

**О «холодном» и «горячем» способах
определения потенциалов ионизации
ИОНОВ**

Г.В.Шпатаковская
ИММ РАН



Содержание

- # Введение
- # «Холодный» метод ($T = 0$)
 - Свободный ион
 - Нейтральная атомная ячейка
 - Сжатый ион
- # «Горячий» метод ($T > 0$)
 - Идеальная плазма
- # Сравнение результатов
- # Заключение

«Холодный» метод

Свободный ион z в модели ТФ (I)

$$n_e(r) = \frac{p_\mu^3(r)}{3\pi^2}, \quad \frac{p_\mu^2(r)}{2} = \mu - U(r) = \frac{Z}{R_z} \frac{\varphi_z(x)}{x},$$

$$\sqrt{x} \varphi_z'' = A \varphi_z^{3/2},$$

$$\varphi_z(0) = 1, \quad \varphi_z(x \geq 1) = 0,$$

$$\varphi_z'(1) = -z/Z, \quad x = r/R_z, \quad A = 8\sqrt{2ZR_z^3}/3\pi$$

Плотность электронов на границе иона равна нулю

«Холодный» метод

Свободный ион z в модели ТФ (II)

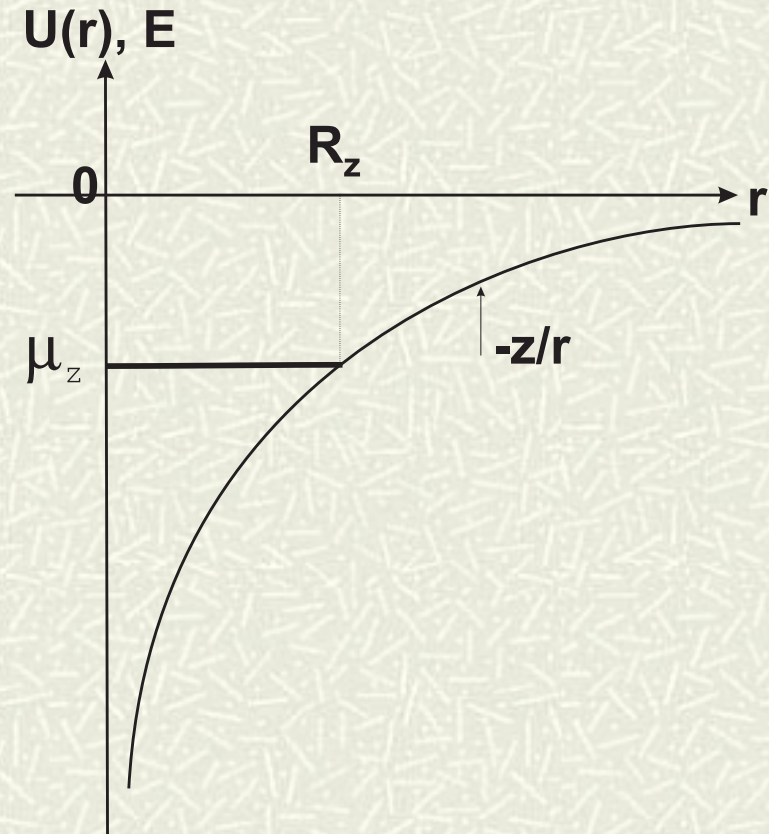
$\mu_z = -z / R_z$ – энергия Ферми,

R_z – радиус иона z ,

$E < \mu$ – уровни энергии
основного состояния,

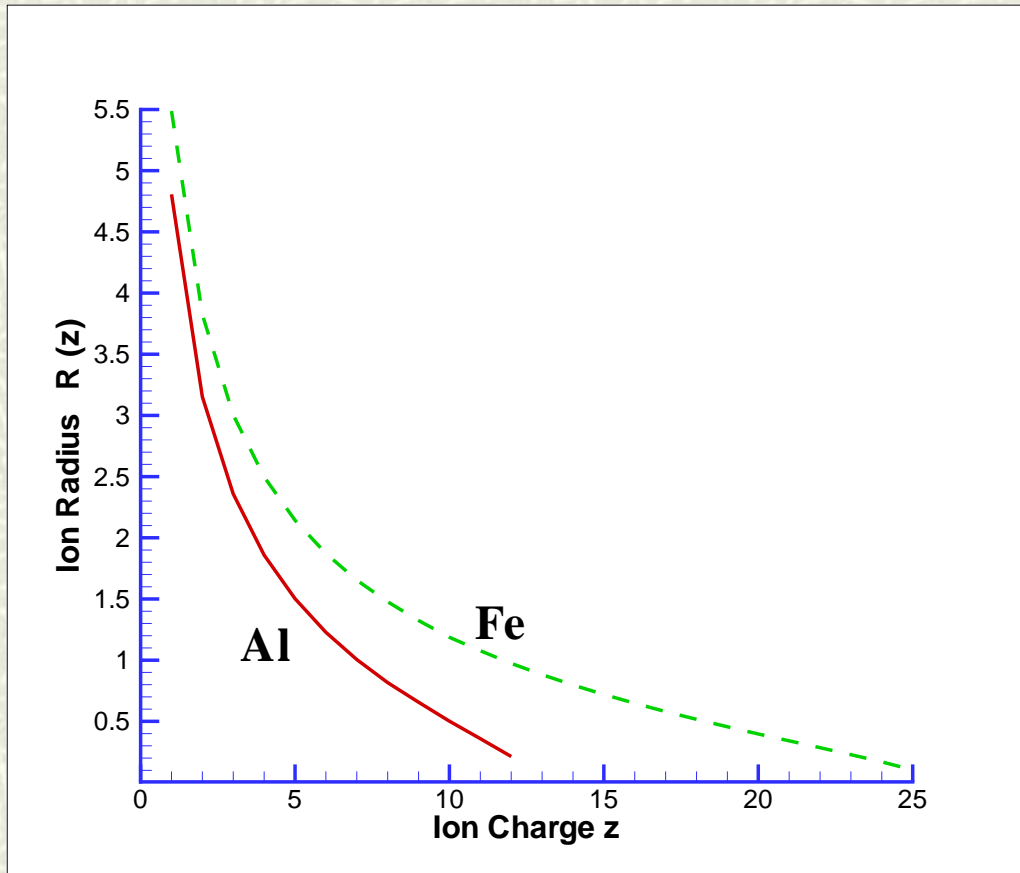
$\mu_z < E \leq 0$ – уровни
возбуждения

$E > 0$ – непрерывный спектр



«Холодный» метод

Радиусы свободных ионов Al и Fe в модели ТФ



«Холодный» метод

Как влияет наличие ионизованных электронов на эффективный заряд ионов?

Ионизация давлением.

Уравнение Томаса-Ферми для нейтральной атомной ячейки
радиуса $R = R_z$

$$n_e(r) = \frac{p_\mu^3(r)}{3\pi^2}, \quad \frac{p_\mu^2(r)}{2} = \mu - U(r) = \frac{Z}{R} \frac{\varphi(x)}{x},$$

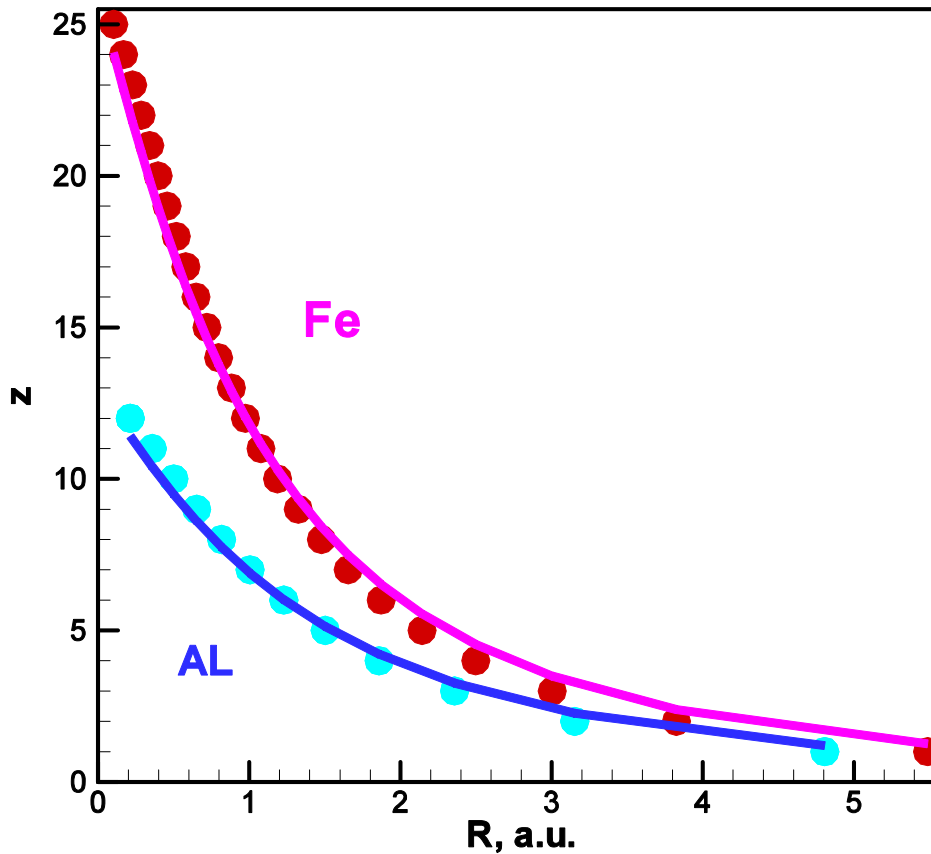
$$\sqrt{x}\varphi'' = A\varphi^{3/2},$$

$$\varphi(0) = 1, \quad \varphi(1) = \varphi'(1),$$

$$x = r/R, \quad A = 8\sqrt{2ZR^3}/3\pi, \quad z_{\text{eff}} = n_e(R) \cdot V_R$$

«Холодный» метод

Зависимость от радиуса заряда свободного иона (\bullet) и числа ионизованных электронов в нейтральной атомной ячейке (____) для алюминия и железа



«Холодный» метод.

Энергия и потенциал ионизации иона с зарядом z элемента Z в модели ТФ с учетом квантово-обменной поправки (I)

$$E_z^{TF} = -\frac{8\sqrt{2R_z}}{5\pi} Z^{5/2} \int_0^1 \frac{\varphi_z^{5/2}(x)}{\sqrt{x}} dx,$$

$$E_z^{TF}(Z) \approx -1.27 \frac{z^{7/3}}{1 - 0.903(z/Z)^{1/4}} eV \quad - \text{Зоммерфельд, 1933}$$

$$\delta E_z^{qu-ex} = -\frac{44R_z}{9\pi^2} \int_0^1 \varphi_z^2(x) dx, \quad - \text{Квантово-обменная поправка}$$

$$I_z = E_z - E_{z+1} \quad - \text{Потенциал ионизации}$$

«Холодный» метод

Энергия и потенциалы ионизации иона z элемента Z в модели ТФ и с учетом квантово-обменной поправки (II)

I.K. Dmitrieva and G.I. Plindov, *Phys. Lett.* **75** (1975) 3;
J. Physique **38** (1977) 7; *J. Physique* **45** (1984) 85

$$I_z = I(N, Z) \simeq -\mu(N - 1/2, Z) = -\mu_{z+1/2}, \quad z = Z - N$$

$$\mu_{TFC} = \mu_{TF} + \mu_{qu-ex}$$

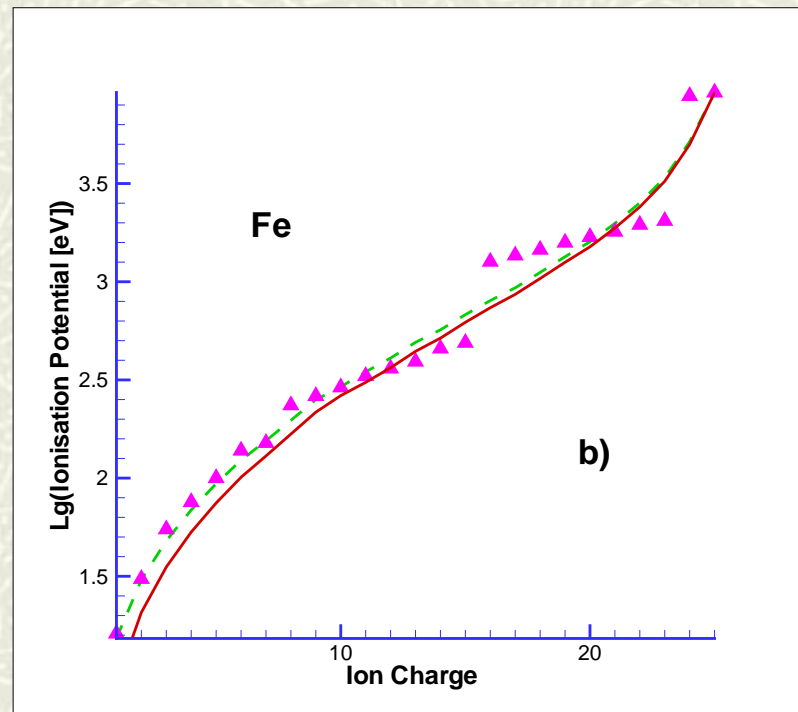
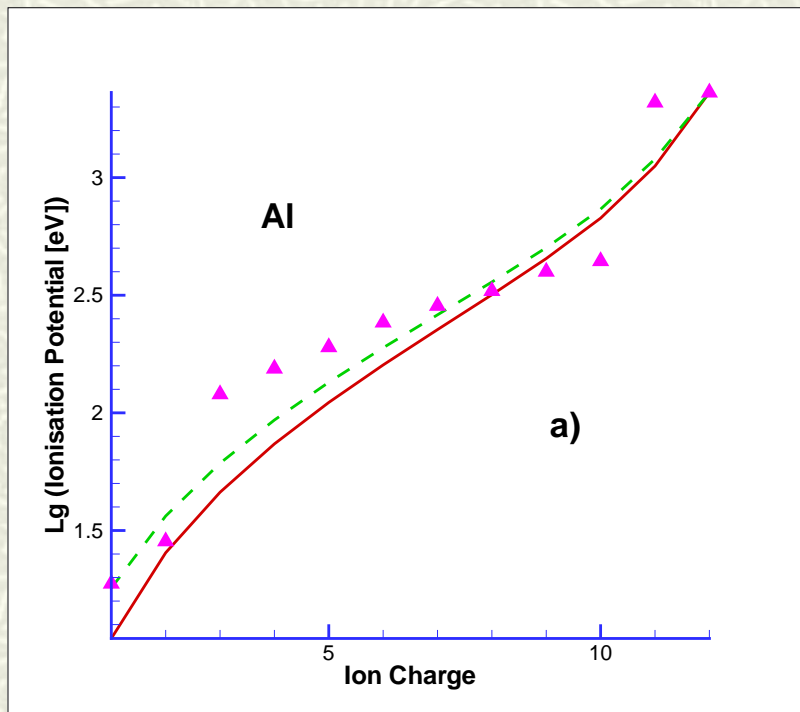
$$\mu_{TF} \left(0.88 \leq \frac{N}{Z} \leq 1 \right) = -0.1103(Z - N)^{4/3} \left[1 - 0.9102 \left(1 - \frac{N}{Z} \right)^{\sigma/3} \right]^{-1}, \quad \sigma = 0.5 \cdot (\sqrt{73} - 7)$$

$$\mu_{TF} \left(\frac{N}{Z} \leq 0.88 \right) = -18^{-1/3} \left(\frac{Z}{N} \right)^{2/3} (Z - N)^{4/3} \left[1 - 0.36105 \frac{N}{Z} - 0.06767 \left(\frac{N}{Z} \right)^2 - \frac{0.035N^3}{Z^2(Z - 0.7388N)} \right]$$

$$\mu_{qu-ex} = -\frac{88}{27\pi^2} \left(\frac{2Z}{3N} \right)^{1/3} (Z - N)^{2/3} \left[1 - 0.2536 \frac{N}{Z} - \frac{0.068N^2}{Z(Z - 0.7355N)} \right]$$

«Холодный» метод

Потенциалы ионизации ионов Al и Fe по моделям ТФ (___) и ТФП (_ _ _) в сравнении с эмпирическими данными



«Холодный» метод

Зависимость от радиуса потенциалов ионизации $I(z, R)$ для ионов железа

R_z - Радиус свободного иона z (сл. 4)

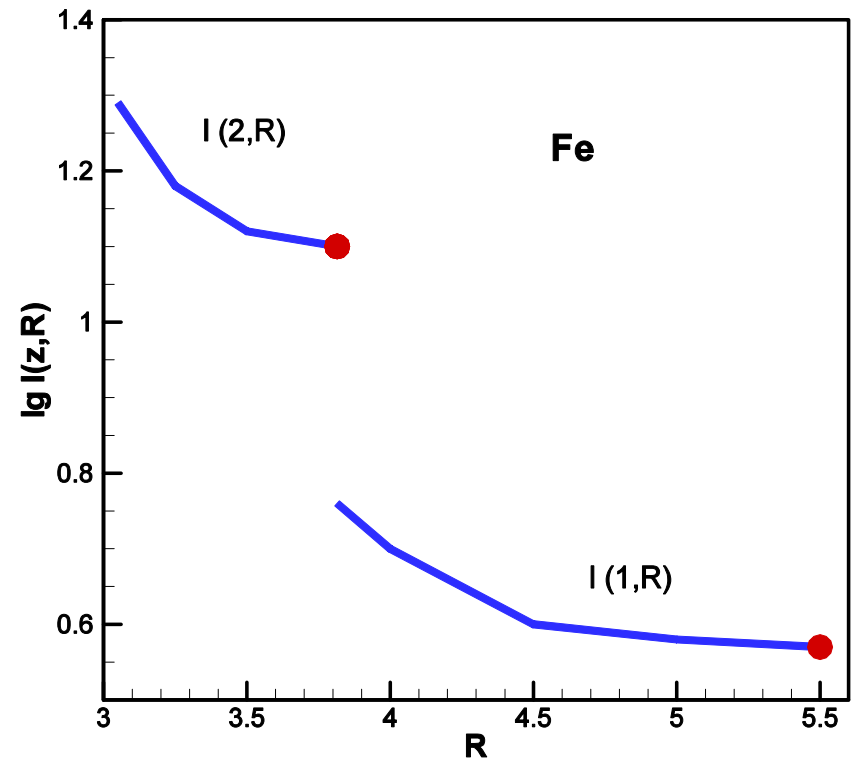
$$I(1, R) = E(1, R) - E(2, R_2), \quad R_2 \leq R \leq R_1,$$

$$I(2, R) = E(2, R) - E(3, R_3), \quad R_3 \leq R \leq R_2$$

$$\varphi'_z(1) - \varphi(1) = -z / Z$$

Плотность электронов на границе сжатого иона **не** равна нулю

Для $z = 1$ изменение $I(1, R) \sim +30\%$ при сжатии до радиуса R_2 ,
для $z = 20$ при сжатии до радиуса R_{21} изменение $\sim +6\%$



«Горячий» метод»

Нейтральная атомная ячейка радиуса R в модели ТФ

Уравнение ТФ для функции $\varphi(r)$

$$\xi = \xi(x) = \frac{\mu - U(\bar{r})}{T} = \frac{Z}{RT} \cdot \frac{\varphi(x)}{x}, \quad x = \frac{r}{R}, \quad \mu = \frac{Z}{R} \varphi(1)$$

$$\frac{d^2 \varphi}{d x^2} = A x I_{1/2}(\xi(x)), \quad A = \frac{4\sqrt{2}}{\pi} \frac{R^3 T^{3/2}}{Z}$$

Граничные условия:

$$\varphi(0) = 1, \quad \varphi_x'(1) = \varphi(1)$$

Число ионизованных электронов

$$Z_{eff} = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} T^{3/2} I_{1/2} \left(\frac{\mu}{T} \right) \cdot V_R$$

«Горячий» метод»

Квантово-обменная поправка, модель ТФП

$$\mu_{TFC} = \mu_{TF} + \delta\mu_{qu-ex}$$

$$\xi = \xi_{TF} + \hbar^2 \xi_{qu-ex}, \quad \xi_{qu-ex} = \frac{1}{3\pi\sqrt{2T}} \left[I'_{1/2}(\xi_{TF}(x)) + \frac{\chi(x)}{x} \right]$$

Для $\chi(x)$ уравнение:

$$\frac{d^2 \chi}{d x^2} = a \left[I'_{1/2}(\xi_{TF}) \chi + x Y'(\xi_{TF}) \right], \quad \chi(0) = 0, \quad \chi'(1) = \chi(1),$$

$$a = \frac{4\sqrt{2T}}{\pi} R^2,$$

$$\delta\mu_{qu-ex} = T \xi_{qu-ex} \quad (1)$$

«Горячий» метод»

Оболочечная поправка. Модель УТФ

$$\mu_{RTF} = \mu_{TFC} + \delta\mu_{sh}$$

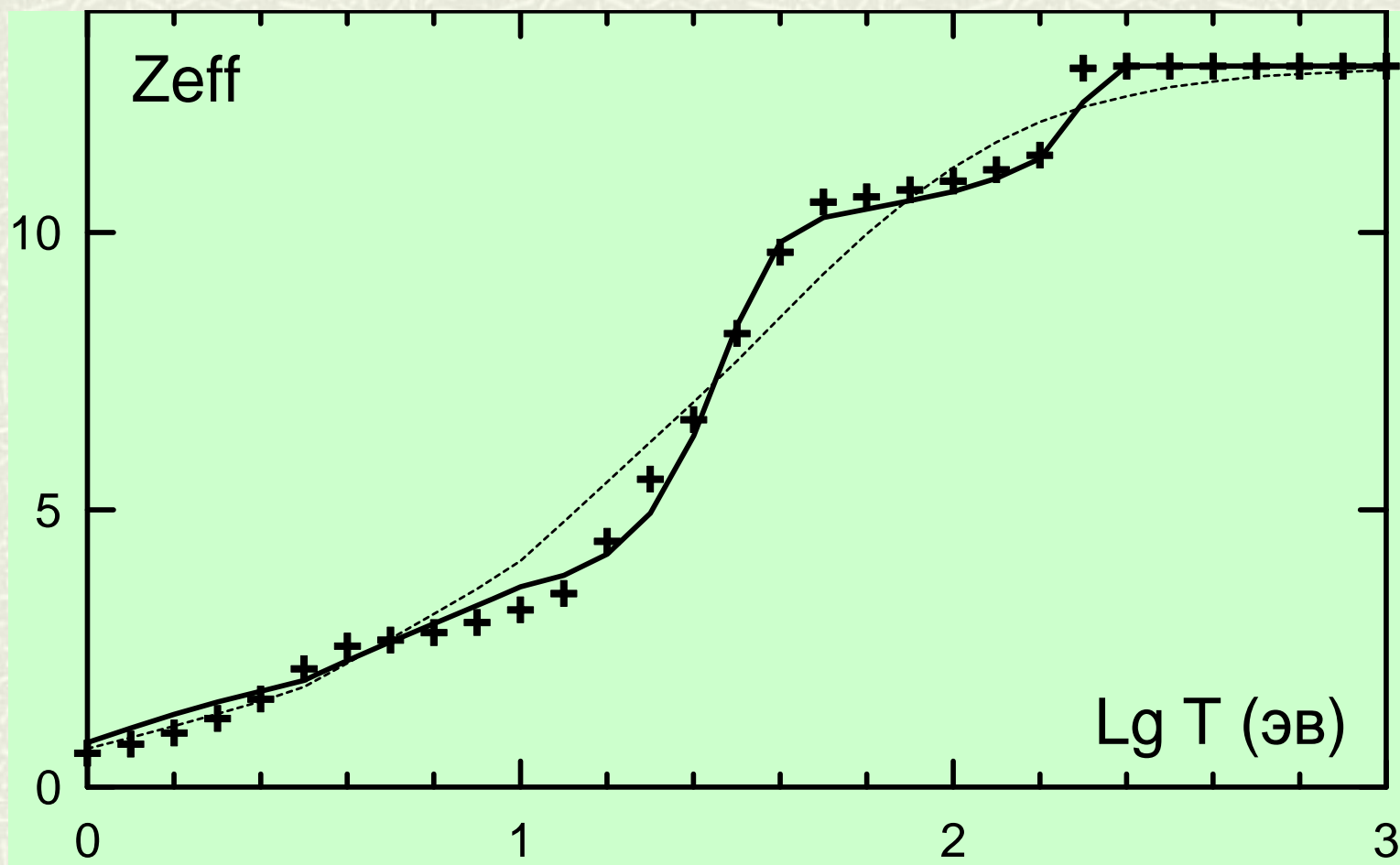
$$\delta\mu_{sh} = -\frac{2}{\pi\delta_\mu} \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k^2} \left(\frac{X_\lambda^{(k)} \cos[2k\pi\lambda_{max}(\mu)]}{\text{sh}[X_\lambda^{(k)}]} - \frac{X_S^{(k)} \cos(2kS_\mu)}{\text{sh}[X_S^{(k)}]} \right) \cdot \int \frac{\partial n_{TF}}{\partial \mu} d\bar{r}$$

$$X_\lambda^{(k)} = 2\pi k \frac{\partial[\pi\lambda_{max}(\mu)]}{\partial \mu} T, \quad X_S^{(k)} = 2\pi k \frac{\partial S_\mu}{\partial \mu} T = 2\pi k \tau(\mu) T$$

$$z_{eff} = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} T^{3/2} I_{1/2} \left(\frac{\mu_{RTF}}{T} \right) \cdot V_R$$

«Горячий» метод»

Число ионизованных электронов в плазме алюминия ($N_i = 10^{18}$ см $^{-3}$) по моделям ТФП (— —), УТФ (—) и Саха-Райзера (+)



«Горячий» метод»

Идеальная плазма в статистической модели и в модели Саха-Райзера

$$\underbrace{z_{eff}^{TF(RTF)}(T) = \frac{T^{3/2}}{\sqrt{2\pi^3}} \exp\left(\frac{\mu_{TF(RTF)}}{T}\right) \cdot V_R, \quad z_{eff}^{S-R}(T) = \frac{T^{3/2}}{\sqrt{2\pi^3}} \exp\left(-\frac{I_z}{T}\right) \cdot V_R}_{I_z = -\mu_{z+1/2}}$$

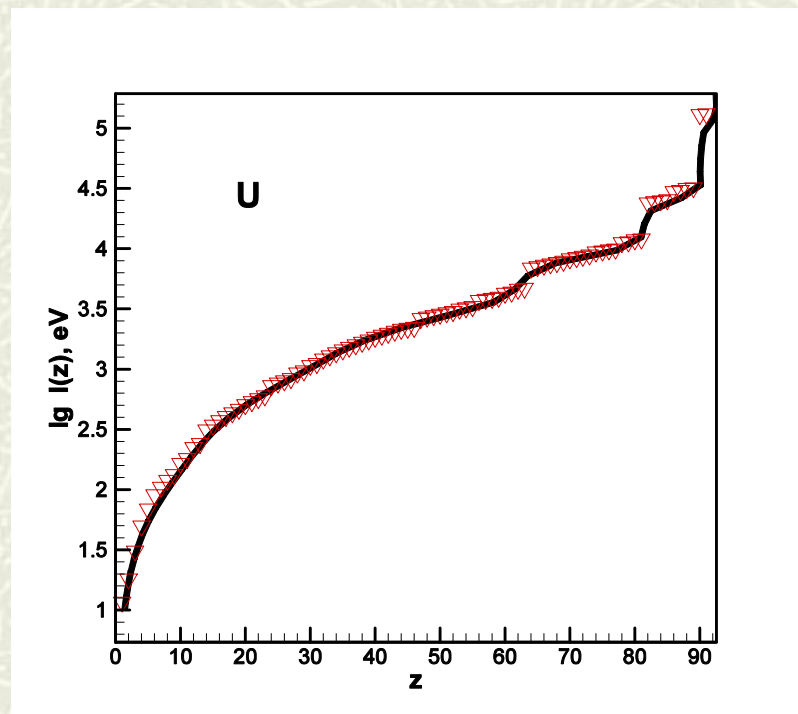
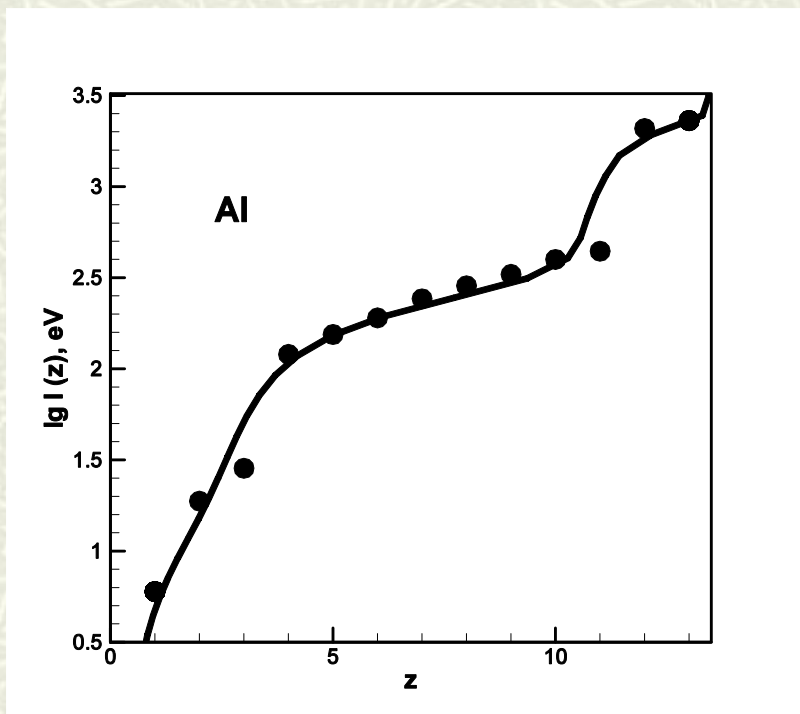
$$\mu_z = \mu_{TF}$$

$$\mu_z = \mu_{TFC} = \mu_{TF} + \delta\mu_{qu-ex}$$

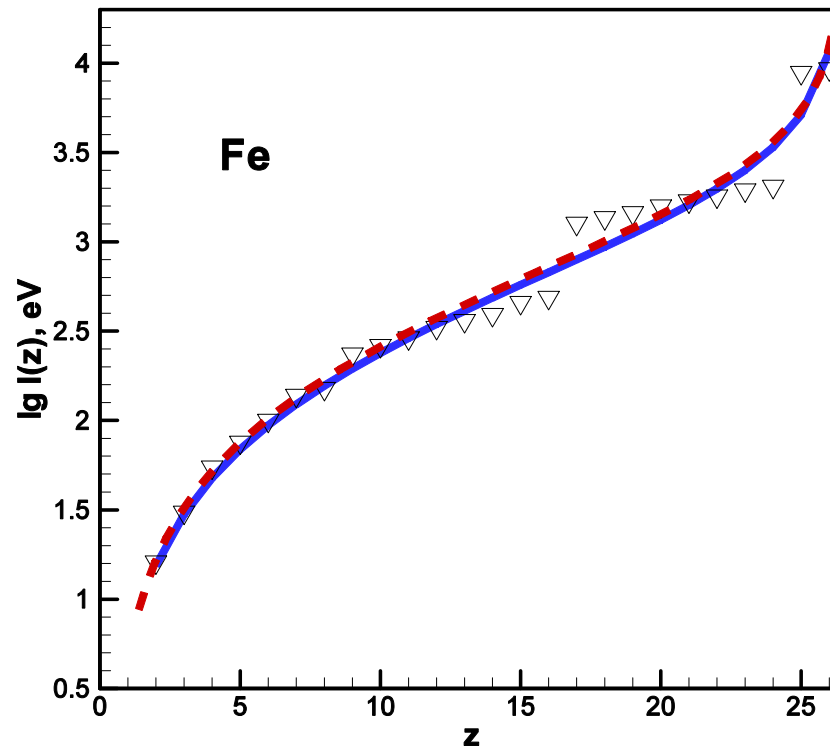
$$\mu_z = \mu_{RTF} = \mu_{TF} + \delta\mu_{qu-ex} + \delta\mu_{sh}$$

«Горячий» метод»

Потенциалы ионизации ионов Al и U по модели УТФ (—) в сравнении с экспериментом (●) и квантово-механическим расчетом (▽) [Carlson et al (1970)]



Сравнение результатов «холодного» (_____) и «горячего» (_____) методов по модели ТФП для потенциалов ионизации железа



Заключение

- На основе модели ТФ сформулирован количественный критерий для определения диапазона плотности плазмы, в котором возможно использование характеристик свободных ионов.
- Радиус свободного иона приблизительно равен радиусу нейтральной ячейки с тем же числом ионизованных электронов, т.е. влияние ионизованных электронов на характеристики иона невелико.
- Потенциалы ионизации ионов увеличиваются при сжатии, причем чем больше заряд иона, тем меньше относительное увеличение.
- «Горячий» расчет по модели УТФ дает оценку потенциалов ионизации свободных ионов с учетом оболочечной структуры их спектров.
- «Холодный» и «горячий» расчеты потенциалов ионизации по моделям ТФ и ТФП фактически совпадают.
- Пока не удастся ввести оболочечные эффекты в «холодную» модель ТФ.

Благодарю за внимание!