

# Plasma Atomic Physics

- Designation of charge states

|                      |         |         |          |          |          |                 |
|----------------------|---------|---------|----------|----------|----------|-----------------|
| Ionization degree    | 0+,     | 1+,     | 2+,      | 3+,      | ....     | Z+              |
| Atom Y               | YI      | YII,    | YIII,    | YIV      |          |                 |
| Carbon C (Z=6)       | CI,     | CII,    | CIII,    | CIV,     | CV,      | CVI, CVII       |
| Isoelectronic series | C-like, | B-like, | Be-like, | Li-like, | He-like, | H-like, nucleus |

- Atomic states

- Ground state
- Excited states (resonance states – 1 electron from outer shell excited to higher shell)
- Autoionization states (bound states with energy higher than ionization potential – electron excited from inner shell or more excited electrons) – spontaneous non-radiative transition to continuum possible

- Units – cgs units

radius normalized on Bohr radius  $a_0$  ( $a_0 = \hbar^2 / m e^2 = 0.529177 \times 10^{-8}$  cm)

energy in units Rydberg  $1 \text{ Ry} = 1 R_\infty = e^2 / 2a_0 = 13.6058 \text{ eV} = 109737.3 \text{ cm}^{-1}$

# Solution of Schrödinger equation

- Time-independent Schrödinger equation

$$\mathbf{H} \Psi^k(\vec{r}) = E^k \Psi^k(\vec{r})$$

$$\Psi^k(\vec{r}) = \sum_b y_b^k \psi_b$$

Wave function  $\psi_b$  is a function of one-electron states  $\varphi_j$

$$\psi_b = f(\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N)$$

Wave function has to be antisymmetric with respect to exchange of any 2 electrons

$$\psi_{b1} = \varphi_1(\vec{r}_1) \varphi_2(\vec{r}_2) = -\psi_{b2} = -\varphi_1(\vec{r}_2) \varphi_2(\vec{r}_1)$$

Wave functions have to be orthonormal

$$\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij} \quad \langle \psi_i | \psi_j \rangle = \delta_{ij} \quad \langle \Psi | \Psi' \rangle = \delta_{\Psi\Psi'}$$

# Atom (ion) with 1 electron

- Schrödinger equation  $H\varphi = E\varphi$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m} \left[ \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} r + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \left( \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] + V(\mathbf{r})$$

$$H = \frac{p^2}{2m} + V(r) = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{L^2}{2m r^2} - \frac{2Za_0}{r} \quad a_0 - \text{Bohr radius}$$

- Solution  $\varphi(\vec{r}) = \varphi_{nlm_l m_s}(\vec{r}) = \frac{1}{r} P_{nl}(r) \cdot Y_{lm_l}(\theta, \varphi) \cdot \sigma_{m_s}(s_z)$ ,

where  $n = 1, 2, \dots$  - principle quantum number,  $l = 0, 1, \dots, n-1$  characterizes orbital angular momentum,  $m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l$  is orientation of angular momentum and  $m_s = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$  is spin angular momentum orientation

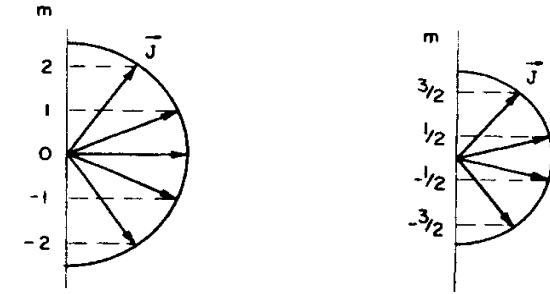
- Operators of angular momentum ( $L^2, L_z, S^2, S_z, J^2, J_z$ )

$J^2 = \mathbf{J} \cdot \mathbf{J} = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$  - eigenvalues  $j(j+1)$  -  $j=0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$

$J_z$  - eigenvalues  $m$  ( $m = -j, -j+1, -j+2, \dots, j-1, j$ )

# Orbital and spin angular momentum

*Semiclassical picture for  $J = 2, 3/2$*



- **Eigenfunctions** of operators  $L^2, L_z$  of orbital angular momentum

$$Y_{lm}(\theta, \phi) = \Theta_{lm}(\theta) \cdot \Phi_m(\phi) = (-1)^{(m+|m|)/2} \left[ \frac{(2l+1)(l-|m|)!}{4\pi(l+|m|)!} \right]^{1/2} P_l^{|m|}(\cos \theta) e^{im\phi}$$

- Spherical harmonics are orthonormal

$$\langle Y_{lm} | Y_{l'm'} \rangle \equiv \int_0^{2\pi} \int_0^\pi Y_{lm}^* Y_{l'm'} \sin \theta \, d\theta \, d\phi = \delta_{ll'} \delta_{mm'}$$

$$|Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 = |\Theta_{lm}(\theta)|^2$$

Sum over  $m$  -spherically symmetric electron density

$$\sum_{m=-l}^l |Y_{lm}(\theta, \phi)|^2 = \frac{2l+1}{4\pi}$$

- **Nomenclature of orbital angular momentum**

s ( $l=0$ ) p (1) d (2) f(3) g(4) h(5) i(6) k(7) l(8) m(9)

- **Electron spin** – electron has internal angular momentum  $j = 1/2$  (z component  $m_s = -1/2, 1/2$ ), eigenfunctions  $\sigma_{m_s}(s_z) \equiv \delta_{m_s s_z}$  and

$$\langle \sigma_{m_s}(s_z) | \sigma_{m'_s}(s_z) \rangle = \delta_{m_s m'_s}$$

$$\langle Y_{lm_l} \sigma_{m_s} | Y_{l'm'_l} \sigma_{m'_s} \rangle = \delta_{ll'} \delta_{m_l m'_l} \delta_{m_s m'_s}$$

# Radial part of the wave function

- Radial equation – bound state  $P_{nl}(0) = P_{nl}(\infty) = 0$

$$\left[ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2Z}{r} \right] P_{nl}(r) = EP_{nl}(r)$$

- Substitution  $\rho = 2Zr/n$ ,  $E = -Z^2/n^2$

$$\left[ \frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{1}{4} + \frac{n}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right] P_{nl} = 0$$

- Analytic solution

$$P_{nl}(r) = - \left[ \frac{Z(n-l-1)!}{n^2[(n+l)!]^3} \right]^{1/2} \rho^{l+1} e^{-\rho/2} L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$

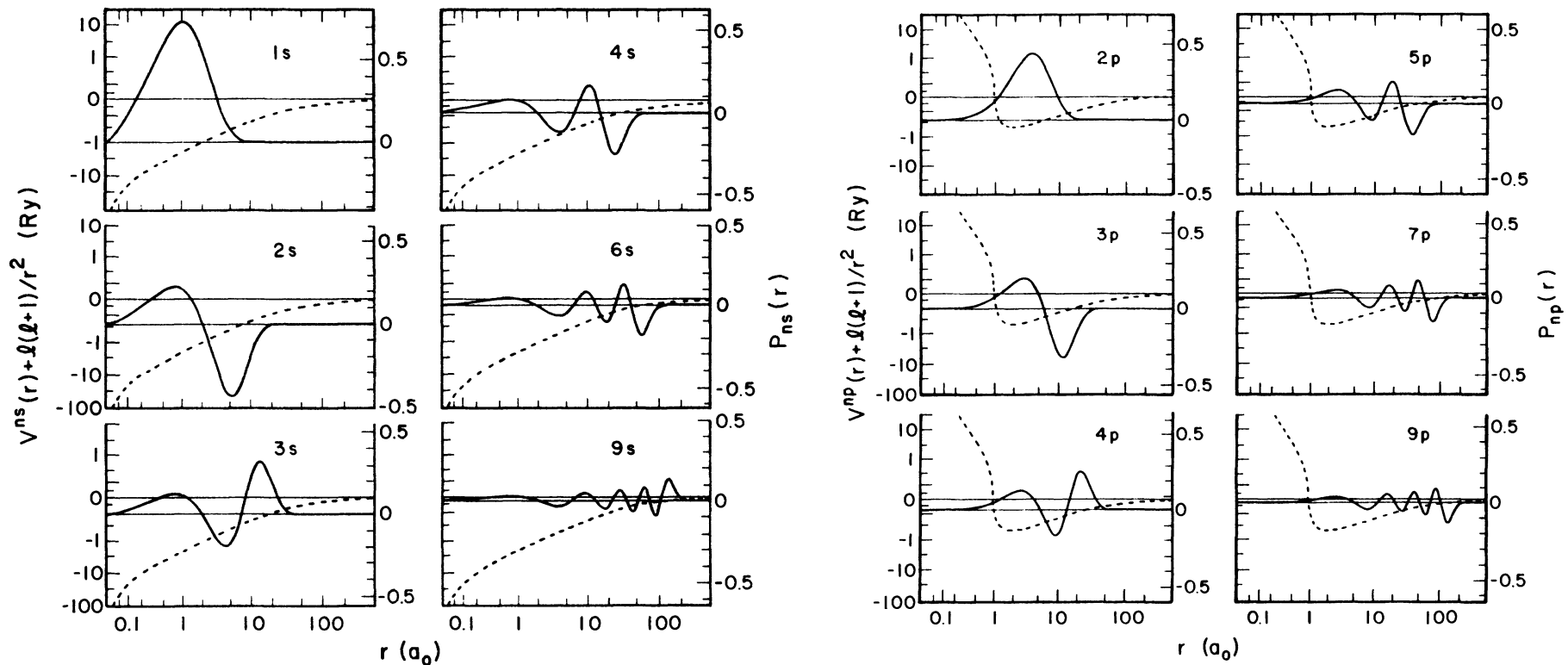
where the associate Laguerre polynomial is

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = - [(n+l)!]^2 \sum_{k=0}^{n-l-1} \frac{(-\rho)^k}{k!(n-l-1-k)!(2l+1+k)!}$$

phase convention used

$$P_{nl}(r) > 0, \quad r \rightarrow 0$$

# Radial part of wave function



Radial wave functions (full line) and effective potential (dotted) for the lowest s and p states

- Number of nodes (zeros) is  $n-l-1$ , number of extremes is  $n-l$
- For atoms with more than 1 electron, potential  $V$  has no simply expressible form and analytic solution cannot be found
- Numerical solution – E is iterated for given number of nodes

# Orbits and relativistic corrections

- Hamiltonian with relativistic corrections

$$H = -\nabla^2 + V - \frac{\alpha^2}{4}(E - V)^2 - \frac{\alpha^2}{4}\left(\frac{dV}{dr}\right)\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\alpha^2}{2}\frac{l}{r}\left(\frac{dV}{dr}\right)(l \cdot s)$$

where fine structure constant  $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{h}{mca_0} = \frac{1}{137.036}$

– 3<sup>rd</sup> term – result of relativistic change in mass of electron (mass-velocity term)

– 4<sup>th</sup> Darwin term – relativistic non-localizability

– 5. spin-orbital term – magnetic interaction of spin and orbital magnetic moments

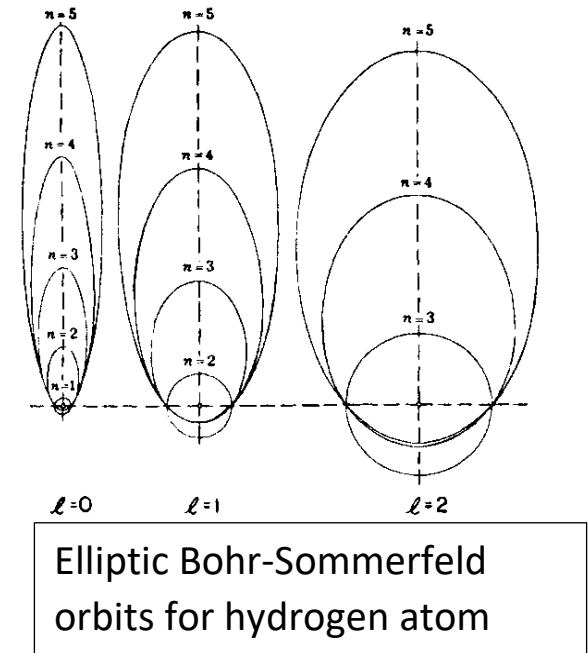
– Mass-velocity and Darwin terms → only shift of level energies

– Spin-orbit coupling leads to splitting of energy levels with  $l \neq 0$

Operator  $l \cdot s = \frac{1}{2}(j^2 - l^2 - s^2)$  – eigenvalues  $X \equiv \frac{1}{2}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]$

and shift  $E_{so} = \alpha^2 Z X \langle r^{-3} \rangle = (1 - \delta_{l0}) \frac{\alpha^2 Z^4}{n^3 l(l+1)(2l+1)} [j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)] R_y$

where  $[\ ] = l$  for  $j = l + \frac{1}{2}$  and  $[\ ] = -(l+1)$  for  $j = l - \frac{1}{2}$



# Complex atoms

- Hamiltonian

$$H = H_{\text{kin}} + H_{\text{elec-nucl}} + H_{\text{elec-elec}} + H_{\text{s-o}} = - \sum_i \nabla_i^2 - \sum_i \frac{2Z}{r_i} + \sum_{i>j} \sum \frac{2}{r_{ij}} + \sum_i \xi_i(r_i)(l_i \cdot s_i)$$

(mass-velocity and Darwin terms omitted – only energy shift after solving)

- Solution is a linear combination of functions  $\Psi_b$

$$\Psi^k(\vec{r}) = \sum_b y_b^k \Psi_b, \quad \langle \Psi_b | \Psi_{b'} \rangle = \delta_{bb'}$$

- System of linear equations is solved (M base functions)

$$\sum_{b'=1}^M H_{bb'} y_{b'}^k = E^k y_b^k, \quad H_{bb'} = \langle \Psi_b | H | \Psi_{b'} \rangle \quad \text{energies } E^k \text{ – eigenvalues}$$

- Base functions composed of single-particle wave functions - antisymmetric

$$\Psi = (N!)^{-1/2} \sum_{\mathbf{p}} (-1)^p \varphi_1(\mathbf{r}_{j_1}) \varphi_2(\mathbf{r}_{j_2}) \varphi_3(\mathbf{r}_{j_3}) \cdots \varphi_N(\mathbf{r}_{j_N})$$

sum over all permutations

- Base functions – eigenfunctions of total  $J^2$  and  $J_z$

$$\mathbf{J} = \sum_{i=1}^N (\mathbf{l}_i + \mathbf{s}_i)$$

- Equivalent electrons - same  $nl$  –  $w$  electrons in subshell  $(nl)^w$

- Closed subshells  $k$  ( $s^2, p^6, d^{10}, f^{14}, \dots$ ) have  $L_k = S_k = J_k = 0$

- Example Ne I  $1s^2 2s^2 2p^5 3s$  usually denoted Ne I  $2p^5 3s$  (closed omitted)



## Detailed structure of energy states

- First – radial wave function and average energy of configuration
- Then energy splitting inside one configuration (angular momenta coupling)
- Coupling of 2 angular momenta  $j_1, m_1$  and  $j_2, m_2$  not commutative, coupled

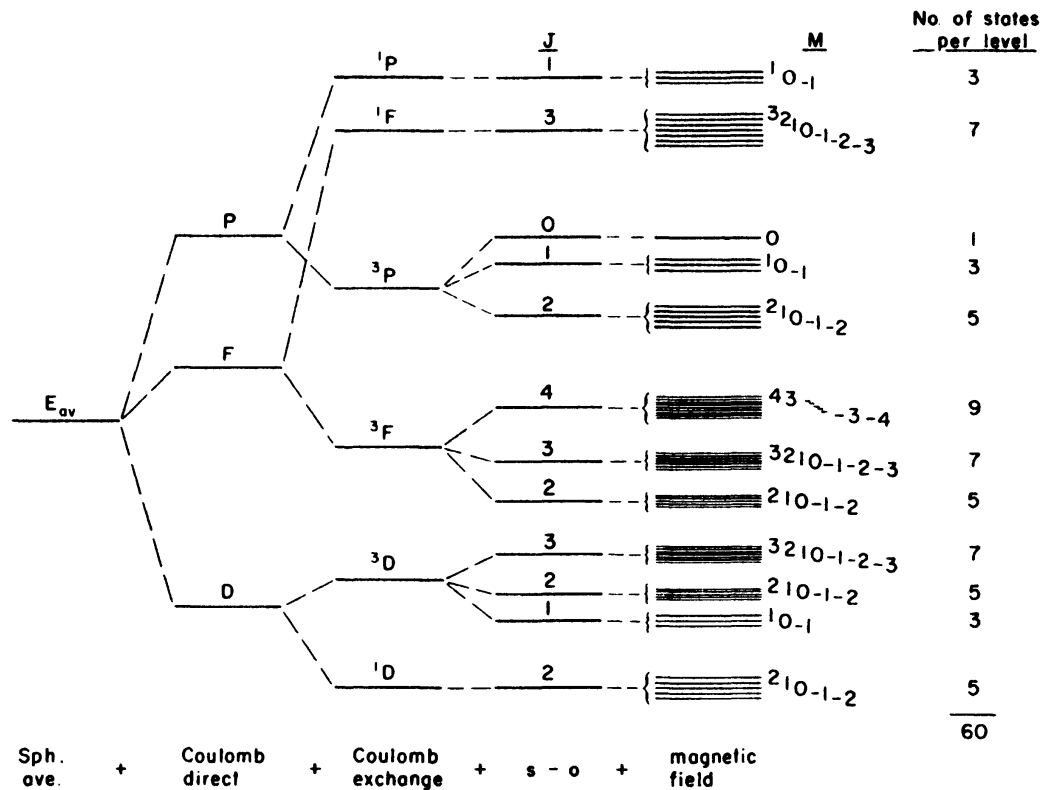
$$|j_1 j_2 j m\rangle = \sum_{m_1=-j_1}^{j_1} C(j_1 j_2 m_1, m - m_1; j m) |j_1 j_2 m_1, m - m_1\rangle = (-1)^{j_1+j_2-j} |j_2 j_1 j m\rangle$$

is eigenfunction of 4 operators  $J_1^2, J_2^2, J^2 = (J_1 + J_2)^2, J_z = J_{1z} + J_{2z}$

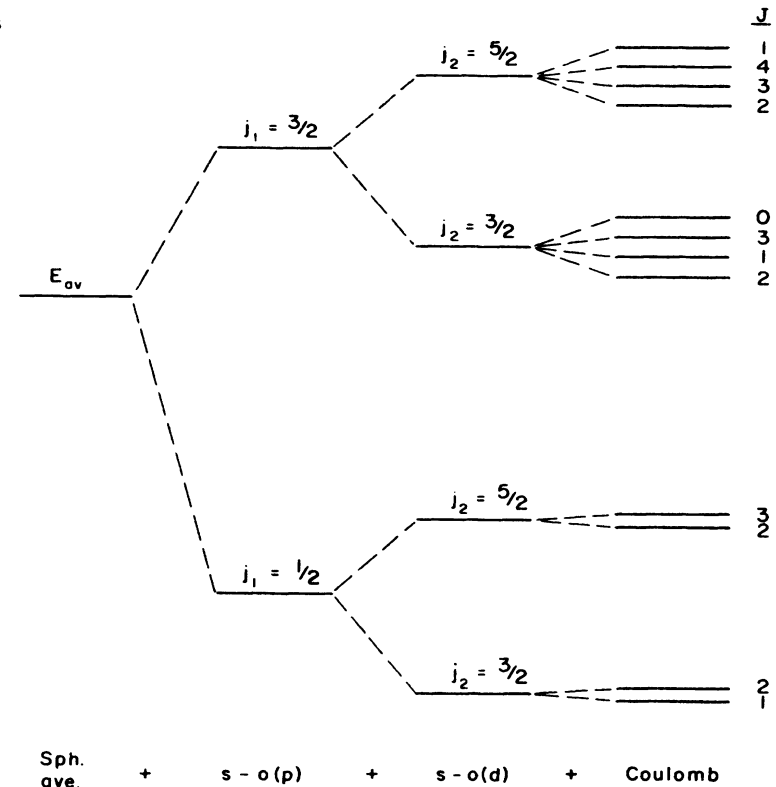
$C()$  are Clebsch-Gordan coefficients

- Coupling of 3 angular momenta more complicated (not associative)
- Coupling schemes
- **LS** coupling (Coulomb repulsion  $\gg$  spin-orbit interaction)
  - basic splitting according to  $\mathbf{L} = \sum_i \mathbf{l}_i$  and  $\mathbf{S} = \sum_i \mathbf{s}_i$ , then  $\mathbf{L}$  and  $\mathbf{S}$  are coupled
  - $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$  to form eigenfunctions of  $\mathbf{J}^2, J_z$  – notation  $^{2S+1}L_J - 2S+1$  - multiplicity, o – odd parity, e.g.  $^2P_{1/2}^o$
- **jj** coupling (for high  $Z$  - spin-orbit interaction  $\gg$  Coulomb repulsion)
  - $\mathbf{l}_i + \mathbf{s}_i = \mathbf{j}_i$ ,  $\mathbf{J}$  and  $\mathbf{M}$  – sum of  $\mathbf{j}_i$  – for 2 electrons  $[(l_1, s_1)j_1, (l_2, s_2)j_2] \mathbf{J} \mathbf{M}$
- other coupling schemes (**LK, jK**), intermediate coupling

# Diagrams of energy states



Scheme of splitting of energy levels of *pd* configuration in conditions of **LS** coupling starting from averaged  $E_{av}$  and gradually adding large Coulomb interaction, spin-orbit interaction and external magnetic field



Scheme of energy levels of *pd* configuration in conditions of **jj** coupling, 2 strong spin-orbit interactions lead to 4 energies; small splitting due to Coulomb repulsion

## Atomová fyzika plazmatu

jen pro nejnižší  $Z$  možnost jádra + volné elektrony (a nic jiného)

stupně ionizace  $0+, 1+, \dots, Z+$

atom  $Y$   $YI, YII, \dots$

uhlík  $C$   $CI, CII, CIII,$

$CIV, CV, CVI, CVII$

Li-like He-like H-like jádro  
(vodíkopodobný)

### Schéma hladin

singletní

$1s2s^1S$   $L=0$   $S=0$   $g=1$

tripletní

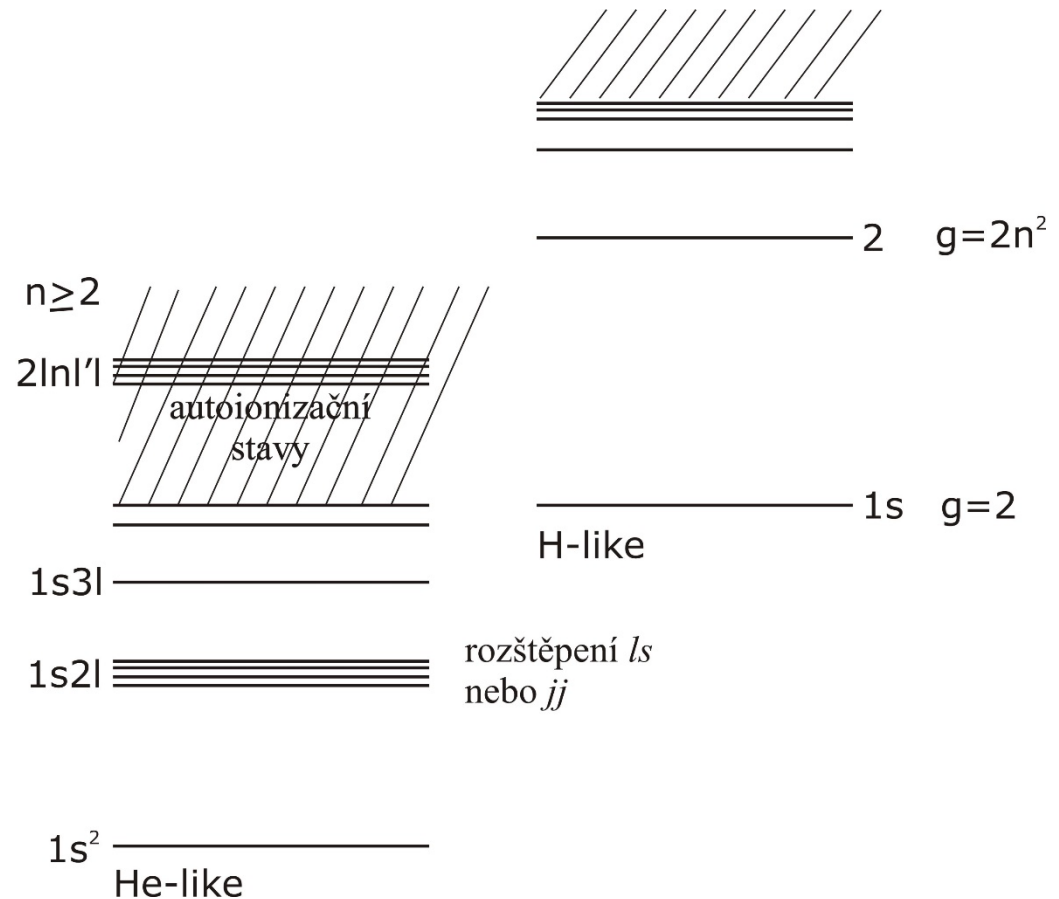
$1s2s^3S$   $L=0$   $S=1$   $g=3$

$1s2p^1P$   $L=1$   $S=0$   $g=3$

$1s2p^3P$   $L=1$   $S=1$   $g=9$

povolený dipólový přechod na  
základní hladinu  $\Delta S=0, \Delta L=\pm 1$  (0)

LS vazba pro lehké prvky, relativistické jevy u vysokých  $Z \Rightarrow$  jj vazba méně omezení na  
radiační přechody.



## Autoionizační stavy

1. excitováno  $> 1$  elektron

2. excitován elektron z vnitřní slupky      např. Li-podobný  $1s2l2l'$

Proces autoionizace  $Y^{**} \rightarrow Y^+ + e^-$

Energie fotonu pro přechod  $Y^{**} \rightarrow Y^*$  je blízká k přechodu  $Y^{+*} \rightarrow Y^+$  v o jednu více ionizovaném atomu - *satelit* k rezonanční čáře (satelity významné pro diagnostiku)

## Rozdělení iontů podle elektronových slupek

**K-slupka**    –    H, He-podobné      obvykle stačí  $\leq 30$  hladin

**L-slupka**    –    Li- až Ne-like      Li-like  $\leq 30$  hladin      další  $\geq 100$  hladin

Ne-like – relativně jednoduchý a dobře známý – srážkově buzené lasery v měkkém rtg.

základní stav  $1s^2 2s^2 2p^6 \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5 3p$       srážková excitace      zakázaný optický  
přechod do zákl. stavu

inverze s hladinou  $1s^2 2s^2 2p^5 3s$ , kde je přechod spontánní emisí do zákl. stavu povolen

**M-slupka**    –     $\geq 10^3$  stavů    TA – transition arrays (přechody mezi skupinami stavů)  
pásové spektrum – čáry nelze rozeznat

Plazmová chemie – disociace    vibrační stavy      zajímavá pro aplikace

# Atomové procesy

## 1. Srážkové procesy

- pokud  $n_e$  není malé, často dominují srážky iontů s elektrony
- účinný průřez pro proces  $\alpha$

$Q^{(\alpha)}$  necht' na částici 2 nalétává tok  $\Gamma_1 = n_1 g$

$$Q^{(\alpha)} = \frac{\text{počet událostí } \alpha \text{ za 1s na 1 částici druhu 2}}{\Gamma_1}$$

počet událostí /  $\text{m}^3\text{s}$   $R_{12}^{(\alpha)} = n_1 n_2 g Q_{12}^{(\alpha)}(g)$   $\left( R_{11}^{(\alpha)} = \frac{1}{2} n_1^2 g Q_{11}^{(\alpha)}(g) \right)$

$$\left( \frac{dn_2}{dt} \right)^{(\alpha)} = -R_{12}^{(\alpha)} \quad \dots \text{zmenšení počtu částic } n_2 \text{ procesem } \alpha$$

- **srážková excitace (deexcitace)**

$$i^{(k)} + e \rightleftharpoons i^{(l)} + e \quad \varepsilon_{kl} = \varepsilon_l - \varepsilon_k \quad \varepsilon \geq \varepsilon_{kl} \quad \dots \text{prahová energie elektronu}$$

– účinný průřez má velmi podobnou závislost na  $u = \varepsilon / \varepsilon_{kl}$  (pro přechody vnějšího  $e^-$  mezi hladinami, kde je dipólový přechod povolen)

$$Q^{(k \rightarrow l)}(\varepsilon) = 4\pi a_0^2 \left( \frac{\varepsilon^H}{\varepsilon_{kl}} \right)^2 f_{kl} \beta_1 g(u) \quad g(u)$$

$$g(u) = \frac{u-1}{u^2} \ln \left( \frac{5}{4} \beta_2 u \right)$$

maximum  $g$  pro  $u \sim 2-4$ ; pro velká  $u$  je proces málo pravděpodobný,  $\beta_1, \beta_2$  konstanty řádu 1

$\varepsilon^H = 13,6 \text{ eV}$  - H - ionizační potenciál

$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 5,3 \times 10^{-11} \text{ m} \quad \text{Bohrův poloměr (poloměr 1. vodíkového orbitu)}$$

$f_{kl}$  - síla oscilátoru pro absorpci (charakterizuje fotoexcitaci)

$$Q \sim \frac{1}{\varepsilon_{kl}^2}$$

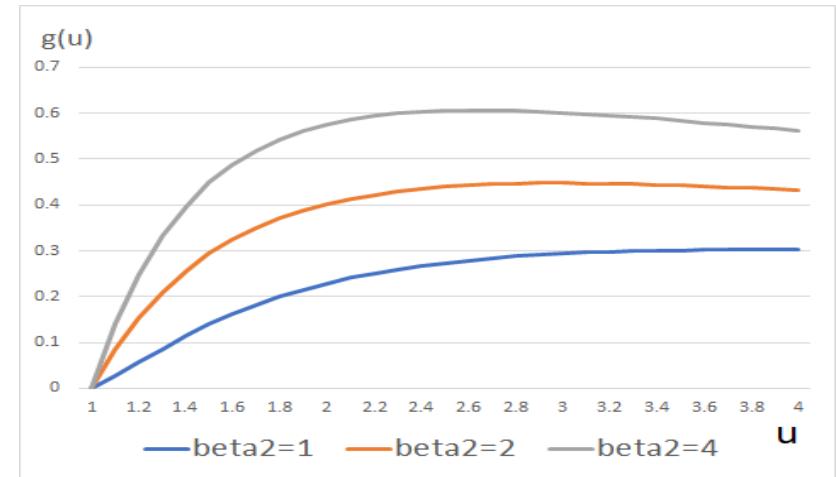
srážkové procesy rychlé mezi blízkými hladinami

např. mezi hladinami se stejným  $n$  (hlavním kvantovým číslem)

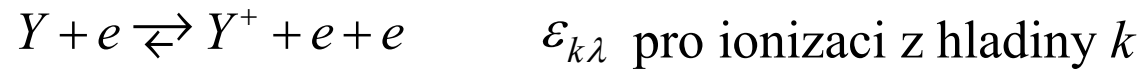
velikost rozštěpení hladin s různými  $l$  klesá s  $n$

rovnováha uvnitř 1 rozštěpené hladiny může být zajištěna srážkami

srážkový přechod mezi hladinami, kde dipólový přechod není povolen může být stejně rychlý jako u povoleného přechodu !!! (jen nelze vyjádřit přes  $f_{kl} \cong 0$ )



- **srážková ionizace (tříčásticová rekombinace)**



(tříčásticová rekombinace  $\rightarrow$  rychlost  $\sim n_i n_e^2$  nezanedbatelná jen v hustém plazmatu)

$$u = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_{k\lambda}} \quad Q^{(k \rightarrow \lambda)}(\varepsilon) = 2,66\pi a_0^2 \left( \frac{\varepsilon^H}{\varepsilon_{k\lambda}} \right)^2 \xi_k \beta_1 g(u) \quad \xi_k \dots \text{počet } e^- \text{ na hladině } k$$

**Dielektronová rekombinace** – srážkově radiální proces



## 2. **Radiační procesy**

Přechody mezi stavy

vázaný – vázaný  $\rightarrow$  čárové záření

vázaný – volný  $\rightarrow$  spojitě s hranicí (hrana)

volný – volný  $\rightarrow$  brzdné záření

- **Vázaný – vázaný (fotoexcitace a fotodeexcitace)**

$$i^{(l)} \rightleftharpoons i^{(k)} + h\nu \quad h\nu = \varepsilon_l - \varepsilon_k = \varepsilon_{kl} \quad \vec{p}_\nu = \frac{h\nu}{c} \vec{\Omega} \quad \vec{\Omega} \text{ - jednotkový vektor}$$

$I_\nu(\vec{\Omega})$  - spektrální intenzita záření v jednotkovém prostorovém úhlu  $I_\nu(\Omega)d\nu d\vec{\Omega}$

- ve vakuu pro izotropní elektromagnet. pole  $I_\nu = n_\nu \cdot \frac{c}{4\pi} \cdot h\nu$

Absorpce fotonu - počet absorbovaných fotonů nepohyblivými částicemi o koncentraci  $n_2$  za 1 času v jednotce 1 objemu

$$R = \int R_\nu d\nu = n_2 \int \frac{I_\nu(\vec{\Omega})}{h\nu} d\nu \cdot Q_\nu d\vec{\Omega} \quad Q_\nu \text{ účinný průřez pro absorpci}$$

(pro pohyblivé částice se  $\nu$  mění Dopplerovým jevem, v klidové soustavě  $Q_\nu(\nu, \vec{\Omega})$ )

**Fotoexcitace**  $k \rightarrow l$   $Q_\nu^{(k \rightarrow l)} = \frac{e^2}{4\varepsilon_0 m_e c} f_{kl} \Phi(\nu)$

$f_{kl}$  - síla oscilátoru pro absorpci (obvykle  $0 < f_{kl} < 1$ ) ( $f_{lk} = -g_k f_{kl} / g_l$  - síla osc. pro emisi)

$\Phi(\nu)$  - tvar absorpční čáry  $\int \Phi(\nu) d\nu = 1$  tvar emisní čáry se může lišit (často stejný)

$$I^{kl}(\vec{\Omega}) = \int I_\nu(\vec{\Omega}) \Phi(\nu) d\nu \quad (I^{kl}(\vec{\Omega}) = I_{\nu_{kl}}(\vec{\Omega}) \text{ pokud intenzita slabě závisí na } \nu)$$



Počet fotoexcitací / jednotku času a objemu  $R^{kl} = n_k B_{kl} \bar{I}^{kl}$  kde  $\bar{I}^{kl} = \int I^{kl}(\vec{\Omega}) d\Omega$

$$B_{kl} = \frac{e^2}{4\varepsilon_0 m_e c h \nu_{kl}} f_{kl} \quad \text{Einsteinův koeficient pro absorpci}$$

**Stimulovaná emise**  $R_{stim}^{lk} = n_l B_{lk} \bar{I}^{kl}$   $B_{lk}$  – Einsteinův koeficient pro stimulovanou emisi

**Spontánní emise**  $R_{spont}^{lk} = n_l A_{lk}$  **Radiační doba života**  $\tau_{lk} = A_{lk}^{-1} \sim \frac{1}{\nu_{kl}^2}$

**Rovnováha pro absolutně černé těleso**  $\Rightarrow$  vztahy mezi Einsteinovými koeficienty

Záření absolutně černého tělesa  $I_\nu = B_\nu = \frac{2h\nu^3 / c^2}{e^{h\nu/kT} - 1}$  a  $n_k = \frac{g_k}{g_l} n_l e^{h\nu/k_B T}$

$$g_k B_{kl} = g_l B_{lk} \quad \frac{A_{lk}}{B_{lk}} = \frac{8\pi h \nu_{kl}^3}{c^2} \Rightarrow A_{lk} = \frac{g_k}{g_l} \frac{2\pi e^2 \nu_{kl}^2}{\varepsilon_0 m_l c^3} f_{kl}$$

(pro povolené přechody v XUV oblasti s energií fotonu  $\varepsilon_{kl} \sim 1 \text{ keV}$  je  $\tau_{lk} \geq 10^{-14} \text{ s}$   
 pro přechody v optické oblasti s energií fotonu  $\varepsilon_{kl} \sim 1 \text{ eV}$  je  $\tau_{lk} \geq 10^{-8} \text{ s}$ )

**Tvar čáry** (velmi často  $\Phi(\nu)$  emisní =  $\Phi(\nu)$  absorpční)

1. *Přirozené rozšíření*

– důsledek spontánní emise (konečná radiální doba života)

$$\Delta\varepsilon_{lk} \cong h\gamma_{lk} \quad \text{šířka hladiny} \quad \gamma_l = \sum_{j<l} A_{lj} \quad \gamma_{lk} \cong \gamma_l + \gamma_k$$

Lorenzův tvar čáry

$$\Phi(\nu) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_{lk} / 4\pi}{(\nu - \nu_{kl})^2 + (\gamma_{lk} / 4\pi)^2}$$

2. *Tlakové rozšíření* (v důsledku interakcí s okolními částicemi)

v plazmatu s převahou nabitých částic především působení elektrických polí, tedy Starkovo rozšíření (včetně rozštěpení) – zdroje srážky s elektrony a iontová mikropole  
U neutrálních částic např. Van der Waalsovo rozšíření

3. *Dopplerovo rozšíření* – v důsledku tepelného pohybu iontů

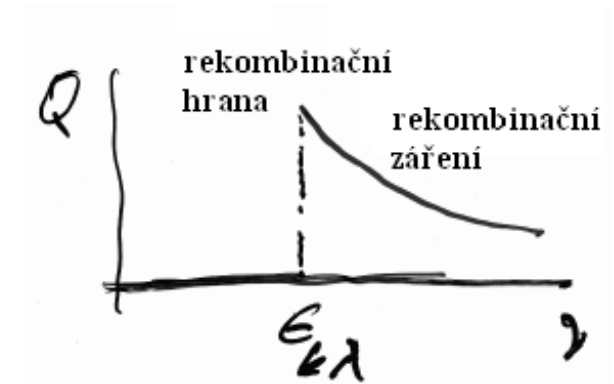
při Maxwellovské rozdělovací funkci - profil čáry  $\Phi(\nu) \sim \exp\left[-\frac{(\nu - \nu_{kl})^2}{\Delta\nu_D^2 / 4 \ln 2}\right]$

Pokud se najednou projeví Lorenzovo i Dopplerovo rozšíření – **Voigtův profil** (konvoluce)

- **Vázaný – volný** (fotoionizace a fotorekombinace)

fotoionizace z hladiny  $k$   $h\nu \geq \varepsilon_{k\lambda}$

$$Q^{(k \rightarrow \lambda)} \sim \frac{1}{\nu^3}$$



fotorekombinační záření – zdroj

$$j_\nu \sim e^{-\frac{h\nu - \varepsilon_{k\lambda}}{k_B T_e}} \text{ pro Maxwelllovo rozdělení } e^-$$

koeficient závislý na iontu a hladině  $g_{bf}$  (Gauntův faktor)

- **Volný – volný**  
**brzdné záření**

spektrum blízké  $\sim e^{-\frac{h\nu}{k_B T_e}}$  celkový výkon  $P^{ff} \sim Z^2 n_e n_i T_e^{1/2} \bar{g}_{ff}$  (Gauntův free-free)

Poměr mezi rekombinačním a brzdným zářením (pro  $H$  atom  $k$  hlavní kvant. číslo)

$$\frac{P_k^{fb}}{P^{ff}} = \frac{2\varepsilon_{k\lambda} / k}{n_e Z^2 \bar{g}_{ff} k_B T_e}$$

pro srážkovou absorpci fotonu na iontu je

$$Q_\nu \sim \frac{1}{\nu^3 \nu_{Te}} \text{ emise hlavně na}$$

**cyklotronové záření** – v magnetických polích

elektronové cyklotronové frekvenci  $\omega_{ce}$ , a také na jejích harmonických

výkon emitovaný elektronem  $P = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{4\omega_{ce}^2}{3m_e c^2} \frac{8\pi}{3} E_{kin}$   $E_{kin} = m_e v^2 / 2$

## Transport záření

$l$  - dráha podle paprsku  $\rightarrow$

pro  $\nu \gg \frac{\omega_p}{2\pi}$

$$v_g \approx c$$

$$\varepsilon_r \approx 1$$

$$\underbrace{\frac{1}{c} \frac{\partial I_\nu}{\partial t}}_{\approx 0} + \frac{\partial I_\nu}{\partial l} = j_\nu - k_\nu I_\nu$$

( $j_\nu, k_\nu$  mohou záviset na  $\vec{\Omega}$ , např. v důsledku makroskopického pohybu prostředí)  
(pro jednoduchost je zanedbán rozptyl záření)

$L$  charakteristický rozměr

$k_\nu L \ll 1$  opticky tenké prostředí

$k_\nu L \geq 1$  opticky tlusté prostředí

při  $k_\nu L \rightarrow \infty$   $I_\nu \rightarrow B_\nu$  absolutně černé těleso

Fotoexcitace, fotoionizace, stimulovaná emise  $\Rightarrow$  VLIV záření na populace

Laboratorní plazmata jsou většinou opticky tenká (v některých případech s výjimkou center nejintenzivnějších emisních čar)

Výjimka – cyklotronová emise na elektronové cyklotronové frekvenci  $\omega_{ce}$  z magneticky udržovaného plazmatu (např. tokamaku) je opticky tlustá

## Rovnováhy

### 1. TE (úplná termodynamická rovnováha) – hmota i záření v rovnováze

- Záření = absolutně černému tělesu  $I_\nu = B_\nu = \frac{2h\nu^3 / c^2}{e^{h\nu/kT} - 1} \quad (T = T_e = T_i = T_r)$
- Rovnováha mezi excitačními stavy (Boltzmannův vztah)

$$\frac{n_l}{n_k} = \frac{g_l}{g_k} e^{-\varepsilon_{kl}/k_B T_e} \quad \text{kde } \varepsilon_{kl} = \varepsilon_k - \varepsilon_l$$

Relativní populace základního stavu  $\frac{n}{n_1} = \sum_{k=1}^{k_{\max}} \frac{n_k}{n_1} = \frac{1}{g_1} \sum g_k e^{-\varepsilon_k/k_B T_e} = \frac{Z(T)}{g_1}$

Partiční funkce  $Z(T)$  diverguje při  $k_{\max} = \infty$ , je třeba si ovšem uvědomit, že pro velmi

vysoké stavy je  $r_{orbit} \gg \sqrt[3]{1/n_i}$  a takové stavy **nemusí být vázané** – nejsou to stavy izolovaného iontu a jsou ovlivněny okolím

**Snížení ionizačního potenciálu  $\Delta I$**  – často se používá předpoklad, že stavy s energií

$$\varepsilon_k > I - \Delta I \quad \text{nejsou vůbec vázané} \quad \text{při } T_e \ll \varepsilon_2 \quad \text{je pak } Z(T) \simeq g_1$$

- Rovnováha mezi ionizačními stavy (chemická rovnováha – Sahaova rovnice)

rovnováha mezi  $k$ -tou hladinou neutrálního atomu a základní hladinou jednonásobného

iontu dána rovnicí 
$$\frac{n_e n_1^+}{n_k} = 2 \frac{g_1^+}{g_k} \left( \frac{2\pi m_e k_B T_e}{h^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{\epsilon_{k\lambda}}{k_B T_e}} \quad \epsilon_{k\lambda} = \epsilon_{1\lambda} - \epsilon_k = I - \epsilon_k$$

tentýž vztah platí mezi jakýmkoli hladinami  $p$ -násobně a  $p+1$ -násobně ionizovaných iontů  
Podobné vztahy lze zapsat pro celkové populace iontů – zde napíši pro neutrály a  $1\times$ ioniz.

$$\frac{n_e n_i}{n_n} = 2 \frac{Z_i}{Z_n} \left( \frac{2\pi m_e k_B T_e}{h^2} \right)^{3/2} e^{-\frac{I}{k_B T_e}} \quad \text{kde } Z_i \text{ a } Z_n \text{ jsou příslušné partiční funkce}$$

- Elektronů (a iontů) mají Maxwelllovo rozdělení s příslušnou teplotou ( $T = T_e = T_i$ )

**2. LTE (lokální termodynamická rovnováha) – hmota je v rovnováze, záření ne**  
platí Maxwellovo rozdělení elektronů + Boltzmannovy vztahy + Sahovy rovnice,  
ale neplatí spektrum absolutně černého tělesa (záření musí být rovnovážné  
alespoň v té části spektra, kde radiační procesy podstatně ovlivní populace !)  
LTE splněna vždy, pokud je hustota tak velká, že srážkové procesy převažují všude  
nad radiačními (vliv radiačních procesů na populace lze zanedbat)

**3. Koronální rovnováha (velmi zředěné plazma)**

Nejedná se vlastně o rovnováhu, ale o stacionární stav

Zředěné plazma – fotodeexcitace  $\gg$  srážková deexcitace

– fotorekombinace  $\gg$  3-částicová a dielektronová rekombinace

Zanedbání pomalých procesů značně zjednoduší výpočet stacionárního stavu

**4. Řešení rychlostních rovnic**

Řešíme rovnice pro  $n_{pk}$  (k-tý stav p-násobně ionizovaného iontu)

Systém obyčejných diferenciálních rovnic (stacionární stav – časové derivace = 0)

Vazba mezi různými částmi systému zprostředkována zářením

V přiblížení opticky tenkého systému – členy obsahující intenzitu záření zanedbáme,  
tj. neuvažujeme vliv absorpce a stimulované emise fotonů

## **Princip detailní rovnováhy (detailed balancing)**

V rovnováze musí být diferenciální reakční rychlost přímého a *inverzního procesu* stejné (invariantnost vůči obrácení času)

Z *diferenciálního účinného průřezu* přímého procesu lze tedy spočítat diferenciální účinný průřez inverzního procesu a ten mohou využít i *mimo rovnováhu*

Pokud navíc budu uvažovat i mimo rovnováhu Maxwelllovo rozdělení elektronů lze stejný postup aplikovat i na *rychlostní koeficienty*

V rovnováze se rychlost srážkové excitace = rychlosti srážkové deexcitace  
a rychlost srážkové ionizace = rychlosti tříčásticové rekombinace

Z rychlostních koeficientů přímého procesu spočítám *rychlostní koeficienty inverzního procesu* a ty použiji *mimo rovnováhu*

Stejnou aplikací principu detailní rovnováhy jsou vztahy mezi **Einsteinovými koeficienty** (výpočet koeficientů z detailní rovnováhy je výhodný i pro numerické modelování – automaticky je zaručeno zachování rovnovážného řešení)