

Atomová fyzika plazmatu

- Označení nábojových stavů

Stupeň ionizace 0+, 1+, 2+, 3+, Z+

Atom Y YI, YII, YIII, YIV

Uhlík C (Z=6) CI, CII, CIII, CIV, CV, CVI, CVII

Izoelektronová C-podobný, B-p., Be-p., Li-p., He-p., vodíku-p., holé jádro

- Atomové stavy

- Základní stav

- Excitované stavy (resonanční stavy – jeden elektron z vnější podslupky excitován do vyšší podslupky)

- Autoionizační stavy (vázané stavy s energií vyšší než ionizační potenciál – elektron excitován z vnitřní slupky nebo víc excitovaných elektronů) – spontánní nezářivý přechod do kontinua je možný

- Jednotky – cgs jednotky → poloměr normalizován na Bohrov a_0

($a_0 = \hbar^2 / m e^2 = 0.529177 \times 10^{-8}$ cm) a energie v jednotkách Rydberg

1 Ry = 1 $R_\infty = e^2/2a_0 = 13.6058$ eV = 109737.3 cm⁻¹

Řešení Schrödingerovy rovnice

- Časově-nezávislá Schrödingerova rovnice

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

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

Vlnová funkce ψ_b je funkcí jednoelektronových stavů φ_i

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

Vlnová funkce musí být antisymetrická vzhledem k výměně libovolných 2 elektronů

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

Vlnové funkce musí být ortonormální

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

Atom (iont) s 1 elektronem

- Schrödingerova rovnice $H\varphi = E\varphi$

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

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

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

kde $n = 1, 2, \dots$ – hlavní kvantové číslo, $l = 0, 1, \dots, n-1$ charakterizuje orbitální úhlový moment, $m_l = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ je orientace orbitálního úhlového momentu a $m_s = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ je orientace spinového úhlového momentu

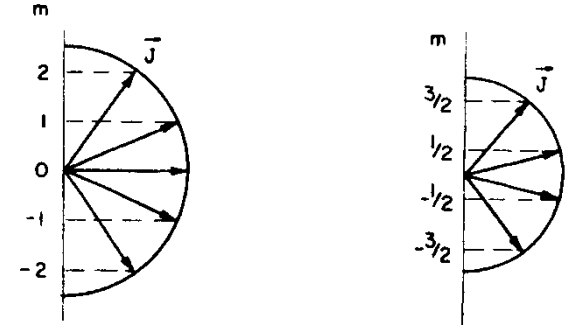
- Operátory úhlového momentu ($L^2, L_z, S^2, S_z, J^2, J_z$)

$$J^2 = J \cdot J = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2 - \text{vlastní hodnoty } j(j+1)\hbar^2 - j=0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$$

$$J_z - \text{vlastní hodnoty } m\hbar \quad (m = -j, -j+1, -j+2, \dots, j-1, j)$$

Orbitální a spinový úhlový moment

Semiklasický obrázek pro úhlové momenty $J = 2, 3/2$



- **Vlastní funkce** operátorů L^2, L_z orbitálního úhlového momentu

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

– Sférické harmoniky jsou ortonormální

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

Suma přes m – sféricky symetrická el. hustota

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

– Označení orbitálního úhlového momentu

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

- **Elektronový spin** – elektron má vnitřní úhl. mom. $j = 1/2$ (z komponenta $m_s = -1/2, 1/2$), vlastní funkce $\sigma_{m_s}(s_z) \equiv \delta_{m_s s_z}$ a

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

Radiální část vlnové funkce

- Radiální rovnice – vázaný stav $P_{nl}(0) = P_{nl}(\infty) = 0$

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

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

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

- Analytické řešení

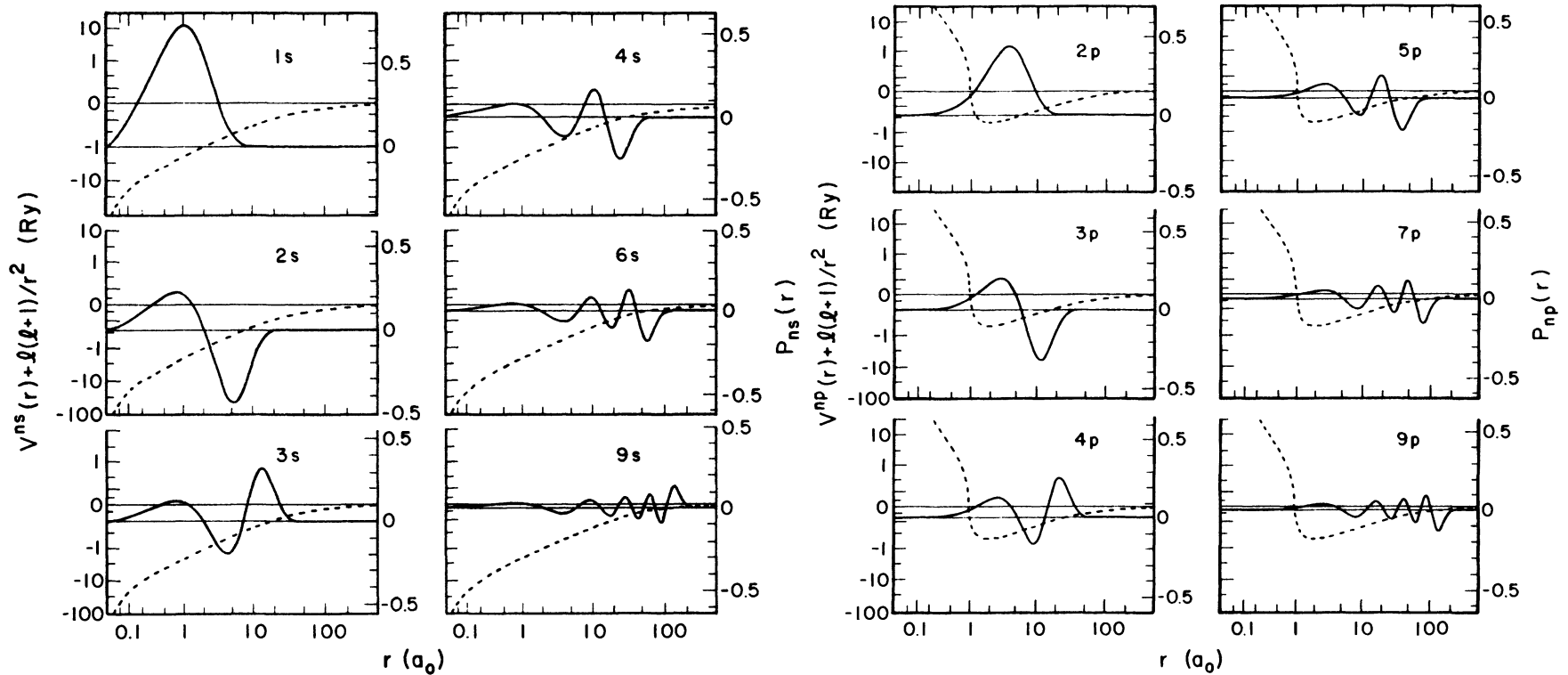
$$P_{nl}(r) = - \left[\frac{Z(n-l-1)!}{n^2[(n+l)!]^3} \right]^{1/2} \rho^{l+1} e^{-\rho/2} L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$$

kde asociovaný Laguerrov polynom je

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

použita fázová konvence $P_{nl}(r) > 0$, $r \rightarrow 0$

Radiální část vlnové funkce



Radiální vlnové funkce (plná čára) a efektivní potenciál (čárkovaná) pro nejnižší s and p stavy

- Počet uzlů (nul) je $n-l-1$, počet extrémů je $n-l$
- Pro atomy s více než 1 elektronem, potenciál V nemá žádný jednoduše vyjádřitelný tvar a nelze nalézt analytické řešení
- Numerické řešení – E je iterováno při zadaném počtu uzlů

Orbity a relativistické opravy

- Hamiltonián s relativistickými opravami

$$H = -\nabla^2 + V - \frac{\alpha^2}{4}(E - V)^2 - \frac{\alpha^2}{4}\left(\frac{dV}{dr}\right)\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\alpha^2}{2}\frac{1}{r}\left(\frac{dV}{dr}\right)(\mathbf{l}\cdot\mathbf{s})$$

kde konstanta jemné struktury $\alpha = \frac{e^2}{hc} = \frac{\hbar}{mca_0} = \frac{1}{137.036}$

- 3. člen – důsledek relativistické změny hmoty elektronů (hmotově-rychlostní člen)
- 4. je Darwinův člen – projev relativ. neurčitosti
- 5. je spin-orbitální člen – magnetická interakce spinového a orbitálního magnet. momentů

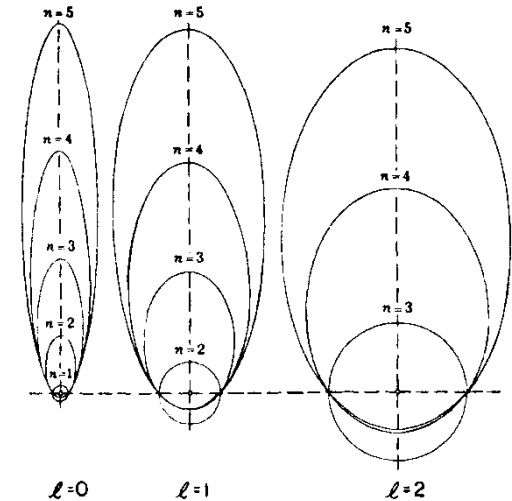
– Hmotově-rychlostní a Darwinův člen → pouze posuv energií hladin

– Spin-orbitální vazba vede k rozštěpení energetických hladin s $l \neq 0$

Operátor $\mathbf{l}\cdot\mathbf{s} = \frac{1}{2}(\mathbf{j}^2 - \mathbf{l}^2 - \mathbf{s}^2)$ - vlastní hodnoty $\chi \equiv \frac{1}{2}[j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)]$

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

kde $[\] = l$ pro $j = l + 1/2$ a $[\] = -(l+1)$ pro $j = l - 1/2$



Eliptické Bohr-Sommerfeldovy orbity pro vodíkový atom

Komplexní atomy

- Hamiltonián

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

(hmotově-rychlostní a Darwinův člen – jen posuv energie po vyřešení)

- Řešení je lineární kombinací Ψ_b

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

- Systém lineárních rovnic je řešen (M bázových funkcí)

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

- Bázové funkce skládány z 1-částicových vlnových funkcí - antisymetrická

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

- Bázové funkce – vlastní funkce celkového J^2 and J_z $\mathbf{J} = \sum_{i=1}^N (l_i + s_i)$

- Ekvivalentní elektrony mají stejná $nl - w$ elektronů v podslupce $(nl)^w$

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

- Příklad Ne I $1s^2 2s^2 2p^5 3s$ obvykle značeno Ne I $2p^5 3s$ (uzavřené vynechány)

Detailní struktura energetických hladin

- Nejdříve – radiální vlnové funkce a střední energie konfigurace
- Potom rozštěpení energií uvnitř jedné konfigurace (způsobené vazbou úhlových momentů)

- Vazba 2 úhlových momentů j_1, m_1 and j_2, m_2 , svázaná funkce

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

je vlastní funkce 4 operátorů $J_1^2, J_2^2, J^2 = (J_1 + J_2)^2, J_z = J_{1z} + J_{2z}$

$C()$ jsou Glebsch-Gordonovy koeficienty

- Vazba 3 úhlových momentů ještě komplikovanější (není asociativní)

- Schémata vazeb

- **LS** vazba (coulombovské odpuzování \gg spin-orbitální interakce)

základní rozštěpení podle $\mathbf{L} = \sum_i \mathbf{l}_i$ a $\mathbf{S} = \sum_i \mathbf{s}_i$, potom \mathbf{L} a \mathbf{S}

jsou svázány $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ aby vytvořily vlastní funkce \mathbf{J}^2, J_z

označení $^{2S+1}L_J - 2S+1$ – násobnost, o – lichá parita, např. $^2P_{1/2}$

- **jj** vazba (pro vysoká Z spin-orbitální interakce \gg Coulombovo odpuzení)

$\mathbf{l}_i + \mathbf{s}_i = \mathbf{j}_i$ \mathbf{J} a \mathbf{M} – suma \mathbf{j}_i – pro 2 elektrony $[(l_1, s_1)j_1, (l_2, s_2)j_2]JM$

- Další schémata vazeb (**LK**, **JK**), smíšená vazba

Schémata energetických hladin

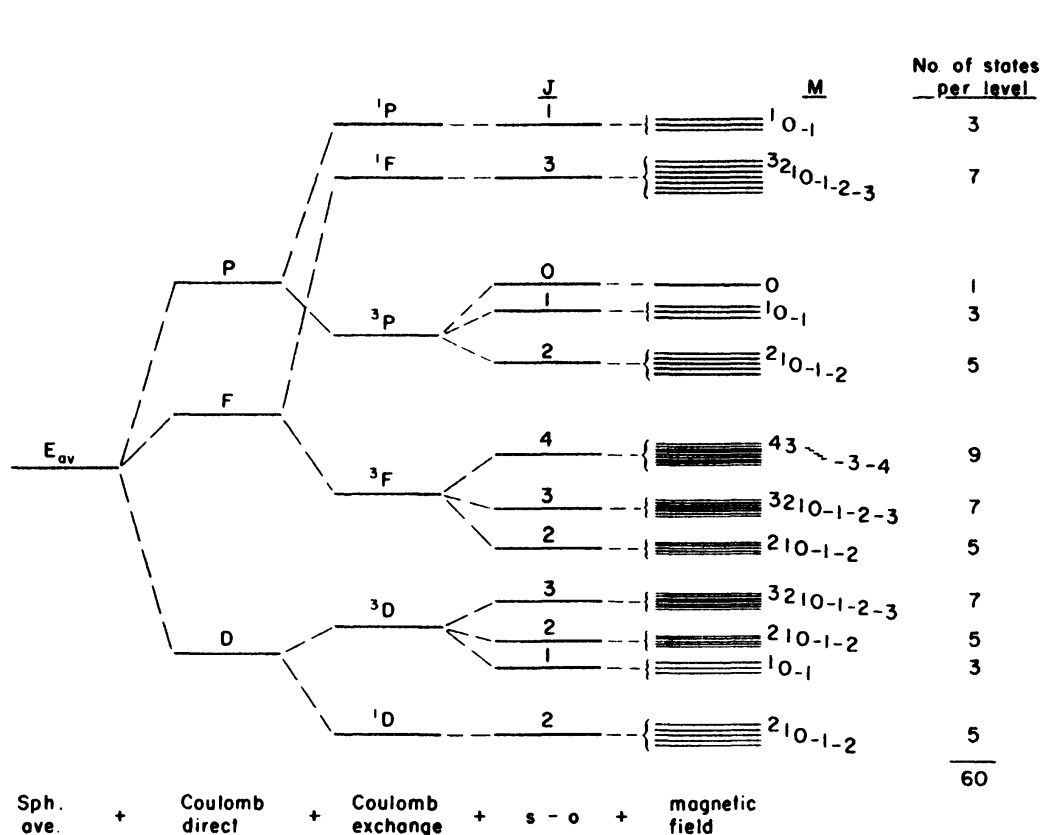


Schéma rozštěpení energetických hladin *pd* konfigurace za podmínek **LS** vazba začínající od středované E_{av} a pak postupně přidávající velkou Coulombovu interakci, spin-orbitální interakci a nakonec vnější magnetické pole

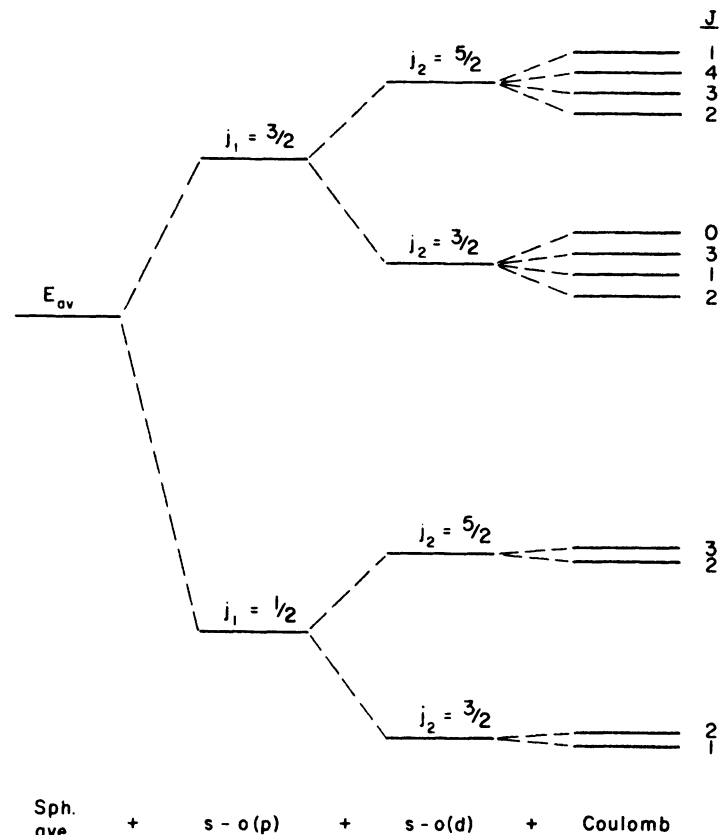


Schéma energetický hladin *pd* konfigurace za podmínek **jj** vazby, 2 silné spin-orbitální interakce vedou ke 4 energiím; malé rozštěpení v důsledku Coulombova odpuzování

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

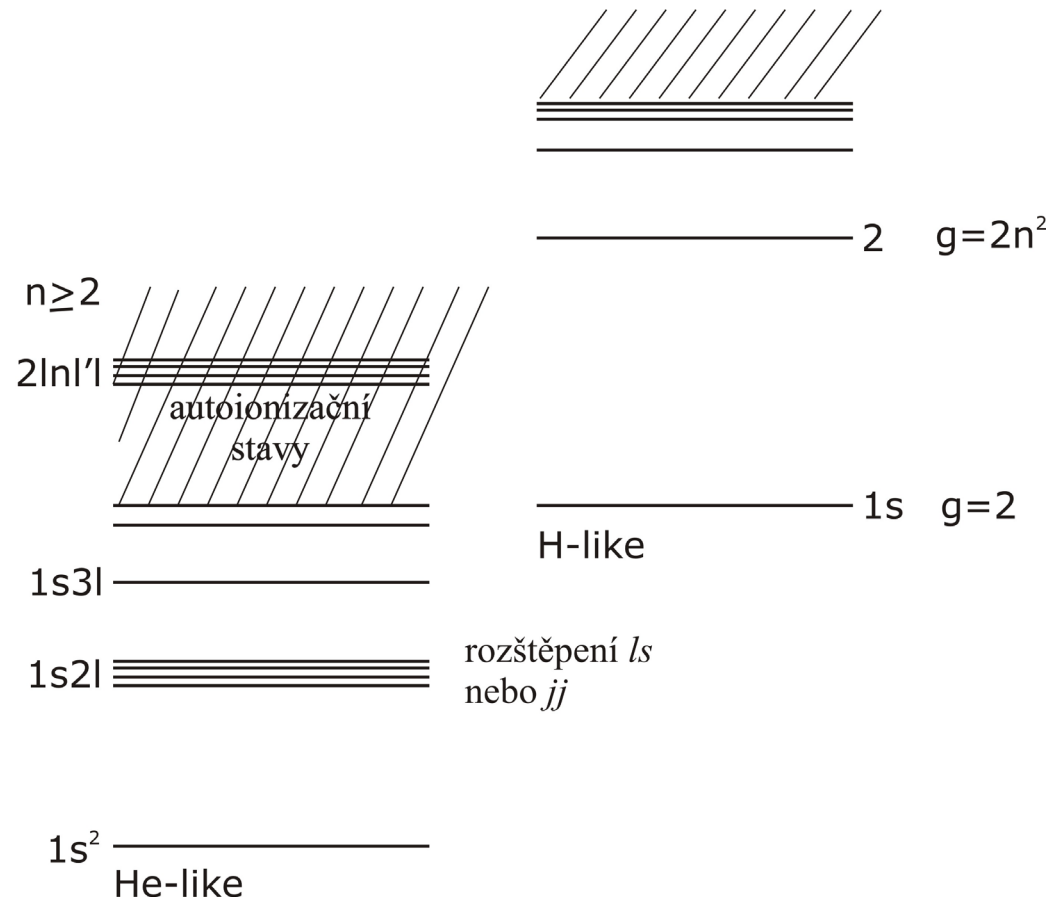
$1s2s^3S$ $L=0$ $S=1$ $g=3$

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

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

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

Relativistické jevy u vysokých $Z \Rightarrow jj$ vazba méně omezení na 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 ≤ 30 hladin

L-slupka – Li- až Ne-like Li-like ≤ 30 hladin další ≥ 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 α

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

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

- **srážková excitace (deexcitace)**

$i^{(k)} + e \rightleftharpoons i^{(l)} + e$ $\varepsilon_{kl} = \varepsilon_l - \varepsilon_k$ $\varepsilon \geq \varepsilon_{kl}$... 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)

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

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

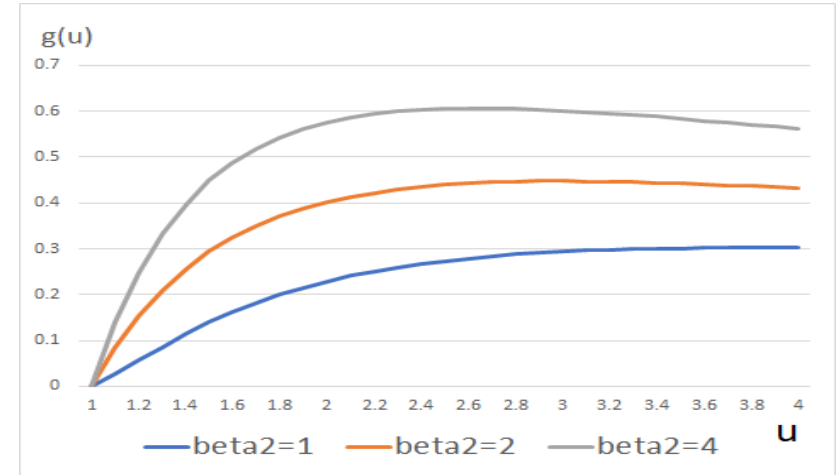
maximum g pro $u \sim 2-4$; pro velká u je proces málo pravděpodobný, β_1, β_2 konstanty řádu 1

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

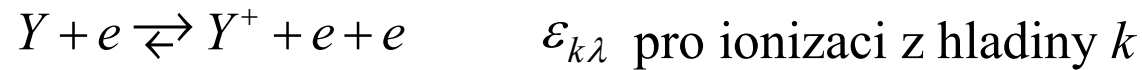
$$a_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{m_e e^2} = 5,3 \times 10^{-11} \text{ m} \quad \text{Bohrův poloměr (poloměr 1. vodíkového orbitu)}$$

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 radiační 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 ν mění Dopplerovým jevem, v klidové soustavě $Q_\nu(\nu, \vec{\Omega})$)

Fotoexcitace $k \rightarrow l$ $Q_\nu^{(k \rightarrow l)} = \frac{e^2}{4\epsilon_0 m_e c} f_{kl} \Phi(\nu)$

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

Rovnováha pro absolutně černé těleso \Rightarrow vztahy mezi Einsteinovými koeficienty

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

(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 radiační 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 Maxwelllovské 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

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

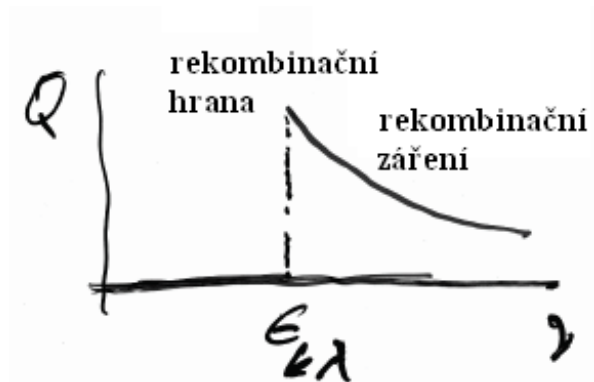
koeficient závislý na iontu a hladině g_{bf} (Gauntův faktor)

- **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 $\frac{P_k^{fb}}{P^{ff}} = \frac{2\varepsilon_{k\lambda} / k}{k_B T_e}$ (pro H atom k hlavní kvant. číslo)

pro srážkovou absorpci fotonu na iontu je $Q_\nu \sim \frac{n_e Z^2 \bar{g}_{ff}}{\nu^3 v_{Te}}$



Transport záření

l - dráha podle paprsku \rightarrow

pro $\nu \gg \frac{\omega_p}{2\pi}$ $v_g \approx c$ $\varepsilon_r \approx 1$

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

(j_ν, k_ν mohou záviset na $\vec{\Omega}$, např. v důsledku makroskopického pohybu prostředí)

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 => VLIV záření na populace

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 ΔI – často se používá předpoklad, že stavy s energií

$\varepsilon_k > I - \Delta I$ nejsou vůbec vázané při $T_e \ll \varepsilon_2$ je pak $Z(T) \approx g_1$

- Rovnováha mezi ionizačními stavy (chemická rovnováha – Sahaova rovnice)
rovnováha mezi k -tou hladinou neutrálního atomu a základní hladinou jednonásobného

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

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.

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

- Elektronů (a iontů) mají Maxwellovo 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 tříčasticové 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)