

УДК 533.9, 539.9, 539.17-539-19

Разработка кинетических моделей движущейся плазмы.

Коэффициенты Эйнштейна для иона ксенона.

Кули–заде М.Е.*, Решетникова О.Ф., Скороход Е.П.*****

Московский авиационный институт (национальный исследовательский университет), МАИ, Волоколамское шоссе, 4, Москва, А-80, ГСП-3, 125993, Россия

**e-mail: kuli_marina@mail.ru*

***e-mail: resholga@yandex.ru*

****e-mail: e.p.skorohod@mail.ru*

Аннотация

Изучение потоков движущейся плазмы, как экспериментального, так и теоретического, а также фундаментальные вопросы плазмомеханики в настоящий момент относятся к быстро развивающимся областям науки, находящим применение при решении задач двигателестроения, ракетно-космической отрасли. В частности моделирование физико-химических процессов необходимо для задач многоуровневой кинетики, спектроскопии низкотемпературной плазмы, оптической диагностики плазменных потоков. Коэффициенты Эйнштейна спонтанных радиационных переходов являются основными слагаемыми многочисленных кинетических уравнений, используются для построения векторов состояний исследуемой плазмы при обработке спектров.

Приведены значения сил осцилляторов и вероятностей ~ 1000 радиационных переходов иона ксенона. Даны рекомендации по использованию приведённых

табличных данных ХеII в соответствие со схемой учитываемых уровней и конфигураций.

Ключевые слова: плазма ксенона, моделирование радиационных процессов в кинетике, силы осцилляторов иона ХеII, коэффициенты Эйнштейна спонтанных радиационных переходов иона ХеII, вероятности фото–переходов иона ХеII, оптическая диагностика.

Введение

Настоящая работа является продолжением рассмотрения вопросов плазмомеханики [1– 4]. Разработка кинетических моделей [5–7, 22–25] по-прежнему актуальна, поскольку способствует развитию современной спектроскопии плазмы, становлению новых экспериментальных методов пассивной и активной оптической диагностики (например, метод лазерно–индуцированной флуоресценции) и др.

Изучение свойств низкотемпературной плазмы, в частности, вектора состояния [1– 4] движущейся ксеноновой плазмы, как экспериментального, так и теоретического, невозможно без знания вероятностей фото–переходов A_{ki} (коэффициентов Эйнштейна спонтанных радиационных переходов A_{ki}), когда вероятности спонтанного излучения (испускания), поглощения и вынужденного излучения характеризуются соответственно коэффициентами Эйнштейна A_{ki} , B_{ki} ,

$$B_{ik} \quad \text{как} \quad g_i B_{ik} = g_i B_{ki} = g_i A_{ki} \frac{c^3}{8\pi h \nu^3} .$$

Для расчёта коэффициентов Эйнштейна A_{ki} необходимо определиться со схемой уровней, на базе которой формируются система кинетических уравнений и

релаксационная матрица [8].

Как отмечено в [9]: «Точное предсказание параметров спектральных атомных линий является одной из актуальных проблем современной атомной физики. В радиационной газовой динамике принципиально важно предсказание параметров как можно большего числа линий, в том числе достаточно слабых» (имеются в виду данные [10]).

В работах из списка, цитируемого в [1, 2], по изучению ксеноновой плазмы Холловского двигателя мало внимания уделяется вопросу: какие уровни и конфигурации следует учитывать в расчётах. Обычно в зарубежных публикациях рассматриваются усреднённые блоки, “полки”, с использованием экспериментально полученных констант, отдельно пишется кинетика для атома, отдельно для иона (совместно не рассматриваются).

Следует заметить, что усреднение радиационных констант связано с определением Q -фактора матричного элемента [11] (сложением моментов дипольных переходов). Предлагается более детально осуществить составление схемы уровней и выбор оптических констант для составления кинетических уравнений.

1. Схемы уровней ксенона

Общая схема уровней атома XeI и ионов ксенона XeII – XeIV, принадлежащих основным электронным конфигурациям приведена в [3]. Атом ксенона, относящийся к восьмой группе, имеет два предела ионизации: $5s^2 5p^5 \ ^2P_{3/2}$, рис.1 и для смещенной (штрихованной) схемы уровней $5s^2 5p^5 \ ^2P_{1/2}$, – рис.2.

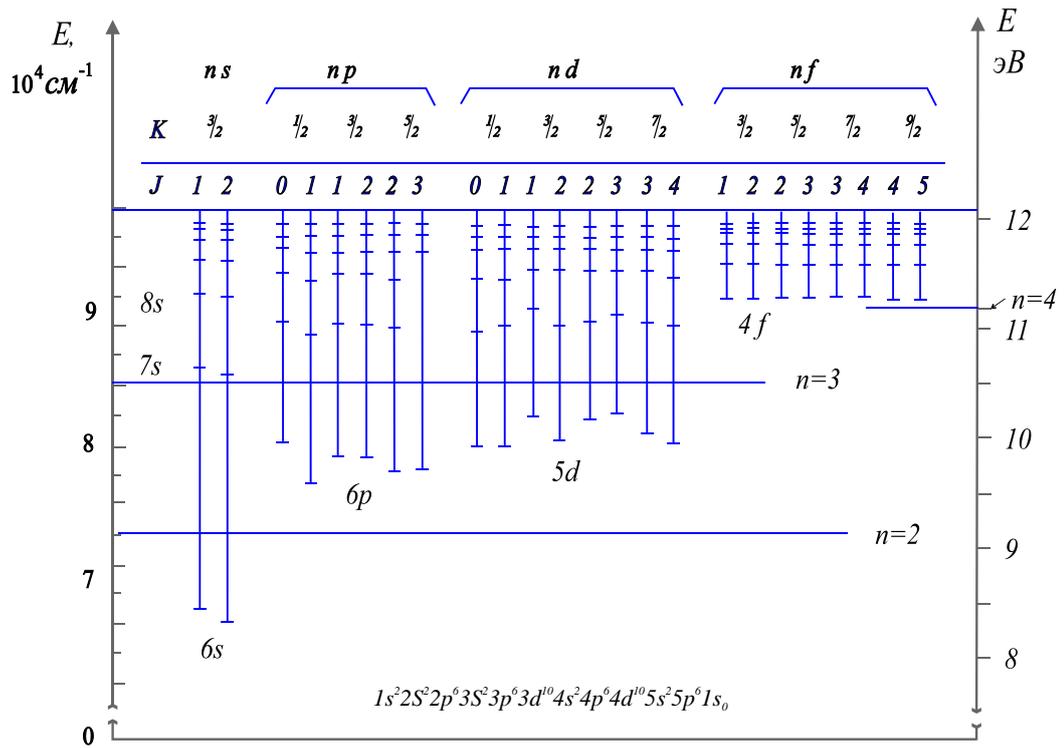


Рис.1. Схема уровней атома ХеI.

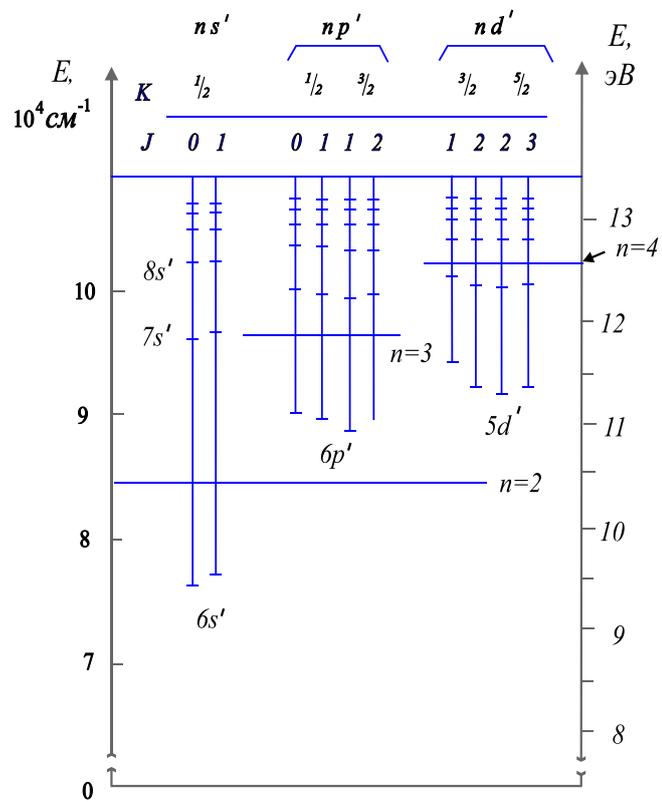


Рис.2. Смещённая схема уровней атома ксенона ХеI.

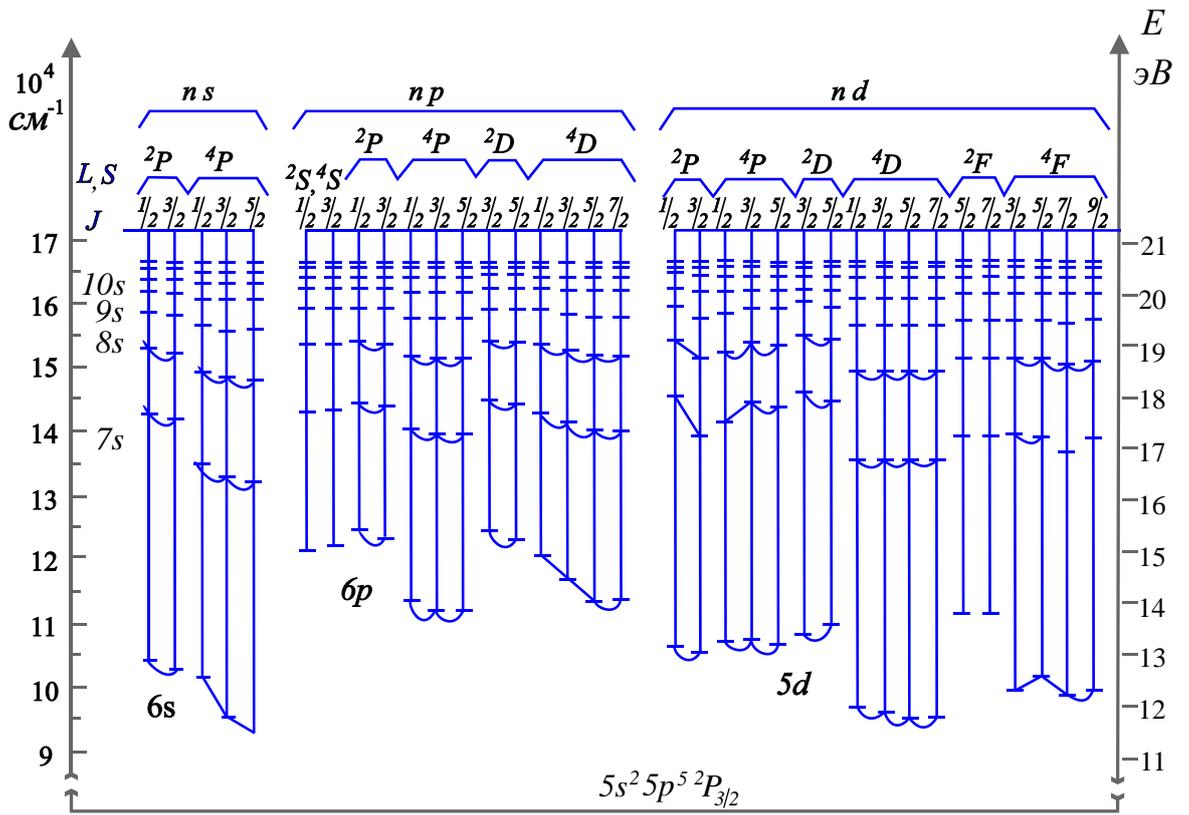


Рис. 3. Схема уровней иона ХеII.

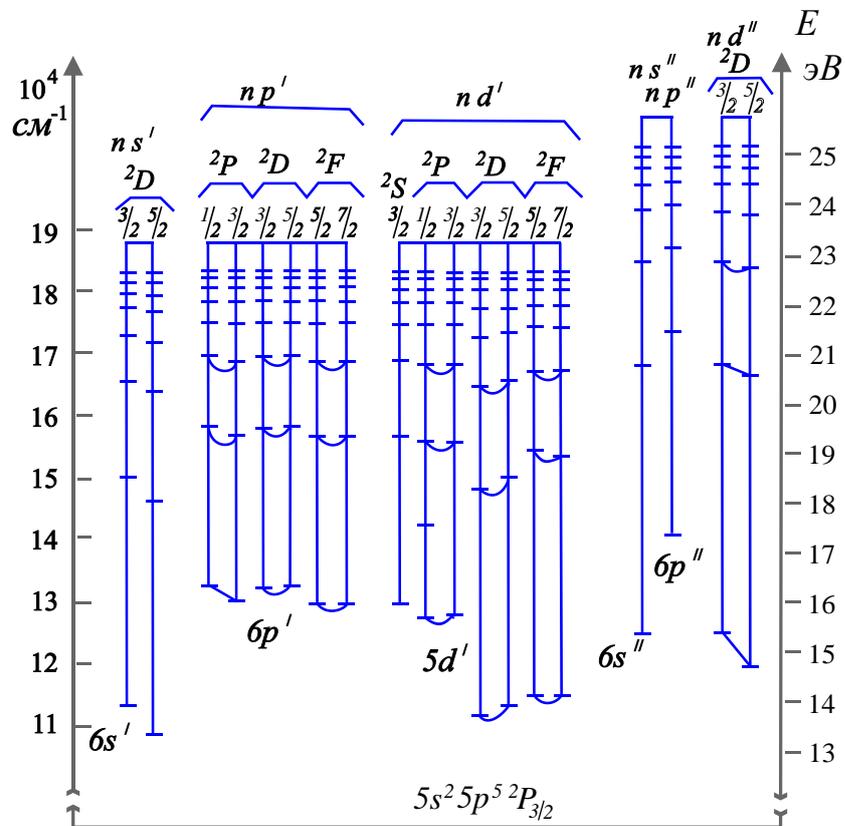


Рис. 4. Смещённые схемы уровней иона ХеII.

Схема уровней иона ксенона приведена на рис.3 и смещённые схемы на рис.4.

В рамках, так называемой, излучательно–столкновительной модели [4] рассматриваются: реакции спонтанных радиационных переходов, возбуждения электронным ударом, процессы ионизации и рекомбинации. Все бинарные взаимодействия в виде констант скоростей в слагаемых кинетических уравнений записываются согласно выбранной схеме уровней.

Рассмотрим пример составления схемы многоуровневой кинетической модели, которая включает уровни и (что принципиально) их группы, как для атома ХеI, так и для иона ХеII.

Схема атома ХеI составляется из: 4 уровней (6, 7 *s* конфигураций); 12 уровней для 6, 7 *p* конфигураций; 16 уровней для 5, 6 *d* конфигураций; 4 уровня для 6, 7 *s'* конфигураций; 8 уровней для 6, 7 *p'* конфигураций; 8 уровней для 5, 6 *d'* конфигураций, а также для конфигураций 8 *s*, 8 *p*, 7 *d*, 8 *s'*, 8 *p'*, 7 *d'* и водородоподобных уровней 5, 6 *n* (всего 60). Смещённые уровни можно учитывать выборочно, что уменьшит общее число до 41.

Для иона ХеII включаются: – 10 уровней для 6, 7 *s* конфигураций; 26 уровней для 6, 7 *p* конфигураций; 34 уровня для 5, 6 *d* конфигураций; 4 уровня для 6, 7 *s'* конфигураций; 12 уровней для 6, 7 *p'* конфигураций; 14 уровней для 5, 6 *d'* конфигураций; 2 уровня для 6, 7 *s''* конфигураций; 2 уровня для 6, 7 *p''* конфигураций; 4 уровня для 5, 6 *d''* конфигураций, а также для конфигураций 8 *s*, 8 *p*

, $7d$, $8s'$, $8p'$, $7d'$ и водородоподобных уровней 6 , $7n$ (всего 108). Смещенные уровни с двумя штрихами можно не учитывать, что уменьшит общее число до 100.

Таким образом, размерность релаксационной матрицы – $n = 168 \times 168$ в первом случае и $n = 141 \times 141$ – во втором.

Обратимся к экспериментальным исследованиям [1,2] плазмы Холловского двигателя. Регистрируемое число линий ксенона в спектре для атома составляет 95, а для первого иона – 149, т.е. вектор состояния, представлен 244 значениями. Для этих целей число кинетических уравнений составит 141 (второй вариант) для атома и первого иона и 12 уравнений для второго иона.

Чтобы решать теоретически задачу [1,2] необходимо определиться с многочисленными константами и решать задачу многоуровневой кинетики совместно с функцией распределения электронов по энергиям.

Сокращение числа уровней (рис.1.–рис.4.) с целью упрощения вычислительных алгоритмов уменьшает вкладываемую энергию в плазму, меняет фактор влияния согласно [8], которыми являются рекомбинационные процессы.

2. Силы осцилляторов и вероятности фото–переходов иона ХеII

Одной из характеристик возбуждённых состояний атома являются вероятности радиационных переходов или коэффициенты Эйнштейна для спонтанного излучения.

$$A_{ki} = \frac{g_i}{g_k} \left(\frac{1}{137} \right)^3 \frac{e^2}{2a_0} \left(\frac{\Delta E}{Ry} \right)^2 f_{ik} = 0.829 \cdot 10^{10} \frac{g_i}{g_k} \left(\frac{\Delta E}{Ry} \right)^2 f_{ik}, \quad (1)$$

где $\Delta E = \hbar\omega$ разность энергий верхнего и нижнего уровней, $Ry = 13.6 \text{ эВ}$, $g_i = 2J_0 + 1$ – статистический вес нижнего уровня, $g_k = 2J_1 + 1$ – статистический вес верхнего

уровня. Сила осциллятора в поглощении f_{ik} перехода $i-k$ в кулоновском приближении [11] равна

$$f_{ik} = \frac{Q}{2\ell_i + 1} F(\ell_i, \ell_k). \quad (2)$$

Здесь ℓ_i, ℓ_k – орбитальные моменты оптического электрона в начальном и конечном состояниях, величина $F(\ell_i, \ell_k)$ указана в [11]. $F(\ell_i, \ell_k)$ находится как функция эффективных главных квантовых чисел уровней n_i^* и n_k^* , которые указаны в [табл.1-табл.4](#) электронного приложения, которое можно посмотреть на сайте: http://tahir.sytes.net/!books/articles/Приложение_к_статье.pdf [26] (аналогичную процедуру можно повторить и для эффективного главного числа n^* всей конфигурации).

В случае иона ХеII угловой фактор Q характеризуется LS – связью. Обозначим начальное состояние индексом «0», а конечное «1». Для перехода $[S_p L_p] l_0 S L_0 J_0 \rightarrow [S_p L_p] l_1 S L_1 J_1$ угловой фактор Q равен

$$Q_{01} = (2L_0 + 1)(2J_1 + 1) \left\{ \begin{matrix} L_0 & J_0 & S \\ J_1 & L_1 & 1 \end{matrix} \right\}^2 (2l_0 + 1)(2L_1 + 1) \left\{ \begin{matrix} l_0 & L_0 & L_p \\ L_1 & l_1 & 1 \end{matrix} \right\}^2 \quad (3)$$

где l_0, l_1 – орбитальные моменты оптического электрона в начальном и конечном состояниях, S – полный спин (рассматриваются переходы без изменения спина), L_0, L_1 – полные орбитальные моменты, S_p, L_p – полный спин и орбитальный момент родительского терма. Q – фактор отражает угловую зависимость матричного элемента [11].

В приложении, [табл.1.–табл.4](#), представлены результаты расчёта сил

осцилляторов f_{ik} в поглощении согласно (1), (2), а также расчёты вероятностей фотопереходов. В [2] проводится сравнение с данными других авторов [14–21].

Таблицы построены в зависимости от спектроскопических символов рассматриваемых переходов (не по длинам волн). Это удобно при формировании всех дипольных переходов с выбранного нижнего уровня.

[В табл.1. - табл. 4](#) (см. приложение) приведены значения эффективных главных квантовых чисел n^* (n_i^* – нижнее, n_k^* – верхнее), в соответствии с которыми определена энергия перехода $\hbar\omega = E_k - E_i$, эВ. Указанная длина волны λ , выраженная в ангстремах (10^{-10} м), соответствует энергии $i \rightarrow k$ -го перехода (в поглощении) и может в последних знаках отличаться от данных [12]. Цифры, которые записаны курсивом, взяты из [12]. Цифры длин волн, обозначенные обычным шрифтом, – наш расчёт.

Обсуждение результатов

В [табл.1 – табл.4](#) (см. приложение) приведены длины волн для всех разрешенных дипольных переходов рис.1 – рис.4. В эксперименте спектральные линии с длинами волн более 1000 нм практически не регистрируются. Приведённые расчётные значения сил осцилляторов во всех случаях нужны для определения средних, а также оценочных значений вероятностей фото–переходов.

Согласно [11] при переходе с **уровня на конфигурацию** Q -фактор определяется суммой, равной 1. В этом случае суммируем значения сил осцилляторов с конкретного i -го нижнего уровня на все возможные в таблицах k -состояния и затем просто делим на их число.

Так, например, рассмотрим в табл.1 (см. приложение) номера переходов: 5; 13; 21; 29 с уровня $7s^2 P_{1/2}$ на всю конфигурацию $8p$. Сила осциллятора равна 0.071.

Заключение

Важным этапом развития плазмомеханики является организация банка оптических констант. Представленные многочисленные радиационные константы иона ксенона необходимы при разработке кинетических моделей.

Детальное рассмотрение радиационных констант предваряет обсуждение схемы уровней атома и иона ксенона. Предложенная схема уровней иона ксенона и указанные в таблицах значения эффективного главного квантового числа позволяют рассчитывать в кулоновском приближении переходы, отсутствующие в справочном издании [12].

Сформулированное понятие «вектор состояния» [1, 2] способствует с единых позиций изучать распределения заселённостей атома и иона ксенона с использованием радиационных констант.

Библиографический список

1. Криворучко Д.Д., Скрылев А.В., Скороход Е.П. Определение концентраций возбужденных состояний и вероятностей радиационных переходов XeI плазмы Холловских двигателей // Труды МАИ. 2017. № 92. URL: <http://trudymai.ru/published.php?ID=76859>
2. Криворучко Д.Д., Кули-заде М.Е., Скороход Е.П., Скрылев А.В. Вероятности фото-переходов иона XeII и распределения возбуждённых состояний в

- низкотемпературной плазме холловского двигателя // Труды МАИ. 2017. № 94.
URL: <http://trudymai.ru/published.php?ID=80962>
3. Кули-заде М.Е., Скороход Е.П. Разработка кинетических моделей движущейся плазмы. Константы радиационных d-p переходов иона ксенона // Труды МАИ. 2017. № 95. URL: <http://trudymai.ru/published.php?ID=84423>
 4. Гаврилова А.Ю., Киселёв А.Г., Скороход Е.П. Диаграммы метаравновесных состояний тяжёлых инертных газов // Теплофизика высоких температур. 2014. Т. 52. № 2. С. 174 – 185.
 5. Лосев С.А., Сергиевская А.Л. Каталог моделей физико-химических процессов: наполнение интернет – реализации // Материалы VII Международной конференции по неравновесным процессам в соплах и струях, Алушта, 2008. С. 286 – 288.
 6. Черный Г.Г., Лосев С.А. Физико-химические процессы в газовой динамике.– М.: Изд-во МГУ, 1995, Т.1. - 343 с.
 7. Черный Г.Г., Лосев С.А. Физико-химические процессы в газовой динамике. - М.: Научно-издательский центр механики, 2002. – Т. 2. - 368 с
 8. Скороход Е.П. Спектроскопические методы исследования физико-химических и тепловых процессов в плазменных устройствах. Дисс. ...докт. техн. наук. – М., МАИ, 2002. – 41 с.
 9. Суржиков С.Т. Сравнительный анализ роли спектральных линий атомов и ионов в радиационном нагреве поверхностей четырех типов спускаемых космических аппаратов // Теплофизика высоких температур. 2016. Т. 54. № 2. С. 249 – 266.

10. Wiese W.L., Smith M.W., Glennon B.M. Atomic Transition Probabilities, New York, Int. Print. Opt, 1966, 153 p.
11. Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. – М.: Наука, 1977. – 319 с.
12. Стриганов А.Р., Свентицкий Н.С. Таблицы спектральных линий нейтральных и ионизированных атомов. – М.: Атомиздат, 1966. – 899 с.
13. Гаврилова А.Ю., Скороход Е.П. Сечения и константы скоростей плазмохимических реакций инертных газов. – М.: Изд-во МАИ, 2011. –192 с.
14. Tharwat M. El-Sherbini. Transition probabilities and radiative lifetimes for singly ionized xenon // Journal of Physics B: Atomic and Molecular Physics, 1976, vol. 9, no. 10, pp. 1665.
15. Wiese W.L., Martin G.A. Wavelengths and Transition Probabilities for Atoms and Atomic Ions, Part II: Transition Probabilities, United States National Bureau of Standards NSRDS-NBS 68, 1980, 148 p.
16. Michael W. Winter, Christoph Eichhorn, Monika Auweter-Kurtz and Thomas Pfrommer, Status on Plasma Diagnostic Measurements on a RIT-10 Ion Thruster IEPC-2007-173 // 30th International Electric Propulsion Conference, Stuttgart, Germany, September 17-20, 2007. URL: http://erps.spacegrant.org/uploads/images/images/iepc_articledownload_1988-2007/2007index/IEPC-2007-173.pdf
17. Gigos M., Mar S., Perez C., de la Rosa I. Experimental Stark widths and shifts and transition probabilities of several XeII lines // Physical Review, 1994, vol. E 49, no. 2, pp. 1575.

18. Manzella D.H. Stationary Plasma Thruster Plume Emissions. Presented as IEPC 93-097 // Proceeding of the 23rd International Electric Propulsion Conference. September 1993.
19. Miller M.H., Roig R.A. Transition Probabilities of Xe I and Xe II // Physical Review A, 1973, vol. 8, pp. 480 - 486.
20. Konjevic N., Lesage A., Fuhr J.R. and Wiese W.L. Experimental Stark Widths and Shifts for Spectral Lines of Neutral and Ionized Atoms (A Critical Review of Selected Data for the Period 1989 Through 2000) // Journal of Physical and Chemical Reference, 2002, vol. 31, no. 3, URL: <https://www.nist.gov/sites/default/files/documents/srd/jpcrd622.pdf>
21. Di Rocco H.O., Iriarte D.I., Pomarico J.A. Lifetimes and transition probabilities of XeII: Experimental measurements and theoretical calculations // European Physical Journal D, 2000, vol.10 (1), pp. 19 - 26.
22. Шахатов В.А. Уровневые полуэмпирические столкновительно-излучательные модели в оптической диагностике неравновесных газовых разрядов: Автореферат дисс. докт. ф-м. наук. – М.: МГУ, 2016. – 50 с.
23. Шибкова Л.В. Физические процессы в движущейся плазме многокомпонентных инертных и химически активных смесей: Автореферат дисс. докт. ф-м. наук. – М.: Объединенный институт высоких температур РАН, 2007. – 43 с.
24. Дьячков Л.Г. Развитие квазиклассической теории радиационных свойств низкотемпературной атомарной плазмы: Автореферат дисс. ... докт. ф-м. наук. – М.: Объединенный институт высоких температур РАН, 2001. – 36 с.

25. Гидаспов В.Ю. Численное моделирование стационарных волн горения и детонации в смеси частиц бора с воздухом // Труды МАИ. 2016. № 91. URL: <http://trudymai.ru/published.php?ID=75562>

26. Приложение к статье «Разработка кинетических моделей движущейся плазмы. Коэффициенты Эйнштейна для иона ксенона». URL: [http://tahir.sytes.net/!books/articles/Приложение к статье.pdf](http://tahir.sytes.net/!books/articles/Приложение%20к%20статье.pdf)