

УДК 519.6

## О МЕТОДИКЕ УЧЕТА ЭФФЕКТА ШТАРКА ПРИ РАСЧЕТАХ СПЕКТРАЛЬНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ВЫСОКОТЕМПЕРАТУРНОЙ ПЛАЗМЫ

А. Ф. Никифоров, В. Г. Новиков, Н. Н. Фимин  
(ИПМ им. М. В. Келдыша РАН)

Эффект уширения спектральных линий под воздействием ионного микрополя (эффект Штарка) может оказаться важным при расчете коэффициентов поглощения фотонов в плотной высокотемпературной плазме. Рассматривается методика учета эффекта Штарка в квазистатическом приближении, основанная на диагонализации возмущенного ионным микрополем гамильтониана иона. Распределение ионного микрополя получено с использованием модели возмущающих независимых частиц. Методика может применяться как для легких элементов, так и для элементов с большим зарядом атомного ядра. Расчеты основаны на релятивистской модели Хартри—Фока—Слэтера и проводились с помощью программы THERMOS, разработанной в ИПМ им. М. В. Келдыша.

### Введение

Уширение спектральных линий может существенно влиять на макроскопические характеристики излучающей плазмы. Кроме естественного и доплеровского уширений, важную роль играет взаимодействие излучающего иона с электронами и ионами плазмы. Как правило, взаимодействие с электронами можно рассматривать в так называемом *ударном приближении*, при этом уширение электронами можно приближенно описать лоренцевским профилем с некоторой шириной [1–4]. Взаимодействие с ионами, рассматриваемое в квазистатическом приближении, приводит к расщеплению и смещению энергетических уровней в плазме. Вместо одной спектральной линии с определенной частотой появляется много линий с близкими частотами, испускаемых разными ионами, на которые действуют плазменные микрополя разной интенсивности (штарковское уширение).

В настоящей работе исследуется влияние различных подходов к учету эффекта Штарка на уширение спектральных линий в плазме и влияние этого эффекта на спектральные характеристики вещества.

Проанализирована методика, основанная на *двухуровневом приближении* [3], и проведено сравнение с данными, полученными в многоуровневом приближении с использованием *mt*-представления ( $n$  — главное квантовое число,  $m$  — проекция полного момента электрона на выделенную ось) [4]. Рассмотрен также полуаналитический вариант многоуровневого приближения, значительно сокращающий время счета.

Показано, что для элементов с зарядом атомного ядра  $Z \gg 1$  влияние эффекта Штарка на средние коэффициенты поглощения фотонов составляет несколько процентов. Влияние на спектральные коэффициенты в некотором интервале частот может быть более заметным.

### Двухуровневое приближение

В двухуровневом приближении [3] предполагается, что расщепление по главному квантовому числу  $n$  велико и в электрическом поле происходит смешивание лишь двух ближайших уровней по орбитальному квантовому числу  $l$ . Так как эффект Штарка наиболее существенен для верхних уровней,

где влияние релятивистских поправок мало, то при вычислении штарковского расщепления можно ограничиться классификацией уровней по квантовым числам  $n$  и  $l$ , считая, что штарковские сдвиги уровней  $\varepsilon_{nlj}$  при  $j = l \pm 1/2$  равны ( $j$  — квантовое число полного момента электрона).

Рассмотрим уровни  $\varepsilon_{nl}$  и  $\varepsilon_{n,l-1}$ . Тогда для сдвига уровней  $\Delta\varepsilon$  имеем секулярное уравнение [1]

$$\begin{vmatrix} \frac{\Delta}{2} - \Delta\varepsilon & V_{12} \\ V_{21} & -\frac{\Delta}{2} - \Delta\varepsilon \end{vmatrix} = 0,$$

откуда смещение уровня  $\varepsilon_{nl}$  в электрическом поле  $F$

$$\Delta_{nl}^{n,l-1} = \Delta\varepsilon - \frac{\Delta}{2} = \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_{nl} - \varepsilon_{n,l-1}}{2}\right)^2 + V_{12}^2} - \frac{\varepsilon_{nl} - \varepsilon_{n,l-1}}{2}. \quad (1)$$

Здесь  $V_{12} = V_{21} = \langle nlm | Fz | n'l'm' \rangle$  — матричный элемент взаимодействия электрона с электрическим полем  $\vec{F}$  (полагаем  $\vec{F}\vec{r} = Fz$ ):

$$\langle nlm | Fz | n'l'm' \rangle = \begin{cases} \delta_{mm'} F r_{nl,nl'} \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+3)(2l+1)}}, & l' = l+1; \\ \delta_{mm'} F r_{nl,nl'} \sqrt{\frac{l^2 - m^2}{(2l+1)(2l-1)}}, & l' = l-1; \end{cases}$$

$$r_{nl,nl'} = \int R_{n'l'}(r) r R_{nl}(r) dr,$$

где  $\delta_{mm'}$  — символ Кронекера,  $\delta_{mm'} = \begin{cases} 1, & m = m'; \\ 0, & m \neq m'; \end{cases}$   $R_{nl}(r)$  — радиальная функция (радиальная

часть волновой функции) электрона (индексы показывают, что волновая функция принадлежит дискретному спектру:  $\psi_{nlm}(\vec{r}) = (1/r) R_{nl}(r) (-1)^m Y_{lm}(\vartheta, \varphi)$ ). В остальных случаях (при  $l' \neq l \pm 1$ ) матричный элемент взаимодействия электрона с электрическим полем равен нулю.

Величину  $\Delta_{nl}^{n,l-1}$  усредним по направлению поля  $\vec{F}$ , что эквивалентно усреднению по проекции орбитального момента  $m$  на направление поля. Предполагая в основном квадратичную зависимость от поля ( $(\Delta/2)^2 \gg V_{12}^2$ ), среднее значение  $\langle \Delta_{nl}^{n,l-1} \rangle$  можно получить, подставляя в (1) вместо  $V_{12}^2$  величину

$$\langle V_{12}^2 \rangle = v_{nl,nl'}^2 = \frac{1}{2l_{<}} \sum_{m=-l_{<}}^{l_{<}} |\langle nlm | Fz | n'l'm \rangle|^2 = \frac{l_{>} F^2 (r_{nl,nl'})^2}{3(2l_{<} + 1)},$$

$$l_{<} = \min(l, l'), \quad l_{>} = \max(l, l').$$

Учитывая два ближайших уровня (если  $l = 0$  или  $l' = n - 1$ , то один ближайший уровень), для средней величины сдвига в поле  $F$  получаем

$$d_{nl} = \langle \Delta_{nl}^{n,l-1} \rangle + \langle \Delta_{nl}^{n,l+1} \rangle, \quad (2)$$

где

$$\langle \Delta_{nl}^{n,l-1} \rangle = \sqrt{\left(\frac{\varepsilon_{>} - \varepsilon_{<}}{2}\right)^2 + v_{nl,nl'}^2} - \frac{\varepsilon_{>} - \varepsilon_{<}}{2},$$

$$\varepsilon_{<} = \min(\varepsilon_{nl}, \varepsilon_{n'l'}), \quad \varepsilon_{>} = \max(\varepsilon_{nl}, \varepsilon_{n'l'}).$$

### Многоуровневое приближение

Более точная модель штарковского уширения предполагает учет тонкой структуры спектра (см. работу [5], где проведены расчеты для гелиеподобных ионов). Использование такой модели в массовых расчетах не представляется возможным из-за больших затрат машинного времени. Более предпочтительным является обобщение двухуровневого приближения. Вариант такой модели рассмотрен в книге [4]. Суть ее заключается в следующем.

В заданном электрическом поле  $\vec{F}$  одноэлектронные уровни энергии и волновые функции электронов можно найти, используя теорию возмущений. В качестве невозмущенного гамильтониана берется  $H_0 = -\Delta/2 - V(r)$ , где эффективный центрально-симметричный потенциал  $V(r)$  есть самосогласованный потенциал релятивистской модели Хартри—Фока—Слэтера (ХФС), отвечающий наиболее вероятному состоянию иона и свободных электронов в атомной ячейке. Возмущение имеет вид  $H' = \vec{F}\vec{r} = Fz$  (ось  $z$  направлена вдоль  $\vec{F}$ ).

Выберем в качестве невозмущенных волновые функции электронов с полным моментом количества движения  $\vec{j} = \vec{l} + \vec{s}$ :

$$\psi_{nljm} = \sum_{m_l, m_s} C_{lm_l \frac{1}{2} m_s}^{jm} \psi_{nlm_l m_s},$$

где  $C_{lm_l \frac{1}{2} m_s}^{jm}$  — коэффициенты Клебша—Гордана. Тогда матричные элементы оператора  $H_0$  в этом представлении диагональны и не зависят от  $m$ :

$$\langle nljm | H_0 | nljm \rangle = \varepsilon_{nlj}.$$

Поскольку  $\vec{F}\vec{r} = Fz$ , а  $z = \sqrt{4\pi/3} r Y_{10}(\vartheta, \phi)$  есть неприводимый тензорный оператор 1-го ранга, коммутирующий со спиновым оператором, то по теореме Вигнера—Эккарта

$$\begin{aligned} \langle nljm | Fz | n'l'j'm' \rangle &= (-1)^{j-m} \begin{pmatrix} j & 1 & j' \\ -m & 0 & m' \end{pmatrix} \times \\ &\times (-1)^{3/2-l'+j} \sqrt{(2j+1)(2j'+1)} W(lj'l'j'; \frac{1}{2}, 1) (nl \| Fz \| n'l'), \end{aligned}$$

где приведенный матричный элемент

$$(nl \| Fz \| n'l') = (-1)^{(l-l'+1)/2} \sqrt{\frac{l+l'+1}{2}} F r_{nl, n'l'} \quad (l' = l \pm 1);$$

$W(abcd; ef)$  — коэффициент Рака.

Так как  $3jm$ -символ Вигнера  $\begin{pmatrix} j & 1 & j' \\ -m & 0 & m' \end{pmatrix} \neq 0$  только при  $m' = m$ , то отсюда следует, что для характеристики уровней энергии, соответствующих квантовым числам  $n, l, j, m$ , кроме главного квантового числа  $n$ , остается квантовое число  $m$ .

Собственные функции гамильтониана  $H = H_0 + H'$  представляются в виде линейных комбинаций функций  $\psi_{nljm}$  с фиксированными значениями  $n$  и  $m$ :

$$\psi_{nm}^{(s)} = \sum_{l,j} c_{nljm}^{(s)} \psi_{nljm},$$

где  $s$  — номер собственного значения. Коэффициенты  $c_{nljm}^{(s)}$  являются решениями секулярного уравнения

$$(\varepsilon_{nm}^{(s)} - \varepsilon_{nlj}) c_{nljm}^{(s)} = \sum_{l',j'} \langle nljm | Fz | n'l'j'm' \rangle c_{n'l'j'm'}^{(s)}, \quad (3)$$

т. е. собственными значениями пятидиагональной матрицы, внедиагональные элементы которой есть  $\langle nljm|Fz|n'l'j'm\rangle$ , а на главной диагонали расположены  $\varepsilon_{nlj}$ . С учетом правил отбора матричные элементы не равны нулю лишь при  $l' = l, l \pm 1, j' = j, j \pm 1$ .

Так как матричные элементы  $\langle ljm|Fz|n'l'j'm\rangle$  меняют знак при замене  $m$  на  $-m$ , то можно считать, что  $\varepsilon_{nlj} - \varepsilon_{n,-m}^{(s)} = \varepsilon_{nm}^{(s)} - \varepsilon_{nlj}$ ,  $c_{nlj,-m}^{(s)} = c_{nljm}^{(s)}$ , и решать задачу на собственные значения лишь для  $m > 0$ .

В водородоподобном приближении  $r_{nl;n,l-1} \approx -\frac{3n\sqrt{n^2 - l_i^2}}{Z_{nl_i} + Z_{n,l_i-1}}$ , где  $Z_{nl_i}$  — эффективный заряд иона. Точность водородоподобного приближения можно оценить, исходя из табл. 1. Как видно из таблицы, результаты расчетов дипольного матричного элемента в водородоподобном приближении и с использованием численных волновых функций в данном случае весьма близки (отличие  $\sim 3\%$ ).

Электрическое поле  $F$ , создаваемое ионами плазмы, не является постоянным. В квазистатическом приближении предполагаем, что расщепление спектральной линии на отдельные компоненты и расположение этих компонентов в спектре поглощения зависит от  $F$  как функционального параметра, распределение вероятностей которого  $W(F)$  предполагается известным. В качестве  $W(F)$  удобно взять аппроксимацию результатов численного моделирования, которая применима в широкой области температур и плотностей [6]:

$$W(F) = \frac{H(u)}{F_0}, \quad H(u) = \frac{2u}{\pi} \int_0^\infty x \sin(ux) \exp\left(-x^{3/2} / \left(1 + \frac{\Gamma}{\sqrt{x}}\right)^{1,2876}\right) dx. \quad (4)$$

Здесь  $u = F/F_0$ ,  $F_0 = 2\pi(4Z_0N_e/15)^{2/3}$  — нормальная хольцмарковская напряженность поля;  $Z_0$  — средний заряд иона;  $N_e = 6,022 \cdot 10^{23} \rho Z_0/A$  — плотность электронов в  $1/\text{см}^3$ ;  $A$  — атомный вес;  $\Gamma = Z_0^2/(\theta r_0)$  — параметр неидеальности плазмы;  $\theta$  — температура в ат. ед.;  $r_0 = 1,388 (A/\rho)^{1/3}$  — радиус атомной ячейки;  $\rho$  — плотность вещества в  $\text{г}/\text{см}^3$ .

В табл. 2 в качестве примера приведены результаты расчетов расщепления (сдвига) линий поглощения для плазмы золота при переходе  $nlj \rightarrow n'l'j'$  ( $n = 3, n' = 4$ ) во внешнем поле  $F = 0,45F_0$ , которое соответствует максимально вероятному значению поля (см. (4)) при температуре  $T = 0,3$  кэВ и плотности  $\rho = 0,1 \text{ г}/\text{см}^3$ . Вычисление эффективного уширения  $D_{St}$  проводилось с помощью решения секулярного уравнения (3) для возмущенного гамильтониана. Производился перебор всех возможных переходов  $nlj \rightarrow n'l'j'$  с вычислением соответствующих значений штарковского расщепления. Величина  $D_{St}$  получалась следующим образом: для данного перехода  $nlj \rightarrow n'l'j'$  определялись все соответствующие ему переходы-компоненты  $nms \rightarrow n'm's'$  при наложении поля (штарковское расщепление и сдвиг), после чего за  $D_{St}$  принималось максимальное расстояние между упомянутыми расщепленными (или сдвинутыми) компонентами, отвечающими переходу в присутствии и в отсутствие внешнего поля.

Таблица 1

Дипольные матричные элементы, вычисленные по волновым функциям модели ХФС ( $r_{nl;n,l-1}$ ) и в водородоподобном приближении ( $r_{nl;n,l-1}^H$ ), для золота при  $T = 0,3$  кэВ,  $\rho = 0,1 \text{ г}/\text{см}^3$

| $n$ | $l$ | $n'$ | $l'$ | $r_{nl;n,l-1}$ | $r_{nl;n,l-1}^H$ |
|-----|-----|------|------|----------------|------------------|
| 3   | 1   | 3    | 0    | -0,177         | -0,181           |
| 3   | 2   | 3    | 1    | -0,143         | -0,149           |
| 4   | 1   | 4    | 0    | -0,343         | -0,343           |
| 4   | 2   | 4    | 1    | -0,308         | -0,318           |
| 4   | 3   | 4    | 2    | -0,241         | -0,252           |

Таблица 2

Параметры штарковского уширения в двухуровневом и многоуровневом приближениях для плазмы золота ( $T = 0,3$  кэВ,  $\rho = 0,1$  г/см<sup>3</sup>)

| $nlj \rightarrow n'l'j'$      | Энергия перехода<br>$ \varepsilon_{n'l'j'} - \varepsilon_{nlj} $ | $D_2 =  d_{nl}  +  d_{n'l'} $ | $D_{St}$ |
|-------------------------------|--|-------------------------------|----------|
| (301/2) $\rightarrow$ (411/2) | 112,340068   | 0,001090                      | 0,000283 |
| (301/2) $\rightarrow$ (413/2) | 115,577682   | 0,001090                      | 0,000882 |
| (311/2) $\rightarrow$ (401/2) | 98,868506  | 0,000916                      | 0,001654 |
| (313/2) $\rightarrow$ (401/2) | 83,434163  | 0,000916                      | 0,001611 |
| (311/2) $\rightarrow$ (423/2) | 112,718586   | 0,000223                      | 0,000247 |
| (313/2) $\rightarrow$ (423/2) | 97,284243  | 0,000223                      | 0,000705 |
| (313/2) $\rightarrow$ (425/2) | 98,059653  | 0,000223                      | 0,001383 |
| (323/2) $\rightarrow$ (413/2) | 72,537993  | 0,000961                      | 0,000912 |
| (325/2) $\rightarrow$ (413/2) | 72,413780  | 0,000961                      | 0,000893 |
| (323/2) $\rightarrow$ (411/2) | 72,537993  | 0,000961                      | 0,001029 |
| (323/2) $\rightarrow$ (435/2) | 90,223598  | 0,000107                      | 0,000498 |
| (325/2) $\rightarrow$ (437/2) | 87,135553  | 0,000107                      | 0,000450 |
| (325/2) $\rightarrow$ (435/2) | 86,861771  | 0,000107                      | 0,000511 |

Проанализируем отличие двухуровневого приближения от многоуровневого для перехода ( $n = 3, l = 0, j = 1/2$ )  $\rightarrow$  ( $n' = 4, l' = 1, j' = 1/2$ ). В этом случае значение величины  $D_2 = |d_{nl}| + |d_{n'l'}| = |d_{30}| + |d_{41}|$  (см. формулу (2)) в 4 раза превышает результат более точного расчета  $D_{St}$ .

Построим для матрицы  $A = \|a_{ik}\|, i, k = \overline{1, 7}$ , при  $n = 4$  минорные субматрицы с размерностями 1, 2, ..., 6, начиная с элемента  $a_{66}$ , значение которого  $a_{66} = \varepsilon_{4,1,1/2} = -82,4619214$ . При этом матрица  $2 \times 2$  отвечает двухуровневому приближению,  $3 \times 3$  — трехуровневому и т. д. С увеличением размерности субматриц соответствующие собственные значения изменяются, приближаясь к наиболее точному в принятом приближении:

- 1) для матрицы  $1 \times 1$   $\bar{\varepsilon} = -82,4619214$ ;
- 2) для матрицы  $2 \times 2$   $\bar{\varepsilon} = -82,4609824$ ;
- 3) для матрицы  $3 \times 3$   $\bar{\varepsilon} = -82,4609867$ ;
- 4) для матрицы  $4 \times 4$   $\bar{\varepsilon} = -82,4614439$ ;
- 5) для матрицы  $5 \times 5$   $\bar{\varepsilon} = -82,4614452$ ;
- 6) для матрицы  $6 \times 6$   $\bar{\varepsilon} = -82,4614442$ ;
- 7) для матрицы  $7 \times 7$   $\bar{\varepsilon} = -82,4614374$ .

Видно, что происходит заметное изменение собственных значений при переходе от размерности субматриц  $N = 3$  к  $N = 4$  (в дальнейшем для  $N \geq 4$  результат меняется мало). Аналогичная ситуация имеет место и для других элементов с большим  $Z$ . Это обусловлено, как уже указывалось, недостаточностью двухуровневого приближения и необходимостью рассмотрения, как минимум, четырех уровней.

Анализ табл. 2 показывает, что для перехода ( $n = 3, l = 0$ )  $\rightarrow$  ( $n' = 4, l' = 1$ ) двухуровневое приближение по сравнению с многоуровневым дает расщепление, в 4 раза большее, а для перехода ( $n = 3, l = 2$ )  $\rightarrow$  ( $n' = 4, l' = 3$ ) оно, наоборот, в 5 раз меньше. В большинстве остальных случаев отличие  $D_2$  от  $D_{St}$  составляет не более 50% (в обе стороны).

Таким образом, правомерность использования двухуровневого приближения зависит от того, насколько чувствительными к параметрам уширения являются спектральные и средние коэффициенты поглощения фотонов.

### Вычисление спектральных коэффициентов поглощения фотонов

Полное сечение поглощения в спектральных линиях в одноэлектронном приближении может быть представлено в следующем виде [4]:

$$\sigma_{bb} = \frac{3\pi}{4} c^3 \sigma_0 \sum_Q P_Q \sum_{n,l,j} \sum_{n',l',j'} N_{nlj}^Q \left( 1 - \frac{N_{n'l'j'}^Q}{2j'+1} \right) f_{nlj,n'l'j'}^Q J_{nlj,n'l'j'}^Q(\omega), \quad (5)$$

где  $\sigma_0$  — томсоновское сечение рассеяния,  $\sigma_0 = 0,665 \cdot 10^{-24}$  см<sup>2</sup>;  $c = 137,036$  — скорость света в ат. ед.;  $P_Q$  — вероятность конфигурации  $Q$  иона;  $N_{nlj}^Q$  — числа заполнения соответствующей конфигурации  $Q$ ;  $f_{nlj,n'l'j'}^Q$  — силы осцилляторов;  $J_{nlj,n'l'j'}^Q$  — форма линии поглощения при переходе  $nlj \rightarrow n'l'j'$ .

В двухуровневом приближении профиль спектральной линии описывается функцией Фойгта:

$$J_{nlj,n'l'j'} = \frac{1}{\sqrt{\pi}D} K \left( \frac{\omega - \omega_{nlj,n'l'j'}}{D}, \frac{\gamma}{D} \right), \quad K(x, y) = \frac{y}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\exp(-s^2)}{(x-s)^2 + y^2} ds,$$

где  $\omega_{nlj,n'l'j'}$  — энергия перехода;  $D = \omega_{nlj,n'l'j'} \sqrt{2\theta/(1836A)}/c$  — доплеровский параметр уширения. Эффект Штарка учитывается введением дополнительного слагаемого  $|d_{nl}| + |d_{n'l'}$  в лоренцевскую ширину  $\gamma$  или соответствующим увеличением доплеровского параметра  $D$ .

Более последовательным представляется подход, в котором вместо переходов  $nlj \rightarrow n'l'j'$  учитываются отдельные штарковские компоненты, т. е. переходы  $nms \rightarrow n'm's'$  ( $m' = m, m \pm 1$ ):

$$\sigma_{bb}(\omega) = \frac{3\pi}{4} c^3 \sigma_0 \int_0^{+\infty} dF \cdot W(F) \sum_Q P_Q \sum_{n,m,s} \sum_{n',m',s'} N_{nms}^Q (1 - N_{n'm's'}^Q) f_{nms,n'm's'} J_{nms,n'm's'}(\omega),$$

где

$$f_{nms,n'm's'} = \frac{2}{3} \left( \varepsilon_{n'm'}^{(s')} - \varepsilon_{nm}^{(s)} \right) \left| \int \left( \psi_{n'm'}^{(s')} \right)^* \vec{r} \psi_{nm}^{(s)} d\vec{r} \right|^2; \quad (6)$$

$N_{nms}^Q$  — числа заполнения уровней  $nms$  ( $N_{nms}^Q = 0; 1$ ) конфигурации иона  $Q$  с вероятностью  $P_Q$ ;  $W(F)$  — функция распределения ионного микрополя  $F$ ;  $\varepsilon_{nm}^{(s)}$ ,  $\psi_{nm}^{(s)}$  — соответственно собственные значения и собственные функции гамильтониана в  $nms$ -представлении.

Силы осцилляторов (6) могут быть представлены в следующем виде:

$$f_{nms,n'm's'} = \frac{2}{3} \left( \varepsilon_{n'm'}^{(s')} - \varepsilon_{nm}^{(s)} \right) \left| \langle n'm's' | \vec{r} | nms \rangle \right|^2,$$

где матричные элементы

$$\langle n'm's' | \vec{r} | nms \rangle = \sum_{l,j,l',j'} c_{nljm}^{(s)} c_{n'l'j'm'}^{(s')} \langle \psi_{n'l'j'm'} | \vec{r} | \psi_{nljm} \rangle.$$

Здесь и далее суммирование по  $l, j, l', j'$  проводится при условиях

$$l' = l \pm 1; \quad j \geq |m|; \quad j' \geq |m'|; \quad 0 \leq l \leq n-1; \quad 0 \leq l' \leq n'-1.$$

Используя для  $\langle n'l'j'm' | \vec{r} | nljm \rangle$  представление через матричные элементы  $r_{nl,n'l'}$  и теорему Вигнера—Экарта, имеем

$$\begin{aligned} \langle n'm's' | z | nms \rangle &= \sum_{l,j,l',j'} c_{n'l'j'm'}^{(s')} c_{nljm}^{(s)} (-1)^{j-m} \begin{pmatrix} j & 1 & j' \\ -m & 0 & m' \end{pmatrix} \times \\ &\times (-1)^{3/2-l'+j} \sqrt{(2j'+1)(2j+1)} W \left( lj'l'j'; \frac{1}{2} 1 \right) r_{nl,n'l'} (-1)^{l+l'+1} \sqrt{\frac{l+l'+1}{2}}; \end{aligned}$$

$$\langle n'm's'|a|nms\rangle = \sum_{l,j,l',j'} c_{n'l'j'm'}^{(s')} c_{nljm}^{(s)} (-1)^{j-m} \left[ \begin{pmatrix} j & 1 & j' \\ -m & -1 & m' \end{pmatrix} + \delta_1(a) \begin{pmatrix} j & 1 & j' \\ -m & 1 & m' \end{pmatrix} \right] \times \\ \times (-1)^{3/2-l'+j'} \sqrt{(2j+1)(2j'+1)} W(lj'l'j'; \frac{1}{2}1) \delta_2(a) r_{nl,n'l'} (-1)^{l+\frac{l+l'+1}{2}} \sqrt{\frac{l+l'+1}{4}}.$$

Здесь  $a = x$  или  $a = y$ ;

$$\delta_1(a) = \begin{cases} -1 & \text{при } a = x; \\ +1 & \text{при } a = y; \end{cases} \quad \delta_2(a) = \begin{cases} 1 & \text{при } a = x; \\ i & \text{при } a = y. \end{cases}$$

Рассмотрим реализацию вычисления коэффициентов поглощения в спектральных линиях с учетом эффекта Штарка в многоуровневом приближении. При получении собственных значений  $\epsilon_{nm}^{(s)}$  матрицы  $A = \|a_{ik}\|$  будем считать, что квантовое число  $s$  связано с номером  $q$  данного собственного значения следующим образом:  $s = 2(n - |m|) + 1 - q$ . Очевидно, квантовое число  $s$  определяет соответствие собственного значения в  $nms$ -представлении надлежащему собственному значению в  $nlj$ -представлении. Компоненты собственного вектора при заданном значении  $s$

$$c_{nljm}^{(s)} = c_{n,n-p,n-p+\delta/2,m}^{(2n-2|m|+1-q)} = r_{h+2(q-1)(n-|m|)}, \quad (7)$$

$$p = 1, \dots, n - |m| + 1/2; \quad \delta = \pm 1; \quad h = \begin{cases} 2p - 1, & \text{если } \delta = +1; \\ 2p, & \text{если } \delta = -1; \end{cases}$$

$$h \leq 2(n - |m|), \quad n - p + \delta/2 > 0.$$

Здесь  $\{r_k\}$  — вектор с  $[2(n - |m|)]^2$  компонентами, представляющий собой последовательную запись всех элементов матрицы  $A$  после диагонализации по столбцам снизу вверх, начиная с последнего столбца. Очевидно, что соотношение (7) устанавливает однозначное соответствие между  $c_{nljm}^{(s)}$  и компонентами собственного вектора при заданных  $n$ ,  $m$  и  $s$ .

Используя (6) и имея в распоряжении коэффициенты  $c_{nljm}^{(s)}$ , можно вычислить силы осцилляторов в  $nms$ -представлении:

$$f_{nms,n'm's'} = \frac{2}{3} \left( \epsilon_{n'm'}^{(s')} - \epsilon_{nm}^{(s)} \right) \sum_{l,j,l',j'} \left[ c_{nljm}^{(s)} c_{n'l'j'm'}^{(s')} \times \right. \\ \left. \times r_{nl,n'l'} W(lj'l'j'; \frac{1}{2}1) \sqrt{(2j+1)(2j'+1)} \begin{pmatrix} j & 1 & j' \\ -m & m-m' & m' \end{pmatrix} \right]^2.$$

Запишем выражение для сечения (5) с учетом эффекта Штарка в виде, удобном для вычислений (вместо суммирования по  $s$ ,  $s'$  проведем суммирование по  $l$ ,  $j$ ,  $l'$ ,  $j'$ ):

$$\sigma_{bb}(\omega) = \frac{3\pi\sigma_0}{4} c^3 \sum_Q P_Q \sum_{n=1}^{n_{\max}} \sum_{m=-(n-1/2)}^{n-1/2} \sum_{n'=n}^{n_{\max}} \sum_{m'=m-1}^{m+1} \sum_{l,j,l',j'} N_{nlj}^Q \left( 1 - \frac{N_{n'l'j'}^Q}{2j'+1} \right) f_{nlj,n'l'j'}^Q J_{nms,n'm's'}^Q(\omega).$$

Здесь  $s = 2n - l - j - 1/2 \geq 1$ ;  $s' = 2n' - l' - j' - 1/2 \geq 1$ ;  $0 \leq l \leq n - 1$ ;  $0 \leq l' \leq n' - 1$ ;  $P_Q$  — вероятность конфигурации  $Q$  с числами заполнения  $N_{nlj}^Q$ ;  $J_{nms,n'm's'}^Q(\omega)$  — обобщенный профиль линии поглощения:

$$J_{nms,n'm's'}^Q(\omega) = \frac{1}{f_{nlj,n'l'j'}^Q} \int_0^\infty f_{nms,n'm's'}^Q J_{nlj,n'l'j'}^Q(\omega - \omega_{nms,n'm's'}[F]) W(F) dF,$$

где  $J_{nlj,n'l'j'}^Q(\omega - \omega_{nms,n'm's'}[F]) = J(\omega - \omega[F])$  — профиль отдельного компонента.

Вычислительная практика показала, что расчеты по приведенным формулам требуют чрезвычайно больших затрат машинного времени, что связано, в частности, с необходимостью интегрирования по полю  $F$ . Поэтому необходимы дальнейшие упрощения. Для этого целесообразно проводить вычисление сил осцилляторов  $f_{nms,n'm's'}^Q$  лишь для наиболее вероятного значения поля и предполагать линейную или квадратичную зависимость смещения компонентов спектральных линий от поля.

Кроме того, в случае сильного влияния эффекта Штарка, т. е. когда  $\gamma_{st} \gg \gamma_L$ , где  $\gamma_{st}$  — штарковская ширина,  $\gamma_L$  — лоренцевская ширина, можно приближенно использовать для профиля компонентов дельта-функцию Дирака, что позволяет провести интегрирование по полю аналитически.

В случае линейного эффекта Штарка, приближенно полагая

$$J(\omega - \omega[F]) \approx \delta(\omega - \omega[F]), \quad \omega[F] \approx \omega_{nms,n'm's'}(0) + C_{nms,n'm's'}^{(1)} F, \quad (8)$$

получаем

$$\int_0^\infty W(F) J(\omega - \omega[F]) dF = \frac{1}{C_{nms,n'm's'}^{(1)}} W\left(\frac{\omega - \omega_{nms,n'm's'}(0)}{C_{nms,n'm's'}^{(1)}}\right), \quad (9)$$

где  $\omega_{nms,n'm's'}(0)$  — положение центра линии в отсутствие поля;  $C_{nms,n'm's'}^{(1)}$  — параметр штарковского уширения.

Для квадратичного эффекта Штарка имеем

$$\int_0^\infty W(F) J(\omega - \omega[F]) dF = \left(\frac{1}{C_{nms,n'm's'}^{(2)}}\right)^{1/2} W\left(\sqrt{\frac{\omega - \omega_{nms,n'm's'}(0)}{C_{nms,n'm's'}^{(2)}}}\right),$$

где, в отличие от (8),

$$\omega[F] = \omega_{nms,n'm's'}(0) + C_{nms,n'm's'}^{(2)} F^2.$$

### Результаты расчетов

Полученные результаты и их сравнение друг с другом подробно освещены в работе [7]. Здесь приводятся несколько рисунков и таблиц, адекватно иллюстрирующих характерные ситуации.

Для тестирования программы были проведены расчеты профилей линий в плазме водорода и сравнение полученных результатов с результатами классической работы Г. Грима [8]. Рассматривались линии серий Лаймана и Бальмера  $Ly_\alpha$ ,  $Ly_\beta$ ,  $H_\alpha$ ,  $H_\beta$  в достаточно широком диапазоне температур и плотностей. Интенсивность приведена в зависимости от приведенной частоты  $\alpha$ , которая связана с частотой  $\nu$  в  $1/c$  следующим образом:

$$\alpha = \frac{\Delta\lambda}{F_0} = \frac{2\pi c \Delta\nu}{2,6\omega_0^2 e N_e^{2/3}} = 1,4 \cdot 10^{-3} \cdot \frac{\omega - \omega_0}{\rho \omega_0^2 Z_0^{2/3}},$$

где  $c = 3 \cdot 10^{10}$  см/с;  $\Delta\nu = \nu - \nu_0$ ,  $\nu_0$  — центр линии;  $\omega_0 \equiv 2\pi\nu_0$  — циклическая частота, соответствующая центру линии;  $N_e$  — концентрация электронов в  $1/\text{см}^3$ ;  $e = 4,8 \cdot 10^{-10}$  ед. СГСЭ;  $\omega$  — энергия фотона в эВ;  $\rho$  — плотность плазмы в  $\text{г}/\text{см}^3$ ;  $Z_0$  — средний заряд иона.

На рис. 1 дается сравнение профиля линии поглощения  $Ly_\alpha$  из [8] при температуре  $T = 20\,000$  К и плотности электронов  $N_e = 10^{18}$   $\text{см}^{-3}$  с профилем, полученным численно по программе THERMOS, модифицированной для учета эффекта Штарка; на рис. 2 — то же, но для линии  $Ly_\beta$  при температуре  $T = 40\,000$  К и плотности  $N_e = 10^{17}$   $\text{см}^{-3}$ . В силу симметрии на рисунках приведены лишь части профилей для  $\alpha > 0$ .



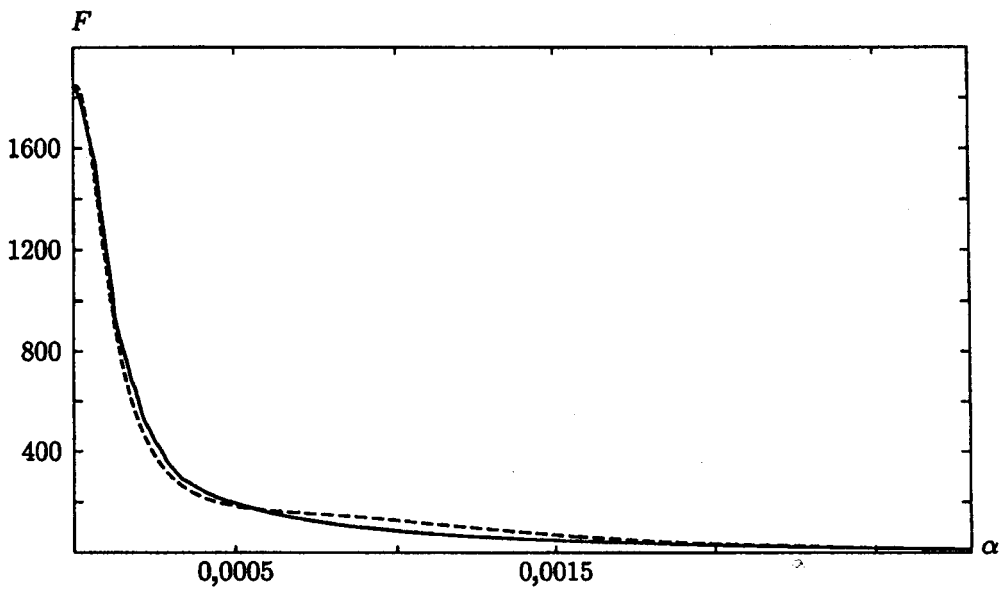


Рис. 1. Профиль линии  $Ly_{\alpha}$  водорода в зависимости от безразмерной переменной  $\alpha$  при  $T = 20\,000\text{ К}$ ,  $N_e = 10^{18}\text{ см}^{-3}$ : — — численный расчет; - - - - результат из работы [8]

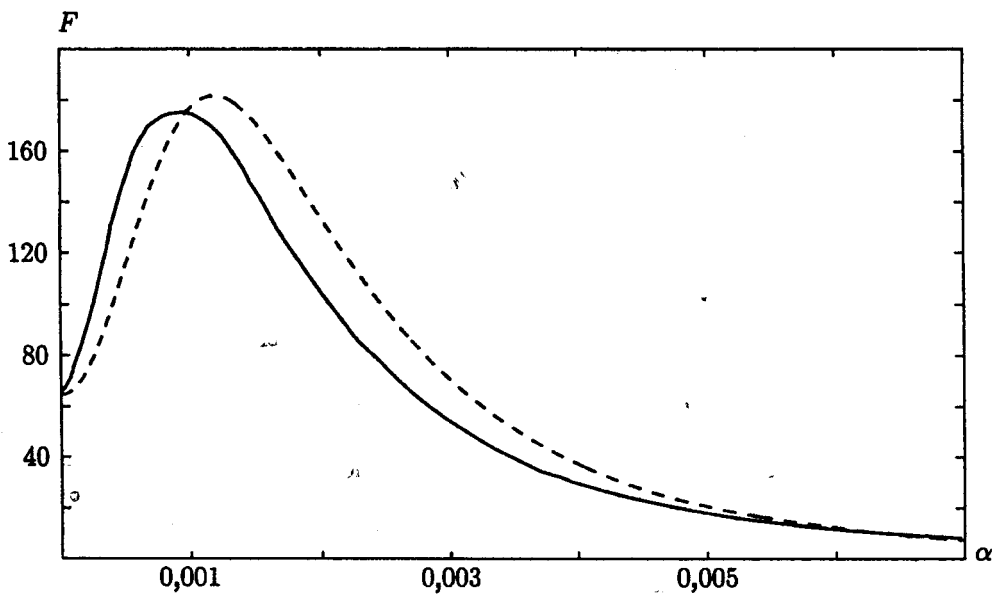


Рис. 2. Профиль линии  $Ly_{\beta}$  водорода в зависимости от безразмерной переменной  $\alpha$  при  $T = 40\,000\text{ К}$ ,  $N_e = 10^{17}\text{ см}^{-3}$ : — — численный расчет; - - - - результат из работы [8]

Как видно из графиков, результаты тестовых расчетов по программе THERMOS достаточно близки к полученным в расчетах [8]. Некоторое отличие в профилях связано с использованием различных приближений для электронного уширения.

Результаты расчетов спектральных коэффициентов поглощения для водорода при температуре  $T = 1\text{ эВ}$  и плотности  $\rho = 10^{-6}\text{ г/см}^3$  приведены на рис. 3, 4. Расчеты выполнены как без учета, так и с учетом эффекта Штарка в различных приближениях: в двухуровневом приближении посредством введения дополнительной лоренцевской или доплеровской ширины, с учетом эффекта Штарка путем численной диагонализации гамильтониана и с учетом эффекта Штарка методом полуаналитического интегрирования (9).

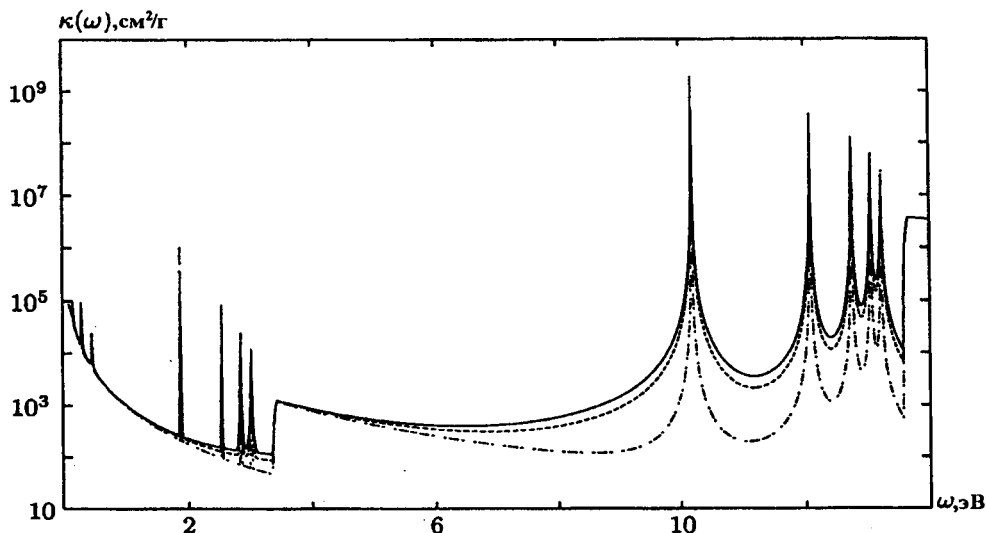


Рис. 3. Спектральные коэффициенты поглощения для водорода при  $T = 1 \text{ эВ}$ ,  $\rho = 10^{-6} \text{ г/см}^3$  ( $N_e = 6 \times 10^{16} \text{ 1/см}^3$ ): — — численная диагонализация гамильтониана; - - - — полуаналитическое приближение; - · - · — без учета эффекта Штарка

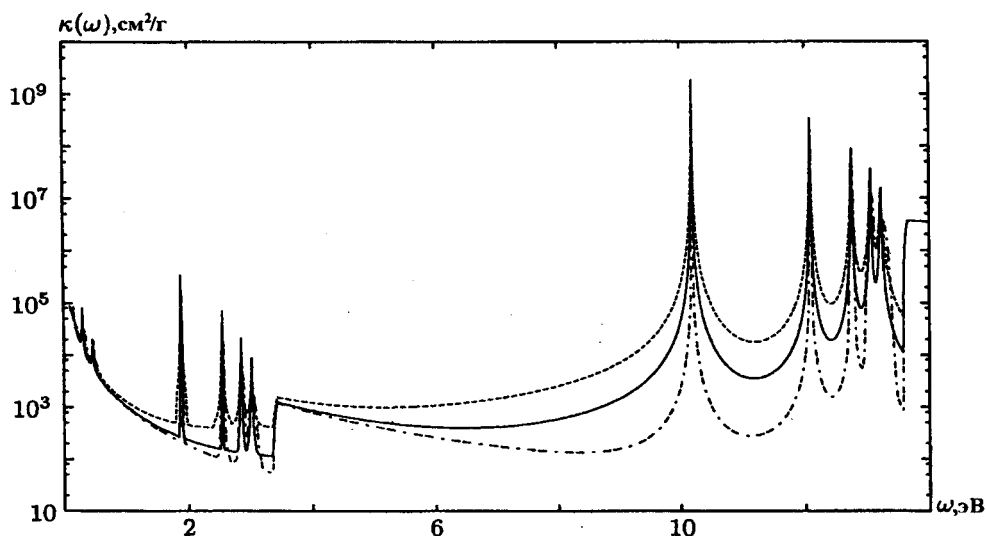


Рис. 4. Сравнение различных вариантов двухуровневого приближения для водорода при  $T = 1 \text{ эВ}$ ,  $\rho = 10^{-6} \text{ г/см}^3$ : — — численная диагонализация; - - - — двухуровневое приближение с дополнительным лоренцевским уширением; - · - · — двухуровневое приближение с дополнительным доплеровским уширением

Значения средних по Росселанду коэффициентов поглощения приведены в табл. 3.

Как видно из графиков и таблиц, влияние эффекта Штарка для водорода весьма существенно как для спектральных характеристик, так и для средних величин. Приведем для сравнения результаты расчетов росселандовых средних для тех же значений температуры и плотности, полученные по другим известным программам [9], таким как LEDCOP (Лос-Аламосская национальная лаборатория, США), OPAL и HOPE (Ливерморская национальная лаборатория, США):  $k_R^{\text{LEDCOP}} = 426 \text{ см}^2/\text{г}$ ;  $k_R^{\text{OPAL}} = 452 \text{ см}^2/\text{г}$ ;  $k_R^{\text{HOPE}} = 512 \text{ см}^2/\text{г}$ .

Расчет с использованием численной диагонализации и последующего численного интегрирования требует в десятки раз больше времени, чем приближенные методики. Из приближенных методик, как и ожидалось, методика с использованием полуаналитического интегрирования дает наиболее приемлемые результаты.

Для элементов с  $Z > 1$  трудоемкость расчетов многократно возрастает, поэтому метод прямой диагонализации неприменим для массовых расчетов. В связи с этим роль приближенных методик значительно возрастает. С целью исследования их точности были выполнены расчеты для различных химических элементов, от углерода ( $Z = 6$ ) до золота ( $Z = 79$ ). Наиболее подробные расчеты проведены для углерода и алюминия.

На рис. 5, 6 для плазмы углерода при температуре  $T = 100$  эВ и плотности  $\rho = 0,1$  г/см<sup>3</sup> сравниваются результаты расчетов спектральных коэффициентов поглощения  $\kappa(\omega)$  с учетом эффекта Штарка, полученные различными методами. Значения росселандовых коэффициентов поглощения сведены в табл. 4.

Результаты расчетов по другим программам [9]:  $k_R^{\text{LEDCOP}} = 736$  см<sup>2</sup>/г;  $k_R^{\text{OPAL}} = 763$  см<sup>2</sup>/г;  $k_R^{\text{HOPE}} = 771$  см<sup>2</sup>/г.

Для алюминия при температуре  $T = 100$  эВ и плотности  $\rho = 0,1$  г/см<sup>3</sup> влияние эффекта Штарка мало, так как основные спектральные линии находятся вдали от максимума весовой функции Росселанда. Поэтому расчет проведен для температуры  $T = 250$  эВ, при которой влияние эффекта Штарка на средние коэффициенты поглощения достигает  $\sim 6\%$  (рис. 7, 8 и табл. 5).

Для элементов с  $Z \geq 26$ , для которых влияние эффекта Штарка заметно меньше, проведены менее подробные сравнения. Результаты расчетов коэффициентов поглощения  $k_R$  для плазмы железа ( $Z = 26$ ), олова ( $Z = 50$ ) и золота ( $Z = 79$ ) при температуре  $T = 100$  эВ и плотности  $\rho = 0,1$  г/см<sup>3</sup>

Таблица 3

Средние по Росселанду коэффициенты поглощения для водорода ( $T = 1$  эВ;  $\rho = 10^{-6}$  г/см<sup>3</sup>)

| Метод учета эффекта Штарка                  | $k_R, \text{см}^2/\text{г}$ |
|---|-----------------------------|
| Без учета эффекта Штарка                    | 199                         |
| Двухуровневое приближение, уширение Доплера | 268                         |
| Двухуровневое приближение, уширение Лоренца | 1 047                       |
| Полуаналитическое приближение               | 352                         |
| Численное интегрирование                    | 444                         |

Таблица 4

Средние по Росселанду коэффициенты поглощения для углерода ( $T = 100$  эВ,  $\rho = 0,1$  г/см<sup>3</sup>)

| Метод учета эффекта Штарка                  | $k_R, \text{см}^2/\text{г}$ |
|---|-----------------------------|
| Без учета эффекта Штарка                    | 440                         |
| Двухуровневое приближение, уширение Доплера | 637                         |
| Двухуровневое приближение, уширение Лоренца | 952                         |
| Полуаналитическое приближение               | 613                         |
| Численное интегрирование                    | 692                         |

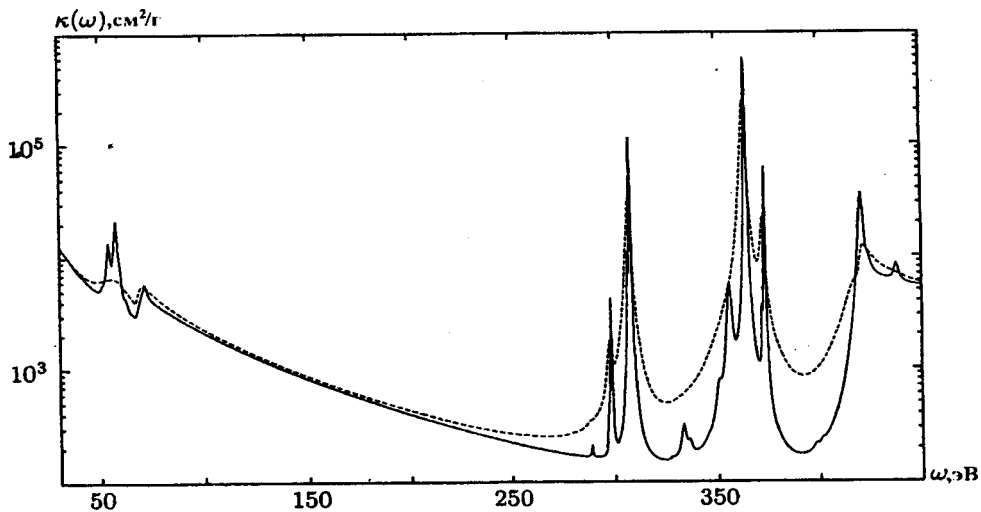


Рис. 5. Спектральные коэффициенты поглощения для углерода ( $T = 100$  эВ;  $\rho = 0,1$  г/см<sup>3</sup>), полученные с учетом эффекта Штарка с помощью численной диагонализации (—) и посредством двухуровневого приближения путем введения дополнительной лоренцевской ширины (- - -)

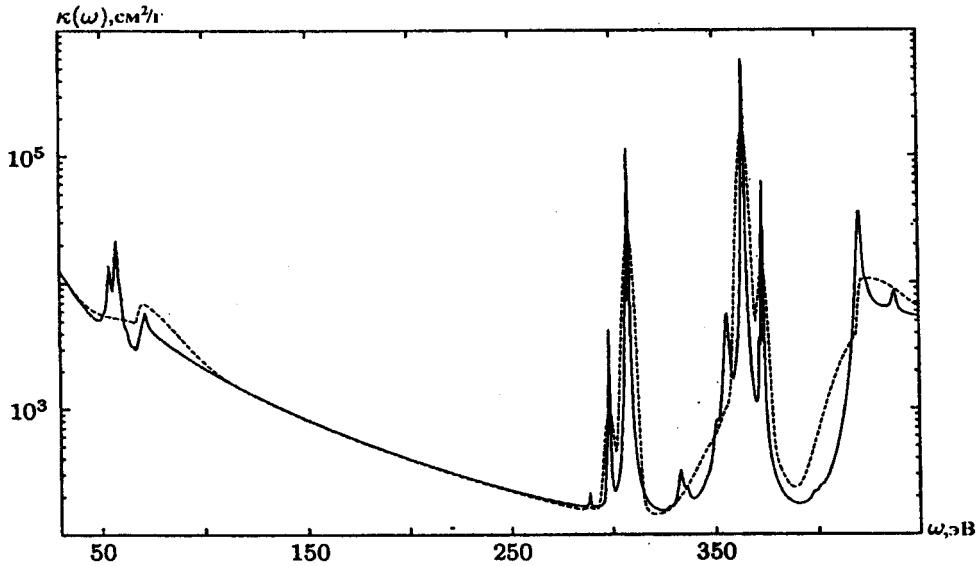


Рис. 6. Спектральные коэффициенты поглощения для углерода ( $T = 100 \text{ эВ}$ ;  $\rho = 0,1 \text{ г/см}^3$ ), полученные с учетом эффекта Штарка с помощью численной диагонализации (—) и посредством двухуровневого приближения путем введения дополнительной доплеровской ширины (- - -)

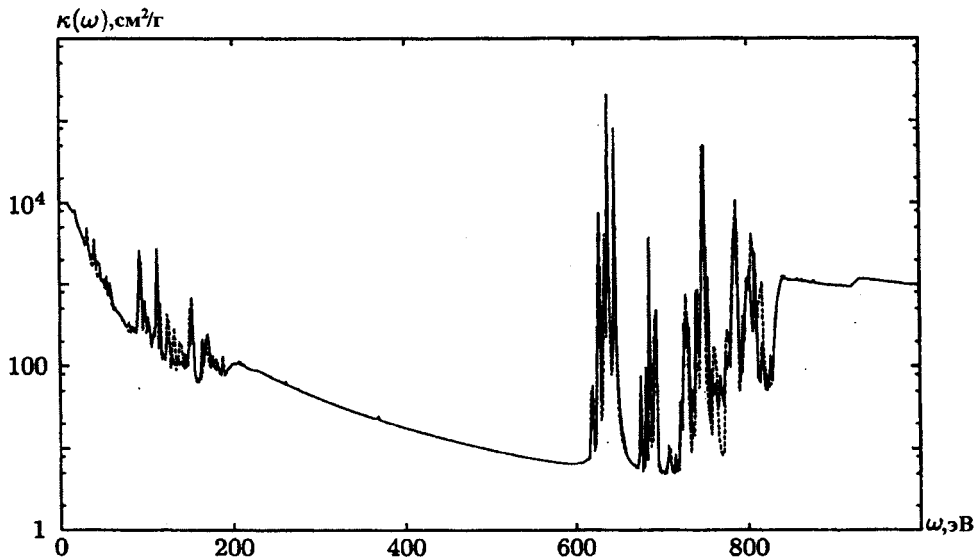


Рис. 7. Спектральные коэффициенты поглощения для алюминия ( $T = 250 \text{ эВ}$ ;  $\rho = 0,1 \text{ г/см}^3$ ), полученные при расчетах с учетом эффекта Штарка с помощью численной диагонализации (—) и полуаналитической диагонализации (- - -)

приведены в табл. 6. Анализ этой таблицы с учетом результатов предыдущих расчетов показывает, что наиболее аккуратный учет эффекта Штарка с помощью численной диагонализации дает значения, как правило, лежащие между значениями, полученными по двум вариантам двухуровневого приближения, причем введение дополнительного доплеровского уширения преуменьшает влияние эффекта Штарка, а введение дополнительного лоренцевского уширения — преувеличивает.

Из табл. 5, 6 видно, что относительные отклонения средних коэффициентов поглощения для алюминия, железа, олова и золота, вычисленных в вышеупомянутых приближениях, от значений коэффициентов, полученных без учета эффекта Штарка, не превышают 5%.

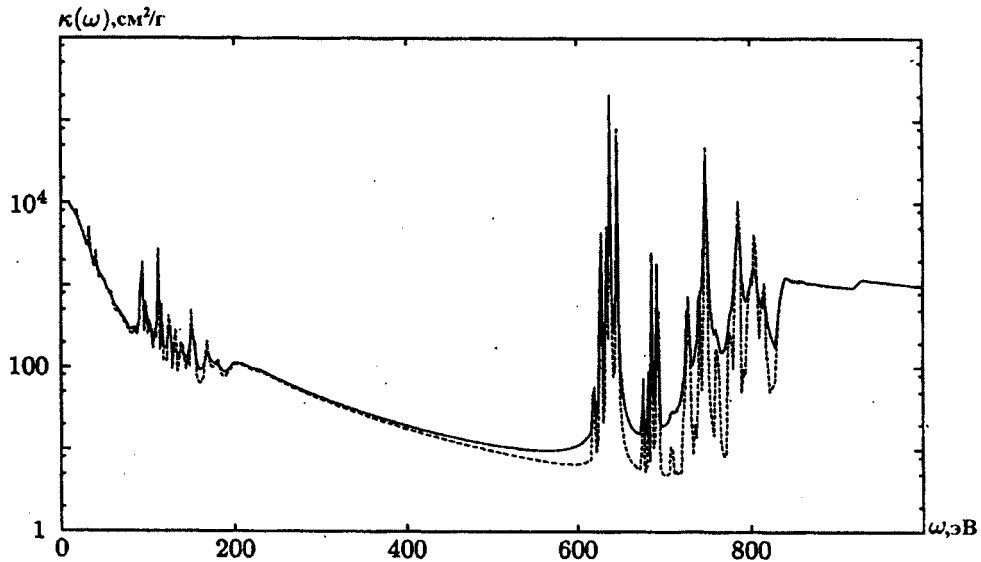


Рис. 8. Спектральные коэффициенты поглощения для алюминия ( $T = 250 \text{ эВ}$ ;  $\rho = 0,1 \text{ г/см}^3$ ), полученные при расчетах с учетом эффекта Штарка с помощью двухуровневого приближения с использованием дополнительного лоренцевского уширения (—) и посредством полуаналитической диагонализации (- - -)

Таблица 5

Средние по Росселанду коэффициенты поглощения для алюминия ( $T = 250 \text{ эВ}$ ;  $\rho = 0,1 \text{ г/см}^3$ )

| Метод учета эффекта Штарка                  | $k_R, \text{ см}^2/\text{г}$ |
|---|------------------------------|
| Без учета эффекта Штарка                    | 17,2                         |
| Двухуровневое приближение, уширение Доплера | 17,8                         |
| Двухуровневое приближение, уширение Лоренца | 24,6                         |
| Полуаналитическое приближение               | 18,1                         |
| Численное интегрирование                    | 18,3                         |

Таблица 6

Коэффициенты поглощения для железа, олова и золота ( $T = 100 \text{ эВ}$ ;  $\rho = 0,1 \text{ г/см}^3$ )

| Метод учета эффекта Штарка                  | $k_R, \text{ см}^2/\text{г}$ |       |        |
|---|------------------------------|-------|--------|
|   | железо                       | олово | золото |
| Без учета эффекта Штарка                    | 1262                         | 1221  | 1550   |
| Двухуровневое приближение, уширение Доплера | 1304                         | 1256  | 1626   |
| Двухуровневое приближение, уширение Лоренца | 1333                         | 1287  | 1665   |
| Полуаналитическое приближение               | 1313                         | —     | —      |

Итак, как видно из результатов сравнения, влияние эффекта Штарка для легких элементов может быть весьма существенным (для водорода получено двукратное отличие значений росселандова пробега). Для элементов со средними и большими  $Z$  учет эффекта Штарка, как правило, дает поправку  $\sim 1-5\%$  для средних величин, причем трудоемкость расчетов настолько велика, что применение численной диагонализации вряд ли является целесообразным в массовых расчетах. Использование полуаналитической методики позволяет в несколько раз сократить время расчета без ощутимой потери точности, хотя трудоемкость расчетов все равно остается высокой.

### Список литературы

1. Собельман И. И. Введение в теорию атомных спектров. М.: Физматгиз, 1963.
2. Бете Г., Солпитер Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. М.: Физматгиз, 1960.
3. Rozsnyai B. F. Spectral lines in hot dense matter // J. Quant. Spectr. Radiat. Transfer. 1977. Vol. 17. P. 77-88.

4. Никифоров А. Ф., Новиков В. Г., Уваров В. Б. Квантово-статистические модели высокотемпературной плазмы и методы расчета росселандовых пробегов и уравнений состояния. М.: Наука, 2000.
5. Воинов Б. А., Рослов В. И. Эффект Штарка для гелиеподобного иона // Вопросы атомной науки и техники. Теоретическая и прикладная физика. 1987. Вып. 1. С. 22–34.
6. Rosznyi B., Einwohner T. Theoretical analysis of spectral lines of the one and two electron ions in hot plasma // Spectral Line Shapes II. Berlin – New York: Walter de Gruyter, 1983. P. 315–327.
7. Никифоров А. Ф., Новиков В. Г., Фимин Н. Н. Влияние эффекта Штарка на спектральные характеристики высокотемпературной плазмы: Препринт № 21. М.: ИПМ им. М. В. Келдыша РАН, 2005.
8. Griem H. R. Spectral line broadening by plasmas. Academic Press, 1974.
9. Rickert A. Review of the Third International Opacity WorkShop and Code Comparison Study // J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer. 1995. Vol. 54, No 1–2. P. 325–332.

Статья поступила в редакцию 19.09.06.

---