

MAX-PLANCK-INSTITUT FÜR QUANTENOPTIK

**Berechnung frequenzabhängiger Opazitäten
für Hoch-Z Plasma mit l-Aufspaltung**

ALEXANDER RICKERT

Berichtigung

	lies:	statt:
S. 7, Formel II.4	σ_{mn}	σ_{nm}
S. 8, Formel II.8	$(\frac{m}{n})^5$	$(\frac{m}{n})$
S. 8, Formel II.9	$Z_m^2/2m^2$	$Z_m^2/2n^2$
S. 9, Formel II.10	$+\frac{Z_n}{n^2}$	$-\frac{Z_n}{n^2}$
S. 11	[19]	[18]
S. 12	[20]	[19]
S. 34, 1. Z. v. o.	Ionensphärenmodells	Ionenspärenmodells
S. 35, Formel III.14	2.795	2.776
S. 37, 5. Z. v. o.	$+\frac{Z_n}{n^2}$	$-\frac{Z_n}{n^2}$
S. 37, 6. Z. v. o.	σ_{mn}	σ_{nm}
S. 41.	$KI = 0$	KI
S. 81, Formel B.3d	$(2l + 1 + t)!$	$(2l + 1 = t)!$

MAX-PLANCK-INSTITUT FÜR QUANTENOPTIK

Berechnung frequenzabhängiger Opazitäten für Hoch-Z Plasma mit l-Aufspaltung

ALEXANDER RICKERT

Dieser MPQ-Bericht ist als Manuskript des Autors gedruckt
Alle Rechte vorbehalten

This MPQ-report has been printed as author's manuscript
All rights reserved

Max-Planck-Institut für Quantenoptik
8046 GARCHING bei MÜNCHEN, Bundesrepublik Deutschland

ABSTRACT

Frequency dependent opacities for high-Z materials are calculated taking into account splitting of energy levels with the orbital quantum number l . We use a model which enables us to create opacity tables with acceptable costs in computing time. These tables are needed for numerical simulations of radiation transport in high-Z plasmas. At present they are not available in the published literature.

The energy levels are calculated with the help of the screened hydrogenic model with l -splitting. We determine the oscillator strengths for bound-bound and bound-free transitions in the hydrogenic approximation using hydrogenic wave functions with two *different* screened nuclear charges. It is assumed that the conditions of LTE are fulfilled and therefore the electrons are distributed among the various energy levels according to Fermi-Dirac statistics. Continuum lowering and pressure ionization are taken into account and the degeneracy parameter is calculated selfconsistently.

We discuss the cross sections for the relevant absorption processes, their corrections for the case of high density, and the extinction coefficient. The change in the extinction coefficient by taking into consideration l -splitting is illustrated for a gold plasma. With l -splitting the frequency dependent opacities have more structure, and more absorption at lower photon energies (50–500 eV) takes place. We expect that these alterations will reduce the discrepancy between measured and simulated spectra, which was observed by various laser plasma groups; a realistic simulation with a radiation hydrodynamics code using the new frequency dependent opacities has not yet been performed. However, a comparison between a measured emission spectrum from a laser irradiated gold foil and the calculated emission spectrum by means of the frequency dependent opacities of this work and the assumption of uniform density and temperature is given and already indicates considerable improvement.

We also average the extinction coefficients to obtain Rosseland and Planck mean opacities in order to compare them with the data contained in the SESAME opacity library and find satisfactory agreement.

INHALTSVERZEICHNIS

Verzeichnis der Abbildungen	V
Verzeichnis der Tabellen	VIII
I. Einleitung	1
II. Atomphysikalische Grundlagen	5
II.1. Das Modell des abgeschirmten Wasserstoffatoms (SHM)	5
II.1.1. SHM ohne l -Aufspaltung	6
II.1.2. SHM mit l -Aufspaltung (SHML)	8
II.2. Ionisationspotentiale	10
II.3. Oszillatorstärken	13
II.3.1. Oszillatorstärke für Photoanregung	14
II.3.2. Oszillatorstärke für Photoionisation	16
II.4. Die Wasserstoffnäherung für Oszillatorstärken	17
III. Das statistische Modell	31
III.1. Lokales thermodynamisches Gleichgewicht (LTE)	31
III.2. Das Modell des gemittelten Atoms (Average Atom Model)	31
III.3. Lösung des Gleichungssystems	38
III.4. Ergebnisse für Aluminum und Gold	42
IV. Absorption und Streuung	47
IV.1. Photoanregung	47
IV.2. Photoionisation	49
IV.3. Inverse Bremsstrahlung	54
IV.4. Streuung	55
IV.5. Die frequenzabhängige Opazität (Extinktionskoeffizient)	55

INHALTSVERZEICHNIS (Fortsetzung)

V. Diskussion frequenzabhängiger und frequenzgemittelter	
Opazitäten	61
V.1.. Emission aus dünner Folie	61
V.2. Rosseland Opazität	67
V.3. Planck Opazität	74
VI. Zusammenfassung	77
Anhang A. Radialintegral für gebunden-gebunden Übergänge	79
Anhang B. Radialintegral für gebunden-frei Übergänge	81
Anhang C. Das Programm OPAL	83
Literaturverzeichnis	85
Danksagung	91

VERZEICHNIS DER ABBILDUNGEN

II.1 Schema der Energieniveaus für Gold XXV.	10
II.2 Ionisationspotentiale für Aluminum nach SHM und experimentelle Werte.	11
II.3 Ionisationspotentiale für Aluminum nach SHML und experimentelle Werte.	11
II.4 Ionisationspotentiale für Gold nach SHM und Werte nach Carlson et al.	12
II.5 Ionisationspotentiale für Gold nach SHML und Werte nach Carlson et al.	12
II.6 2p-Radialwellenfunktion für Natrium nach Hartree-Fock und wasserstoffähnlich nach Perrot.	18
II.7 2p-Radialwellenfunktion für Natrium nach Hartree-Fock und wasserstoffähnlich nach Mayer.	18
II.8 3s-Radialwellenfunktion für Gold nach Hartree-Fock und wasserstoffähnlich nach Perrot.	19
II.9 3s-Radialwellenfunktion für Gold nach Hartree-Fock und wasserstoffähnlich nach Mayer.	19
II.10 Übergangsintegral σ^2 für Natrium und Caesium bei Variation der effektiven Kernladungszahl des Endniveaus Z_f nach Perrot und zum Vergleich nach Abdel-Hady et al.	24
II.11 Differentielle Oszillatorstärke des Niveaus 2p in Au XXXIV.	29
III.1 Struktogramm für Algorithmus von Mancini und Fontán.	41
III.2 Ionisationsgrad Z_0 für Aluminium und Gold in Abhängigkeit von der Temperatur bei verschiedenen Dichten aus dem Modell dieser Arbeit und nach Thomas-Fermi.	43

VERZEICHNIS DER ABBILDUNGEN (Fortsetzung)

III.3 Besetzungszahlen der vierten Hauptschale in Gold mit $\rho = 1.0 \times 10^{-1} \text{ g/cm}^3$ bei Variation der Temperatur.	44
III.4 Einelektronenenergien der vierten Hauptschale in Gold mit $\rho = 1.0 \times 10^{-1} \text{ g/cm}^3$ bei Variation der Temperatur.	45
IV.1 Photoionisationskoeffizient für neutrales Gold in der Wasserstoff- näherung.	52
IV.2 Photoionisationskoeffizient für Gold XXXIV in verschiedenen Näherungen.	54
IV.3 Extinktionskoeffizient für Aluminium ($\rho = 0.187 \text{ g/cm}^3$) und Kalzium ($\rho = 0.683 \text{ g/cm}^3$) bei $T = 100 \text{ eV}$ in Abhängigkeit von der Photonen- energie nach "Astrophysical Opacity Library", Modell dieser Arbeit und in der Wasserstoffnäherung ohne l -Aufspaltung nach Tsakiris und Eidmann.	57
IV.4 Extinktionskoeffizient für Gold ($\rho = 0.1 \text{ g/cm}^3$) bei $T = 100 \text{ eV}$ in Abhängigkeit von der Photonenergie nach dieser Arbeit und ohne l -Aufspaltung nach Tsakiris und Eidmann.	58
IV.5 Extinktionskoeffizient für Gold ($\rho = 0.1 \text{ g/cm}^3$) bei $T = 100 \text{ eV}$ in im Bereich $1 \text{ keV} \leq h\nu \leq 2 \text{ keV}$	59
V.1 Temperatur und Dichteprofil für 50 nm Goldtarget	62
V.2 Emissionsspektrum für 50 nm Goldtarget	64
V.3 Emissionsspektrum einer homogenen Goldschicht bei $T = 35 \text{ eV}$ und $\rho = 10^{-2} \text{ g/cm}^3$	64
V.4 Emissionsspektrum einer homogenen Goldschicht bei $T = 50 \text{ eV}$ und $\rho = 10^{-2} \text{ g/cm}^3$	65
V.5 Emissionsspektrum einer homogenen Goldschicht bei $T = 50 \text{ eV}$ und $\rho = 10^{-3} \text{ g/cm}^3$	65

VERZEICHNIS DER ABBILDUNGEN (Fortsetzung)

V.6 Rosseland Opazität für Europium in Abhängigkeit von der Temperatur bei $\rho = 0.1 \text{ g/cm}^3$ ohne und mit 20 eV künstliche Linienverbreiterung.	69
V.7 Rosseland Opazität für Europium in Abhängigkeit von der Temperatur bei $\rho = 10 \text{ g/cm}^3$ ohne und mit 20 eV künstliche Linienverbreiterung.	70
V.8 Rosseland Opazität für Europium in Abhängigkeit von der Temperatur bei $\rho = 10^3 \text{ g/cm}^3$ ohne und mit 20 eV künstliche Linienverbreiterung.	71
V.9 Extinktionskoeffizient für Europium bei $\rho = 0.1 \text{ g/cm}^3$ und $T = 1 \text{ keV}$ nach Modell dieser Arbeit ohne Linienverbreiterung und nach Tsakiris und Eidmann mit "band-smearing".	72
V.10 Planck Opazität für Europium in Abhängigkeit von der Temperatur bei $\rho = 0.1 \text{ g/cm}^3$	75
V.11 Planck Opazität für Europium in Abhängigkeit von der Temperatur bei $\rho = 10 \text{ g/cm}^3$	75
V.12 Planck Opazität für Europium in Abhängigkeit von der Temperatur bei $\rho = 10^3 \text{ g/cm}^3$	76
C.1 Aufbau des Programms OPAL.	83

VERZEICHNIS DER TABELLEN

II.1	Numerische Werte der Konstante für das SHML nach Perrot.	9
II.2	Übergangsintegral σ^2 und effektive Kernladungszahlen für verschiedene Übergänge in einfachen Systemen.	21
II.3	Übergangsintegral σ^2 und effektive Kernladungszahlen für verschiedene Übergänge in O VI.	23
II.4	Oszillatorstärke für verschiedene Übergänge in einfachen Systemen. ...	26
II.5	Summe der Oszillatorstärken für diskrete Übergänge und für Übergänge ins Kontinuum in der Wasserstoffnäherung.	28

I. Einleitung

Energietransport durch Strahlung ist ein entscheidender Prozeß bei der Bestimmung des hydrodynamischen Verhaltens von heißen, dichten Plasmen. Er wird durch die Strahlungstransportgleichung beschrieben, wozu frequenzabhängige Opazitäten — auch Extinktionskoeffizienten genannt — beziehungsweise deren mit einer Gewichtsfunktion über die Frequenz gemittelten Werte nötig sind.

Da sich ein Großteil der stellaren Materie im Plasmazustand befindet, war die Berechnung von Opazitäten bereits in den zwanziger Jahren unseres Jahrhunderts Gegenstand astrophysikalischer Forschung, die sich aber auf leichte und mittelschwere Elemente bis einschließlich Nickel beschränkte. Die Methoden und Ergebnisse sind in einem Übersichtsartikel von Cox [1] zusammengefaßt. Mit der "Astrophysical Library" [2] stehen frequenzabhängige und gemittelte Werte für die häufigsten stellaren Elemente zur Verfügung.

Die Arbeit wurde während des Manhattan Projekts, das die Entwicklung von Nuklearsprengkörpern zum Ziel hatte, im Zusammenhang mit der Strahlungsausbreitung im frühen Feuerball einer Nuklearexplosion fortgesetzt. Dies lieferte wichtige Beiträge und Modelle, die auch heute noch verwendet werden. Vieles wurde jedoch geheim gehalten oder erst später der Allgemeinheit zugänglich gemacht. Die "Los Alamos T-4 Group" [3] veröffentlichte die "Sesame"-Bibliothek, die Opazitäten für leichte und einige schwere Elemente bis Europium enthält, leider ohne Hinweise, wie diese berechnet wurden.

Im Rahmen großer Projekte in den fünfziger und sechziger Jahren zur Klärung der Probleme beim Wiedereintritt von Raumflugkörpern in die Atmosphäre und bei der Aufheizung von Raketenwänden wurden auch detaillierte Opazitätsberechnungen für atmosphärische Belange durchgeführt, die aber auch nur Niedrig-Z Material beinhalteten [4].

Durch den Einsatz von Hochleistungslasern und intensiven Teilchenstrahlen ist es möglich, heiße, dichte Plasmen durch Bestrahlung von Materie im Labor zu erzeugen, wobei als Target auch Hoch-Z Material —insbesondere Gold— Verwendung findet. Für eine numerische Simulation sind die frequenzabhängigen Opazitäten für einen weiten Bereich von Temperatur und Dichte erforderlich, die für diese Hoch-Z Elemente nicht verfügbar sind. Nardi und Zinamon [5] führten

eine der wenigen Berechnungen für ein Hoch- Z Material durch, um den Einfluß der Linienabsorption zu untersuchen. In dieser Arbeit wird jedoch nur die frequenzabhängige Opazität für Gold bei einem speziellen Wert von Temperatur und Dichte betrachtet. Die "Astrophysical Library" enthält nur Elemente mit $Z \leq 28$ und die "Sesame"-Bibliothek nur über die Frequenz gemittelte Werte bis $Z = 63$. Daher müssen Tabellen für die frequenzabhängigen Opazitäten von Hoch- Z Elementen selbst erstellt werden.

Detaillierte quantenmechanische Rechnungen wären jedoch äußerst langwierig, da man die Energieniveaus der verschiedensten Ionisations- und Anregungszustände bestimmen und eine Vielzahl von Linien durch Übergänge zwischen diesen berücksichtigen muß. Sie sind mit einem akzeptablen Rechenzeitaufwand für die Menge von Werten, die eine Computersimulation benötigt, nicht durchführbar, und man ist gezwungen, Näherungen einzuführen.

Viele Berechnungen beruhen auf dem Modell des abgeschirmten Wasserstoffatoms (Screened Hydrogenic Model SHM), in dem die Energien durch die Wasserstoffenergien mit einer effektiven Kernladungszahl gegeben sind, die sich aus der Kernladungszahl und der Abschirmung des Kerns durch die anderen Elektronen ergibt [6, 7]. Da die Energieniveaus des Wasserstoffes nur von der Hauptquantenzahl n abhängen, ist im Rahmen des einfachen SHM die Aufspaltung der Energien nach der Drehimpulsquantenzahl l nicht berücksichtigt. Tsakiris und Eidmann [8] haben auf der Basis des SHM eine einfache, aber sehr erfolgreiche Methode entwickelt, die es gestattet, mit geringem Rechenzeitbedarf frequenzgemittelte Opazitäten für schwere Elemente zu bestimmen. Eidmann verwendete das SHM auch in einer Arbeit über "Non-LTE"-Opazitäten [9]. Die Ergebnisse dieser Arbeit zeigen eine Diskrepanz zwischen gemessenen und simulierten Emissionsspektren, die auch bei anderen Vergleichen mit dem Experiment [10] auftritt. Die gerechneten Spektren zeigen geringere Emission bei niedrigen Photonenenergien und besitzen weniger Struktur. Dies ist wahrscheinlich verursacht durch das Vernachlässigen der l -Aufspaltung der Energieniveaus, die bei Gold bis zu 500 eV betragen kann, und damit auch der $\Delta n = 0$ Übergänge. Zum genaueren Verständnis der Emissionsspektren und auch zu Diagnostikzwecken ist es daher erforderlich, die l -Aufspaltung in die Berechnung der frequenzabhängigen Opazitäten zu integrieren, was bisher noch nicht durchgeführt wurde.

Ziel der vorgelegten Arbeit ist es, die l -Aufspaltung der Energien und die Übergänge mit $\Delta n = 0$ bei der Berechnung der Extinktionskoeffizienten in einfacher Weise zu berücksichtigen, ohne dabei den Aufwand an Rechenzeit *erheblich* zu steigern. Dies wurde durch ein kürzlich von Perrot entwickeltes Modell für die schnelle Berechnung der atomaren Struktur möglich, in dem das SHM um l -Aufspaltung erweitert wird [11].

In Kapitel II wird das SHM mit und ohne l -Aufspaltung ausführlich diskutiert und die damit bestimmten Ionisierungsenergien für Aluminium und Gold mit genauen Werten verglichen. Dieser Vergleich zeigt, daß durch Hinzunahme der l -Aufspaltung die Übereinstimmung mit genauen Werten deutlich verbessert wird. Nahezu alle Beispiele der vorliegenden Arbeit beziehen sich auf Aluminium als leichtes Element und Gold als schweres Element, da beide häufig als Targetmaterial verwendet werden und auch in Ref. [8] ausgewählt wurden, so daß ein direkter Vergleich möglich ist. Im Anschluß daran wird die Berechnung der Oszillatorstärken behandelt, und die Ergebnisse anhand der Dipolsummenregel überprüft. In früheren Arbeiten wurden die Oszillatorstärken aus den Werten für Wasserstoff durch Multiplikation mit der Besetzungszahl des Niveaus und einem Verfügbarkeitsfaktor für das Endniveau bestimmt [7, 8]. Wir verwenden hingegen für das Radialmatrixelement der Oszillatorstärke Wasserstoffwellenfunktionen, wobei Anfangs- und Endzustand durch *verschiedene* effektive Kernladungszahlen charakterisiert sind.

Im Rahmen dieser Arbeit setzen wir voraus, daß der Zustand der Materie lokal durch eine Temperatur beschrieben werden kann, daß also lokales thermodynamisches Gleichgewicht (Local Thermodynamic Equilibrium LTE) vorliegt. Die Voraussetzungen und Folgerungen dieser Annahme werden in Kapitel III beschrieben.

Zur Berechnung der Besetzungszahlen der Energieniveaus ersetzen wir die tatsächliche Verteilung über verschiedene Ionisations- und Anregungszustände durch ein mittleres, fiktives Ion (average atom approximation) [7, 12], dessen Besetzungszahlen durch die Fermi-Dirac Statistik gegeben sind. Das chemische Potential bestimmen wir selbstkonsistent, so daß auch der Fall hoher Entartung, d.h. dichtes, kaltes Plasma, mit eingeschlossen ist. Dieses Modell, die Korrekturen

durch Plasmaeffekte und die Lösung der sich ergebenden nichtlinearen, gekoppelten Gleichungen sind ebenfalls in Kapitel III enthalten.

Der Temperaturbereich dieser Arbeit erstreckt sich von 1 eV^* bis zu einigen keV . Temperaturen kleiner 1 eV werden nicht betrachtet, da sonst Absorption durch Rotations- und Vibrationsanregung von Molekülen einen Beitrag zur Opazität leistet. Da auch nukleare Absorptionsmechanismen, Elektron-Positron Paarbildung, Photon-Photon Streuung und Compton Effekt nicht in Betracht gezogen werden, ist der Bereich zu hohen Temperaturen eingeschränkt. Als Absorptionsmechanismen verbleiben noch atomare Prozesse und Thomson Streuung. Die frequenzabhängigen Absorptionskoeffizienten für gebunden-gebunden (Photoanregung), gebunden-frei (Photoionisation) und frei-frei (inverse Bremsstrahlung) Übergänge und die Streuung werden in Kapitel IV in der wasserstoffähnlichen Näherung mit l -Aufspaltung berechnet. Im letzten Abschnitt des Kapitels IV werden die frequenzabhängigen Opazitäten diskutiert.

Da für die frequenzabhängigen Opazitäten keine Vergleichswerte zur Verfügung stehen, bestimmen wir in Kapitel V mit den Extinktionskoeffizienten dieser Arbeit die Emission aus einer dünnen, homogenen Schicht und vergleichen diese mit experimentellen Resultaten. Anschließend berechnen wir über die Frequenz gemittelte Opazitäten und überprüfen unsere Ergebnisse anhand der Daten aus der "Sesame"-Bibliothek. Eine gute Übereinstimmung mit Daten aus der "Sesame"-Bibliothek konnte ohne Verschmierung der Linien oder einer Verschmierung zu ganzen Bändern, wie dies in Ref. [8] erforderlich war, erreicht werden.

Eine Zusammenfassung in Kapitel VI und ein Überblick über die Struktur des Programms, das in Standard-FORTRAN77 geschrieben ist, im Anhang C schließen die Arbeit ab.

* 1 eV entspricht 11605°K

II. Atomphysikalische Grundlagen

In diesem Kapitel werden wir die Methoden zur Berechnung der atomphysikalischen Daten besprechen, die zur Beschreibung des Zustandes der Materie und der Wechselwirkung mit den Photonen benötigt werden. Angesichts der Fülle benötigter Werte sind wir gezwungen, uns auf ein einfaches Modell zu beschränken. Eine Beschreibung mit wasserstoffähnlichen Wellenfunktionen und Energien wird verwendet.

II.1. DAS MODELL DES ABGESCHIRMTEN WASSERSTOFFATOMS (SHM)

Wasserstoff und wasserstoffähnliche Ionen sind die einzigen Systeme, für die eine analytische Lösung des quantenmechanischen Problems durchführbar ist. Für alle anderen Atome und Ionen kann der Hamiltonoperator des Vielteilchensystems angegeben werden, eine exakte Lösung der Schrödinger- oder Diracgleichung ist jedoch unmöglich. Das von Hartree entwickelte — und von vielen anderen erweiterte — selbstkonsistente Verfahren liefert die Energien und Wellenfunktionen mit hoher Genauigkeit, wozu aber ein hoher Aufwand an Rechenzeit erforderlich ist.

Häufig sind einfache Näherungen ausreichend, die mit geringerer Genauigkeit schnell Ergebnisse verfügbar machen. Näherungswerte für Energien beschreibt das Modell des abgeschirmten Wasserstoffatoms (Screened Hydrogenic Model SHM), das bereits 1930 von Slater [13] entwickelt wurde, und eine Verfeinerung des Bohr'schen Atommodells darstellt. Man nimmt an, daß sich jedes Elektron in einem mittleren, zentralsymmetrischen Potential bewegt, das vom Kern und allen anderen Elektronen gebildet wird. Die Elektronen schirmen die Kernladung ab, so daß auf die Elektronen der ersten Schale nahezu die gesamte Ladung des Kerns wirkt, auf Elektronen in den äußeren Schalen nur eine durch Abschirmung verringerte, effektive Ladung. Die Schrödingergleichung für ein Teilchen in einem Coulombpotential beliebiger Stärke ist durch Skalierung der Lösung des Wasserstoffatoms sofort gegeben, und es verbleibt nur noch die Berechnung der effektiven Ladungszahlen.

II.1.1. SHM OHNE l -AUFSPALTUNG

Slater [13,14] ermittelt die effektive Ladungszahl für jedes Elektron nach $Z - S_i$, wobei Z die Kernladungszahl und S_i die Abschirmkonstante für das Elektron i sind. Zur Bestimmung des Anteils der Elektronen an der Abschirmung gibt Slater empirische Regeln an, wobei Elektronen einer Unterschale (n, l) zu gleichen Teilen beitragen. Die s - und p -Schalen sind jedoch zusammengefaßt, so daß die l -Aufspaltung nicht vollständig berücksichtigt ist. Dieser Satz von Konstanten ergibt für leichte sowie hochionisierte Elemente gute Energiewerte, bei schweren sowie neutralen Elementen ist dieser Satz von Abschirmkonstanten aber nicht geeignet. Die totale Energie für eine Konfiguration ist durch die Summe $-\sum_i \frac{(Z-S_i)^2}{n_i^2} 13.6 \times 10^{-3} \text{ (keV)}$ über alle Elektronen gegeben, wobei n_i bei Slater eine effektive Hauptquantenzahl ist. Die Übergangsenergien erhält man als Differenz der totalen Energien vor und nach dem Übergang.

Eine erste Verbesserung wurde von Mayer [6] durchgeführt, der Abschirmkonstanten σ_{nm} mittels Störungstheorie erster Ordnung angewandt auf wasserstoffähnliche Wellenfunktionen berechnete, wobei sowohl innere als auch äußere Elektronen zur Abschirmung beitragen. σ_{nm} beschreibt, mit welchem Anteil ein Elektron in Schale m ein Elektron abschirmt, das sich in Schale n befindet. Ist P_m die Besetzung der Schale m , so ergibt sich für die effektive Kernladungszahl der Hauptschale n

$$Z_n = Z - \sum_m \sigma_{nm} P_m \left(1 - \frac{1}{2n^2} \delta_{nm}\right) \quad (II.1)$$

und für die Einelektronenergie

$$E_n = -\frac{Z_n^2}{n^2} \times 13.6 \times 10^{-3} \text{ (keV)} \quad (II.2)$$

Die Abschirmkoeffizienten für die ersten 10 Hauptniveaus sind bei Mayer [6] und Pomraning [15] tabelliert.

Häufig wird die effektive Kernladungszahl nach Mayer auch verwendet, um andere Eigenschaften eines Mehrelektronensystems, wie zum Beispiel Absorptionsquerschnitte [7,8], aus den Werten für wasserstoffähnliche Systeme abzuschätzen, indem man die Kernladungszahl Z durch die effektive Ladungszahl ersetzt. Hierzu benötigt man aber effektive Kernladungszahlen für die Wellenfunktionen, die nicht ohne weiteres mit denen für die Energien übereinstimmen.

Eine Ladung auf einer Kugelschale erzeugt in ihrem Inneren ein konstantes Potential, so daß äußere Elektronen nur einen konstanten Beitrag zur Energie geben, der die Wellenfunktionen nicht verändert. Nähert man die tatsächliche Wellenfunktion durch eine Wasserstoffwellenfunktion mit einem effektiven Z , so ist nur die innere Abschirmung zu berücksichtigen. Bei der Betrachtung von strahlenden Prozessen ist die Unterscheidung nach innerer und äußerer Abschirmung daher sehr wichtig. Eine ausführliche Diskussion ist bereits bei Slater [16, Sec.9-7] gegeben.

More [17] hat diese Unterscheidung in das SHM eingebaut, indem er bei der Abschirmung der Kernladung nur die inneren Schalen betrachtet und diese nach

$$Z_n = Z - \sum_{m \leq n} P_m \sigma_{nm} \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{nm}\right) \quad (II.3)$$

ermittelt, wobei die Besetzung der Schale m erneut durch P_m gegeben ist. Zu den Einelektronenenergien tragen auch die äußeren Elektronen bei, so daß diese durch

$$E_n = \left(-\frac{Z_n^2}{2n^2} + \sum_{m \geq n} P_m \frac{Z_m}{m^2} \sigma_{nm} \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{nm}\right)\right) \times 27.21 \times 10^{-3} \text{ (keV)} \quad (II.4)$$

bestimmt sind*. Die Einelektronenenergien genügen der Konsistenzbedingung

$$\frac{\partial E}{\partial P_n} = E_n \quad (II.5)$$

mit der totalen Energie E der Konfiguration, die man aus

$$E = -\sum_n \left(\frac{Z_n^2}{2n^2}\right) P_n \times 27.21 \times 10^{-3} \text{ (keV)} \quad (II.6)$$

berechnet.

Eine entscheidende Verbesserung des SHM gelang More jedoch erst durch eine Anpassung der Abschirmkonstanten σ an einen Datensatz von 800 Ionisationspotentialen von 30 Elementen, der von Scofield mittels Hartree-Fock-Slater Rechnungen bestimmt wurde. Ein Vergleich mit Ionisationspotentialen, berechnet mit den Abschirmkoeffizienten nach Mayer, zeigt Abweichungen um mehr als 100 Prozent. Besonders groß sind die Abweichungen für die ersten Ionisationspotentiale schwerer Elemente. Nach der Optimierung beträgt die Abweichung nur noch 25 Prozent, und auch für schwere Elemente konnte eine gute Übereinstimmung erreicht werden. Diese neuen Abschirmkonstanten sind bei More ebenfalls tabelliert, sie weichen um maximal 10 Prozent von den Mayer'schen Werten ab.

*Multiplikation mit e^2/a_0 ist erforderlich, da More e^2/a_0 als Einheit für die Energie verwendet.

II.1.2. SHM MIT l -AUFSPALTUNG (SHML)

In einem erst kürzlich veröffentlichten Artikel von Perrot [11] ist die Erweiterung des SHM um l -Aufspaltung durchgeführt. Perrot leitet das SHM mit Unterscheidung nach der Drehimpulsquantenzahl l aus dem Variationsprinzip ab, aber auch dieses Modell erfordert im allgemeinen die Anpassung von Konstanten an genauere Werte. Um dies zu umgehen, wird in Ref. [11] das allgemeine Modell auf das Modell von More reduziert und die l -Aufspaltung anschließend in Störungsrechnung erster Ordnung berücksichtigt, so daß nur noch wenige Modellkonstanten angepasst werden müssen. Die effektiven Kernladungszahlen sind in diesem Modell nur durch die Hauptquantenzahl n ($n = 1, \dots, 10$) bestimmt, das heißt es wird angenommen, daß sich diese innerhalb einer Hauptschale nur wenig ändern.

Ist die Besetzung der Schale (m, l) durch P_{ml} und der Hauptschale m durch $P_m = \sum_l P_{ml}$ gegeben, und kennzeichnet wie bisher Z die Kernladungszahl und σ die Abschirmkonstanten nach More, so ergibt sich gemäß Ref. [11] für die effektive Kernladungszahl

$$Z_n = Z - \sum_{m \leq n} P_m \sigma_{nm} \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{nm}\right) + \sum_m P_m q_{mn} \sum_{l=0}^{n-1} \frac{P_{nl}}{P_n} g_{nl} \quad (II.7)$$

mit

$$g_{nl} = \frac{1}{4n^2} [n^2 - 2l(l+1) - 1] + \nu_n \quad (II.7a)$$

Die ν_n werden anhand der Bedingung ermittelt, daß für alle Elemente des Periodensystems die Ionisationspotentiale positiv und die Einelektronenbindungsenergien negativ sind. In WKB-Näherung erhält man für Außerdiagonalelemente

$$q_{nm} = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \left(\frac{m}{n}\right) [2 - \left(\frac{m}{n}\right)^2]^{1/2} & \text{falls } 2n^2 > m^2 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (II.8)$$

Für die Diagonalelemente q_{nn} und $n = 1, \dots, 7$ verwendet Perrot die exakten Wasserstoffwerte, die zusammen mit den numerischen Werten für die ν_n in Tab. II.1 aufgeführt sind, und für $n = 8, \dots, 10$ den WKB-Wert $1/\pi$ nach Gl. (II.8). Mit diesen effektiven Ladungen folgt die totale Energie, wie im SHM formuliert von More, aus

$$E = - \sum_m P_m \frac{Z_m^2}{2n^2} \times 27.21 \times 10^{-3} (\text{keV}) \quad (II.9)$$

Die Einelektronenenergien sind

$$E_{nl} = E_n - \left(\sum_m P_m [q_{nm} S_m - q_{mn} S_n] - \frac{Z_n}{n^2} g_{nl} \sum_m P_m q_{mn} \right) 27.21 \times 10^{-3} (\text{keV}) \quad (II.10)$$

mit

$$S_n = \frac{Z_n}{n^2} \sum_{l=0}^{n-1} \frac{P_{nl}}{P_n} g_{nl} \quad (II.10a)$$

und den Einelektronenenergien E_n nach Gl. (II.4) — aber mit modifizierten Z_n nach Gl. (II.7).

n	q_{nn}	ν_n
1	0.270672	0.000
2	0.366310	0.070
3	0.371802	0.020
4	0.329523	0.012
5	0.295072	-0.100
6	0.296580	-0.400
7	0.320910	-0.420
8	$1/\pi$	0
9	$1/\pi$	0
10	$1/\pi$	0

Tab. II.1: Numerische Werte der Konstanten für das SHML nach Perrot [10].

Die Resultate werden bei Perrot ausführlich diskutiert und mit experimentellen oder selbstkonsistenten Werten verglichen. Wir wollen hier nur anhand des Beispiels Au^{24+} in Abb. II.1 verdeutlichen, welche enorme Verbesserung die Einführung der l -Aufspaltung bei der Beschreibung der Energieniveaus mit sich bringt. Abb. II.1 zeigt die Energieniveaus $n = 4$ und $n = 5$ des Goldions mit und ohne Entartung und zum Vergleich relativistische Hartree-Fock-Slater Ergebnisse nach Yabe und Goel [18].

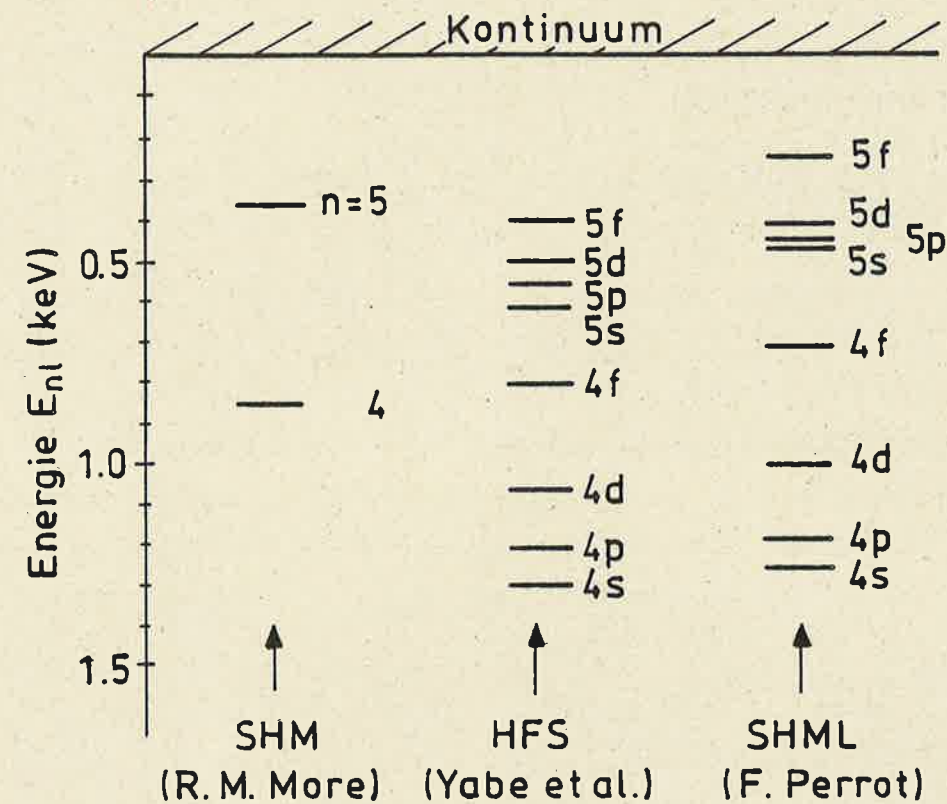


Abb. II.1: Schema der Energieniveaus für Gold XXV.

Im SHM besitzen alle Elektronen der Hauptschale $n = 4$ und $n = 5$ die gleiche Energie, während in der Hartree-Fock-Slater Beschreibung eine Aufspaltung vom $4s$ - zum $4f$ -Niveau von 500 eV und vom $5s$ - zum $5f$ -Niveau von über 200 eV besteht. Das SHML zeigt dagegen gute Übereinstimmung bei der Aufspaltung der Energieniveaus, obwohl die totalen Werte für die Eielektronenenergien insgesamt zu gering sind.

II.2. IONISATIONSPOTENTIALE

Als Ionisationspotential bezeichnet man die Energie, die aufgewendet werden muß, um das am wenigsten gebundene Elektron eines Ions oder Atoms im Grundzustand zu entfernen und ein Ion der nächsten Ladungsstufe im Grundzustand zu erzeugen. In Abb. II.2 bis Abb. II.5 sind die Ionisationspotentiale aller Ladungszustände von Al und Au nach Mayer (siehe auch Ref. [8]) und nach Perrot dargestellt. Zum Vergleich werden bei Aluminium experimentelle Werte [19] und bei Gold Werte aus Schalenmodellrechnungen nach Carlson et al. [20] mit angegeben.

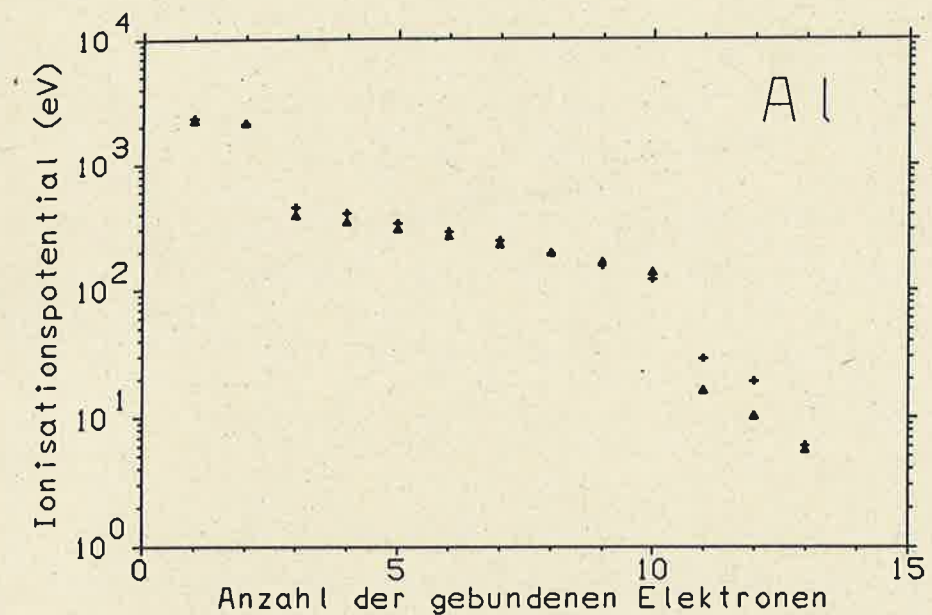


Abb. II.2: Ionisationspotentiale für Aluminum nach SHM [8]
 Δ und experimentelle Werte [18] +.

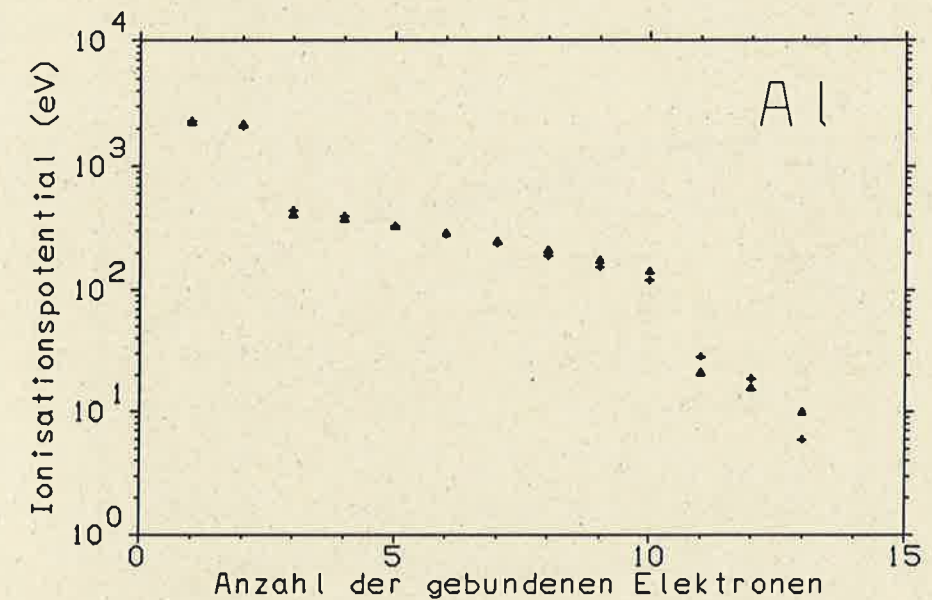


Abb. II.3: Ionisationspotentiale für Aluminum nach SHML
 [10] Δ und experimentelle Werte [18] +.

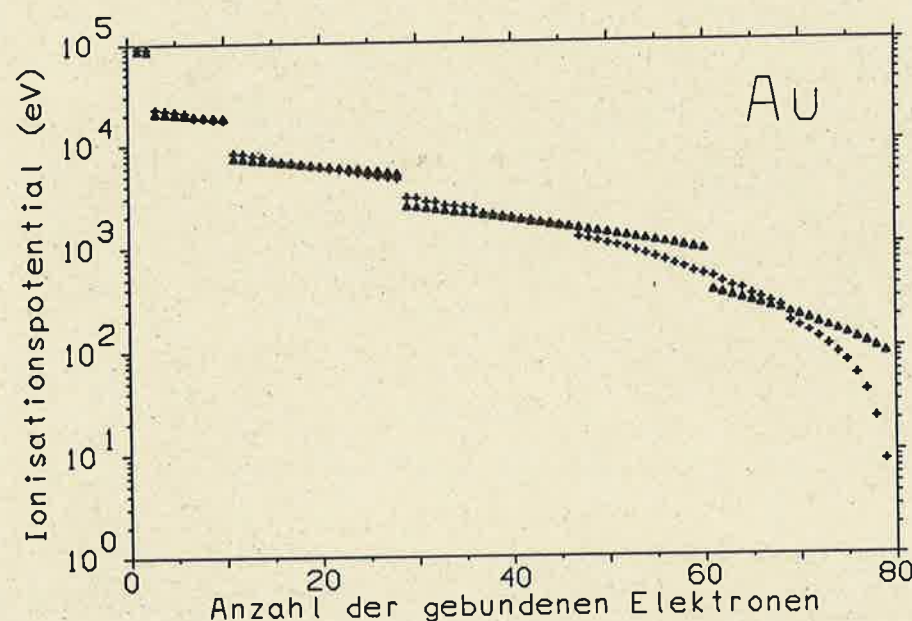


Abb. II.4: Ionisationspotentiale für Gold nach SHM [8] \triangle und Werte nach Carlson et al. [19] +.

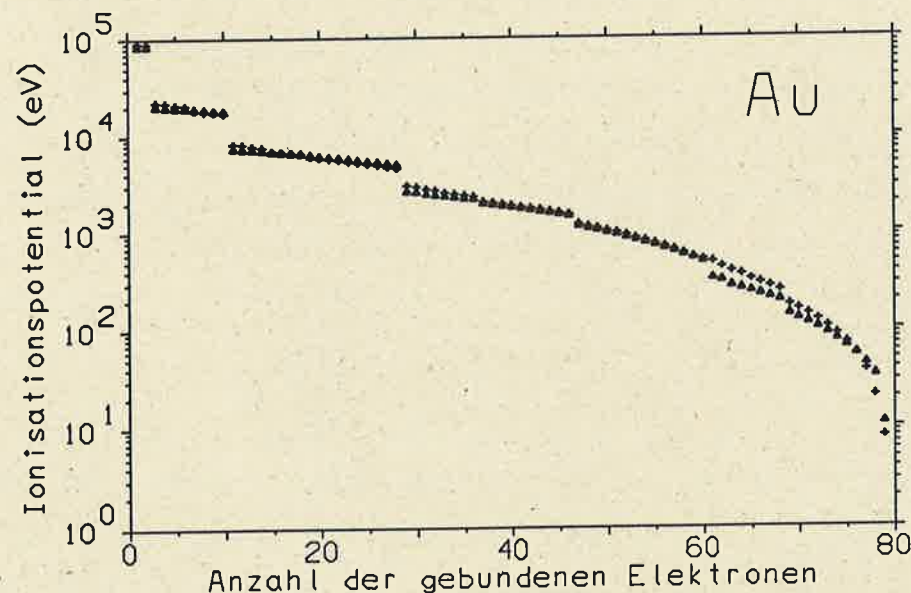


Abb. II.5: Ionisationspotentiale für Gold nach SHML [10] \triangle und Werte nach Carlson et al. [19] +.

Im Rahmen des SHML ergibt sich das Ionisationspotential aus der Differenz der totalen Energie Gl. (II.9) der Konfiguration vor und nach der Ionisierung. Für das Ionisationspotential im SHM wurde (wie in Ref. [8]) die Einelektronenenergie des letzten noch besetzten Niveaus gewählt.

Im Falle des Aluminiums reproduziert das entartete SHM die experimentellen Werte gut, da für Niedrig-Z Elemente die l -Aufspaltung nur gering ist. Die mittlere Abweichung (Wurzel aus der mittleren quadratischen Abweichung) beträgt im SHM 20% und im SHML 21%. Die Ionisationspotentiale der Goldionen dagegen werden im SHML deutlich besser beschrieben als im SHM. Letzteres liefert für die ersten Ionisationsstufen viel zu hohe Werte und unterschätzt damit den Ionisationsgrad. Nach Verwendung der modifizierten Abschirmkonstanten nach More und Aufheben der Entartung reduziert sich die mittlere Abweichung von 126% auf 14%, und auch die Kanten werden richtig beschrieben. Die kleine Kante beim Übergang von 61 zu 60 gebundenen Elektronen entsteht dadurch, daß im SHML die 5s-Schale vor der 4f-Schale entleert wird, in genaueren Rechnungen jedoch zuerst 2 Elektronen der 4f-Schale entnommen werden, bevor die Elektronen der 5s-Schale ionisiert werden.

II.3. OSZILLATORSTÄRKEN

Die Berechnung der Absorptionskoeffizienten erfordert die Kenntnis der Oszillatorstärken für alle Übergänge zwischen gebundenen Niveaus und von gebundenen Niveaus ins Kontinuum. Dazu benötigt man die Wellenfunktion des aktiven Elektrons vor und nach dem Übergang. Die genaue Bestimmung wäre auf der Basis von Hartree-Fock Rechnungen möglich, was allerdings einen hohen numerischen Aufwand erfordert. Zur Erstellung einer Tabelle mit 400 Extinktionskoeffizienten (20 Temperaturwerte und jeweils 20 Dichtewerte pro Temperatur) eines Elements sind ungefähr 10^5 Oszillatorstärken (≈ 300 für einen Wert) erforderlich. Für diese große Anzahl von Oszillatorstärken sind Hartree-Fock Rechnungen nicht durchführbar, weshalb wir in dieser Arbeit auf einfache, wenn auch grobe Näherungen ausweichen.

Die Oszillatorstärken berechnen wir mit Hilfe der Wasserstoffnäherung, in der die Wellenfunktionen durch Wasserstoffwellenfunktionen mit einer geeigneten effektiven Kernladungszahl gegeben sind. Wir beschreiben Anfangs- und Endzu-

stand mit verschiedenen effektiven Kernladungszahlen, die wir aus dem SHML übernehmen.

In den folgenden beiden Abschnitten beschreiben wir die Bestimmung der diskreten und der differentiellen Oszillatorstärken in dieser Näherung. Die Gültigkeit und die Genauigkeit der Wasserstoffnäherung behandeln wir in Kap. II.4.

II.3.1. OZILLATORSTÄRKE FÜR PHOTOANREGUNG

Frühere Arbeiten [7,8], die Opazitäten auf der Basis des SHM ohne l -Aufspaltung berechneten, verwenden Wasserstoffoszillatorstärken und für Übergänge zwischen höheren Niveaus die quasiklassische Formel

$$f(n \rightarrow m) = 1.96 \frac{nm^3}{(m^2 - n^2)^3} .$$

Dies war möglich, da nur Hauptschalen betrachtet wurden.

In der vorliegenden Arbeit benötigen wir die Oszillatorstärken nach der Drehimpulsquantenzahl l aufgespaltet, so daß wir die Wasserstoffergebnisse nicht direkt übernehmen können. Da keine gute und schnelle Methode zur Verfügung steht, verwenden wir die Wasserstoffnäherung und benützen die gleichen effektiven Kernladungszahlen wie für die Energien (SHML).

Die Dipol-Oszillatorstärke f_{ij} eines Überganges $i \rightarrow j$ in einem System mit N Elektronen ist definiert als

$$f_{ij} = \frac{1}{3} \times \frac{E_j - E_i}{13.6 \times 10^{-3}} \left| \left\langle \Psi_i(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \left| \sum_{k=1}^N \vec{r}_k \right| \Psi_j(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) \right\rangle \right|^2 \quad (II.11)$$

mit der Wellenfunktion des Anfangszustandes Ψ_i und des Endzustandes Ψ_j . Das Matrixelement ist in Einheiten des Bohr'schen Radius a_0 einzusetzen, die Einheit der Energien E_j und E_i ist keV . Setzen wir voraus, daß sich die Elektronen in einem Zentralfeld bewegen, und betrachten nur Einelektronenübergänge, so sind nur Übergänge von der Schale (nl) nach $(n'l')$ ($l' = l \pm 1$) zu berücksichtigen. Bei teilweiser Besetzung der Anfangs- oder Endschale erhält man die Multiplettaufspaltung. Ordnet man allen Multiplettübergängen die gleiche Energie ΔE zu, summiert über die möglichen Endzustände und mittelt über die Anfangszustände, dann ergibt sich:

$$f_{nl,n'l'} = \frac{1}{3} \times \frac{\max\{l, l'\}}{2l+1} \frac{\Delta E}{13.6 \times 10^{-3}} \left(R_{nl}^{n'l'} \right)^2 P_{nl} \left(1 - \frac{P_{n'l'}}{2(2l'+1)} \right) . \quad (II.12)$$

Es stehen P_{nl} und $P_{n'l'}$ für die Besetzungszahlen der Schalen (nl) und $(n'l')$ und der Faktor $(1 - \frac{P_{n'l'}}{2(2l'+1)})$ für die Verfügbarkeit des Endniveaus. Das Radialmatrixelement $R_{nl}^{n'l'}$ errechnet sich aus

$$R_{nl}^{n'l'} = \int_0^\infty R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) r^3 dr . \quad (II.13)$$

Die $R_{nl}(r)$ sind Radialanteile der Einteilchenwellenfunktion

$$\psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\theta, \phi) , \quad (II.14)$$

die sich für ein Elektron im Zentralfeld bei Vernachlässigen des Spinanteils als Produkt einer Radialwellenfunktion und der Kugelflächenfunktion Y_{lm} ausdrücken läßt, wobei letztere auch von der Magnetquantenzahl m abhängt.

Die Berechnung der Dipoloszillatorstärke reduziert sich damit auf das Problem, die Radialwellenfunktion des aktiven Elektrons vor und nach dem Übergang zu bestimmen. Wir nähern diese Wellenfunktionen mit Hilfe der analytisch bekannten Wellenfunktionen des Wasserstoffes, indem wir die Kernladungszahl durch eine effektive Kernladungszahl ersetzen.

Da hierbei nur die Abschirmung durch die inneren Elektronen wichtig ist, was bereits in Kap. II.1.1 dargelegt wurde, verwenden wir Z_{eff} aus dem SHML. Wir untersuchten auch eine Formel für die effektiven Kernladungszahlen von Abdel-Hady et al. [21], deren Koeffizienten an Hartree-Fock Daten für Übergangswahrscheinlichkeiten angepasst sind. Die Verwendung dieser Formel verbesserte die Resultate aber nicht, so daß wir die effektiven Kernladungszahlen aus dem SHML beibehielten. Obwohl wir verschiedene effektive Kernladungszahlen für den Ausgangs- und den Endzustand erlauben, ist das Integral über diese Radialwellenfunktionen einfach zu lösen. Die möglichen Verfahren hierzu werden im Anhang A erläutert.

Aus der Bedingung der Orthogonalität der Gesamtwellenfunktionen folgt, daß die Radialwellenfunktionen zu gleichem l und verschiedenem n orthogonal zueinander sein müssen

$$\int_0^\infty R_{nl} R_{n'l} r^2 dr = \delta_{nn'} .$$

Die wasserstoffähnlichen Wellenfunktionen verschiedener Hauptschalen sind im allgemeinen nicht orthogonal, da wir im SHML verschiedene Z_{eff} für jede Hauptschale erhalten. Dies könnte eine der Ursachen dafür sein, daß die Wasserstoffnäherung zwar für Übergänge mit $\Delta n = 0$ und für hochionisierte Atome zufriedenstellende Resultate liefert, bei Übergängen zwischen Hauptschalen in Atomen in niedrigen Ionisationsstufen die Resultate aber oft von zweifelhaftem Wert sind.

II.3.2. OSZILLATORSTÄRKE FÜR PHOTOIONISATION

Die Oszillatorstärke für einen Übergang vom Niveau (nl) in das Kontinuum berechnet man ebenfalls nach Gl. (II.11). Die Wellenfunktion des Endzustandes ist nun aber die Wellenfunktion eines Teilchens im Kontinuum. Normiert man diese auf die Einheitsdichte, macht den üblichen Separationsansatz im Zentralpotential und betrachtet nur Eielektronenübergänge, so erhält man

$$\frac{df_{nl}}{dh\nu} = 4.927 \times 10^3 h\nu \sqrt{h\nu - I_{nl}} \times P_{nl} \times Q_{\epsilon} \left[\frac{l+1}{2l+1} \left(R_{nl}^{\epsilon, l+1} \right)^2 + \frac{l}{2l+1} \left(R_{nl}^{\epsilon, l-1} \right)^2 \right] \quad (II.15)$$

Dabei ist $h\nu$ die Photonenenergie in keV , I_{nl} die Ionisationsenergie für ein Elektron der Schale (nl) in keV und

$$R_{nl}^{\epsilon, l'} = \int_0^{\infty} R_{nl}(r) R_{\epsilon l'}(r) r^3 dr \quad (II.16)$$

das Radialintegral in Einheiten $a_0^{5/2}$. $R_{\epsilon l'}$ ist der Radialanteil der Kontinuumswellenfunktion eines Elektrons mit kinetischer Energie $\epsilon = h\nu - I_{nl}$ und Drehimpuls $l' = l \pm 1$. Q_{ϵ} berücksichtigt die teilweise Besetzung des Endniveaus in Abhängigkeit von der kinetischen Energie des Elektrons und wird in Kap. IV.2 diskutiert. Die gebundenen Wellenfunktionen R_{nl} sind auf eins normiert. Die Normierung der Kontinuumswellenfunktionen ist so gewählt, daß sich diese asymptotisch wie

$$R_{l'} \underset{kr \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\sin(kr + \gamma \ln(2kr) - \pi \frac{l'}{2} + \eta_{l'}^{\pm})}{kr} \quad (II.17)$$

verhalten. Die Radialanteile sowohl der gebundenen Wellenfunktionen als auch der Kontinuumswellenfunktionen beschreiben wir wasserstoffähnlich mit verschiedenen Z_{eff} . Die effektive Kernladungszahl des gebundenen Zustandes ist durch das SHML und die des freien Elektrons durch die Ladung des Ions nach Entfernen

des Elektrons gegeben. Die analytische Lösung dieses Radialintegrals nach Bebb [22] ist im Anhang B beschrieben.

Der Partialwirkungsquerschnitt für Photoionisation aus der Schale (nl) ist proportional zur entsprechenden differentiellen Oszillatorstärke $df_{nl}/dh\nu$. Wir behandeln daher die Gültigkeit der Wasserstoffnäherung für die differentielle Oszillatorstärke zusammen mit dem Absorptionskoeffizienten für Photoionisation in Kap. IV.2.

II.4. DIE WASSERSTOFFNÄHERUNG FÜR OSZILLATORSTÄRKEN

In diesem Abschnitt behandeln wir kurz die Genauigkeit der Wasserstoffnäherung und vergleichen ihre Ergebnisse mit der "Coulomb-Approximation" und mit experimentellen Daten.

Radialwellenfunktionen in Wasserstoffnäherung und nach Hartree-Fock

Eine Möglichkeit festzustellen, wie genau die Wasserstoffnäherung mit Z_{eff} aus dem SHML ist, bietet ein Vergleich des Radialanteils der wasserstoffähnlichen Wellenfunktion mit Resultaten aus Hartree-Fock Rechnungen. In Abb. II.6-II.9 sind rR_{2p} für Natrium und rR_{3s} für Gold in der Wasserstoffnäherung mit Z_{eff} nach Perrot und Mayer und Ergebnisse aus Hartree-Fock Rechnungen [23] dargestellt.

Es ist deutlich zu erkennen, daß das Modell von Mayer zur Beschreibung der Wellenfunktionen nicht geeignet ist. Da auch Abschirmung durch äußere Elektronen berücksichtigt wird, sind die effektiven Kernladungszahlen zu niedrig. Daher ist die Skalierung von Größen wie Oszillatorstärken oder Photoionisationsquerschnitten, die von der Wellenfunktion des Anfangs- und des Endzustandes abhängen, mit Z_{eff} gemäß Mayer nicht möglich. Mit den effektiven Kernladungszahlen aus dem SHML von Perrot hingegen lassen sich die Wellenfunktionen gut nähern.

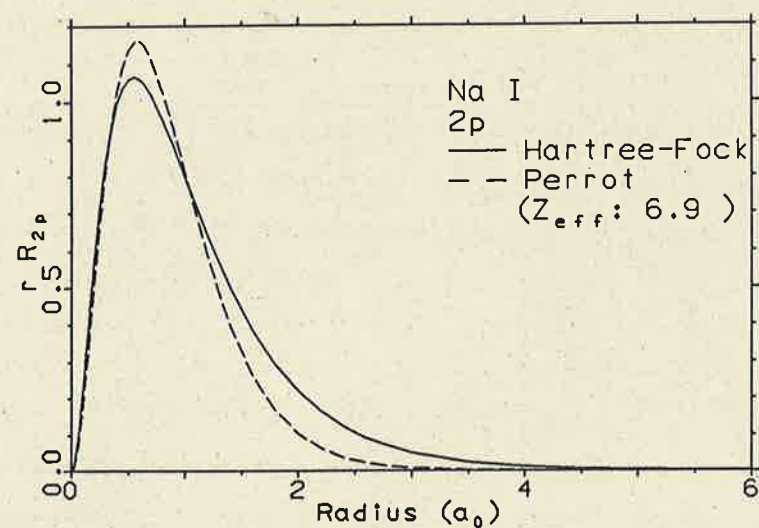


Abb. II.6: $2p$ -Radialwellenfunktion (atomare Einheiten) für Natrium nach Hartree-Fock (durchgezogene Linie) und wasserstoffähnlich nach Perrot (gestrichelte Linie).

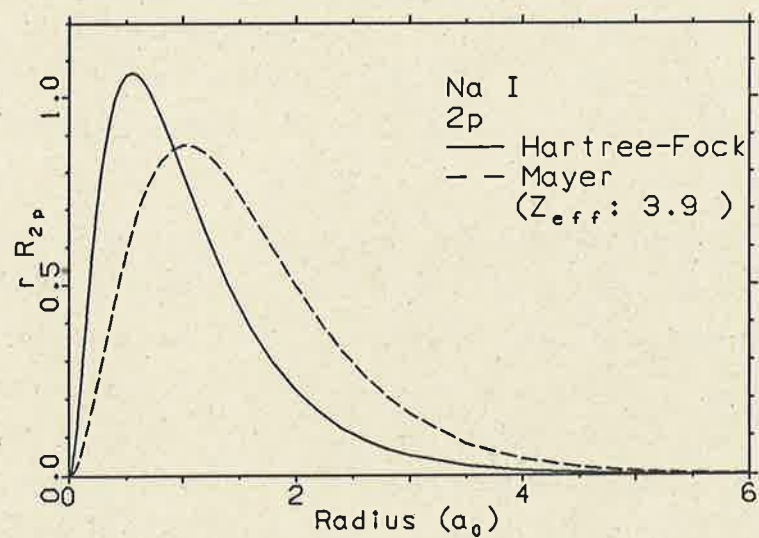


Abb. II.7: $2p$ -Radialwellenfunktion (atomare Einheiten) für Natrium nach Hartree-Fock (durchgezogene Linie) und wasserstoffähnlich nach Mayer (gestrichelte Linie).

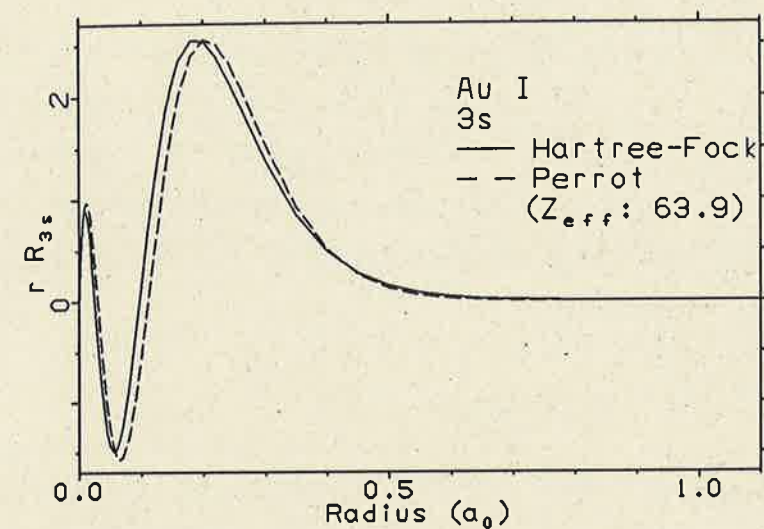


Abb. II.8: $3s$ -Radialwellenfunktion (atomare Einheiten) für Gold nach Hartree-Fock (durchgezogene Linie) und wasserstoffähnlich nach Perrot (gestrichelte Linie).

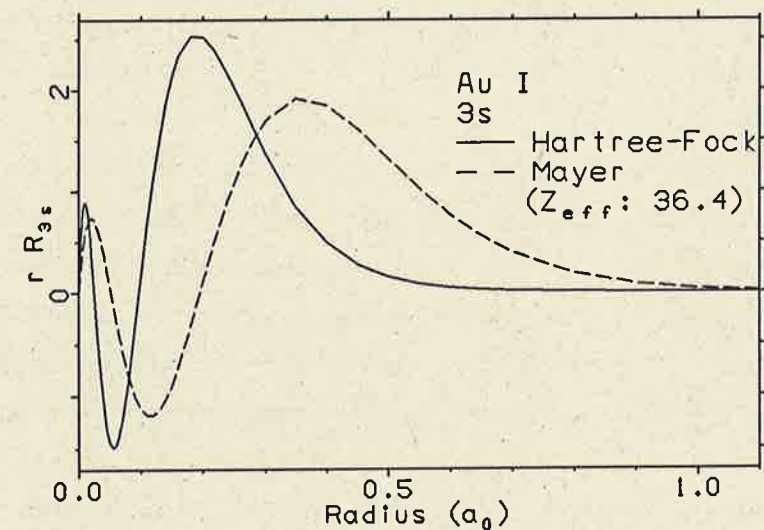


Abb. II.9: $3s$ -Radialwellenfunktion (atomare Einheiten) für Gold nach Hartree-Fock (durchgezogene Linie) und wasserstoffähnlich nach Mayer (gestrichelte Linie).

Das Übergangsintegral

Da das Radialmatrixelement $R_{nl}^{n'l'}$ durch ein Integral über zwei oszillierende Funktionen gegeben ist, genügt es nicht, die Wellenfunktionen einzeln annähernd zu reproduzieren. Kleine Fehler in den Wellenfunktionen können zu großen Fehlern nach der Integration führen, was noch dadurch verstärkt wird, daß das Radialmatrixelement quadratisch in die Oszillatorstärke eingeht. Aus diesem Grunde wird oftmals das Übergangsintegral

$$\sigma^2 = \frac{1}{4(\max\{l, l'\})^2 - 1} \left(R_{nl}^{n'l'} \right)^2 \quad (II.18)$$

betrachtet. Um einen Eindruck von den Abweichungen der verschiedenen Näherungen untereinander und vom Experiment zu vermitteln, berechneten wir Übergangsintegrale für einige einfache Systeme in der Wasserstoffnäherung mit Z_{eff} nach Perrot und verglichen diese mit Ergebnissen der "Coulomb-Approximation" gemäß Bates und Damgaard [24] und mit experimentellen Werten. Mit Hilfe der "Coulomb-Approximation" ist in vielen Fällen eine schnelle Abschätzung von Oszillatorstärken möglich, wenn genaue Werte für die Übergangsenergie verfügbar sind. Sie beruht auf der Tatsache, daß der Hauptbeitrag zum Radialmatrixelement $R_{nl}^{n'l'}$ aus einem Bereich hoher Werte von r stammt. In diesem Bereich kann das zentralsymmetrische Potential des Atoms durch seine asymptotische Coulombform $-(Z_0 + 1)/r$ genähert werden. Führt man noch eine effektive Hauptquantenzahl ein, die durch die Übergangsenergie festgelegt ist, so kann die radiale Schrödingergleichung für den allgemeinen Fall gelöst werden. Eine genaue Behandlung der "Coulomb-Approximation" und der Voraussetzungen für ihre Anwendbarkeit ist in dem bekannten Artikel von Bates und Damgaard [24] gegeben. Diesem Artikel und einer Arbeit von Naqvi [25] entnahmen wir die Werte für die Übergangsintegrale in der "Coulomb-Approximation". Aus tabellierten Werten für Übergangsenergie und Oszillatorstärke nach Wiese [26, 27] berechneten wir mit Gl. (II.12) und Gl. (II.18) experimentelle Übergangsintegrale. Tab. II.2 zeigt die Resultate zusammen mit Z_{eff} für Anfangs- und Endzustand.

	Modell dieser Arbeit			Bates Damgaard	Wiese	
Li I	Z_i	Z_f	σ_{hyd}^2	σ_{CA}^2	σ_{exp}^2	$\sigma_{hyd}^2/\sigma_{exp}^2$
$2s \rightarrow 2p$	0.92	0.83	12.5	5.5	5.53	2.26
$2s \rightarrow 3p$	0.92	0.74	0.66	0.018	0.0195	33.8
$2s \rightarrow 4p$	0.92	0.72	0.18	0.014	0.0144	12.5
$2s \rightarrow 5p$	0.92	0.72	0.05	0.0069	0.00888	5.63
Be I						
$2s^2 \rightarrow 2sp$	1.71	1.62	3.36	2.0	1.75	1.92
Na I						
$3s \rightarrow 3p$	1.55	1.51	23.4	6.1	6.35	3.69
$3s \rightarrow 4p$	1.55	0.94	2.10	0.052	0.0514	40.9
$3s \rightarrow 5p$	1.55	0.69	0.78	0.0067	0.00691	113.
Al I						
$4s \rightarrow 4p$	1.44	1.34	94.6	17	20.3	4.66
$4s \rightarrow 5p$	1.44	0.73	2.41	0.24	0.249	9.68
Ca II						
$4s \rightarrow 4p$	3.88	3.54	13.1	4.3	4.50	2.91
Cs I						
$6s \rightarrow 6p$	2.35	2.21	179.	9.9	—	—
$6s \rightarrow 7p$	2.35	1.62	8.90	0.13	—	—

Tab. II.2: Übergangsintegral σ^2 (in atomaren Einheiten) und effektive Kernladungszahlen für verschiedene Übergänge in einfachen Systemen.

Die Übergangsintegrale der Tab. II.2 in der "Coulomb-Approximation" stimmen gut mit experimentellen Daten überein. Dazu werden die Übergangsenergien mit hoher Genauigkeit benötigt, um die effektiven Hauptquantenzahlen zu bestimmen. Bates und Damgaard erwähnen, daß die σ^2 -Werte der Übergänge, die in der obigen Tabelle ausgewählt wurden, sehr sensitiv auf Änderungen reagieren. Bereits durch eine Veränderung der effektiven Hauptquantenzahl um etwas mehr als ein Prozent kann jeder beliebige Wert reproduziert werden. Diese Genauigkeit für die Energien ist im Rahmen des SHML nicht erreichbar, so daß wir diese Methode nicht anwenden können. Zudem ist zu beachten, daß in der "Coulomb-Approximation" auch bei Verwendung der experimentell bekannten Energien Abweichungen bis zu 100% auftreten können [28, S.343].

Das Modell dieser Arbeit hingegen liefert für σ^2 Resultate, die insbesondere bei Übergängen zwischen Hauptschalen erheblich von experimentellen Werten abweichen. Die obige Tabelle enthält aber nur Atome im Grundzustand oder in der ersten Ionisationsstufe. Betrachtet man Atome mit mittlerem oder hohem Ionisationsgrad, so zeigen die Ergebnisse der Wasserstoffnäherung eine zufriedenstellende Übereinstimmung mit der "Coulomb-Approximation" und mit experimentellen Werten. Dies ist in Tab. II.3 am Beispiel des O VI dargestellt. Die Daten für die "Coulomb-Approximation" sind in einem Artikel von Varsavsky [29] enthalten.

Unsere Berechnungen bestätigen auch eine Beobachtung, die Varsavsky [29] gemacht hat. Ist bei Übergängen mit $\Delta n \neq 0$ die größere der beiden Drehimpulsquantenzahlen l mit der größeren Hauptquantenzahl n verbunden, so sind die Werte der Wasserstoffnäherung höher als die Werte der "Coulomb-Approximation". Im umgekehrten Fall liefert die Wasserstoffnäherung niedrigere Werte.

Der Einfluß der effektiven Kernladungszahl des Endniveaus Z_f bei konstantem Z_i des Ausgangsniveaus ist in Abb. II.10 für zwei Übergänge aus Tab. II.2 dargestellt. Zum Vergleich sind die Ergebnisse der Wasserstoffnäherung mit Z_{eff} nach Abdel-Hady et al. [21] mit abgebildet. Die durchgezogene, horizontale Linie kennzeichnet den σ^2 -Wert der "Coulomb-Approximation".

	Modell dieser Arbeit			Bates Damgaard	Wiese
	Z_i	Z_f	σ_{hyd}^2	σ_{CA}^2	σ_{exp}^2
$2s \rightarrow 2p$	5.92	5.83	0.264	0.239	0.222
$2s \rightarrow 3p$	5.92	5.74	0.0754	0.045	0.0431
$2s \rightarrow 4p$	5.92	5.71	0.0146	0.0097	—
$3s \rightarrow 3p$	5.78	5.74	1.63	1.45	1.40
$3s \rightarrow 4p$	5.78	5.72	0.266	0.132	—
$4s \rightarrow 4p$	5.74	5.72	5.50	4.85	—
$2p \rightarrow 4s$	5.83	5.74	0.00122	0.00243	—
$2p \rightarrow 3d$	5.83	5.66	0.0425	0.0373	0.0570
$3p \rightarrow 3d$	5.74	5.66	0.212	0.182	0.187
$3d \rightarrow 4p$	5.66	5.72	0.00433	0.00462	—

Tab. II.3: Übergangsintegral σ^2 (in atomaren Einheiten) und effektive Kernladungszahlen für verschiedene Übergänge in O VI.

Diese Kurven zeigen ein oszillierendes Verhalten. Eine Variation der effektiven Kernladungszahl des Endniveaus bedeutet eine Verschiebung der Knoten der Wellenfunktion, wodurch an bestimmten Stellen nahezu Auslöschung auftritt. Das richtige Z_f ist durch den Schnittpunkt der Linie für das Resultat gemäß Bates und Damgaard mit der Kurve für σ^2 bestimmt. Dieser liegt in Bereichen, in denen kleine Änderungen von Z_f zu ganz unterschiedlichen Werten für σ^2 führen. Dies wurde bei allen Übergängen mit $\Delta n \neq 0$ aus Tab. II.2 beobachtet, nicht jedoch bei $\Delta n = 0$ Übergängen. Es scheint, daß die beiden effektiven Kernladungszahlen empfindlich in die Berechnung von σ^2 bei Übergängen zwischen Hauptschalen eingehen. Da wir aber nur einige Werte berechnet haben, ist diese Aussage nicht signifikant.

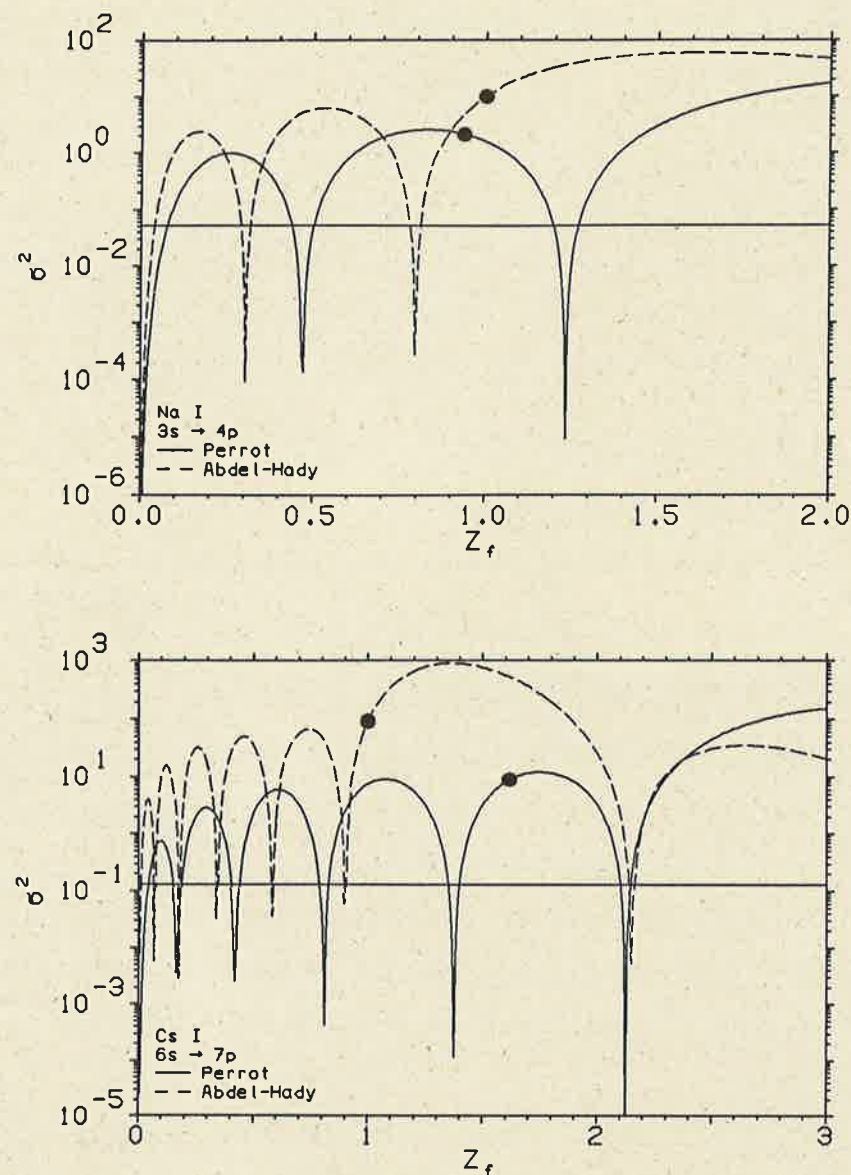


Abb. II.10: Übergangintegral σ^2 (atomare Einheiten) für Natrium und Caesium bei Variation der effektiven Kernladungszahl des Endniveaus Z_f nach Perrot (durchgezogene Linie, Na : $Z_i = 1.55$ Cs : $Z_i = 2.35$) und zum Vergleich nach Abdel-Hady et al. [21] (gestrichelte Linie, $Z_i = 1.00$ in beiden Fällen). Die Punkte markieren die Werte, die sich mit den entsprechenden Z_f ergeben, und die horizontale Linie den Wert gemäß der "Coulomb-Approximation".

Beispiele für diskrete Oszillatorstärken

In Tab. II.4 sind einige Oszillatorstärken, die wir mit Hilfe der bereits berechneten Übergangintegrale und den Energien aus dem SHML bestimmt haben, und experimentelle Daten nach Wiese [26,27] aufgelistet. Die Übergangsenergie bestimmten wir aus der Differenz der totalen Energien der Konfiguration vor und nach dem Übergang. Die Meßwerte für Cäsium sind in einem Artikel von Exton [30] aufgeführt. Zusätzlich geben wir als Beispiel für ein hochionisiertes Atom Werte für Neon VI. Wir wählten Neon VI, da hierfür experimentelle Werte verfügbar sind.

Die Übersicht zeigt, daß die Oszillatorstärken aller $\Delta n = 0$ Übergänge und für hochionisierte Ionen auch der $\Delta n \neq 0$ Übergänge mit zufriedenstellender Genauigkeit reproduziert werden. Bei allen anderen Übergängen ergeben sich unter Umständen große Abweichungen.

Würden die berechneten Energien mit den experimentellen Energien übereinstimmen, so wären die Quotienten aus der berechneten und der experimentellen Oszillatorstärke identisch mit denen der entsprechenden Übergangintegrale aus Tab. II.2, da die Oszillatorstärke dem Produkt aus Übergangintegral und Übergangsenergie proportional ist. Die Abweichung der beiden Quotienten voneinander ist ein Maß für den Einfluß der berechneten Energien. Für Li sind diese Abweichungen besonders stark, was darauf zurückzuführen ist, daß die Energien für Li im SHML nur sehr schlecht reproduziert werden. Aber auch bei Al treten starke Abweichungen auf. Beim Übergang $4s \rightarrow 4p$ reduziert sich das Verhältnis von 4.66 beim Übergangintegral auf 1.16 bei der Oszillatorstärke. Dies bedeutet, daß die Energie des Übergangs gegenüber der experimentellen Energie zu niedrig ist und damit der Fehler im Übergangintegral ausgeglichen wird. Der Übergang $4s \rightarrow 5p$ in Al zeigt genau den umgekehrten Fall. Durch eine zu hohe Übergangsenergie verschlechtert sich das Verhältnis von 9.68 auf 107. bei der Oszillatorstärke. Diesen beiden Beispiele machen deutlich, daß zur Bestimmung der Oszillatorstärken auch die Energien hinreichend genau bekannt sein müssen. Da wir nur genäherte Energien zur Verfügung haben, ist es auch ausreichend, die Radialintegrale in der Wasserstoffnäherung zu berechnen.

	diese Arbeit f_{hyd}	f_{exp}	$\frac{f_{hyd}}{f_{exp}}$
<i>Li I</i> $2s \rightarrow 2p$	0.499	0.753	0.663
<i>Li I</i> $2s \rightarrow 3p$	9.85	0.00552	1784.
<i>Li I</i> $2s \rightarrow 4p$	3.24	0.00480	675.
<i>Li I</i> $2s \rightarrow 5p$	8.73	0.00316	2762.
<i>Be I</i> $2s^2 \rightarrow 2sp$	1.02	1.36	0.750
<i>Na I</i> $3s \rightarrow 3p$	0.329	0.982	0.335
<i>Na I</i> $3s \rightarrow 4p$	0.604	0.0142	42.5
<i>Na I</i> $3s \rightarrow 5p$	0.266	0.00221	120.
<i>Al I</i> $4s \rightarrow 4p$	1.64	1.41	1.16
<i>Al I</i> $4s \rightarrow 5p$	0.364	0.00340	107.
<i>Ca II</i> $4s \rightarrow 4p$	2.05	1.04	1.97
<i>Cs I</i> $6s \rightarrow 6p$	3.17	1.05	3.02
<i>Cs I</i> $6s \rightarrow 7p$	3.29	0.0148	22.
<i>Ne VIII</i> $2s \rightarrow 2p$	0.0528	0.152	0.347
<i>Ne VIII</i> $2s \rightarrow 3p$	0.397	0.298	1.33
<i>Ne VIII</i> $2p \rightarrow 3s$	0.0127	0.0245	0.518
<i>Ne VIII</i> $2p \rightarrow 3d$	0.698	0.667	1.05
<i>Ne VIII</i> $3s \rightarrow 3p$	0.0641	0.256	0.250
<i>Ne VIII</i> $3p \rightarrow 3d$	0.0544	0.0382	1.42

Tab. II.4: Oszillatorstärke für verschiedene Übergänge in einfachen Systemen.

Eine Möglichkeit, die Ergebnisse zu verbessern, besteht darin, die Dipolmatrixelemente in einer anderen Form zu entwickeln. In der vorliegenden Arbeit wurden die Matrixelemente in der Längenform

$$R_{nl}^{n'l'} = \int_0^\infty R_{nl}(r) R_{n'l'}(r) r^3 dr \quad (II.19)$$

berechnet, da dann eine analytische Lösung möglich ist. Die Geschwindigkeitsform

$$R_{nl}^{n'l'} = \frac{2 \times 13.6 \times 10^{-3}}{\Delta E} \int_0^\infty \left(R_{nl} \frac{dR_{n'l'}}{dr} + \begin{cases} l', & \text{falls } l' > l \\ -l, & \text{falls } l' < l \end{cases} \frac{R_{nl} R_{n'l'}}{r} \right) r^2 dr \quad (II.20)$$

ist eine Alternative hierzu [31]. Beide Formen ergeben mit exakten Wellenfunktionen die gleichen Resultate. Bei genäherten Wellenfunktionen sind die Ergebnisse im allgemeinen verschieden, da die Wellenfunktionen in der Längenform in großen Abständen und in der Geschwindigkeitsform in mittleren Abständen vom Kern besonders gewichtet werden. Bei Verwendung von Wellenfunktionen, die an Energien angepasst sind, ist die Geschwindigkeitsform besser geeignet als die Längenform. Diese Wellenfunktionen sind in mittleren Abständen vom Kern gut bestimmt, was genau dem Bereich entspricht, der für die Geschwindigkeitsform wichtig ist [32, 28 S.338 und 31 S.252].

Die Summenregel

Jede Methode zur Berechnung der Oszillatorstärken sollte die Thomas-Reiche-Kuhn Summenregel erfüllen. Sie behält auch ihre Gültigkeit, wenn man Einteilchenübergänge in einem Vielelektronensystem betrachtet [16, 33]. Die Summenregel fordert, daß die Summe der Oszillatorstärken aller möglichen Übergänge einer bestimmten Konfiguration gleich der Anzahl der gebundenen Elektronen N ist.

$$\sum_{n'l, n'l'} f_{nl \rightarrow n'l'} + \sum_{n'l} \int_{I_{nl}}^\infty \frac{df_{nl}}{dh\nu} dh\nu = N \quad (II.21)$$

Dies stellt eine notwendige, aber keine hinreichende Bedingung dar. Wird die Summenregel verletzt, so sind die Oszillatorstärken unzuverlässig. Aus dem Erfüllen der Summenregel folgt aber nicht die Richtigkeit der Oszillatorstärken. Dies zeigen zum Beispiel die Berechnungen von Green, Weber und Krawitz, die Oszillatorstärken auf zwei verschiedene Arten berechneten und sehr verschiedene

	N	Σ_b	[%]	Σ_c	Σ_t
Al I	13	3.30	25.4	29.27	32.57
Al IV	10	1.65	16.5	12.79	14.44
Al IX	5	2.32	46.4	3.03	5.35
Al XI	3	1.63	54.3	1.56	3.19
Au I	79	42.51	53.8	535.32	577.83
Au XXV	50	25.35	50.7	84.28	109.63
Au XXXIV	46	20.64	44.9	48.72	69.36
Au LXV	15	9.75	65.0	6.09	15.84
Au LXXV	5	3.13	62.6	1.93	5.06
Au LXXVIII	1	0.56	56.0	0.43	0.99

Tab. II.5: Summe der Oszillatorstärken für diskrete Übergänge und für Übergänge ins Kontinuum in der Wasserstoffnäherung.

Resultate erhielten, obwohl die Summenregel in beiden Fällen nahezu erfüllt war [34].

Tab. II.5 zeigt die Summe der Oszillatorstärken der gebunden-gebunden Übergänge Σ_b bis $n' = 50$, der gebunden-frei Übergänge Σ_c und die totale Summe Σ_t für Aluminium- und Goldionen im Grundzustand mit N gebundenen Elektronen. Zusätzlich ist der Anteil von Σ_b an der gesamten Oszillatorstärke N in Prozent angegeben.

In der Summe über die diskreten Oszillatorstärken wurde bis $n' = 10$ die effektive Kernladungszahl nach Perrot vor und nach dem Übergang verwendet. Die Energie erhält man aus der Differenz der totalen Energie der Ausgangs- und der Endkonfiguration im SHML. Für $n' = 11, \dots, 50$ ist das Modell von Perrot für die Endkonfiguration nicht anwendbar. Daher berechneten wir deren Energie als Summe aus der Energie der passiven Elektronen gemäß Perrot und der Wasserstoffenergie $E_{n''} = \left(\frac{Z_0+1}{n'}\right)^2 13.6 \times 10^{-3} (\text{keV})$ des aktiven Elektrons, wobei Z_0 die Ladung des Ions ist. Als effektive Kernladungszahl des Endniveaus verwen-

deten wir ebenfalls $Z_0 + 1$. Die Integration der differentiellen Oszillatorstärken führten wir bis zum 40 fachen der Übergangsenergie durch, da der Beitrag der höheren Photonenenergien vernachlässigbar ist. Der Verlauf der differentiellen Oszillatorstärke in Abhängigkeit von der Photonenenergie $h\nu$ ist in Abb. II.11 am Beispiel des 2p-Niveaus im Grundzustand von Au XXXIV dargestellt.

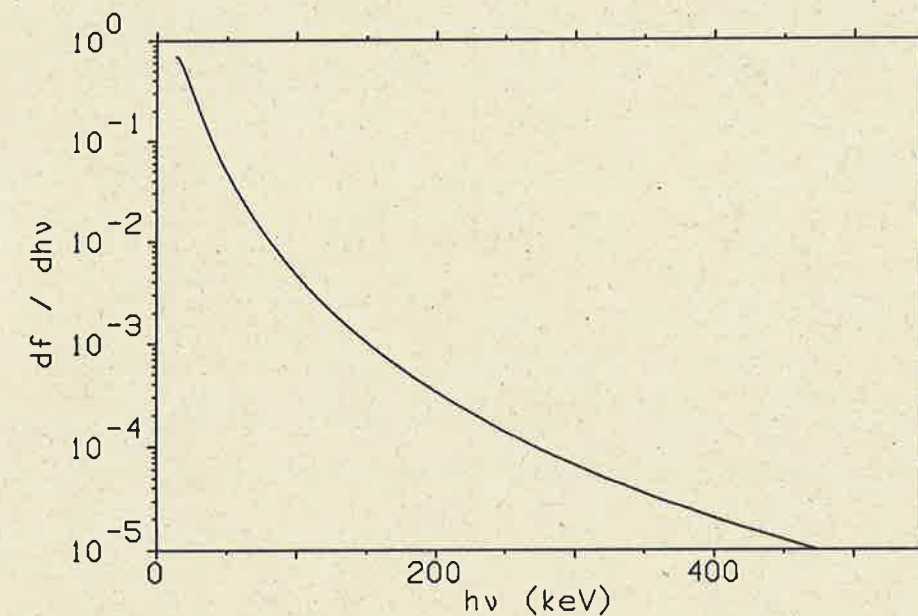


Abb. II.11: Differentielle Oszillatorstärke des Niveaus 2p in Au XXXIV.

Der Anteil der gebunden-gebunden Übergänge beträgt zwischen 16.5% und 65%, was vernünftig erscheint. Die Gesamtstärke der Übergänge in das Kontinuum ist bei den neutralen und schwach ionisierten Elementen aber viel zu hoch, da in diesem Falle — wie bei den diskreten Oszillatorstärken — die Bedingungen der Wasserstoffnäherung nicht erfüllt sind. Die äußeren Elektronen sind nur schwach gebunden und befinden sich nicht mehr unter dem dominierenden Einfluß eines Kernes, der durch die anderen Elektronen nur abgeschirmt wird, sondern in einem Potential, das vom Coulombpotential stark abweicht. Betrachtet man Elemente in höheren Ionisationsstufen, so sind die Ergebnisse besser und werden für wasserstoffähnliches Gold nahezu exakt, obwohl die Energien aus dem SHML berechnet wurden.

Die Summenregel ist in der Wasserstoffnäherung mit verschiedenen effektiven Kernladungszahlen bei niedrigen Ionisationsstufen verletzt, was auf eine Unzuverlässigkeit des Verfahrens hinweist. Da die Methode bei mittleren und höheren Ionisationszuständen zufriedenstellende Resultate gibt und ein alternatives Modell nicht verfügbar ist, wollen wir sie dennoch bei unseren Berechnungen anwenden.

III. Das statistische Modell

In diesem Kapitel werden die statistischen Methoden eingeführt, mit denen wir den elektronischen Zustand der Materie beschreiben, der den Extinktionskoeffizienten festlegt. Befindet sich die Materie im lokalen thermodynamischen Gleichgewicht, dann ist dieser Zustand durch Temperatur und Dichte eindeutig festgelegt. Es ist dann möglich, Tabellen für die Extinktionskoeffizienten zu erstellen, die in einem Strahlungshydrodynamik-Programm (zum Beispiel MULTI 3 [35]) weiterverarbeitet werden.

III.1. LOKALES THERMODYNAMISCHES GLEICHGEWICHT (LTE)

Der Zustand der Materie ist bestimmt, wenn die Verteilung der Elektronen auf gebundene und freie Zustände bekannt ist. Im thermodynamischen Gleichgewicht ist dieser Zustand bereits durch zwei thermodynamische Variablen über die Gleichgewichtsbeziehungen der statistischen Mechanik festgelegt. Wir wählen hierfür die Temperatur T und die Dichte ρ . Wenn wir LTE annehmen, so bedeutet dies, daß wir diese Beziehungen für lokale Werte $T(\vec{r})$ und $\rho(\vec{r})$ der Materie anwenden, wobei sich die Temperatur über einen Bereich von einigen mittleren freien Weglängen nicht ändert. Voraussetzung hierfür ist, daß das Plasma stoßdominiert ist, da dann Elektronenanregung und Abregung sowie Ionisation und Rekombination nur durch Elektronenstöße festgelegt sind, und der Einfluß der Strahlung auf die Besetzungszahlen vernachlässigbar ist.

III.2. DAS MODELL DES GEMITTELTEN ATOMS (AVERAGE ATOM MODEL)

In einem Plasma gegebener Temperatur und Dichte befinden sich Atome in verschiedenen Ionisations- und Anregungszuständen, die in unterschiedlicher Weise zum gesamten Extinktionskoeffizienten beitragen. Dieser kann berechnet werden, wenn die Häufigkeit der einzelnen Konfigurationen aus der Sahagleichung bestimmt wird. Opazitätsberechnungen, welche die wichtigen Konfigurationen explizit berücksichtigen ("detailed configuration accounting DCA" oder "explicit ion method"), sind für Niedrig-Z Material mit $Z \leq 30$ durchführbar und werden bei Huebner [36] beschrieben.

Bei schweren Elementen ist dies selbst mit modernen Computern nicht möglich, da man Millionen von Konfigurationen berücksichtigen müßte. Für Hoch-Z Ma-

terial wird häufig das Modell des gemittelten Atoms verwendet, das in der englischen Literatur als "average ion model" oder "average atom model" bezeichnet wird. Man berücksichtigt nur ein mittleres Atom, das eine Konfiguration besitzt, die dem Mittelwert über alle Konfigurationen der tatsächlich vorliegenden Verteilung entspricht. Damit reduziert sich die Komplexität des Problems beträchtlich, da man nur noch die Absorptionsquerschnitte für eine Konfiguration berechnen muß. Es finden verschiedene Modelle Anwendung, die sich hinsichtlich des zugrundeliegenden Atommodells unterscheiden. Carson, Mayers und Stibbs [37] führten Rechnungen mit dem Thomas-Fermi Modell durch. Rozsnyai [38] entwickelte ein Modell auf der Grundlage der relativistischen Hartree-Fock-Slater Methode. Ein einfaches Modell, das bereits 1932 von Strömgren [39] eingeführt und 1947 von Mayer [6] verbessert wurde, verwendet das SHM. Es wurde oftmals für Opazitätsberechnungen ohne l -Aufspaltung verwendet [7, 8, 15] und kann in einfacher Weise um l -Aufspaltung erweitert werden.

Die Besetzung der Energieniveaus ist durch die Fermi-Dirac Verteilung zur Temperatur T (keV) gemäß

$$P_{nl} = \frac{2(2l+1) \times d_{nl}}{1 + \exp\left(\frac{\tilde{E}_{nl}}{T} + \tilde{\alpha}\right)} \quad (III.1)$$

gegeben, wodurch sich gebrochenzahlige Besetzungszahlen ergeben. Hier machen wir von der Voraussetzung des LTE Gebrauch, da sich die Fermi-Dirac Verteilung nur im thermodynamischen Gleichgewicht einstellt. Eigentlich ist diese Verteilung nur auf unabhängige Teilchen anwendbar, also wenn die Energieniveaus nicht von den Besetzungszahlen abhängen. Da wir die Eielektronenenergien aus dem SHML mit den gemittelten Besetzungszahlen nach Gl. (III.1) berechnen, sind die Energieniveaus aber Funktionen der Besetzung aller Schalen. Die Anwendbarkeit der Fermi-Dirac Verteilung für diesen Fall wechselwirkender Teilchen ist in Ref. [6, 40, 41] diskutiert.

Der Term $2(2l+1)$ steht für die Entartung des Niveaus im freien Atom. Der Faktor d_{nl} berücksichtigt den bei hohen Dichten wirksam werdenden Effekt der Druckionisation. Der Abstand zwischen den Atomen ist bei hohen Dichten so gering, daß sich die besetzten Orbitale benachbarter Atome überlappen, wodurch aufgrund des Ausschließungsprinzips von Pauli Elektronen ins Kontinuum gehoben

werden. Der Raum, der einem einzelnen Atom zur Verfügung steht, ist durch den Radius

$$R_0 = \left(\frac{3}{4\pi N_i}\right)^{\frac{1}{3}} = \left(\frac{3Am_H}{4\pi\rho}\right)^{\frac{1}{3}} \quad (III.2)$$

der Ionenkugelschale gekennzeichnet, der sich aus der Teilchendichte der Ionen $N_i = \rho/Am_H$ mit der Dichte ρ (g/cm³), der Massenzahl A des Elements und der Masse des Wasserstoffatoms m_H (g) ergibt. Zimmerman und More [42] beschreiben die Druckionisation im SHM mit l -Entartung gemäß

$$d_n = \frac{1}{1 + \left(\alpha \frac{R_n^0}{R_0}\right)^\beta}, \quad (III.3)$$

wobei R_n^0 der Radius der Hauptschale n im Grundzustand des freien Atoms in der Wasserstoffnäherung ist. Die Zahlenwerte für die Parameter α und β sind in der Arbeit nicht enthalten, wurden aber von Tsakiris und Eidmann [8] bestimmt, indem sie den Ionisationszustand mit Resultaten aus dem Thomas-Fermi Modell verglichen. Sie erzielten mit $\alpha = 3$ und $\beta = 4$ eine gute Übereinstimmung.

Wir modifizieren diese Formel für den Fall der l -Aufspaltung, indem wir R_n^0 durch den Radius R_{nl}^0 der Schale (nl) ersetzen

$$d_{nl} = \frac{1}{1 + \left(\alpha \frac{R_{nl}^0}{R_0}\right)^\beta}. \quad (III.4)$$

R_{nl}^0 für das neutrale Atom im Grundzustand berechnen wir wasserstoffähnlich mit der effektiven Kernladung Z_n^0 des Niveaus nach Perrot aus

$$R_{nl}^0 = \frac{1}{2Z_n^0} (3n^2 - l(l+1)) a_0. \quad (III.5)$$

Alternativ hierzu untersuchten wir die Druckionisation in der Form von Mancini und Fontán [43]. Da die Ergebnisse nahezu identisch waren, behielten wir das Schema von Zimmerman und More bei. Unser Programm erlaubt jedoch, zwischen den beiden Versionen zu wählen.

\tilde{E}_{nl} (keV) kennzeichnet die Energie des Niveaus mit Quantenzahlen (nl), die sich aus der Energie E_{nl} der Schale im SHML und einem Korrekturfaktor ΔE_{nl} zusammensetzt. Letzterer berücksichtigt die Wechselwirkung der freien Elektronen untereinander und mit dem Ion.

ΔE_{nl} (keV) berechnen wir im Rahmen des Ionensphärenmodells (ion sphere model) von Mayer [6], das auch bei Pomraning [15] beschrieben ist. Die Ladung des gemittelten Ions beträgt

$$Z_0 = Z - \sum_{nl} P_{nl} . \quad (III.6)$$

Wir legen um das Ion eine Kugelschale mit Radius R_0 und verteilen darin die freien Elektronen homogen, so daß diese nach außen elektrisch neutral ist. Freie Elektronen außerhalb der Sphäre besitzen keine Wechselwirkung mit dem Ion, freie Elektronen innerhalb verringern die Bindungsenergie. Das elektrostatische Potential ϕ (Volt) der freien Elektronen im Abstand r beträgt

$$\phi(r) = \frac{Z_0 e}{2R_0} \left(3 - \frac{r^2}{R_0^2} \right) . \quad (III.7)$$

Nach Mittelung über die Ladungsverteilung des gebundenen Elektrons erhält man [6]:

$$\Delta E_{nl} = \frac{Z_0 e^2}{2R_0} \left(3 - \frac{\overline{(r^2)}_{nl}}{R_0^2} \right) \times 10^{-3} . \quad (III.8)$$

$\overline{(r^2)}_{nl}$ ist der mittlere quadratische Radius des Orbitals (nl), der in der Wasserstoffnäherung durch

$$\overline{(r^2)}_{nl} = a_0^2 \frac{n^4}{Z_n^2} \left(1 + \frac{3}{2} \left(1 - \frac{l(l+1) - \frac{1}{3}}{n^2} \right) \right) \quad (III.9)$$

gegeben ist.

Aus der Wechselwirkung eines freien Elektrons mit dem Ion und den anderen freien Elektronen resultiert, daß ein freies Elektron ohne kinetische Energie eine negative totale Energie besitzt. Mittelt man die Wechselwirkungsenergie über das Volumen der Ionensphäre, so beträgt diese in keV [36]

$$\frac{3}{5} \frac{Z_0 e^2}{2R_0} \times 10^{-3} . \quad (III.10)$$

Diese Energie muß zur Energie jedes Niveaus addiert werden, damit alle freien Elektronen in der Ionensphäre eine positive totale Energie besitzen (Kontinuumsabsenkung).

Nach Zusammenfassen der Gl. (III.8) und Gl. (III.10) und Einsetzen der Gl. (III.2) folgt für ΔE_{nl} in keV

$$\Delta E_{nl} = 9.805 \times 10^{-3} Z_0 \times \left\{ 3.6 \left(\frac{\rho}{A} \right)^{\frac{1}{3}} - 0.5192 \left(\frac{n^4 \rho}{Z_n^2 A} \right) \left(1 + \frac{3}{2} \left(1 - \frac{l(l+1) - \frac{1}{3}}{n^2} \right) \right) \right\} . \quad (III.11)$$

Zuletzt benötigen wir noch den Entartungsparameter $\tilde{\alpha}$, um die Besetzungszahlen nach Gl. (III.1) zu berechnen. In der Fermi-Dirac Statistik ist das chemische Potential μ oder der Entartungsparameter $\tilde{\alpha} = -\mu/T$ durch die Teilchendichte der freien Elektronen N_e (cm^{-3}) bestimmt [44]. Diese ist im "average atom model" direkt der Anzahl der freien Elektronen pro Atom proportional

$$N_e = Z_0 \times N_i , \quad (III.12)$$

so daß wir den Entartungsparameter selbstkonsistent berechnen können. Der Entartungsparameter ist durch die Bedingung

$$N_e = \frac{4\pi}{h^3} (2m_e T)^{\frac{3}{2}} \int_0^\infty \frac{u^{\frac{1}{2}}}{\exp(\tilde{\alpha} + u) + 1} du \quad (III.13)$$

$$= \frac{4\pi}{h^3} (2m_e T)^{\frac{3}{2}} F_{1/2}(\tilde{\alpha})$$

festgelegt, die jeder Elektronendichte N_e eindeutig einen Wert des Entartungsparameters zuordnet. Nach Einsetzen der Zahlenwerte für die Konstanten und mit Gl. (III.12) erhält man für $F_{1/2}$ (Fermi-Dirac Integral der Ordnung 1/2):

$$F_{1/2}(\tilde{\alpha}) = 2.776 \times 10^{-3} \frac{Z_0 \rho}{A T^{\frac{3}{2}}} . \quad (III.14)$$

Nach Umkehrung dieser Gleichung ist $\tilde{\alpha}$ als Funktion von Z_0 gegeben: $\tilde{\alpha} = H(Z_0)$. Wir berechneten 800 numerische Werte des Integrales im Bereich $-40 \leq \tilde{\alpha} \leq 40$ und überprüften diese im Bereich $-15.9 \leq \tilde{\alpha} \leq 4$ anhand der tabellierten Werte von Clayton [44]. Den zur jeweiligen Elektronendichte gehörenden Wert des Entartungsparameters erhalten wir durch lineare Interpolation aus den Tabellenwerten. Im Grenzfall hoher Entartung ($\tilde{\alpha} < -40$) benutzen wir als Näherung für das Fermi-Dirac Integral [44]

$$F_{1/2}(\tilde{\alpha}) = \frac{2}{3} (-\tilde{\alpha})^{\frac{3}{2}} \quad (III.15)$$

und im Grenzfall schwacher Entartung ($\tilde{\alpha} > 40$)

$$F_{1/2}(\tilde{\alpha}) = \exp(-\tilde{\alpha}) \Gamma\left(\frac{3}{2}\right) \quad (III.16)$$

Der Entartungsparameter berechnet sich dann nach

$$\tilde{\alpha} = -\frac{1}{2m_e T} \left(\frac{3N_e h^3}{8\pi} \right)^{\frac{2}{3}} = -2.588 \times 10^{-2} \frac{1}{T} \left(\frac{Z_0 \rho}{A} \right)^{\frac{2}{3}} \quad (III.17)$$

beziehungsweise

$$\tilde{\alpha} = -\ln \left(\frac{N_e h^3}{2(2\pi m_e T)^{\frac{3}{2}}} \right) = -\ln \left(3.132 \times 10^{-3} \frac{Z_0 \rho}{AT^{\frac{3}{2}}} \right) \quad (III.18)$$

Wir haben damit alle Formeln zusammengestellt, die wir für das "average atom model" benötigen, und fassen diese in einer Übersicht noch einmal zusammen.

(a) Besetzungszahlen

$$P_{nl} = \frac{2(2l+1) \times d_{nl}}{1 + \exp\left(\frac{\tilde{E}_{nl}}{T} + \tilde{\alpha}\right)}$$

(b) Druckionisation

$$d_{nl} = \frac{1}{1 + \left(\alpha \frac{R_{nl}^0}{R_0}\right)^\beta}$$

(c) Radius der Ionenkugelschale

$$R_0 = \left(\frac{3Am_H}{4\pi\rho} \right)^{\frac{1}{3}}$$

(d) Radius der Schale (nl) im neutralen Atom

$$R_{nl}^0 = \frac{1}{2Z_n^0} (3n^2 - l(l+1)) a_0$$

(e) effektive Kernladungszahlen

$$Z_n = Z - \sum_{m \leq n} P_m \sigma_{nm} \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{nm}\right) + \sum_m P_m q_{mn} \sum_{l=0}^{n-1} \frac{P_{nl}}{P_n} g_{nl}$$

(f) Energieniveaus

$$\tilde{E}_{nl} = E_{nl} + \Delta E_{nl}$$

$$E_{nl} = E_n - \left(\sum_m P_m [q_{nm} S_m - q_{mn} S_n] - \frac{Z_n}{n^2} g_{nl} \sum_m P_m q_{mn} \right) 27.21 \times 10^{-3} \text{ keV}$$

$$E_n = \left(-\frac{Z_n^2}{2n^2} + \sum_{m \geq n} P_m \frac{Z_m}{m^2} \sigma_{nm} \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{nm}\right) \right) 27.21 \times 10^{-3} \text{ keV}$$

$$\Delta E_{nl} = 9.805 \times 10^{-3} Z_0$$

$$\times \left\{ 3.6 \left(\frac{\rho}{A} \right)^{\frac{1}{3}} - 0.5192 \left(\frac{n^4 \rho}{Z_n^2 A} \right) \left(1 + \frac{3}{2} \left(1 - \frac{l(l+1) - \frac{1}{3}}{n^2} \right) \right) \right\} \text{ keV}$$

(g) Ladungszustand

$$Z_0 = Z - \sum_{nl} P_{nl}$$

(h) Fermi Integral

$$F_{1/2}(\tilde{\alpha}) = 2.795 \times 10^{-3} \frac{Z_0 \rho}{AT^{\frac{3}{2}}}$$

Wir berücksichtigen alle Niveaus bis zur Hauptquantenzahl $n = 10$, so daß wir insgesamt 55 Besetzungszahlen berechnen müssen. Diese sind durch die erste Gleichung der Übersicht bestimmt. Da die Energieniveaus aber selbst wieder von den Besetzungszahlen abhängen, erhalten wir ein Gleichungssystem mit 55 gekoppelten, nichtlinearen Gleichungen. Eine weitere Gleichung kommt durch die selbstkonsistente Berechnung des Entartungsparameters hinzu, da dieser auch von den Besetzungszahlen abhängt und umgekehrt. Letztlich müssen wir also für jede Temperatur und Dichte ein System von 56 gekoppelten, nichtlinearen Gleichungen lösen.

III.3. LÖSUNG DES GLEICHUNGSSYSTEMS

Zur Weiterverarbeitung in einem Strahlungshydrodynamik-Programm benötigen wir die Extinktionskoeffizienten im Bereich von 1 eV bis einige keV. Daher müssen wir auch unser Gleichungssystem in diesem Bereich lösen. Eine Lösung des Systems ist durch einen Satz von Werten für den Entartungsparameter, die Besetzungszahlen und die Energieniveaus gegeben, die gleichzeitig alle Gleichungen erfüllen.

Der Bereich hoher Temperaturen bereitet keine Probleme; bei niedrigen Temperaturen treten jedoch Schwierigkeiten auf. Auch im entarteten Fall, in dem man nur die 10 Niveaus zur Hauptquantenzahl n betrachtet, ist es nicht immer möglich, eine konsistente Lösung zu finden. So konnten zum Beispiel Tsakiris und Eidmann mit der Newton-Raphson Methode für Gold bei $T < 10\text{eV}$ und für Aluminium bei $T < 1\text{eV}$ keine Konvergenz erreichen [8]. Die Ursache hierfür ist rein numerischer Art und bereits seit langem bekannt. Schwierigkeiten bei niedrigen Temperaturen bereitet das diskontinuierliche Verhalten der Besetzungszahlen. Carson und Hollingsworth [45] diskutieren dieses Problem im Detail und geben ein Verfahren mit variabler Entartung der gebundenen Niveaus, um diese Probleme zu vermeiden. Ein anderes Schema ist bei Huebner beschrieben [36].

Mit Einführung der l -Aufspaltung reduziert sich die Entartung der gebundenen Niveaus von $2n^2$ auf $2(2l+1)$. Damit verringern sich auch die Diskontinuitäten in den Besetzungszahlen, was zu einer Verbesserung des Konvergenzverhaltens beiträgt. Wir versuchten aus diesem Grunde zunächst, unser System ohne weitere Eingriffe zur Vermeidung der Diskontinuitätsprobleme zu lösen.

Eine weitere Korrektur ist jedoch noch erforderlich. Wenn bei niedrigen Temperaturen die inneren Niveaus nahezu vollständig besetzt sind, ergeben sich aus dem SHML oftmals positive Eielektronenenergien für die äußeren Schalen, deren Besetzung nur sehr gering ist. Die Elektronen in diesen Niveaus sind daher nicht gebunden und müssen zur Anzahl der freien Elektronen addiert werden. Im Programm berücksichtigen wir dies durch:

$$\tilde{E}_{nl} \geq 0 \Rightarrow P_{nl} = 0 \quad . \quad (III.19)$$

Die Gleichungen unseres Systems lassen sich in die Form

$$G_i(P_1, \dots, P_{55}, \tilde{\alpha}) = 0 \quad , \quad i = 1, \dots, 56 \quad (III.20)$$

bringen. Wir versuchten die Nullstellen aller Gleichungen mit zwei Unterprogrammen der "NAG"-Bibliothek [46] zu bestimmen, die mit einer modifizierten Powell-Hybrid Methode arbeiten. Da in beiden Fällen unter 5 eV noch Konvergenzprobleme auftraten, gingen wir dazu über, das System iterativ zu lösen.

Alle iterativen Lösungsansätze beruhen auf dem gleichen Schema. Man wählt einen Startwert für die Besetzungszahlen und berechnet daraus die Energieniveaus und den Entartungsparameter. Mit diesen ermittelt man aus der Fermi-Dirac Verteilung mittels Gl. (III.1) neue Besetzungszahlen. Man wiederholt diese Schritte, bis die relative Abweichung zwischen den Besetzungszahlen zweier Schritte kleiner ist als eine vorgegebene Toleranz, und die Eielektronenenergien und der Entartungsparameter sich nicht mehr ändern. Die Anzahl der hierzu notwendigen Iterationsschritte hängt von der Wahl der Startbesetzung ab. Im günstigsten Falle könnte der Startwert bereits mit dem Endresultat übereinstimmen, so daß nur ein Iterationsschritt nötig wäre. Das Verfahren konvergiert aber auch bei geschickter Wahl des Startwertes nicht immer.

Mit dem iterativen Algorithmus, den Velarde et al. [47] für ihr "average atom model" ohne l -Aufspaltung verwenden, erreichten wir für Gold und Temperaturen kleiner als 70 eV selbst in 1000 Schritten keine Konvergenz. Das Konvergenzverhalten verschlechterte sich damit sogar noch gegenüber der Powell-Hybrid Methode.

Erst mit dem Algorithmus von Mancini und Fontán [43] gelang es uns, Konvergenz bis 1 eV für alle Elemente zu erreichen. Der Algorithmus, der für jedes Energiemodell im Rahmen einer "average atom"-Näherung angewendet werden kann, ist in Ref. [43] beschrieben. Es genügten in fast allen Fällen weniger als 30 Schritte, um eine selbstkonsistente Lösung des Systems zu erhalten, wobei wir als Startwert den Grundzustand eines nur wenig ionisierten Atoms setzten. Da im Programm keine unbesetzten Niveaus erlaubt sind, besetzten wir die verbleibenden Niveaus mit jeweils 0.1. Als Stopkriterium wählten wir dabei, daß die relative Abweichung der Besetzungszahlen zwischen dem i -ten und dem vorhergehenden

Iterationsschritt für alle Niveaus kleiner als 10^{-3} sein muß.

$$\frac{|P_{nl}^i - P_{nl}^{i-1}|}{P_{nl}^{i-1}} < 10^{-3} \quad \begin{matrix} n = 1, \dots, 10 \\ l = 0, \dots, n-1 \end{matrix} \quad (III.21)$$

Der Algorithmus ist in Abb. III.1 in Form eines Struktogramms mit unseren Bezeichnungen dargestellt. Als Eingabedaten müssen der Startwert für die Besetzungszahlen, die Parameter ω_{nl} , die Kernladungszahl, die Temperatur und die Dichte zur Vergütung gestellt werden. Zuerst wird dann die äußerste Schleife durchlaufen, die der Konvergenzindex KI kontrolliert, der zu Beginn jedes Durchganges auf Null gesetzt wird. Die Berechnung der neuen Besetzungen erfolgt anschließend in der inneren Doppelschleife. Man bestimmt die Besetzungszahlen gemäß der Fermi-Dirac Verteilung und erhält aus diesen und den alten Besetzungszahlen durch Bildung eines gewichteten Mittels die neuen Besetzungszahlen P_{nl}'' . Ist die relative Abweichung der neuen Werte von den alten Besetzungszahlen größer als eine vorgegebene Toleranz, die wir zu 10^{-3} wählten, so wird der Konvergenzindex um 1 erhöht. Danach wird die Anzahl gebundener Elektronen ermittelt. Ist diese kleiner als die Kernladungszahl, so wird damit die Zahl der freien Elektronen pro Atom und anschließend der Entartungsparameter berechnet. Bei niedrigen Temperaturen und Dichten sind fast alle Elektronen gebunden, und es kann bei einem Niveau geschehen, daß mehr als Z Elektronen gebunden wären. Dann bestimmt man den Entartungsparameter durch Umkehrung der Gl. (III.1). Mit dem neuen Entartungsparameter ergibt sich die Zahl der freien Elektronen pro Atom, und aus der Ladungserhaltung folgt die Zahl der gebundenen Elektronen. Zieht man von letzterer die Besetzung aller anderen Niveaus ab, so resultiert daraus die neue Besetzung des Niveaus. Anschließend wird der Parameter ω_{nl} um die Hälfte reduziert, um zu vermeiden, daß dieses Niveau in den weiteren Schritten erneut zu einer Gesamtanzahl von gebundenen Elektronen führt, die größer als die Kernladungszahl ist. Im Anschluß daran wird der Konvergenzindex überprüft. Ist dieser ungleich Null, dann sind noch nicht alle Besetzungszahlen mit ausreichender Genauigkeit bestimmt, und ein weiterer Iterationsschritt wird durchgeführt. Ansonsten wird die Iteration beendet, und man ermittelt mit den Resultaten für die Besetzungszahlen die Einelektronenenergien und den Entartungsparameter.

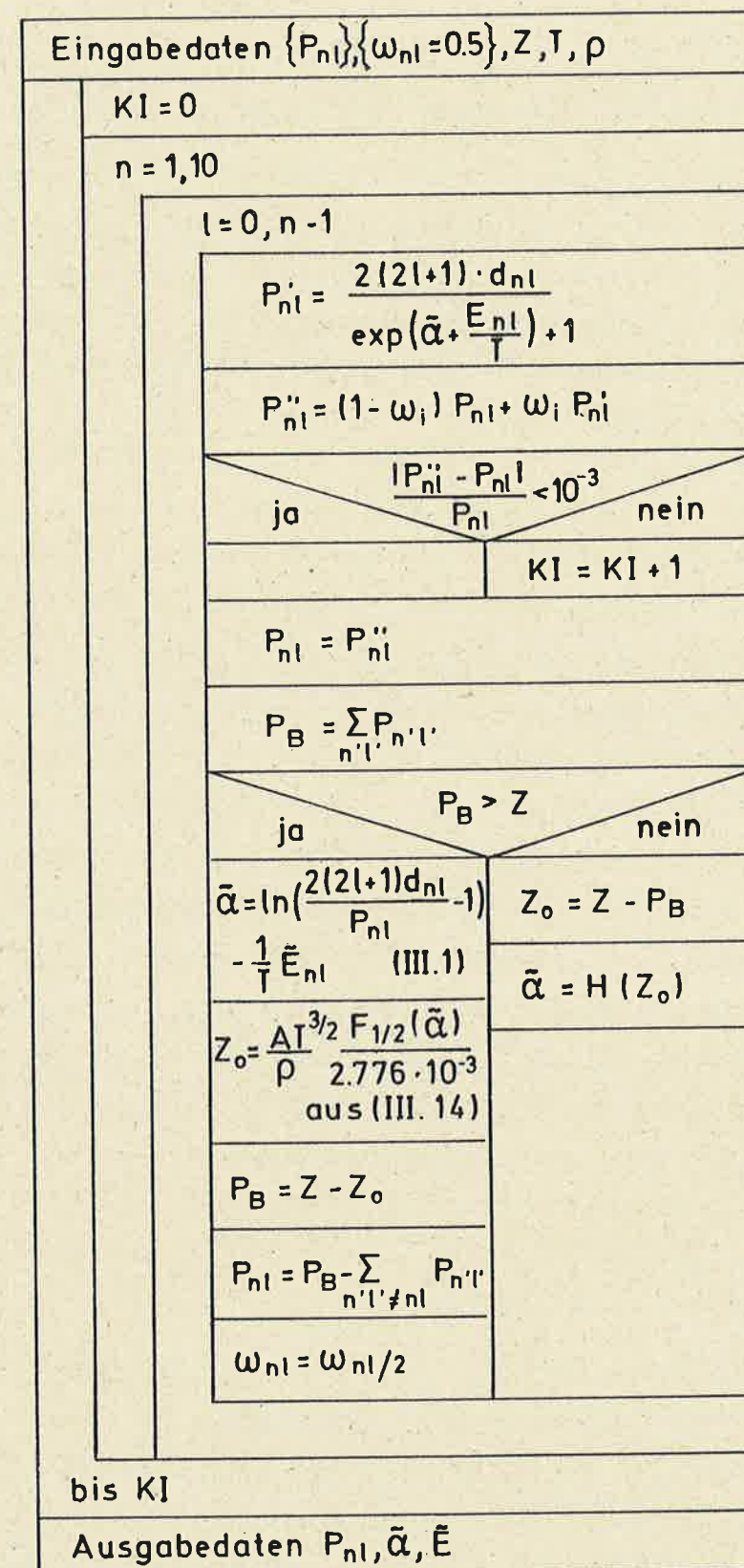


Abb. III.1: Struktogramm für Algorithmus von Mancini und Fontán.

III.4. ERGEBNISSE FÜR ALUMINIUM UND GOLD

Die Ergebnisse, die man aus dem "Average Atom Model" gemeinsam mit dem SHML erhält, werden in diesem Abschnitt anhand einiger Beispiele erläutert. Zunächst betrachten wir den Ionisationsgrad Z_0 eines Al- und eines Au-Plasmas bei Variation der Temperatur bei verschiedenen Dichten (Abb. III.3) und vergleichen diesen mit den Resultaten des Thomas-Fermi Modells, die wir anhand einer einfachen Formel mit angepassten Koeffizienten von More [41] ermittelt haben. Diese Kurven stimmen gut überein, wenn man davon absieht, daß man aus dem Thomas-Fermi Modell glatte Kurven erhält, da die Schalenstruktur des Atoms nicht berücksichtigt wird. In den Kurven unseres Modells erkennt man hingegen einzelne Plateaus, die durch abgeschlossene Hauptschalen verursacht werden.

Der qualitative Verlauf des Ionisationsgrades in Abhängigkeit von der Temperatur zeigt auch eine gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen für den Fall ohne l -Aufspaltung (siehe [41] und [8]). Bei $\rho = 0.1 \text{ g/cm}^3$ und Temperaturen kleiner 100 eV ist der Ionisationsgrad für Gold in unseren Berechnungen aber etwas größer, da die ersten Ionisationspotentiale im SHML geringer sind als im SHM.

Bei hoher Dichte ist der Ionisationsgrad über weite Bereiche unabhängig von der Temperatur, da durch Druckionisation bereits ein Großteil der Elektronen ins Kontinuum gehoben wurde, und die restlichen Elektronen stark gebunden sind. Erst bei Temperaturen größer 1 keV beginnt die Freisetzung der inneren Elektronen. Der Ionisationsgrad nach Thomas-Fermi bei $\rho = 0.1 \text{ g/cm}^3$ und niedrigen Temperaturen weicht etwas von unseren Ergebnissen ab (man beachte die geänderte Skala). Dies ist entweder auf eine schlechte Anpassung der Parameter α und β der Druckionisation oder auf ein Scheitern der Anpassungsformel von More bei hohen Dichten zurückzuführen.

Die Besetzungszahlen der Niveaus mit $n = 4$ sind in Abb. III.3 für Gold bei einer Dichte von 0.1 g/cm^3 dargestellt. Bei niedrigen Temperaturen ist diese Schale noch vollständig besetzt. Erst ab einer Temperatur von 30 eV werden Elektronen aus der vierten Schale entnommen. Bei $T = 1 \text{ keV}$ sind dann nahezu alle Elektronen entfernt, und es beginnt das Entleeren der nächsten Schale.

Die Verringerung der Anzahl gebundener Elektronen beeinflusst auch die Einnelektronenenergien (Abb. III.4). Ist die Hauptschale vollständig besetzt, so besteht

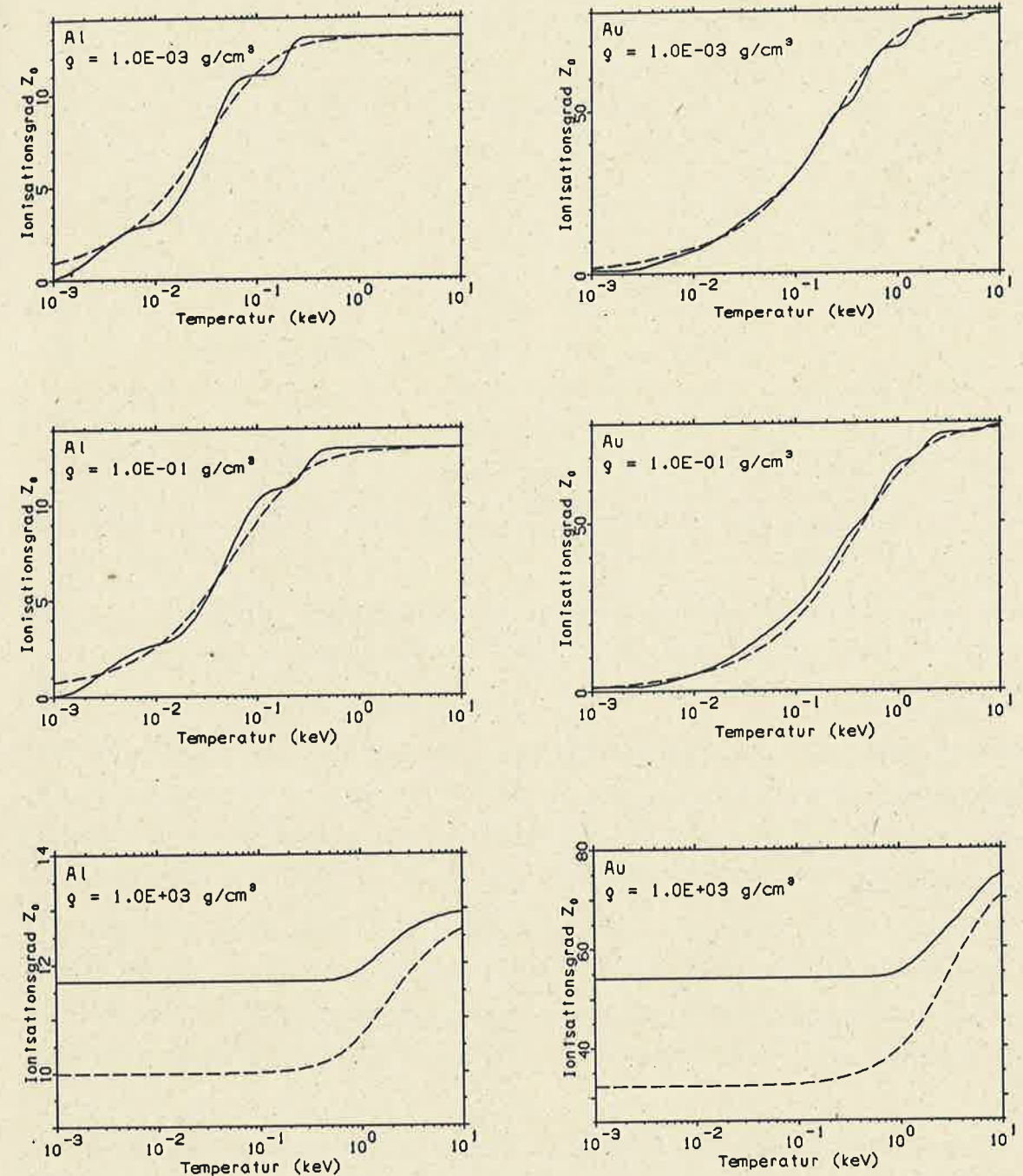


Abb. III.2: Ionisationsgrad Z_0 für Aluminum und Gold in Abhängigkeit von der Temperatur bei verschiedenen Dichten aus dem Modell dieser Arbeit (durchgezogene Linie) und nach Thomas-Fermi (gestrichelte Linie).

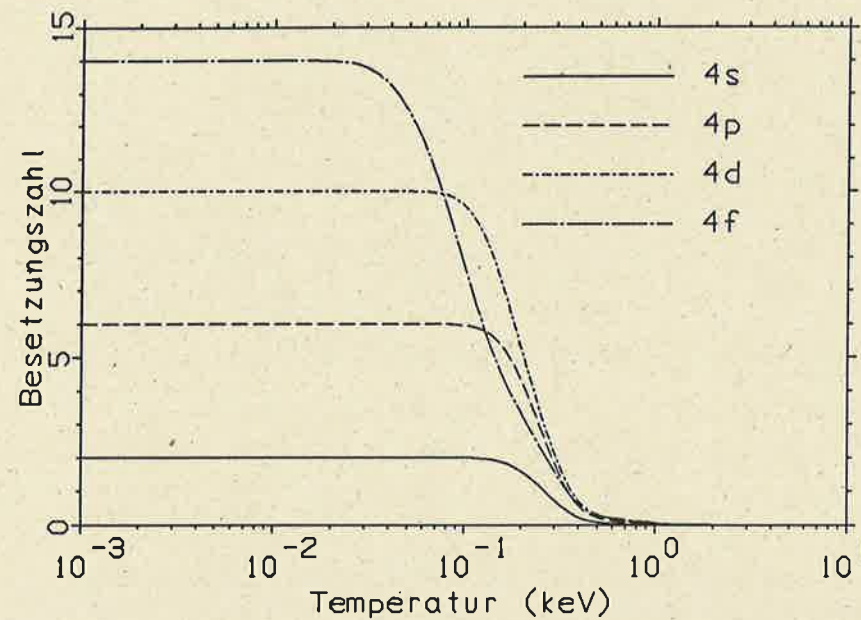


Abb. III.3: Besetzungszahlen der vierten Hauptschale in Gold mit $\rho = 1.0 \times 10^{-1} \text{ g/cm}^3$ bei Variation der Temperatur.

eine Aufspaltung zwischen der 4s und der 4f Schale von ungefähr 500 eV. Werden Elektronen aus der Schale entnommen, dann reduziert sich die gegenseitige Abschirmung, die verbleibenden Elektronen sind stärker gebunden, und die Energieaufspaltung der Unterschalen verringert sich. Ab $T = 1 \text{ keV}$, wenn die Besetzung der Schale vernachlässigbar gering ist, ist keine Aufspaltung mehr vorhanden und das Niveau kann sehr gut wasserstoffähnlich beschrieben werden. Mit fortschreitender Ionisierung werden auch innere Schalen entvölkert, wodurch die Bindung noch stärker wird, da die Abschirmung durch die inneren Elektronen schwächer wird.

Nach diesen wenigen Beispielen, die nur einen Eindruck von den Resultaten des "Average Atom" Modells vermitteln sollten, beenden wir das Kapitel. Mit den Besetzungszahlen und den Energien unseres gemittelten Atoms sind wir nun in der Lage, die Absorptionsquerschnitte zu berechnen.

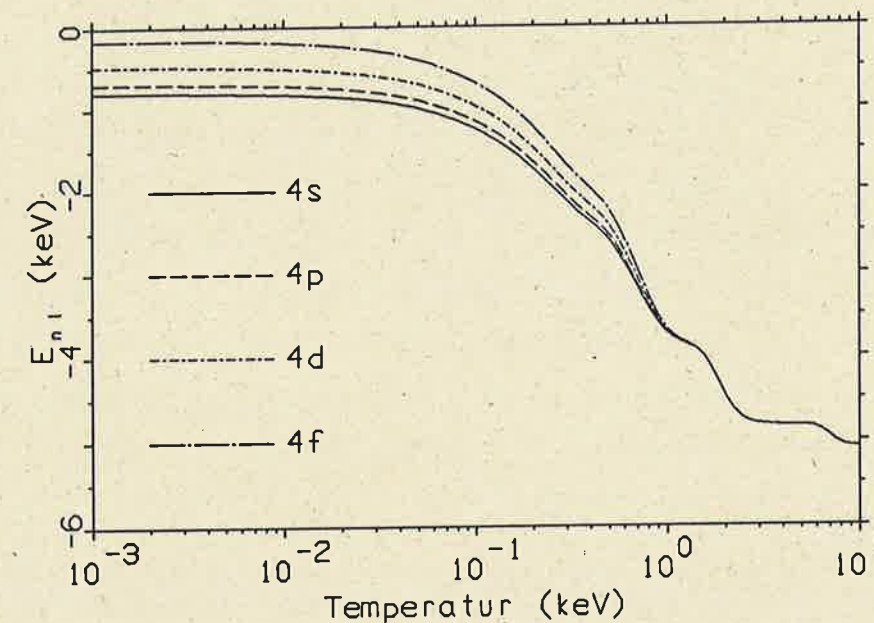


Abb. III.4: Einelektronenenergien der vierten Hauptschale in Gold mit $\rho = 1.0 \times 10^{-1} \text{ g/cm}^3$ bei Variation der Temperatur.

IV. Absorption und Streuung

Die relevanten Absorptionsmechanismen im Temperaturbereich, der in dieser Arbeit betrachtet wird, sind Photoanregung, Photoionisation, inverse Bremsstrahlung und Streuung. Mit Standardformeln [36] bestimmen wir deren Wirkungsquerschnitte für die Konfiguration des gemittelten Atoms, das aus dem "Average Atom" Modell folgt. Die Ionisierungsenergie und die Anregungsenergie sind durch die Einelektronenenergie beziehungsweise die Differenz der Einelektronenenergien der Ausgangskonfiguration gegeben. Die effektiven Kernladungszahlen sind ebenfalls nur durch die Ausgangskonfiguration bestimmt, das heißt wir vernachlässigen, daß sich die effektiven Kernladungszahlen ändern, wenn ein Elektron in eine andere Schale übergeht. Diese Näherungen sind eng verbunden mit jedem Modell eines gemittelten Atoms, und nicht durch das SHML oder die Wasserstoffnäherung bedingt.

IV.1. PHOTOANREGUNG

Der Wirkungsquerschnitt für den Einfang eines Photons unter gleichzeitiger Anhebung eines gebundenen Elektrons in eine höhere Schale ist

$$\sigma_{nl,n'l'}^{bb}(\nu) = \frac{\pi e^2}{mc} \times f_{nl,n'l'} \times \Psi_{nl,n'l'}(\nu) \quad (IV.1)$$

Nach Einsetzen der Konstanten und Division durch die Masse eines Atoms ergibt sich für den Massenabsorptionskoeffizienten eines Übergangs ($nl \rightarrow n'l'$)

$$\kappa_{nl,n'l'}^{bb}(\nu) = \frac{6.602 \times 10^4}{A} \times f_{nl,n'l'} \times \Psi_{nl,n'l'}(\nu) \text{ (cm}^2/\text{g)} \quad (IV.2)$$

Die Bestimmung der Oszillatorstärken $f_{nl,n'l'}$ wurde bereits in Kapitel II.3.1 besprochen. Das Linienprofil $\Psi_{nl,n'l'}(\nu)$ setzt sich im allgemeinen Fall aus den Beiträgen des Dopplerprofils, des Lorentzprofils und des Starkprofils zusammen, die alle eine andere Form und Breite besitzen. Diese müssen miteinander gefaltet werden, um das Profil der Linie zu erhalten. Die Bestimmung des Starkprofils und die Faltung der verschiedenen Linienprofile zu Fano- oder Voigtprofilen erfordert langwierige und komplizierte Berechnungen, die für die Vielzahl von Übergängen, die wir berücksichtigen müssen, praktisch undurchführbar sind. Wir wählen daher ein auf eins normiertes Lorentzprofil

$$\Psi_{nl,n'l'}(\nu) = \frac{1}{\pi} \frac{\gamma_{nl,n'l'}}{(|\tilde{E}_{nl} - \tilde{E}_{n'l'}| - h\nu)^2 + (\gamma_{nl,n'l'})^2} \quad (IV.3)$$

mit einer Breite $\gamma_{nl,n'l'}$. Bei der Bestimmung der Breite berücksichtigen wir die Lorentzbreite γ^L , die Dopplerbreite γ^D , die Feinstrukturaufspaltung γ^F [41] und die Elektronenstoßverbreiterung des oberen Niveaus γ^S . Letztere berechnen wir nach Armstrong et al. [48], arbeiten aber nicht mit effektiven Hauptquantenzahlen, sondern mit effektiven Kernladungszahlen aus dem SHML und berücksichtigen nur die Aufspaltung des oberen Niveaus ($n'l'$)

$$\gamma_{nl,n'l'}^L = 4.75 \times 10^{-6} (\tilde{E}_{nl} - \tilde{E}_{n'l'})^2 \text{ (keV)} , \quad (IV.4)$$

$$\gamma_{nl,n'l'}^D = 1.036 \times 10^{-3} |\tilde{E}_{nl} - \tilde{E}_{n'l'}| \sqrt{\frac{T}{A}} \text{ (keV)} , \quad (IV.5)$$

$$\gamma_{n'}^F = 7.253 \times 10^{-7} (Z_{n'})^4 \frac{n' - 1}{n'^4} \text{ (keV)} , \quad (IV.6)$$

$$\gamma_{n'l'}^S = 1.268 \times 10^{-3} \frac{Z_0 \rho}{A \sqrt{T}} \left(\frac{n'}{Z_{n'}} \right)^2 [5n'^2 + 1 - 3l'(l' + 1)] \text{ (keV)} . \quad (IV.7)$$

Die totale Breite beträgt dann

$$\gamma_{nl,n'l'} = \sqrt{(\gamma_{nl,n'l'}^L)^2 + (\gamma_{nl,n'l'}^D)^2 + (\gamma_{n'}^F)^2 + (\gamma_{n'l'}^S)^2} . \quad (IV.8)$$

Summiert man über die Beiträge aller erlaubten Übergänge, so erhält man den totalen Massenabsorptionskoeffizienten für Photoanregung

$$\kappa^{bb}(\nu) = \sum_{nl} \sum_{n'l'} \kappa_{nl,n'l'}^{bb}(\nu) \quad (l' = l \pm 1) . \quad (IV.9)$$

IV.2. PHOTOIONISATION

Der Wirkungsquerschnitt für Photoionisation, das heißt Absorption eines Photons und Freisetzen eines gebundenen Elektrons, ist zur differentiellen Oszillatorstärke proportional

$$\sigma_{nl,\epsilon}^{bf}(\nu) = \frac{\pi e^2 h}{mc} \times \frac{df_{nl}}{dh\nu} . \quad (IV.10)$$

Setzen wir den Ausdruck für die Oszillatorstärke (Gl. (II.15)) und die numerischen Werte der Konstanten ein, so ergibt sich der Massenabsorptionskoeffizient für Photoionisation aus einer Unterschale (nl)

$$\begin{aligned} \kappa_{nl,\epsilon}^{bf}(\nu) &= \frac{3.247 \times 10^8}{A} h\nu \sqrt{h\nu - |\tilde{E}_{nl}|} \times P_{nl} \times Q_\epsilon \\ &\times \left\{ \frac{l+1}{2l+1} \left(R_{nl}^{\epsilon,l+1} \right)^2 + \frac{l}{2l+1} \left(R_{nl}^{\epsilon,l-1} \right)^2 \right\} \text{ (cm}^2/\text{g)} . \end{aligned} \quad (IV.11)$$

Der Verfügbarkeitsfaktor Q_ϵ berücksichtigt — wie bereits erwähnt — die teilweise Besetzung der Kontinuumszustände. Im Modell des gemittelten Atoms sind die Zustände nach Fermi-Dirac besetzt, und wir erhalten für die Verfügbarkeit des Niveaus mit der kinetischen Energie $\epsilon = h\nu - |\tilde{E}_{nl}|$:

$$Q_\epsilon = 1 - \frac{1}{1 + \exp\{\tilde{\alpha} + \epsilon/T\}} . \quad (IV.12)$$

Der totale Massenabsorptionskoeffizient für Photoionisation ist durch die Summe aller Beiträge der besetzten Niveaus gegeben, deren Bindungsenergie kleiner oder gleich der Photonenenergie ist.

$$\kappa^{bf}(\nu) = \sum_{nl} \Theta(h\nu - |\tilde{E}_{nl}|) \kappa_{nl,\epsilon}^{bf}(\nu) \quad (IV.13)$$

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0 & \text{falls } x < 0 \\ 1 & \text{falls } x \geq 0 \end{cases} \quad (IV.14)$$

Wir haben damit alle Formeln zusammengestellt, die wir zur Berechnung des Absorptionskoeffizienten für Photoionisation benötigen, und es verbleibt nur noch, die Gültigkeit der Wasserstoffnäherung mit zwei verschiedenen effektiven Kernladungszahlen (effektive Kernladungszahl aus dem SHML für das Ausgangsniveau und $Z_0 + 1$ für das Endniveau) zu besprechen, die in dieser Arbeit verwendet wird.

Hierzu geben wir zunächst einen Überblick über einige bisherige Arbeiten, die in diesem Zusammenhang wichtig sind.

Schon in den frühen Tagen der Quantenmechanik wurde die Wasserstoffnäherung mit nur *einer* effektiven Kernladungszahl mit großem Erfolg zur Berechnung des Absorptionskoeffizienten für Photoionisation durch *Röntgen-* und *Gammastrahlung* angewendet [49]. Die analytischen Ausdrücke, die man für wasserstoffähnliche Atome erhält, wurden für andere Atome übernommen, indem man die Kernladungszahl durch eine effektive Kernladungszahl ersetzte.

Bereits 1939 zeigte Bates, daß es im allgemeinen nicht zulässig ist, für den diskreten und den kontinuierlichen Zustand die gleiche Kernladungszahl zu verwenden, da diese sehr unterschiedlich sind. Zudem liefert die Verwendung einer mittleren Kernladungszahl immer eine Frequenzvariation des Absorptionskoeffizienten wie für Wasserstoff, was für andere Elemente im allgemeinen nicht richtig ist. Nur für Zustände, in denen ein Elektron hoch angeregt ist, ist diese Unterscheidung weniger wichtig, und man kann die Photoionisation aus diesem Niveau mit *einer* effektiven Kernladungszahl beschreiben [50]. Die beste einfache Näherung nach Bates besteht darin, für den diskreten Zustand die effektive Kernladungszahl nach Slater und für den kontinuierlichen Zustand die Ladung des Atoms nach Entfernen des Elektrons zu nehmen.

Dennoch erzielten Hahn und Rule [51] überraschenderweise für den umgekehrten Prozeß des strahlenden Einfangs hochenergetischer Elektronen, der mit der Photoionisation durch das Prinzip des detaillierten Gleichgewichts verbunden ist, durch Skalierung der Wasserstoffergebnisse für das Radialmatrixelement mit einer effektiven Kernladungszahl $Z_{eff} = \frac{Z+Z_0+1}{2}$ gute Ergebnisse, falls $Z \leq 50$, $0.4 \times Z \leq Z_0 + 1$ und falls die kinetische Energie ϵ des Elektrons im Bereich $0.3 \text{ keV} \leq \epsilon \leq 100 \text{ keV}$ liegt. Da wir jedoch auch Querschnitte für schwere Elemente und für den Fall $Z_0 + 1 < 0.4 \times Z$ benötigen, ist diese Wahl der effektiven Kernladungszahl für unsere Zwecke nicht geeignet.

Für Atome, die nur wenig ionisiert sind ($Z_0 + 1 < 0.5 \times Z$), stellten Abdel-Hady et al. [21] durch Vergleich mit Hartree-Fock Resultaten fest, daß sich die Resultate bei Wahl der effektiven Kernladungszahl $Z_{eff} = \sqrt{Z(Z_0 + 1)}$ für beide Zustände erheblich verbessern.

In den bisherigen Arbeiten zur Opazitätsberechnung ohne *l*-Aufspaltung wurde der mit dem Gaunt-Faktor g^{bf} nach Menzel und Pekeris [52] korrigierte Kramers Querschnitt verwendet

$$\kappa_{n,\epsilon}^{bf}(\nu) = 12.0 \times \frac{Z_n^4}{A n^5} P_n g^{bf} \frac{1}{(h\nu)^3} (\text{cm}^2/\text{g}) , \quad (\text{IV.15})$$

wobei die Kernladungszahl durch eine effektive Kernladungszahl der Hauptschale n ersetzt wurde. Für diese verwendeten Tsakiris und Eidmann die effektiven Kernladungszahlen nach Mayer. Kim und Pratt [53] legten jedoch dar, daß die Kramers Formel mit Z_n nach Mayer den Wirkungsquerschnitt für Atome in niedrigen und mittleren Ionisationsstufen unterschätzt.

Bessere Resultate erwarten wir mit Z_n aus dem SHML, da diese nur innere Abschirmung berücksichtigen, wodurch sich höhere effektive Kernladungszahlen und damit größere Wirkungsquerschnitte ergeben. Da der Kramers Querschnitt proportional Z_n^4 ist, wirken sich diese Differenzen in den effektiven Kernladungszahlen stark aus.

Nach diesem Überblick wollen wir nun anhand der Abb. IV.1 die Resultate der verschiedenen Modelle am Beispiel des neutralen Goldatoms miteinander und mit experimentellen Ergebnissen für die totale Absorption im Festkörper vergleichen. Die experimentellen Werte sind bei Henke et al. [54] tabelliert. Daß es zulässig ist, für $h\nu > 50 \text{ eV}$ atomare Modelle zur Beschreibung des Absorptionsspektrums eines Festkörpers anzuwenden, wird in Ref. [55] und Ref. [56] diskutiert.

(a) *Modell dieser Arbeit (Bild links oben)*

Bei Wahl von Z_n aus dem SHML für den Ausgangszustand und $Z_0 + 1$ für den Kontinuumszustand ist die Absorption zu hoch, was bereits bei der Besprechung der Summenregel deutlich wurde. Die äußeren Elektronen befinden sich in einem Feld, das stark vom Coulombfeld abweicht, so daß die Wasserstoffnäherung nicht mehr zulässig ist. Das Minimum bei niedrigen Energien wird aber im Verlauf richtig beschrieben, obwohl es zu höherer Energie verschoben ist. Mit steigendem Ionisationsgrad wächst der Einfluß des Kerns, und die Zentralsymmetrie nimmt zu, was — wie bei den Oszillatorstärken für Photoanregung — zu verbesserten Resultaten führt.

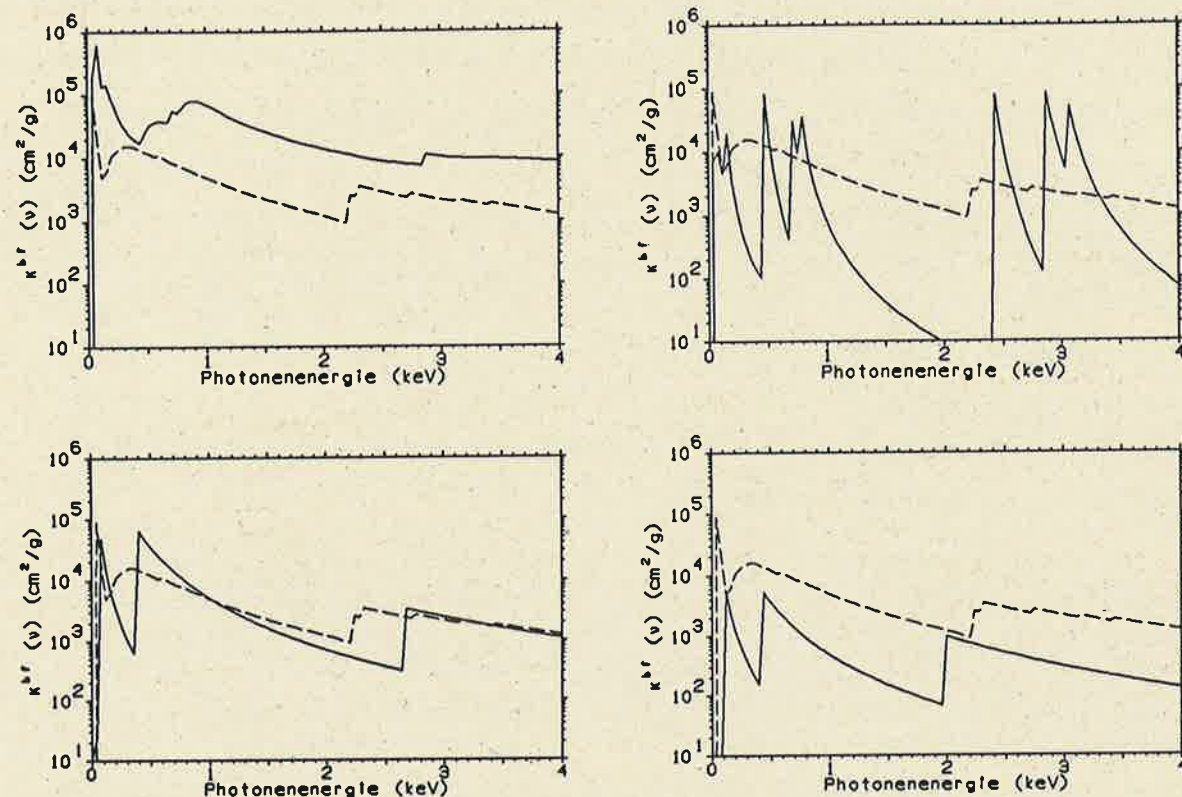


Abb. IV.1: Photoionisationskoeffizient für neutrales Gold in der Wasserstoffnäherung. links oben: Modell dieser Arbeit, $Z_i = Z_n$ nach SHML, $Z_f = Z_0 + 1$, rechts oben: effektive Kernladungszahlen nach Abdel-Hady et al. $Z_i = Z_f = \sqrt{Z + (Z_0 + 1)}$, links unten: Kramers Querschnitt mit Z_n nach SHML, rechts unten: Kramers Querschnitt mit Z_n nach Mayer. Gestrichelt sind zum Vergleich die Meßwerte nach Henke et al. dargestellt.

(b) Wasserstoffnäherung mit Z_{eff} nach Abdel-Hady et al. (Bild rechts oben)

Völlig inakzeptabel erscheint es uns hingegen, für beide Kernladungszahlen $Z_{eff} = \sqrt{Z(Z_0 + 1)}$ zu nehmen. Dies führt zu großen Fehlern, sowohl in der Größenordnung als auch im Verlauf der Kurve des Absorptionskoeffizienten für Photoionisation.

(c) Kramers Querschnitt mit Z_n nach Mayer (Bild rechts unten)

Der Kramers Querschnitt mit Z_n nach Mayer, dem Gaunt Faktor g^{bf} in der Form von Menzel und Pekeris und mit Energien ohne l -Aufspaltung aus dem SHM, der in der Arbeit von Tsakiris und Eidmann [8] verwendet wurde, ergibt zu geringe Werte für den Photoionisationskoeffizienten. Durch die Berücksichtigung der äußeren Abschirmung erhält man zu geringe effektive Kernladungszahlen, was zu einer Unterschätzung des Wirkungsquerschnittes führt.

(d) Kramers Querschnitt mit Z_n nach SHML (Bild links unten)

Wir untersuchten auch den mit einem Gaunt Faktor modifizierten Kramers Querschnitt mit effektiven Kernladungszahlen aus dem SHML und l -gemittelten Energien. Damit ergab sich eine gute Übereinstimmung ab etwa 700 eV, wenn auch die Kanten bei Vernachlässigung der l -Aufspaltung nicht mehr richtig beschrieben werden.

Bei Elementen in höheren Ionisationsstufen reduzieren sich die Abweichungen zwischen den Resultaten der verschiedenen Modelle, was in Abb. IV.2 für Gold XXXIV veranschaulicht ist. Da in diesem Falle nur eine geringe äußere Abschirmung für Niveaus mit einer Bindungsenergie kleiner als 10 keV besteht, ist die Differenz zwischen den effektiven Kernladungszahlen nach Mayer und nach Perrot gering. Auch beschreibt die Wasserstoffnäherung mit verschiedenen effektiven Kernladungszahlen den Absorptionskoeffizienten gut, was auch bereits die Betrachtung der Summenregel zeigte.

Wir verwenden im weiteren die Wasserstoffnäherung mit verschiedenen effektiven Kernladungszahlen, da damit auch die l -Aufspaltung beschrieben werden kann. Zudem zeigten Vergleiche mit der "Astrophysical Library" für das Element Eisen (Das Element mit dem höchsten Z , das in der Bibliothek enthalten ist.) eine gute Übereinstimmung. Unser Programm bietet aber auch die Möglichkeit, mit l -gemittelten Energien und dem Wirkungsquerschnitt nach Kramers mit effektiven Kernladungszahlen aus dem SHML zu arbeiten.

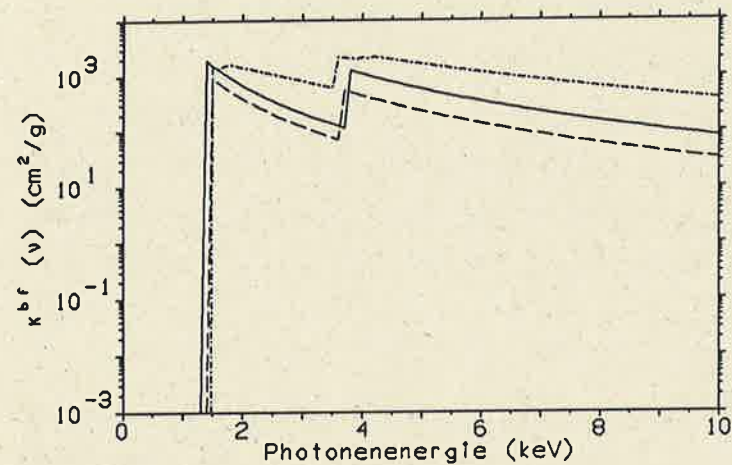


Abb. IV.2: Photoionisationskoeffizient für Gold XXXIV. gestrichelte Linie: Kramers mit effektiven Kernladungszahlen und Energien nach Mayer, durchgezogene Linie: Kramers mit l -gemittelten Energien und effektiven Kernladungszahlen aus dem SHML, strichpunktierte Linie: Wasserstoffnäherung mit $Z_i = Z_n$ aus dem SHML und $Z_f = Z_0 + 1$.

IV.3. INVERSE BREMSSTRAHLUNG

Auch die freien Elektronen können Photonen absorbieren, indem sie in einen höher angeregten Kontinuumszustand übergehen. Wir beschreiben diesen Prozeß wasserstoffähnlich, indem wir in der Formel für den Absorptionskoeffizienten die Kernladungszahl durch die Ladung des Ions ersetzen, in dessen Feld sich das Elektron befindet. Unter der Annahme, daß die Elektronen einer Maxwell Verteilung genügen, ergibt sich für den Massenabsorptionskoeffizienten:

$$\kappa^{ff}(\nu) = 2.78 \times \frac{Z_0^3 \rho}{A^2 T^{1/2} (h\nu)^3} \times g^{ff} \text{ (cm}^2/\text{g)} . \quad (\text{IV.16})$$

Der Gaunt-Faktor g^{ff} enthält die quantenmechanischen Korrekturen zum klassischen Ergebnis und wurde von Menzel und Pekeris [52] bestimmt.

$$g^{ff} = 1 + 0.1728 \times \left(\frac{h\nu}{13.6 \times 10^{-3} Z_0^2} \right)^{1/3} \left(1 + 2 \frac{T}{h\nu} \right) \quad (\text{IV.17})$$

Bei dichten Plasmen sind die Elektronen entartet, und der Absorptionsquerschnitt

muß über die Fermi-Dirac Verteilung und nicht über die Maxwell Verteilung gemittelt werden. Dies kann durch Multiplikation mit einem Faktor

$$\Phi = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\ln \left(\frac{1 + \exp(-\tilde{\alpha})}{1 + \exp(-\tilde{\alpha} - \frac{h\nu}{T})} \right)}{F_{1/2}(\tilde{\alpha}) (1 - \exp(-\frac{h\nu}{T}))} \quad (\text{IV.18})$$

berücksichtigt werden [57].

IV.4. STREUUNG

Für Streuung ist der Thomson Streuquerschnitt pro Elektron eine für unseren Bedarf ausreichende Näherung:

$$\sigma^{es} \cong 6.65 \times 10^{-25} \text{ cm}^2 .$$

Wir betrachten nur Streuung an freien Elektronen und erhalten mit Z_0 freien Elektronen pro Atom für den Streukoeffizienten:

$$\kappa^{es} = 0.4 \frac{Z_0}{A} . \quad (\text{IV.19})$$

IV.5. DIE FREQUENZABHÄNGIGE OPACITÄT (EXTINKTIONSKOEFFIZIENT)

Um die frequenzabhängige Opazität — auch als Extinktionskoeffizient bezeichnet — zu bestimmen, müssen die Absorptionskoeffizienten aller oben beschriebenen Prozesse und der Streukoeffizient für jede Photonenenergie aufsummiert werden. Der Bereich der Photonenenergie ist dazu fein genug zu unterteilen, um die Beiträge jeder Linie zu berücksichtigen. Eine Schrittweite $\frac{h\nu}{T} = 0.01$ ist im allgemeinen ausreichend.

Eine weitere Korrektur ist bei der Bildung des Extinktionskoeffizienten nötig. Die Absorptionskoeffizienten für Photoionisation, Photoanregung und inverse Bremsstrahlung müssen um den Beitrag der induzierten Emission korrigiert werden. Der Streukoeffizient darf nicht erniedrigt werden, da sich induzierte Streuung in eine Richtung und induzierte Streuung aus dieser Richtung heraus exakt kompensieren [58]. Der LTE-Ausdruck für den Extinktionskoeffizienten lautet dann

$$\kappa(\nu) = (\kappa^{bb}(\nu) + \kappa^{bf}(\nu) + \kappa^{ff}(\nu)) [1 - \exp(-\frac{h\nu}{T})] + \kappa^{es} . \quad (\text{IV.20})$$

Zwei Beispiele für Extinktionskoeffizienten leichter Elemente sind in Abb. IV.3 dargestellt. Wir besprechen zuerst leichte Elemente, da hierfür frequenzabhängige Werte aus der "Astrophysical Library" zum Vergleich verfügbar sind.

Der Extinktionskoeffizient nach Tsakiris und Eidmann ist hierbei in der Wasserstoffnäherung ohne jede Verschmierung der Linien* abgebildet. Die Linien weisen eine geringere Breite als die Linien unseres Modells auf, da nur die Doppler- und Lorentzbreite berücksichtigt wurde. Ansonsten sind die Abweichungen gegenüber unserem Modell bei den ausgewählten leichten Elementen gering. Vergleicht man die beiden einfachen Modelle mit den detaillierten Berechnungen der "Astrophysical Library", so erkennt man, daß der Anteil der Photoionisation und der inversen Bremsstrahlung gut beschrieben wird. Die Linien zeigen jedoch weniger Aufspaltung, da nur eine gemittelte Konfiguration betrachtet wurde, die Berechnungen der "Astrophysical Library" jedoch die häufigsten Konfigurationen explizit berücksichtigen. Die Einführung der l -Aufspaltung führt bei diesen Niedrig-Z Materialien zu keiner nennenswerten Verbesserung.

Ein ganz anderes Bild ergibt sich für den Fall schwerer Elemente, bei denen die Aufspaltung der Linien nach der Drehimpulsquantenzahl wichtig ist. Zur Veranschaulichung der Änderungen, die sich durch Einführung der l -Aufspaltung ergeben, sind in Abb. IV.4 und Abb. IV.5 die Extinktionskoeffizienten in der Wasserstoffnäherung mit und ohne l -Aufspaltung dargestellt. Diese frequenzabhängigen Opazitäten mit l -Aufspaltung stellen das zentrale Resultat dieser Arbeit dar. Sie werden zur Weiterverarbeitung in einem Strahlungshydrodynamik-Programm zur Simulation von Hoch-Z Plasmen benötigt, wo bisher frequenzabhängige Extinktionskoeffizienten in der Wasserstoffnäherung *ohne* l -Aufspaltung verwendet wurden, wodurch sich Diskrepanzen beim Vergleich mit dem Experiment ergeben (siehe auch Einleitung).

Vergleicht man die Resultate mit und ohne Aufspaltung, so wird deutlich, daß die l -Aufspaltung bei schweren Elementen den Extinktionskoeffizienten erheblich verändert. Die Aufspaltung der Energieniveaus hat zur Folge, daß sich die Anzahl der Linien erhöht und insbesondere bei niedrigen Photonenenergien mehr absorbiert wird. Die Beiträge des Absorptionskoeffizienten für Photoionisation weichen

*Die verschiedenen Methoden zur Verschmierung werden in Ref. [8] behandelt.

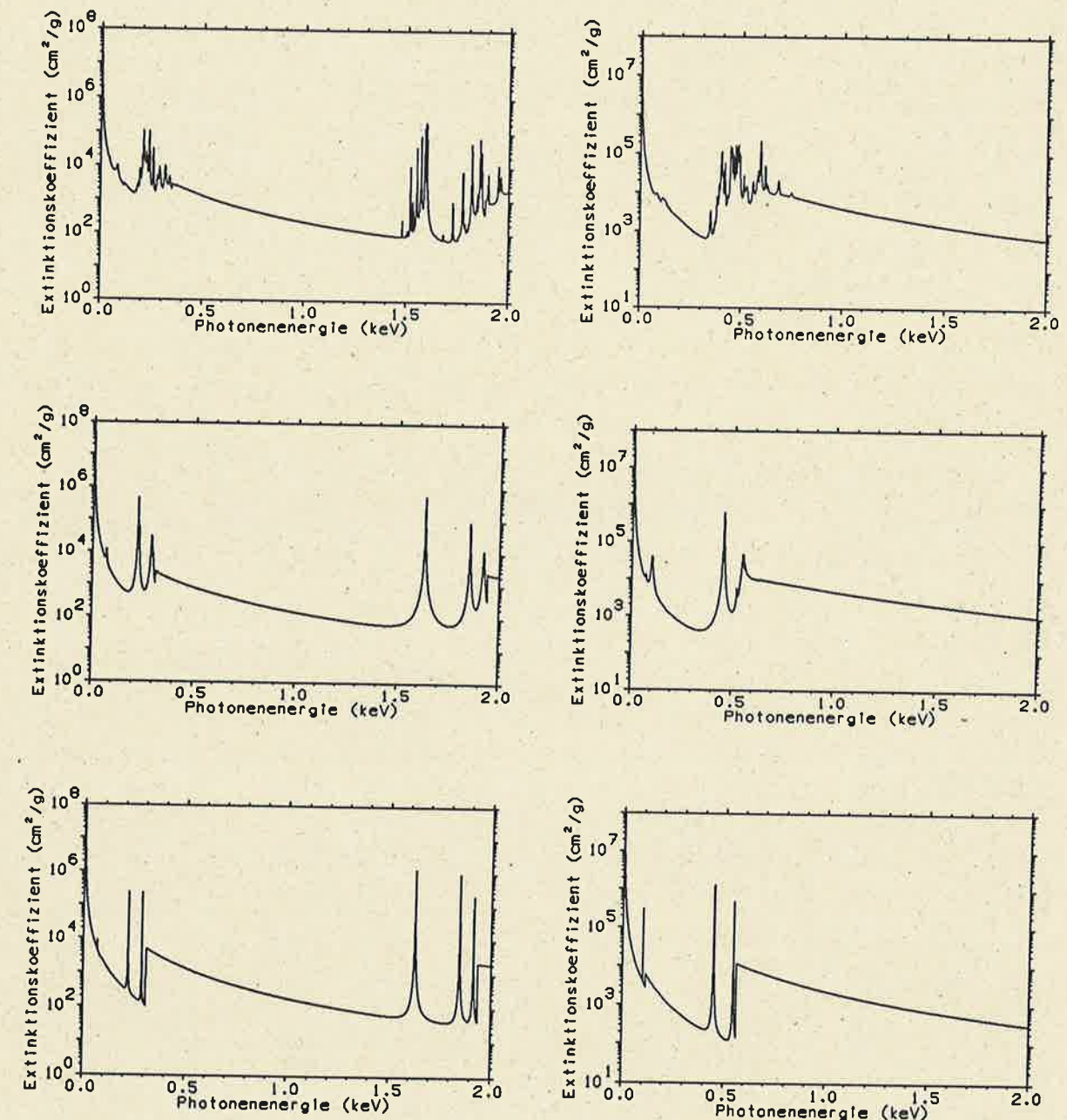


Abb. IV.3: Extinktionskoeffizient für Aluminium ($\rho = 0.187 \text{ g/cm}^3$, links) und Kalzium ($\rho = 0.683 \text{ g/cm}^3$, rechts) bei $T = 100 \text{ eV}$ in Abhängigkeit von der Photonenergie nach "Astrophysical Opacity Library" (oben), Modell dieser Arbeit (Mitte) und in der Wasserstoffnäherung ohne l -Aufspaltung nach Tsakiris und Eidmann (unten).

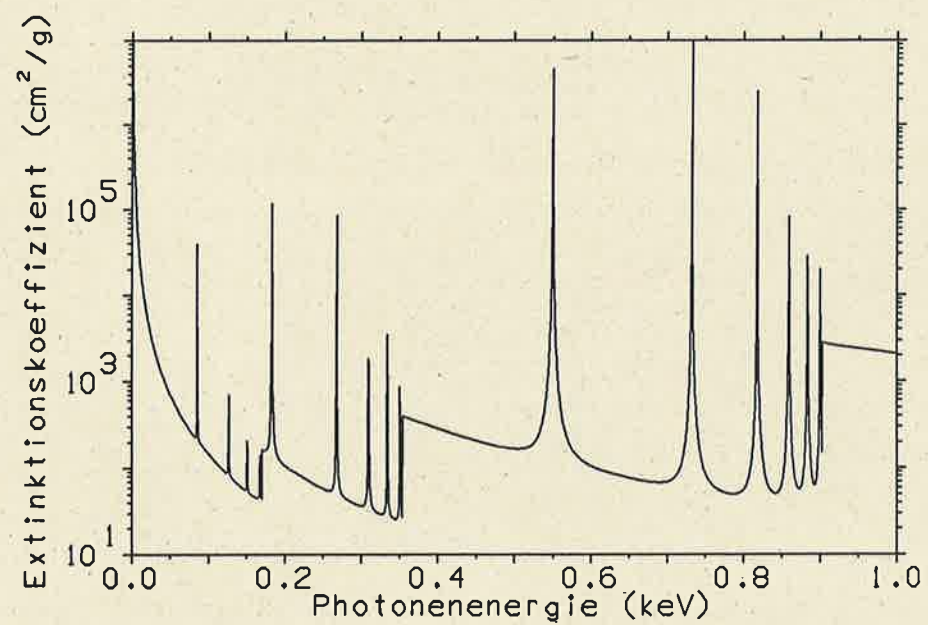
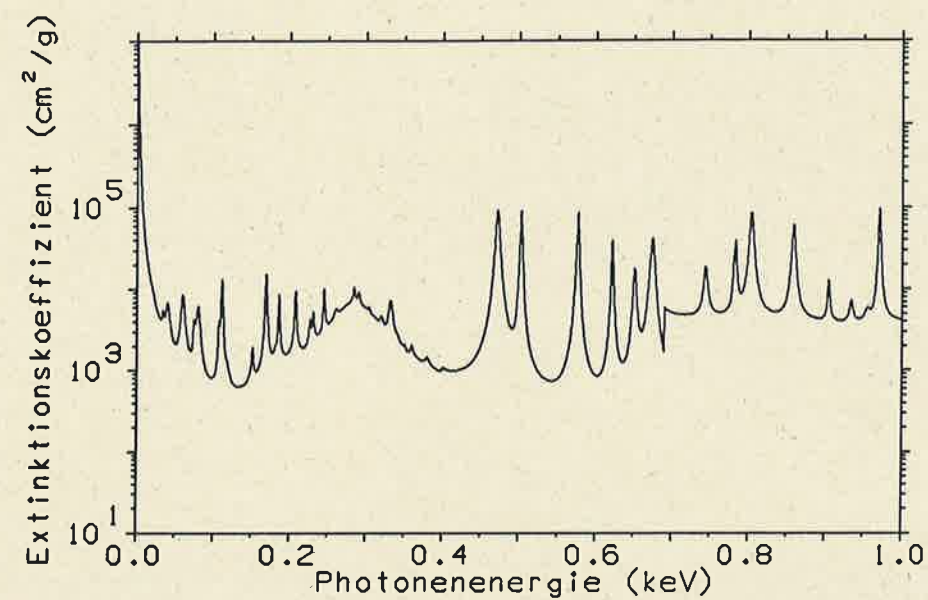


Abb. IV.4: Extinktionskoeffizient für Gold ($\rho = 0.1 \text{ g/cm}^3$) bei $T = 100 \text{ eV}$ in Abhängigkeit von der Photonenergie nach dieser Arbeit (oben) und in der Wasserstoffnäherung ohne l -Aufspaltung nach Tsakiris und Eidmann (unten).

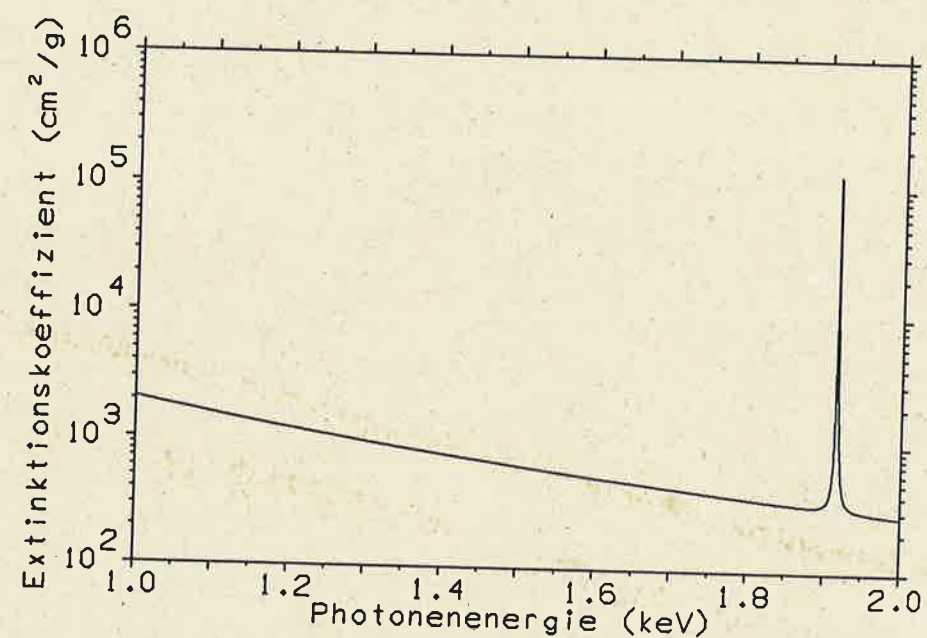
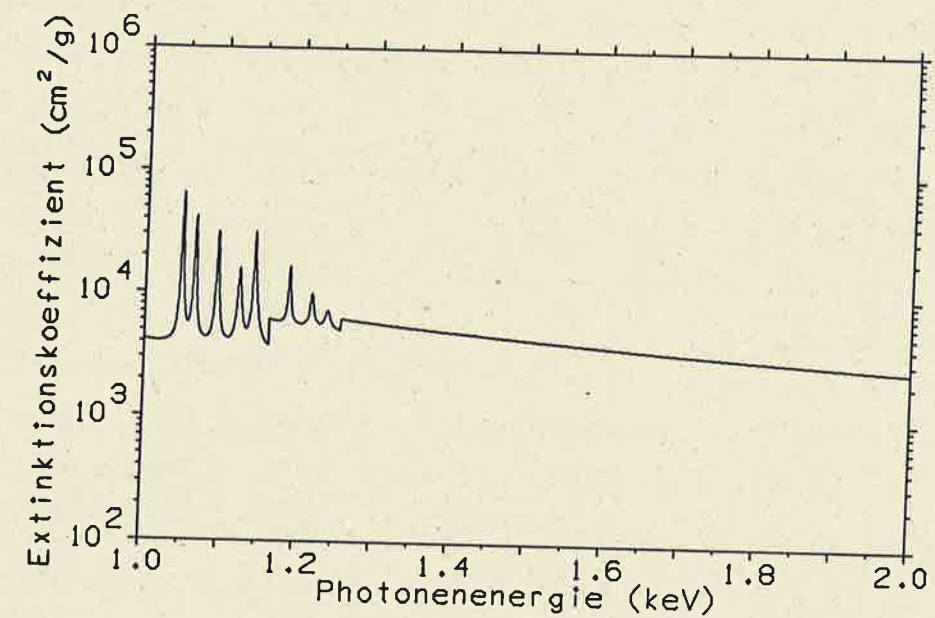


Abb. IV.5: Wie Abb. IV.4 nur im Bereich $1 \text{ keV} \leq h\nu \leq 2 \text{ keV}$.

insbesondere bei $h\nu > 1.5 \text{ keV}$ erheblich voneinander ab. Wir führen dies auf die Unterschätzung des Wirkungsquerschnitts bei Verwendung der Kramers Formel mit effektiven Kernladungszahlen nach Mayer zurück (siehe Seiten 51 und 53).

In einem Programm für den Strahlungstransport in Multigruppennäherung wird der Bereich der Photonenergie in einzelne Gruppen unterteilt, für die eine frequenzgemittelte Opazität benötigt wird. Bei der Bildung dieser Mittelwerte spielt die Position der Linien eine wichtige Rolle, da diese über die Zugehörigkeit zu einer Gruppe entscheidet. Dies erfordert die Berücksichtigung der genauen Frequenzvariation des Extinktionskoeffizienten. Daher erwarten wir bei Verwendung der frequenzabhängigen Opazitäten mit l -Aufspaltung in einem Strahlungshydrodynamik-Programm Verbesserungen bei den simulierten Spektren.

Eine weitere wesentliche Konsequenz der Einführung der l -Aufspaltung ist, daß zur Ermittlung frequenzgemittelter Opazitäten eine Verschmierung der Linien nicht mehr erforderlich ist, was wir im nächsten Kapitel besprechen werden.

V. Diskussion frequenzabhängiger und frequenzgemittelter Opazitäten

Da keine Vergleichswerte für die frequenzabhängigen Opazitäten existieren, ermitteln wir im ersten Abschnitt dieses Kapitels anhand der Extinktionskoeffizienten die Emission aus einer dünnen, homogenen Plasmaschicht und vergleichen diese mit Messungen an Laserplasmen. Anschließend führen wir die Frequenzmittelung der Extinktionskoeffizienten zur Rosseland und Planck Opazität durch und vergleichen diese mit Daten für frequenzgemittelte Opazitäten aus der "Sesame"-Bibliothek.

V.1. EMISSION AUS DÜNNER FOLIE

Die Emission aus einer dünnen Goldschicht, die durch Laserbestrahlung aufgeheizt wird, wurde erst kürzlich von Celliers und Eidmann untersucht [59]. Hierzu bestrahlten sie unter anderem freistehende, 50 nm dicke Goldfolien mit einem frequenzverdoppelten Nd-Glas-Laser (Pulsdauer: 3 ns , Wellenlänge: $0.53 \mu\text{m}$, Energie: 10 J) und ermittelten mittels zweier Transmissionsgitter-Spektrometer das Emissionsspektrum auf der Vorder- und Rückseite der Folie (siehe Abb. V.2). Die spektrale Auflösung betrug 15 \AA . Der Laser wurde auf einen Fleck mit $\approx 600 \mu\text{m}$ Durchmesser fokussiert, so daß eine Intensität von 10^{12} W/cm^2 erreicht wurde.

Celliers und Eidmann führten auch Computersimulationen mit MULTI [35] durch, wobei sie den Ladungszustand des Plasmas, die Absorptionskoeffizienten und die Emissionskoeffizienten mit einem stationären Nichtgleichgewichtsmodell [9] berechneten, das die l -Aufspaltung der Energieniveaus nicht berücksichtigt. Als ein Ergebnis der Simulation ist in Abb. V.1 das räumliche Temperatur- und Dichteprofil dargestellt, das sich zu einem festen Zeitpunkt einstellt, der dem Maximum des Laserpulses entspricht.

Wir wollen die gemessenen Spektren mit Resultaten aus der vorliegenden Arbeit vergleichen. Hierzu setzen wir voraus, daß sich das Plasma im LTE befindet und homogen ist, das heißt wir setzen eine einheitliche Dichte und Temperatur voraus. Es emittiert nur der Bereich der Folie, welcher der Fläche $F = \pi(300 \mu\text{m})^2$ des Laserflecks entspricht. Die Folie expandiert nur eindimensional in Richtung des einfallenden Laserstrahls. Dann ist die Dicke d der Plasmaschicht nach der Expansion aufgrund der Massenerhaltung durch die Anfangsdicke $d_i = 50 \text{ nm}$, die

Festkörperdichte ρ_S und die Dichte des expandierten Plasmas ρ gegeben:

$$d = d_i \times \frac{\rho_S}{\rho} . \quad (V.1)$$

Das Plasma sei optisch dünn, so daß das gesamte Plasmavolumen $V = F \times d$ zur Emission beiträgt, und die Winkelverteilung der Strahlung isotrop ist. Der Emissionskoeffizient j_ν folgt mit dem Kirchhoff'schen Satz aus dem Massenabsorptionskoeffizienten κ_ν (ohne Streuung, siehe hierzu Abschnitt V.3):

$$j_\nu = \kappa_\nu \rho I_\nu^P . \quad (V.2)$$

Für die gesamte Emission des Plasmas während der Pulsdauer $\tau = 3 \text{ ns}$ des Laserpulses erhält man:

$$\frac{d^2 E}{d\lambda d\Omega} = j_\nu \left| \frac{d\nu}{d\lambda} \right| d F \tau . \quad (V.3)$$

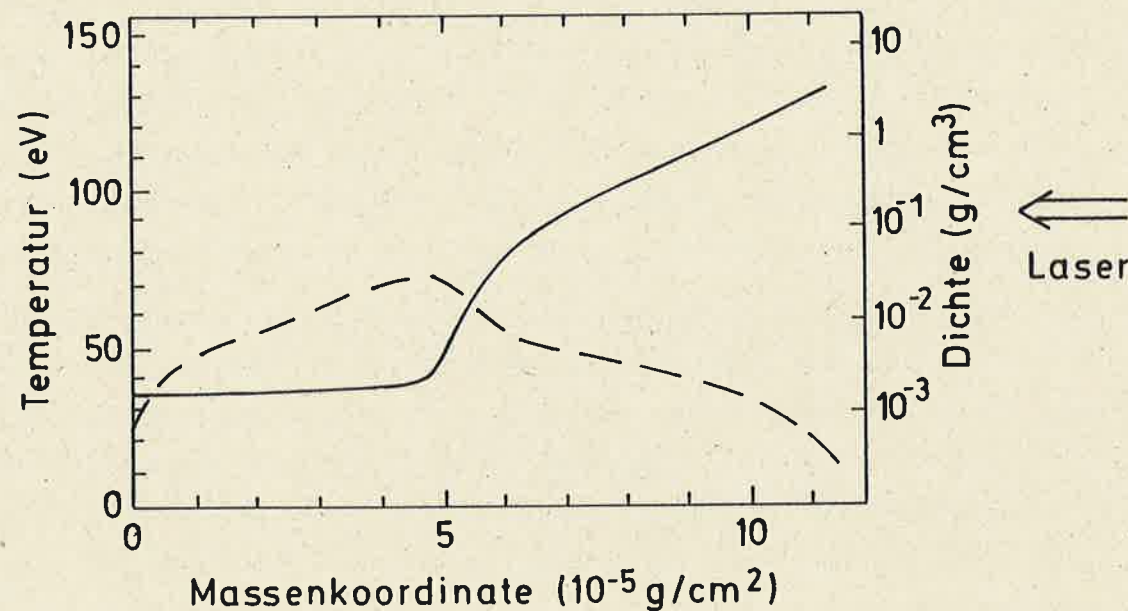


Abb. V.1: Räumliches Temperatur- (durchgezogene Linie) und Dichteprofil (gestrichelte Linie) aus Computersimulation mit MULTI (nach Ref. [59]) für 50 nm dicke Goldfolie, die mit einem Laser (Intensität: 10^{12} W/cm^2 , Pulsdauer: 3 ns, Wellenlänge: $0.53 \mu\text{m}$) bestrahlt wurde, zum Zeitpunkt des Maximums des Laserpulses.

Wir haben die Emission bei verschiedenen Dichten und Temperaturen berechnet, wobei wir sowohl die Absorptionskoeffizienten nach dem Modell dieser Arbeit als auch die Absorptionskoeffizienten in der "band-smearing" Näherung nach Tsakiris und Eidmann verwendeten. Da nicht alle Verbreiterungsmechanismen in unserer Betrachtung der Linienbreite berücksichtigt wurden, führten wir eine zusätzliche künstliche Linienverbreiterung $\Delta\gamma$ ein. Die totale Breite beträgt dann (siehe Gl. IV.8)

$$\gamma_{nl,n'l'} = \sqrt{(\gamma_{nl,n'l'}^L)^2 + (\gamma_{nl,n'l'}^D)^2 + (\gamma_{n'l'}^F)^2 + (\gamma_{n'l'}^S)^2} + \Delta\gamma . \quad (V.4)$$

Als zusätzliche Linienverbreiterung setzten wir $\Delta\gamma = 0.15 \times |\tilde{E}_{nl} - \tilde{E}_{n'l'}|$. Diesen Wert bestimmten wir durch einen Vergleich mit den gemessenen Spektren. Die berechneten Spektren sind in Abb. V.3 bis Abb. V.5 dargestellt. Temperaturen und Dichten entsprechen typischen Werten des Experiments, die aus Abb. V.1 zu entnehmen sind.

Da das Plasma im Experiment keine einheitliche Temperatur und Dichte hatte, setzt sich die Emission aus den Beiträgen des heißen Plasmas der Vorderseite und des kalten Plasmas der Rückseite zusammen. Um die berechneten Spektren mit den gemessenen vergleichen zu können, müsste man daher eine Kombination der drei berechneten Spektren betrachten. Wir können aber nicht erwarten, daß unser einfaches Modell die gemessenen Spektren im Detail wiedergibt, da sich das Laserplasma nicht im Zustand des lokalen thermodynamischen Gleichgewichts befindet, und die Annahme des optisch dünnen Plasmas nicht immer zutrifft, so daß Strahlungstransport bereits eine Rolle spielt. Vielmehr wollen wir nur anhand des Vergleichs mit dem Experiment besprechen, welche Änderungen im Spektrum sich durch die Einführung der l -Aufspaltung ergeben.

Mit den Absorptionskoeffizienten ohne l -Aufspaltung erhält man starke Emission um $\approx 20 \text{ Å}$ und $\approx 70 \text{ Å}$, welche durch das N-Band und das O-Band verursacht wird. Bei großen Wellenlängen tritt nahezu keine Emission auf. Diese signifikante Struktur der beiden breiten Linien ist im Experiment nicht zu beobachten. Zudem zeigen die gemessene Spektren bei großen Wellenlänge noch Emission (siehe Abb. V.2).

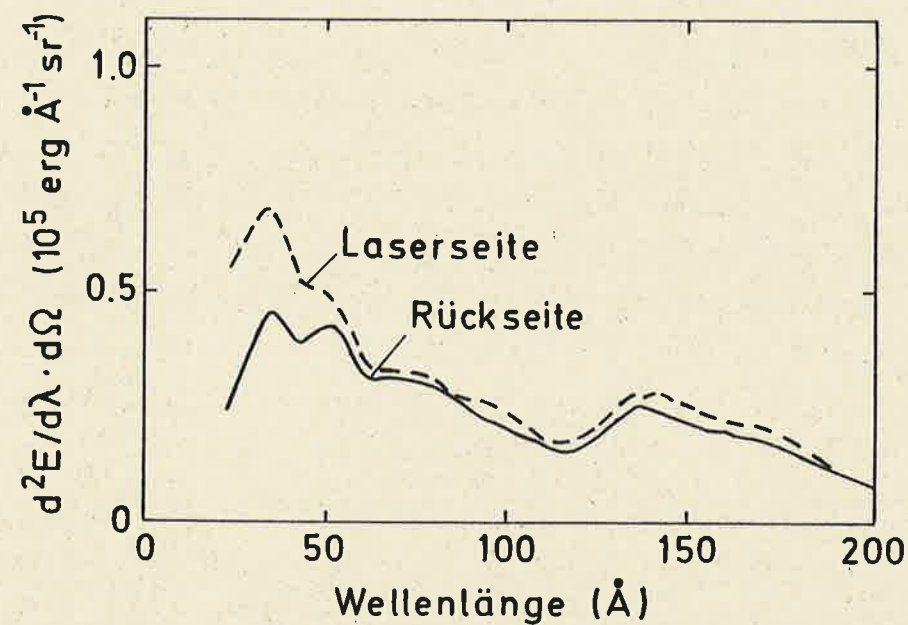


Abb. V.2: Emissionsspektrum der Laser- und der Rückseite für 50 nm dicke Goldfolie nach Ref. [59]. (Intensität: 10^{12} W/cm^2 , Pulsdauer: 3 ns, Wellenlänge: $0.53 \mu\text{m}$)

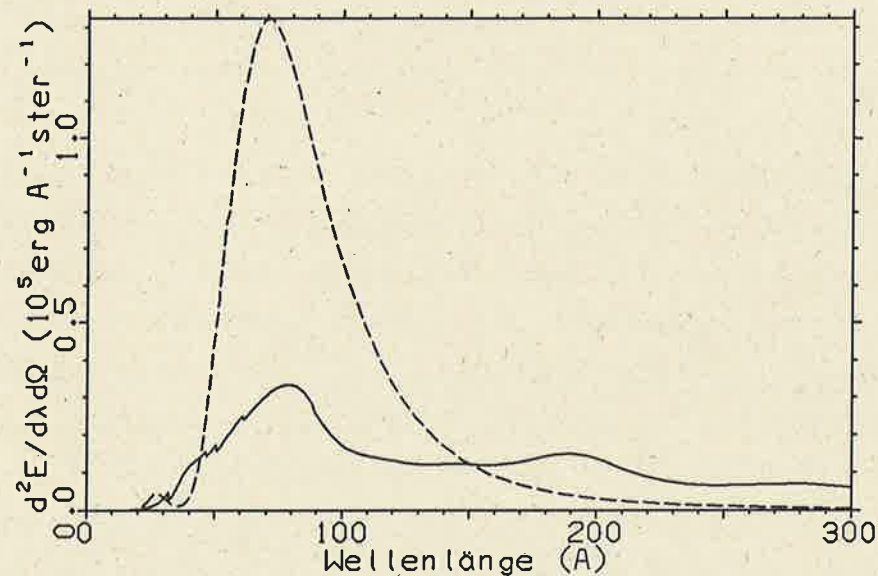


Abb. V.3: Emissionsspektrum einer homogenen Goldschicht bei $T = 35 \text{ eV}$ und $\rho = 10^{-2} \text{ g/cm}^3$ berechnet mit den Extinktionskoeffizienten dieser Arbeit (—) und den Koeffizienten nach Tsakiris und Eidmann (- -).

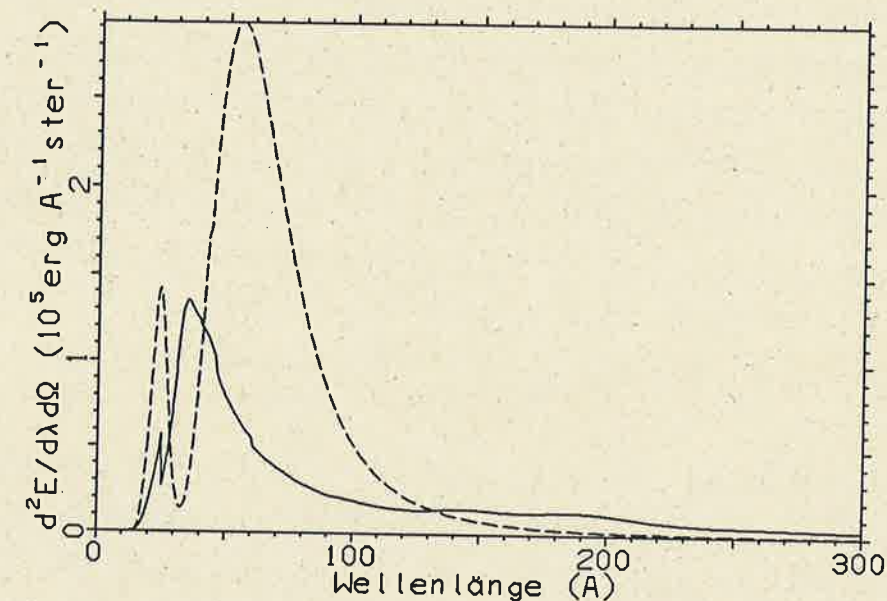


Abb. V.4: Wie Abb. V.3 nur für $T = 50 \text{ eV}$ und $\rho = 10^{-2} \text{ g/cm}^3$.

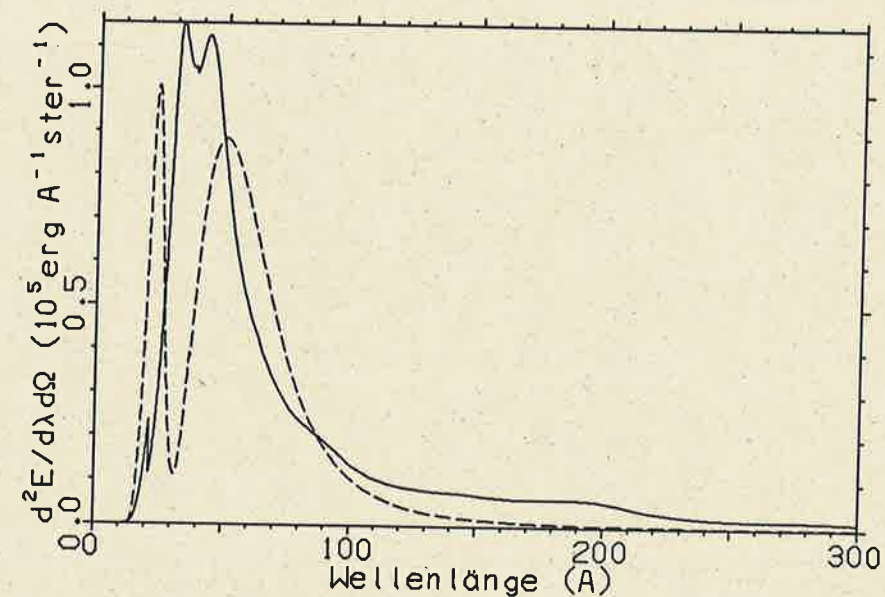


Abb. V.5: Wie Abb. V.3 nur für $T = 50 \text{ eV}$ und $\rho = 10^{-3} \text{ g/cm}^3$.

Durch Einführung der l -Aufspaltung ändert sich das Spektrum erheblich. Es tritt nun wesentlich mehr Emission bei Wellenlängen $\lambda > 150 \text{ \AA}$ auf, da sich die Übergangsenergien ändern, und auch $\Delta n = 0$ Übergänge berücksichtigt werden. Die Spektren zeigen mehr Struktur, wie dies auch bei gemessenen Spektren beobachtet wird. Die Emissionspitze bei 200 \AA entspricht möglicherweise der gemessenen Emission bei 140 \AA , da die Verschiebung um $\approx 60 \text{ \AA}$ im Rahmen des SHML durchaus möglich ist. Auch die Emissionspitze bei $\approx 40 \text{ \AA}$ und deren typische "Doppelhöcker-Struktur" wird richtig beschrieben (Abb. V.5). Bei Vernachlässigen der l -Aufspaltung hingegen wird in diesem Bereich nahezu keine Strahlung emittiert.

Insgesamt kann festgestellt werden, daß durch Einführung der l -Aufspaltung die Übereinstimmung mit den gemessenen Spektren verbessert wird. Für eine genauere Diskussion der Spektren ist es jedoch erforderlich, eine realistischere Simulation mit MULTI vorzunehmen, die Temperatur- und Dichteprofile sowie Abweichungen vom lokalen thermodynamischen Gleichgewicht berücksichtigt.

V.2. ROSSELAND OPAZITÄT

In der Diffusionsnäherung der Strahlungstransportgleichung ist eine frequenzgemittelte Opazität wichtig, die nach dem Astrophysiker, der diese zuerst einführte, als Rosseland Opazität bezeichnet wird. Ihre Ableitung und eine Diskussion ihrer Gültigkeit ist in vielen Lehrbüchern über Strahlungshydrodynamik und Astrophysik (zum Beispiel [60] und [61]) zu finden. Wir wollen hier nur die Formel zur Bildung des Mittelwertes angeben

$$\frac{1}{\kappa_R} = \frac{\int_0^\infty \frac{1}{\kappa(\nu)} \frac{dU_\nu^P(T)}{dT} d\nu}{\int_0^\infty \frac{dU_\nu^P(T)}{dT} d\nu}, \quad (V.5)$$

wobei U_ν^P die zur Planck Verteilung gehörende spektrale Energiedichte ist. Der Extinktionskoeffizient $\kappa(\nu)$ ist durch Gl. (IV.20) gegeben und enthält auch den Anteil der Streuung. Die Rosseland Opazität ist ein Mittelwert über die freien Weglängen $\lambda = 1/\rho\kappa(\nu)$ und ermöglicht in optisch dichten Plasmen den Transport von Strahlung aller Frequenzen so zu behandeln, als sei nur eine Frequenz vorhanden. Sie ist das harmonische Mittel über alle Frequenzen und wichtet besonders die Bereiche zwischen den Linien, in denen das Material weniger stark absorbiert. Dies macht ihre Berechnung schwierig, da man nicht nur alle Linien und deren Position berücksichtigen muß, sondern auch das Linienprofil kritisch in die Berechnung eingeht. Die Rosseland Opazität zeigt daher insbesondere in Bereichen, in denen die Absorption durch Photoanregung dominant ist, eine starke Abhängigkeit von Linienbreite und Linienprofil.

Die Wasserstoffnäherung ohne l -Aufspaltung ist zur Bestimmung der Rosseland Opazität nicht ausreichend, da die Anzahl der Linien erheblich unterschätzt wird [8]. Daher ersetzen Tsakiris und Eidmann alle Linien eines Bandes (alle Linien mit gleicher Hauptquantenzahl n des Ausgangsniveaus) durch eine einzelne Linie, die einheitlich über den gesamten Bereich des Bandes verschmiert wurde. Da auch diese Verschmierung nicht ausreichte, um die "Sesame"-Daten zu reproduzieren, führten sie eine weitere Verschmierung dieser Bänder ein, das sogenannte "band-smearing".

Um auch den Einfluß einer zusätzlichen Linienverbreiterung auf die Rosseland Opazität untersuchen zu können, behalten wir die künstliche Linienverbreiterung

$\Delta\gamma$ bei, wobei wir aber nur konstante Werte zulassen. Diese können wir gegebenenfalls verwenden, um die Rosseland Opazitäten an genauere Rechnungen anzupassen. Zu diesem Zwecke berechneten wir Rosseland Opazitäten für das Element Europium bei den Dichten 0.1 g/cm^3 , 10 g/cm^3 und 10^3 g/cm^3 und Temperaturen zwischen 50 eV und 100 keV nach dem Modell dieser Arbeit, und verglichen diese mit den Werten der "Sesame"-Bibliothek [3]. Als Beispiel wählten wir Europium, da es das schwerste Element ist, das in der "Sesame"-Bibliothek enthalten ist. Unsere Ergebnisse sind in Abb. V.6 bis V.8 dargestellt. Zusätzlich sind auch die Ergebnisse mit "band-smearing" nach Tsakiris und Eidmann abgebildet.

Unsere Resultate zeigen bei allen Dichten und Temperaturen auch ohne zusätzliche Linienverbreiterung eine zufriedenstellende Übereinstimmung mit den "Sesame"-Werten. Um die Ergebnisse im Detail zu diskutieren, betrachten wir drei Temperaturbereiche getrennt.

(a) Unterer Temperaturbereich ($T \leq 800 \text{ eV}$)

Die Abweichungen werden bei $\rho = 0.1 \text{ g/cm}^3$ und $\rho = 10 \text{ g/cm}^3$ durch eine Linienverbreiterung von $\Delta\gamma = 20 \text{ eV}$ noch weiter verringert. Bei $\rho = 10^3 \text{ g/cm}^3$ ist durch Kontinuumsabsenkung und Druckionisation die Zahl der möglichen Linienübergänge stark verringert. Die noch vorhandenen Linien besitzen zudem eine große Linienbreite durch Stoßverbreiterung, da diese proportional zur Dichte ist. Daher führt in diesem Fall die Linienverbreiterung nur zu sehr geringen Änderungen.

Die Resultate nach Tsakiris und Eidmann zeigen bei 0.1 g/cm^3 und 10 g/cm^3 gute Übereinstimmung mit den Daten der "Sesame"-Bibliothek. Die Abweichungen sind geringer als bei unseren Werten ohne zusätzliche Verbreiterung und etwas größer als bei unseren Werten mit $\Delta\gamma = 20 \text{ eV}$. Bei 10^3 g/cm^3 weichen sie jedoch erheblich ab, da in diesem Fall ein entartetes Plasma vorliegt, Tsakiris und Eidmann aber das Fermi Integral durch den Wert bei schwacher Entartung näherten.

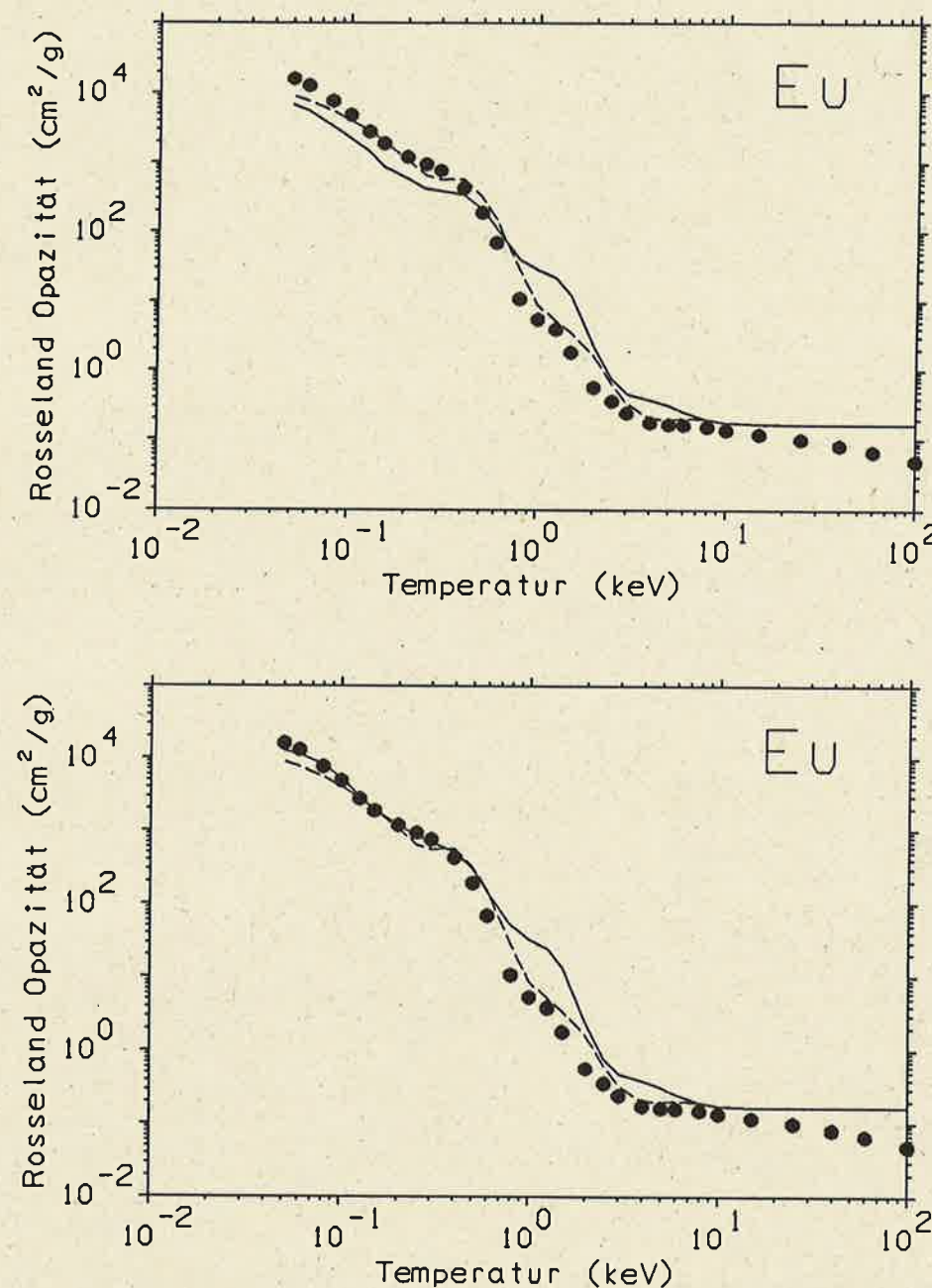


Abb. V.6: Rosseland Opazität für Europium in Abhängigkeit von der Temperatur bei $\rho = 0.1 \text{ g/cm}^3$ (oben) und mit 20 eV (unten) künstliche Linienverbreiterung. Die durchgezogene Linie kennzeichnet die Werte dieser Arbeit und die gestrichelte Linie die Ergebnisse ohne l -Aufspaltung nach Tsakiris und Eidmann. Die Punkte stellen die Daten der "Sesame"-Bibliothek dar.

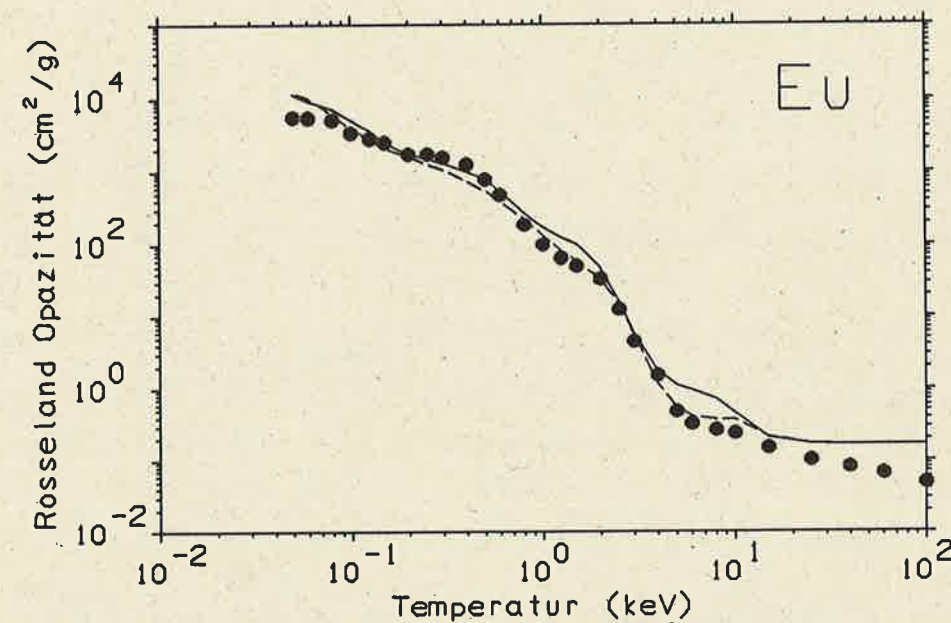
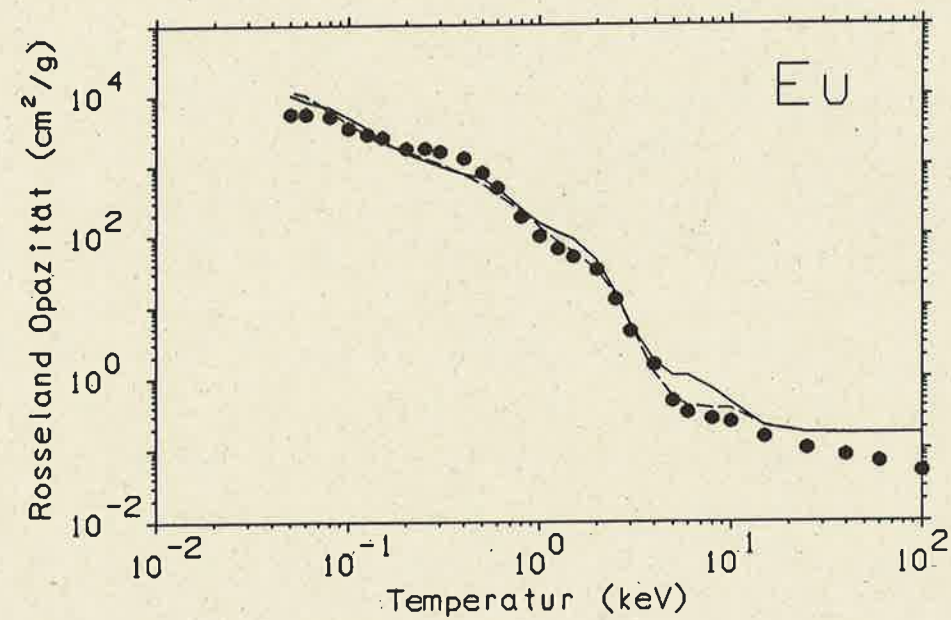


Abb. V.7: Wie Abb. V.6 nur für $\rho = 10 \text{ g/cm}^3$.

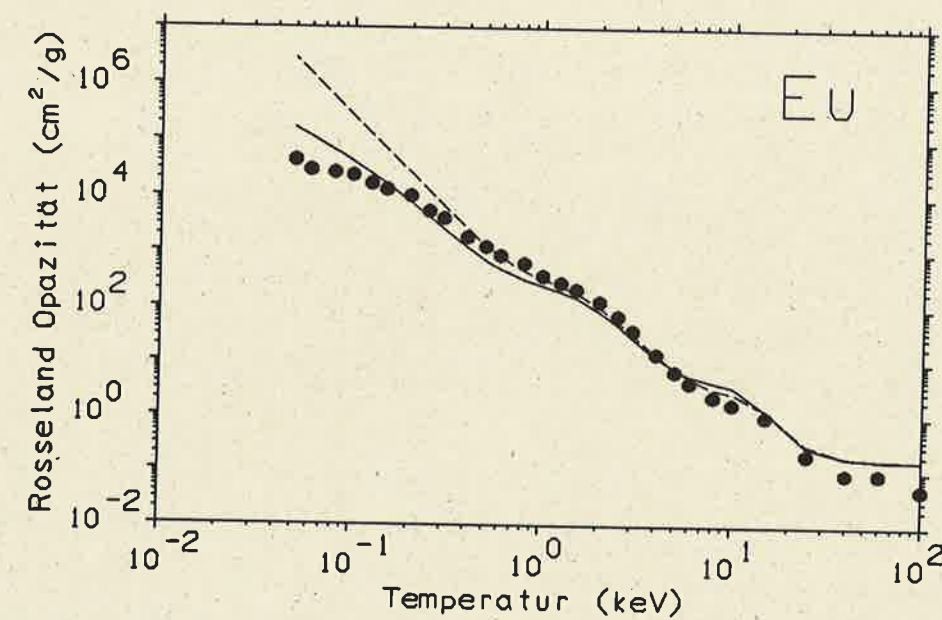
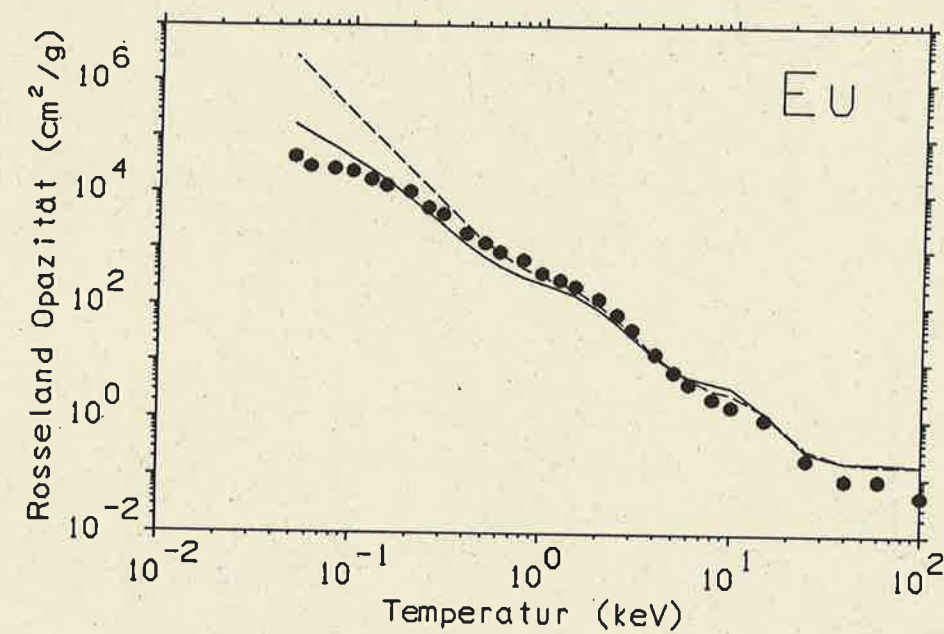


Abb. V.8: Wie Abb. V.6 nur für $\rho = 10^3 \text{ g/cm}^3$.

(b) Mittlerer Temperaturbereich ($800 \text{ eV} < T < 10 \text{ keV}$)

Die Rosseland Opazitäten ohne l -Aufspaltung mit "band-smearing" folgen dem Verlauf der "Sesame"-Werte überraschend gut. Unsere Opazitäten mit Berücksichtigung der l -Aufspaltung haben in einigen Bereichen höhere Werte. Um dies zu verstehen, betrachten wir als Beispiel den Extinktionskoeffizienten für Europium bei 0.1 g/cm^3 und $T = 1 \text{ keV}$ (siehe Abb. V.9).

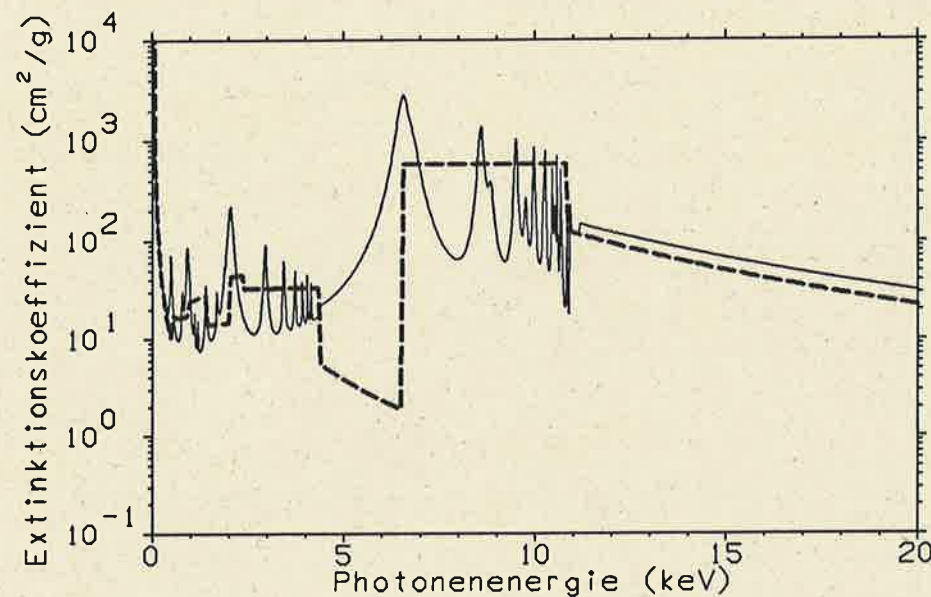


Abb. V.9: Extinktionskoeffizient für Europium bei $\rho = 0.1 \text{ g/cm}^3$ und $T = 1 \text{ keV}$ nach Modell dieser Arbeit ohne Linienverbreiterung (durchgezogene Linie) und nach Tsakiris und Eidmann mit "band-smearing" (gestrichelte Linie).

Die Gewichtsfunktion $\frac{dU^P(T)}{dT}$ besitzt ein Maximum bei ungefähr $h\nu = 4 \times T$ (in diesem Fall also bei 4 keV), das heißt der Extinktionskoeffizient in einem Bereich um $4T$ trägt besonders viel zur Rosseland Opazität bei. Der Extinktionskoeffizient in der "band-smearing" Näherung weist gerade im Bereich $4.5 \text{ keV} \leq h\nu \leq 6.5 \text{ keV}$ zwischen den beiden Bändern eine Lücke auf. In unserem Modell tritt diese Lücke nicht auf, da eine Linie mit $\approx 200 \text{ eV}$ Linienbreite diesen Bereich überdeckt. Diese Breite wird hauptsächlich durch die Feinstrukturaufspaltung verursacht, die in der Arbeit von Tsakiris und

Eidmann nicht berücksichtigt wurde. Dies hat zur Folge, daß der Wert für die Rosseland Opazität mit l -Aufspaltung um einen Faktor ≈ 5 größer wird. Den "Sesame"-Wert würde man erreichen, wenn die Linienverbreiterung durch Feinstrukturaufspaltung auf 15% der ursprünglichen Verbreiterung reduziert wird. Dies zeigt, daß die Rosseland Opazität in diesem Bereich empfindlich auf Änderungen in der Linienbreite reagiert. Da bei der Berechnung der Linienbreite nur einfache Abschätzungen verwendet wurden, können wir nicht entscheiden, welcher Wert der genauere ist. Ein Vergleich mit den Extinktionskoeffizienten, die den "Sesame"-Daten zugrundeliegen, ist leider nicht möglich, da nicht bekannt ist, wie die Opazitäten der "Sesame"-Bibliothek berechnet wurden. Daher kann über deren Genauigkeit keine Aussage gemacht werden.

(c) Oberer Temperaturbereich ($T \geq 10 \text{ keV}$)

Es sind nahezu alle Elektronen freigesetzt und Streuung dominiert. Daher beeinflußt die zusätzliche Linienverbreiterung von 20 eV die Rosseland Opazität nicht. Unsere Resultate sind bei allen drei Dichten identisch mit denen von Tsakiris und Eidmann, da wir den gleichen Streuquerschnitt verwenden. Die Abweichungen von den "Sesame"-Werten sind auf ein Vernachlässigen relativistischer Effekte zurückzuführen, die bei diesen Temperaturen wichtig sind, in unserer Berechnung aber nicht enthalten sind.

Insgesamt erhalten wir aus unserem Modell, wie der Vergleich mit der "Sesame"-Bibliothek zeigte, gute Resultate für die Rosseland Opazität in einem weiten Bereich von Temperatur und Dichte, ohne die Linien zu verschmieren. Daraus schließen wir, daß unser Modell die Extinktionskoeffizienten und deren Variation mit der Frequenz annähernd richtig beschreibt, und somit zur Weiterverarbeitung in einem Strahlungshydrodynamik-Programm geeignet ist. Durch eine künstliche Verbreiterung der Linien $\Delta\gamma$, deren Werte für verschiedene Elemente man durch Vergleich mit der "Sesame"-Bibliothek oder anderen genaueren Werten bestimmen kann, lassen sich die Ergebnisse in bestimmten Bereichen noch verbessern.

V.3. PLANCK OPAZITÄT

Betrachtet man Emission aus optisch dünnen Plasmen, so erweist sich oftmals die Einführung einer weiteren frequenzgemittelten Opazität, der sogenannten Planck Opazität, als vorteilhaft. Eine eingehende Diskussion der Planck Opazität ist zum Beispiel in Ref. [62] zu finden. Ihre Definition lautet

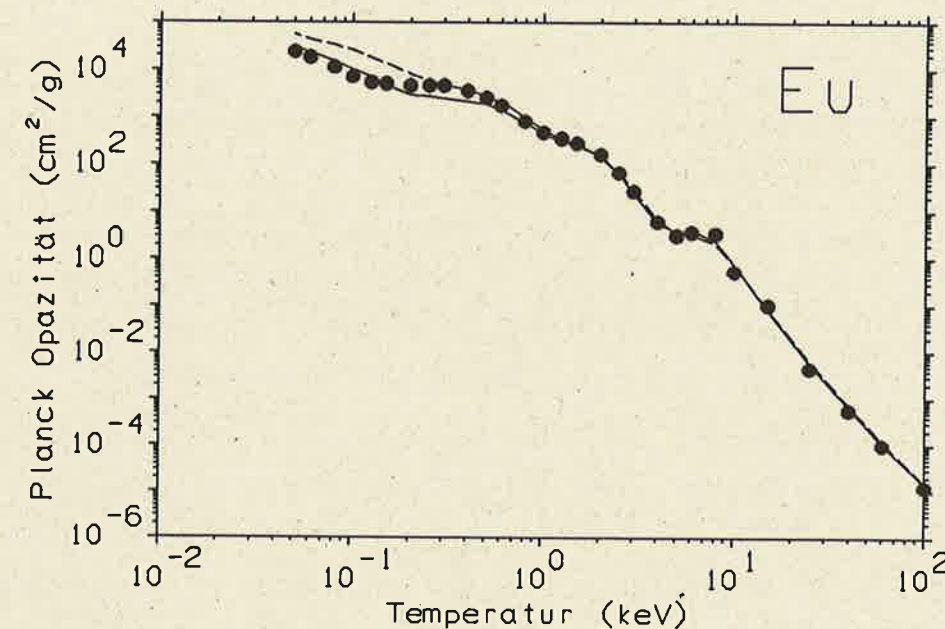
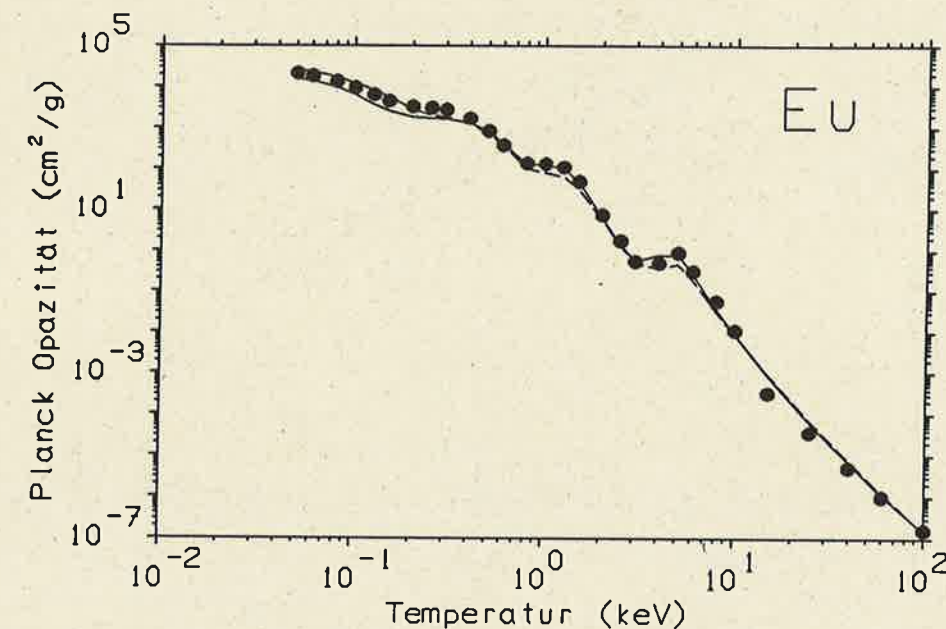
$$\kappa_P = \frac{\int_0^\infty \kappa(\nu) U_\nu^P d\nu}{\int_0^\infty U_\nu^P d\nu} \quad (V.6)$$

Der Extinktionskoeffizient $\kappa(\nu)$ ist erneut durch Gl. (IV.20) gegeben. Da Streuung zwar die Richtung eines Photons ändert, nicht jedoch zur Emission beiträgt, muß man zur Bildung der Planck Opazität den Extinktionskoeffizienten ohne Streuung verwenden. Eine eingehendere Behandlung dieses Sachverhaltes findet man bei Mihalas und Weibel-Mihalas [60].

Die Berechnung der Planck Opazität ist weniger kritisch als die der Rosseland Opazität, da sie aufgrund ihrer Definition nicht sehr empfindlich auf Änderungen im Linienprofil reagiert. Daher ändert auch eine zusätzliche Linienverbreiterung nur wenig an den Resultaten unseres Modells, die in allen Fällen sehr gut mit den "Sesame"-Daten übereinstimmen. Als Beispiel sind in Abb. V.10 bis V.11 einige Planck Opazitäten für Europium abgebildet. Die mittlere Abweichung s (Wurzel aus der mittleren quadratischen Ableitung) von den "Sesame"-Daten ist für unser Modell bei allen drei Dichten geringer als für das Modell von Tsakiris und Eidmann. Letzteres liefert bei 10^3 g/cm^3 und niedrigen Temperaturen wie bei den Rosseland Opazitäten zu hohe Werte, da die Entartung nicht berücksichtigt wird.

Abb. V.10: (oben) Planck Opazität für Europium in Abhängigkeit von der Temperatur bei $\rho = 0.1 \text{ g/cm}^3$. Die durchgezogene Linie kennzeichnet die Werte dieser Arbeit ohne künstliche Linienverbreiterung ($s = 43\%$) und die gestrichelte Linie die Ergebnisse ohne l -Aufspaltung nach Tsakiris und Eidmann ($s = 48\%$). Die Punkte stellen die Daten der "Sesame"-Bibliothek dar.

Abb. V.11: (unten) Wie Abb. V.10 nur für $\rho = 10 \text{ g/cm}^3$. Diese Arbeit: $s = 26\%$, Tsakiris und Eidmann: $s = 91\%$.



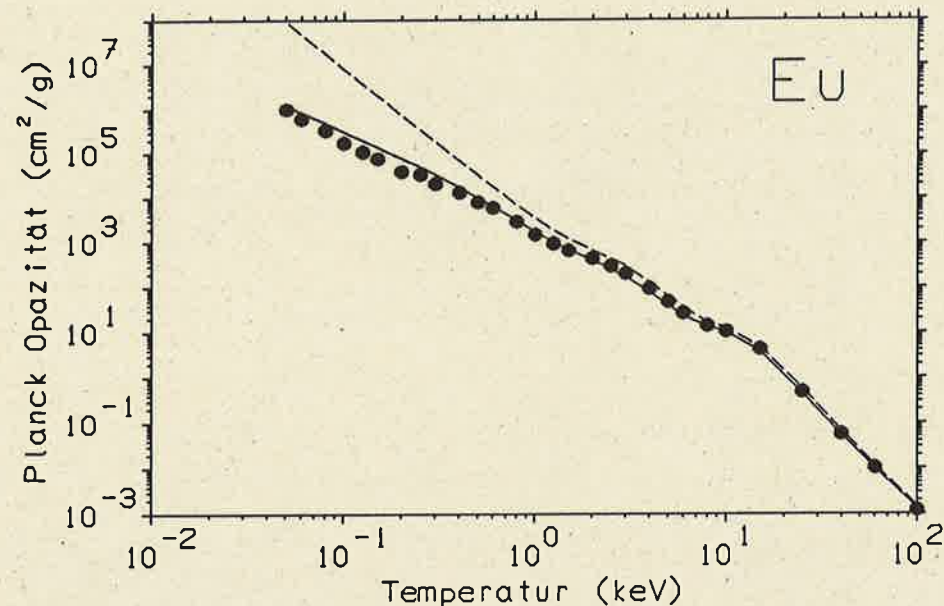


Abb. V.12: Wie Abb. V.10 nur für $\rho = 10^3 \text{ g/cm}^3$. Diese Arbeit: $s = 38\%$, Tsakiris und Eidmann: $s = 2669\%$.

VI. Zusammenfassung

In der vorgelegten Arbeit wurden frequenzabhängige Opazitäten für schwere Elemente unter Berücksichtigung der l -Aufspaltung der atomaren Energieniveaus in einer Weise berechnet, die es gestattet, mit einem vertretbarem Aufwand an Rechenzeit Tabellen dieser Größen für einen weiten Bereich von Temperatur und Dichte zu erstellen. Tabellen dieser Art stehen bisher in publizierter Form nicht zur Verfügung. Sie werden jedoch zur numerischen Simulation des Strahlungstransports in Hoch-Z Plasmen benötigt.

Die Energieniveaus erhielten wir aus dem Modell des abgeschirmten Wasserstoffatoms mit l -Aufspaltung von Perrot, das die Energieniveaus und Ionisationspotentiale erheblich besser beschreibt als die Wasserstoffnäherung ohne l -Aufspaltung. Die Oszillatorstärken bestimmten wir in der Wasserstoffnäherung, indem wir die Wellenfunktionen durch entsprechende Wasserstoffwellenfunktionen mit zwei verschiedenen effektiven Kernladungszahlen näherten. Diese Näherung, ihr Gültigkeitsbereich und die Wahl geeigneter effektiver Kernladungszahlen wurden anhand vieler Beispiele eingehend diskutiert.

Die Besetzungszahlen ermittelten wir im Rahmen einer "average-atom"-Näherung, in der wir die Elektronen gemäß der Fermi-Dirac Statistik auf die Energieniveaus verteilten. Den Entartungsparameter der Fermi-Dirac Verteilung bestimmten wir selbstkonsistent, so daß auch der Fall hoher Entartung in unsere Betrachtung mit eingeschlossen ist. Kontinuumsabsenkung und Druckionisation wurden in das statistische Modell integriert. Durch Verwendung des Algorithmus von Mancini und Fontán konnten die Konvergenzprobleme beseitigt werden, die in früheren Arbeiten bei niedrigen Temperaturen auftraten. Es ist nun möglich das Gleichungssystem bis zu Temperaturen von 1 eV zu lösen.

Wir behandelten die Wirkungsquerschnitte der relevanten Absorptionsmechanismen, ihre Korrekturen bei hohen Dichten und die Berechnung frequenzabhängiger Opazitäten. Am Beispiel eines Goldplasmas zeigten wir die Veränderungen in den frequenzabhängigen Opazitäten, welche die Einführung der l -Aufspaltung mit sich bringt. Mit l -Aufspaltung besitzen die Extinktionskoeffizienten mehr Struktur und sind bei niedrigen Photonenenergien (50 – 500 eV) höher. Wir erwarten, daß dies die systematische Diskrepanz zwischen den gemessenen

nen und den simulierten Spektren verringert, die von verschiedenen Laserplasma-Gruppen beobachtet wurde. Dies zeigte auch der Vergleich zwischen dem gemessenen Emissionsspektrum eines Laserplasmas und dem berechneten Emissionsspektrum, das in dieser Arbeit unter Verwendung der frequenzabhängigen Opazitäten mit l -Aufspaltung bestimmt wurde.

Ein Vergleich der Rosseland Opazitäten für Europium, die sich aus den Extinktionskoeffizienten mit l -Aufspaltung in der vorliegenden Arbeit ergaben, mit den Daten aus der "Sesame"-Bibliothek zeigte eine zufriedenstellende Übereinstimmung, die durch eine geringe, zusätzliche Linienverbreiterung noch verbessert werden konnte. Eine Verschmierung der Linien oder ganzer Bänder war hierzu nicht nötig. Eine nennenswerte Abweichung zwischen den Rosseland Opazitäten mit l -Aufspaltung einerseits und den Rosseland Opazitäten ohne l -Aufspaltung und den "Sesame"-Daten andererseits trat nur für Temperaturen im Bereich zwischen 1 keV und 10 keV auf, verursacht durch das teilweise Schließen einer Lücke zwischen zwei Bändern bei Berücksichtigung der l -Aufspaltung. Bei den Planck Opazitäten ergab die Gegenüberstellung eine gute Übereinstimmung in allen Bereichen.

Anhang A. Radialintegral für gebunden-gebunden Übergänge

Das in unserer Arbeit benötigte Dipolmatrixelement $R_{nl}^{n'l'}$ über normierte, wasserstoffähnliche Wellenfunktionen ist ein spezielles Integral einer ganzen Gruppe von Integralen der Form

$$J_{\gamma}^{sp}(\alpha, \alpha') = \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{k+k'}{2}z\right) z^{\gamma-1+s} F(\alpha, \gamma, kz) F(\alpha', \gamma-p, k'z) dz, \quad (A.1)$$

deren Lösung mittels Rekursion bei Landau und Lifschitz [63] gegeben ist. Damit ist nicht nur die Berechnung des Dipolmatrixelementes, sondern auch höherer Multipole möglich. Die Parameter für das Dipolmatrixelement ergeben sich durch einen Vergleich mit der allgemeineren Formel zu:

$$k = \frac{2Z_n}{a_0 n}, \quad k' = \frac{2Z_{n'}}{a_0 n'}, \quad (A.2)$$

$$\alpha = -n + l + 1, \quad \alpha' = -n' + l', \quad \gamma = 2l + 2, \quad p = 2, \quad s = 1. \quad (A.3)$$

Im Fall des Dipolmatrixelementes kann das Ergebnis aber auch in geschlossener Form angegeben werden [25]:

$$R_{nl}^{n'l'}(Z_n, Z_{n'}) = \left[\frac{(n+l)!}{(2n)(n-l-1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{(n'+l')!}{(2n')(n'-l'-1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \\ \times \frac{1}{(2l+1)!} \frac{1}{(2l'+1)!} 2^{l+l'+4} z_n^{n^*+n'^*+l+\frac{3}{2}} z_{n'}^{l'+\frac{3}{2}} \\ \times (z_n + z_{n'})^{-2-n-n'} \sum_u \psi^u(nl, n'l') \left(\frac{z_{n'}}{z_n} \right)^u, \quad (A.4)$$

mit

$$n^* = n - l - 1, \quad n'^* = n' - l' - 1, \quad (A.5)$$

$$z_n = \frac{2}{n} Z_n, \quad z_{n'} = \frac{2}{n'} Z_{n'}, \quad (A.6)$$

und

$$\psi^u(nl, n'l') = \sum_i \sum_j d_{nl}^i d_{n'l'}^j 2^{i+j} (l+l'+3+i+j)! \\ \times \frac{(n^*+n'^*-i-j)!}{(n^*+n'^*-i-u)!(u-j)!}, \quad (A.7)$$

wobei

$$i_m = \min\{n^*, n^* + n'^* - u\}, j_m = \min\{n'^*, u\}, \quad (A.8)$$

$$d_{nl}^i = (-1)^i \frac{(n^*)!}{(n^* - i)!} \frac{(2l + 1)!}{(2l + 1 + i)!} \frac{1}{i!}, \quad (A.9)$$

$$d_{n'l'}^i = (-1)^i \frac{(n'^*)!}{(n'^* - i)!} \frac{(2l' + 1)!}{(2l' + 1 + i)!} \frac{1}{i!}. \quad (A.10)$$

Anhang B. Radialintegral für gebunden-frei Übergänge

Eine analytische Formel für das Integral

$$I_m = \int_0^\infty R_{nl}(r, Z_i) r^m R_{\epsilon l'}(r, Z_f) r^2 dr \quad (B.1)$$

bei Verwendung verschiedener effektiver Kernladungszahlen Z_i und Z_f für die diskrete Radialwellenfunktion und die Kontinuumswellenfunktion ist bei Bebb [22] gegeben. Der Wellenzahlvektor k eines freien Elektrons mit der kinetischen Energie ϵ ergibt sich aus

$$k = \sqrt{\frac{2m\epsilon}{\hbar^2}}. \quad (B.2)$$

Für das Integral ergibt sich dann

$$I_m = \eta(K_n)^{l'} \exp(-2\gamma \tan^{-1}(K_n)) \times \sum_{t=0}^{n-l-1} d_t [2/(1 + K_n^2)^{\frac{1}{2}}]^{N+2l'+2} S(N), \quad (B.3)$$

mit folgenden Abkürzungen:

$$\eta = (-1)^{m+1+l-l'} \left(\frac{n}{2Z}\right)^{m+\frac{3}{2}} \times \left[\frac{2\pi\gamma(n+l)!(n-l-1)!}{2n(1 - \exp(-2\pi\gamma))} \prod_{r=1}^{l'} (r^2 + \gamma^2) \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (B.3a)$$

$$K_n = \frac{nk}{Z_i}, \quad (B.3b)$$

$$\gamma = \frac{Z_f}{k}, \quad (B.3c)$$

$$d_t = [(n-l-1-t)!(2l+1+t)!t!]^{-1}, \quad (B.3d)$$

$$N = m + 1 + l - l' + t; m \geq -(1 + l - l'), \quad (B.3e)$$

und

$$S(N) = \sum_{s=0}^N \binom{N}{s} |\zeta(N-s, s)| \cos \psi(N, s), \quad (B.3f)$$

$$|\zeta(N-s, s)| = \prod_{p=1}^{N-s} [\gamma^2 + (l' + p)^2]^{\frac{1}{2}} \times \prod_{q=1}^s [\gamma^2 + (l' + q)^2]^{\frac{1}{2}}, \quad (B.3g)$$

$$\psi(N, s) = N\pi + \sum_{p=1}^{N-s} \phi(p) - \sum_{q=1}^s \phi(q) + (N - 2s)\theta, \quad (B.3h)$$

wobei

$$\phi(j) = \tan^{-1} \left(\frac{\gamma}{l' + j} \right) \quad \text{und} \quad \theta = \tan^{-1} K_n. \quad (B.3i)$$

Es ist zu beachten, daß sich in der Veröffentlichung von Bebb ein Druckfehler befindet. In Gl. (B.3.g) wurde bei beiden Produkten der Exponent $1/2$ vergessen. Das Radialintegral ist in Einheiten $a_0^{m+\frac{3}{2}}$ gegeben. Das in unserer Arbeit benötigte Dipolintegral erhält man mit $m = 1$ in der Einheit $a_0^{\frac{5}{2}}$.

Anhang C. Das Programm OPAL

Unser Programm zur Berechnung der Extinktionskoeffizient und Opazitäten OPAL (OPacities in Average atom approximation with L-splitting) ist in Standard-FORTRAN77 geschrieben und besteht ohne Unterprogramme zur graphischen Darstellung aus ungefähr 900 Anweisungen. Einen Eindruck von der Struktur des Programms vermittelt Abb. C.1.

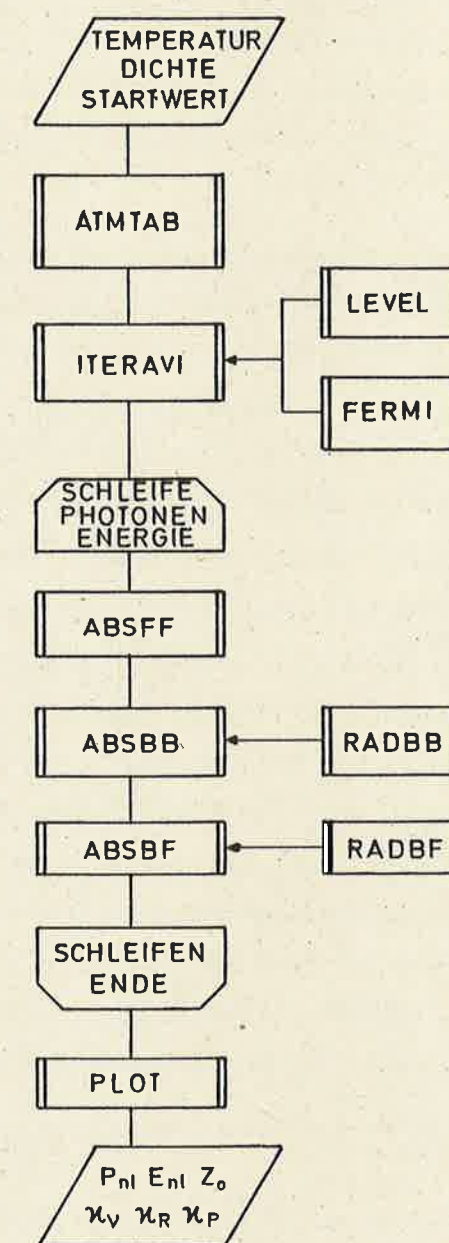


Abb. C.1: Aufbau des Programms OPAL.

Zunächst ist die Eingabe der gewünschten Werte für Temperatur und Dichte erforderlich, eine Änderung des Startwertes ist optional. Danach werden aus dem Unterprogramm ATMTAB die zum Element gehörenden Daten Atomgewicht, Elementsymbol und effektive Kernladungszahlen für das neutrale Element im Grundzustand aus Tabellen eingelesen. Anschließend wird in der Routine ITERAVI das in Kap. III beschriebene selbstkonsistente Lösungsverfahren durchgeführt, wozu die Unterprogramme LEVEL zur Bestimmung der Energieniveaus und FERMI zur Berechnung des Fermi-Dirac Integrals der Ordnung $1/2$ benötigt werden. Mit den daraus resultierenden Energieniveaus und Besetzungszahlen des gemittelten Atoms kann dann der frequenzabhängige Massenabsorptionskoeffizient berechnet werden.

Hierzu wird die Photonenenergie innerhalb einer Schleife von einem Minimalwert bis zu einem Maximalwert variiert, die beide frei wählbar sind, und zu jeder Photonenenergie der Absorptionskoeffizient ermittelt. In ABSFF wird der Absorptionskoeffizient für inverse Bremsstrahlung, in ABSBB für Photoanregung und in ABSBF für Photoionisation berechnet. Die hierfür notwendigen Radialintegrale für gebunden-gebunden und gebunden-frei Übergänge nach Anhang A und B stellen die Unterprogramme RADBB und RADBF zur Verfügung.

Nach Beendigung der Schleife wird der Extinktionskoeffizient in der Routine PLOT über die Photonenenergie geplottet (siehe zum Beispiel Abb. IV.3). Auch werden die Besetzungszahlen, die Energieniveaus, der Ladungszustand, die Rosseland Opazität und die Planck Opazität in Tabellenform ausgegeben.

Das Programm wurde auf der CRAY X-MP/2 im Rechenzentrum Garching der Max-Planck-Gesellschaft getestet, mit der auch alle für die vorliegende Arbeit notwendigen Rechnungen durchgeführt wurden. Da nur der FORTRAN77-Befehlssatz verwendet wurde, ist das Programm aber sehr portabel. Es benötigt auf dem CRAY-Computer zwischen einigen Sekunden und einigen Minuten CPU-Zeit. Die Laufzeit ist insbesondere von der Anzahl der Linien abhängig, die bei der Berechnung zu berücksichtigen sind.

LITERATURVERZEICHNIS

- [1] A. N. Cox, *Stellar Absorption Coefficients and Opacities* in L. H. Aller and D. B. McLaughlin (eds), *Stars and Stellar Systems*, Vol. 8: *Stellar Structure*. Univ. of Chicago Press, Chicago (1965)
- [2] W. F. Huebner, A. L. Merts, N. H. Magee, Jr. and M.F. Argo, *Astrophysical opacity library*. Los Alamos Scientific Laboratory Manual, LA-6760-M, Los Alamos, N. M. (1977)
- [3] SESAME '83: *Report on the Los Alamos equation-of-state Library*. T4-Group, Los Alamos National Laboratory Report LALP-83-4, Los Alamos, N. M. (1983)
- [4] S. S. Penner and D. B. Olfe, *Radiation and Reentry*. Academic Press, New York and London (1968)
- [5] E. Nardi and Z. Zinamon, *Phys. Rev. A* **20**, 1197 (1979)
- [6] H. Mayer, *Methods of opacity calculations*. Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-647, Los Alamos, N. M. (1947)
- [7] W. A. Lokke and W. H. Grasberger, *XSNQ-U—A Non-LTE Emission and Absorption Coefficient Subroutine*. Lawrence Livermore Laboratory Report UCRL-52276, Univ. of California, Livermore (1977)
- [8] G. D. Tsakiris and K. Eidmann, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **38**, 353 (1987)
- [9] K. Eidmann, *Emission and Absorption of Radiation in Laser-Produced Plasmas* in A. Caruso and E. Sindoni (eds), *Course and Workshop of the International School of Plasma Physics Piero Caldirola "Inertial Confinement Fusion"* (Varenna 1988). Editrice Compositori, Bologna (1989)
- [10] T. Yabe and C. Yamanaka, *Comm. Plasma Phys.* **9**, 169 (1985)
- [11] F. Perrot, *Fast Calculation of Electronic Structure: The Screened Hydrogenic Model with L-Splitting*. *Physica Scripta* **39**, 332 (1989)

- [12] D. E. Post, R. V. Jensen, C. B. Tarter, W. H. Grasberger, and W. A. Lokke, *At. Data Nucl. Data Tables* **20**, 397 (1977)
- [13] J. C. Slater, *Phys. Rev.* **36**, 57 (1930)
- [14] J. C. Slater, *Quantum Theory of Matter*. McGraw-Hill, New York (1951)
- [15] G. C. Pomraning, *The Equations of Radiation Hydrodynamics*. Pergamon Press, Oxford (1973)
- [16] J. C. Slater, *Quantum Theory of Atomic Structure*. McGraw-Hill, New York (1960)
- [17] R. M. More, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **27**, 345 (1982)
- [18] T. Yabe and B. Goel, *Relativistic Calculations of Level Energies of High-Z Atoms*. Kernforschungszentrum Karlsruhe Report KfK-4176, Karlsruhe (1986)
- [19] R. C. Weast (ed), *CRC Handbook of Chemistry and Physics*. CRC Press Inc., Boca Raton, Florida (1987)
- [20] T. A. Carlson, C. W. Nestor, Jr., N. Wasserman, and J. D. McDowell, *At. Data Nucl. Data Tables* **2**, 63 (1970)
- [21] Afaf Abdel-Hady, I. Nasser, and Y. Hahn, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **39**, 197 (1988)
- [22] H. B. Bebb, *J. Math. Phys.* **7**, 955 (1966)
- [23] C. Froese-Fischer, *At. Data* **4**, 301 (1972)
- [24] D. R. Bates and A. Damgaard, *Phil. Trans. Roy. Soc. Lond. A* **242**, 101 (1949)
- [25] A. M. Naqvi, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **4**, 597 (1964)
- [26] W. L. Wiese, M. W. Smith, and B. M. Glennon, *Atomic Transition Probabilities — Hydrogen through Neon*. NSRDS-National Bureau of Standards **4**, Vol. I, U.S. Government Printing Office, Washington, D.C. (1966)

- [27] W. L. Wiese, M. W. Smith, and B. M. Miles, *Atomic Transition Probabilities — Sodium through Calcium*. NSRDS-National Bureau of Standards **22**, Vol. II, U.S. Government Printing Office, Washington, D.C. (1969)
- [28] I. I. Sobel'man, *Introduction to the Theory of Atomic Spectra*. Pergamon Press (1972)
- [29] C. M. Varsavsky, *Planet. Space Sci.* **11**, 1001 (1963)
- [30] R. J. Exton, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **16**, 309 (1976)
- [31] H. A. Bethe and E. E. Salpeter, *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms*. Plenum Publishing Corporation, New York (1977)
- [32] D. Layzer and R. H. Garstang, *Ann. Rev. Astronomy Astrophys.* **6**, 449 (1968)
- [33] U. Fano and J. W. Cooper, *Rev. Mod. Phys.* **40**, 441 (1968)
- [34] L. C. Green, N. E. Weber, and E. Krawitz, *Astrophys. J.* **113**, 690 (1951)
- [35] R. Ramis, R. Schmalz, and J. Meyer-ter-Vehn, *Comp. Phys. Comm.* **49**, 475 (1988)
- [36] W. F. Huebner, *Atomic and Radiative Processes in the Solar Interior* in P. A. Sturrock (ed), *Physics of the Sun*, Vol. I, D. Reidel Publishing Company (1986)
- [37] T. R. Carlson, D. F. Mayers, and D. W. N. Stibbs, *Mon. Not. R. astr. Soc.* **140**, 483 (1968)
- [38] B. F. Rozsnyai, *Phys. Rev. A* **5**, 1137 (1972)
- [39] B. Strömgren, *Zs. f. Astrophys.* **4**, 118 (1932)
- [40] J. M. Green, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **4**, 639 (1964)
- [41] R. M. More, *Atomic Physics in Inertial Confinement Fusion*. Lawrence Livermore Laboratory Report UCRL-84991 Part I and II, Univ. of California, Livermore (1981)

- [42] G. P. Zimmerman and R. M. More, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **23**, 517 (1980)
- [43] R. C. Mancini and C. F. Fontán, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **34**, 115 (1985)
- [44] D. D. Clayton, *Principles of Stellar Evolution and Nucleosynthesis*. McGraw-Hill (1968)
- [45] T. R. Carlson and H. M. Hollingsworth, *Mon. Not. R. astr. Soc.* **141**, 77 (1968)
- [46] The Numerical Algorithms Group Ltd, *The NAG Fortran Library Manual - Mark 12*, Oxford (1987)
- [47] G. Velarde et al., *Pandora Code: An Average Atom-Model for Opacity Calculations*. Report DENIM 010, Universidad Politecnica de Madrid, Madrid (1984)
- [48] B. H. Armstrong, R. R. Johnston, R. S. Kelly, H. E. DeWitt, and S. G. Brush, *Opacity of High Temperature Air* in C. A. Rouse (ed), *Progress in High Temperature Physics and Chemistry*, Vol. 1, Pergamon Press, Oxford, New York (1966)
- [49] H. Hall, *Rev. Mod. Phys.* **8**, 358 (1936)
- [50] D. R. Bates, *Mon. Not. R. astr. Soc.* **100**, 25 (1939)
- [51] Y. Hahn and D. W. Rule, *J. Phys. B.: Atom. Molec. Phys.* **10**, 2689 (1977)
- [52] D. H. Menzel and C. H. Pekeris, *Mon. Not. R. astr. Soc.* **96**, 77 (1935)
- [53] Y. S. Kim and R. H. Pratt, *Phys. Rev. A* **27**, 2913 (1983)
- [54] B. I. Henke, P. Lee, T. J. Tanaka, R. L. Shimabukuro, and B. K. Fujikawa, *At. Data Nucl. Data Tables* **27**, 1 (1982)
- [55] B. Sonntag, *J. Phys. (Paris) Coll. C4, Suppl. 7*, **39**, 9 (1978)

- [56] F. Combet-Farnoux, *J. Phys. (Paris) Coll. C4, Suppl. 7*, **39**, 1 (1978)
- [57] P. J. Cox and R. T. Giuli, *Principles of Stellar Structure*, Vol. 1, Gordon and Breach, New York (1968)
- [58] H. L. Mayer, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **47**, 585 (1964)
- [59] P. Celliers and K. Eidmann, *Conversion of Laser Light into X-rays in Thin Foil Targets*. Zur Veröffentlichung eingereicht bei Phys. Rev. A
- [60] D. Mihalas and B. Weibel-. Mihalas, *Foundations of Radiation Hydrodynamics*. Oxford University Press, New York and Oxford (1984)
- [61] G. B. Rybicki and A. P. Lightman, *Radiative Processes in Astrophysics*. John Wiley & Sons (1979)
- [62] Ya. B. Zeldovich and Yu. P. Raizer, *Physics of Shock Waves and High-Temperature Hydrodynamic Phenomena*. Academic Press (1966)
- [63] L. D. Landau und E. M. Lifschitz, *Lehrbuch der Theoretischen Physik, Band III: Quantenmechanik*. Akademie-Verlag, Berlin (1984)

DANKSAGUNG

Die vorliegende Arbeit wurde am Max-Planck-Institut für Quantenoptik in Garching bei München durchgeführt.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Dr. habil. Jürgen Meyer-ter-Vehn, der durch seine Vorlesungen an der Technischen Universität München mein Interesse für das Gebiet der Laserplasmen erst geweckt hat. Er hat das Thema dieser Arbeit vorgeschlagen und freundlicherweise die Betreuung während der Durchführung übernommen. Ohne seine Kontakte zur Technischen Universität München wäre diese Arbeit wohl nicht möglich gewesen.

Herrn Dr. Siegbert Witkowski danke ich für die Aufnahme in die Laserplasma Arbeitsgruppe am MPQ und die Möglichkeit, die Berechnungen auf dem CRAY X-MP/2 Supercomputer des Rechenzentrums Garching durchzuführen.

Viele Diskussionen mit Herrn Bernd Kärcher waren mir sehr hilfreich. Die experimentellen Ergebnisse wurden mir von Herrn Dr. Klaus Eidmann überlassen, der auch bei der Klärung vieler Fragen zum Vergleich mit dem Experiment behilflich war. Herr Dr. George Tsakiris stellte freundlicherweise sein Programm zur Opazitätsberechnung ohne l -Aufspaltung zur Verfügung. Frau Josefine Pfister besorgte die rasche und sorgfältige Ausarbeitung der Tuschezeichnungen. Ihnen allen sei hiermit gedankt.

