

РАДИАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА АЛЮМИНИЕВОЙ ПЛАЗМЫ

И.Б. Косарев

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Институт динамики геосфер Российской академии наук

На основе данных из современных литературных источников и собственных квантовомеханических расчетов составлен банк данных по спектроскопическим характеристикам компонент алюминиевой плазмы в широком диапазоне величин газодинамических параметров. Рассчитаны таблицы коэффициентов поглощения, групповые и полные розселандовы и планковские пробеги излучения в диапазоне плотностей от 10^{-5} до 100 кг/м^3 и температур от 0.3 до 50 кК. Составленные таблицы радиационных свойств алюминиевой плазмы использовались при численном моделировании активных геофизических экспериментов с выбросом горячей алюминиевой струи в ионосфере.

Введение

При численном моделировании ряда активных геофизических экспериментов [Адушкин и др., 1998; Гаврилов и др., 2003] появляется необходимость оценить роль излучения, испускаемого горячей алюминиевой струей, в создании ионизации в объёме воздуха, через который движется струя. В связи с этим возникает потребность в таблицах радиационных свойств алюминиевой плазмы в широком диапазоне газодинамических параметров при достаточно широкой шкале по энергии квантов.

Вычисление состава алюминиевой плазмы

Состав диссоциирующей и ионизирующейся среды вычислялся в предположении локального термодинамического равновесия. Конкретный химический состав для

каждой пары значений плотности и температуры был определён из решения системы уравнений диссоциации и ионизационного равновесия (уравнения Саха) с учетом электронейтральности и сохранения числа ядер. В качестве компонентов газовой фазы рассматривались молекулы, атомы, положительные и отрицательные атомарные и молекулярные ионы и электроны.

Состав плазмы вычислялся с учетом поправок на неидеальность плазмы, при этом для расчета поправок к потенциалам ионизации, обусловленных подсистемой заряженных частиц, используется кольцевое дебаевское приближение в большом каноническом ансамбле [Грязнов и др., 1980]. Населенности энергетических уровней рассчитывались по Больцмановскому распределению.

Расчеты сечений и вероятностей радиационных переходов

При определении величины спектральных коэффициентов поглощения суммировались вклады различных типов радиационных переходов – свободно-свободных, связанно-свободных и связанно-связанных. Типы доминирующих процессов значительно изменяются с температурой и зависят от спектрального интервала.

Основными механизмами, определяющими поглощение излучения в рассмотренном диапазоне температур, являются переходы в электронно-колебательных полосах молекулы Al_2 , фотодиссоциация и фотоионизация молекулы и молекулярного иона Al_2^+ , фотопоглощение отрицательного молекулярного и атомарных ионов, тормозное поглощение при электронном рассеянии на нейтральных и заряженных частицах, фотоионизация атомов и ионов алюминия различной кратности ионизации, находящихся в основном и возбужденных состояниях, поглощение в спектральных линиях. Для вычисления сечений рассматриваемых радиационных процессов использовался комплекс квантовомеханических программ [Косарев, 2009, 2015], рассчитывающих волновые функции частиц по методу самосогласованного поля Хартри–Фока.

Сечения фотопоглощения атомов и атомарных ионов различной кратности ионизации рассчитывались с помощью волновых функций дискретного и непрерывного спектра, вычисленных по методу самосогласованного поля Хартри–Фока [Косарев, 2009]. Расчет всех дипольных матричных элементов проводился с использованием волновых функций, вычисленных по методу самосогласованного поля. Все расчеты сечений проводились по точным квантово-механическим формулам. База спектроскопических данных была дополнена результатами экспериментальных исследований, проведенных в последние десятилетия.

Сечения фотоионизации оболочки $nc^{N-2s+1}L$ вычислялись согласно [Собельман, 1977] через сумму квадратов дипольных моментов соответствующих переходов в состояния с различными орбитальными моментами, подчиняющихся правилам отбора.

Для учета корреляций в расчетах фотоионизации многоэлектронных оболочек применялось приближение случайных фаз с обменом [Амусья, 1987], в котором эффективный дипольный момент $D_{\text{эф}}$ получается из решения интегрального уравнения, использующего хартри–фоковский $D_{\text{нл,эф}}$ в качестве первого приближения.

Помимо этого, вычисление сечений фотоионизации основных состояний атомов Al и ионов Al^+ , Al_2^+ и их возбужденных состояний (с конфигурацией внешних электронов, соответствующей основному состоянию) в расчетах фотопоглощения учитывался процесс автоионизации, дающий ряд резонансов в околороговой области. Поскольку учитываемые в программе переходы в некоторых случаях имеют разные пороги ионизации, то дискретные возбуждения одного из переходов попа-

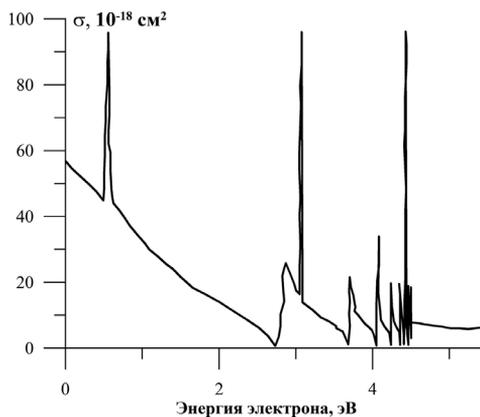


Рис. 1

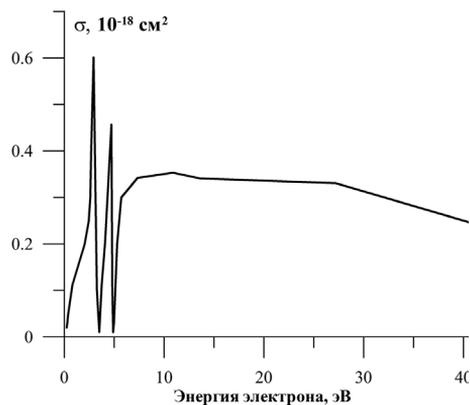


Рис. 2

дают в область непрерывного спектра другого перехода. Взаимодействие двух переходов приводит к образованию в спектре фотопоглощения асимметричных максимумов и более сложных контуров поглощения называемых контурами Фано. В проведенных расчетах для учета этого явления использовалась программа [Чернышева и др., 1993], позволившая учесть часть автоионизационных резонансов в сечениях фотоионизации Al и Al^+ [Le Dourneuf et al., 1975; Butler et al., 1993]. Результаты расчетов сечений фотоионизации Al и Al^+ приведены на рис. 1, 2, соответственно.

Методом Хартри-Фока рассчитывалось также сечение фотоотрыва отрицательного иона Al^- . Поглощение этими ионами вносит заметный вклад в коэффициент поглощения в непрерывном спектре в диапазоне 0.4–3 эВ при температурах несколько кК.

Расчет коэффициентов поглощения

Коэффициент поглощения в каждой спектральной точке определяется как сумма произведений сечений поглощения, соответствующих различным радиационным переходам, на населенности уровней, с которых производится тот или иной переход. К этой сумме добавляются поглощение в непрерывном спектре при переходах в полях атомов и ионов. Величины коэффициентов поглощения, соответствующие свободно-свободным переходам при рассеянии электронов на молекулярных частицах, вычисляются через сечение упругого рассеяния электрона на этих частицах.

Для вычисления сечения тормозного поглощения при рассеянии электрона на атоме используется метод прямого расчета этого сечения путем суммирования матричных элементов по парциальным волнам начального и конечного состояния рассеиваемого электрона [Geltman, 1973]. Параметры, определяющие форму поляризационного потенциала, подбираются из условия наилучшего соответствия вычисленных сечений упругого рассеяния экспериментальным данным. Величина атомной поляризуемости также берется из экспериментальных данных.

Силы осцилляторов спектральных линий атома и ионов алюминия брались из [Wiese, 1969; Kelleher, Podobedova, 2008; Sansonetti, Martin, 2005] или в случае необходимости рассчитывались с помощью волновых функций. При этом в вычислениях использовались модернизированные варианты программ [Косарев, 2009] расче-

та волновых функций. Уровни энергий брались из таблиц [Moore, 1971; Sansonetti, Martin, 2005] или при их отсутствии – из квантово-механических расчетов.

Сечение поглощения в спектральной линии определяется как величиной соответствующей силы осциллятора, так и ее контуром, зависящим от механизма уширения, связанного с взаимодействием излучающего атома с окружающими его частицами плазмы. Для случая больших плотностей плазмы к контуру добавляются нормированные добавки, связанные с вкладом запрещенных компонент [Грим, 1978]. При еще больших плотностях контур линии становится близким к контуру линии водородоподобного атома или иона.

Главным механизмом уширения спектральных линий в низкотемпературной плазме, связанных с взаимодействием с окружающими частицами, является штарковское расщепление энергетических уровней поглощающих частиц под действием электрических полей окружающих ионов и электронов. Электронные ударные ширины вычисляются согласно [Грим, 1978]. При вычислении ударной ширины линии атома Al , возмущаемого нейтральными частицами плазмы, например, Al_2 , потенциал взаимодействия предполагается Ван-дер-Ваальсовым. К вычисленной ширине добавляется вклад резонансного уширения линий, связанного с взаимодействием атомов Al , находящихся в основном и возбужденном состояниях [Вайнштейн и др., 1979].

При вычислении сечений поглощения молекулы Al_2 используется ряд упрощающих предположений, позволяющих с учетом правила сумм для вращательных линий, выражения для центров линий, их ширин и расстояния между ними, усреднить величину сечения поглощения электронно-колебательной полосы по вращательной структуре [Суржиков, Кузнецова, 1998]. Величины электронного момента электронно-колебательных переходов в Al_2 , их зависимость от длины волны, факторы Франка-Кондона и другие спектроскопические характеристики были взяты из литературных данных [Кузьменко и др., 1984] или из спектроскопических измерений, или рассчитаны методами квантовой механики [Langhoff and Bauschlicher, 1990; Greeff et al. 1996].

Колебательные волновые функции определяются из решения радиального уравнения Шредингера по потенциальным кривым верхних и нижних состояний. Область газодинамических параметров плазмы алюминиевых паров соответствует приближениям слабой и умеренной неидеальности, в которых соблюдается принцип спектроскопической устойчивости [Фортов, Якубов, 1994].

Основное влияние плазменного окружения на оптические характеристики в случае слабонеидеальной плазмы при этом сводится к деформации контура, связанной с появлением запрещенных компонент, сдвигу спектральных линий, смещению порога фотоионизации в сторону низких энергий.

В случае высоких плотностей плазмы вводился формфактор для каждого уровня, учитывающий вероятность его реализации в плазме и определяемый по микрополевой модели плазмы [Кобзев, Куриленков, 1978; Дьячков, 1997]. При этом дискретный уровень реализуется с некоторой вероятностью W , зависящей от плазменных микрополей, и пропорционально W ослабевают спектральные линии, излучаемые с этого уровня. Для каждого члена спектральной серии, сходящейся к данному порогу, вводится вероятность $1-W$ появления состояния непрерывного спектра вместо верхнего состояния перехода и соответственно вероятность появления сплошного спектра вместо линии. При вычислении ширин линий для многозарядных ионов использовались результаты [Грим, 1978; Кобзев, 1983]. Для расчета термодинамических свойств алюминиевой плазмы использовалось широкодиапазонное уравнение состояния алюминия с учетом испарения и ионизации [Сапожников, Миронова, 2005].

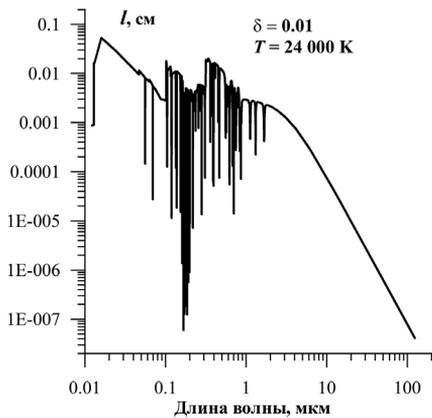


Рис. 3

По описанной выше методике были рассчитаны таблицы оптических и термодинамических свойств плазмы алюминия в диапазоне изменения газодинамических параметров: по температуре $T = 300 \text{ К} \div 50 \text{ кК}$, по относительной плотности $\sigma = 10^{-5} \div 100$ ($\sigma = \rho/\rho_L$, где ρ_L – плотность, соответствующая числу Лошмидта). Для алюминия $\rho_L = 1.22 \cdot 10^{-3} \text{ г/см}^3$. На рис. 3 в качестве примера приведен график пробегов излучения в алюминиевой плазме, рассчитанных по описанной методике. Шкала энергий квантов в расчетах включала в себя около 12000 точек для указанных значений

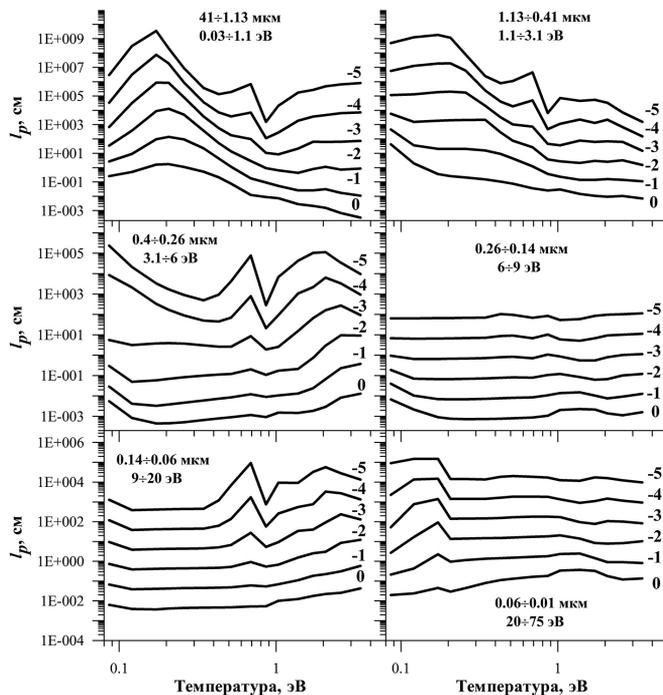


Рис. 4

плотности и температуры. На рис. 4 приведены групповые планковские пробеги для отдельных спектральных участков диапазона 0.03–75 эВ, в котором рассчитывался перенос излучения, испускаемого алюминиевой струей в окружающую воздушную среду [Лосева и др., 2017].

Заключение

На основе данных из современных литературных источников и собственных квантовомеханических расчетов составлен банк данных по спектроскопическим

характеристикам компонент алюминиевой плазмы в широком диапазоне величин газодинамических параметров. В расчетах радиационных переходов в дискретном и сплошном спектрах применялись методы самосогласованного поля Хартри-Фока, метод случайных фаз с обменом и др. Рассчитаны таблицы коэффициентов поглощения, групповые и полные росселандовы и планковские пробеги излучения в диапазоне плотностей от 10^{-5} до 100 кг/м^3 и температур от 0.3 до 50 кК. Составленные таблицы радиационных свойств алюминиевой плазмы использовались при численном моделировании активных геофизических экспериментов с выбросом горячей алюминиевой струи в ионосфере.

Работа выполнена при финансовой поддержке программы РАН (проект № 0146-2015-0018).

Литература

Адушкин В.В., Зецер Ю.И., Гаврилов Б.Г., Грыцкив И.В., Киселев Ю.Н., Романовский Ю.Ф., Рыбаков В.А., Менг Ч.-И., Эрландсон Р., Стоянов Б. Активные эксперименты «Флаккус 1,2»: исследование взаимодействия плазменной струи с геофизической средой на высоте 140 км // ДАН РФ. 1998. Т. 361. № 6. С. 818.

Амусья М.Я. Атомный фотоэффект. М.: Наука. 1987. – 282 с.

Вайнштейн Л.А., Собельман И.И., Юков Е.А. Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. М.: Наука. 1979. – 320 с.

Гаврилов Б.Г., Зецер Ю.И., Подгорный И.М., Собынин Д.Б., Менг Ч.-И., Эрландсон Р.Э., Стенбек-Нилсен Х.К., Пфафф Р.Ф., Линч К.А. Движение плазменной струи поперек геомагнитного поля в активном геофизическом эксперименте «NORTH STAR» // Космические исследования. 2003. Т. 41. № 1. С. 33.

Грим Г. Уширение спектральных линий в плазме. М.: Мир. 1978. – 492 с.

Грязнов В.К., Иосилевский И.Л., Красников Ю.Г. и др. Теплофизические свойства рабочих сред ядерной энергетической установки с газофазным реактором / Под ред. В.М. Иевлевой. М.: Атомиздат. 1980. – 303 с.

Дьячков Л.Г. К расчету вероятности разрушения связанных состояний атома в плазменных микрополях // ТВТ. 1997. Т. 35. № 5. С. 823.

Каменщиков В.А., Пластинин Ю.А., Николаев В.М., Новицкий Л.А. Радиационные свойства газов при высоких температурах. М.: Машиностроение. 1971. – 440 с.

Кобзев Г.А. Уширение спектральных линий положительных ионов азота и кислорода: Препринт. М.: ИВТАН, 1983. № 1–101. – 49 с.

Кобзев Г.А., Куриленков Ю.К. Влияние неидеальности на фоторекомбинационные спектры плазмы // ТВТ. 1978. Т. 16. № 3. С. 458.

Косарев И.Б. Оптические свойства паров вещества космических тел, вторгающихся в атмосферу Земли // ТВТ. 2009. Т. 47. № 6. С. 811–821.

Косарев И.Б. Модернизация таблиц радиационных свойств горячего воздуха // Динамические процессы в геосферах. Вып. 7: Сборник научных трудов ИДГ РАН. М.: ГЕОС, 2015. С. 167–174.

Кузьменко Н.Е., Кузнецова Л.А., Кузяков Ю.Я. Факторы Франка-Кондона двухатомных молекул. М.: МГУ, 1984. – 344 с.

Лосева Т.В., Голубь А.П., Косарев И.Б., Ляхов А.Н., Поклад Ю.В., Гаврилов Б.Г., Зецер Ю.И., Черменин А.В. Начальная стадия развития плазменной струи в активных геофизических ракетных экспериментах // Настоящий сборник.

Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. М.: Наука, 1977. – 320 с.

- Суржиков С.Т., Кузнецова Л.А.* Информационно-вычислительный комплекс «MSRT-RADEN». 1. Основная модель коэффициентов поглощения электронных спектров двухатомных молекул // Математическое моделирование. 1998. Т. 10. № 3. С. 15.
- Сапожников А.Т., Миронова Е.Е.* Уравнение состояния алюминия с учетом испарения и ионизации // VII Забабахинские научные чтения. Снежинск : 2003. – 14 с.
- Фортов В.Е., Якубов И.Т.* Неидеальная плазма. М. : Энергоатомиздат, 1994. – 368 с.
- Чернышева Л.В., Семенов С.К., Черепков Н.А.* Программа вычисления парциальных сечений фотоионизации атомов с учетом корреляций в нескольких переходах. СПб. : Препринт ФТИ АН. № 1620. 1993.
- Butler K., Mendoza C. and Zeippen M.* Atomic data for opacity calculations: XIX. The magnesium isoelectronic sequence // J. Phys B: Atom. Molec. Phys. 1993. V. 26. No. 24. P. 4409.
- Geltman S.* Free-free radiation in electron-neutral atom collisions // JQSRT. 1973. V. 13. No. 7. P. 601–613.
- Greeff C.W., Lester W.A. and Hummod B.L.* Electronic states of Al and Al2 using quantum Monte-Carlo with effective core potential // J. Chem. Phys. 1996. V. 104. № 5. P. 1977–1986.
- Kelleher D.E. and Podobedova L.I.* Atomic Transition Probabilities of Aluminum. A Critical Compilation // J.Phys. Chem. Ref. Data. 2008. V. 37. No. 2.
- Langhoff S.R. and Bauschlicher C.W.* Theoretical study of the spectroscopy of Al2 // J.Chem.Phys.1990. V. 92. № 3. P. 1879.
- Le Dourneuf M., Vo Ky Lan, Burke P.G. and Taylor K.T.* The photoionization of neutral aluminium // J. Phys B: Atom. Molec. Phys. 1975. V. 8. No. 16. P. 2640.
- Moore Ch.* Atomic energy levels. Washington: U.S.DC Nat. Stand. Ref. Data Ser., Nat. Bur. Stand. 1971. V. 2. № 35. – 309 p.
- Sansonetti J.E. and Martin W.C.* Atomic Spectroscopic Data. // J. Phys. Chem. Ref. Data. 2005. V.34. No. 4. P. 1571.
- Wiese W.L., Smith M.W. and Miles B.M.* Atomic Transition Probabilities – Sodium Through Calcium Washington U.S. DC: Nat. Stand. Ref. Data Ser., Nat.Bur. Stand. 1969. V. 22. № 2. – 320 p.