

В.П. Демкин, Е.В. Корюкина, О.Г. Ревинская

Асимметрия контура спектральной линии атома во внешнем электрическом поле

Томский государственный университет

Поступила в редакцию 7.10.2001 г.

Проведено теоретическое исследование влияния столкновительных механизмов возбуждения на контур спектральной линии атома во внешнем электрическом поле. В представлении матрицы плотности изучено формирование контуров линий переходов $4\ ^1S_0 - 2\ ^1P_1$, $4\ ^1P_1 - 2\ ^1S_0$, $4\ ^1D_2 - 2\ ^1P_1$, $4\ ^3S_1 - 2\ ^3P_{0,1,2}$, $4\ ^3P_{0,1,2} - 2\ ^3S_1$ атома гелия, возбужденного электронным ударом в присутствии внешнего электрического поля.

Контур линии является чувствительным инструментом в диагностике плазмы. Знание контура позволяет изучить роль различных процессов, протекающих в плазме, определить функции распределения возмущающих частиц, особенно с ярко выраженными анизотропными свойствами. Диагностика по контуру спектральной линии незаменима при изучении спектров с перекрывающимися контурами.

Столкновительные процессы являются одними из основных механизмов формирования контура линии. Кроме столкновительных механизмов на характеристики излучения плазмы большое влияние оказывает внешнее электрическое поле, которое приводит к изменению поляризационных и угловых характеристик излучения, давая вклад, сравнимый с эффектами анизотропных столкновений.

В данной статье теоретически исследовано совокупное влияние столкновительных механизмов возбуждения на контур спектральной линии во внешнем электрическом поле на примере излучения атома, возбужденного электронным ударом.

1. Контур линии излучения атома во внешнем электрическом поле

Контур спектральной линии является результатом Фурье-преобразования функции корреляции $F(t)$, которая описывает временную зависимость состояния атома

$$I(\omega) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} F(t) e^{-i\omega t} dt. \quad (1)$$

В представлении матрицы плотности функция корреляции описывается элементами матрицы плотности $\rho_{M_0 M_0}$ состояния $|M_0\rangle$ атома после испускания фотона, которая связана с матрицей плотности $\rho_{MM'}$ состояний $|M\rangle$ атома до излучения с помощью оператора радиационного перехода D .

В присутствии внешнего электрического поля состояние атома необходимо описывать штарковскими волновыми функциями $|M\rangle$ и $|M_0\rangle$, которые в разложении по волновым функциям $|J'M\rangle$ изолированного атома имеют вид

$$|M\rangle = \sum_{J'} C_{J'}(M) |J'M\rangle. \quad (2)$$

Пусть в результате испускания фотона атом перешел в состояние $|M_0\rangle$, которое не возмущается полем: $|M_0\rangle = |J_0 M_0\rangle$.

Введем тензор поляризации $\Phi_q^{(k)}$ излучения через разложение по сферическим компонентам вектора поляризации e_λ :

$$\Phi_q^{(k)} = \sum_{q_1 q_2} (-1)^q \sqrt{2k+1} \begin{pmatrix} 1 & 1 & k \\ q_1 - q_2 - q \end{pmatrix} e_{q_1}^{(1)} e_{q_2}^{(1)}. \quad (3)$$

Тогда для перехода $J \rightarrow J_0$ контур спектральной линии в дипольном приближении можно записать как суперпозицию Фурье-образов компонент матрицы плотности $\rho_{MM'}$:

$$I(\omega) = \frac{a_0^2 e^2}{2c^3} \sum_M \sum_{M_0} \sum_{J'} \sum_{J''} \sum_{q_1 q_2} (-1)^{q_1} \sqrt{2k+1} \begin{pmatrix} 1 & 1 & k \\ q_1 - q_2 - q \end{pmatrix} \times \\ \times \Phi_q^{(k)} \langle J_0 M_0 | D_{q_1}^{(1)} | J'M\rangle \langle J_0 M_0 | D_{q_2}^{(1)} | J''M\rangle^* \times \\ \times C_{J'}(M) C_{J''}^*(M) \omega_{J''M}^{3/2} \omega_{J'M}^{3/2} \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} \rho_{MM}(t) e^{-i\omega t} dt. \quad (4)$$

Фурье-образ M -компоненты матрицы плотности будем называть M -компонентой контура линии $I_M(\omega)$.

Зависимость матрицы плотности $\rho_{MM}(t)$ от времени определяется кинетическими процессами, в которых участвовал атом до излучения.

2. Кинетические уравнения для элементов матрицы плотности во внешнем электрическом поле

Кинетическое уравнение для элементов матрицы плотности $\rho_{MM}(t)$ составлено с учетом возбуждения атома электронным ударом и спонтанного излучения:

$$\dot{\rho}_{MM} = -(\Gamma_M - i\omega_M)\rho_{MM} + \sum_{M_0} G_{MM}^{M_0M_0} \rho_{M_0M_0}, \quad (5)$$

где Γ_M – обратное время жизни M -го уровня атома; $G_{MM}^{M_0M_0}$ – матрица возбуждения M -го состояния атома электронным ударом.

В случае квазистационарного возбуждения M -компонента контура может представлять собой совокупность лорентцевского и дисперсионного контуров:

$$I_M(\omega) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \int_0^{\infty} \rho_{MM}(t) e^{-i\omega t} dt = \frac{1}{\pi \Gamma_M} \left(\frac{\operatorname{Re} \sum_{M_0} G_{MM}^{M_0M_0} \rho_{M_0M_0}}{\Gamma_M^2 + \omega_M^2} \right) \frac{\Gamma_M^2}{\Gamma_M^2 + (\omega - \omega_M)^2} + \frac{1}{\pi \Gamma_M} \left(\frac{\operatorname{Im} \sum_{M_0} G_{MM}^{M_0M_0} \rho_{M_0M_0}}{\Gamma_M^2 + \omega_M^2} \right) \frac{\Gamma_M (\omega_M - \omega)}{\Gamma_M^2 + (\omega - \omega_M)^2}. \quad (6)$$

Наличие дисперсионной составляющей M -компоненты контура линии определяется величиной мнимой части матрицы возбуждения $G_{MM}^{M_0M_0}$.

Сравнивая полученный результат со случаем спонтанного возбуждения, можно видеть, что возбуждение формирует заселенности M -состояний атома.

3. Матрица возбуждения атома электронным ударом во внешнем электрическом поле

Матрица возбуждения $G_{M'M''}^{M_0M_0''}$ описывает изменение состояния системы «атом + налетающий электрон», усредненное по функции распределения электронов $f_e(\mathbf{k}_0)$ по импульсу налетающих электронов \mathbf{k}_0 . Переходя к базису атомных волновых функций, матрицу возбуждения можно записать в виде

$$G_{M'M''}^{M_0M_0''} = N_e \frac{\pi a_0^2 e^2}{\hbar} \sum_{J'J''} C_{J'}^*(M') C_{J''}(M'') \times \int f_e(\mathbf{k}_0) d\mathbf{k}_0 G_{J'J''}^{J_0M_0' J_0M_0''}(\mathbf{k}_0). \quad (7)$$

Представим функцию распределения электронов $f_e(\mathbf{k}_0)$ по импульсу налетающих электронов \mathbf{k}_0 в виде совокупности медленных (максвелловских) и быстрых (пучковых) электронов:

$$f_e(\mathbf{k}_0) = W \left[(1 - \gamma) \exp \left(-\frac{(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_d)^2}{\bar{\mathbf{k}}^2} \right) + \gamma \delta(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_b) \right], \quad (8)$$

причем медленные электроны характеризуются скоростью теплового движения \mathbf{k} и дрейфовой скоростью \mathbf{k}_d ; пучковые электроны характеризуются скоростью \mathbf{k}_b и относительным вкладом γ ; W – нормировочный коэффициент.

Разложим функцию распределения медленных электронов по мультипольным моментам $f_0^{(k)}(k_0)$:

$$f_e(\mathbf{k}_0) = W \left[(1 - \gamma) \sum_k f_0^{(k)}(k_0) Y_0^{(k)}(\Omega_{k_0}) + \gamma \delta(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_b) \right]. \quad (9)$$

Мультипольные моменты $f_0^{(k)}(k_0)$ разложения функции распределения медленных электронов определяются из обратного преобразования:

$$f_0^{(k)}(k_0) = \int \exp \left(-\frac{(\mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_d)^2}{\bar{\mathbf{k}}^2} \right) Y_0^{(k)*}(\Omega_{k_0}) d\Omega_{k_0}. \quad (10)$$

При построении матрицы возбуждения $G_{M'M''}^{M_0M_0''}$ для атома гелия учитывалось как прямое, так и обменное взаимодействие электрона с атомом.

Для прямого возбуждения в борновском приближении в столкновительной системе координат матрицу возбуждения $G_{J'M'}^{J_0M_0' J_0M_0''}(\mathbf{k}_0)$ можно записать в виде

$$G_{J'M'}^{J_0M_0' J_0M_0''}(\mathbf{k}_0) = \frac{8\pi^2}{k_0^2} \int_{k_0-k}^{k_0+k} \frac{dq}{q^3} \sum_{xq'} (2x+1) \times \langle J'M' | C_q^{(x)} j_x(qr) | J_0' M_0' \rangle \times \langle J''M'' | C_q^{(x)} j_x(qr) | J_0'' M_0'' \rangle^*. \quad (11)$$

Для обменного взаимодействия в приближении Окура получим

$$G_{J'M'}^{J_0M_0' J_0M_0''}(\mathbf{k}_0) = \frac{8\pi^2}{k_0^6} \int_{k_0-k}^{k_0+k} q dq \sum_{\kappa q'} (2\kappa+1) \times \langle J'M' | C_q^{(\kappa)} j_{\kappa}(qr) | J_0' M_0' \rangle \times \langle J''M'' | C_q^{(\kappa)} j_{\kappa}(qr) | J_0'' M_0'' \rangle^*. \quad (12)$$

При таком подходе угловые и радиальные интегралы легко разделяются, что значительно упрощает дальнейший анализ.

Теоретически показано, что в борновском приближении матрица возбуждения $G_{M'M''}^{M_0M_0''}$ имеет существенно вещественный вид. Следовательно, M -компонента контура линии не содержит дисперсионной составляющей. Поэтому асимметрия контура линии может объясняться соотношением заселенностей и частот различных M -компонент.

Численные расчеты возбуждения проводились как для синглетных 4^1S_0 , 4^1P_1 , 4^1D_2 , 5^1D_2 , так и

для триплетных 4^3S_1 , $4^3P_{1,2}$ состояний атома гелия. Вычисления показали, что с увеличением напряженности внешнего электрического поля изменяется относительная заселенность магнитных подуровней возбужденного состояния атома. Поэтому, как видно из формулы (6), внешнее электрическое поле приводит к изменению амплитуд M -компонент контура линии.

4. Результаты расчетов

Расчеты контуров линий неполяризованного излучения проводились для переходов $4^1S_0 - 2^1P_1$, $4^1P_1 - 2^1S_0$, $4^1D_2 - 2^1P_1$, $4^3S_1 - 2^3P_{0,1,2}$, $4^3P_{0,1,2} - 2^3S_1$ атома гелия в диапазоне напряженностей поля от 0 до 100 кВ/см при давлении газа 1–10 торр и температуре газа 330 К.

Наиболее характерные зависимости влияния возбуждения атома электронным ударом на форму спектральной линии в присутствии внешнего электрического поля приведены на рис. 1 и 2. Графики отражают зависимость относительной интенсивности излучения I от длины волны перехода.

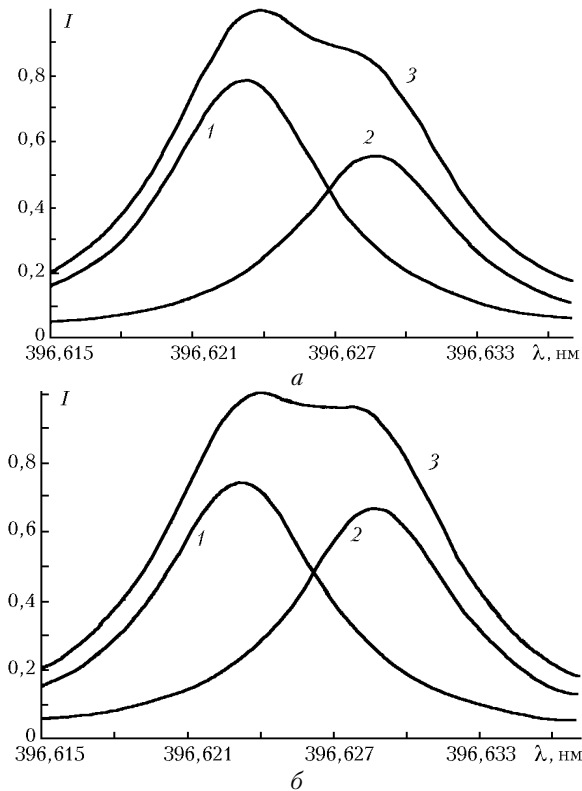


Рис. 1. Контур линии неполяризованного излучения переходов $4^1P_1 - 2^1S_0$ (396,64 нм) при изотропном заселении магнитных подуровней (а) и при заселении магнитных подуровней электронным ударом (б) для напряженности внешнего электрического поля 15 кВ/см: 1 – контур линии для $M = 0$; 2 – контур линии для $|M| = 1$; 3 – совокупный контур

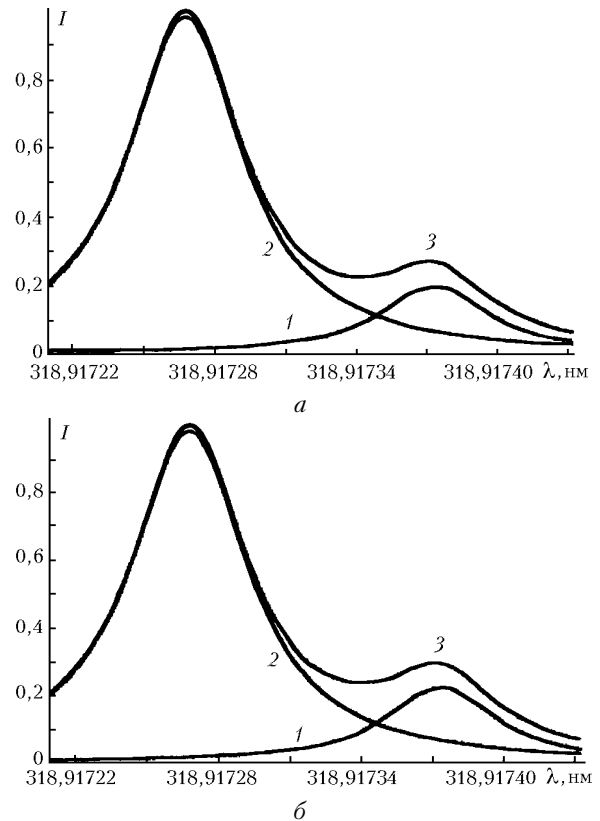


Рис. 2. Контур линии неполяризованного излучения переходов $4^3P_1 - 2^3S_1$ (318,91 нм) при изотропном заселении магнитных подуровней (а) и при заселении магнитных подуровней электронным ударом (б) для напряженности внешнего электрического поля 30 кВ/см: 1 – контур линии для $M = 0$; 2 – контур линии для $|M| = 1$; 3 – совокупный контур

Расчеты показали, что внешнее электрическое поле вносит существенный вклад в формирование контура линии излучения атома гелия, возбуждаемого электронным ударом. Электрическое поле приводит к расщеплению магнитных подуровней атома и, соответственно, к сдвигу M -компонент контура линии. Для некоторых переходов расстояние между M -компонентами может достигать 1 нм.

В отсутствие внешнего электрического поля возбуждение медленными (максвелловскими) электронами приводит к изотропному заселению магнитных подуровней атома. С ростом внешнего поля возрастает дрейфовая скорость медленных электронов и заселение становится анизотропным. Пучковая компонента усиливает анизотропию. Перераспределение заселенностей магнитных подуровней возбужденного состояния атома в электрическом поле приводит к преимущественному заселению одной из M -компонент, что согласно формуле (6) отражается на амплитуде соответствующей M -компоненты контура линии.

V.P. Demkin, E.V. Koryukina, O.G. Revinskaya. Asymmetry of atom spectral line shape in external electric field.

In this work the theoretical investigation of influence of the collisional excitation mechanisms on spectral line shape in external electric field has been done. Formation of line profiles was studied in the density matrix representation for $4^1S_0 - 2^1P_1$, $4^1P_1 - 2^1S_0$, $4^1D_2 - 2^1P_1$, $4^3S_1 - 2^3P_{0,1,2}$, $4^3P_{0,1,2} - 2^3S_1$ transitions of He atom excited by electron impact over an external electric field.