

трудник лаборатории водной экологии **Котовщиков А.В.**, e-mail: kotovschik@iwep.asu.ru - Институт водных и экологических проблем СО РАН (Барнаул);

магистрант кафедры геоэкологии и природопользования Акулова О.Б., e-mail: Akulova8282@mail.ru.- Алтайский государственный университет (Барнаул)

УДК: 539.183.5

О ШИРИНЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ

В. А. Попов, П. Ю. Гуляев, Б. В. Семкин

Предложен метод описания экспериментально наблюдаемых уширений спектральных линий. Показано, что в рамках решения единой спектральной задачи, учитывающей ширину спектральных линий, можно описать и кинетические свойства электронов в атомах, кластерах и металлах.

Ключевые слова: ширина спектральных линий, моделирование, электронные возбуждения

Введение

Экспериментальные данные показывают, что во всех случаях атомы и молекулы при переходе из возбужденного состояния в основное испускают целый спектр частот. Причем каждая спектральная линия имеет вполне определенную форму и ширину. Ширина спектральной линии и форма линии зависят как от строения атомов и молекул, так и от внешних воздействий на эти частицы. Даже в том случае, когда на атомы или молекулы не действуют внешние силы, спектральные линии имеют конечную ширину, неустранимую никакими способами. Эта ширина Γ обусловлена соотношением неопределенностей Гейзенберга: $\Gamma \tau \sim \hbar$, где Γ – неопределенность уровня с энергией E , τ – время жизни частицы на этом уровне, \hbar – постоянная Планка.

Если же атомы или молекулы сталкиваются между собой в процессе теплового хаотического движения, то их энергетические состояния могут изменяться, что приводит к еще большему уширению спектральных линий. Частота излучения при этом будет зависеть еще и от величины и направления скорости движения частиц относительно приемника излучения. Хаотичность теплового движения приводит к тому, что вместо одной частоты, соответствующей идеальному случаю для неподвижных частиц, приемник воспринимает более широкий спектр частот.

Воздействие постоянных магнитных и электрических полей на атомы или молекулы приводит к сдвигу их энергетических уровней и расщеплению на несколько подуровней. Причем каждый из подуровней обладает своей шириной. Перекрываясь, они образуют спектральную линию большей ширины. При воздействии на атомы или молекулы электромагнитной волной с частотой, равной частоте квантового перехода, наблюдается ре-

зонансное поглощение, если населенность нижнего уровня перехода больше, чем населенность верхнего уровня, и вынужденное излучение, если верхний уровень населен больше, чем нижний. Отмеченное насыщение спектральной линии сопровождается увеличением амплитуды волны, что приводит к уширению этой спектральной линии.

Отметим, что в кристаллах, в отличие от атомов и молекул, уширение спектральных линий происходит за счет колебаний кристаллической решетки, сильно зависит от нарушений периодической структуры, от примесей, вакансий и других дефектов.

В работе поставлена задача: в рамках единого подхода *ab initio* описать весь спектр испускания и поглощения атомов, молекул и кристаллов с учетом ширины спектральных линий. Отметим, что идея учитывать ширину энергетических уровней впервые предложена в [1] при вычислении возбужденных волновых функций в атоме водорода. Затем эта идея была использована для описания возбуждений в многоэлектронных атомах [2], в кластерах [3].

Метод исследования

Рассмотрим сначала стандартное решение спектральной задачи основного состояния многоэлектронного атома:

$$\mathbf{H}\psi = E\psi \quad (1)$$

Аппроксимация центрального поля позволяет разделить радиальные переменные и угловые, а собственные функции ψ оператора энергии \mathbf{H} искать в виде произведения радиальной функции $R(r)$ на угловую $Y(\theta, \varphi)$:

$$\psi = R(r)Y(\theta, \varphi), \quad (2)$$

причем угловая часть удовлетворяет следующим уравнению:

$$-\Delta Y(\theta, \varphi) = l(l+1)Y(\theta, \varphi). \quad (3)$$

РАЗДЕЛ I. ТРУДЫ УЧЕНЫХ АЛТАЙСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

Здесь Δ – сферическая часть оператора Лапласа, а l принимает любые значения в комплексной области. Если потребовать, чтобы решения уравнений (3) были регулярны на сфере при $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, непрерывны при $\theta = 0$, $\theta = \pi$ и удовлетворяли условию $Y(\theta, \varphi + 2\pi) = Y(\theta, \varphi)$, то мы приходим к проблеме собственных значений, допускающей решения только при целых значениях $l = 0, 1, 2, \dots$ и $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$.

Перейдём к рассмотрению возбуждённых состояний атома. Такие возбуждения, способные спонтанно распасться за конечное время τ , и, согласно соотношению неопределённостей $\Gamma \sim \hbar/\tau$, обладают конечной шириной энергетического уровня, характеризующего квазистационарную систему. Волновая функция, описывающая эту систему, должна содержать такой экспоненциальный множитель, чтобы все вероятности, определяющиеся квадратом модуля волновой функции, затухали по закону $\exp(-\Gamma t/\hbar)$:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \psi(\mathbf{r}) \exp\left\{-i\left(E - \frac{i\Gamma}{2}\right)\frac{t}{\hbar}\right\}. \quad (4)$$

Будем считать, что для описания возбуждений аппроксимация центрального поля оправдана в той же степени, в какой она оправдана для описания незаполненных оболочек основного состояния. Тогда функцию $\psi(r)$, стоящую в правой части равенства (4), удобно искать в виде (2). Более того, пусть угловая функция $Y(\theta, \varphi)$ удовлетворяет тем же уравнениям (3), но регулярна только по φ . Произвольное поведение этой функции на сфере по переменной θ снимает ограничение на целочисленные значения параметра l . Будем считать его, в общем случае, комплексным: $l = l + iy$, где l , как и прежде, пусть пробегает целочисленные значения, тогда область изменения комплексной добавки $x + iy$ может быть ограничена $|x| < 0.5$ и $|y| < 0.5$. Таким образом, задача отыскания спектра орбитальных возбуждений атома может быть сведена к проблеме собственных значений стационарного уравнения Шредингера:

$$\left(\mathbf{H} + \frac{\hbar^2}{2m} \frac{u + iv}{r^2}\right)\psi = \varepsilon\psi. \quad (5)$$

Здесь \mathbf{H} – оператор энергии для атома в основном состоянии, $u = x(x+2l+1) - y^2$, $v = y(2x+2l+1)$. Заметим, что при $y \neq 0$ задача (5) является существенно неэрмитовой с комплексными значениями $\varepsilon = E - i\Gamma/2$. Перебирая все возможные значения $|x| < 0.5$ и $|y| < 0.5$ в процессе поиска самосогласованных решений уравнений (5) можно проследить по ми-

нимуму полной энергии возбуждённого атома за его спектральными характеристиками, обусловленными орбитальными переходами электронов.

В дальнейшем будем пользоваться атомной системой единиц. Для перехода к этой системе единиц достаточно считать, что во всех используемых здесь соотношениях постоянная Планка $\hbar = 1$, квадрат заряда электрона $e^2 = 2$, масса электрона $m = 1/2$. Тогда энергия будет измеряться в Ридбергах, а расстояние – в боровских радиусах.

Результаты и обсуждение

Задачу (5) мы решали численно в базисе функций гауссового типа, используя девять функций в разложении по $l = 0$ и девять функций – в разложении по $l = 1$. Оценки показали, что базис такой длины вполне пригоден при решении уравнений (5) методом Рунта для атома лития, если $|x| < 0.5$ и $|y| < 0.5$, т.к. увеличение длины этого базиса не меняет требуемой точности всех значений, приведенных ниже для обсуждения.

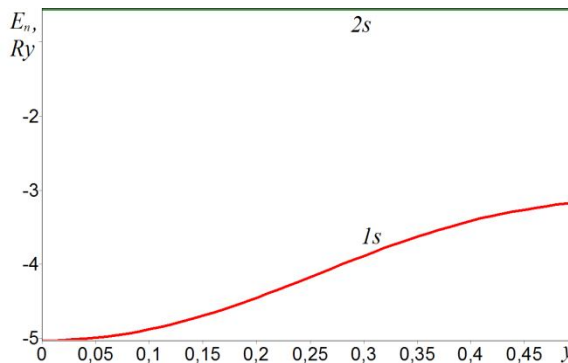


Рисунок 1 – Зависимость действительных частей одноэлектронных энергий атома лития от параметра y при $x=0$.

Результаты самосогласованных вычислений, в том числе и приведенные на рисунке 1, показывают, что действительные части одноэлектронных энергий внешних состояний $2s$ -, $2p$ -, $3s$ -, ... -симметрии в атоме практически не меняются с изменением параметра y от 0 до 0,5. Возрастание энергии одноэлектронного состояния $1s$ -симметрии с увеличением y мы трактуем как коллапс спектра – явление, интенсивно обсуждаемое в научной литературе. Мнимая часть полной энергии атома (заметим, что модуль этой величины есть вероятность распада возбуждения в единицу времени) как функция параметра y для $x=0$ изображена на рисунке 2. Отметим, что зависимости, приведенные на рисунке 1 и на рисунке 2, слабо меняются с изменением

О ШИРИНЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ

параметра x , в отличие от изменений полной энергии.

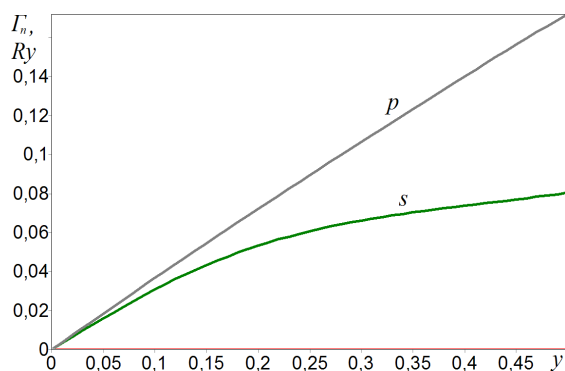


Рисунок 2 – Зависимость мнимых частей одноэлектронных энергий атома лития от параметра y при $x=0$.

Зависимости действительных частей полных энергий атома лития от параметра y при $x=-0,08; -0,04; 0,00; 0,04; 0,08$ приведены на рисунке 3.

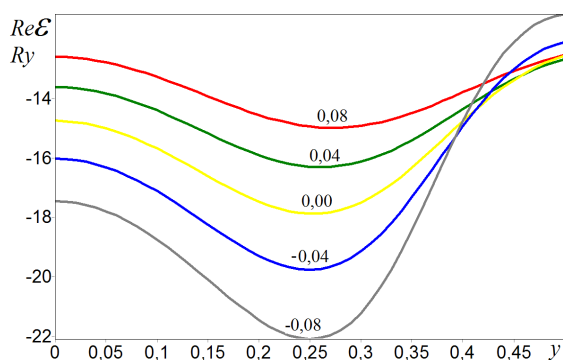


Рисунок 3 – Зависимости действительных частей полных энергий атома лития от параметра y при $x=-0,08; -0,04; 0,00; 0,04; 0,08$.

Результаты расчетов показывают, что существует область возбужденных состояний атома с энергиями, значительно меньшими энергии основного состояния, равной $-14,86Ry$. Большая часть этих возбуждений являются короткоживущими. Наибольший же интерес представляют долгоживущие возбуждения с мнимой частью полной энергии, обращаемой в нуль. Такие состояния можно обнаружить на рисунке 4 в области изменения параметра y от 0,3 до 0,5.

Отметим, что оказать столь интенсивное воздействие на атом, соответствующее значениям $y > 0,3$, скорее всего, нереально. Практически используемые поля воздействия на атом предполагают изменение параметра y до тысячных, в крайнем случае, до сотых долей единицы. Тем не менее, получить стабильное возбуждение можно, если, напри-

мер, поместить такой атом в поле, созданное другим атомом.

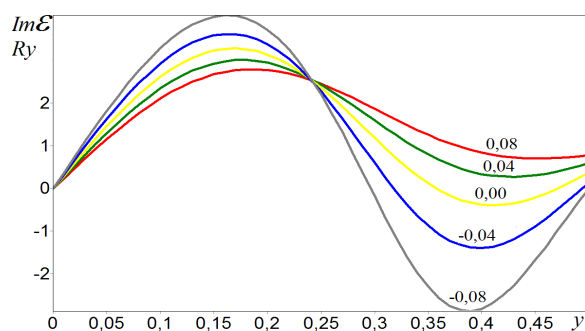


Рисунок 4 – Зависимости мнимых частей полных энергий атома лития от параметра y при $x=-0,08; -0,04; 0,00; 0,04; 0,08$.

Для проверки этого предположения мы вычислили полную энергию двух атомов лития как функцию расстояния между ними при небольших значениях параметра $y=0, 2 \cdot 10^{-5}, 4 \cdot 10^{-5}, 6 \cdot 10^{-5}, 8 \cdot 10^{-5}$ и $x=0$. Результаты расчетов, представленные на рисунке 5, показывают, что зависимости действительных частей полных энергий системы двух атомов от d – расстояния между ними практически совпадают при всех выше указанных значениях y .

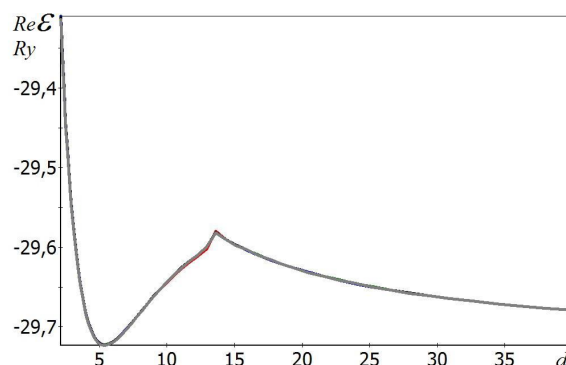


Рисунок 5 – Зависимость действительных частей полных энергий двух атомов лития в зависимости от d - расстояния между ними в борвских радиусах. Здесь, все линии при $x=0$ и $y=0, 2 \cdot 10^{-5}, 4 \cdot 10^{-5}, 6 \cdot 10^{-5}, 8 \cdot 10^{-5}$ практически совпадают.

Совместное существование двух атомов лития при больших расстояниях между ними вплоть до 13 борвских радиусов оказывается энергетически не выгодным. Но на пике зависимости действительной части полной энергии от d при расстоянии между атомами, равном 13 борвским радиусам, происходит перестройка электронной структуры, а именно снятие вырождения состояний $1s$ -симметрии.

Мнимая часть полной энергии при этом обращается в нуль (см. рисунок 6). Таким образом, указанное состояние при расстоянии

РАЗДЕЛ I. ТРУДЫ УЧЕНЫХ АЛТАЙСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО ТЕХНИЧЕСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

между атомами, равном 13 боровским радиусам, является долгоживущим, пока система двух атомов лития находится в поле внешнего воздействия.

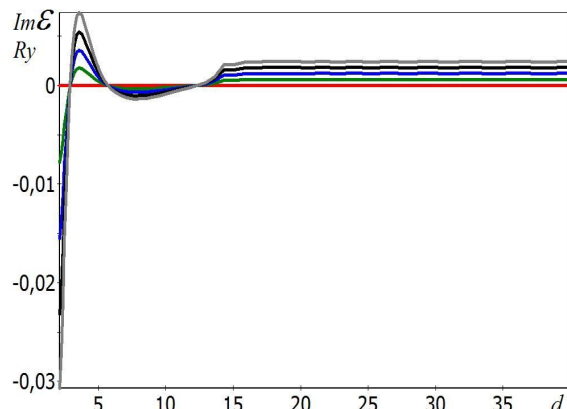


Рисунок 6 – Зависимость мнимых частей полных энергий двух атомов лития в зависимости от d -расстояния между ними при $x=0$ и $y=0$, $2 \cdot 10^{-5}$, $4 \cdot 10^{-5}$, $6 \cdot 10^{-5}$, $8 \cdot 10^{-5}$. Здесь, линия с большим отклонением от нуля соответствует большему значению параметра y .

Другое долгоживущее состояние приходится на расстояние между атомами, равное 5,8 боровских радиусов (см. рисунок 6), соответствующее при этом минимуму действительной части полной энергии системы двух атомов (см. рисунок 5). Указанное состояние является стабильным, а расстояние между атомами соответствует экспериментально наблюдаемому значению.

Мнимая часть полной энергии обращается в нуль и при расстоянии между атомами около трех боровских радиусов (см. рисунок 6). Действительная часть полной энергии при этом достигает достаточно больших значений (см. рисунок 5). В принципе и это долгоживущее возбуждение реализуемо.

Полученные нами данные позволяют предполагать, что если интересующий нас атом поместить в поле двух, трех, или большего числа атомов, то может образоваться кластер, стабильный по энергии и с продолжительным временем жизни при примерно таких же расстояниях между атомами. Для проверки этого предположения мы вычислили полную энергию трех и четырех атомов лития как функцию расстояния между ними при $x=0$ и еще меньших значениях параметра $y=0$, $2 \cdot 10^{-6}$, $4 \cdot 10^{-6}$, $6 \cdot 10^{-6}$, $8 \cdot 10^{-6}$. Результаты расчетов показывают, что действительная часть полной энергии качественно ведет себя так же, как и для двух атомов. Мнимая часть полной энергии электронов обращается в нуль при таких же значениях расстояний ме-

жду атомами, что и в системе двух атомов лития.

Применение этого метода для описания возбуждений в кристаллах позволяет утверждать, что действительная часть спектра и плотность состояний практически не меняется, если $|y| < 0.05$ при $x=0$. Наибольший же интерес представляет мнимая часть спектра, в соответствии с соотношением неопределенностей обратно пропорциональная времени распада каждого возбуждения. Плотности состояний (в единицах: число состояний/Ry) мнимой части спектра для наинижней полосы при значениях параметров $x=0$; $y=0.01$, 0.02 , 0.03 , 0.04 , 0.05 приведены на рисунке 7.

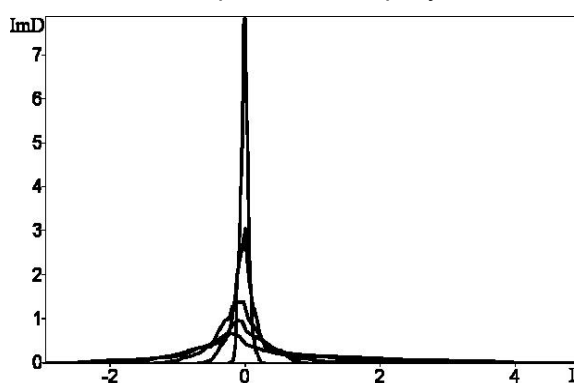


Рисунок 7 – Плотность состояний мнимой части спектра наинижней полосы при значениях параметров $x=0$; $y=0.01$, 0.02 , 0.03 , 0.04 , 0.05 .

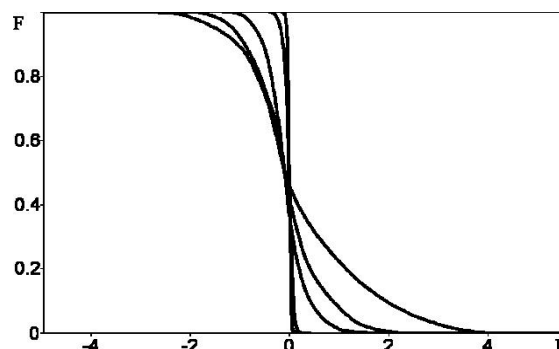


Рисунок 8 – Функция распределения при значениях параметров $x=0$; $y=0.01$, 0.02 , 0.03 , 0.04 , 0.05 .

Здесь чем больше значение параметра возмущения y , тем ниже положение пика. Полученные зависимости являются производными по мнимой части энергии от функции распределения и имеют смысл числа возбужденных состояний в единичном интервале Γ – ширины размытия энергетического уровня. Они имеют δ -образный вид и очень похожи на производные от равновесной функции распределения Ферми-Дирака. Результат интегрирования дает функцию распределения, представленную на рисунке 8,

ПОЛЗУНОВСКИЙ ВЕСТНИК № 2/1, 2012

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ И РАСЧЁТ ВЕСА ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ВОСОПЛАМЕНИТЕЛЯ ДЛЯ АРТИЛЛЕРИЙСКОГО ЗАРЯДА

незначительно отличающуюся от функции распределения Ферми-Дирака.

Заключение

Предложен метод количественного описания возбужденных состояний электронов многоатомных систем с учетом ширины энергетических уровней. Показано, что атом лития, помещенный в поле большой интенсивности, сравнимое с интенсивностью поля в самом атоме, может перейти в возбужденное состояние с полной энергией, меньшей энергии основного состояния, и пребывать в таком состоянии неограниченно долго. Обнаружены неограниченно долго живущие возбуждения в двух-, трех- и четырехатомных кластерах в полях реально достижимых интенсивностей при расстояниях между атомами вблизи 3, 6 и 13 боровских радиусов. Состояния кластеров с расстояниями между атомами вблизи 6 боровских радиусов обладают наименьшими значениями действительной части полной энергии. Они стабильны и при отсутствии внешних возбуждений. Другие состояния кластеров с расстояниями между атомами вблизи 3 и 13 боровских радиусов также обладают неограниченно большим временем жизни, но только в условиях внешних воздействий. На примере металлического лития показано, что в рамках зонной теории

можно вычислить и функцию распределения электронов, следовательно, проводить описание и кинетических свойств материала. При этом не суть важно, каким является это возбуждение: тепловым, электромагнитным, вакуационным, примесным, или вызвано другим нарушением строгой периодичности кристаллической решетки.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Янавичус, А. Водородные волновые функции, учитывающие ширину уровня // А. Янавичус, В. Шучуров. - Литовский физический сборник. - 1968, т. 8, №1-2. С. 47-51.
2. Попов, А.В. Решение спектральной задачи для электронов в атоме, учитывающей ширину энергетических уровней // А.В. Попов. - Оптика и спектроскопия. - 2002, т. 93, №1. С. 5-7.
3. Попов, А.В. Конденсат возбужденных состояний в бериллии // А.В. Попов. - ФТТ. - 2008, т. 50, №8. С.1530-1534.

Д.ф.-м.н., проф. В.В. Попов - Алтайский Государственный технический университет, кафедра общей физики, pva379@mail.ru, (385-2)29-08-52; д.т.н., проф. П. Ю. Гуляев - Югорский государственный университет, кафедра физики, templog858@ntsru.info, (2367) 35-75-95; д.ф.-м.н., проф. Б.В. Семкин - Алтайский Государственный технический университет, кафедра естествознания и системного анализа, (385-2)29-09-66.

УДК: 531.571 + 531.57

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВОСПЛАМЕНЕНИЯ И РАСЧЁТ ВЕСА ДОПОЛНИТЕЛЬНОГО ВОСОПЛАМЕНИТЕЛЯ ДЛЯ АРТИЛЛЕРИЙСКОГО ЗАРЯДА

Леонов Г.Н.

Рассмотрены физические процессы при воспламенении артиллерийских зарядов. Для отечественного дымного пороха приведено стехиометрическое соотношение для его горения. На основе решения сопряжённой задачи теплопроводности приведена методика оценочного расчёта веса дополнительного воспламенителя.

Ключевые слова: артиллерийский заряд, дополнительный воспламенитель, дымный ружейный порох, продукты горения, кондуктивно-очаговое зажжение

При делении арт.выстрела на периоды первым периодом является так называемый предварительный период. Он длится от начала срабатывания капсюля воспламенителя и воспламенения основного заряда до момента начала движения снаряда, т.е. до момента форсирования. При баллистическом проектировании арт.выстрела рассчитывается форма, размеры (сгорающий свод) и вес

заряда. Давление форсирования, как правило, задается по соображениям последующего согласования с экспериментальными данными отстрела. Все, что связано в предварительном периоде с воспламенением, зачастую определяется весьма приближенно. Поэтому итоговая доработка выстрела во многом определяется экспериментальной отработкой, т.е. стрельбами. При этом исходят из