1)^{J_i-M_i} \begin{pmatrix} J_i & 1 & J_j \\ -M_i & q & M_j \end{pmatrix} \langle \gamma_i J_i \| D \| \gamma_j J_j \rangle \right|^2, \quad (8)$$

где $C_i^{(JM)}$ и $C_j^{(JM')}$ – коэффициенты разложения из уравнения (5), а $\omega_{JM,JM'}$ – частота $JM \rightarrow JM'$ перехода. Интенсивности штарковских компонент спектральных линий рассчитываются как

$$I(JM \rightarrow JM') = N_{JM} A(JM \rightarrow JM') \Delta E_{MM'}, \quad (9)$$

где N_{JM} – заселенность штарковского состояния JM .

Основными процессами, определяющими формирование профилей линий в плазме, являются доплеровское и штарковское уширение. Тогда профиль штарковской компоненты спектральной линии рассчитывается как свертка штарковского и доплеровского профилей

$$I(a, \Delta\omega) = I_0^s \frac{a}{\pi^{3/2} \Delta\omega_D} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(-y^2) dy}{a^2 + (\Delta\omega / \Delta\omega_D - y)^2}, \quad a = \frac{\Delta\omega_s}{\Delta\omega_D}, \quad \Delta\omega_D = \omega_0 v_a / c, \quad \Delta\omega = \omega - \omega_0, \quad (10)$$

где I_0^s рассчитывается по формуле (9), v_a – средняя тепловая скорость атомов. Ширина штарковской компоненты $\Delta\omega_s$ рассчитывается по формуле [2]

$$\Delta\omega_s = 11.4 C_4^{2/3} V^{1/3} N_e. \quad (11)$$

Здесь N_e – концентрация электронов, V – средняя скорость электронов, C_4 – константа уширения для динамического квадратичного эффекта Штарка. В рамках предложенного подхода расчет C_4 проводится по формуле

$$C_4 = \Delta E(F, \omega) / \hbar F^2, \quad (12)$$

где $\Delta E(F, \omega)$ – сдвиг штарковской компоненты в электрическом поле напряженности F и частоты ω относительно положения спектральной линии в отсутствие электрического поля. Полный профиль спектральной линии в электрическом поле рассчитывается как сумма профилей ее штарковских компонент.

Предложенный теоретический подход свободен от ограничений теории возмущений и справедлив в широкой области изменения частоты и напряженности электрического поля. Корректность подхода подтверждается отличным согласием рассчитанных профилей линий с экспериментальными данными для спектральных линий атома He [4].

3. Результаты и их обсуждение

При расчете матрицы энергии атома неона в электрическом поле учитывались $nl[J_c K]JM$ ($l = 0-3$) состояния с $n \leq 10$, вычисленные в схеме lJ -связи. Если $J_c = 1/2$, состояние атома принято обозначать как $nl'[K]JM$, при $J_c = 3/2$ состояние обозначается как $nl[K]JM$. Параметры электрического поля изменялись в следующих пределах: напряженность поля F от 0 до 120 кВ/см с частотами $\omega = 10^3, 10^5, 10^6$ и 10^7 МГц. В рассматриваемом диапазоне температур и плотностей электронов магнитные подуровни являются равнозаселенными [7], что и было принято в данной работе при расчете заселенностей в формуле (9).

Рассмотрим результаты исследования механизмов формирования профилей линий в спектре излучения аргона в переменном электрическом поле. Принято считать, что расщепление спектральных линий на штарковские компоненты и сдвиг этих компонент в

электрическом поле вызваны увеличением напряженности поля. Наши расчеты согласуются с этим утверждением. Действительно, увеличение напряженности электрического поля приводит к расщеплению линии на штарковские компоненты различной интенсивности, которые сдвигаются в электрическом поле с разными скоростями и в разных направлениях. Вследствие этого увеличение напряженности поля приводит сначала к асимметрии, а затем к расщеплению спектральных линий на штарковские компоненты. В качестве иллюстрации на Рис.1 приводится поведение спектральной линии $5d[1/2]_1-4p[1/2]_1$ при увеличении напряженности электрического поля F .

Как показали наши расчеты, изменение частоты поля также может приводить к сдвигу линий и как к расщеплению спектральных линий на штарковские компоненты, так и к исчезновению этого расщепления (Рис.2). На этих рисунках сплошные линии есть полные контуры спектральных линий, штриховые и пунктирные линии – контуры штарковских компонент, формирующих соответствующие им полные профили спектральных линий.

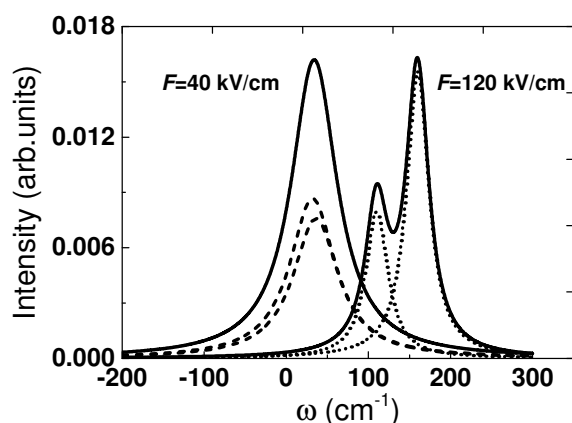


Рис.1. Поведение профиля спектральной линии $5d[1/2]_1-4p[1/2]_1$ при изменении напряженности электрического поля.

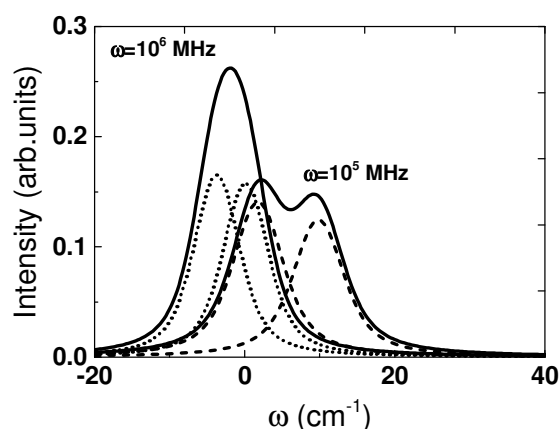


Рис.2. Поведение профиля спектральной линии $6d[1/2]_1-4p[1/2]_1$ при изменении частоты электрического поля.

Далее рассмотрим характерные особенности, присущие поведению спектральных линий аргона при изменении напряженности и частоты электрического поля. Результаты исследований этих характерных черт поведения приведены на Рис.3–5.

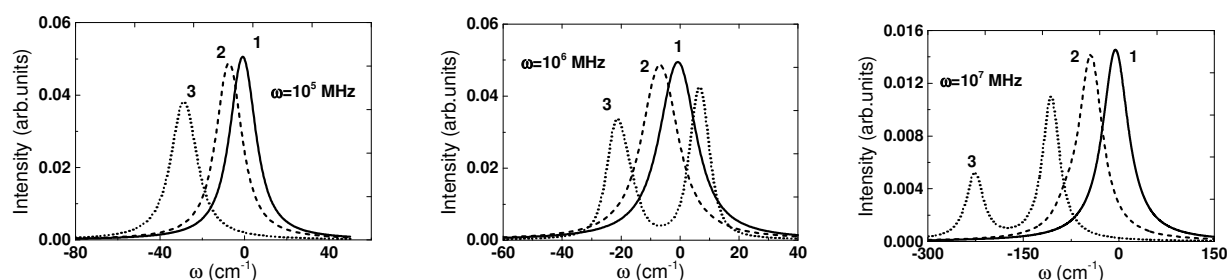


Рис.3. Поведение профилей спектральной линии $8s[3/2]_2-4p[1/2]_1$ при изменении напряженности F и частоты ω электрического поля (1 – $F = 20$ кВ/см, 2 – $F = 60$ кВ/см, 3 – $F = 120$ кВ/см).

Как следует из Рис.3, при частоте электрического поля $\omega = 10^5$ МГц увеличение напряженности поля приводит только к сдвигу спектральной линии в красную область, при этом профили спектральной линии остаются симметричными, интенсивность линий слегка уменьшается. При $\omega = 10^6$ МГц расщепление линии на штарковские компоненты происходит

при $F > 90$ кВ/см. Интенсивности штарковских компонент отличаются слабо. Ширина спектральных линий при $\omega = 10^5$ и $\omega = 10^6$ МГц практически не меняется. Кардинальные изменения в поведении рассматриваемой спектральной линии происходит при частоте электрического поля $\omega = 10^7$ МГц. Как видно из Рис.3, при этой частоте происходит резкое уширение и тушение линий при всех значениях напряженности поля, и интенсивности штарковских компонент при $F = 120$ кВ/см отличается больше чем в 2 раза.

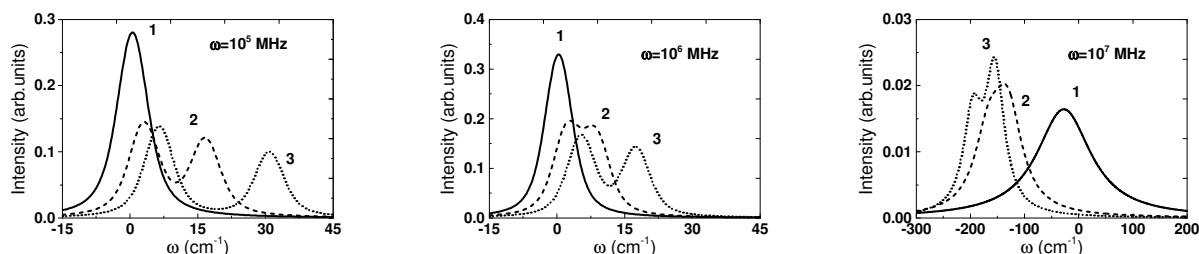


Рис.4. Поведение профилей спектральной линии $6d[1/2]_1-4p[1/2]_1$ при изменении напряженности F и частоты ω электрического поля (1 – $F = 20$ кВ/см, 2 – $F = 80$ кВ/см, 3 – $F = 120$ кВ/см).

Как видно из Рис.4, профили спектральной линии $6d[1/2]_1-4p[1/2]_1$ остаются симметричными для всех рассмотренных значений ω только при $F = 20$ кВ/см, при $F > 40$ кВ/см наблюдается либо асимметрия линий, либо полное расщепление линии на штарковские компоненты. При $\omega = 10^5$ и $\omega = 10^6$ МГц линия движется в фиолетовую область с ростом F , при этом ее интенсивность падает. При $\omega = 10^7$ МГц, как и в предыдущем случае, наблюдается кардинальное изменение в поведении спектральной линии. Линия резко уширяется, ее интенсивность падает на порядок в сравнении с интенсивностью при меньших значениях ω . Кроме того, направление сдвига линии меняется противоположное, т.е. теперь линия движется в красную область с ростом F .

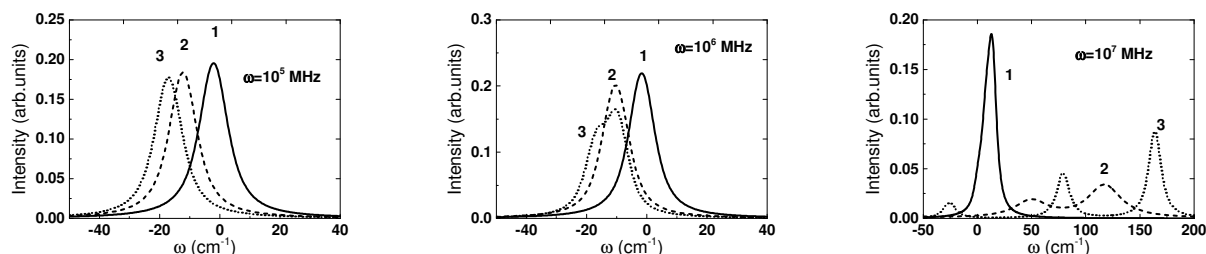


Рис.5. Поведение профилей спектральной линии $6d'[5/2]_2-4p'[3/2]_1$ при изменении напряженности F и частоты ω электрического поля (1 – $F = 40$ кВ/см, 2 – $F = 100$ кВ/см, 3 – $F = 120$ кВ/см).

Как следует из Рис.5, при $\omega = 10^5$ МГц увеличение напряженности поля приводит к сдвигу спектральной линии в красную область, профили спектральной линии остаются симметричными. При $\omega = 10^6$ МГц асимметрия линии наблюдается только при $F = 120$ кВ/см, тогда как при $\omega = 10^7$ МГц наблюдается полное расщепление линии на штарковские компоненты, причем расстояние между этими компонентами очень велико (~ 100 см $^{-1}$). Кроме того, при $\omega = 10^7$ МГц направление сдвига спектральной линии сменилось на противоположное по сравнению с меньшими значениями ω . Аналогичные результаты получены и для других спектральных линий аргона.

На основании результатов компьютерного моделирования можно утверждать, что увеличение напряженности электрического поля приводит к асимметрии спектральных линий с последующим разделением линии на штарковские компоненты, при этом интенсивность линий падает с ростом F . Зависимость поведения спектральных линий от частоты электрического поля намного сложнее. Поведение линий практически не меняется

при $\omega = 10^3 - 10^5$ МГц. При $\omega > 10^5$ МГц увеличение частоты электрического поля приводит к асимметрии линии и ее распаду на штарковские компоненты. Кроме того, увеличение ω приводит к смене направления сдвига спектральной линии, к резкому уширению и тушению линий.

Кроме исследования закономерностей в поведении профилей спектральных линий аргона при изменении параметров электрического поля, было интересно провести моделирование профилей линий в зависимости от плотности электронов N_e и температуры атомов T . Поскольку штарковская ширина линии пропорциональна N_e , а доплеровская ширина пропорциональна $T^{1/2}$, ожидаемо, что увеличение плотности электронов или температуры атомов будет приводить к уширению линий и уменьшению их интенсивности. Если спектральные линии асимметричны, то увеличение N_e и T должно приводить к исчезновению асимметрии. Именно такой результат был получен в наших расчетах для всех рассмотренных линий.

4. Заключение

На основании результатов компьютерного моделирования были выявлены закономерности в поведении профилей линий в спектре излучения аргона при изменении напряженности и частоты циркулярно поляризованного электрического поля. Обнаруженные закономерности позволили проанализировать механизмы формирования профилей спектральных линий аргона в электрическом поле.

Теоретические закономерности, полученные в данной работе впервые, представляют интерес с теоретической точки зрения и полезны при решении практических задач диагностики плазмы, магнитного пересоединения и в других отраслях физики, где спектроскопические методы используются для исследования влияния переменных электрических полей на свойства объекта изучения. Кроме того, выявленные закономерности могут быть полезны при разработке новых источников излучения, или при поиске оптимального режима работы уже существующих источников излучения.

5. Литература

- [1] Griem H.R., *Spectral Line Broadening by Plasma*. (New York, London: Academic Press, 1974).
- [2] Собельман И.И., *Введение в теорию атомных спектров*. (Москва: Физматлит, 1963).
- [3] Allen C.W., *Astrophysical Quantities*. (London: Athlone Press, 1973).
- [4] Koryukina E.V., Koryukin V.I., *Russ. Phys. J.*, **63**(12), 2057, 2021; doi: 0.1007/s11182-021-02274-w.
- [5] Koryukina E.V., *J. Phys.: Conf. Ser.* **1141**, 012053, 2018; doi:10.1088/1742-6596/1141/1/012053.
- [6] Koryukina E.V., *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **38**(17), 3296, 2005; doi:10.1088/0022-3727/38/17/S34.
- [7] Frank A.G., Gavrilenko V.P., Kirie N.P., Oks E., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **39**(24), 5119, 2006; doi:10.1088/0953-4075/39/24/009.