

01;04

Аналитическая модель для снижения потенциалов ионизации атомов и ионов в неидеальной плазме

© С.И. Анисимов, Ю.В. Петров

Институт теоретической физики им. Л.Д. Ландау РАН,
Московская область, Черноголовка

Поступило в Редакцию 10 февраля 1997 г.

Разработана модель для расчета сдвига уровней и снижения потенциалов ионизации атомов и ионов вследствие экранирования в неидеальной плазме, допускающая аналитическое решение. Применение полученных выражений к плазме алюминия, золота, меди и цезия показывает, что снижение потенциалов ионизации у цезия наиболее значительно.

При определении концентрации компонент неидеальной плазмы большое значение имеет величина потенциала ионизации нейтральных атомов и ионов [3,4,6–14]. В плотной плазме эти потенциалы существенно перенормируются по сравнению со случаем свободных атомов и ионов вследствие экранирования кулоновского взаимодействия. Мы будем описывать потенциальную энергию валентного электрона атома или иона на расстоянии r от ядра функцией

$$U(r) = -\frac{Z^*/\lambda}{\exp(r/\lambda) - 1} \quad (1)$$

(потенциал Хюльцена с длиной экранирования λ и эффективным зарядом Z^*). При $r \ll \lambda$ эта функция переходит в кулоновский потенциал $U_c(r) = -Z^*/r$, а при $r \gg \lambda$ принимает вид $U(r) = -\frac{Z^*}{\lambda} e^{-r/\lambda}$. Переходя к переменной $x = r/\lambda$ и записывая уравнение Шредингера для функции $\chi(x) = \frac{R(x)}{x}$, где $R(x)$ — радиальная часть волновой функции, получаем (используются атомные единицы):

$$-\frac{\chi''}{2\lambda^2} + \left(-\frac{Z^*}{\lambda} \cdot \frac{1}{e^x - 1} + \frac{l(l+1)}{2\lambda^2 x^2} \right) \chi = E\chi. \quad (2)$$

Для состояний с орбитальным моментом $l = 0$ дискретный спектр этого уравнения известен [2,5]. Он определяется главным квантовым числом n ($n = 1, 2, \dots$):

$$E_n = -\frac{Z^{*2}}{2n^2} \left(1 - \frac{n^2}{2Z^2\lambda} \right)^2. \quad (3)$$

В случае состояний с ненулевым орбитальным моментом l поступим следующим образом. Заменяем в (2) центробежный член $U_l(x) = \frac{l(l+1)}{2\lambda^2 x^2}$ на функцию $\tilde{U}_l(x) = \frac{l(l+1)}{2\lambda^2} / (e^x - 1)^2$. При $r \ll \lambda$ функции $U_l(x)$ и $\tilde{U}_l(x)$ совпадают, а поскольку для связанного электрона $r \sim 1$, то при $\lambda \gg 1$ в плазме $\tilde{U}_l(x)$ очень хорошо приближает $U_l(x)$. Для центробежной функции $\tilde{U}_l(x)$ мы решим радиальное уравнение точно при произвольном l . Кроме того, мы можем улучшить результат, учтя разность между $U_l(x)$ и $\tilde{U}_l(x)$ по теории возмущений. Итак, уравнение для функции χ имеет теперь вид

$$-\frac{\chi''}{2\lambda^2} + \left(-\frac{Z^*}{\lambda} \cdot \frac{1}{e^x - 1} + \frac{l(l+1)}{2\lambda^2} \cdot \frac{1}{(e^x - 1)^2} \right) \chi = \tilde{E}\chi. \quad (4)$$

Переходя к переменной $u = e^{-x}$ и вводя обозначения

$$\alpha^2 = -\lambda^2 \tilde{E}, \quad \beta^2 = 2Z^*\lambda, \quad (5)$$

ищем χ в виде

$$\chi(u) = u^\alpha (1-u)^{l+1} w(u), \quad (6)$$

где функция $w(u)$ удовлетворяет уравнению

$$u(1-u)w'' + (2\alpha + 1 - (2\alpha + 2l + 3)u)w' - ((2\alpha + 1)(l+1) - \beta^2)w = 0. \quad (7)$$

Конечное при $u \rightarrow 1$ решение имеет вид

$$w(u) = F(\alpha + 1 + l + \gamma, -n_r, 2\alpha + 1, u), \quad (8)$$

где $\gamma = (\alpha^2 + \beta^2 + l(l+1))^{1/2}$, $n_r = -(\alpha + 1 + l + \gamma)$ — радиальное квантовое число ($n_r = 0, 1, 2, \dots$), а $F(\xi, \eta, \zeta, u)$ — гипергеометрическая функция:

$$F(\xi, \eta, \zeta, u) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(\xi)_m (\eta)_m}{(\zeta)_m} \cdot \frac{u^m}{m!}$$

Здесь введено обозначение:

$$\begin{aligned}(\xi)_m &= \xi(\xi + 1)(\xi + m - 1), \\ (\xi)_0 &= 1.\end{aligned}$$

Вводя главное квантовое число $n = n_r + l + 1$ ($n = 1, 2, \dots$), получаем дискретный спектр в виде

$$\tilde{E}_{n,l} = -\frac{Z^{*2}}{2n^2} \left(1 - \frac{n^2 - l(l+1)}{2Z^*\lambda} \right)^2. \quad (9)$$

Учтя возмущение

$$\delta U_l(x) = U_l(x) - \tilde{U}_l(x), \quad (10)$$

получим поправку к $\tilde{E}_{n,l}$:

$$\delta \tilde{E}_{n,l} = \frac{l(l+1)}{2\lambda^2} \frac{\int_0^\infty \chi_{n,l}^2 \left(\frac{1}{x^2} - \frac{1}{(e^x-1)^2} \right) dx}{\int_0^\infty \chi_{n,l}^2 dx}. \quad (11)$$

Для случая, соответствующего так называемым круговым кулоновским орбиталям ($n_r = 0$, $l = n - 1$), эта поправка равна

$$\begin{aligned}\delta \tilde{E}_{n,l} &= \delta \tilde{E}_{n,n-1} \\ &= \frac{l(l+1)}{2\lambda^2} \frac{\sum_{m=0}^{2n} (-1)^m \binom{2n}{m} (2\alpha + m) \ln(2\alpha + m) - \sum_{m=0}^{2(n-1)} \frac{(-1)^m}{2\alpha+2+m} \binom{2n-2}{m}}{\sum_{m=0}^{2n} \frac{(-1)^m}{2\alpha+m} \binom{2n}{m}}.\end{aligned} \quad (12)$$

Здесь

$$\binom{i}{j} = \frac{i!}{j!(i-j)!}$$

— биномиальные коэффициенты.

Выражение (12) содержит только конечные суммы невысокого порядка, поэтому легко вычисляется. Оно справедливо и при небольших λ ,

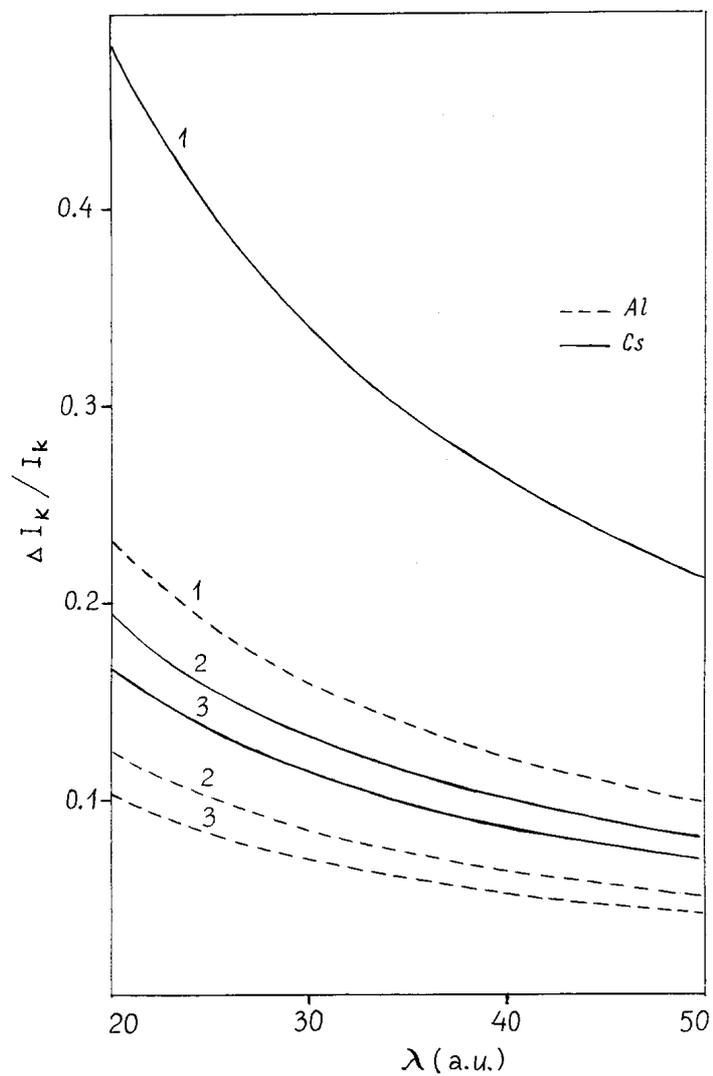


Рис. 1. Относительное снижение трех первых потенциалов ионизации ΔI_k ($k = 1, 2, 3$) для алюминия и цезия. Здесь $\Delta I_k / I_k = (I_k(\lambda) - I_k(\infty)) / I_k(\infty)$.

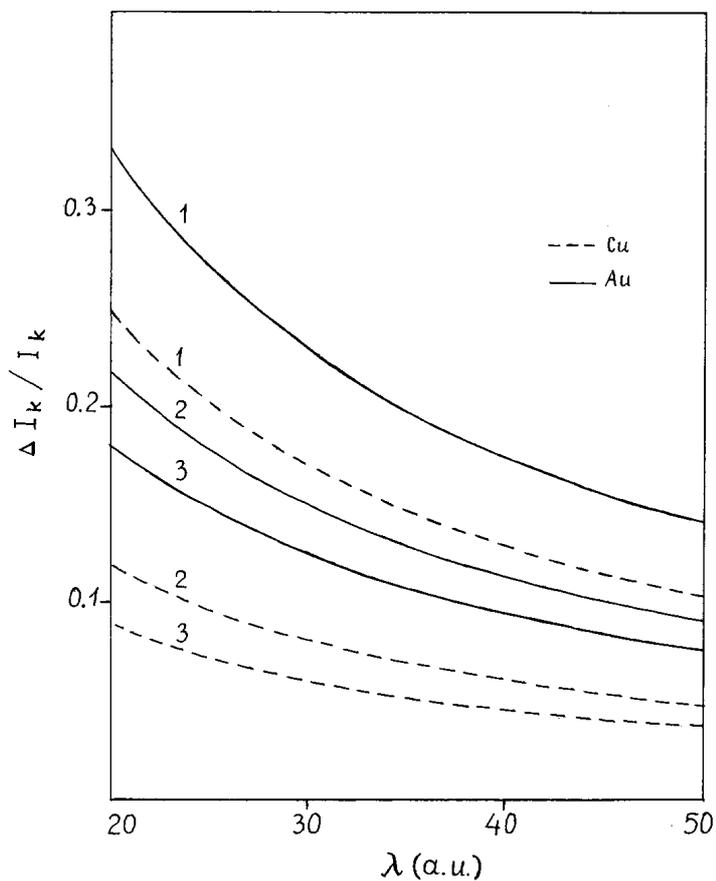


Рис. 2. Относительное снижение трех первых потенциалов ионизации меди и золота.

что позволяет определить точку моттовского перехода, т. е. такое значение λ , при котором $E_{n,l} = 0$. Вдали от области перехода Мотта, когда $\lambda \gg 1$, вычисляя асимптотику выражения (11), получаем при любых l :

$$\delta \tilde{E}_{n,l} = \frac{\alpha l}{2\lambda^2}. \quad (13)$$

Эффективный заряд Z^* определим из условия равенства потенциала ионизации свободного атома или иона (при $\lambda \rightarrow \infty$) экспериментальному значению I_{nl}^0 :

$$\frac{Z^{*2}}{2n^2} = I_{nl}^0. \quad (14)$$

Тогда потенциал ионизации с учетом экранирования при больших λ равен

$$I_{nl} = -E_{nl} = I_{nl}^0 \left(1 - \frac{n^2 - l(l+1)}{2n\lambda} \sqrt{\frac{1}{2I_{nl}^0}} \right)^2 \left(1 - \frac{l}{\lambda} \sqrt{\frac{1}{I_{nl}^0}} \right). \quad (15)$$

Относительное снижение трех первых потенциалов ионизации алюминия и цезия в зависимости от длины экранирования показано на рис. 1. Аналогичная зависимость для трех первых потенциалов золота и меди приведена на рис. 2. Обращает на себя внимание значительно более существенное, чем для других элементов, снижение потенциалов ионизации цезия.

Настоящая работа поддержана Российским фондом фундаментальных исследований, грант 95-02-04535а и грантом INTAS-94-1105.

Список литературы

- [1] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Статистическая физика. Ч. 1. М., 1976. 584 с.
- [2] Флюгге З. Задачи по квантовой механике. Т. 1. М.: Мир, 1974. 341 с.
- [3] Renkert H., Hensel F., Frank E.U // Phys. Lett. A. 1969 V. 30. N 9. P. 494–495.
- [4] Hefner W., Hensel F. // Phys. Rev. Lett. 1982. V. 48. N 15. P. 1026–1028.
- [5] Arista N.R., Gras-Marti A., Baragiola R.A. // Phys. Rev. 1989. V. 40. N 4. P. 6873.
- [6] Förster A., Kahlbaum T., Ebeling W. // High Press. Res. 1991. V. 7. P. 375–377.
- [7] Ebeling W., Förster A., Fortov V. et al. Thermophysical Properties of Hot Dense Plasma. Teubner-Texte zur Physik. Bd. 25, Stuttgart–Leipzig, 1991. 315 p.
- [8] Ликальтер А.А. // УФН. 1992. Т. 162. В. 7. С. 119–147.
- [9] Якубов И.Т. // УФН. 1993. Т. 163. В. 5. С. 35–51.
- [10] Ликальтер А.А. // ЖЭТФ. 1994. Т. 106. В. 6. С. 1663–1675.
- [11] Ликальтер А.А. // ТВТ. 1994. Т. 32. В. 6. С. 803–808.
- [12] DeSilva A.W., Kunze H.-J. // Phys. Rev. E. 1994. V. 49. N 5. P. 4448–4454.
- [13] Ng A., Celliers P., Xu G. et al. // Phys. Rev. E. 1995. V. 52. N 4. P. 4299–4310.
- [14] Ликальтер А.А. // ЖЭТФ. 1995. Т. 107. В. 6. С. 1996–2006.