

Н.Я. Шапарев, И.М. Шкедов

## ДИНАМИКА ФОТОИОНИЗАЦИИ АТОМОВ БАРИЯ СОЛНЕЧНЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ

Представлены результаты численного моделирования процесса фотоионизации плоского слоя оптически тонких и толстых паров бария под действием солнечного излучения. Построена многоуровневая модель атома бария, которая позволяет описывать динамику фотоионизации паров с учетом кинетики заселения синглетного  $^1D_2$  и триплетных  $^3D_{1,2,3}$  состояний. Получено, что ионизация плотных паров происходит неоднородно по пространственной переменной из-за эффектов поглощения падающего на слой излучения, а эффективное время ионизации слоя увеличивается по сравнению с оптически тонкой средой. Найдены также два режима просветления паров для излучения с  $\lambda = 5535,48 \text{ \AA}$ , первый связан с заселением метастабильных состояний, а второй обусловлен фотоионизацией газа.

Инжекция паров бария в верхние слои атмосферы используется для создания искусственных облаков (ИО) с целью диагностики окружающей среды. Облако нейтральных атомов образуется в процессе газодинамического разлета продуктов реакции (паров), которое в дальнейшем ионизируется под действием солнечного излучения [1–4]. В этих работах отмечается решающая роль атомов в метастабильных состояниях  $^1,3D$  на динамику образования ИО, которая связана с тем, что скорость фотоионизации с  $^1,3D$  уровней значительно превосходит скорость фотоионизации из основного состояния атома бария. Такое сильное различие определяется формой спектрального распределения интенсивности солнечного излучения [8–9]. В тех случаях, когда выбрасывается достаточно большое количество вещества, могут возникать оптически плотные нейтральные облака на частотах, соответствующих резонансным переходам атома бария [5–6]. Поэтому для корректного описания процесса фотоионизации плотных образований в верхней атмосфере необходимо учитывать перенос радиации в резонансных линиях атомов.

Таким образом, исследование и моделирование процесса ступенчатой ионизации атомов бария солнечным светом в теоретическом плане представляет интерес для выяснения конкретных каналов ионизации, а с практической точки зрения этот процесс необходим для прогнозирования динамики образования ИО при планировании экспериментов. Кроме того, получаемые значения заселенностей возбужденных состояний атомов и ионов важны для расчета интенсивностей спектральных линий и интерпретации имеющихся экспериментальных данных по свечению ИО.

Данная статья посвящена определению каналов и времени ионизации для плоского слоя паров бария в оптически тонкой и толстой средах.

## Оптически тонкие среды

Динамика ионизации оптически тонких паров описывается системой балансных уравнений для заселенности уровней, которые включены в модель атома бария. Учитываются процессы возбуждения, тушения, ионизации атомов под действием широкополосного излучения и спонтанный распад. Считается, что до облучения все атомы находятся в основном состоянии, их концентрация известна и равна  $N_0$ . Скорости процессов фотовозбуждения и спонтанного распада рассчитывались с помощью данных для сил осцилляторов [7] и распределения интенсивности солнечного излучения по спектру [8–9]. Оценки значений скоростей и сечений фотоионизации проводились по полуэмпирической методике, которая описана в [10]. Отметим, что полученные таким образом величины сечений фотоионизации для метастабильных уровней  $^3D$  находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными [11].

Для простейшей трехуровневой модели, включающей основное, метастабильное и оптически связанное с ними возбужденное состояния, система балансных уравнений имеет аналитическое решение в том случае, если заселенность возбужденного уровня  $N_3(t)$  адиабатически отслеживает изменение заселенностей основного  $N_1(t)$  и метастабильного  $N_2(t)$  состояний. Такое приближение (режим квазистационарности) соответствует тому, что  $dN_3/dt \approx 0$  и его применение в нашем случае оправдано потому, что характерное время фотоионизации много больше характерного времени фотовозбуждения и спонтанного распада

$$\frac{1}{F_j} \gg \frac{1}{B_{ij}} \gg \frac{1}{A_{ji}}, \quad (1)$$

где  $F_j$  – скорость фотоионизации атомов с  $j$ -го уровня;  $B_{ij}$  и  $A_{ji}$  – скорости фотовозбуждения и спонтанного распада для перехода  $i \rightarrow j$ .

При таких предположениях динамика изменения заселенностей  $N_1(t)$ ,  $N_2(t)$ ,  $N_3(t)$  и концентрации электронов  $N_e(t)$  определяется скоростями фотопроцессов и имеет вид

$$N_1(t) = N_0 \{ q_1 [e^{-\lambda_2 t} - e^{-\lambda_1 t}] + e^{-\lambda_1 t} \}, \quad (2)$$

$$N_2(t) = N_0 \{ q_2 [e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t}] \}, \quad (3)$$

$$N_3(t) = \frac{B_{13}}{\alpha_0} N_1(t) + \frac{B_{23}}{\alpha_0} N_2(t), \quad (4)$$

$$N_e(t) = N_0 - p_1 N_1(t) - p_2 N_2(t), \quad (5)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} q_1 = \frac{\alpha_{11}(\lambda_1 - \alpha_{11})}{\Delta}; \quad q_2 = \frac{(\lambda_1 - \alpha_{11})(\lambda_2 - \alpha_{11})}{\Delta}; \\ p_1 = 1 + B_{13}/\alpha_0; \quad p_2 = 1 + B_{23}/\alpha_0; \\ \lambda_1 = \frac{(\alpha_{11} + \alpha_{22})(1 + \delta)}{2}; \quad \lambda_2 = \frac{(\alpha_{11} + \alpha_{22})(1 - \delta)}{2}; \\ \Delta = \alpha_{12}(\lambda_1 - \lambda_2); \quad \delta = \left[ 1 - \frac{4(\alpha_{11} \cdot \alpha_{22} - \alpha_{12} \cdot \alpha_{21})}{(\alpha_{11} + \alpha_{22})^2} \right]^{1/2}; \\ \alpha_1 = F_3 + B_{32} + A_{32}; \quad \alpha_2 = F_3 + B_{31} + A_{31}; \\ \alpha_0 = \alpha_1 + B_{31} + A_{31}; \\ \alpha_{11} = F_1 + B_{12} + B_{13} \cdot \frac{\alpha_1}{\alpha_0}; \quad \alpha_{21} = B_{12} + \frac{B_{13}}{\alpha_0} (B_{32} + A_{32}); \\ \alpha_{12} = B_{21} + A_{21} + \frac{B_{23}}{\alpha_0} \cdot (B_{31} + A_{31}); \\ \alpha_{22} = F_2 + B_{21} + A_{21} + \frac{\alpha_2}{\alpha_0} \cdot B_{23}. \end{array} \right. \quad (6)$$

Теоретическую оценку характерного времени фотоионизации  $\tau_\Phi$  можно получить, используя формулу

$$\tilde{N}_e(t) = N_0 \left[ 1 - \exp\left(-\frac{t}{\tau_\Phi}\right) \right] \quad (7)$$

для аппроксимации временной зависимости концентрации электронов  $N_e(t)$ , которая задана выражением (5). Численное значение  $\tau_\Phi$  определяется из условия минимума функционала

$$R(\tau_\Phi) = \frac{1}{N_0} \int_0^\infty [N_e(t) - \tilde{N}_e(t)]^2 dt = R_0 + \tau_\Phi \left\{ \frac{1}{2} + \frac{2(p_2 q_2 - p_1 q_1)}{(\lambda_2 \tau_\Phi + 1)^2} + \frac{2[p_2 q_2 - p_1(1 - q_1)]}{(\lambda_1 \tau_\Phi + 1)^2} \right\}, \quad (8)$$

описывающего величину среднеквадратической ошибки аппроксимации. Минимум функционала (8) достигается при тех значениях  $\tau_\Phi$ , которые удовлетворяют уравнению

$$\frac{1}{4} - (p_2 q_2 - p_1 q_1) \frac{(\lambda_2 \tau_\Phi - 1)}{(\lambda_2 \tau_\Phi + 1)^3} - [p_2 q_2 - p_1(1 - q_1)] \frac{(\lambda_1 \tau_\Phi - 1)}{(\lambda_1 \tau_\Phi + 1)^3} = 0. \quad (9)$$

В таблице приведены значения характерного времени фотоионизации  $\tau_\Phi$  и минимальные значения функционала (8), соответствующие ионизации атомов по трехуровневой схеме с различных метастабильных состояний.

Анализ результатов указывает на то, что наименьшее время  $\tau_\Phi$ , равное 207,9 с, получается для случая, когда ионизация происходит с уровня  $^1D_2$ , который заселяется через возбужденное состояние  $^1P_1$  излучением с длиной волны 5535,48 Å. На основании этого, по-видимому, можно предположить, что именно этот ступенчатый процесс дает основной вклад в ионизацию атомов бария, однако полученная для него величина  $\tau_\Phi$  существенно отличается по численному значению от экспериментальных характерных времен ионизации, которые лежат в пределах от 20 до 30 с [4]. Причиной этого может являться грубое приближение для описания процесса ионизации атомов излучением в рамках трехуровневой модели, так как она не учитывает вклада в ионизацию от других состояний. Расчеты показали, что суммарный вклад в ионизацию атомов с  $^1D_2$  уровня от других возбужденных состояний

кроме  $^1P_1$  мал, и практически не уменьшает значения  $\tau_{\text{ф}}$ .

**Значения характерного времени фотоионизации бария  $\tau_{\text{ф}}$  соответствующие различным метастабильным состояниям, которые найдены с помощью трехуровневой модели атома**

Резонансный переход, $\lambda, \text{\AA}$	Метастабильный уровень	Время $\tau_{\text{ф}}, \text{с}$	Значение функционала
$^1S_0 \rightarrow ^1P_1$ 5535,48	$^1D_2^*$	207,94	- 0,0579
$^1S_0 \rightarrow ^3P_1$ 7911,34	$^3D_1$	450,00	- 0,0240
$^1S_0 \rightarrow ^3P_2$ 7911,34	$^3D_2$	773,55	- 3,373·10 <sup>-4</sup>
$^1S_0 \rightarrow ^3P_1$ 3889,33	$^3D_1$	444,35	- 0,0607
$^1S_0 \rightarrow ^3P_1$ 3889,33	$^3D_2$	338,36	- 0,1363
$^1S_0 \rightarrow ^1P_1$ 3501,11	$^1D_2$	369,36	- 0,0557
$^1S_0 \rightarrow ^1P_1$ 3071,58	$^1D_2$	511,09	- 0,0318
$^1S_0 \rightarrow ^1P_1$ 5535,48	$^1D_2$	160,05	- 0,1158

\* Метастабиль  $^1D_2$  распадается со скоростью  $2 \text{ с}^{-1}$ .

Влияние на кинетику фотоионизации триплетной группы метастабильных уровней  $^3D_{1,2,3}$  учитывалось в рамках многоуровневой модели атома бария, включающей основное, метастабильные  $^1D_2$ ,  $^3D_{1,2,3}$  и те возбужденные состояния, которые оптически связывают основное и метастабильные уровни или метастабильи  $^1D_2$  и  $^3D_{1,2,3}$  между собой. В результате получается двенадцатиуровневая модель атома бария, и соответствующая ей система балансных уравнений относительно заселенностей решалась численными методами [19].

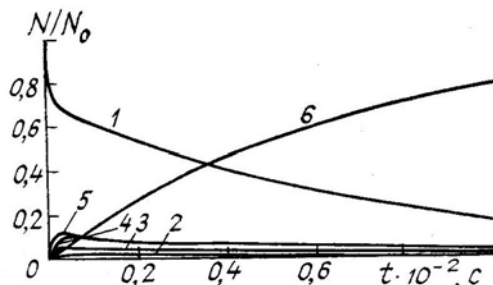


Рис. 1. Динамика изменения плотности ионов (6), атомов бария в состояниях:  $^1S_0$  – кривая 1;  $^3D_1$  – 2;  $^3D_2$  – 3;  $^3D_3$  – 4 и  $^1D_2$  – 5

Временной ход концентрации электронов (кривая 6), заселенностей основного (1) и метастабильных ( $^3D_1$  – (2),  $^3D_2$  – (3),  $^3D_3$  – (4) и  $^1D_2$  – (5)) состояний представлен на рис. 1. Видим, что в начале процесса ионизации за время  $\approx 1 \text{ с}$  происходит перераспределение атомов между основным и метастабильными уровнями под действием процессов фотовозбуждения и спонтанного распада. В дальнейшем идет медленная ионизация метастабильных атомов излучением с характерным временем  $\tau_{\text{ф}} \approx 67$  секунд. Кроме того, было выявлено, что связь между метастабильями  $^1D_2$  и  $^3D_{1,2,3}$  через промежуточные возбужденные состояния играет важную роль в кинетике ионизации бария, так как при ее отсутствии значение характерного времени  $\tau_{\text{ф}}$  увеличивается до 127 с.

### Оптически плотные среды

Фотоионизацию плотных бариевых облаков необходимо описывать с учетом процессов переноса излучения в резонансных линиях атомов, так как они могут приводить к пространственной неоднородности ИО. Кроме того, под действием их происходит формирование пространственного распределения внутренних источников излучения (возбужденных атомов), которые в конечном итоге и определяют динамику свечения нейтрального и ионного облаков под действием внешней радиации.

В этом разделе статьи обсуждаются основные результаты численного моделирования процесса фотоионизации плоскопараллельного плотного слоя паров бария, на одну сторону которого под прямым углом к поверхности падает солнечное излучение.

При построении математической модели рассматриваемого процесса были сделаны следующие предположения:

- 1) процесс переизлучения поглощенных фотонов атомами описывается в приближении о полном частотном перераспределении [12, 13];
- 2) контуры линий излучения и поглощения имеют доплеровскую форму;
- 3) рассеяние фотонов атомами происходит изотропно (сферическая индикатриса рассеяния).

Тогда в системе балансных уравнений для многоуровневого атома по сравнению с оптически тонким слоем кроме членов, описывающих вклад в фотопроцессы возбуждения от прямой солнечной радиации, пришедшей в данную точку слоя извне, появятся члены, которые определяются только интенсивностью излучения, испускаемого возбужденными атомами среды. Они должны учитывать суммарный по объему вклад в скорости фотовозбуждения, и поэтому получается система интегродифференциальных уравнений относительно заселенностей рассматриваемых состояний атома. Подобные члены появляются в интегральном уравнении, которое позволяет найти распределение возбужденных атомов по слою под действием внешней радиации и (или) электронного удара в стационарном случае для двухуровневого атома [14, 15, 16]. Динамика изменения интенсивности прямого солнечного излучения описывается стационарным уравнением переноса. Производную по времени от интенсивности излучения считаем равной нулю из-за малости характерного времени распространения радиации в поглощающей среде по сравнению с характерным временем фотовозбуждения атомов. Это обстоятельство приводит к тому, что пространственное распределение интенсивности успевает установиться задолго до того момента, когда хоть сколько-нибудь заметно изменятся физические свойства поглощающей среды, которые могут повлиять на процесс распространения излучения.

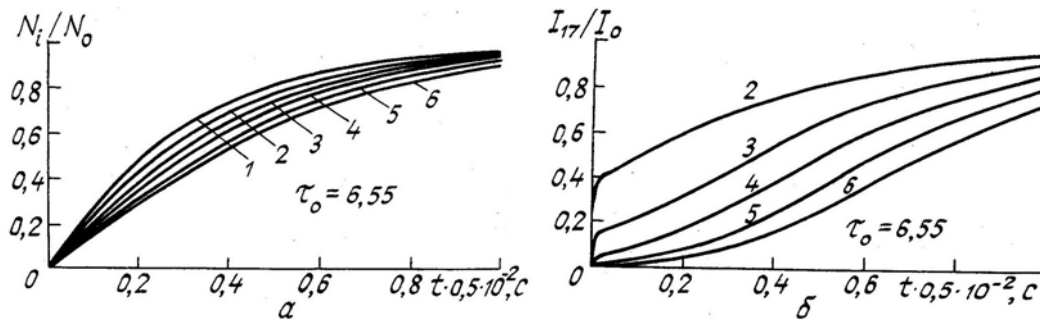


Рис. 2. Временной ход плотности ионов (*a*) и интенсивности излучения на центральной частоте доплеровского контура для резонансной линии с  $\lambda = 5535,48 \text{ \AA}$  (*б*) в различных точках среды  $x/L$ : 0,0—кривая 1; 0,2—2; 0,4—3; 0,6—4; 0,8—5 и 1,0—6

Полученная таким образом система уравнений имеет громоздкий вид и здесь не приводится. Она сводится к системе обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) относительно заселенностей уровней в заданном наборе точек по слою с помощью соответствующего выбора оптимальных кубатурных формул для интегрирования по угловой, частотной и пространственной переменным. Задача Коши для системы ОДУ решалась численными методами [17, 18].

Результаты расчетов показали, что динамика фотоионизации происходит неоднородно по слою (рис. 2, *a*). Это вызвано тем, что скорость фотовозбуждения на резонансном переходе уменьшается с глубиной, потому, что ослабевает интенсивность излучения из-за эффектов поглощения. Следовательно, характерное время фотоионизации для оптически плотных сред зависит от пространственной переменной  $x$ .

Временную зависимость концентрации электронов  $N_e(x, t)$  в заданной точке среды  $x$ , будем аппроксимировать выражением

$$\tilde{N}_e(x_i, t) = N_0 \left\{ 1 - \exp \left[ - \frac{t}{\tau_\phi(x_i)} \right] \right\}, \quad (10)$$

тогда из условия минимума среднеквадратической ошибки аппроксимации, описываемой функционалом

$$\hat{L}[\tau_\phi(x_i)] = \frac{1}{N_0^2} \sum_{j=1}^M [\tilde{N}_e(x_i, t_j) - N_e(x_i, t_j)]^2, \quad (11)$$

можем вычислить характерное время фотоионизации  $\tau_\phi(x_i)$ . Здесь  $t_j$  — момент времени, в котором значение концентрации электронов  $N_e(x_i, t)$  находится из численного решения исходной задачи,

$M$  — количество таких моментов времени. За характерное время ионизации слоя в целом с оптической толщиной  $\tau_0$  примем значение  $\tau_\phi(\tau_0)$ , которое получается при усреднении по пространственной переменной функции  $\tau_\phi(x)$  и вычисляется по формуле

$$\tau_\phi(\tau_0) = \frac{1}{L} \int_0^L \tau_\phi(x) dx \approx \frac{1}{(n-1)} \left\{ \frac{1}{2} [\tau_\phi(x_1) + \tau_\phi(x_n)] + \sum_{l=2}^{n-1} \tau_\phi(x_l) \right\}, \quad (12)$$

являющейся следствием использования правила трапеций при вычислении интеграла ( $L$  — толщина слоя,  $n$  — число узлов по пространственной переменной). На рис. 3 представлена зависимость времени ионизации  $\tau_\phi(\tau_0)$  от значения оптической толщины слоя  $\tau_0$ . Видно, что процесс ионизации плотных слоев замедляется по сравнению с оптически тонкими средами тем сильнее, чем больше их оптическая толщина. Так, например, для слоя с  $\tau_0 = 13,1$  время ионизации увеличивается на 49,2%.

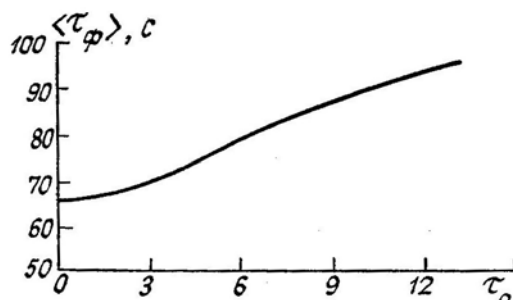


Рис. 3. Зависимость усредненного времени ионизации от оптической толщины слоя

Необходимо также отметить, что пространственная неоднородность наблюдается и в распределении атомов, находящихся во всех состояниях. Динамика изменения во времени интенсивности излучения на центральной частоте доплеровского контура в различных точках поглощающего слоя изображена на рис. 2, б. Рост интенсивности отмечается на всех частотах контура поглощения по мере развития ионизации излучением. Выделяются два качественно различных режима изменения интенсивности: первый с временным интервалом  $\approx 1$  с, который назовем «быстрым», и второй с плавной динамикой роста — «медленным». «Быстрый» режим — результат проявления процесса уменьшения плотности атомов в основном состоянии под действием фотовозбуждения, которое осуществляет быстрое перераспределение атомов между основным и метастабильными уровнями. Второй режим осуществляется уменьшением числа атомов в процессе фотоионизации. С его развитием происходит просветление поглощающего слоя, которое явно выражено на рис. 4, где приводится частотная зависимость выходящей интенсивности на различных этапах ионизации. Таким образом, описанные выше два режима изменения интенсивности являются качественно различными режимами просветления среды.

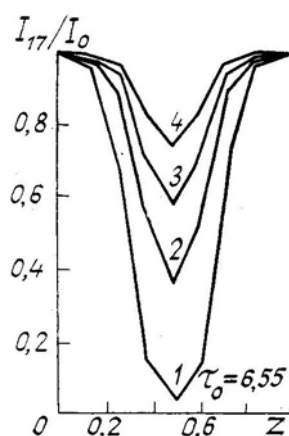


Рис. 4. Частотная зависимость интенсивности выходящего из слоя излучения в моменты времени  $t$ : 40 с — кривая 1; 80 с — 2; 160 с — 3; 200 с — 4 ( $z = (v - v_0) / \Delta v_D - 3,19$ )

В заключение отметим, что анализ фотоионизации паров бария в оптически тонком слое позволяет построить многоуровневую модель атома, описать качественную картину ионизации и получить количественную оценку характерного времени ионизации. Численное моделирование фотоионизации плотных образований в рамках многоуровневой модели атома показал, что процесс ионизации слоя в

целом замедляется по сравнению с оптически тонкими средами и происходит неоднородно по пространству. Наблюдаются также два различных режима просветления поглощающего слоя.

Пространственная неоднородность ионизации должна отразиться на динамике свечения слоя, но это — предмет будущих исследований, которыми намерены заняться авторы.

1. Forpl H., Haerendel G., Loidl J., Lust R. et al. //Planet. Space Sci. 1965. V. 13. P. 95.
2. Forpl H., Haerendel G., Hasel L., Loidl J. et al. //Planet. Space. Sci. 1967. V. 15. P. 307.
3. Drapatz S.W. //Planet. Space. Sci. 1972. V. 20. P. 663.
4. Rosenberg N.W., Best G.T. //J. Phys. Chem. 1971. V. 75. P. 1412.
5. Аношкин В.А., Жилинский А.П., Петров Г.Г., Рожанский В.А., Цендин Л.Д. //Геомагнетизм и аэрономия. 1979. Т. XIX. С. 1058.
6. Катасев Л.А., Куликова Н.В. //Труды института экспериментальной метеорологии. М.: Гидрометеоздат, 1978. Вып. 6 (74). С. 31.
7. Радциг А.А., Смирнов В.М. Справочник по атомной и молекулярной физике. М.: Атомиздат, 1980. 240 с.
8. Макарова Е.А., Харитоновна А.В. Распределение энергии в спектре Солнца и солнечная постоянная. М.: Наука, 1972. 288 с.
9. Бурлов-Васильев К.А., Гуртовенко Э.А., Троян В.И. //Кинематика и физика небесных тел. 1986. Т. 2. С. 3.
10. Собельман И.И. Введение в теорию атомных спектров. М.: Наука, 1977. 319 с.
11. Carlsten J.L., McIlrath T.J., Parkinson W.H. //J. Phys. B: Atom. Molec. 1974. V. 7. P. 1244.
12. Михалас Д. Звездные атмосферы. М.: Мир, 1982. Т. 1. 352 с.
13. Михалас Д. Звездные атмосферы. М.: Мир, 1982. Т. 2. 422 с.
14. Биберман Л.М. //ЖЭТФ. 1947. Т. 176. С. 416.
15. Биберман Л.М., Воробьев В.С., Якубов И.Т. Кинетика неравновесной низкотемпературной плазмы. М.: Наука, 1982. 375 с.
16. Булышев А.Е., Преображенский Н.Г., Суворов А.Е. //УФН. 1988. Т. 156. С. 153.
17. Бабушка И., Витасек Э., Прагер М. Численные процессы решения дифференциальных уравнений. М.: Мир, 1969. 368 с.
18. Современные численные методы решения обыкновенных дифференциальных уравнений /Под ред. Дж. Холла, Дж. Уатта. М.: Мир, 1979. 312 с.
19. Шапарев Н.Я., Шкедов И.М. Фотоионизация паров бария широкополосным излучением. Оптически тонкие среды. М., 1989. 34 с. Деп. В ВИНТИ 02.03.89. № 1428-В89.

ВЦ СО АН СССР, Красноярск

Поступила в редакцию  
6 августа 1991 г.

**N. Ya. Shaparev, I. M. Shkedov. The Ba Atoms Photoionization Dynamics by Solar Radiation.**

Some results of numerical simulation of photoionization of optically thin and thick layers of Ba vapor by solar radiation are presented. A multi-level model of the Ba atom has been constructed that allows one to describe the vapor photoionization dynamics allowing for the kinetics of singlet  $^1D_2$  and triplet  $^3D_{1,2,3}$  states population. It has been found that ionization of dense vapor is inhomogeneous with respect to the spatial variable due to the effects of incident radiation absorption by the layer, and that the effective time of layer's ionization is increased compared to that in an optically thin medium. Two modes of the vapor clearing-up for radiation with  $\lambda = 5535,48 \text{ \AA}$  have also been found, the first one is connected with populating metastable states, and the second one with the gas photoionization.