

MAX-PLANCK-INSTITUT FÜR QUANTENOPTIK

**Zustand und optische Eigenschaften
dichter Plasmen**

ALEXANDER RICKERT

**MPQ-Report
175**

Zustand und optische Eigenschaften
dichter Plasmen

ALEXANDER RICKERT

Max-Planck-Institut
für Quantenoptik
BIBLIOTHEK
D-8046 Garching

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

MPQ 175

Februar 1993

It is interesting to note that the accurate calculation of opacities covers a remarkably wide range of physical phenomena and theories. While crude opacity values are relatively easy to obtain, accurate values are very difficult to calculate. Even though, for most aspects of the calculations, the basic physical processes are reasonably well understood, the carrying out of the necessary calculations is a tedious and complicated task, and long-term efforts are required.

BAXTER H. ARMSTRONG

RALPH W. NICHOLLS

(1972)

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Atomphysikalische Grundlagen	9
2.1	Modell unabhängiger Teilchen	10
2.1.1	Analytisches Atompotential	10
2.1.2	Energieniveaus	15
2.1.3	Ionisationspotentiale	18
2.1.4	Vergleich mit abgeschirmtem Wasserstoffmodell	22
2.2	Oszillatorstärken in semiklassischer Näherung	24
3	Plasmazustand	31
3.1	Stationäre Ratengleichungen	35
3.2	Wirkungsquerschnitte und Ratenkoeffizienten	37
3.2.1	Stoßanregung und Stoßabregung	39
3.2.2	Stoßionisation und Dreikörperrekombination	43
3.2.3	Photoabregung und Photorekombination	46
3.2.4	Dielektronische Rekombination	49
3.3	Nichtidealitätseffekte	62
3.4	Numerische Lösung der Ratengleichungen	68
3.5	Resultate	70
3.5.1	Ionisationsgrad	70
3.5.2	Häufigkeitsverteilung der Ladungszustände	78
3.5.3	Zustandsgleichung	79
4	Extinktions- und Emissionskoeffizienten	87
4.1	Häufigkeiten der (n, l, j) -Zustände	88
4.2	Lösung der Dirac-Gleichung im Modellpotential	89
4.3	Photoanregung und Photoabregung	96

4.3.1	Berechnung relativistischer Oszillatorstärken	97
4.3.2	Linienprofil und Linienbreite	102
4.4	Photoionisation und Photorekombination	106
4.5	Bremsstrahlung und inverse Bremsstrahlung	110
4.6	Streuung	111
4.7	Extinktions- und Emissionskoeffizient	112
5	Zusammenfassung	117
A	Parameter für analytische Atompotentiale	121
B	Das Programm SAPHIR	125
	Literaturverzeichnis	131

Abbildungsverzeichnis

1.1	Zustandsdiagramm der Sonne (durchgezogene Kurve) und von Laborplasmen.	2
1.2	Dichte- und Temperaturprofil in laserbestrahlter Hoch-Z-Materie.	3
2.1	Abweichung des analytischen Potentials vom DFS-Potential für Al I und Gold XXV.	14
2.2	$6s_{1/2}$ -Wellenfunktion für Gold I.	19
2.3	Ionisationspotentiale für Aluminium und Eisen.	20
2.4	Ionisationspotentiale für Gold.	21
2.5	Vergleich der Ionisationspotentiale für Gold mit Resultaten des abgeschirmten Wasserstoffmodells.	22
2.6	Oszillatorstärke für Resonanzübergang in Al I und Al XI über Anfangs- und Endenergie.	29
3.1	Atomare Wechselwirkungsprozesse	40
3.2	Möglichkeiten der Ionisation zwischen einfach angeregten Zuständen.	45
3.3	Ratenkoeffizient für dielektronische Rekombination in Au XXV.	58
3.4	Ratenkoeffizient für dielektronische Rekombination in Al VI.	59
3.5	Beitrag der Hauptschalen zur dielektronischen Rekombination in Au XXV.	60
3.6	Ionisationsgrad eines Goldplasmas mit $T_e = 200 \text{ eV}$ und $T_e = 10 \text{ eV}$ in Abhängigkeit von der Dichte.	67
3.7	Ionisationsgrad eines Aluminiumplasmas mit $T_e = 50 \text{ eV}$, $T_e = 100 \text{ eV}$ und $T_e = 200 \text{ eV}$ in Abhängigkeit von der Dichte.	71
3.8	Ionisationsgrad eines Eisenplasmas mit $T_e = 50 \text{ eV}$, $T_e = 100 \text{ eV}$ und $T_e = 200 \text{ eV}$ in Abhängigkeit von der Dichte.	72
3.9	Ionisationsgrad eines Goldplasmas mit $T_e = 50 \text{ eV}$, $T_e = 100 \text{ eV}$ und $T_e = 200 \text{ eV}$ in Abhängigkeit von der Dichte.	73

3.10 Ionisationsgrad eines Eisenplasmas und eines Goldplasmas mit $T_e = 500 \text{ eV}$ in Abhängigkeit von der Dichte mit und ohne dielektronische Rekombination.	75
3.11 Ionisationsgrad eines Goldplasmas der Temperatur $T_e = 100 \text{ eV}$ mit und ohne Berücksichtigung angeregter Zustände in Abhängigkeit von der Dichte.	77
3.12 Relative Häufigkeit der Ionisationszustände eines Aluminiumplasmas der Dichte $n_i = 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ und der Temperatur $T_e = 50 \text{ eV}$	79
3.13 Relative Häufigkeit der Ionisationszustände eines Goldplasmas der Dichte $n_i = 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ und der Temperatur $T_e = 600 \text{ eV}$	80
3.14 Innere Energie eines Goldplasmas der Temperatur $T_e = 50, 100, 200 \text{ eV}$ in Abhängigkeit von der Dichte mit und ohne Berücksichtigung der Entartung.	83
3.15 Druck eines Goldplasmas der Temperatur $T_e = 50, 100, 200 \text{ eV}$ in Abhängigkeit von der Dichte mit und ohne Berücksichtigung der teilweisen Entartung.	84
3.16 Anteile der inneren Energie eines Goldplasmas der Temperatur $T_e = 100 \text{ eV}$ in Abhängigkeit von der Dichte.	85
4.1 Bindungsenergie der Niveaus $3d_{3/2}$ und $3d_{5/2}$ für Au II in Abhängigkeit von der Elektronendichte.	94
4.2 Bindungsenergie der Niveaus $4f_{5/2}$ und $4f_{7/2}$ für Au II in Abhängigkeit von der Elektronendichte.	94
4.3 Bindungsenergien und Oszillatorstärke des Übergangs $6s_{1/2} \rightarrow 6p_{1/2}$ für Au I in Abhängigkeit von der Elektronendichte.	100
4.4 Bindungsenergien und Oszillatorstärke des Übergangs $3s_{1/2} \rightarrow 4p_{3/2}$ für Al III in Abhängigkeit von der Elektronendichte.	101
4.5 Linienverschiebung des Übergangs $1s_{1/2} \rightarrow 1p_{3/2}$ für Al XIII in Abhängigkeit von der Elektronendichte.	103
4.6 Photoionisationsquerschnitt für die Niveaus $3p_{1/2}$ in Al I und $6s_{1/2}$ in Au I.	107
4.7 Einfluß der freien Elektronen auf den Photoionisationsquerschnitt.	108
4.8 Extinktionskoeffizient eines Goldplasmas mit $T_e = 100 \text{ eV}$ und $n_i = 3 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$	113
4.9 Emissionskoeffizient eines Goldplasmas mit $T_e = 100 \text{ eV}$ und $n_i = 3 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$	114

B.1 Aufbau des Programms SAPHIR	126
B.2 Aufbau des Unterprogramms EOS	127
B.3 Aufbau des Unterprogramms SOLVE	128
B.4 Aufbau des Unterprogramms ABSCON	129

Tabellenverzeichnis

2.1	Bindungsenergien für Au I und Au XXV.	16
2.2	Bindungsenergien für Fe I und Fe XV.	17
2.3	Bindungsenergien für Al I und Al X.	17
2.4	Vergleich der Bindungsenergien für und Au XXV mit Resultaten des abgeschirmten Wasserstoffmodells.	23
2.5	Oszillatorstärken und Energien für Aluminium, Eisen und Gold. .	28
3.1	Abschirmkonstanten σ_{nm}	54
3.2	Numerische Werte der Konstanten für das abgeschirmte Wasser- stoffmodell mit ℓ -Aufspaltung.	55
3.3	Verbesserte Abschirmkonstanten σ_{nm}	55
4.1	Bindungsenergien der M-Schale und der N-Schale in Gold.	95
4.2	Oszillatorstärken in relativistischer Beschreibung.	99
4.3	Parameter des analytischen Potentials für Ga I, In I und Tl I. . .	102
A.1	Parameter des analytischen Potentials für Aluminium.	122
A.2	Parameter des analytischen Potentials für Eisen.	122
A.3	Parameter des analytischen Potentials für Gold.	123

Kapitel 1

Einleitung

Schon seit den zwanziger Jahren unseres Jahrhunderts ist Strahlungstransport in dichten Plasmen Gegenstand astrophysikalischer Forschung, da sich ein Großteil der stellaren Materie im Plasmazustand befindet und Energietransport durch Strahlung ein entscheidender Prozeß ist. Diese Studien beschränken sich jedoch auf die in stellaren Plasmen mit relevanter Häufigkeit vertretenen Elemente mit niedrigen Kernladungszahlen bis einschließlich Nickel. Mit der Entwicklung von Hochleistungslasern und intensiven Teilchenstrahlen wurde es möglich, heiße, dichte Plasmen durch Bestrahlung von Materie im Labor zu erzeugen, deren Temperatur und Dichte den Verhältnissen im Inneren der Sonne entsprechen (Arnold und Meyer-ter-Vehn 1987 [1], Sigel 1991 [2]). Dadurch können astrophysikalische Probleme im Labor unter kontrollierten Bedingungen studiert werden. Es erschließt sich zudem die Möglichkeit, den Strahlungstransport in Plasmen zu untersuchen, die Elemente mit hohen Kernladungszahlen – wie zum Beispiel Gold – enthalten. Diese Untersuchungen sind von entscheidender Bedeutung für die Kernfusion durch Trägheitseinschluß, die Entwicklung gepulster Röntgenquellen und den Bau von Röntgenlasern. Aber auch ohne konkreten Bezug auf Anwendungen sind diese Forschungen faszinierend, da es möglich ist, makroskopische Materiemengen ($\approx mg$) unter extremen Bedingungen zu erzeugen und deren Wechselwirkung mit Strahlung zu studieren. So können im Labor Dichten von bis zu $1000 g/cm^3$, Drücke im Bereich von $Gbar$, Temperaturen von $10^8 K$ und Geschwindigkeiten im Bereich $10^7 - 10^8 cm/s$ erreicht werden, wobei die Lebensdauer dieser Plasmen im Bereich von ns liegt.

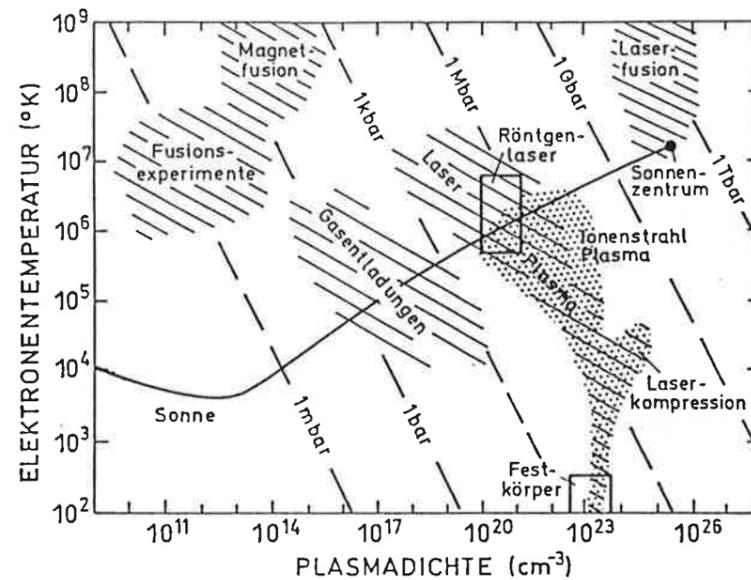


Abb. 1.1: Zustandsdiagramm der Sonne (durchgezogene Kurve) und von Laborplasmen.

Einen Überblick über den Temperatur- und Dichtebereich von Laborplasmen im Vergleich zum Plasmazustand der Sonne zeigt Abb. 1.1. Fusionsexperimente mit magnetischem Einschluss und die zur Magnetfusion notwendigen Bedingungen sind durch sehr niedrige Dichten im Bereich von 10^{14} cm^{-3} und hohe Temperaturen gekennzeichnet, während für die Laserfusion extrem hohe Dichten im Bereich um 10^{26} cm^{-3} erforderlich sind. Die mit einem Hochleistungslaser erzeugten Plasmen umfassen einen Bereich der Dichte von ungefähr 10^{18} cm^{-3} bis 10^{25} cm^{-3} , was ungefähr dem mit Ionenstrahlen zugänglichen Bereich entspricht, der in der Abbildung durch die punktierte Fläche dargestellt ist. Die heute bereits verwirklichten Röntgenlaser arbeiten in dem durch ein Rechteck markierten Gebiet, und der Bereich mittlerer Dichten von ungefähr 10^{17} cm^{-3} ist mittels Gasentladungen zugänglich.

Neben dem bereits erwähnten Energietransport durch Strahlung ist bei der Beschreibung strahlerzeugter Plasmen auch die Hydrodynamik zu berücksichtigen, da diese Plasmen aufgrund des hohen Drucks schnell expandieren. Dabei ist es erforderlich, die Gleichung für den Strahlungstransport zusammen mit den hydrodynamischen Gleichungen zu lösen, da einerseits Energietransport durch

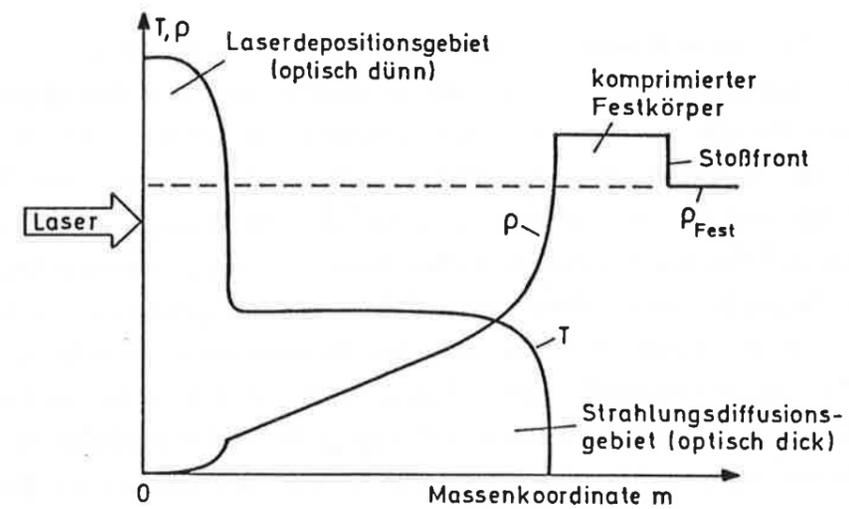


Abb. 1.2: Dichte- und Temperaturprofil in laserbestrahlter Hoch-Z-Materie.

Strahlung das hydrodynamische Verhalten beeinflusst und andererseits Strahlungstransport vom Temperatur- und Dichteprofil des Plasmas abhängt. Der qualitative Verlauf des Temperatur- und Dichteprofiles eines lasererzeugten Hoch-Z-Plasmas ist in Abb. 1.2 dargestellt. Vor Auftreffen des Lasers liegt ein Festkörper mit homogener Dichte und Temperatur vor. Durch Absorption der Laserenergie an der Oberfläche (links) ablatiert dieser Festkörper, und durch Rückstoß entsteht eine in das kalte Material eindringende Stoßwelle (rechts). Im mittleren Bereich zwischen dem Gebiet der Laserdeposition und dem stoßkomprimierten Gebiet im Festkörper erkennt man eine Temperaturwelle mit scharfer Front, die im Hoch-Z-Material durch Strahlungsdiffusion entsteht.

Um diesen Verlauf numerisch zu beschreiben, wird das Material in kleine Massenzellen unterteilt, deren Dichte ρ und Temperatur T aus der Lösung der hydrodynamischen Gleichungen folgt, und anschließend die Strahlungstransportgleichung für jede dieser Massenzellen gelöst. Die Strahlungstransportgleichung

$$\frac{\partial I_\nu}{\partial s} = -\kappa_\nu(\rho, T)I_\nu + \eta_\nu(\rho, T) \quad (1.1)$$

ist eine Bilanzgleichung für die spezifische Intensität I_ν der Strahlung mit Frequenz ν entlang der Ausbreitungsrichtung, die beim Durchgang durch die Massenzelle durch Absorption und Streuung verringert ($-\kappa_\nu(\rho, T)I_\nu$) und durch Emis-

sion ($\eta_\nu(\rho, T)$) verstärkt wird. Um die Änderung der spezifischen Intensität und die durch Strahlung in der Massenzelle deponierte oder von der Massenzelle abgegebene Energie berechnen zu können, müssen die Extinktionskoeffizienten $\kappa_\nu(\rho, T)$ und die Emissionskoeffizienten $\eta_\nu(\rho, T)$ in Abhängigkeit von Temperatur, Dichte und Frequenz bekannt sein, und dem Strahlungs-Hydrodynamik-Programm in Form von Tabellen verfügbar gemacht werden. Die typischen Temperaturen liegen hierbei zwischen einigen keV in der lasergeheizten Randschicht und $\approx 1 eV$ im kalten Material, und der Dichtebereich erstreckt sich von $\rho \approx 10^{-4} \times \rho_{Fest}$ im expandierenden Plasma bis zu $10^3 \times \rho_{Fest}$ in durch sphärische Kompression erzeugten Plasmen, wobei ρ_{Fest} die Festkörperdichte ist. Unter diesen Bedingungen sind für eine numerische Simulation Photonen mit Energien zwischen $1 eV$ und $\approx 10 keV$ relevant. Bevor jedoch die optischen Eigenschaften berechnet werden können, ist es wiederum erforderlich, den Zustand des Plasmas, das heißt die Häufigkeit der einzelnen Ionisations- und Anregungszustände, zu bestimmen, was ebenfalls ein komplexes Problem darstellt, zumal in Experimenten verschiedenste Elemente und auch Gemische verwendet werden. Aufgrund der Komplexität des Problems ist man daher gezwungen, einschneidende Näherungen einzuführen, obwohl die physikalischen Grundlagen aus Atomphysik, Thermodynamik und Plasmaphysik in vielen Fällen wohlbekannt sind und für einzelne Teilbereiche exaktere Methoden verfügbar wären. Dabei ist es schwierig, die Näherungen konsistent durchzuführen und alle wichtigen Eigenschaften des Plasmas zu erfassen. An das Plasmamodell werden in dieser Arbeit jedoch folgende Anforderungen gestellt:

- Die bei niedrigen Dichten und hohen Temperaturen auftretenden Abweichungen des Plasmazustands vom thermodynamischen Gleichgewicht und der Übergang in ein lokales thermodynamisches Gleichgewicht (LTE) sollen ebenso konsistent erfaßt werden wie die Abweichungen vom idealen Gas (Nichtidealität) bei hohen Dichten.
- Die einzelnen Ionisations- und Anregungszustände im Plasma sollen berücksichtigt werden (*detailed configuration accounting* DCA) und nicht nur eine über alle Zustände gemittelte Konfiguration (*average atom model*) (Huebner 1986 [3]).
- Da vor allem schwere Elemente betrachtet werden, sollen bei der Berechnung der Wirkungsquerschnitte für Photoanregung und Photoionisation re-

lativistische Energien und Wellenfunktionen benutzt werden und auch bei der Bestimmung des Plasmazustands der Aufspaltung in (n, ℓ) -Unterschalen Rechnung getragen werden.

- Der Einfluß der im Plasma vorhandenen freien Elektronen auf die atomare Struktur, der zu einer Abweichung der Bindungsenergien von den Werten für ein isoliertes Atom führt, soll berücksichtigt werden (Skupsky 1980 [4]).

Keines der bisher zur Erstellung von Tabellen publizierten Modelle genügt diesen Anforderungen in allen Punkten. Häufig wird zum Beispiel das Modell eines abgeschirmten Wasserstoffatoms verwendet, in dem nur über die Hauptschale gemittelte Energien betrachtet werden (Eidmann 1989 [5], MacFarlane 1989 [6], Itoh *et al.* 1987 [7]), was zu einer Diskrepanz zwischen gerechneten und gemessenen Spektren führt. Diese Diskrepanz kann durch Berücksichtigung der ℓ -Aufspaltung verringert werden, was der Autor anhand eines erweiterten LTE-Modells (Rickert 1989 [8], Rickert und Meyer-ter-Vehn 1990 [9]) für ein Goldplasma gezeigt hat (Rickert und Meyer-ter-Vehn 1991 [10]).

Ziel der vorgelegten Arbeit ist daher die Bestimmung des Zustands und der optischen Eigenschaften von Plasmen unter Beachtung der oben aufgeführten Anforderungen. Diese für numerische Simulationen notwendigen Daten sind bisher in der Literatur nicht verfügbar, obwohl sie für dichte Plasmen und ihre Anwendungen von erheblicher Bedeutung sind.

Um den Rechenaufwand in akzeptablen Grenzen zu halten, war es für diese Arbeit entscheidend, eine Näherungs-Hierarchie einzuführen. Bindungsenergien und Oszillatorstärken werden an verschiedenen Stellen auf unterschiedlichem Näherungsniveau behandelt, je nachdem in welchem Umfang und mit welcher Genauigkeit diese atomaren Größen benötigt werden.

- Bei der Berechnung der Photoabsorptionsquerschnitte für Hoch-Z-Material als Funktion der Photonenenergie (Kapitel 4) werden relativistische Bindungsenergien (E_{nlj}) und Wellenfunktionen zur Bestimmung dieser Größen benutzt, die mittels eines parametrisierten, analytischen Potentials und Lösen der entsprechenden DIRAC-Gleichung ermittelt werden. Der dafür erforderliche hohe numerische Aufwand ist möglich, da nur die Zustände mit relevanter Häufigkeit zur Photoabsorption beitragen.

- Im DCA-Ratengleichungsmodell zur Ermittlung des Plasmazustands werden nur einfach angeregte Konfigurationen und nur die ℓ -Aufspaltung der Energieniveaus ($E_{n\ell}$) berücksichtigt, um die Anzahl der Zustände auf eine handhabbare Größenordnung zu beschränken. Dies ist möglich, da relativistische Effekte die Besetzungshäufigkeiten der Zustände und integrale Größen wie Druck und innere Energie nur wenig beeinflussen. Die Bindungsenergien erhält man durch Mittelung der relativistischen Energien über den Gesamtdrehimpuls j . Für das zur Berechnung der Oszillatorstärken notwendige Dipolmatrixelement wird eine semiklassische, nichtrelativistische Näherung verwendet, mit der das Dipolmatrixelement für Übergänge zwischen einfach angeregten Zuständen in guter Näherung und mit geringem numerischen Aufwand – verglichen mit der Verwendung von relativistischen Wellenfunktionen – berechnet werden kann.
- Ein wichtiger Prozeß, der im Ratengleichungsmodell berücksichtigt werden soll, ist die dielektronische Rekombination. Bei der Bestimmung dieser Rate muß über viele doppelt angeregte Zwischenzustände summiert werden, wofür die bisher besprochenen Methoden zu aufwendig sind. Angesichts der Ungenauigkeiten in den Ratenkoeffizienten ist es hier ausreichend, Energien und Oszillatorstärken dieser doppelt angeregten Zwischenzustände mit dem abgeschirmten Wasserstoffmodell mit ℓ -Aufspaltung (Rickert 1989 [8]) zu berechnen.

In Kapitel 2 der vorliegenden Arbeit wird die Verwendung eines parametrisierten, analytischen Potentials zur Ermittlung der Bindungsenergien und Wellenfunktionen ausführlich diskutiert und die daraus folgenden Resultate mit genauen Werten verglichen. Dieser Vergleich zeigt, daß sich selbstkonsistente, relativistische Rechnungen für Bindungsenergien und Wellenfunktionen von Atomen und Ionen gut mit einem parametrisierten, analytischen Potential (Green *et al.* 1969 [11]) und Lösen der entsprechenden DIRAC-Gleichung reproduzieren lassen, und zwar mit wesentlich geringerem Rechenaufwand als bei selbstkonsistenten Rechnungen.

Im Anschluß daran wird die Berechnung der semiklassischen Oszillatorstärken behandelt, und die Ergebnisse für einige Übergänge werden anhand experimenteller Werte für isolierte Atome überprüft, wobei sich eine sehr gute Übereinstimmung ergibt. Zudem werden Oszillatorstärken für hochionisiertes Gold berechnet, die

nicht in der Literatur zu finden sind.

In Kapitel 3 wird das Ratengleichungsmodell beschrieben und die Berechnung der Raten diskutiert. Besonderer Wert wurde hierbei auf die konsistente Berücksichtigung der dielektronischen Rate gelegt, die in bisherigen Modellen nur in sehr grober Näherung erfaßt wurde (siehe z.B. Eidmann 1989 [5]). Zudem werden im Ratengleichungsmodell die durch die Plasmaumgebung verursachten Nichtidealitätseffekte in einer Weise berücksichtigt, die bei hohen Dichten einen Ionisationsgrad vorhersagt, der dem aus dem THOMAS-FERMI-Modell folgenden sehr nahe kommt, jedoch zusätzlich der Schalenstruktur der Ionen Rechnung trägt.

Ein relativistisches Modellpotential zur Beschreibung von Atomen in dichten Plasmen, das von der Dichte der freien Elektronen abhängt, und die Bestimmung der Absorptions- und Streuquerschnitte wird in Kapitel 4 behandelt. Eine Zusammenfassung in Kapitel 5, die Tabellierung der Parameter des analytischen Potentials für Aluminium, Eisen und Gold im Anhang A und ein Überblick über das im Rahmen der vorliegenden Dissertation entwickelte Programm SAPHIR im Anhang B schließen die Arbeit ab.

Kapitel 2

Atomphysikalische Grundlagen

In diesem Kapitel werden die Methoden zur Berechnung der Übergangsenergien und Oszillatorstärken vorgestellt, die im folgenden zur Beschreibung des Plasmazustands benötigt werden. Im Prinzip wäre es möglich, all diese Daten für isolierte Atome mit hoher Genauigkeit unter Verwendung moderner *ab initio* Methoden der Atomphysik zu berechnen. Angesichts der Fülle benötigter Werte in dieser Arbeit ist dies jedoch praktisch nicht durchführbar, und man ist gezwungen einfachere Modelle zu verwenden. Auch ist in dichten Plasmen der Einfluß des umgebenden Plasmas auf Energieeigenwerte und Oszillatorstärken zu berücksichtigen, wofür einfache Modelle zur Näherung herangezogen werden, da bisher keine zufriedenstellende Lösung für dieses komplexe Vielteilchenproblem vorliegt (Kraeft *et al.* 1986 [12]). Zudem werden die in diesem Kapitel berechneten Daten zur Bildung von Ratenkoeffizienten verwendet, für die ebenfalls nur Näherungen möglich sind. Daher wäre eine aufwendige, genaue Berechnung auch nicht angemessen. Ein zentraler Punkt ist, daß die Energien nicht selbstkonsistent sondern mittels eines parametrisierten Potentials und Lösung der entsprechenden DIRAC-Gleichung berechnet werden.

2.1 Modell unabhängiger Teilchen

Sehr erfolgreich in der Atomphysik ist das Modell unabhängiger Teilchen, in dem sich jedes einzelne Elektron in einem gemittelten, zentralsymmetrischen Potential bewegt, das durch den Kern und die anderen Elektronen erzeugt wird. Dies stellt den Ausgangspunkt des selbstkonsistenten Verfahrens nach Hartree (1975 [13]) und seiner zahlreichen Verfeinerungen dar. Ist dieses Potential bekannt, können durch Lösung der SCHRÖDINGER- oder DIRAC-Gleichung die Energieeigenwerte und Wellenfunktionen bestimmt werden.

2.1.1 Analytisches Atompotential

Für neutrale Atome mit Kernladungszahl Z haben Green, Sellin und Zachor (1969 [11]) eine analytische Darstellung des zentralsymmetrischen Potentials mit zwei Parametern H und d vorgeschlagen¹

$$V(r) = \frac{1}{r} \left((1 - Z) \left(\frac{1}{H \left(\exp\left(\frac{r}{d}\right) - 1\right) + 1} \right) - 1 \right), \quad (2.1)$$

die es erlaubt, auch umfangreiche Berechnungen atomarer Daten wie zum Beispiel Energieniveaus, Oszillatorstärken (Ganas und Green 1973 [14], Ganas 1987 [15]) und Wirkungsquerschnitte für Elektronenstoßanregung oder -ionisation (Ganas und Green 1980 [16], Kazaks *et al.* 1972 [17]) für Plasmasimulationen durchzuführen (siehe hierzu auch den Übersichtsartikel von Green (1973 [18])). Dieses Potential zeigt zudem das richtige asymptotische Verhalten:

$$V(r) \rightarrow \begin{cases} -Z/r & \text{für } r \rightarrow 0 \\ -1/r & \text{für } r \rightarrow \infty \end{cases}, \quad (2.2)$$

so daß eine LATTER-Korrektur (Latter 1955 [19]), die eine Diskontinuität in der Ableitung des Potentials zur Folge hat, nicht erforderlich ist. Die beiden Parameter wurden dann durch Anpassung an selbstkonsistente HARTREE-FOCK-

¹Wenn keine speziellen Einheiten angegeben sind, werden in diesem Kapitel atomare Einheiten verwendet. Länge: Bohrscher Radius $a_0 = 0.529 \times 10^{-8} \text{ cm}$, Energie: $2 \text{ Rydberg} = 27.2116 \text{ eV}$.

SLATER(HFS)²-Potentiale ermittelt, die bei Herman und Skillman (1963 [20]) für alle neutralen Elemente mit $2 \leq Z \leq 103$ tabelliert sind. Dabei stellten sie fest, daß es möglich ist, den Parameter H durch

$$H = d\alpha Z_c^{0.4} \text{ mit } Z_c = Z - 1, \alpha \approx 1.05 \quad (2.3)$$

zu ersetzen. Zudem wurden die Parameter d und α bestimmt, indem die SCHRÖDINGER-Gleichung im analytischen Potential gelöst wurde, und die daraus resultierenden Eigenwerte mit der Methode der kleinsten Fehlerquadrate an HFS-Eigenwerte, HF-Energien und experimentelle Energie angepaßt wurden. Während in den beiden ersten Fällen eine gute Übereinstimmung erzielt werden konnte, gelang bei Anpassung an experimentelle Energien dies nur für Elemente mit $Z \leq 40$, da dann relativistische Effekte wichtig werden.

Darewych *et al.* (1971 [21]) verwendeten die DIRAC-Gleichung mit Gl. (2.1) anstelle der SCHRÖDINGER-Gleichung und erhielten für alle neutralen Elemente im Grundzustand gute Übereinstimmung sowohl mit experimentellen Energien als auch mit relativistischen HF-Energien. Eine weiteres relativistisches Potential wurde von Salvat *et al.* (1987 [22]) vorgeschlagen, die offensichtlich³ keine Kenntnis von der vorangegangenen Arbeit hatten. Da dieses Potential jedoch fünf Parameter für jedes Element besitzt, was deren numerische Bestimmung wegen des Auftretens lokaler Minima schwierig macht, wird dieser Ansatz hier nicht weiter verfolgt.

Eine *ab initio* Methode zur Bestimmung der Parameter entwickelten Bass, Green und Wood (1973 [23]). Sie minimierten die Gesamtenergie bezüglich der Parameter des analytischen Potentials Gl. (2.1), wobei die Wellenfunktionen Eigenfunktionen dieses Potentials sind. Die Berechnung der Gesamtenergie erfolgt dabei im Rahmen der HF- oder auch der HFS-Methode. Die Ergebnisse der in dieser Weise modifizierten HF-Näherung zeigten eine sehr gute Übereinstimmung mit Werten aus uneingeschränkten HF-Rechnungen (Abweichungen kleiner 100 ppm).

²In der HARTREE-FOCK(HF)-Theorie wird die Austauschwechselwirkung durch Verwendung antisymmetrischer Gesamtwellenfunktionen in Determinantenform exakt behandelt. Die HFS-Theorie ist ein Näherung zur HF-Theorie, die die Austauschwechselwirkung durch einen von der Elektronendichte abhängigen, lokalen Term beschreibt und Produktwellenfunktionen verwendet.

³Die Autoren erwähnen, daß nach ihrer Kenntnis bisher kein analytisches, relativistisches Potential vorgeschlagen wurde. Zudem vergleichen sie nur mit nichtrelativistischen Ergebnissen nach Green, Sellin und Zachor (1969 [11]) und führen die Arbeit von Darewych *et al.* nicht auf.

Eine Verallgemeinerung des analytischen Potentials im nichtrelativistischen Fall für Ionen mit Ladungszustand Z_I führten Hahn und Watson (1973 [24]) ein:

$$V(r) = \frac{1}{r} \left((Z_c - Z) \left(\frac{1}{H \left(\exp\left(\frac{r}{d}\right) - 1 \right) + 1} \right) - Z_c \right) \quad (2.4)$$

und

$$H = d\alpha(Z - Z_c)^{0.4} \text{ mit } Z_c = Z_I + 1, \alpha = 1. \quad (2.5)$$

Für die Parameter α und d behielten sie für alle Ionen die Werte bei, die Grenn, Sellin und Zachor (1969 [11]) für neutrale Elemente erhielten. Erst Szydlík und Green (1974 [25]) ($Z \leq 18$) und Garvey *et al.* (1975 [26]) ($36 \leq Z \leq 54$) ermittelten die beiden Parameter für alle Ionen mit Hilfe der *ab initio* Methode nach Bass *et al.* (1973 [23]), was zu einer Verbesserung führte.

Ein anderes analytisches Potential für Atome und Ionen, das für jede Hauptschale einen Beitrag in Form eines YUKAWA-Ausdrucks besitzt, wurde von Rogers (1981 [27], Rogers *et al.* 1988 [28]) verwendet. Die Parameter wurden dann durch Lösung einer über den Spin gemittelten DIRAC-Gleichung und anschließendem Vergleich der Energieeigenwerte mit experimentellen Werten bestimmt. Da für Hoch-Z-Elemente im allgemeinen und speziell im Falle hoher Ladungszustände nur wenige experimentelle Daten zur Verfügung stehen, blieb diese Studie auf Elemente mit $Z \leq 55$ beschränkt. Für astrophysikalische Anwendungen stellt dies keine Beschränkung dar; diese Beschreibung wurde daher für ein Programm zur Berechnung von Opazitäten (Iglesias *et al.* 1987 [29]) für Niedrig-Z-Elemente verwendet.

In der vorliegenden Arbeit stehen aber besonders Hoch-Z-Elemente im Mittelpunkt des Interesses, und die atomaren Daten werden für alle Ionisationsstufen benötigt, weshalb keine der bestehenden Studien für die Zwecke hier ausreichend ist. Es wird zwar die Form des Potentials Gl. (2.4) beibehalten, die in bisherigen Arbeiten sehr erfolgreich war, jedoch werden die Parameter neu bestimmt. Hierzu wird die DIRAC-Gleichung für den Grundzustand aller Ionen (außer wasserstoffähnliche Ionen) im analytischen Potential gelöst⁴; die Aufspaltung aufgrund des Spins wird berücksichtigt, da diese für Hoch-Z-Elemente in hohen Ionisationsstufen wichtig ist. Die so erhaltenen Energieeigenwerte E_{AP} werden

⁴Das numerische Verfahren zur Lösung der DIRAC-Gleichung wird im ersten Abschnitt des Kapitels 4 behandelt.

mittels der Methode der kleinsten Fehlerquadrate an Energieeigenwerte E_{DFS} aus selbstkonsistenten DIRAC-FOCK-SLATER(DFS)-Rechnungen angepaßt, indem die Summe

$$\sum \left(\frac{E_{AP} - E_{DFS}}{E_{DFS}} \right)^2 \quad (2.6)$$

minimiert wird, wobei die DFS-Eigenwerte mit dem Programm HEX (Liberman *et al.* 1971 [30], Liberman *et al.* 1965 [31]) unter Verwendung der LATTER-Korrektur und des SLATER-Austauschpotentials berechnet wurden. Die Summe in Gl. (2.6) erstreckt sich über alle im Grundzustand besetzten Orbitale und das darauf folgende erste (in wasserstoffähnlicher Reihenfolge) unbesetzte Orbital. Ein unbesetztes Orbital wird immer zugelassen, damit für heliumähnliche Ionen wenigstens zwei Energieeigenwerte zur Verfügung stehen. Die mit dieser Methode erhaltenen Parameter für Aluminium, Eisen und Gold sind im Anhang A aufgelistet.

Ein besonderer Vorteil der analytischen Potentiale liegt darin, daß im Programm zur Berechnung der Emissions- und Absorptionskoeffizienten nur die beiden Parameter geändert werden müssen, falls für spezielle Anwendungen eine höhere Genauigkeit erforderlich ist. Dies setzt natürlich voraus, daß auch genauere Anpassungswerte zur Verfügung stehen. Die Anpassung an experimentelle Energien hat den Vorteil, daß Austausch- und Korrelationseffekte berücksichtigt werden. Es ist auch möglich, andere analytische Formen des Potentials zu berücksichtigen, ohne große Änderungen im Programm vornehmen zu müssen. Dies erlaubt es, den Einfluß der atomphysikalischen Daten auf die Emissions- und Absorptionskoeffizienten zu untersuchen, ohne jeweils extrem umfangreiche Datenmengen neu berechnen zu müssen.

Um einen Eindruck von der Genauigkeit zu vermitteln, mit der die selbstkonsistenten Potentiale durch die analytischen Potentiale genähert werden, sind in Abb. 2.1 als Beispiel die relativen Abweichungen zweier DFS-Potentiale von analytischen Potentialen dargestellt, wobei im selbstkonsistenten Fall die Resultate sowohl mit als auch ohne LATTER-Korrektur angegeben sind. Diese Korrektur ist erforderlich, um das richtige asymptotische Verhalten des Potentials für große Radien zu erzwingen. So setzt sich zum Beispiel das Potential, in dem sich ein Elektron in einem neutralen Atom befindet, aus dem Potential $-Z/r$ des Kerns und der N verbleibenden Rumpfelektronen zusammen. Bei großen Abständen reduziert sich dieses Potential auf ein COULOMB-Potential mit der Ladung $Z_c = Z - N$

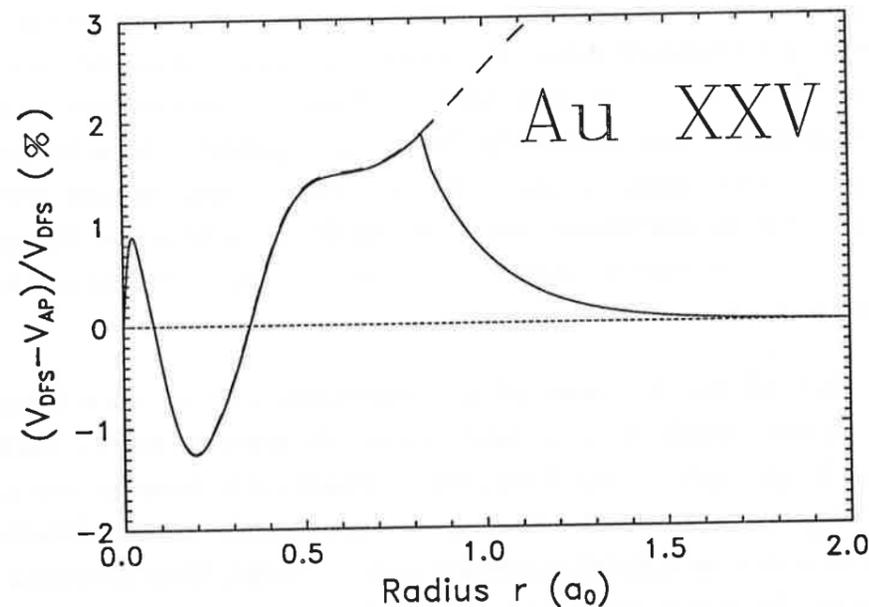
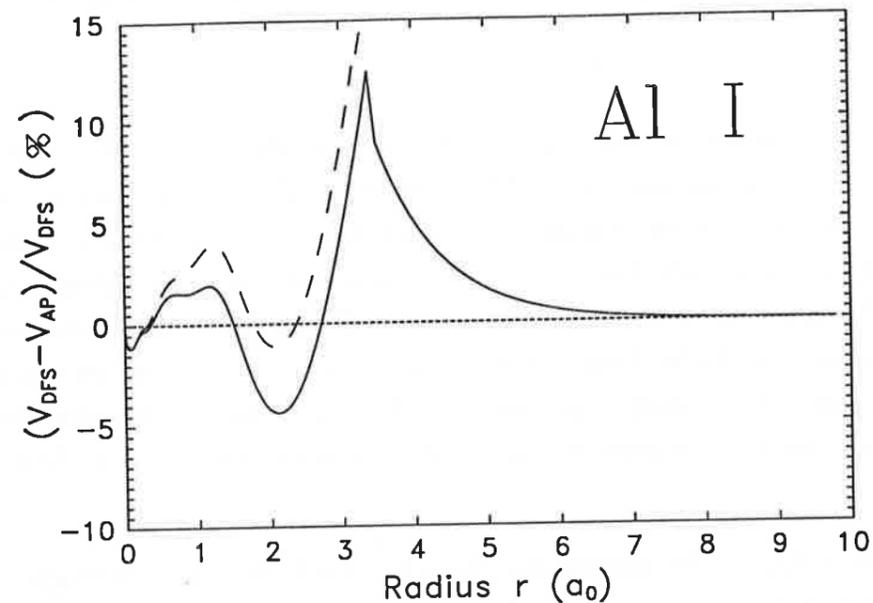


Abb. 2.1: Relative Abweichung des analytischen Potentials V_{AP} vom selbstkonsistenten DFS-Potential V_{DFS} über den Radius r für neutrales Aluminium und 24-fach geladenes Gold. Die selbstkonsistente Rechnung wurde hierfür mit (durchgezogene Linie) und ohne Korrektur (gestrichelte Linie) nach Latter (1955 [19]) durchgeführt.

des Rumpfs; im Falle des neutralen Atoms also auf die Form $-1/r$. Um dies zu erreichen, wird das selbstkonsistente Potential durch das Potential $-Z_c/r$ des Rumpfs ersetzt für alle Radien, die größer sind als der Radius r_L , bei dem es erstmals diesen Wert erreicht.

In den beiden Abbildungen ist deutlich zu erkennen, wie durch Berücksichtigung dieser Korrektur die Übereinstimmung mit dem analytischen Potential verbessert wird, das aufgrund seiner Form das richtige asymptotische Verhalten aufweist. Ohne LATTER-Korrektur wächst die prozentuale Abweichung für Radien $r > r_L$ stark an, während sie mit Korrektur gegen Null strebt. Die größte Abweichung trat in allen untersuchten Fällen beim Radius r_L auf. Sie betrug für neutrale Elemente typischerweise 10% bis 20% und reduzierte sich für Ionen mit hohem Ladungszustand auf einige Prozent.

2.1.2 Energieniveaus

Nachdem man die Potentiale mit dem oben erwähnten Verfahren bestimmt hat, kann man durch Lösung der DIRAC-Gleichung die Energieeigenwerte bestimmen. Um einen Eindruck von der Genauigkeit der Methode der analytischen Potentiale im relativistischen Fall zu vermitteln, listen die Tabellen 2.1 bis 2.3 exemplarisch einige dieser Werte auf zusammen mit Einteilchenenergien aus DFS-Rechnungen, die zur Bestimmung der Parameter verwendet wurden, experimentellen Bindungsenergien (Bearden und Burr 1967 [32], Moore 1949 [33], Moore 1952 [34]) und Einteilchenenergien, die unter Verwendung des DIRAC-FOCK(DF)-Programms GRASP (Dyall *et al.* 1989 [35]) im Rahmen dieser Arbeit berechnet wurden. Dabei ist zu beachten, daß die experimentellen Werte nicht für isolierte Atome sondern für dünne Schichten ermittelt wurden, was aber für die stark gebundenen Niveaus unerheblich ist und die anderen aufgelisteten Niveaus nur wenig beeinflussen sollte.

Bei einem Vergleich der gerechneten Einteilchenenergien mit den experimentellen Bindungsenergien für die neutralen Teilchen zeigen die DFS-Werte eine bessere Übereinstimmung als die DF-Ergebnisse, was darauf schließen läßt, daß das

	Au I				Au XXV			
	AP	DFS	DF	Exp.	AP	DFS	DF	Exp.
1s _{1/2}	3014.0	2976.9	2986.1	2966.6	3035.5	3003.8	3012.3	-
2s _{1/2}	535.85	527.14	532.19	527.45	559.16	553.84	558.19	-
2p _{1/2}	519.19	506.31	509.28	504.70	542.11	533.04	535.31	-
2p _{3/2}	447.92	438.11	441.70	438.00	471.11	464.82	467.72	-
3s _{1/2}	125.40	125.09	128.09	125.86	150.60	151.55	153.85	-
3p _{1/2}	116.45	115.59	117.85	115.68	141.53	142.08	143.70	-
3p _{3/2}	100.91	100.47	102.73	100.80	126.13	126.91	128.43	-
3d _{3/2}	84.341	84.552	85.957	84.196	109.36	111.06	111.88	-
3d _{5/2}	80.913	81.283	82.739	81.057	105.99	107.78	108.44	-
4s _{1/2}	27.887	27.500	29.140	27.89	52.886	52.590	53.532	-
4p _{1/2}	23.873	23.401	24.739	23.66	48.862	48.474	49.221	-
4p _{3/2}	20.191	19.753	21.068	20.04	44.964	44.551	45.130	-
4d _{3/2}	13.254	12.994	13.867	12.94	37.961	37.749	38.112	-
4d _{5/2}	12.554	12.308	13.172	12.27	37.190	36.976	36.966	-
4f _{5/2}	3.5060	3.5738	3.8680	3.18	28.124	28.219	28.110	-
4f _{7/2}	3.3688	3.4251	3.7207	3.04	27.953	28.027	27.913	-
5s _{1/2}	4.3297	4.2436	4.6845	3.962				
5p _{1/2}	2.9736	2.8919	3.1894	2.63				
5p _{3/2}	2.2999	2.2564	2.5590	1.97				
5d _{3/2}	0.4353	0.4472	0.4935	-				
5d _{5/2}	0.3688	0.3836	0.4287	-				
6s _{1/2}	0.3181	0.3060	0.2917	-				

Tabelle 2.1: Vergleich der Bindungsenergien (in Einheiten $2Ry$) für Gold aus verschiedenen Modellen. AP: Analytisches Potential dieser Arbeit. DFS: DIRAC-FOCK-SLATER-Rechnungen. DF: DIRAC-FOCK-Rechnungen. Exp: Experimentelle Werte nach Bearden und Burr (1967 [32]).

	Fe I				Fe XV			
	AP	DFS	DF	Exp.	AP	DFS	DF	Exp.
1s _{1/2}	256.17	260.31	263.82	261.36	277.76	277.43	280.32	-
2s _{1/2}	31.903	30.978	32.465	31.09	47.039	47.201	48.175	-
2p _{1/2}	28.370	26.956	27.868	26.50	43.340	43.347	43.607	-
2p _{3/2}	27.855	26.481	27.356	26.02	42.842	42.856	43.130	-
3s _{1/2}	3.7686	3.7119	4.2630	3.41	16.815	16.786	16.657	16.8 ^a
3p _{1/2}	2.5868	2.5003	2.9184	1.98				
3p _{3/2}	2.5245	2.4405	2.6946	1.98				
3d _{3/2}	0.4602	0.4730	0.6053	-				
3d _{5/2}	0.4534	0.4665	0.6036	-				
4s _{1/2}	0.2913	0.2768	0.2631	-				

^anach Moore (1952 [34])

Tabelle 2.2: Wie Tabelle 1.1 nur für Eisen.

	Al I				Al X			
	AP	DFS	DF	Exp.	AP	DFS	DF	Exp.
1s _{1/2}	55.635	56.959	58.633	57.314	70.887	70.891	72.115	-
2s _{1/2}	4.3638	4.3748	4.9289	4.325	14.517	14.512	14.504	14.64 ^a
2p _{1/2}	2.9986	2.9838	3.2323	2.69				
2p _{3/2}	2.9817	2.9660	3.2083	2.69				
3s _{1/2}	0.3664	0.3731	0.3942	-				
3p _{1/2}	0.1803	0.1791	0.2100	-				

^anach Moore (1949 [33])

Tabelle 2.3: Wie Tabelle 1.1 nur für Aluminium.

KOOPMANS-Theorem⁵ (Koopmans 1933 [36], Cowan 1981 [37]) näherungsweise erfüllt ist. Auch die Abweichungen der aus dem analytischen Potential folgenden Energien von den experimentellen Energien sind – bis auf einige stark gebundene Orbitale in neutralem Gold – gering und liegen durchaus im Rahmen der Abweichungen der berechneten Werte untereinander und von den experimentellen Daten. Für hochionisierte Elemente, die im Rahmen dieser Arbeit von größerem Interesse sind, zeigen alle berechneten Daten eine sehr gute Übereinstimmung. Leider sind jedoch in diesem Fall nur wenige experimentelle Bindungsenergien zu Vergleichszwecken verfügbar. Die Ionisationsenergien für Eisen und Aluminium werden aber von allen drei Modellen sehr gut vorhergesagt.

Einen weiteren Eindruck von der Genauigkeit der Methode vermittelt ein Vergleich der Wellenfunktionen im analytischen und im selbstkonsistenten Potential, den Abb. 2.2 am Beispiel des neutralen Goldatoms zeigt. Auch hier ist das Modell unabhängiger Teilchen im analytischen Potential in der Lage, die selbstkonsistenten Wellenfunktionen sehr gut zu nähern.

2.1.3 Ionisationspotentiale

Eine zur Beschreibung des Zustands von Plasmen wichtige Größe stellen die Ionisationspotentiale dar, da diese den mittleren Ionisationsgrad in Abhängigkeit von Temperatur und Dichte beeinflussen. So haben zu hohe Ionisationspotentiale einen zu geringen Ionisationsgrad zur Folge und umgekehrt. Häufig werden in Plasmamodellen die berechneten Ionisationspotentiale nach Carlson *et al.* (1970 [38]) verwendet, da diese für alle Ionen aller Elemente mit $2 \leq Z \leq 103$ tabelliert sind. Daher werden in Abb. 2.3 die relativen Abweichungen dieser Werte und der Resultate dieser Arbeit für Aluminium und Eisen von den genauesten tabellierten Daten (Wiese *et al.* 1969 [39], Fuhr *et al.* 1988 [40]) gezeigt. Im allgemeinen sind die Abweichungen der Ionisationspotentiale dieser Arbeit geringer, insbesondere trifft dies jedoch für die bereits ionisierten Elemente zu, bei denen die Abweichung der Werte nach Carlson *et al.* circa 5 – 10% betragen, während die Ionisationspotentiale dieser Arbeit nur um circa 3% abweichen. Der größte

⁵Das Theorem besagt, daß die Ionisierungsenergie für ein Elektron gleich der negativen Einzelteilchenenergie ist, unter der Annahme unveränderter Wellenfunktionen der noch verbleibenden Elektronen nach Entfernen des Elektrons.

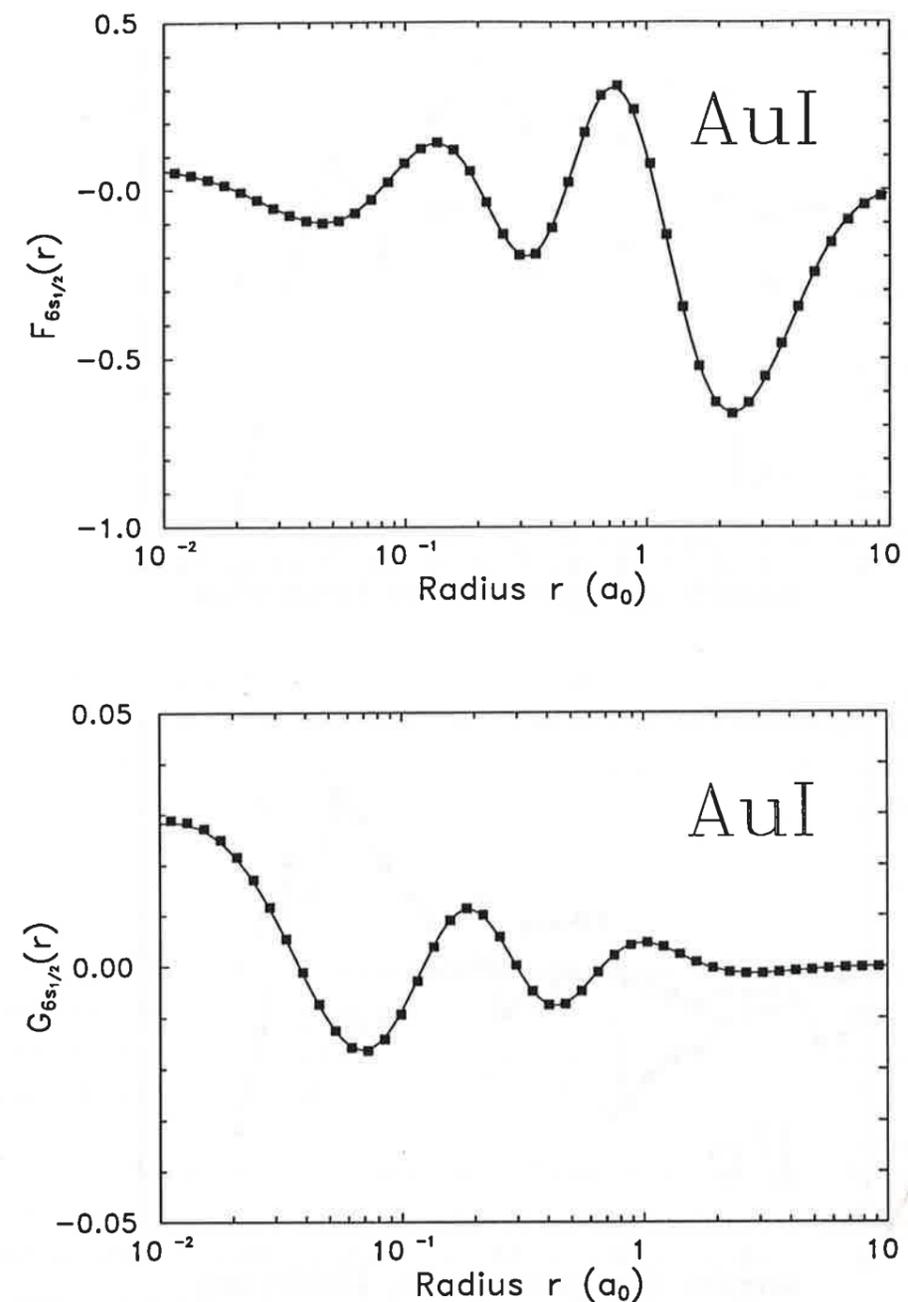


Abb. 2.2: Große (F) und kleine (G) Komponente der $6s_{1/2}$ -Wellenfunktion in Gold I. Durchgezogene Linie: Lösung der DIRAC-Gleichung im analytischen Potential. Quadrate: Resultat aus selbstkonsistenter DFS-Rechnung mit Programm HEX (Lieberman *et al.* 1971 [30], 1965 [31]).

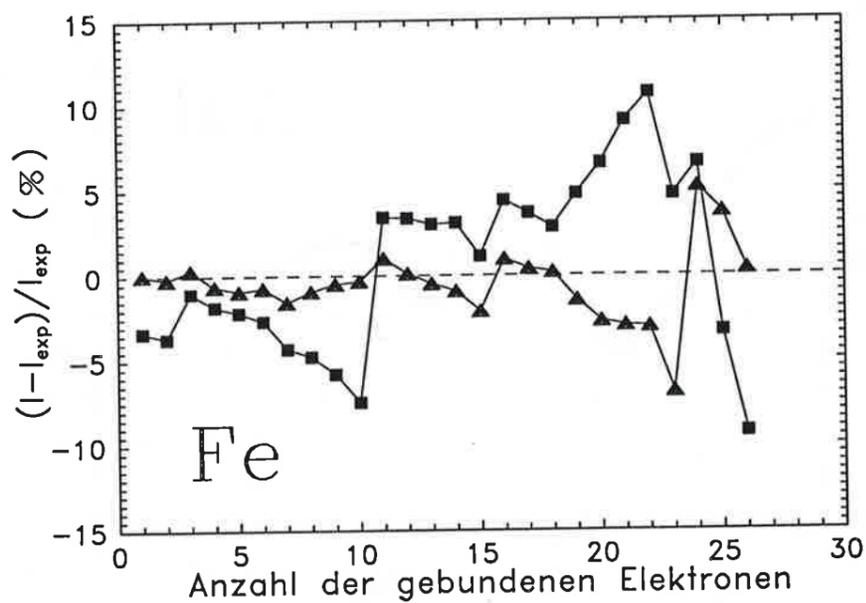
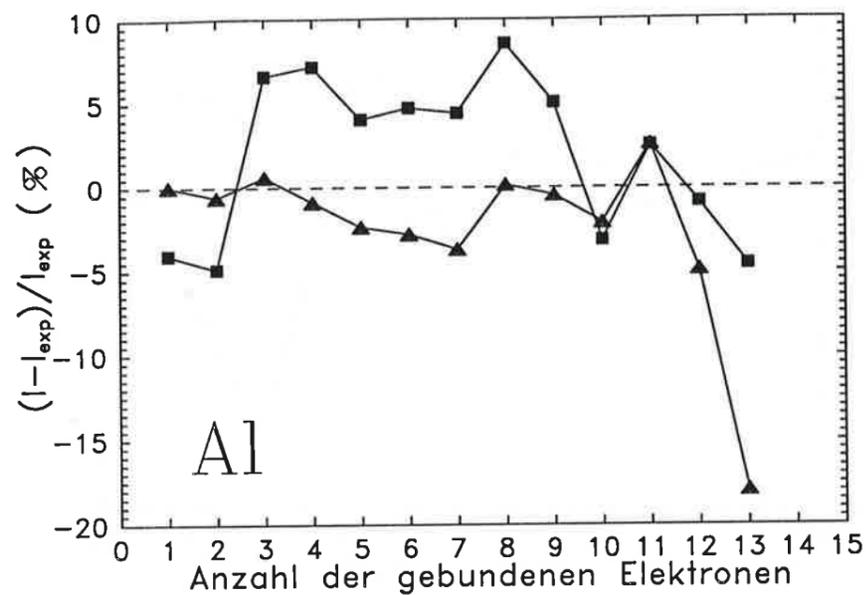


Abb. 2.3: Relative Abweichung der berechneten Ionisationspotentiale für Aluminium und Eisen. Die Dreiecke stellen die Abweichungen der Resultate dieser Arbeit und die Quadrate der Werte nach Carlson *et al.* (1970 [38]) von tabellierten Ionisationspotentialen nach Wiese *et al.* (1969 [39]) und Fuhr *et al.* (1988 [40]) dar.

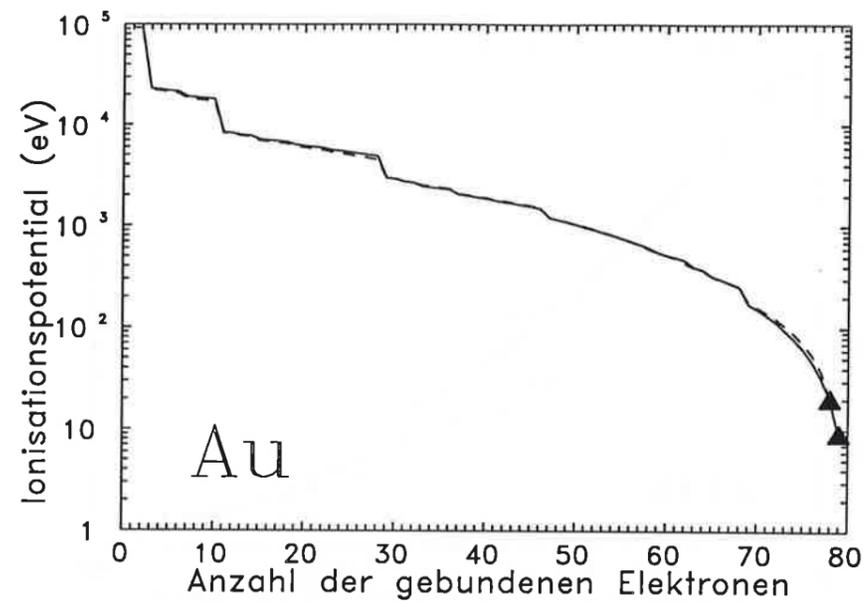


Abb. 2.4: Ionisationspotentiale für Gold. Die durchgezogene Linie zeigt die Ergebnisse dieser Arbeit und die gestrichelte Linie die Werte nach Carlson *et al.* (1970 [38]) an. Die beiden experimentellen Werte (*CRC Handbook of Chemistry and Physics* 1990 [41]) sind durch Dreiecke dargestellt.

Fehler (-17.95%) tritt bei neutralem Aluminium auf, was jedoch nicht auf eine Unzulänglichkeit des Modells unabhängiger Teilchen mit analytischem Potential zurückzuführen ist, da bereits die selbstkonsistente DFS-Rechnung einen Fehler von -18.54% gibt.

Für Gold stehen nur für das neutrale und das einfach ionisierte Atom experimentelle Daten zur Verfügung, so daß ein Vergleich nicht sinnvoll ist. Stattdessen sind in Abb. 2.4 die Ionisationspotentiale selbst dargestellt. Es ist jedoch zu erwarten, daß auch hier die Ionisationspotentiale dieser Arbeit für höher geladene Ionen genauer sind als die Werte nach Carlson *et al.*, da im Grenzfall des wasserstoffähnlichen Goldions im ersten Fall das Ionisationspotential 93455 eV gegenüber 91290 eV im zweiten Fall beträgt, was im Vergleich zum exakten, relativistischen Wert von 93460 eV zu niedrig ist.

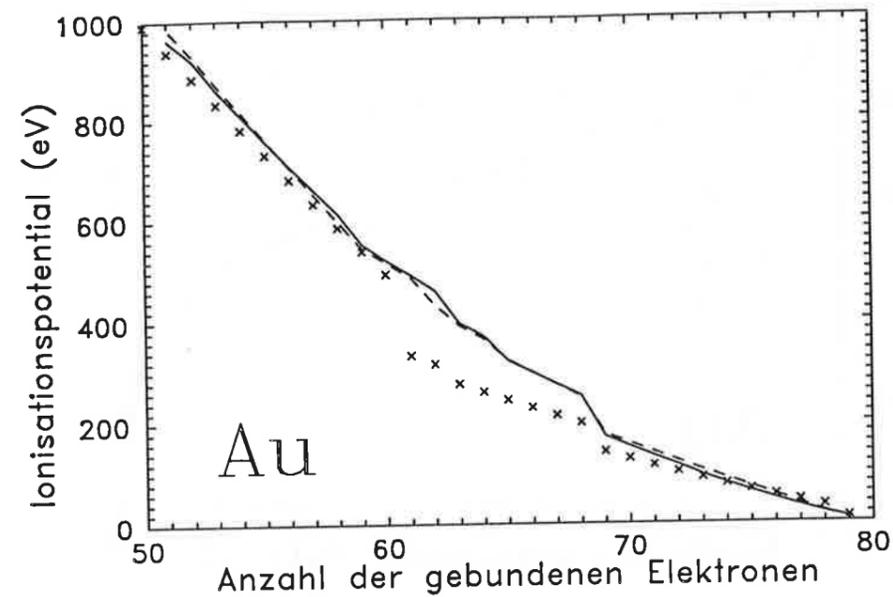


Abb. 2.5: Ionisationspotentiale für Gold. Die durchgezogene Linie zeigt die Ergebnisse dieser Arbeit und die gestrichelte Linie die Werte nach Carlson *et al.* (1970 [38]) an. Die Resultate des abgeschirmten Wasserstoffmodells (Perrot 1989 [42]) sind durch Kreuze dargestellt.

2.1.4 Vergleich mit abgeschirmtem Wasserstoffmodell

In diesem Abschnitt werden die Ergebnisse der vorliegenden Arbeit für Bindungsenergien und Ionisationspotentiale mit Werten verglichen, die aus dem bisher verwendeten, abgeschirmten Wasserstoffmodell mit ℓ -Aufspaltung (Perrot 1989 [42], Rickert 1989 [8], Rickert und Meyer-ter-Vehn 1990 [9]) folgen. Anhand des Beispiels Au^{24+} in Tab. 2.4 wird deutlich, welche Verbesserung das neue Modell für die Bindungsenergien mit sich bringt. Die abgeschirmten Wasserstoffwerte weichen erheblich von allen anderen Werten ab und sind insgesamt zu gering; so ergibt sich zum Beispiel für den Wert der Bindungsenergie des $4s$ -Niveaus nur ≈ 47 gegenüber ≈ 53 in den anderen drei Modellen. Auch die Ionisationspotentiale des abgeschirmten Wasserstoffmodells, von denen einige in Abb. 2.5 dargestellt werden, weisen große Abweichungen von den genaueren Resultaten auf, insbesondere im Bereich zwischen Au^{10+} bis Au^{18+} .

Au XXV					
	AP	DFS	DF		SHML
$1s_{1/2}$	3035.5	3003.8	3012.3	$1s$	2731.1
$2s_{1/2}$	559.16	553.84	558.19	$2s$	489.08
$2p_{1/2}$	542.11	533.04	535.31	$2p$	469.27
$2p_{3/2}$	471.11	464.82	467.72		
$3s_{1/2}$	150.60	151.55	153.85	$3s$	132.96
$3p_{1/2}$	141.53	142.08	143.70	$3p$	125.76
$3p_{3/2}$	126.13	126.91	128.43		
$3d_{3/2}$	109.36	111.06	111.88	$3d$	111.35
$3d_{5/2}$	105.99	107.78	108.44		
$4s_{1/2}$	52.886	52.590	53.532	$4s$	46.911
$4p_{1/2}$	48.862	48.474	49.221	$4p$	43.431
$4p_{3/2}$	44.964	44.551	45.130		
$4d_{3/2}$	37.961	37.749	38.112	$4d$	36.469
$4d_{5/2}$	37.190	36.976	36.966		
$4f_{5/2}$	28.124	28.219	28.110	$4f$	26.028
$4f_{7/2}$	27.953	28.027	27.913		

Tabelle 2.4: Vergleich der Bindungsenergien (in Einheiten $2Ry$) für Gold aus verschiedenen Modellen. AP: Analytisches Potential dieser Arbeit. DFS: DIRAC-FOCK-SLATER-Rechnungen. DF: DIRAC-FOCK-Rechnungen. SHML: abgeschirmtes Wasserstoffmodell mit ℓ -Aufspaltung (Perrot 1989 [42]).

Zusammenfassend läßt sich sagen, daß das Modell unabhängiger Teilchen mit analytischem Potential der Form (2.1) auch im relativistischen Fall anwendbar ist, und die damit ermittelten Einteilchenenergien eine für die Zwecke dieser Arbeit ausreichende, hohe Genauigkeit aufweisen, die gegenüber den bisher häufig verwendeten, einfachen wasserstoffähnlichen Modellen eine deutliche Verbesserung bringt.

2.2 Oszillatorstärken in semiklassischer Näherung

Um die Anzahl der Zustände in den weiter unten zu besprechenden Ratengleichungen auf eine handhabbare Größenordnung zu beschränken, wird bei der Bestimmung des Plasmazustands (Kapitel 3) – und nur dabei – die Feinstrukturaufspaltung der Energieniveaus vernachlässigt, das heißt es werden nur Übergänge $n\ell \rightarrow n'\ell'$ zwischen Unterschalen betrachtet. In diesem Abschnitt wird die Berechnung der Energien und Oszillatorstärken für diese Übergänge behandelt. Wie bereits oben erwähnt wurde, *müssen* angesichts der Vielzahl benötigter Oszillatorstärken, von denen viele zudem experimentell bisher nicht zugänglich sind, und *können* angesichts der Ungenauigkeiten in den damit zu bildenden Ratenkoeffizienten einfache Näherungen verwendet werden.

Zur Berechnung der nichtrelativistischen Einteilchen-Oszillatorstärken

$$f_{n\ell \rightarrow n'\ell'}^{(1)} = \frac{2}{3} \Delta E_{n\ell, n'\ell'} \frac{\max(\ell, \ell')}{2\ell + 1} |D_{n\ell}^{n'\ell'}|^2 \quad (2.7)$$

hat man sich Kenntnis über die Übergangsenergien $\Delta E_{n\ell, n'\ell'}$ und die radialen Dipolmatrixelemente $D_{n\ell}^{n'\ell'}$ zu verschaffen. Die Übergangsenergien sind im selbstkonsistenten Verfahren durch die Differenz der totalen Energien des Ausgangs- und des Endzustands gegeben, für die jeweils eine getrennte selbstkonsistente Berechnung erforderlich ist. In der vorliegenden Arbeit werden die Übergangsenergien jedoch durch die Differenz $E_{n'\ell'} - E_{n\ell}$ der über den Spin gemittelten Einteilchenenergien $E_{n\ell}$ des Ausgangsniveaus und $E_{n'\ell'}$ des Endniveaus im selben analytischen Potential genähert (*frozen-core-Näherung*), das heißt die gesamte Reorganisation der Rumpfelektronen wird vernachlässigt. Dies stellt jedoch keine

große Einschränkung dar, da zur Beschreibung des Plasmazustands nur einfach angeregte Zustände und Übergänge zwischen diesen betrachtet werden, bei denen sich das aktive Elektron in guter Näherung im Potential des Rumpfs befindet, das aus dem Kernpotential und den verbleibenden Rumpfelektronen gebildet wird.

Aus diesem Grunde ist auch die semiklassische Näherung des radialen Dipolmatrixelements nach Pankratov und Meyer-ter-Vehn (1992 [43]) für diese Zwecke sehr geeignet. Ausgangspunkt ist – wie in der *Coulomb approximation* von Bates und Damgaard (1949 [44]) – die Tatsache, daß für einen Übergang $n\ell \rightarrow n'\ell'$ die signifikanten Beiträge zum radialen Dipolmatrixelement in der Längenform

$$D_{n\ell}^{n'\ell'} = \int_0^\infty R_{n'\ell'}(r) R_{n\ell}(r) r^3 dr \quad (2.8)$$

aus Bereichen großer Radien stammen, bei denen das Potential annähernd durch ein COULOMB-Potential mit der Ladung des Rumpfs Z_c beschrieben werden kann. Mit Hilfe semiklassischer WKB-Wellenfunktionen und einiger Näherungen (Pankratov und Meyer-ter-Vehn [43]) ergibt sich für das Dipolmatrixelement

$$D_{n\ell}^{n'\ell'} = \frac{Z_c \nu_c^2}{\omega (\nu_{n\ell} \nu_{n'\ell'})^{3/2}} (U_\gamma(\epsilon\gamma) \cos \Delta\delta - V_\gamma(\epsilon\gamma) \sin \Delta\delta), \quad (2.9)$$

mit

$$\nu_{n\ell} = \sqrt{\frac{Z_c^2}{2E_{n\ell}}}, \quad \nu_{n'\ell'} = \sqrt{\frac{Z_c^2}{2E_{n'\ell'}}}, \quad \epsilon = \sqrt{1 - \frac{(\ell + \ell' + 1)^2}{(2\nu_c)^2}} \quad (2.10)$$

und

$$\omega = E_{n'\ell'} - E_{n\ell}. \quad (2.11)$$

Die Funktionen $U_\gamma(y)$ und $V_\gamma(y)$ können mittels der ANGER-Funktion $J_\gamma(y)$ und der WEBER-Funktion $E_\gamma(y)$ in folgender Form dargestellt werden:

$$U_\gamma(y) = J'_\gamma(y) + \Delta\lambda \frac{\sqrt{1-\epsilon^2}}{\epsilon} J_\gamma(y), \quad (2.12)$$

$$V_\gamma(y) = E'_\gamma(y) + \Delta\lambda \frac{\sqrt{1-\epsilon^2}}{\epsilon} \left(E_\gamma(y) - \frac{1}{\pi\gamma} \right) + \frac{1-\epsilon}{\pi}. \quad (2.13)$$

Die Ableitungen nach dem Argument y werden mit

$$J'_\gamma(y) = \frac{1}{2} (J_{\gamma-1}(y) - J_{\gamma+1}(y)),$$

$$E'_\gamma(y) = \frac{1}{2} (E_{\gamma-1}(y) - E_{\gamma+1}(y)) \quad (2.14)$$

auf die ursprünglichen Funktionen mit um eins erniedrigten und erhöhten Index zurückgeführt. Für nicht-ganzzahliges γ können diese in der Form

$$J_\gamma(y) = \frac{\sin\gamma\pi}{\gamma\pi} f_\gamma(y) + \frac{\sin\gamma\pi}{\gamma\pi} g_\gamma(y), \quad (2.15)$$

$$E_\gamma(y) = \frac{1 - \cos\gamma\pi}{\gamma\pi} f_\gamma(y) - \frac{1 + \cos\gamma\pi}{\gamma\pi} g_\gamma(y), \quad (2.16)$$

mit

$$f_\gamma(y) = 1 - \frac{y^2}{2^2 - \gamma^2} + \frac{y^4}{(2^2 - \gamma^2)(4^2 - \gamma^2)} - \frac{y^6}{(2^2 - \gamma^2)(4^2 - \gamma^2)(6^2 - \gamma^2)} + \dots \quad (2.17)$$

und

$$g_\gamma(y) = \frac{y}{1^2 - \gamma^2} - \frac{y^3}{(1^2 - \gamma^2)(3^2 - \gamma^2)} + \frac{y^5}{(1^2 - \gamma^2)(3^2 - \gamma^2)(5^2 - \gamma^2)} - \dots \quad (2.18)$$

entwickelt werden. Das zentrale Resultat der oben angeführten Arbeit ist die Wahl von

$$\gamma = \frac{\omega\nu_c^3}{Z_c^2} = \left\langle \frac{wZ_c}{|E_{n\ell} + E_{n'\ell'}|^{3/2}} - \Delta\nu \right\rangle + \Delta\nu, \quad (2.19)$$

wobei $\langle \dots \rangle$ für die nächstgelegene, ganze Zahl steht und $\Delta\nu = \nu_{n'\ell'} - \nu_{n\ell}$. Die Gleichungen (2.7) bis (2.19) ergeben zusammen eine analytische Formel zur Berechnung der Einteilchen-Oszillatorstärke, wenn die Rumpfladung Z_c und die Einteilchenenergien $E_{n\ell}$ und $E_{n'\ell'}$ bekannt sind.⁶ Ist das Ausgangsniveau mit $P_{n\ell}$

⁶Bei Übergängen an denen Wellenfunktionen mit maximaler Drehimpulsquantenzahl $\ell = n - 1$ beteiligt sind, treten manchmal Probleme bei Berechnung der Exzentrizität ϵ in Gleichung (2.10) auf. Diese Wellenfunktionen besitzen keine Knoten, deshalb stellt die Beschreibung mit semiklassischen Wellenfunktionen keine gute Näherung dar. Dies führt zu einem negativem Ausdruck unter der Wurzel, und damit ist die Methode in diesem Fall nicht anwendbar. Diese Übergänge lassen sich aber gut mit Hilfe wasserstoffähnlicher Wellenfunktionen und abgeschirmter Kernladungszahlen beschreiben, die für das Ausgangs- und das Endniveau verschieden sind (Rickert 1989 [8], Rickert und Meyer-ter-Vehn 1990 [9]). Daher wird bei Problemen in der vorliegenden Arbeit diese Methode verwendet, wobei die abgeschirmte Kernladungszahl \tilde{Z} und die Energie \tilde{E} eines Niveaus $(\tilde{n}, \tilde{\ell})$ durch $\tilde{Z} = 2 \times \tilde{n} \sqrt{-\tilde{E}}$ miteinander verbunden sind.

und das Endniveau mit $P_{n'\ell'}$ Elektronen besetzt, erhält man die Oszillatorstärke aus der Einteilchen-Oszillatorstärke durch Multiplikation mit der Besetzung des Ausgangsniveaus und der Verfügbarkeit des Endniveaus

$$f_{n\ell \rightarrow n'\ell'} = P_{n\ell} \left(1 - \frac{P_{n'\ell'}}{2(2\ell' + 1)} \right) f_{n\ell \rightarrow n'\ell'}^{(1)}. \quad (2.20)$$

In Tabelle 2.5 sind Energien und Oszillatorstärken, die im Rahmen dieser Arbeit berechnet wurden, Referenzwerten aus der Literatur (Wiese *et al.* 1969 [39], Fuhr *et al.* 1988 [40], Moore 1958 [45], Penkin und Slavenas 1963 [46]) gegenübergestellt. Es zeigte sich, daß bei neutralem Aluminium die Oszillatorstärken der starken Übergänge gut beschrieben werden, während bei den schwachen Übergängen auch größere Abweichungen zu den Referenzwerten auftreten. Da diese Übergänge in den Ratengleichungen jedoch keine wichtige Rolle spielen, können diese Diskrepanzen in Kauf genommen werden. Mit steigendem Ionisationsgrad ist sowohl in Aluminium als auch in Eisen die Übereinstimmung in den Energien und Oszillatorstärken als sehr gut zu bezeichnen, was angesichts des einfachen Modells sehr erstaunlich ist. Für neutrales Gold stehen leider nur einige Übergangsenergien und die Oszillatorstärke des Resonanzübergangs $6s \rightarrow 6p$ zum Vergleich zur Verfügung. Diese wenigen Werte stimmen aber gut mit den Werten des beschriebenen Modells überein. Für ionisiertes Gold sind keine Referenzdaten in der Literatur zu finden (Wiese *et al.* 1991 [47]), weshalb keine Aussage über die Genauigkeit der Ergebnisse gemacht werden kann.

Bei Verwendung von berechneten Energien mit begrenzter Genauigkeit stellt sich die Frage, wie sich Ungenauigkeiten in den Anfangs- und Endenergien auf die Oszillatorstärken auswirken, da nicht alle tatsächlich verwendeten Daten überprüft werden können. Dies ist in Abb. 2.6 anhand der Oszillatorstärken für den Resonanzübergang in neutralem und in lithiumähnlichem Aluminium veranschaulicht. Der Bereich der abgebildeten Energien reicht ungefähr vom 0.5 bis 1.5 fachen der berechneten Werte aus Tabelle 2.5, daß heißt Abweichungen der tatsächlichen Energien von den berechneten Energien um 50% werden erfaßt. Endenergien kleiner oder gleich der Anfangsenergie sind für Absorptionsoszillatorstärken nicht möglich, daher wurde die Oszillatorstärke in diesem Bereich der Abbildung auf den Wert Null gesetzt. Die Oszillatorstärken hängen auf zweierlei Arten von den Energien ab. Einerseits sind sie direkt proportional zur Übergangsenergie, die sich aus der Differenz der Anfangs- und Endenergie ergibt. Andererseits gehen diese

	$n\ell \rightarrow n'\ell'$	$-E_{n\ell}$	$-E_{n'\ell'}$	ΔE	$\Delta E_{Ref.}$	$f_{nl \rightarrow n'\ell'}$	$f_{Ref.}$
Al I	4s \rightarrow 4p	0.097	0.066	0.031	0.035	1.25	0.9443
	4s \rightarrow 5p	0.097	0.035	0.062	0.068	0.0243	0.0340
	3p \rightarrow 3d	0.180	0.058	0.122	0.148	0.455	0.175
Al III	3s \rightarrow 3p	1.072	0.827	0.245	0.245	0.775	0.875
	3s \rightarrow 4p	1.072	0.400	0.672	0.655	0.0202	0.011
	3s \rightarrow 5p	1.072	0.237	0.835	0.813	0.00647	0.0068
Al XI	2s \rightarrow 2p	16.34	15.45	0.889	0.820	0.123	0.116
	2s \rightarrow 3p	16.34	6.824	9.514	9.433	0.340	0.330
	3s \rightarrow 3p	7.067	6.824	0.243	0.226	0.207	0.194
	3p \rightarrow 3d	6.824	6.729	0.095	0.084	0.0358	0.0314
	3p \rightarrow 4d	6.824	3.785	3.039	3.027	0.632	0.58
Fe XVI	3s \rightarrow 3p	18.17	16.91	1.257	1.327	0.353	0.395
	3s \rightarrow 4p	18.17	9.048	9.117	9.037	0.234	0.217
	3s \rightarrow 5p	18.17	5.637	12.53	12.40	0.0723	0.069
	3s \rightarrow 6p	18.17	3.848	14.32	14.16	0.0308	0.0314
Fe XXIV	2s \rightarrow 2p	75.45	73.09	2.352	2.177	0.0703	0.0654
	2s \rightarrow 3p	75.45	32.37	43.08	42.85	0.388	0.374
	2s \rightarrow 4p	75.45	18.17	57.28	57.07	0.0933	0.097
Au I	6s \rightarrow 6p	0.318	0.136	0.182	0.182 ^a	0.793	0.60 ^b
	6s \rightarrow 7p	0.318	0.057	0.261	0.276 ^a	0.109	—
	6s \rightarrow 8p	0.318	0.032	0.286	0.304 ^a	0.0186	—
Au XXV	4f \rightarrow 5d	28.02	19.43	8.599	—	0.302	—
	4f \rightarrow 5g	28.02	13.24	14.78	—	6.783	—
	5s \rightarrow 5p	25.39	22.85	2.536	—	0.952	—
	5s \rightarrow 6p	25.39	13.95	11.44	—	0.0539	—
	5s \rightarrow 7p	25.39	9.459	15.93	—	0.0211	—

^anach Moore (1958 [45])^bnach Penkin und Slavenas (1963 [46])

Tabelle 2.5: Vergleich der Oszillatorstärken und Energien (in Einheiten 2Ry) für Aluminium, Eisen und Gold mit Literaturwerten ($\Delta E_{Ref.}, f_{Ref.}$ aus Wiese *et al.* (1969 [39]) für Al, Fuhr *et al.* (1988 [40]) für Fe und Moore (1958 [45]) bzw. Penkin und Slavenas (1963 [46]) für Au).

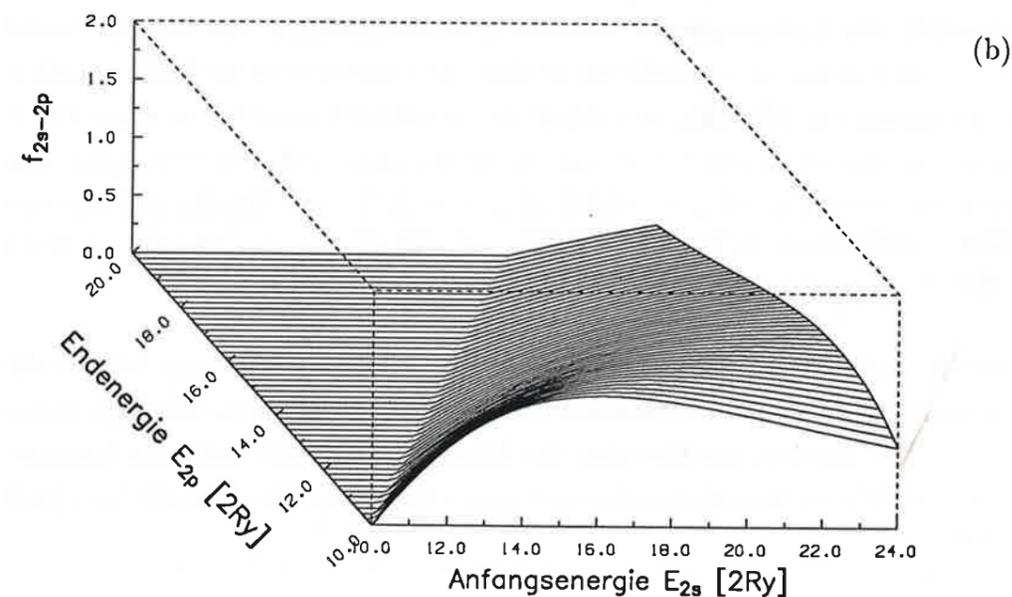
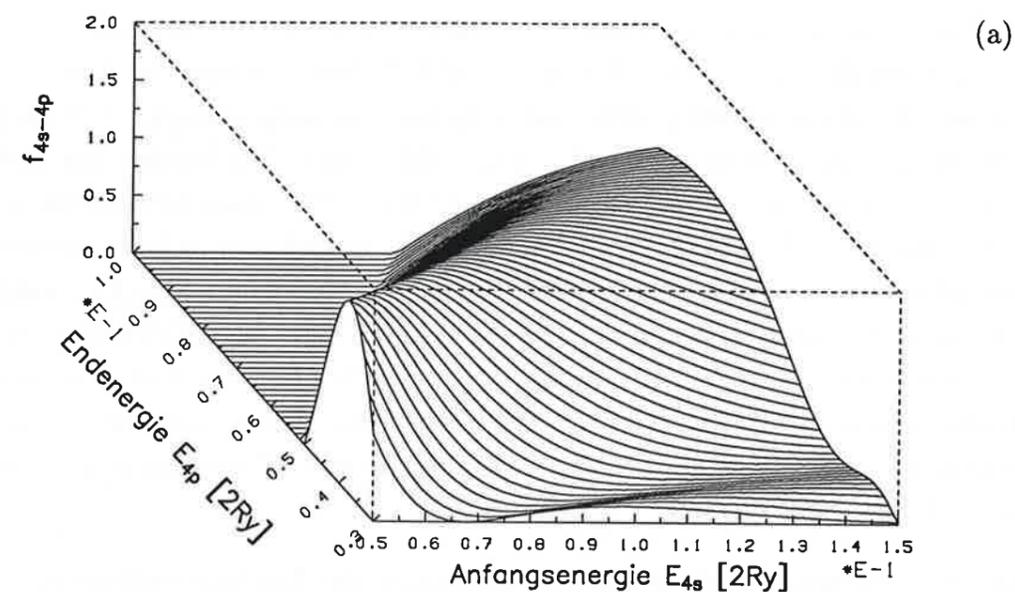


Abb. 2.6: Dipolmatrixelement für Resonanzübergang in Al I (a) und Al XI (b) in Abhängigkeit von der Energie des Ausgangs- und des Endzustands.

Energien auch in die Bestimmung des Dipolmatrixelements ein, wodurch sich eine komplizierte Abhängigkeit ergibt.

Die Oszillatorstärke für den Übergang $4s \rightarrow 4p$ in Al I beträgt bei Verwendung der Energien aus dem oben beschriebenen Modell 1.25. Bei Änderung der Endenergie von -0.066 auf -0.053 (-20%) und festgehaltener Anfangsenergie (-0.097) reduziert sich dieser Wert auf 0.949 (-24%). Hält man die Endenergie fest und senkt die Anfangsenergie von -0.097 auf -0.116 ($+20\%$), dann fällt die Oszillatorstärke auf 1.12 (-10%). Drastischer sind die Veränderungen beim zweiten Beispiel des Übergangs $2s \rightarrow 2p$ in lithiumähnlichem Aluminium. Eine Erhöhung der Endenergie von -15.45 auf -12.36 (-20%) ergibt eine Übergangsenergie von 3.98 gegenüber dem ursprünglichen Wert von 0.89 . Dies hat eine Anhebung der Oszillatorstärke von 0.123 auf 0.731 ($+494\%$) zur Folge. Die Absenkung der Anfangsenergie von -16.34 auf -19.61 ($+20\%$) ergibt eine Übergangsenergie von 4.16 und eine Oszillatorstärke von 0.497 ($+304\%$).

Um den alleinigen Einfluß der Energieabhängigkeit des Dipolmatrixelements zu untersuchen, ist es notwendig, die Übergangsenergie konstant zu lassen. Erniedrigt man die Anfangsenergie im ersten Beispiel (Abb. 2.6 (a)) um 20% und wählt die Endenergie so, daß die Übergangsenergie unverändert bleibt ($E_{4s} = -0.116$, $E_{4p} = -0.089$), so beträgt die Oszillatorstärke 0.945 (-24%). Eine Erhöhung um 20% ($E_{4s} = -0.078$, $E_{4p} = -0.047$) resultiert in einer Oszillatorstärke von 1.17 (-6%). Für das zweite Beispiel (Abb. 2.6 (b)) ergibt sich analog im ersten Fall ($E_{2s} = -19.61$, $E_{2p} = -18.72$) eine Oszillatorstärke von 0.0783 (-36%) und im zweiten Fall ($E_{2s} = -13.07$, $E_{2p} = -12.18$) von 0.211 ($+72\%$).

Diese Beispiele zeigen, wie empfindlich in dem oben beschriebenen Modell die Berechnung der Oszillatorstärken von den verwendeten Energien abhängt. Daher wird zur Bestimmung der Energien die Lösung der DIRAC-Gleichung herangezogen, obwohl die Oszillatorstärken mit einem semiklassischen Modell berechnet werden.

Kapitel 3

Plasmazustand

Für ein Plasma mit gegebener Teilchendichte n_i und Elektronentemperatur T_e ¹, besteht der erste Schritt zur Bestimmung des Absorptions- und Emissionskoeffizienten darin, die Häufigkeiten der verschiedenen Ionisations- und Anregungszustände für jedes Element zu berechnen. In der vorliegenden Arbeit werden die Häufigkeiten im Stoß-Strahlungs-Modell (*collisional radiative model*), das heißt durch Ratengleichungen, beschrieben, die auch Abweichungen vom thermodynamischen Gleichgewicht erfassen. Das Ratengleichungsmodell, die Berechnung der erforderlichen Raten und die Lösung des Ratengleichungssystems werden in diesem Kapitel diskutiert.

Solange keine nuklearen Umwandlungen betrachtet werden, ist die Erweiterung von einem Element auf Gemische einfach durchzuführen und bringt für die vorliegende Arbeit keine weitere physikalische Einsicht mit sich. Der Einfachheit halber werden daher in der vorliegenden Arbeit nur Plasmen betrachtet, die aus einem chemischen Element bestehen. An den entsprechenden Stellen wird jedoch darauf hingewiesen, welche Änderungen sich für Gemische ergeben.

Für den Fall des vollständigen thermodynamischen Gleichgewichts gibt es zwei verschiedene Zugänge, um die Häufigkeit der Ionisations- und Anregungszustände zu ermitteln. Die quantenstatistische Vielteilchentheorie (Kraeft *et al.* 1986 [12], Ebeling *et al.* 1976 [48]) arbeitet im *physikalischen Bild* und betrachtet als elemen-

¹Dem üblichen Gebrauch in der Plasmaphysik folgend werden in diesem Kapitel Energien und Temperaturen in eV ($1eV$ entspricht $11604 K$) und Teilchendichten in cm^{-3} ausgedrückt.

tare Bestandteile des Plasmas nur Elektronen und Kerne, die über COULOMB-Kräfte wechselwirken. Gebundene Zustände ergeben sich durch Lösungen mit negativem Erwartungswert des HAMILTON-Operators. Obwohl diese Art der Beschreibung formal exakt ist, müssen im allgemeinen zur Lösung der daraus resultierenden Gleichungen Reihenentwicklungen benutzt werden, die nur für geringe Dichten oder hohe Temperaturen konvergieren. Aber auch in diesen Fällen ist die Theorie so komplex, daß eine praktische Anwendung für die Zwecke dieser Arbeit nahezu unmöglich erscheint.

Im *chemischen Bild* (Ebeling *et al.* 1976 [48], Förster 1991 [49]) sind dagegen gebundene Zustände wie Ionen, Moleküle oder Cluster und freie Elektronen die grundlegenden Bestandteile des Plasmas, die vermöge effektiver Paarpotentiale miteinander wechselwirken. Eine Methode besteht dann darin, ausgehend von einem Ausdruck für die freie Energie die erforderlichen Häufigkeiten und alle thermodynamischen Größen durch Minimieren der freien Energie zu gewinnen (Griem 1964 [50], Mihalas 1978 [51]). Die Besetzung der angeregten Zustände eines Ions mit Kernladungszahl Z , Ladung j ($j = 0, \dots, Z$) und Anzahldichte n_j genügt dann der BOLTZMANN-Verteilung

$$\frac{n_{j,k}}{n_{j,l}} = \frac{G_{j,k}}{G_{j,l}} \exp\left(-\frac{E_{j,k} - E_{j,l}}{T}\right), \quad (3.1)$$

$$\sum_k n_{j,k} = n_j. \quad (3.2)$$

Dabei sind $G_{j,k}$ und $G_{j,l}$ die statistischen Gewichte und $E_{j,k}$ und $E_{j,l}$ die Energien der angeregten Zustände k und l .

Mit der Energie $E_{j,0}$ des Grundzustands, der Zustandssumme

$$Z_j = \sum_k G_{j,k} \exp\left(-\frac{E_{j,k} - E_{j,0}}{T}\right) \quad (3.3)$$

und dem Ionisationspotential I_j für das Ion j folgt die Dichte der einzelnen Ionensorten n_j und der freien Elektronen n_e durch Lösung eines gekoppelten Systems von SAHA-Gleichungen

$$\frac{n_{j+1}}{n_j} = 2 \frac{Z_{j+1}}{Z_j} \frac{1}{n_e a_0^3} \left(\frac{T}{4\pi Ry}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{I_j}{T}\right) \quad (j = 0, \dots, Z-1), \quad (3.4)$$

wobei die Ladungsneutralität

$$\sum_{j=0}^Z j n_j = n_e \quad (3.5)$$

und die Teilchenerhaltung

$$\sum_{j=0}^Z n_j = n_i \quad (3.6)$$

zu erfüllen sind. Der Zugang über die freie Energie ermöglicht auch die thermodynamisch konsistente Einführung von Nichtidealitätseffekten, was zu einem Satz von modifizierten SAHA-Gleichungen führt (Ebeling *et al.* 1976 [48], Förster 1991 [49]). Eine weitere Methode, die nicht von der freien Energie sondern vom großkanonischen Potential ausgeht, wurde von Rogers (1979 [52], 1986 [53]) entwickelt und von Iglesias *et al.* (1987 [29], 1991 [54]) zur Berechnung von Opazitäten herangezogen.

Liegt kein vollständiges thermodynamisches Gleichgewicht vor, dann gelten diese Beziehungen für lokale Werte von Temperatur und Dichte (local thermodynamic equilibrium LTE)², vorausgesetzt die lokalen Gradienten sind vernachlässigbar klein (Mihalas 1978 [51]). Diese Bedingung ist für viele astrophysikalischen Anwendungen gut erfüllt. Daher basieren drei umfangreiche Projekte der Astrophysik (Huebner *et al.* [55], Hummer und Mihalas 1988 [56], Pradhan 1987 [57], Seaton 1987 [58], Iglesias und Rogers 1990 [59]) zur Berechnung von Absorptionskoeffizienten³ und Opazitäten für einen großen Bereich von Temperatur und Dichte auf der Annahme des LTE, wobei jedoch verschiedene Ansätze zur Beschreibung der Nichtidealitätseffekte benutzt werden. Da im LTE-Fall die Kenntnis der statistischen Gewichte und der Energien ausreicht, um den thermodynamischen Zustand des Plasmas zu beschreiben, ist man in der Lage eine riesige Anzahl von Anregungs- und Ionisationszuständen, unter Einbeziehung modernster Methoden der Atomphysik, zu berücksichtigen (Seaton 1987 [58], Pradhan 1987 [57]).

In astrophysikalischen Plasmen gibt es jedoch auch Bereiche (z.B. Sternatmosphären), in denen kein LTE vorliegt, und nahezu alle Methoden zur Beschreibung der Abweichungen vom LTE wurden in Zusammenhang mit astrophysikalischen Anwendungen eingeführt. Einer umfassenden Darstellung dieses Gebiets ist das Buch von Mihalas (1978 [51]) gewidmet. Diese Abweichungen

²Im vollständigen thermodynamischen Gleichgewicht wird die Strahlung immer durch die PLANCK-Verteilung beschrieben, während sie im LTE davon abweichen kann, falls ein stoßdominiertes Plasma vorliegt.

³Im LTE sind die Emissions- und Absorptionskoeffizienten über das KIRCHHOFFSche Gesetz miteinander verbunden, es ist daher ausreichend einen der Koeffizienten zu bestimmen.

sind häufig auch bei der Beschreibung von Laborplasmen wichtig (z.B. in der Koronaschicht lasererzeugter Plasmen), und können durch eine detaillierte, mikroskopische Beschreibung im Rahmen des chemischen Bilds erfasst werden. Es werden die atomaren Eigenschaften aller Zustände bestimmt und die Raten aller Stoß- und Strahlungsprozesse, die verschiedene Zustände miteinander verbinden, bilanziert. Die Zahl der hierzu erforderlichen Raten wächst sehr stark mit der Zahl der betrachteten Zustände, was die Verwendung einfacherer Modelle und Einschränkungen in der Zahl der Zustände erzwingt. Die verwendeten Modelle unterscheiden sich – je nach Anwendungszweck – erheblich in der Zahl der berücksichtigten Zustände und deren Niveaustuktur, der Auswahl der verbindenden Prozesse und der Genauigkeit, mit der die Raten berechnet werden.

Im Labor können auch Hoch- Z -Plasmen erzeugt werden, die zum Beispiel aus Materialien wie Gold ($Z = 79$) oder Blei ($Z = 82$) bestehen, während für astrophysikalische Anwendungen nur leichte und mittelschwere Elemente ($Z \leq 30$) eine Rolle spielen. Diese Hoch- Z -Elemente besitzen aufgrund der teilweise gefüllten Unterschalen mit hohem Bahndrehimpuls eine viel komplexere atomare Struktur, deren Berücksichtigung in Ratengleichungen bisher nicht in geeigneter Weise möglich ist. Auch werden mit wachsender Kernladungszahl und steigendem Ionisationsgrad relativistische Effekte wichtig. Daher können diese Plasmen nicht mit der für astrophysikalische Plasmen erreichten Genauigkeit beschrieben werden.

Zur Simulation von Röntgenlasern und der Berechnung des Verstärkungsfaktors werden die wichtigen Zustände und die Raten zwischen diesen mit den genauesten Methoden berechnet, die heutzutage verfügbar sind. Andere Zustände werden entweder mit einfachen Methoden beschrieben oder ganz vernachlässigt. Allerdings beschränken sich diese Modelle oftmals nur auf ein spezielles Element und einige für die Lasertätigkeit wichtige Ionisationsstufen und vernachlässigen die Hydrodynamik⁴ und die Nichtidealitätseffekte. Trotz dieser Einschränkungen ist der Aufwand enorm, da mehrere hundert Zustände und eine Vielzahl von Übergängen notwendig sind, um verlässliche Aussagen machen zu können. Als Beispiel sei die Arbeit von Abdallah *et al.* (1992 [60]) genannt, welche die bisher umfangreichste Studie dieser Art ist.

⁴In der vorliegenden Arbeit wird der Begriff Hydrodynamik stellvertretend für die Bewegung von Flüssigkeiten, Gasen und Plasmen benutzt.

Ganz andere Voraussetzungen sind bei einer Simulation der Wechselwirkung intensiver Laser- oder Teilchenstrahlen mit Materie gegeben. Die Bestimmung des thermodynamischen Zustands dient in diesem Fall der Berechnung der Absorptions- und Emissionskoeffizienten sowie der Zustandsgleichung, die dann ihrerseits in einem Programm verwendet werden, das die hydrodynamische Bewegung zusammen mit dem Energietransport durch Strahlung beschreibt. Dabei werden diese Daten für einen großen Bereich von Temperatur und Dichte benötigt. Aufgrund der Komplexität des Problems ist man daher gezwungen, mit einfacheren Modellen zu arbeiten. Welche Näherungen hierzu eingeführt werden und welche in der vorliegenden Arbeit benutzt werden, ist Gegenstand dieses Kapitels. Nach einer Behandlung der Ratengleichungen in Abschnitt 3.1 werden die verwendeten Wirkungsquerschnitte und Ratenkoeffizienten besprochen (3.2), die Nichtidealitätseffekte eingeführt (3.3), die numerische Lösung der Ratengleichungen skizziert (3.4) und die Ergebnisse ausführlich diskutiert (3.5).

3.1 Stationäre Ratengleichungen

Die detaillierte Betrachtung der Strahlungs- und Stoßprozesse (*collisional radiative model*), die im Plasma die Besetzung der Ionisations- und Anregungszustände bestimmen, ermöglicht es, den Plasmazustand sowohl im Grenzfall des LTE als auch im nicht-LTE zu beschreiben. Die Häufigkeit eines Zustands k , der durch seinen Ionisationsgrad $i_k \in (0, \dots, Z)$ und die Anregungsstufe spezifiziert ist, wird unter Vernachlässigung der hydrodynamischen Bewegung durch Betrachtung der Raten aller Prozesse ermittelt, die diesen Zustand be- oder entvölkern. Sei n_k die Dichte dieses Zustands (in cm^{-3}), $U_{i,k}$ die Gesamtrate aller Prozesse (in s^{-1}), die vom Zustand k aus in irgendeinen Zustand l mit Dichte n_l führen, und $U_{k,l}$ die Gesamtrate aller Prozesse, die den Zustand l entleeren und k füllen, dann gilt für die zeitliche Änderung der Besetzung des Zustands

$$\frac{dn_k}{dt} = \sum_l U_{k,l} n_l - n_k \sum_l U_{l,k}, \quad (3.7)$$

wobei sich die Summen über alle zugelassenen Zustände erstrecken. Eine derartige Gleichung gilt für jeden Zustand, so daß insgesamt ein System von gekoppelten Ratengleichungen, dessen Anzahl der Zahl der betrachteten Zustände entspricht, zu lösen ist, um die Häufigkeit jedes Zustands zu erhalten.

Gegenstand der vorliegenden Arbeit soll nur die Beschreibung des Gleichgewichts-Zustands sein, der sich nach hinreichend langer Zeit einstellt. Die hierfür maßgebliche Zeit ist durch die Zeitskala der Raten gegeben. Betrachtet man ein Goldplasma mit Teilchendichte $n_i = 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ und Temperatur $T_e = 200 \text{ eV}$, so liegt typischerweise ein Ion mit Ladungszahl $z_I = 24$ vor. Für dieses Ion hat der EINSTEIN-Koeffizient des Resonanzübergangs $5d \rightarrow 4f$ den Wert $A_{5d-4f} \approx 10^{13} \text{ s}^{-1}$, womit sich eine typische atomare Zeit $t_a \approx 10^{-13} \text{ s}$ für die Einstellung des stationären Gleichgewichts ergibt. Diese ist mit der hydrodynamischen Zeitskala zu vergleichen, die für die Änderung von Temperatur und Dichte maßgeblich ist. Mit der Schallgeschwindigkeit $c_s = 10^6 \text{ cm/s}$ und einer Ausdehnung $d = 10^{-2} \text{ cm}$ erhält man hierfür $t_h \approx 10^{-8} \text{ s}$, so daß die Annahme eines Gleichgewichts-Zustands gut erfüllt ist.

Im Gleichgewicht ändert sich die Besetzung der Zustände zeitlich nicht mehr und es kann in Gl. (3.7)

$$\frac{dn_k}{dt} = 0 \quad (3.8)$$

gesetzt werden, was zu den stationären Ratengleichungen führt. Die Teilchenerhaltung

$$\sum_k \frac{dn_k}{dt} = 0 \quad (3.9)$$

wurde bei Aufstellen der Ratengleichungen bereits implizit berücksichtigt, was durch Summation der Gleichung (3.7) über den Index k leicht einsehbar ist. Deshalb bleibt die Gesamtdichte $n_i = \sum_k n_k$ der Ionen erhalten. Die Dichte der freien Elektronen n_e ergibt sich aus der Ladungserhaltung $n_e = \sum_k i_k n_k$, die bei der Lösung der stationären Ratengleichungen als Nebenbedingung zu berücksichtigen ist. Da die Raten von der Elektronendichte n_e abhängen und diese über die Ladungserhaltung und die Häufigkeitsverteilung indirekt wieder von den Raten, ist eine selbstkonsistente Bestimmung erforderlich.

In dieser Arbeit werden nur einfach angeregte Zustände berücksichtigt, was für leichte und mittlere Elemente eine gute Näherung darstellt, da die doppelt und mehrfach angeregten Zustände energetisch viel höher liegen und daher nur schwer anzuregen sind. Dies trifft für schwere Elemente nicht immer zu. Man ist aber aufgrund der Rechenkapazität gezwungen, auch in diesem Fall die Anzahl der Zustände auf ein handhabbares Maß zu beschränken, was die Betrachtung mehrfach angeregter Zustände ausschließt. Außerdem erlauben die heutigen, geringen

Kenntnisse über mehrfach angeregte Zustände in schweren Elementen noch keine konsistente Beschreibung. Ein Zustand ist außerdem nur durch seine Konfiguration (die Verteilung der Elektronen auf Unterschalen mit Hauptquantenzahl n und Bahndrehimpulsquantenzahl ℓ) spezifiziert, wobei alle Unterschalen mit $n \leq 10$ mitgenommen werden.

Besteht das Plasma aus einem Gemisch chemischer Elemente, ist für jedes Element ein Ratengleichungssystem Gl. (3.7) aufzustellen. Falls keine nuklearen Umwandlungen auftreten, sind die Ratengleichungssysteme nur über die gemeinsame Dichte der freien Elektronen gekoppelt, und die einzelnen Ratengleichungssysteme sind getrennt voneinander zu lösen (siehe Abschnitt 3.4).

3.2 Wirkungsquerschnitte und Ratenkoeffizienten

In freien Plasmen tragen zur Gesamtrate nur Strahlungsprozesse und Stöße mit Elektronen und schweren Teilchen des Plasmas bei. Bei getriebenen Plasmen, die in dieser Arbeit nicht betrachtet werden, können auch Änderungen in der Häufigkeitsverteilung vom äußeren Treiber verursacht werden. Betrachtet man zum Beispiel mit Ionenstrahlen erzeugte Plasmen, dann beeinflussen auch Stöße mit Projektionen die Häufigkeitsverteilung (Kärcher und Meyer-ter-Vehn 1990 [61], Kärcher 1991 [62]). Wird der Treiber abgeschaltet, stellt sich jedoch nach einer Relaxationszeit ein Gleichgewicht ein, das dem eines freien Plasmas entspricht.

Die Besetzung der Ionisations- und Anregungszustände hängt über die strahlenden Prozesse auch vom Strahlungsfeld ab, das seinerseits über Streuung, Emission und Absorption der Photonen durch den thermodynamischen Zustand des Plasmas mitbestimmt wird. Soll der Einfluß des Strahlungsfelds auf die Besetzung berücksichtigt werden, müssen deshalb die Ratengleichungen zusammen (*on-line*) mit den hydrodynamischen Gleichungen und der Gleichung für den Strahlungstransport gelöst werden. Um eine Entkopplung der Ratengleichungen vom Strahlungsfeld zu erreichen, wird in vielen Ratengleichungsmodellen das Plasma als optisch dünn betrachtet (MacFarlane 1989 [6], Eidmann 1989 [5], Wang 1991

[63], Kärcher 1991 [62]), das heißt die Prozesse Photoionisation, Photoanregung, stimulierte Rekombination, stimulierte Abregung und der Umkehrprozess zur dielektronischen Rekombination, die vom Strahlungsfeld abhängen, werden vernachlässigt. Es verbleiben dann nur noch die spontanen strahlenden Übergänge Photoabregung und Photorekombination (Abschnitt 3.2.3) und die zweistufige dielektronischen Rekombination (Abschnitt 3.2.4). Da dann der Zustand des Plasmas nicht vom Strahlungsfeld abhängt, können Tabellen der Absorptions- und Emissionskoeffizienten mit den Parametern Temperatur und Dichte erstellt werden, die anschließend in einem Programm zur Strahlungs-Hydrodynamik verwendet werden. Es existieren zwei Grenzfälle, in denen die Besetzung der Zustände nicht von den vom Strahlungsfeld abhängigen Raten beeinflusst wird. Erstens bei hohen Dichten, wenn ein stoßdominiertes Plasma vorliegt, da dann die Stoßraten gegenüber den strahlenden Raten dominieren. Zweitens bei niedrigen Dichten, wenn die räumliche Ausdehnung des Plasmas so gering ist, daß im Plasma entstandene Photonen dieses ohne weitere Wechselwirkung verlassen, und nur ein schwaches externes Strahlungsfeld vorhanden ist. In allen anderen Fällen müsste eigentlich das Strahlungsfeld in den Ratengleichungen berücksichtigt werden. Dies war bisher – auch unter Einsatz modernster Supercomputer – nur durchführbar, indem man nur Übergänge zwischen den Hauptschalen eines gemittelten Atoms betrachtete (*average atom model*) (Lokke und Grasberger 1977 [64], Pollak 1990 [65]), da der numerische Aufwand sehr groß ist. Im folgenden werden daher in der vorliegenden Arbeit die vom Strahlungsfeld abhängigen Raten vernachlässigt.

Es wird weiterhin vorausgesetzt, daß Stöße von Ionen und Atomen untereinander gegenüber Stößen mit Elektronen vernachlässigt werden können, das heißt Stoßanregung und -abregung (Abschnitt 3.2.1) sowie Stoßionisation und Dreikörperrekombination (Abschnitt 3.2.2) erfolgen nur durch Elektronen. Die Stoßfrequenz hängt vom Fluß der einfallenden Teilchen und damit von deren Geschwindigkeit ab, die für Atome mit Massenzahl A bei thermischer Verteilung um einen Faktor $(m_H A / m_e)^{1/2}$ kleiner ist als für Elektronen. Die Annahme ist daher gerechtfertigt, wenn das Plasma ausreichend ionisiert ist, da nur dann überhaupt freie Elektronen zur Verfügung stehen, die Stöße ausführen können. Dies grenzt den Anwendungsbereich der vorliegenden Arbeit auf Temperaturen $T_e > 1 \text{ eV}$ ein, darunter können Stöße mit neutralen Atomen wichtig werden. Für die Beschreibung von Plasmen mit Temperaturen $T_e \leq 1 \text{ eV}$ müßten auch Beiträge von Molekülen in den Ratengleichungen in Betracht gezogen werden, die in dieser Arbeit ebenfalls

vernachlässigt werden. Bezüglich der Kinetik von Niedertemperatur-Plasmen sei auf das Buch von Biberman *et al.* (1987 [66]) verwiesen, in dem diese ausführlich diskutiert wird.

Zudem wird angenommen, daß die Stöße zwischen den Elektronen ausreichend häufig sind, um eine MAXWELL-Geschwindigkeitsverteilung der Elektronen zur Temperatur T_e zu gewährleisten. Dies wurde bisher bei Angabe einer Elektrentemperatur implizit vorausgesetzt. Diese Annahme ist üblicherweise in freien Plasmen erfüllt, die hier betrachtet werden, weil die Stoßzeit τ_{e-e} zwischen Elektronen kurz ist im Vergleich zu typischen Zeiten τ_{e-i} für die Änderung der Häufigkeit von Ionisations- oder Anregungszuständen. In getriebenen Plasmen hingegen kann die Geschwindigkeitsverteilung der Elektronen von der thermischen Verteilung abweichen, wenn durch den Einfluß des äußeren Treibers Elektronen mit bestimmten Energien bevorzugt angeregt werden (z.B. Kärcher 1991 [62]).

Einen Zusammenfassung aller noch verbleibenden Prozesse, die zur Bestimmung des Plasmazustands hier betrachtet werden, zeigt Abbildung 3.1.

3.2.1 Stoßanregung und Stoßabregung

Der Ratenkoeffizient $C_{k,l}^e$ (in $\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$) für den Stoß eines freien Elektrons mit Geschwindigkeit v_e mit einem Atom oder Ion, das durch den Stoß vom Anregungszustand k in den Anregungszustand l übergeht, ist durch

$$C_{k,l}^e = \sigma_{k,l}(v_e) v_e \quad (3.10)$$

gegeben, wobei $\sigma_{k,l}$ der Wirkungsquerschnitt für den entsprechenden Prozeß ist. Besitzen die freien Elektronen keine feste Energie sondern eine Geschwindigkeitsverteilung $f(v_e)$, dann folgt der Ratenkoeffizient aus einer Mittelung über die Geschwindigkeitsverteilung

$$C_{k,l}^e = \int \sigma_{k,l}(v_e) v_e f(v_e) dv_e \quad (3.11)$$

Die Rate des Prozesses (in s^{-1}) folgt aus dem Ratenkoeffizienten durch Multiplikation mit der Dichte n_e der freien Elektronen. Es können – abhängig vom Zustand des Ions vor und nach dem Stoß – zwei Prozesse unterschieden werden. Liegt der Zustand k energetisch über dem Zustand l , dann wird durch den Stoß

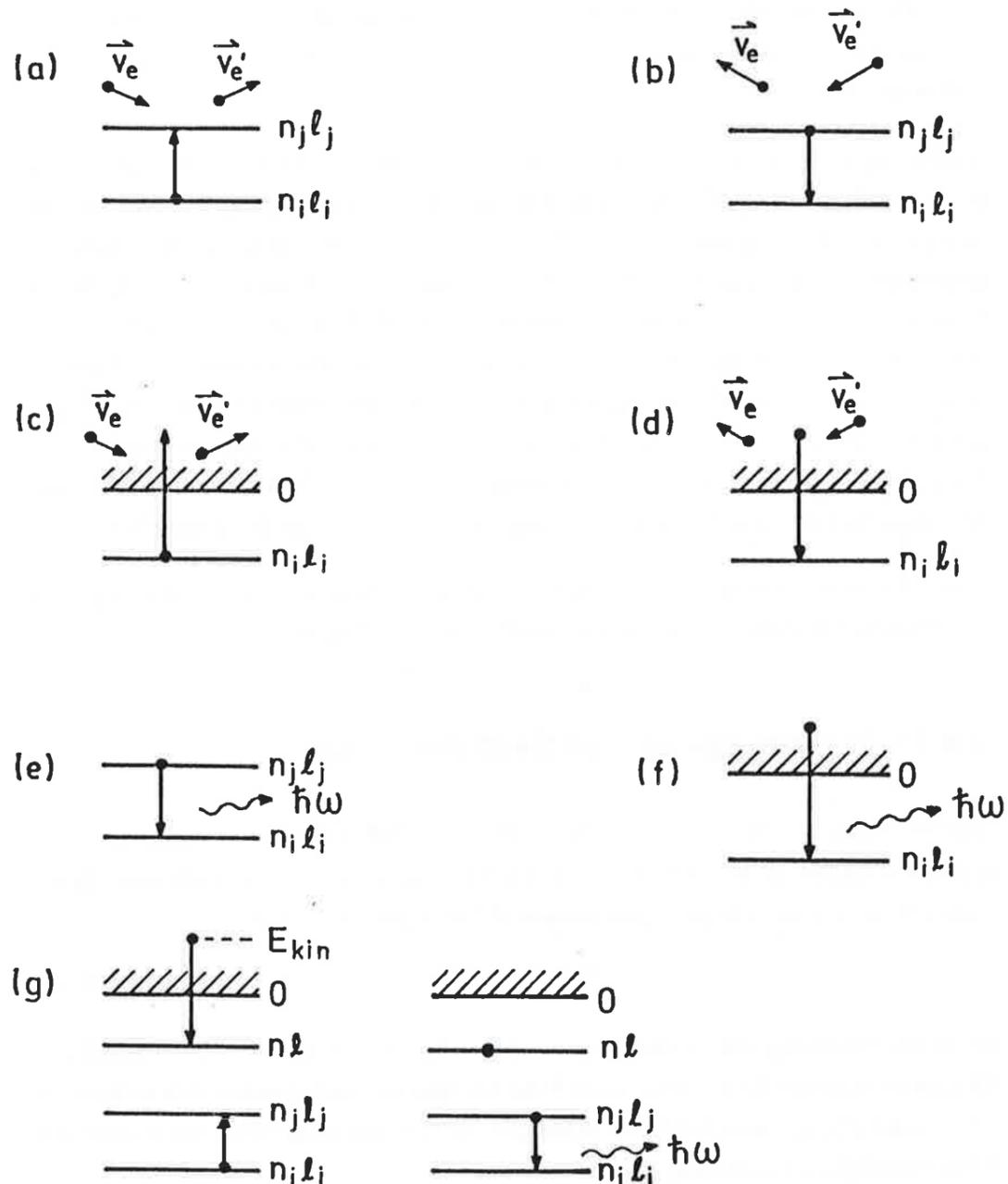


Abb. 3.1: Zusammenfassung der atomaren Wechselwirkungsprozesse. (a) Elektronenstoßanregung, (b) Elektronenstoßabregung, (c) Elektronenstoßionisation, (d) Dreikörperrekombination, (e) Photoabregung, (f) Photorekombination, (g) Dielektronische Rekombination

3.2. WIRKUNGSQUERSCHNITTE UND RATENKOEFFIZIENTEN

das Ion abgeregt und die Energie auf das Elektron übertragen, wodurch sich dessen Geschwindigkeit erhöht. Dies ist der Fall der Stoßabregung, der in Abbildung 3.1(b) veranschaulicht ist. Der umgekehrte Fall der Stoßanregung, bei dem das Ion vom energetisch niedrigeren Zustand k zum höher liegenden Zustand l übergeht, ist in Abbildung 3.1(a) dargestellt.

Stoßanregung

Um zum Ratenkoeffizienten für Stoßanregung zu gelangen, wird in Gl. (3.11) der Wirkungsquerschnitt für Elektronenstoßanregung und die MAXWELL-Verteilung der freien Elektronen eingesetzt. Für dipol-erlaubte Übergänge wird die VAN REGEMORTER-Formel (Van Regemorter 1962 [67]) verwendet, die den Wirkungsquerschnitt für Elektronenstoßanregung mit der Dipol-Oszillatorstärke für die Absorption $f_{k,l}^{abs}$ und der positiven Anregungsenergie $E_{k,l}$ verknüpft, deren Berechnung bereits in Kapitel 2 diskutiert wurde.

Eine ausführliche Diskussion der VAN REGEMORTER-Formel geben Sampson und Zhang (1992 [68]), wobei sie zu dem Ergebnis kommen, daß die Formel für Übergänge mit $\Delta n \geq 1$ in Anbetracht der genauen Daten, die heutzutage verfügbar sind, oftmals eine schlechte Näherung darstellt und nicht mehr verwendet werden sollte. In der vorliegenden Arbeit wird diese Ungenauigkeit jedoch angesichts der Vielzahl von Werten, die für viele verschiedene Elemente benötigt werden, in Kauf genommen; zumal es keinen Sinn macht, nur eine Rate sehr genau zu berechnen und für alle anderen Raten einfache und entsprechend ungenaue Ausdrücke zu verwenden. Eine Berechnung aller Raten mit den heute zur Verfügung stehenden Methoden würde aber weit über den Rahmen dieser Arbeit hinausgehen und wäre in angemessener Zeit nicht durchführbar, obwohl große Fortschritte bezüglich Geschwindigkeit und Genauigkeit bei der Bestimmung der Raten gemacht wurden (Sampson und Zhang 1992 [68]).

Nach Ausführen der Integration ergibt sich für den Ratenkoeffizienten

$$C_{k,l}^e = 1.580 \times 10^{-5} \frac{f_{k,l}^{abs}}{E_{k,l}[\text{eV}] \sqrt{T_e[\text{eV}]}} \exp(-\beta_{k,l}) G_{k,l} (\text{cm}^3 \text{s}^{-1}) \quad (3.12)$$

$$\beta_{k,l} = \frac{E_{k,l}[\text{eV}]}{T_e[\text{eV}]} \quad (3.13)$$

Der GAUNT-Faktor $\mathcal{G}_{k,l}$ ist für neutrale Atome bei Van Regemorter in Abhängigkeit von $\beta_{k,l}$ tabelliert, und Zwischenwerte können durch logarithmische Interpolation gewonnen werden. Für positiv geladene Ionen gilt in guter Näherung

$$\mathcal{G}_{k,l} = \frac{\sqrt{3}}{2\pi} \sqrt{(E_1(\beta_{k,l}))^2 + \frac{1}{2}}, \quad (3.14)$$

wobei $E_1(x) = \int_x^\infty (\exp(-y)/y) dy$ das Exponentialintegral (Abramowitz und Stegun 1972 [69]) ist.

In bisherigen Ratengleichungsmodellen zur Beschreibung von Laborplasmen wurden die dipol-verbotenen Stoßübergänge oftmals vernachlässigt (MacFarlane 1989 [6], Kärcher 1991 [62], Wang 1991 [63]). Werden nur Übergänge zwischen Hauptschalen berücksichtigt, dann ist dies keine schlechte Näherung, da diese Übergänge immer auch dipol-erlaubte Übergänge sind, und die dipol-erlaubten Stöße einen größeren Wirkungsquerschnitt besitzen als die dipol-verbotenen Stöße. Bei Betrachtung der ℓ -Aufspaltung der Niveaus müssen die dipol-verbotenen Übergänge jedoch mitgenommen werden. Da hierfür aber weder experimentelle Daten noch zuverlässige theoretische Formeln zur Verfügung stehen, ist man auf einfache Näherungen angewiesen. Es wird daher die Näherung (Auer und Mihalas 1973 [70])

$$C_{k,l}^e = 8.006 \times 10^{-8} \frac{\Omega_0}{G_k E_{k,l} [eV] \sqrt{T_e [eV]}} \beta_{k,l} (\exp(-\beta_{k,l}) - \beta_{k,l} E_1(\beta_{k,l})) \quad (cm^3 s^{-1}) \quad (3.15)$$

verwendet, wobei G_k das statistische Gewicht des Ausgangszustands ist. Der Parameter Ω_0 wird in Übereinstimmung mit Auer und Mihalas eingesetzt.

Stoßabregung

Aus dem Prinzip des detaillierten Gleichgewichts für Elektronenstöße

$$\frac{\sigma_{k,l}}{\sigma_{l,k}} = \frac{G_l}{G_k} \left(\frac{v'_e}{v_e} \right)^2, \quad (3.16)$$

das den Wirkungsquerschnitt für die Stoßanregung $\sigma_{k,l}$ mit dem für die Stoßabregung $\sigma_{l,k}$ verknüpft, folgt eine Beziehung zwischen dem Ratenkoeffizienten für Stoßabregung $C_{l,k}^e$ und dem Ratenkoeffizienten für Stoßanregung $C_{k,l}^e$ (Kärcher

1991 [62])

$$C_{l,k}^e = b_{k,l}(T_e) C_{k,l}^e \quad (3.17)$$

mit dem BOLTZMANN-Faktor

$$b_{k,l}(T) = \frac{G_k}{G_l} \exp(\beta_{k,l}). \quad (3.18)$$

Dabei sind G_k und G_l die statistischen Gewichte der Zustände, v_e die Geschwindigkeit des Elektrons vor und v'_e die Geschwindigkeit nach der Elektronenstoßanregung. Diese Beziehung ermöglicht die Berechnung der Ratenkoeffizienten für Stoßabregung sowohl für dipol-erlaubte als auch für dipol-verbotene Übergänge durch Multiplikation der entsprechenden Anregungsrate mit dem BOLTZMANN-Faktor $b_{k,l}(T_e)$.

3.2.2 Stoßionisation und Dreikörperrekombination

Wird durch den Elektronenstoß soviel Energie übertragen, daß ein gebundenes Elektron vom Zustand k in einen Kontinuumszustand übergeht und ein Ion im Zustand l mit einer erhöhten Ladung entsteht, dann heißt der Prozeß Stoßionisation (Abbildung 3.1(c)). Hierzu ist mindestens die Ionisierungsenergie $I_{k,l}$ aufzuwenden. Der inverse Prozeß, der in Abbildung 3.1(d) veranschaulicht ist, wird als Dreikörperrekombination bezeichnet. Es werden in dieser Arbeit nur Einelektronenübergänge betrachtet, das heißt nur unmittelbar benachbarte Ionisationsstufen sind durch Ionisation und Rekombination verbunden.

Stoßionisation

Der Ratenkoeffizient ist auch in diesem Falle durch Gl. (3.11) definiert, nur daß der entsprechende Wirkungsquerschnitt für Ionisation eingesetzt werden muß. Hierfür bieten sich zwei semi-empirische Formeln an, die an experimentelle Daten angepaßt sind. Mit der häufig verwendeten LOTZ-Formel (Lotz 1967 [71], 1968 [72], 1968 [73], 1969 [74]) lautet der Ratenkoeffizient für Ionisation aus dem Zustand k mit P_k Elektronen

$$C_{k,l}^e = 2.68 \times 10^{-6} \frac{P_k}{I_{k,l} [eV] \sqrt{T [eV]}} E_1(\beta_{k,l}) \quad (cm^3 s^{-1}) \quad (3.19)$$

$$\beta_{k,l} = \frac{I_{k,l}[\text{eV}]}{T_e[\text{eV}]}, \quad (3.20)$$

wobei für die in der LOTZ-Formel benötigten Konstanten $a = 4 \times 10^{-14}$ und $b = c = 0$ gesetzt wurde. Die neuere Formel von Burgess und Chidichimo (1983 [75]) stellt eine deutliche Verbesserung gegenüber der LOTZ-Formel dar, da die empirische Konstante C dieser Formel an einen viel größeren Datensatz angepaßt wurde. Zudem erlaubt diese Formel die Berücksichtigung des indirekten Ionisationsprozesses Anregung-Autoionisation, der in der LOTZ-Formel unberücksichtigt bleibt. Eine Diskussion der verschiedenen empirischen Wirkungsquerschnitt und ein Vergleich mit experimentellen Daten ist in einem Übersichtsartikel von Phaneuf (1986 [76]) enthalten. Für den Ratenkoeffizienten erhält man in guter Näherung (Burgess und Chidichimo [75])

$$C_{k,l}^e = 1.09 \times 10^{-6} C \frac{\xi_k}{I_{k,l}[\text{eV}] \sqrt{T_e[\text{eV}]} E_1(\beta_{k,l}) w \text{ (cm}^3\text{s}^{-1})} \quad (3.21)$$

mit

$$w = \left(\ln \left(1 + \frac{1}{\beta_{k,l}} \right) \right)^{\alpha/(1+1/\beta_{k,l})} \quad (3.22)$$

und

$$\alpha = \frac{1}{4} \left(\left[\frac{100z + 91}{4z + 3} \right]^{1/2} - 5 \right), \quad (3.23)$$

wobei z die Ladungszahl des Ions vor dem Stoß ist. Für die Konstante wird von Burgess und Chidichimo ein mittlerer Wert von $C = 2.3$ angegeben.

Die Wahl von ξ_k und $I_{k,l}$ hängt davon ab, ob indirekte Ionisationsmechanismen einen wichtigen Beitrag liefern (Burgess und Chidichimo 1983 [75]). Gibt es keine signifikanten Beiträge von Anregung-Autoionisation, dann ist ξ_k die tatsächliche Anzahl der Elektronen in dem Niveau, aus dem ionisiert wird, und $I_{k,l}$ entspricht der Ionisierungsenergie dieses Niveaus. Dies ist der hier verwendete Fall, da für die Berücksichtigung der indirekten Ionisationsmechanismen die Kenntnis der Energien mehrfach angeregter Zustände erforderlich wäre. Zudem haben Burgess und Chidichimo vorausgesetzt, daß alle mehrfach angeregten Zustände, die autoionisierend zerfallen können, dies auch tun. Es besteht jedoch auch die Möglichkeit des strahlenden Zerfalls, der für hochionisierte Zustände dominierend ist, wodurch die Autoionisierung unterdrückt wird. Die Bestimmung von ξ_k und $I_{k,l}$ bei Berücksichtigung von Anregung-Autoionisation wird in dem Artikel von Burgess und Chidichimo diskutiert.

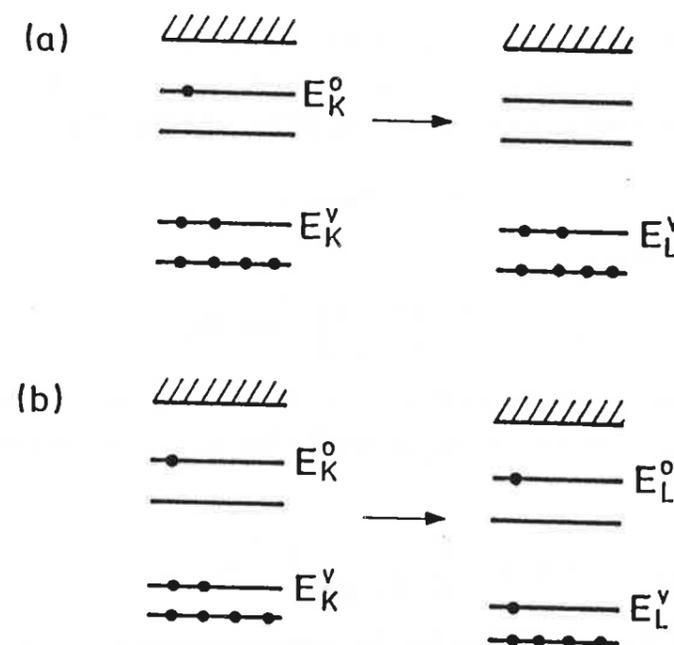


Abb. 3.2: Möglichkeiten der Ionisation zwischen einfach angeregten Zuständen.

In dem in der vorliegenden Arbeit verwendeten Modell unabhängiger Teilchen ist die Ionisierungsenergie gleich dem Betrag der Einteilchenbindungsenergie $I_{k,l} = -E_k^o$, wenn das äußere Elektron entfernt wird, da das verbleibende Ion sich dann – bei ausschließlicher Betrachtung einfach angeregter Zustände – im Grundzustand befindet (Abb. 3.2(a)). Es kann aber auch ein Elektron aus der äußeren Schale des Rumpfs entfernt werden, was ebenfalls zu einem einfach angeregten Zustand führt (Abb. 3.2(b)). Dann ist zu berücksichtigen, daß sich auch die Bindungsenergie des äußeren Elektrons ändert, und die Ionisierungsenergie ist $I_{k,l} = -E_k^o + E_l^o - E_l^v$, wobei die Einteilchenbindungsenergie (< 0) E^o des äußeren Elektrons und E^v des Elektrons in der Valenzschale des Rumpfs benötigt werden.

Dreikörperrekombination

Der Wirkungsquerschnitt für den inversen Prozeß der Dreikörperrekombination ist – analog zum Fall der Stoßanregung und Stoßabregung – mit dem Wirkungs-

querschnitt für Stoßionisation über das Prinzip des detaillierten Gleichgewichts verbunden, wobei aber nun ein Zustand im Kontinuum liegt. Für die Ratenkoeffizienten führt dies auf folgende Beziehung (Kärcher 1991 [62])

$$C_{l,k}^e = n_e s_{k,l} C_{k,l}^e \quad (3.24)$$

mit dem SAHA-Faktor

$$s_{k,l} = \frac{a_0 G_k}{2 G_l} \left(\frac{4\pi Ry}{T_e} \right)^{3/2} \exp(\beta_{k,l}) , \quad (3.25)$$

wobei G_k das statistische Gewicht des Ions vor und G_l nach der Ionisation ist. Setzt man die Zahlenwerte für den BOHR-Radius a_0 und die RYDBERG-Energie ein, so folgt

$$s_{k,l} = 1.66 \times 10^{-22} \frac{G_k}{G_l} \left(\frac{1}{T_e [eV]} \right)^{3/2} \exp(\beta_{k,l}) \text{ (cm}^3\text{)} . \quad (3.26)$$

Damit kann der Ratenkoeffizient für die Dreikörperrekombination aus dem Ratenkoeffizienten für Stoßionisation durch Multiplikation mit dem SAHA-Faktor und der Dichte der freien Elektronen n_e gewonnen werden.

3.2.3 Photoabregung und Photorekombination

Beim Prozeß der Photoabregung geht ein Ion spontan vom Anregungszustand l in den energetisch niedrigeren Zustand k über und sendet dabei ein Photon der Energie $E_{k,l}$ aus (Abbildung 3.1(e)). Befindet sich der Anfangszustand des Elektrons im Kontinuum, bezeichnet man diesen Prozeß als Photorekombination (Abbildung 3.1(f)).

Photoabregung

Die Rate für Photoabregung $R_{l,k}$ ist durch den EINSTEIN-Koeffizienten gegeben

$$R_{l,k} = A_{l,k} , \quad (3.27)$$

der vermöge der Beziehung

$$A_{l,k} = \alpha^3 \frac{Ry}{\hbar} \left(\frac{E_{k,l}}{Ry} \right)^2 \frac{G_k}{G_l} f_{k,l} \quad (3.28)$$

$$= 4.34 \times 10^7 \frac{G_k}{G_l} (E_{k,l} [eV])^2 f_{k,l} \text{ (s}^{-1}\text{)} \quad (3.29)$$

mit der Absorptions-Oszillatorstärke $f_{k,l}$ verknüpft ist, die bereits in Kapitel 2 ermittelt wurde. Die statistischen Gewichte des Ions vor und nach der Abregung sind G_l und G_k , und α ist die SOMMERFELD-Feinstrukturkonstante.

Photorekombination

Der Prozeß ist in Abbildung 3.1(f) veranschaulicht. Photorekombination ist der inverse Mechanismus zur Photoionisation. Ist der Wirkungsquerschnitt für Photoionisation $\sigma_{k,l}$ bekannt, liefert die MILNE-Beziehung (Zel'dovich und Raizer 1966 [77], Kärcher 1991 [62])

$$\frac{\sigma_{k,l}}{\sigma_{l,k}} = \frac{G_l}{G_k} \left(\frac{m_e v_e}{h\nu/c} \right)^2 \quad (3.30)$$

den Wirkungsquerschnitt für Photorekombination $\sigma_{l,k}$. Die Energie des Photons ist hierbei $h\nu$, die Geschwindigkeit des Elektrons v_e und die Elektronenmasse m_e . Für die Photorekombinationsrate folgt unter Verwendung dieser Beziehung (Kärcher 1991 [62])

$$R_{l,k} = \frac{8\pi}{h^3 c^2} n_e s_{k,l} \int_{E_{k,l}}^{\infty} \sigma_{k,l} E^2 \exp\left(-\frac{E}{T_e}\right) dE , \quad (3.31)$$

wobei – wie im Fall der Dreikörperrekombination – $s_{k,l}$ der SAHA-Faktor (Gl. (3.25)) ist. In der vorliegenden Arbeit sind auch bei der Photorekombination nur Einelektronenübergänge zugelassen, so daß nur benachbarte Ionisationsstufen über Photorekombination miteinander gekoppelt sind.

Der klassische KRAMERS-Wirkungsquerschnitt für die Photoionisation (Zel'dovich und Raizer 1966 [77]) eines wasserstoffähnlichen Ions mit Ladungszahl \tilde{Z} lautet

$$\sigma_{k,l} = \frac{h\pi e^2}{m_e c} \frac{df_{k,l}}{dE} \quad (3.32)$$

$$= \frac{64\pi^4 e^{10} m_e}{3\sqrt{3} h^3 c} \frac{P_{nl} \tilde{Z}^4}{n^5 E^3} , \quad (3.33)$$

wobei man vom Zustand k zum Zustand l gelangt, indem ein Elektron aus der Subschale mit der Hauptquantenzahl n und der Besetzung P_{nl} ($P_{nl} = 1$ für

wasserstoffähnliche Ionen) durch Absorption eines Photons der Energie $E = h\nu$ ins Kontinuum gebracht wird. Einsetzen von Gl. (3.33) in Gl. (3.31) ergibt für die Rekombinationsrate

$$R_{l,k} = \frac{32}{3\sqrt{3}} \alpha_0^3 \frac{Ry}{h} \frac{P_{nl} \tilde{Z}}{n^5} n_e s_{k,l} E_1(\beta_{k,l}) \quad (3.34)$$

$$= 1.31 \times 10^{-12} \frac{P_{nl} \tilde{Z}}{n^5} n_e [cm^{-3}] \frac{G_k}{G_l} \frac{\exp(\beta_{k,l})}{(T_e [eV])^{3/2}} E_1(\beta_{k,l}) (s^{-1}), \quad (3.35)$$

wobei wie bisher $\beta_{k,l} = E_{k,l}/T_e$ gilt. Für den Fall des Wasserstoffatoms reduziert sich diese Formel auf die bekannte SEATON-Formel (Seaton 1959 [78]). Wird die Ladungszahl \tilde{Z} durch eine effektive Ladungszahl Z_{eff} ersetzt, die der Abschirmung des Kerns durch die noch gebundenen Elektronen Rechnung trägt, kann diese Formel näherungsweise auch für komplexe Ionen verwendet werden. Eine obere Grenze für die effektive Ladungszahl stellt die Ladungszahl des Kerns Z dar, nach unten hin ist sie durch die Ladungszahl des Ions Z_I begrenzt.

Bei niedrigen Ionisationsstufen wurde die Verwendung von $Z_{eff} = \sqrt{ZZ_I}$ vorgeschlagen (McLaughlin und Hahn 1991 [79]). Für den Einfang hochenergetische Elektronen ($0.3 \text{ keV} \leq E_{kin} \leq 1 \text{ keV}$) in Ionen mit Ladungszuständen $0.4 \leq (Z_I/Z) \leq 1.0$ geben Hahn und Rule (1977 [80]) eine wasserstoffähnliche Abschätzung der Photorekombinationsrate mit $Z_{eff} = (Z + Z_I)/2$. Kim und Pratt (1983 [81]) zeigen, daß diese effektive Ladungszahl zusammen mit dem KRAMERS-Wirkungsquerschnitt eine gute Näherung für hochionisierte Zustände darstellt, die bessere Resultate liefert als die Verwendung einer effektiven Hauptquantenzahl, die aus der Ionisierungsenergie und der Ladung des Ions folgt (Lee und Pratt 1976 [82]), oder einer effektiven Ladungszahl $Z_{eff} = Z - \sum_m \sigma_{nm} P_m$ mit den Abschirmkonstanten σ_{nm} (Lokke und Grasberger 1977 [64]), die an Bindungsenergien angepaßt sind. Die Ursache hierfür ist, daß die effektive Ladungszahl für die Wellenfunktion größer ist als die für die Energie, da für die Wellenfunktion nur die innere Abschirmung beiträgt (Slater 1960 [83]). In der vorliegenden Arbeit wird die effektive Ladungszahl Z_n für die Schale mit Hauptquantenzahl n aus dem Modell des abgeschirmten Wasserstoffatoms mit ℓ -Aufspaltung benutzt, das im Abschnitt 3.2.4 besprochen wird. In diesem Modell trägt zur effektiven Ladungszahl nur innere Abschirmung bei, der Beitrag der äußeren Abschirmung zur Bindungsenergie wird getrennt behandelt.

3.2.4 Dielektronische Rekombination

Dieser Prozeß setzt sich aus zwei Stufen zusammen, die in Abbildung 3.1(g) veranschaulicht sind. Der erste Schritt besteht aus einem strahlungslosen Einfang eines Elektrons mit kinetischer Energie E_{kin} in die Subschale $n\ell$ unter gleichzeitiger Anregung des Ions vom Zustand k in den Zustand l , wobei die Resonanzbedingung $E_{kin} - E_{nl} = E_{k,l}$ erfüllt sein muß. Der dabei entstehende doppelt-angeregte Zustand kann nun wieder durch Autoionisation zerfallen, was dann insgesamt die Verteilung der Ionisations- und Anregungszustände nicht verändert. Er kann aber auch durch einen strahlenden Zerfall übergehen in einen stabilen Zustand, dessen Ladung sich gegenüber der des Ausgangszustands durch den Einfang eines Elektrons in der Subschale $n\ell$ um eins verringert hat. Die dielektronische Rekombination ist wesentlich geprägt durch den resonanten Charakter des Einfangs und durch das Verzweigungsverhältnis zwischen Autoionisation und strahlender Abregung.

Ein Ziel dieser Arbeit war die konsistente Berücksichtigung dieses Prozesses in den Ratengleichungen, da bisher in Modellen, die einen großen Parameterbereich (n_i, T_e, Z) umfassen, nur sehr grobe Näherungen verwendet wurden. Zum Beispiel macht Eidmann (1989 [5]) in seinem Programm SNOP zur Berechnung der Emission und Absorption von Strahlung in lasererzeugten Plasmen die Annahme, daß die totale Rate für dielektronische Rekombination, die zu einem Ion im Grundzustand mit um eins veringert Ladung führt, proportional zur Gesamtrate für strahlenden Rekombination ist. Der Proportionalitätsfaktor d wird durch einen Vergleich von Simulationen mit experimentellen Werten bestimmt. Häufig wird die Formel von Post *et al.* (1977 [84]) benutzt, die eine Modifikation der Formel von Burgess (1965 [85]) ist und eine Näherung für die ℓ -Aufspaltung der Niveaus beinhaltet. Es ist aber auch damit nur möglich, die über alle Unterschalen $n\ell$ und über alle Zwischenzustände l aufsummierte Gesamtrate zu berechnen, weshalb man zur Bestimmung der Ionisationsverteilung nur Grundzustände berücksichtigen kann (siehe z.B. Post *et al.* 1977 [84], Eidmann 1989 [5], MacFarlane 1989 [6], Darée 1992 [86]).

Die Anzahl der Niveaus, in die ein Elektron eingefangen werden kann, ist begrenzt durch die maximale Anzahl angeregter Niveaus, die im Ratengleichungssystem betrachtet werden, in der vorliegenden Arbeit also alle Niveaus mit Hauptquan-

tenzahlen $n \leq 10$. Diese Näherung ist möglich, obwohl hoch angeregte Rydberg-zustände (bis $n \approx 50$) einen maßgeblichen Anteil zum Gesamtratenkoeffizienten liefern, weil das Elektron nach Einfang in ein hoch angeregtes Niveau leicht durch einen Stoß wieder freigesetzt werden kann, wenn nicht die Temperatur sehr klein ist. Zusätzlich werden die hoch angeregten Niveaus, die im isolierten Atom vorhanden sind, im Plasma durch Kontinuumsabsenkung zerstört. Eine quantitative Diskussion dieser Effekte gibt Peter (1985 [87]) am Beispiel des Einfangs in wasserstoffähnliches Helium. Der Einfluß der Stoßionisierung auf die dielektronische Rekombinationsrate in Niveaus mit $n \leq 10$ ist in der vorliegenden Arbeit – im Gegensatz zur Arbeit von Peter – im Ratengleichungssystem implizit berücksichtigt, da Stoßionisation aus angeregten Niveaus möglich ist, daher ist eine Modifikation des Ratenkoeffizienten nicht erforderlich.

Eine ausführliche Behandlung der dielektronischen Rekombination wird in zwei Arbeiten von Peter (1985 [87], 1988 [88]) gegeben, in denen praktische Formeln zur Berechnung der Rate für die dielektronische Rekombination zusammengestellt sind, die in der vorliegenden Arbeit mit einigen Modifikationen verwendet werden. Ist $A_r(l \rightarrow k)$ die Rate für die strahlende Abregung und $A_a(l n\ell \rightarrow k E_{kin} \ell')$ die Rate für die Autoionisation, dann gilt für den Gesamtratenkoeffizienten für dielektronische Rekombination eines Elektrons in die Subschale $n\ell$ (Peter 1988 [88], S.37)

$$C^{DR}(n\ell) = \sum_l \sum_k \frac{A_r(l \rightarrow k) A_a(l n\ell \rightarrow k E_{kin} \ell')}{A_r(l \rightarrow k) + A_a(l n\ell \rightarrow k E_{kin} \ell')} \frac{g(z-1, l n\ell)}{2g(z, k)} \times \frac{h^3}{(2\pi m_e T_e)^{3/2}} \exp\left(-\frac{E_{k,l} + E_{n\ell}}{T_e}\right), \quad (3.36)$$

wobei

$$g(z, k) = \prod_{n'\ell'} \binom{2(2\ell' + 1)}{P_{n'\ell'}^k} \quad \text{und} \quad g(z-1, l n\ell) = \prod_{n'\ell'} \binom{2(2\ell' + 1)}{P_{n'\ell'}^{l n\ell}} \quad (3.37)$$

die statistischen Gewichte des Ausgangszustands mit Ladungszahl z und des doppelt angeregten Zustands mit Ladungszahl $z-1$ sind. Die Besetzung der Subschale $n'\ell'$ in einem Zustand p ist $P_{n'\ell'}^p$, und die Produkte erstrecken sich über alle offenen Unterschalen.

Unter der Annahme, daß das eingefangene Elektron die Abregung $l \rightarrow k$ nicht beeinflusst, entspricht die Rate der strahlenden Abregung dem EINSTEIN-Koeffizienten, der auf die Einteilchen-Oszillatorstärke für die Absorption $f^{(1)}$

zurückgeführt werden kann. Wenn der Zustand l aus dem Zustand k hervorgeht durch Anheben eines Elektrons aus der Subschale $i = n_i \ell_i$ (mit Besetzung P_i und statistischem Gewicht $g_i = 2(2\ell_i + 1)$) in die Subschale $j = n_j \ell_j$ (mit Besetzung P_j und statistischem Gewicht $g_j = 2(2\ell_j + 1)$), dann erhält man

$$A_r(l \rightarrow k) = \frac{Ry}{h} \alpha^3 \left(\frac{E_{k,l}}{Ry}\right)^2 (P_j + 1) \frac{g_i - P_i + 1}{g_j} f_{ij}^{(1)}. \quad (3.38)$$

Als Beispiel sei der Übergang $1s^2 2s^2 \rightarrow 1s^2 2s^1 2p^1 5s^1$ betrachtet, bei dem ein Elektron in der Subschale $5s$ bei gleichzeitiger Anregung eines Rumpfelektrons von $2s$ nach $2p$ eingefangen wird. Hier entspricht $n_i \ell_i = 2s$, $n_j \ell_j = 2p$ und $n\ell = 5s$, und es gilt $P_i = 2$, $g_i = 2$, $P_j = 0$ und $g_j = 6$.

Für die Autoionisierungsrate vom Zustand l zum Zustand k unter Emission eines Elektrons aus der Subschale $n\ell$ gilt näherungsweise (Peter 1988 [88])

$$A_a(l n\ell \rightarrow k E_{kin} \ell') = \frac{8Ry z^2}{\sqrt{3} h n^3} \left(\frac{Ry}{E_{k,l}}\right) \frac{2g(z, k)}{g(z-1, l n\ell)} P_i \frac{g_j - P_j}{g_j} f_{ij}^{(1)} G_l(k, k'), \quad (3.39)$$

wobei

$$G_l(k, k') \approx \frac{0.4}{\ln\left(2\sqrt{\frac{E_{k,l} n^2}{Ry z}}\right)} \frac{1}{2\ell + 1} \quad (3.40)$$

der partielle KRAMERS-GAUNT-Faktor (Peter 1985 [87], S.61) ist. Setzt man die Gleichungen (3.38), (3.39) und (3.40) in Gl. (3.36) ein, so folgt

$$C^{DR}(n\ell) = \sum_l \sum_k \mathcal{A}_l P_i \left(1 - \frac{P_j}{g_j}\right) f_{ij}^{(1)} \left(\frac{Ry}{T_e}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{E_{k,l} + E_{n\ell}}{T_e}\right) \times \frac{1}{n^3(2\ell + 1) + \mathcal{A}_2} \quad (cm^3 s^{-1}), \quad (3.41)$$

mit

$$\mathcal{A}_1 = 2.52 \times 10^{-7} \frac{z^2 \left(\frac{Ry}{E_{k,l}}\right)}{\ln\left(2\sqrt{\frac{E_{k,l} n^2}{Ry z}}\right)}, \quad (3.42)$$

$$\mathcal{A}_2 = 4.75 \times 10^6 \frac{z^2 \left(\frac{Ry}{E_{k,l}}\right)^3}{\ln\left(2\sqrt{\frac{E_{k,l} n^2}{Ry z}}\right)} \gamma \quad (3.43)$$

und

$$\gamma = \frac{2g(z, k)}{g(z-1, k n\ell)} \frac{P_i(g_j - P_j)}{(P_j + 1)(g_i - P_i + 1)}. \quad (3.44)$$

Peter (1988 [88]) betrachtet nur den Einfang in ungefüllte Unterschalen $n\ell$ und setzt daher für das statistische Gewicht des doppelt angeregten Zustands $g(z-1, k, n\ell) = g(z, l) 2(2\ell+1)$, womit sich $\gamma = 1/(2\ell+1)$ ergibt. Damit würde sich Gl. (3.41) auf die Gl. (III-22) von Peter reduzieren. In dem Ratengleichungssystem der vorliegenden Arbeit besteht jedoch die Möglichkeit des Einfangs in eine teilweise gefüllte Schale, daher wird die allgemein gültige Formel für γ (Gl. (3.44)) beibehalten.

Sind die Übergangsenergie $E_{k,l}$ und die Einteilchenoszillatorstärken $f^{(1)}$ bekannt, kann mit Gl. (3.41) der Ratenkoeffizient für dielektronische Rekombination berechnet werden. Im Prinzip wäre es möglich alle diese Daten mit den in Kapitel 2 besprochenen Methoden zu bestimmen, praktisch ist dies jedoch mit einem sehr hohen Aufwand verbunden. Aus diesem Grunde und angesichts der Tatsache, daß über alle doppelt angeregten Zwischenzustände summiert wird, werden die Energien und Oszillatorstärken mit dem Modell des abgeschirmten Wasserstoffatoms berechnet. Es wird ein erweitertes Modell verwendet, das die Aufspaltung nach dem Drehimpuls ℓ berücksichtigt (Perrot 1989 [42], Rickert 1989 [8]) und im folgenden skizziert wird. Dies ist eine Erweiterung gegenüber dem Modell von Peter, der die ℓ -Aufspaltung für die angeregten Zustände vernachlässigt und die Oszillatorstärken durch die Wasserstoffoszillatorstärken mit der Ladung des Ions vor der Rekombination nähert.

Abgeschirmtes Wasserstoffmodell

Ist die Besetzung der Unterschale $m\ell$ durch $P_{m\ell}$ und der Hauptschale m durch $P_m = \sum_{\ell} P_{m\ell}$ gegeben, und kennzeichnet wie bisher Z die Kernladungszahl, so ergibt sich gemäß Perrot (1989 [42]) für die effektive Kernladungszahl in der Hauptschale n

$$Z_n = Z - \sum_{m \leq n} P_m \sigma_{nm} \left(1 - \frac{1}{2} \delta_{nm}\right) + \sum_m P_m q_{nm} \sum_{\ell=0}^{n-1} \frac{P_{n\ell}}{P_n} g_{n\ell} \quad (3.45)$$

mit

$$g_{n\ell} = \frac{1}{4n^2} \left[n^2 - 2\ell(\ell+1) - 1 \right] + \nu_n \quad (3.46)$$

Die ersten beiden Ausdrücke der rechten Seite von Gl. (3.45) entsprechen dem Ergebnis von More (1982 [89]) ohne ℓ -Aufspaltung, wobei zur Abschirmung der

Kernladungszahl nur die inneren Schalen $m \leq n$ beitragen, der letzte Ausdruck trägt der ℓ -Aufspaltung Rechnung. Die Abschirmkonstanten σ_{nm} , die von More an Ionisationsenergien aus HFS-Rechnungen angepaßt wurden, sind in Tab. 3.1 aufgelistet. Für die Außerdiagonalelemente q_{nm} erhält man näherungsweise

$$q_{nm} = \begin{cases} \frac{1}{\pi} \left(\frac{m}{n}\right)^5 \left[2 - \left(\frac{m}{n}\right)^2\right]^{1/2} & \text{falls } 2n^2 > m^2 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}, \quad (3.47)$$

die Diagonalelemente q_{nn} und die ν_n können Tab. 3.2 entnommen werden.

Ein verbessertes Modell für die effektive Kernladungszahl im Wasserstoffmodell ohne ℓ -Aufspaltung, das berücksichtigt, daß sich ein Elektron in einer Schale nicht selbst abschirmen kann, haben Marchand *et al.* (1990 [90]) entwickelt. Für die effektive Kernladungszahl machen sie den Ansatz

$$Z_n = Z - \frac{1}{2} \sigma_{nn} \max(0, P_n - 1) - \sum_{m < n} \sigma_{nm} P_m, \quad (3.48)$$

und passen die Abschirmkonstanten nicht nur an Ionisationsenergien sondern auch an Anregungsenergien für leichte Elemente an. Die daraus folgenden Änderungen für die Abschirmkonstanten zeigt Tab. 3.3, alle anderen Abschirmkonstanten bleiben unverändert. Für das Modell mit ℓ -Aufspaltung ergibt sich für die effektive Kernladungszahl analog zu Gl. (3.45)

$$Z_n = Z - \frac{1}{2} \sigma_{nn} \max(0, P_n - 1) - \sum_{m < n} \sigma_{nm} P_m + \sum_m P_m q_{nm} \sum_{\ell=0}^{n-1} \frac{P_{n\ell}}{P_n} g_{n\ell}, \quad (3.49)$$

wobei die neuen Abschirmkonstanten benutzt werden. Dieses Modell kann in dem Computerprogramm, das im Rahmen dieser Arbeit entwickelt wurde, für alle Elemente mit $Z \leq 30$ gewählt werden.

Die totale Energie E für eine Konfiguration ist bei Kenntnis der effektiven Kernladungszahlen

$$E = -Ry \sum_n P_n \frac{Z_n^2}{n^2}, \quad (3.50)$$

und die für den Ratenkoeffizienten notwendige Anregungsenergien folgen aus der Differenz der totalen Energien der Konfigurationen.

Die Oszillatorstärken werden berechnet, indem die Wellenfunktionen $R(r)$ im Dipolmatrixelement $D_{n\ell}^{n'\ell'} = \int_0^\infty R_{n\ell}(r) R_{n'\ell'}(r) r^3 dr$ durch Wasserstoffwellenfunktionen mit verschiedenen effektiven Kernladungszahlen Z_n und $Z_{n'}$ nach Gl. (3.45)

n → m ↓	1	2	3	4	5
1	0.3125	0.9380	0.9840	0.9954	0.9970
2	0.2345	0.6038	0.9040	0.9722	0.9979
3	0.1093	0.4018	0.6800	0.9155	0.9796
4	0.0622	0.2430	0.5150	0.7100	0.9200
5	0.0399	0.1597	0.3527	0.5888	0.7320
6	0.0277	0.1098	0.2455	0.4267	0.5764
7	0.0204	0.0808	0.1811	0.3184	0.4592
8	0.0156	0.0624	0.1392	0.2457	0.3711
9	0.0123	0.0493	0.1102	0.1948	0.2994
10	0.0100	0.0400	0.0900	0.1584	0.2450
n → m ↓	6	7	8	9	10
1	0.9970	0.9990	0.9999	0.9999	0.9999
2	0.9880	0.9900	0.9990	0.9999	0.9999
3	0.9820	0.9860	0.9900	0.9920	0.9999
4	0.9600	0.9750	0.9830	0.9860	0.9900
5	0.8300	0.9000	0.9500	0.9700	0.9800
6	0.7248	0.8300	0.9000	0.9500	0.9700
7	0.6098	0.7374	0.8300	0.9000	0.9500
8	0.5062	0.6355	0.7441	0.8300	0.9000
9	0.4222	0.5444	0.6558	0.7553	0.8300
10	0.3492	0.4655	0.5760	0.6723	0.7612

Tabelle 3.1: Abschirmkonstanten σ_{nm} nach More (1982 [89]).

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

Tabelle 3.2: Numerische Werte der Konstanten für das abgeschirmte Wasserstoffmodell mit ℓ -Aufspaltung nach Perrot (1989 [42]).

n → m ↓	1	2	3	4	5
1	0.5966	0.8597	0.9923	0.9800	0.9725
2		0.6888	0.8877	0.9640	1.0000
3			0.7322	0.9415	0.9897
4				0.6986	0.8590
5					0.8502

Tabelle 3.3: Verbesserte Abschirmkonstanten σ_{nm} nach Marchand *et al.* (1990 [90]).

bzw. Gl. (3.49) genähert werden. Das Dipolmatrixelement mit diesen Wellenfunktionen ist analytisch zu lösen, und mit den aus dem abgeschirmten Wasserstoffmodell mit ℓ -Aufspaltung folgenden Übergangsenergien ist eine schnelle Berechnung vieler Oszillatorstärken möglich. Das Dipolmatrixelement $D_{n\ell}^{n'\ell'}$ über normierte, wasserstoffähnliche Wellenfunktionen ist ein spezielles Integral einer ganzen Gruppe von Integralen der Form

$$J_{\gamma}^{sp}(\alpha, \alpha') = \int_0^{\infty} \exp\left(-\frac{k+k'}{2}z\right) z^{\gamma-1+s} F(\alpha, \gamma, kz) F(\alpha', \gamma-p, k'z) dz, \quad (3.51)$$

deren Lösung mittels Rekursion bei Landau und Lifschitz (1984 [91]) gegeben ist. Damit ist nicht nur die Berechnung des Dipolmatrixelements sondern auch höherer Multipole möglich. Die Parameter für das Dipolmatrixelement ergeben sich durch einen Vergleich mit der allgemeineren Formel zu

$$k = \frac{2Z_n}{a_0 n}, \quad k' = \frac{2Z_{n'}}{a_0 n'}, \quad (3.52)$$

$$\alpha = -n + \ell + 1, \quad \alpha' = -n' + \ell', \quad \gamma = 2\ell + 2, \quad p = 2, \quad s = 1. \quad (3.53)$$

Im Fall des Dipolmatrixelements kann das Ergebnis aber auch in geschlossener Form angegeben werden (Naqvi 1964 [92])

$$D_{n\ell}^{n'\ell'}(Z_n, Z_{n'}) = \left[\frac{(n+\ell)!}{(2n)(n-\ell-1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \left[\frac{(n'+\ell')!}{(2n')(n'-\ell'-1)!} \right]^{\frac{1}{2}} \\ \times \frac{1}{(2\ell+1)!} \frac{1}{(2\ell'+1)!} 2^{\ell+\ell'+4} Z_n^{n^*+n'^*+\ell+\frac{3}{2}} Z_{n'}^{\ell'+\frac{3}{2}} \\ \times (Z_n + Z_{n'})^{-2-n-n'} \sum_u^{(n^*+n'^*)} \psi^u(n\ell, n'\ell') \left(\frac{Z_{n'}}{Z_n}\right)^u, \quad (3.54)$$

mit

$$n^* = n - \ell - 1, \quad n'^* = n' - \ell' - 1, \quad (3.55)$$

$$z_n = \frac{2}{n} Z_n, \quad z_{n'} = \frac{2}{n'} Z_{n'}, \quad (3.56)$$

und

$$\psi^u(n\ell, n'\ell') = \sum_i^{i_m} \sum_j^{j_m} d_{n\ell}^i d_{n'\ell'}^j 2^{i+j} (\ell + \ell' + 3 + i + j)! \quad (3.57)$$

$$\times \frac{(n^* + n'^* - i - j)!}{(n^* + n'^* - i - u)!(u - j)!}, \quad (3.58)$$

wobei

$$i_m = \min\{n^*, n^* + n'^* - u\}, \quad j_m = \min\{n'^*, u\}, \quad (3.59)$$

$$d_{n\ell}^i = (-1)^i \frac{(n^*)!}{(n^* - i)!} \frac{(2\ell + 1)!}{(2\ell + 1 + i)!} \frac{1}{i!} \quad (3.60)$$

und

$$d_{n'\ell'}^j = (-1)^j \frac{(n'^*)!}{(n'^* - j)!} \frac{(2\ell' + 1)!}{(2\ell' + 1 + j)!} \frac{1}{j!}. \quad (3.61)$$

Bezüglich einer detaillierten Diskussion dieser Methode sei auf die Arbeit von Rickert (1989 [8]) verwiesen.

Resultate

Der Gesamtratenkoeffizient (summiert über k, l und $n\ell$) für dielektronischen Einfang in die Grundzustandsionen Au^{24+} und Al^{5+} wird in Abb. 3.3 und Abb. 3.4 gezeigt, wobei sowohl die Ergebnisse mit als auch ohne ℓ -Aufspaltung dargestellt sind. Erstere wurden mit Hilfe der oben beschriebenen Formeln ermittelt, wobei auch der Einfang in eine teilweise besetzte Valenzschale erlaubt ist, und alle energetisch möglichen Anregungen des Ions auch aus inneren Unterschalen möglich sind. Die Resultate ohne ℓ -Aufspaltung wurden mit einem Computerprogramm berechnet, das die Formeln von Peter zusammen mit dem abgeschirmten Wasserstoffmodell ohne ℓ -Aufspaltung für das Ausgangsniveau i des Rumpfelektrons verwendet, nur Anregung aus der Valenzschale berücksichtigt und Einfang nur in unbesetzte äußere Niveaus zuläßt⁵. Wie man erwarten würde, ergeben sich für Gold durch die Einführung der ℓ -Aufspaltung große Änderungen im Ratenkoeffizienten, die aber auch im Falle des Aluminiums (Kurve 1 in Abb. 3.4) auftreten, obwohl für dieses niedrig-Z Element die ℓ -Aufspaltung der Niveaus keine wichtige Rolle spielen sollte. Die Konfiguration für fünffach geladenes Aluminium im Grundzustand ist $1s^2 2s^2 2p^4$, so daß die Anregung eines Elektrons aus dem Niveau $2s$ nach $2p$ mit einer Energie von 36.3 eV möglich ist. Vernachlässigt man die ℓ -Aufspaltung, dann ist der energetisch niedrigste Übergang aus der Hauptschale mit $n = 2$ nach $n = 3$, wofür eine Energie von 142.3 eV aufzuwenden ist, und bei niedrigen Temperaturen ($T < 10$ eV) reicht die beim Einfang eines Elektrons gewonnene Energie nicht aus, ein Elektron anzuregen. In Kurve 2 der Abb. 3.4

⁵Dieses Programm wurde freundlicherweise von Dr. Bernd Kärcher zur Verfügung gestellt.

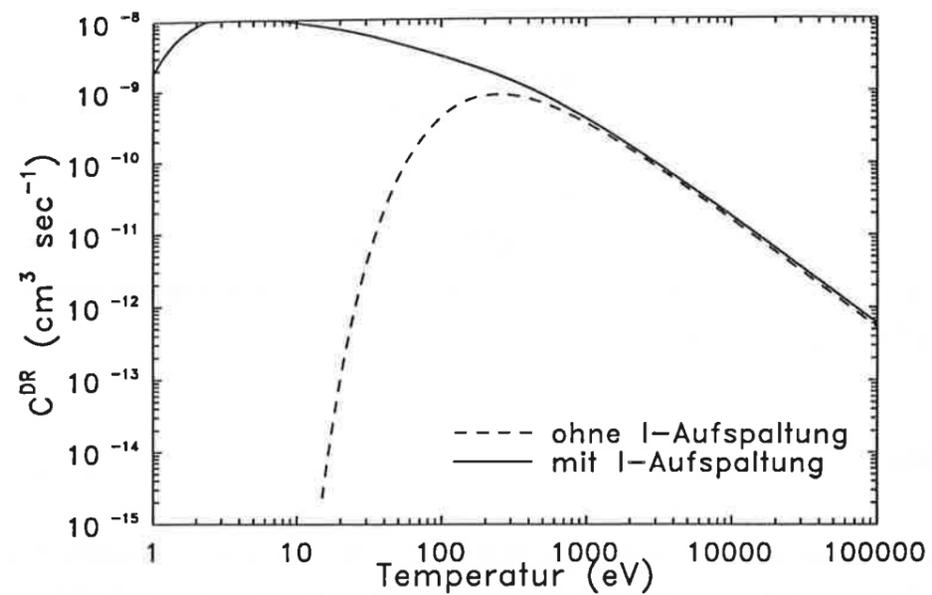


Abb. 3.3: Ratenkoeffizient für dielektronische Rekombination in Au XXV in Abhängigkeit von der Elektronentemperatur.

wurde der Übergang $2s \rightarrow 2p$ in den Rechnungen mit l -Aufspaltung nicht mitgenommen, was auch in diesem Fall zu einer Verschiebung der Schwelle zu einer höheren Temperatur führt. Zusätzlich wurde in Kurve 3 auch der Einfang in die Unterschale $2p$ unterdrückt, da in den Rechnungen ohne l -Aufspaltung Einfang in die Valenzschale $n = 2$ nicht berücksichtigt ist, was eine weitere Annäherung der beiden Ratenkoeffizienten zur Folge hat. Die noch verbleibenden Unterschiede sind auf die Verwendung unterschiedlicher Energien und Oszillatorstärken zurückzuführen. Dieses Beispiel zeigt, daß auch für niedrig- Z Elemente die Einführung der l -Aufspaltung wichtig ist, da sich dadurch neue und veränderte Möglichkeiten der Anregung ergeben.

Die durch l -Aufspaltung verursachten Änderungen am Ratenkoeffizienten für Gold sind, nach den Beiträgen der einzelnen Hauptschalen aufgeschlüsselt, in Abb. 3.5 dargestellt. Die energetisch niedrigste Anregung eines Rumpfelektrons im entarteten Fall (Abb. 3.5 (a)) ist der Übergang $n = 4 \rightarrow n = 5$ mit einer Energie von 563.8 eV. Bei Einfang eines Elektrons in die Schale $n = 5$ werden

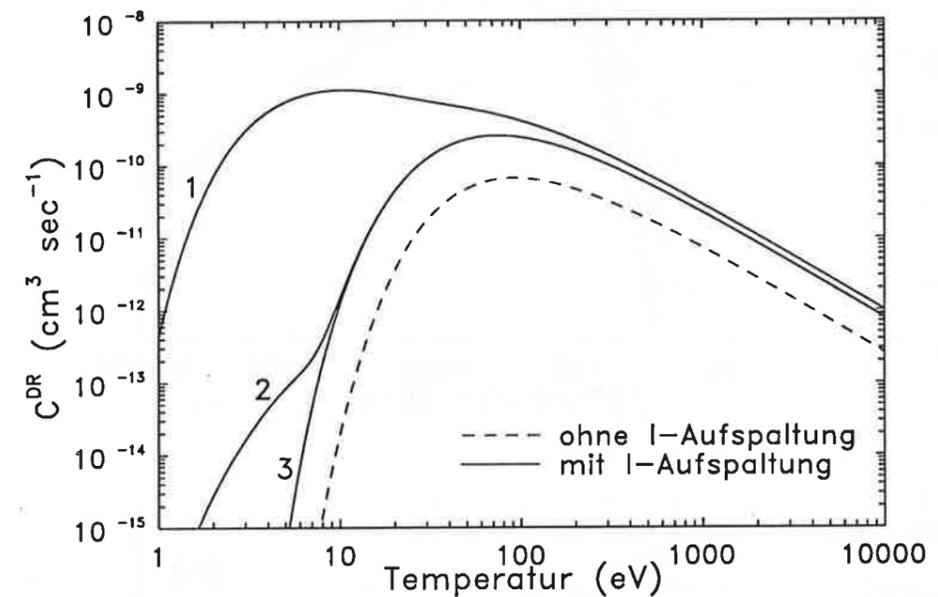


Abb. 3.4: Ratenkoeffizient für dielektronische Rekombination in Al VI in Abhängigkeit von der Elektronentemperatur. (1): Alle Einfangs- und Anregungskanäle berücksichtigt. (2): Der Resonanzübergang $2s \rightarrow 2p$ wurde vernachlässigt. (3): Zusätzlich wurde der Einfang in das Niveau $2p$ unterdrückt.

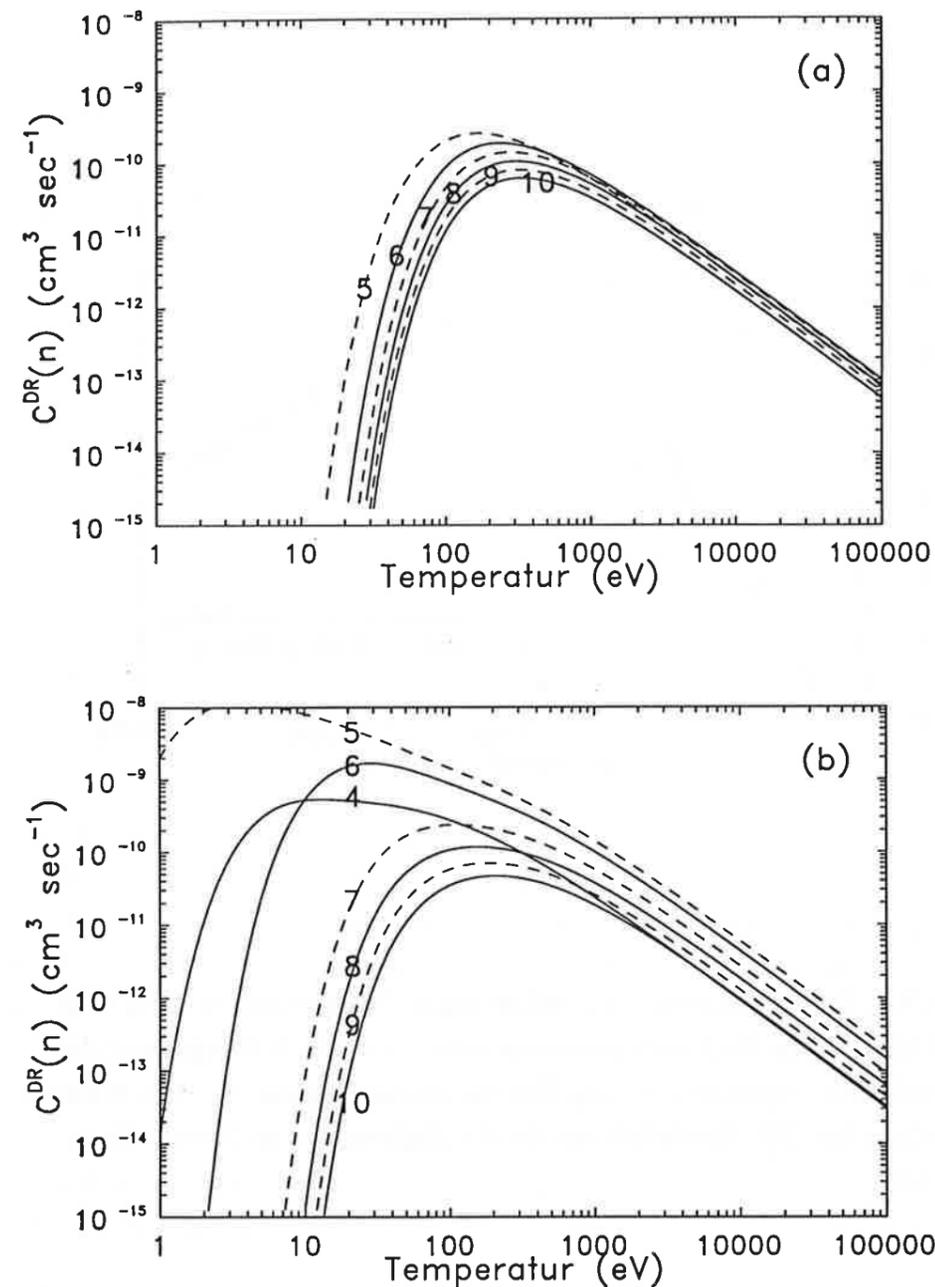


Abb. 3.5: Beitrag der Hauptschalen zur dielektronischen Rekombination in Au XXV in Abhängigkeit von der Elektronentemperatur. Die Zahlen der Kurvenbeschriftung entsprechen den Hauptquantenzahlen der Niveaus, in denen das rekombinierende Elektron eingefangen wird. (a): Rechnung ohne ℓ -Aufspaltung. (b): Rechnung mit ℓ -Aufspaltung und über die Unterschalen summiert.

313.3 eV frei, so daß die kinetische Energie des Elektrons vor dem Einfang ungefähr 250 eV betragen muß, um diesen Übergang anzuregen. Das Maximum des Ratenkoeffizienten für die Hauptschale mit $n = 5$ liegt daher bei einer Elektronentemperatur von ungefähr 174 eV, was einer wahrscheinlichsten Energie von ≈ 250 eV entspricht. Elektronen mit einer größeren kinetischen Energie können auch von der Schale $n = 4$ zur Schale $n = 6$ oder höher anregen, nur fällt für diese Übergänge die Oszillatorstärke stark ab, so daß der Resonanzübergang den größten Beitrag zum Ratenkoeffizienten liefert. Mit steigender Hauptquantenzahl verschiebt sich das Maximum zu höheren Temperaturen, weil beim Einfang des Elektrons in diese Schalen eine geringere Bindungsenergie frei wird, zur Anregung des Resonanzübergangs also eine höhere kinetische Energie erforderlich ist.

Bei Betrachtung der ℓ -Aufspaltung (Abb. 3.5 (b)) ergibt sich – wie im Falle des Aluminiums – ein ganz anderes Bild. Sei zunächst der Beitrag der Schale mit $n = 5$ zum Ratenkoeffizienten betrachtet, der bereits bei Elektronentemperaturen $T_e \approx 3$ eV ein Maximum besitzt, was bedeutet, daß die beim Einfang eines Elektrons in diese Schale frei werdende Bindungsenergie zur Anregung eines Rumpfelektrons nahezu ausreicht. Diese Resonanzbedingung ist für den Einfang in das Niveau $5p$ und gleichzeitiger Anregung eines Elektrons von $4f$ nach $5g$ erfüllt, wozu bei Berechnung der Energien mit dem abgeschirmten Wasserstoffmodell mit ℓ -Aufspaltung nur eine kinetische Energie von 5.1 eV erforderlich ist. Beim Einfang in die Schale $n = 6$ sind vor allem der $\Delta n = 0$ -Übergang $4d \rightarrow 4f$, der aufgrund der teilweise besetzten äußersten Unterschale möglich ist, und der Übergang $4f \rightarrow 5d$ beteiligt, die kinetischen Energien von ≈ 41 eV bzw. ≈ 65 eV erfordern, um den doppelt angeregten Zustand zu erzeugen. Dabei ist zu beachten, daß die Anregungsenergie des doppelt angeregten Zustands auch von der Unterschale abhängt, in die das rekombinierende Elektron eingefangen wird, da diese unter Verwendung des abgeschirmten Wasserstoffmodells mit ℓ -Aufspaltung durch die Differenz der totalen Energie des Ions im Grundzustand vor dem Einfang und der totalen Energie des doppelt angeregten Zustands gegeben ist. Diese beiden Übergänge sind auch maßgeblich bei Rekombination in die Niveaus $n = 7$ bis $n = 10$ beteiligt, daher verschiebt sich auch hier das Maximum mit steigender Hauptquantenzahl des rekombinierenden Elektrons zu höherer Elektronentemperatur. Insgesamt liegt durch die ℓ -Aufspaltung die Schwelle für die Anregung eines Rumpfelektrons bei geringerer Energie als im entarteten Fall, was sich bei den höheren Niveaus durch ein Auftreten des Maximums bei niedrigeren Tempe-

raturen bemerkbar macht.

Der Einfang in die Schale mit $n = 4$ wurde im entarteten Fall vernachlässigt, da die Resonanzbedingung nur durch Anregung eines Elektrons aus der Schale mit $n = 3$ erfüllt werden kann. Diese Übergänge besitzen im Vergleich zur Anregung aus der Valenzschale nur kleine Oszillatorstärken, und es sind hohe kinetische Energien des rekombinierenden Elektrons erforderlich, was dies rechtfertigt. Ganz anders ist die Situation, wenn man die l -Aufspaltung der Energien zuläßt. Es ist dann energetisch möglich, ein Elektron in die Unterschale $4f$ einzufangen, und ein Elektron aus der Unterschale $4p$ in die Unterschale $5s$ anzuregen, wenn die kinetische Energie des eingefangenen Elektrons mindestens 15.5 eV beträgt, so daß das Maximum des Ratenkoeffizienten bei einer Elektronentemperatur von ungefähr 11 eV liegt. Der Ratenkoeffizient ist aber geringer als beim Einfang in die Schalen $n = 5$ und $n = 6$, weil die Oszillatorstärken der beteiligten Übergänge in diesen beiden Fällen größer sind als die Oszillatorstärke $f_{4p \rightarrow 5s}$. Bei einer Temperatur $T_e \approx 60 \text{ eV}$ tritt ein zweites Maximum auf, das in Abb. 3.5 b deutlich zu erkennen ist, da dann auch die Anregung von $4p$ nach $5d$ energetisch möglich ist.

Die in diesem Abschnitt aufgeführten Beispiele haben gezeigt, daß die Aufspaltung der Energieniveaus nach der Drehimpulsquantenzahl bei der Berechnung des Ratenkoeffizienten für die dielektronische Rekombination wichtig ist, da sich dadurch neue Kanäle für die Anregung eines Rumpfelektrons ergeben, die auch beim Gesamtratenkoeffizienten zu erheblichen Änderungen führen.

3.3 Nichtidealitätseffekte

Wie bereits mehrfach angesprochen wurde, ist im Plasma der Einfluß der Elektronen und der Nachbarionen auf die Niveaustuktur der Atome zu berücksichtigen. Mit steigender Dichte verschwinden gebundene Zustände, ob dabei Diskontinuitäten in den thermodynamischen Größen auftreten, ist bis heute Gegenstand der Forschung (More 1981 [93], Förster 1991 [49]). Dieser Effekt sorgt zum Beispiel im LTE-Fall für eine Konvergenz der Zustandsummen, da durch Wechselwirkung mit den anderen Teilchen nur eine endliche Anzahl von gebundenen Zuständen existiert. Es existiert bis jetzt keine quantitative Theorie für dieses zeitabhängige, quantenmechanische Vielteilchenproblem, und selbst wenn es gelingen sollte, das

Problem näherungsweise zu lösen, wäre es fraglich, ob diese Lösung zur Verwendung in einem umfangreichen Ratengleichungsprogramm geeignet wäre. Man ist daher erneut gezwungen, auf ein einfaches Modell auch für die Nichtidealitätseffekte zurückzugreifen, das aber aus numerischen Gründen in der Lage sein sollte, das Verschwinden der Zustände mit steigender Dichte kontinuierlich zu beschreiben. Im allgemeinen unterscheidet man zwei Nichtidealitätseffekte:

- **Kontinuumsabsenkung**

Durch die Wechselwirkung der freien Elektronen untereinander und mit den Ionen wird die Kontinuumschante abgesenkt, und die Wechselwirkung der gebundenen Elektronen mit den freien Elektronen führt zu einer verringerten Bindungsenergie.

- **Druckionisierung**

Der Abstand zwischen den Ionen ist bei hohen Dichten so gering, daß sich die besetzten Orbitale benachbarter Ionen überlappen, wodurch aufgrund des Ausschließungsprinzips von Pauli Elektronen ins Kontinuum gehoben werden.

Zur Beschreibung der Kontinuumsabsenkung existieren viele Modelle, die in unterschiedlichen Dichtebereichen anwendbar sind. Sehr häufig wird die Formel von Stewart und Pyatt (1966 [94]) verwendet, die den kontinuierlichen Übergang zwischen dem Resultat der DEBYE-HÜCKEL-Theorie bei geringen Dichten und dem Resultat des Ionensphärenmodells bei hohen Dichten beschreibt. Im DEBYE-Grenzfall ist die Kontinuumsabsenkung gering, es ist daher in der vorliegenden Arbeit angesichts der Ungenauigkeiten in allen atomaren Größen ausreichend, die Kontinuumsabsenkung im Rahmen des Ionensphärenmodells zu berechnen, zumal sich die STEWART-PYATT-Formel im Falle signifikanter Absenkung der Kontinuumschante immer auf die Ionensphärenformel reduziert.

Im Ionensphärenmodell (More 1981 [93], Clayton 1968 [95]) nimmt man eine homogene Teilchendichte der freien Elektronen n_e an und betrachtet das Ion der Ladung Z_j als Punktladung im Mittelpunkt einer Kugel, deren Radius r_j so gewählt wird, daß die Kugel nach außen elektrisch neutral ist, d.h.

$$\frac{4\pi}{3}(r_j a_0)^3 n_e = Z_j \quad (3.62)$$

Die elektrostatische Energie dieser Anordnung setzt sich zusammen aus dem Anteil der Elektron-Elektron-Wechselwirkung der freien Elektronen

$$U_{ee} = \frac{3 Z_j^2}{5 r_j} \quad (3.63)$$

und der Energie, die zur Anordnung dieser Elektronenladung um die Punktladung des Ions aufgewendet werden muß

$$U_{ej} = -\frac{3 Z_j^2}{2 r_j}, \quad (3.64)$$

womit sich insgesamt ergibt

$$U_j = -\frac{9 Z_j^2}{10 r_j}. \quad (3.65)$$

Da sich Z_j freie Elektronen in der Ionensphäre befinden, hat jedes freie Elektron eine potentielle Energie von $-9Z_j/10r_j$. Betrachtet man ein gemittelt Ion mit der Ladung $z^* = n_e/n_i$ und dem Radius $r_0 = (3/4\pi n_i)^{1/3}/a_0$, dann folgt für die über die verschiedenen Ionen gemittelte Kontinuumsabsenkung

$$\Delta E_1 = -\frac{9 z^*}{10 r_0}. \quad (3.66)$$

Unter der Annahme, daß sich die gebundenen Elektronen im Kugelmittelpunkt befinden, d.h. die Radien der gebundenen Elektronen sind klein im Vergleich zum Ionensphärenradius, ergibt sich durch die Wechselwirkung mit den freien Elektronen eine zusätzliche Verschiebung der Ionisationsenergie

$$\Delta E_2 = -\frac{3 z^*}{2 r_0}, \quad (3.67)$$

so daß zusammen eine Kontinuumsabsenkung

$$\Delta E = -2.4 \frac{z^*}{r_0} \quad (3.68)$$

aus dem Ionensphärenmodell folgt. Der Zahlenfaktor 2.4 spielt angesichts der groben Abschätzung keine Rolle und wird im folgenden durch einen frei wählbaren Parameter τ ersetzt, für den im folgenden ein Wert angegeben wird. In den Raten für Elektronenstoßionisation werden die Nichtidealitätseffekte durch Erniedrigung der Ionisationsenergien um $|\Delta E|$ berücksichtigt.

Ein praktisches Modell für die Druckionisation, das auf einer Idee von Zimmerman und More (1980 [96]) basiert, wurde von Busquet (1990 [97]) zur Verwendung

in einem Ratengleichungsprogramm vorgeschlagen. Die Grundidee dabei ist eine Reduzierung der statistischen Gewichte durch Multiplikation mit einem Faktor

$$\pi_m = 1 - \frac{\Delta E}{I_m}, \quad (3.69)$$

der mit steigender Dichte kontinuierlich vom Wert eins auf den Wert null übergeht, wenn durch Absenkung der Kontinuumsanteile ein Elektron aus dem Ion mit Ionisationsenergie I_m freigesetzt wird. Um das Prinzip des detaillierten Gleichgewichts nicht zu verletzen, müssen dann aber auch alle Raten von n nach m mit dem Faktor π_m des Endzustands multipliziert werden (Busquet 1990 [97]). Busquet verwendet eine andere Abschätzung für ΔE , die nur von der Hauptquantenzahl des entsprechenden Elektrons und der Gesamtdichte der Ionen abhängt, nicht jedoch von der Elektronendichte wie in Gl. (3.68). Bei Abhängigkeit der Kontinuumsabsenkung von der Elektronendichte und damit auch der Druckionisation ist eine mögliche Lösung des Ratengleichungssystems bei hohen Dichten durch den Ionisationsgrad $z^* = 0$ gekennzeichnet, da dann keine Kontinuumsabsenkung und folglich auch keine Druckionisation auftritt. Um diese unphysikalische Lösung auszuschließen und nicht im Ratengleichungssystem mit hohem numerischen Aufwand viele Zustände mitzunehmen, deren statistisches Gewicht aufgrund der Druckionisation verschwindet, wird zusätzlich ein geometrisches Kriterium benutzt, mit dessen Hilfe über die Existenz eines Zustands schon bei der Auswahl der Zustände entschieden wird. Sei die Ausdehnung eines Ions durch den Radius des äußersten Elektrons nl festgelegt, der in wasserstoffähnlicher Näherung mit der effektiven, abgeschirmten Kernladungszahl Z_n (Gl. (3.45))

$$r_{nl} = \frac{1}{2Z_n} (3n^2 - \ell(\ell+1)) \quad (3.70)$$

lautet. Der Zustand wird als nicht mehr gebunden angesehen, wenn der Radius des Ions größer wird als der Ionensphärenradius, der ein Maß für den mittleren Abstand der Ionen ist. In der vorliegenden Arbeit wird ein Zustand als druckionisiert betrachtet, wenn das Kriterium

$$d_{nl} = \frac{1}{1 + \left(\tilde{\alpha} \frac{r_{nl}}{r_0}\right)^\beta} < \epsilon \quad (3.71)$$

erfüllt ist. Der Faktor d_{nl} wurde von Zimmerman und More (1980 [96]) zur Reduzierung der statistischen Gewichte im Modell des gemittelten Atoms (*average*

atom model) eingeführt, und die Parameter $\tilde{\alpha} = (40\pi/3)^{1/3}$ und $\tilde{\beta} = 3$ durch Vergleich mit Resultaten aus dem THOMAS-FERMI-Modell bestimmt (Pollak 1990 [65])⁶. Innerhalb einer Hauptschale besitzen die Orbitale mit kleinen Drehimpulsquantenzahlen den größeren Radius und werden daher zuerst druckionisiert. Diese Bevorzugung von Orbitalen mit hohem Drehimpuls bei hohem Druck wurde unter anderem von Meyer-ter-Vehn und Zittel anhand von Bandstrukturrechnungen für hochkomprimierte Materie beobachtet und diskutiert (Zittel 1986 [99], Meyer-ter-Vehn und Zittel 1988 [100]).

An dieser Stelle wird auf Ergebnisse des Abschnitts 3.5.1 vorgegriffen und in Abb. 3.6 der Ionisationsgrad für ein Goldplasma der Temperatur $T_e = 200 \text{ eV}$ und $T_e = 10 \text{ eV}$ in Abhängigkeit von der Dichte gezeigt. Dargestellt sind der Ionisationsgrad, der aus dem Modell der vorliegenden Arbeit mit und ohne Nichtidealitätseffekte resultiert, und die Werte aus dem bei hohen Dichten gültigen THOMAS-FERMI-Modell, die einer analytischen Anpassungsformel von More (1981 [93]) entnommen wurden. Der Parameter der Kontinuumsabsenkung wurde $\tau = 0.95$ gesetzt. Mit dieser Wahl ist mit Nichtidealitätseffekten eine gute Übereinstimmung mit den Ergebnissen des THOMAS-FERMI-Modells festzustellen, ohne Nichtidealitätseffekte tritt selbst bei Dichten weit oberhalb der Festkörperdichte keine merkliche Ionisation auf. Der Parameter ϵ ist hinreichend klein zu wählen, damit der Ionisationsgrad nicht durch Vernachlässigung wichtiger Zustände beeinflusst wird, aber auch nicht zu klein, um den numerischen Aufwand zu reduzieren. Im Programm SAPHIR ist ϵ frei wählbar, alle Beispiele der vorliegenden Arbeit wurden mit $\epsilon = 10^{-3}$ gerechnet. Das THOMAS-FERMI-Modell ist nicht in der Lage, die Schalenstruktur der Ionen zu erfassen, während im Modell der vorliegenden Arbeit ausgeprägte Stufen im Ionisationsgrad z^* zu erkennen sind, die auf Schalenabschlüsse zurückzuführen sind. Besonders die heliumähnliche ($z_I = 77$) und neonähnliche ($z_I = 69$) Konfiguration sind über einen weiten Dichtebereich sehr stabil. Die Konfiguration mit Ladungszustand $z_I = 51$ ist ebenfalls sehr stabil, da bei hochionisiertem Gold die Niveaus in der wasserstoffähnlichen Reihenfolge aufgefüllt werden, so daß alle Schalen bis $n = 3$ vollständig bestetzt sind, während im Falle neutraler Elemente die $4s$ -Unterschale vor der $3d$ -Unterschale gefüllt wird. Die kleine Stufe bei $z^* = 33$

⁶Überraschenderweise machen Zimmerman und More in ihrem Artikel keine Angaben für $\tilde{\alpha}$ und $\tilde{\beta}$, erst Tsakiris und Eidmann (1987 [98]) veröffentlichten Zahlenwerte, jedoch finden sich in dem Report von Pollak die von More gewählten Werte.

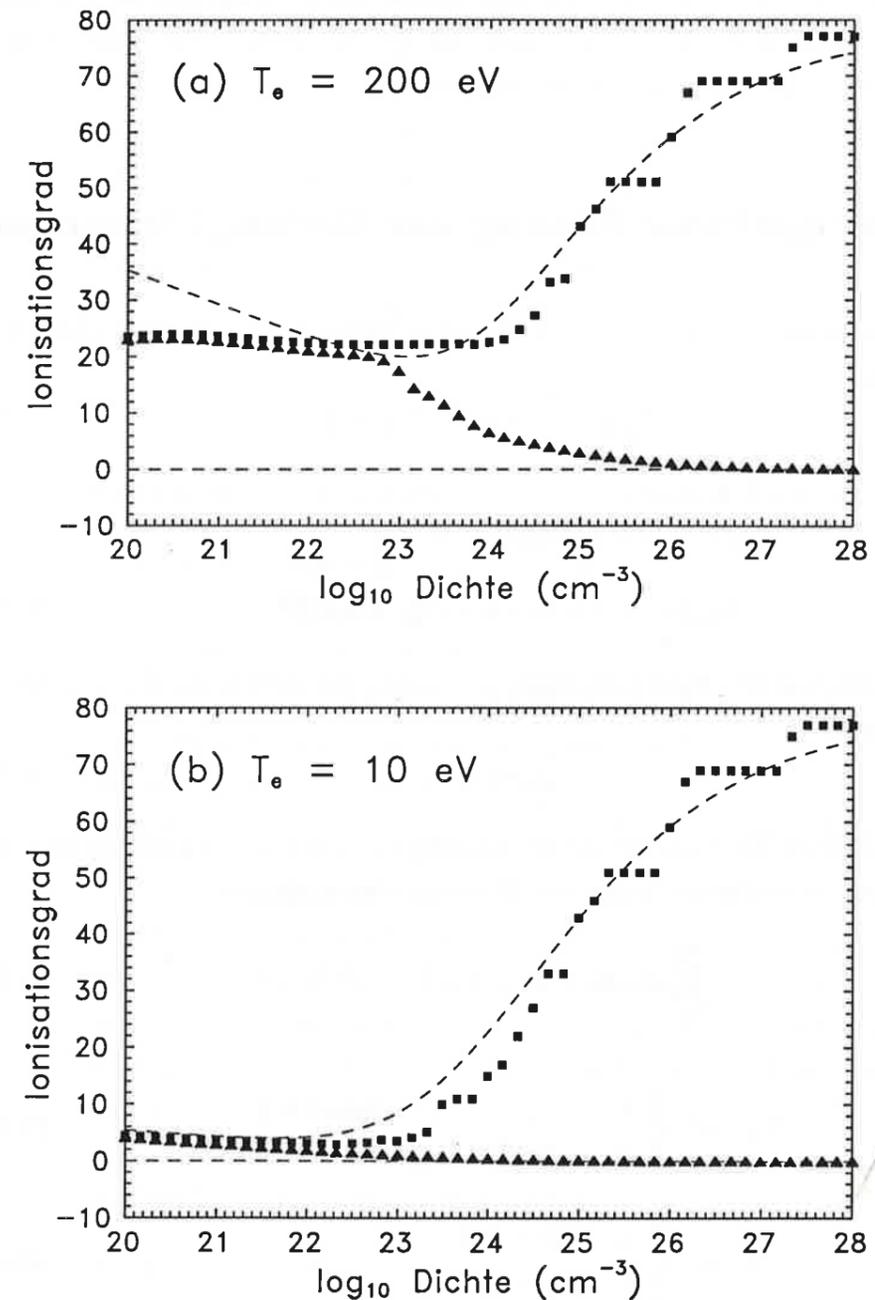


Abb. 3.6: Ionisationsgrad eines Goldplasmas der Temperatur (a) $T_e = 200 \text{ eV}$ und (b) $T_e = 10 \text{ eV}$ in Abhängigkeit von der Dichte. Die gestrichelte Linie stellt die Resultate des THOMAS-FERMI-Modells (More 1981 [93]) dar. Die Ergebnisse mit Nichtidealitätseffekten sind durch Quadrate und die ohne diese Effekte durch Dreiecke gekennzeichnet.

tritt nur bei Berücksichtigung der ℓ -Aufspaltung auf, da in diesem Fall alle Niveaus bis zur $4d$ -Unterschale besetzt sind. Besonders zu erwähnen ist, daß auch die Unabhängigkeit des Ionisationsgrads von der Temperatur für hohe Dichten ($n_i > 5 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$) richtig beschrieben wird.

3.4 Numerische Lösung der Ratengleichungen

Die Gesamtraten $U_{k,l}$ und $U_{l,k}$ im stationären Ratengleichungssystem Gl. (3.7) und Gl. (3.8)

$$\sum_l U_{k,l} n_l - n_k \sum_l U_{l,k} = 0 \quad (3.72)$$

setzen sich aus den Einzelraten aller oben beschriebenen Prozesse zusammen, die zwischen den Zuständen k und l erlaubt sind, d.h.

$$U_{l,k}(n_e, T_e) = R_{k,l} + n_e C_{k,l}^e + n_e C_{k,l}^{DR} \quad (3.73)$$

Die Teilchenerhaltung wird berücksichtigt, indem die Gleichung für den ersten Zustand durch

$$\sum_k n_k = n_i \quad (3.74)$$

ersetzt wird, wodurch auch die triviale Lösung ($n_k = 0 \forall k$) ausgeschlossen wird. In kompakter Schreibweise lautet das Ratengleichungssystem

$$\sum_{k=1}^{NK} \mathcal{U}_{l,k} n_k = b_l, \quad l = 1, \dots, NK, \quad (3.75)$$

$$\mathcal{U}_{l,k} = \begin{cases} 1 & \text{falls } l = 1 \\ U_{l,k} - \delta_{l,k} \sum_m U_{m,l} & \text{sonst} \end{cases}, \quad (3.76)$$

$$b_l = \begin{cases} n_i & \text{falls } l = 1 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}, \quad (3.77)$$

wobei über alle NK Zustände zu summieren ist. Bei einem vorgegebenen Wert für die Elektronendichte können die Raten bestimmt werden, und man erhält die Häufigkeiten n_k der Zustände durch Invertierung der Matrixgleichung (3.75). Die so berechneten Häufigkeiten erfüllen im allgemeinen *nicht* die Ladungserhaltung,

es muß daher nach einem konsistenten Wert der Elektronendichte iterativ gesucht werden. Dazu wird die Nullstelle der Funktion

$$f(n_e, T_e) = \sum_k i_k n_k - n_e \quad (3.78)$$

bestimmt, was ein hochgradig nichtlineares Problem ist, da die Raten und auch die Anzahl NK der Zustände durch die Nichtidealitätseffekte in komplizierter Weise von der Elektronendichte abhängen. Dennoch kann bei Verwendung des NEWTON-RAPHSON-Verfahrens (Press *et al.* 1986 [101]) in fast allen Fällen bereits mit wenigen Iterationsschritten (≈ 10) die Konvergenz erreicht werden.

Zur Matrixinversion einer Gleichung der Form $\mathbf{U} \times \mathbf{n} = \mathbf{b}$ stehen mehrere numerische Verfahren zur Verfügung, die im Programm SAPHIR gewählt werden können.

- GAUSS-JORDAN-Algorithmus mit Pivotwahl

Dieser Algorithmus ist auch bei großen Matrizen sehr stabil, er benötigt jedoch bis zu dreimal längere Rechenzeit als verfeinerte Methoden. Dennoch wurde diese Option im Programm SAPHIR eingebaut, um bei Konvergenzproblemen während der iterativen Suche nach der Elektronendichte, die in Zusammenhang mit der Lösung des Ratengleichungssystems stehen könnten, eine Testmöglichkeit zu besitzen (Press *et al.* 1986 [101], S.24).

- „Singular Value“ Zerlegung

Diese Methode wird verwendet, wenn die Matrix schlecht konditioniert ist, das heißt das Verhältnis des kleinsten Matrixelements zum größten Matrixelement kleiner ist als die numerische Rechengenauigkeit. Dies kann bei den anderen hier beschriebenen Verfahren aufgrund von Rundungsfehlern zu einer ungenauen Lösung oder zu einer singulären Matrix \mathbf{U} führen. In diesem Falle kann durch die „Singular Value“ Zerlegung die Lösung – auch für singuläre Matrizen – verbessert werden (Press *et al.* 1986 [101], S.52).

- „Lower-Upper“ Zerlegung

Als Standardmethode im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde diese Methode gewählt, bei der die Matrix \mathbf{U} mit Hilfe des CROUT-Algorithmus in ein Produkt aus einer unteren Dreiecksmatrix (lower) und einer oberen Dreiecksmatrix (upper) zerlegt wird. Gegenüber dem GAUSS-JORDAN-Algorithmus kann eine um einen Faktor 3 verringerte Rechenzeit erreicht

werden. Dieses Verfahren wurde bei den im Rahmen dieser Arbeit durchgeführten Berechnungen für Matrizen mit bis zu 1000 Zeilen und Spalten benutzt, wobei keine numerische Schwierigkeiten auftraten (Press *et al.* 1986 [101], S.31, The Numerical Algorithms Group 1990 [102], Unterprogramm F04ARF)

Da die Matrix U wegen der sehr unterschiedlichen Raten im allgemeinen bei einfacher Genauigkeit nicht gut konditioniert ist, erfordern alle hier beschriebenen Methoden bei 32bit-Fließkomma-Arithmetik doppelte Genauigkeit bei der Berechnung der Matrixelemente und der Invertierung der Matrix.

3.5 Resultate

In diesem Abschnitt werden einige Ergebnisse für den Ionisationsgrad und für die Verteilung auf die verschiedenen Ionisationsstufen anhand der Elemente Aluminium, Eisen und Gold diskutiert. Diese Elemente wurden ausgewählt, da sie oftmals in Experimenten verwendet werden, und die hier dargestellten Resultate auch zur Interpretation und Planung von Experimenten nützlich sind. Es sei an dieser Stelle noch einmal darauf hingewiesen, daß bei allen Resultaten die vom Strahlungsfeld abhängigen Raten vernachlässigt wurden.

3.5.1 Ionisationsgrad

Der Ionisationsgrad in Abhängigkeit von der Teilchendichte für verschiedene dem Experiment zugängliche Temperaturen ist in Abb. 3.7 bis Abb. 3.9 dargestellt. Obwohl große Unterschiede im Betrag des Ionisationsgrads auftreten, zeigen alle Beispiele den gleichen qualitativen Verlauf. Bei niedrigen Teilchendichten ist der Ionisationsgrad unabhängig von der Teilchendichte, da hier nur die Elektronenstoßionisation aus dem Grundzustand, die strahlende Rekombination und die dielektronische Rekombination eine Rolle spielen, die alle proportional zur Elektronendichte sind, so daß sich diese bei Aufstellung der Ratengleichungen herauskürzen. Angeregte Zustände beeinflussen den Ionisationsgrad nicht, da die

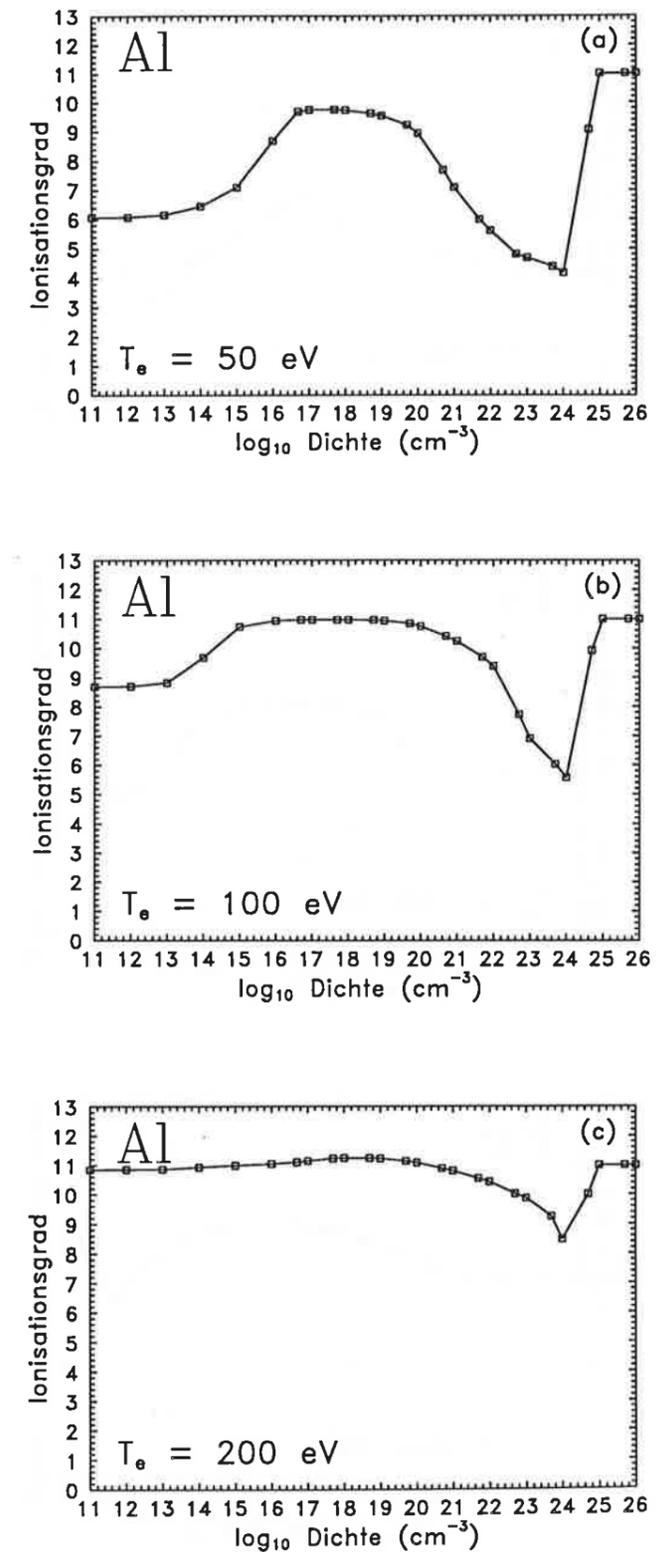


Abb. 3.7: Ionisationsgrad eines Aluminiumplasmas der Temperatur (a) $T_e = 50 \text{ eV}$, (b) $T_e = 100 \text{ eV}$ und (c) $T_e = 200 \text{ eV}$ in Abhängigkeit von der Dichte.

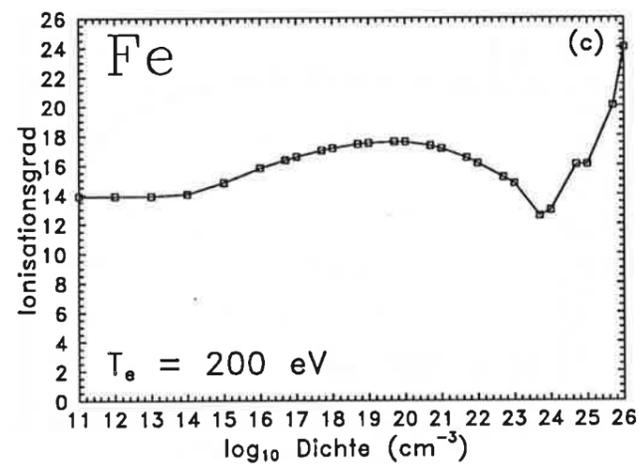
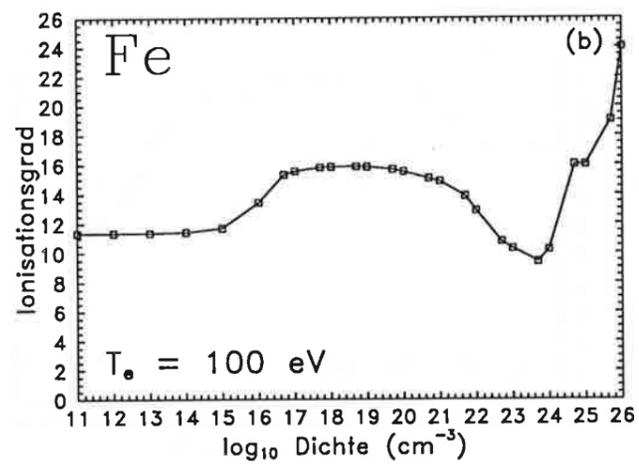
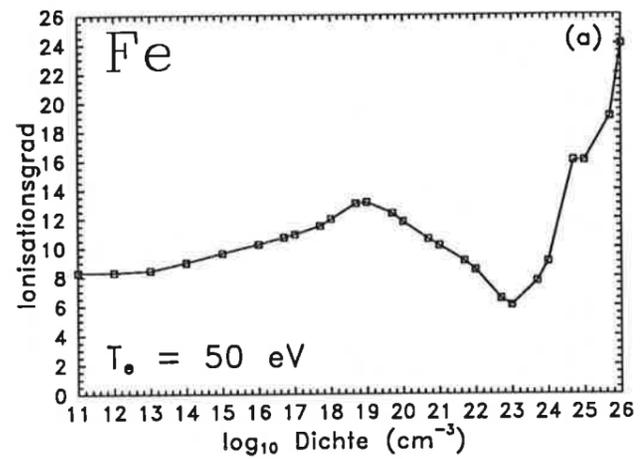


Abb. 3.8: Ionisationsgrad eines Eisenplasmas der Temperatur (a) $T_e = 50 \text{ eV}$, (b) $T_e = 100 \text{ eV}$ und (c) $T_e = 200 \text{ eV}$ in Abhängigkeit von der Dichte.

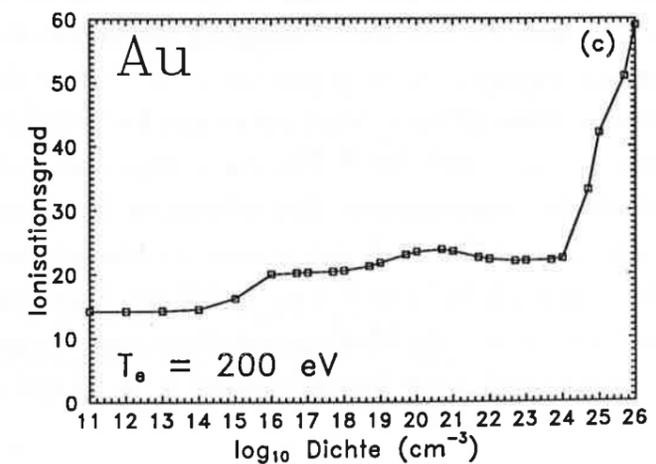
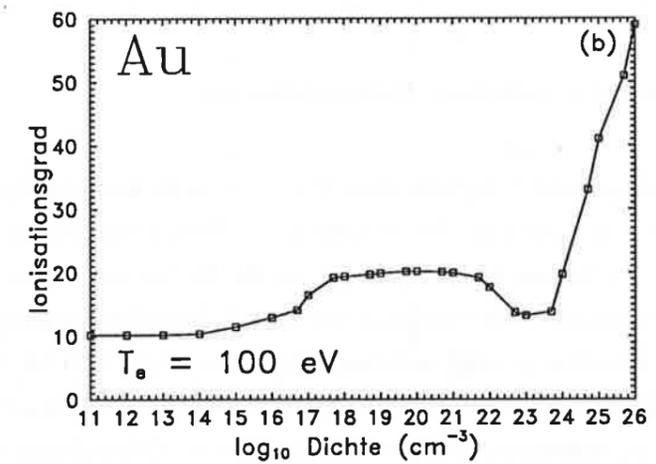
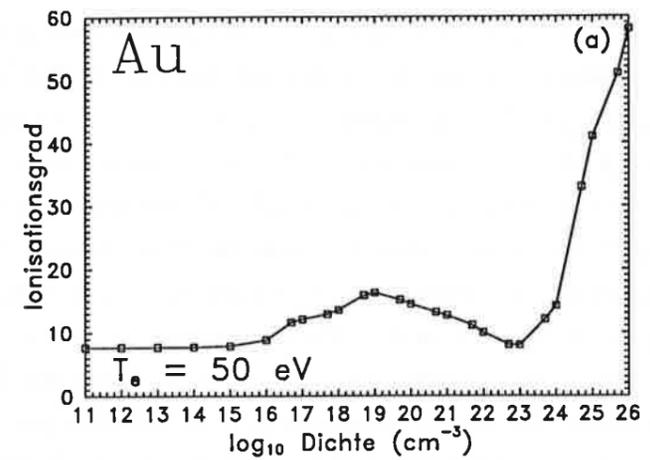


Abb. 3.9: Ionisationsgrad eines Goldplasmas der Temperatur (a) $T_e = 50 \text{ eV}$, (b) $T_e = 100 \text{ eV}$ und (c) $T_e = 200 \text{ eV}$ in Abhängigkeit von der Dichte.

Elektronenstoßanregung aufgrund der niedrigen Dichte gegenüber der strahlenden Abregung klein ist, und daher die angeregten Zustände nur schwach besetzt sind. Dieses Gleichgewicht wird als Korona-Gleichgewicht bezeichnet, da es unter anderem die Verhältnisse in der Sonnenkorona beschreibt. Mit steigender Teilchendichte werden auch die angeregten Zustände durch Elektronenstoßanregung besetzt, die dann leichter zu ionisieren sind, was zu einem ansteigenden Ionisationsgrad führt. Nach Erreichen eines maximalen Werts sinkt der Ionisationsgrad wieder, da dann die Dreikörperrekombination, die dem Quadrat der Elektronendichte proportional ist, der dominierende Rekombinationsmechanismus ist. Dies ist der Bereich des LTE, in dem die Strahlungsraten gegenüber den Stoßraten vernachlässigbar sind. Wie bereits besprochen, folgt dann ein Bereich in dem Nichtidealitätseffekte (Kontinuumsabsenkung, Druckionisierung) zu einem Ansteigen des Ionisationsgrads führen, der dann bei sehr hohen Dichten unabhängig von der Temperatur wird.

Einfluß der dielektronischen Rekombination

Im Koronagleichgewicht liefert die dielektronische Rekombination einen wichtigen Beitrag zur Festlegung des Ionisationsgrads. Dies wurde erstmals von Burgess (1964 [103]) für die Sonnenkorona gezeigt, wo die Diskrepanz zwischen gemessener und berechneter Ionisationsverteilung erst durch Berücksichtigung der dielektronischen Rekombination geklärt werden konnte. In Abb. 3.10 ist der Ionisationsgrad für Eisen und Gold mit und ohne dielektronische Rekombination dargestellt. Es ist deutlich zu erkennen, daß die dielektronische Rekombination einen erheblichen Einfluß auf den Ionisationsgrad des Plasmas ausübt und keinesfalls vernachlässigt werden darf. Bei Eisen mit einer Temperatur von $T_e = 500 \text{ eV}$ ergibt sich im Korona-Gleichgewicht bei Berücksichtigung der dielektronischen Rekombination ein Ionisationsgrad $z^* \approx 16$ gegenüber $z^* \approx 19$ ohne diesen Rekombinationsmechanismus. Diese Differenz wird mit steigender Teilchendichte geringer und verschwindet für $n_i > 10^{18} \text{ cm}^{-3}$. Für ein Goldplasma mit $T_e = 500 \text{ eV}$ hingegen beeinflußt die dielektronische Rekombination den Plasmazustand bis zu Teilchendichten $n_i \approx 10^{23} \text{ cm}^{-3}$. Interessant ist hierbei das Absinken des Ionisationsgrads im Bereich $10^{16} \text{ cm}^{-3} < n_i < 10^{19} \text{ cm}^{-3}$, das durch die dielektronische Rekombination und die Elektronenstoßanregung verursacht wird. Im Korona-Gleichgewicht beträgt der Ionisationsgrad $z^* \approx 26$ und dielektronische

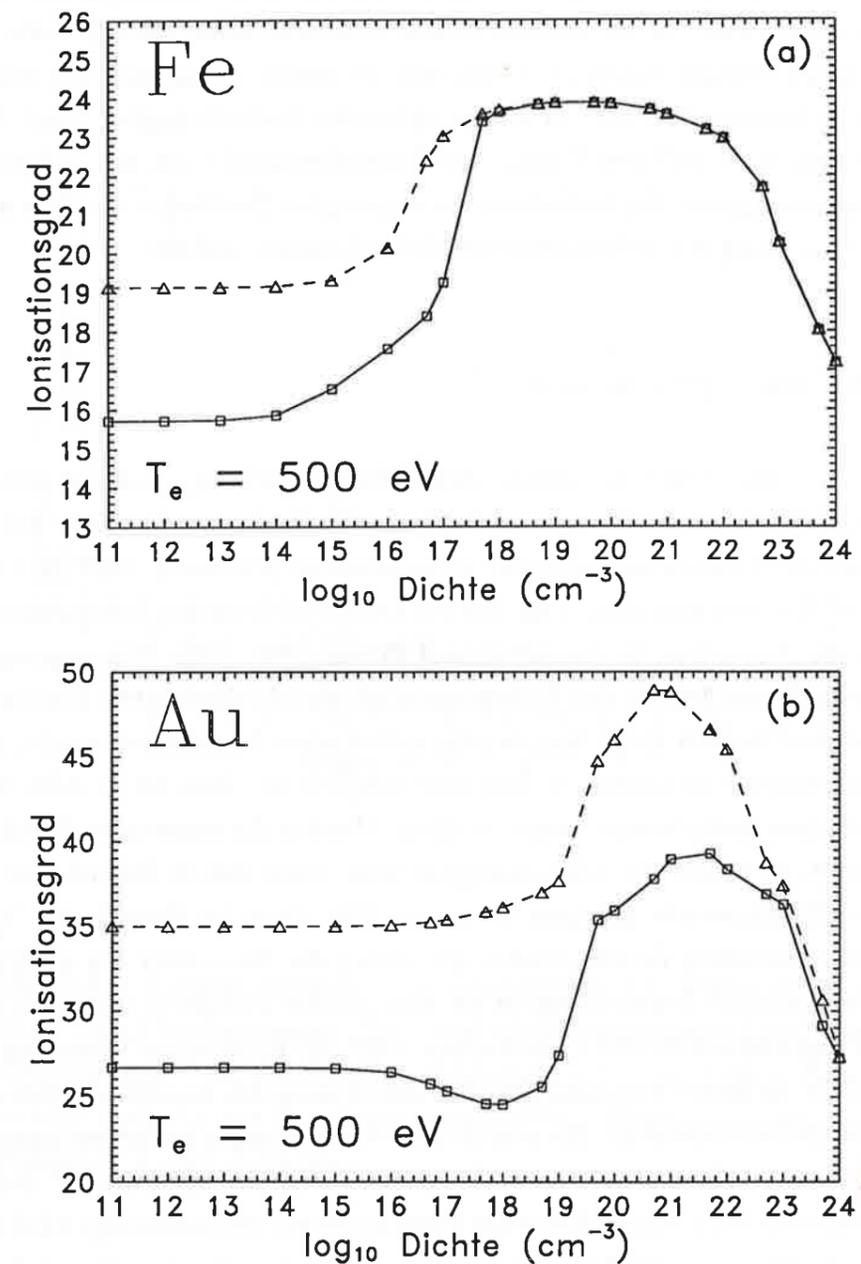


Abb. 3.10: Ionisationsgrad (a) eines Eisenplasmas und (b) eines Goldplasmas der Temperatur $T_e = 500 \text{ eV}$ (b) in Abhängigkeit von der Dichte mit (durchgezogene Linie) und ohne (gestrichelte Linie) dielektronische Rekombination.

Rekombination kann nur durch Anregung des Grundzustands erfolgen. Ab einer Teilchendichte $n_i \approx 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ werden durch Elektronenstoß angeregte Zustände besetzt, wodurch sich für die dielektronische Rekombination neue Kanäle der Anregung eines Rumpfelektrons ergeben, was zu einem Anwachsen der dielektronischen Rekombination und zu einem sinkenden Ionisationsgrad führt. Für Teilchendichten $n_i > 10^{19} \text{ cm}^{-3}$ steigt der Ionisationsgrad dann mit steigender Teilchendichte aufgrund der Ionisation aus angeregten Zuständen an, was auch bei Vernachlässigung der dielektronischen Rekombination auftritt.

Einfluß der angeregten Niveaus

Angeregte Niveaus werden in umfangreichen Ratengleichungsmodellen oftmals nur in einer inkonsistenten Weise berücksichtigt. Entweder werden diese bei der Bestimmung des Ionisationsgrads ganz vernachlässigt (Eidmann 1989 [5], MacFarlane 1989 [6]) oder man nimmt an, das Ion befinde sich vor der Rekombination bzw. nach der Ionisation im Grundzustand (Wang 1991 [63]). Die angeregten Niveaus beeinflussen jedoch den Ionisationsgrad, da aus angeregten Zuständen leichter ionisiert werden kann, was bereits weiter oben besprochen wurde, und auch Rekombination in angeregte Zustände möglich ist. Dies ist in Abb. 3.11 am Beispiel eines Goldplasmas veranschaulicht. Werden die angeregten Zustände vernachlässigt, so behält der Ionisationsgrad über einen weiten Bereich den für das Korona-Gleichgewicht gültigen Wert und fällt dann im Bereich des lokalen thermodynamischen Gleichgewichts ab, wobei der Grenzwert bei niedrigen Dichten der maximale Ionisationsgrad ist. Das gleiche Verhalten zeigen die mit Hilfe des Programms IONMIX (MacFarlane 1989 [6]) ermittelten Werte des Ionisationsgrads, da dieses Programm bei der Berechnung des Ionisationsgrads nur Grundzustände berücksichtigt. Die erheblichen Abweichungen im Ionisationsgrad im Vergleich zu den Resultaten der vorliegenden Arbeit beruhen darauf, daß in diesem Programm die l -Aufspaltung der Energieniveaus vernachlässigt wird und nur eine grobe Näherung für die dielektronische Rekombination benutzt wird, die für Elemente mit hohen Kernladungszahlen nicht zulässig ist.

Ein ganz anderes Verhalten erhält man, wenn die angeregten Niveaus in konsistenter Weise in das Ratengleichungsmodell eingebaut werden. Dies führt im Korona-Gleichgewicht zu einem niedrigeren Ionisationsgrad als ohne angeregte

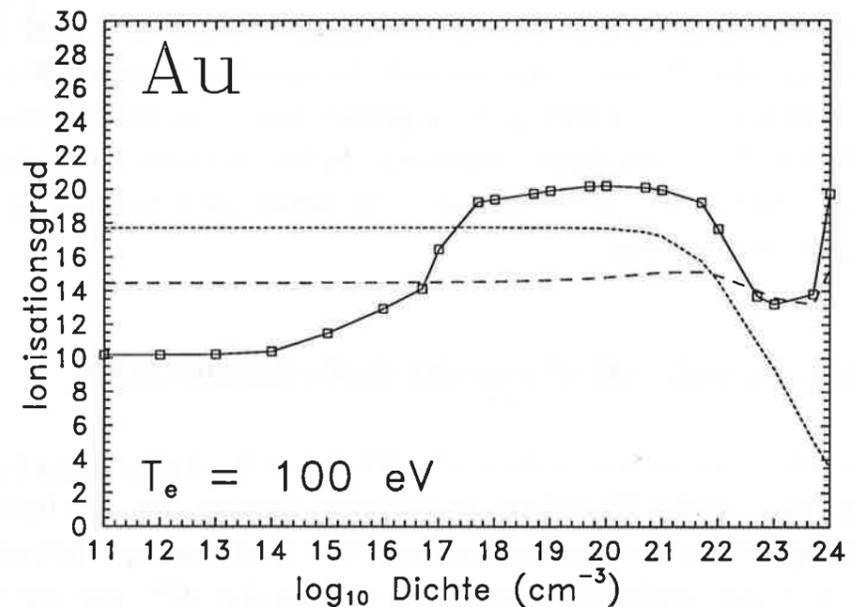


Abb. 3.11: Ionisationsgrad eines Goldplasmas der Temperatur $T_e = 100 \text{ eV}$ mit (durchgezogene Linie) und ohne (gestrichelte Linie) Berücksichtigung angeregter Zustände in Abhängigkeit von der Dichte. Zum Vergleich ist auch der aus dem Programm IONMIX folgende Ionisationsgrad (gepunktete Linie) abgebildet.

Zustände, da strahlende und dielektronische Rekombination in angeregte Niveaus möglich sind. Im Übergangsbereich zwischen dem Korona-Gleichgewicht und dem LTE-Bereich ergeben sich ebenfalls erhebliche Änderungen, da die Ionisation aus angeregten Zuständen einen großen Einfluß auf den Ionisationsgrad hat. Für Teilchendichte $n < 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ hat der Ionisationsgrad bei Vernachlässigung angeregter Zustände einen konstanten Wert $z^* \approx 14$. Mit konsistenter Berücksichtigung der angeregten Zustände variiert dieser Wert zwischen $z^* \approx 10$ und $z^* \approx 20$. Dies beeinflußt sowohl den Plasmazustand als auch die optischen Eigenschaften des Plasmas, so daß es nicht gerechtfertigt ist, angeregte Niveaus zu vernachlässigen. Eine ausführliche Diskussion dieses Sachverhalts ist beispielsweise für alkaliähnliche Ionen bei Mahn (1967 [104]) zu finden, der jedoch die ℓ -Aufspaltung der Energieniveaus vernachlässigt.

3.5.2 Häufigkeitsverteilung der Ladungszustände

Eine wichtiges Resultat stellt auch die relative Häufigkeit der verschiedenen Ionen dar, da diese einen großen Einfluß auf die optischen Eigenschaften des Plasmas hat. Ein Beispiel für ein Aluminiumplasma mit $T_e = 50 \text{ eV}$ und $n_i = 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ zeigt Abb. 3.12. Am häufigsten ist in diesem Fall das Ion Al^{7+} , und die Verteilung fällt zu beiden Seiten monoton ab. Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde aber auch ein nicht monotoner Verlauf der Kurve der relativen Häufigkeiten festgestellt, und ein Beispiel hierfür ist in Abb. 3.13 gegeben. Betrachtet man die Verteilung mit Berücksichtigung aller statistischen Gewichte (markiert durch Quadrate), so fällt eine sehr geringe Häufigkeit des Ions Au^{42+} und ein erneutes Ansteigen der Häufigkeiten für Ionen mit niedrigerer Ladungszahl auf. Dies wird verursacht durch die geringen statistischen Gewichte des Grundzustands und aller einfach angeregten Zustände des Ions Au^{42+} im Vergleich zu benachbarten Ionen. Dieses Ion besitzt im Grundzustand die Konfiguration $(4s)^2(4p)^6(4d)^1$ und alle inneren Niveaus sind vollständig aufgefüllt, die einfach angeregten Zustände erhält man durch Anheben des $4d$ -Elektrons in energetisch höhere Niveaus. Das statistische Gewicht einer gesamten Konfiguration entspricht damit der Entartung der Unterschale, in der sich das äußerste Elektron befindet, für den Grundzustand also $G = 10$. Für das Ion Au^{41+} lautet die Konfiguration des Grundzustands $(4s)^2(4p)^6(4d)^2$, womit sich ein statistisches Gewicht $G = 45$ ergibt. Erneut werden einfach angeregte Zustände durch Anheben eines $4d$ -Elektrons gebildet, deren

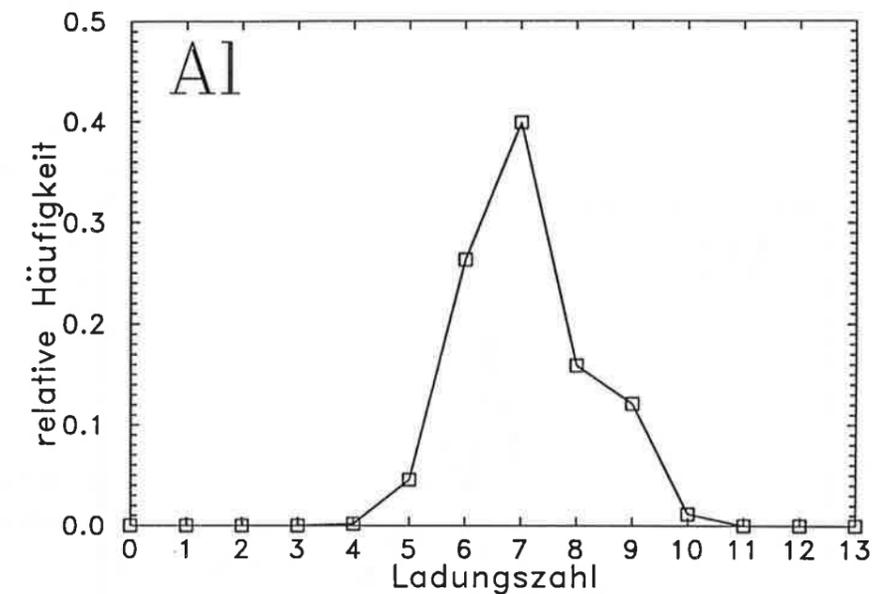


Abb. 3.12: Relative Häufigkeit der Ionisationszustände eines Aluminiumplasmas der Dichte $n_i = 10^{21} \text{ cm}^{-3}$ und der Temperatur $T_e = 50 \text{ eV}$.

gesamtes statistisches Gewicht ist aber durch das Produkt aus dem statistischen Gewicht des verbleibenden $4d$ -Elektrons und der Entartung in der äußersten besetzten Unterschale gegeben. Befinden sich in beiden Ionen das Leuchtelektron in der gleichen Unterschale, so beträgt das statistische Gewicht des angeregten Zustands im Ion Au^{41+} das Zehnfache des Werts im Ion Au^{42+} . Dies führt zu einer bevorzugten Besetzung des Ions mit der niedrigeren Ladungszahl. Zum Vergleich sind in Abb. 3.13 auch die Häufigkeiten dargestellt, wenn das Verhältnis aller statistischen Gewichte zu eins gesetzt wird, was in jedem Falle zum Verschwinden dieser lokalen Minima führt.

3.5.3 Zustandsgleichung

Ist die Häufigkeit der Ionisations- und Anregungszustände bekannt, kann auch die innere Energie \mathcal{E} und der Druck \mathcal{P} des Plasmas bestimmt werden. In der vorliegenden Arbeit werden bei der Bestimmung der Zustandsgleichung die Anteile

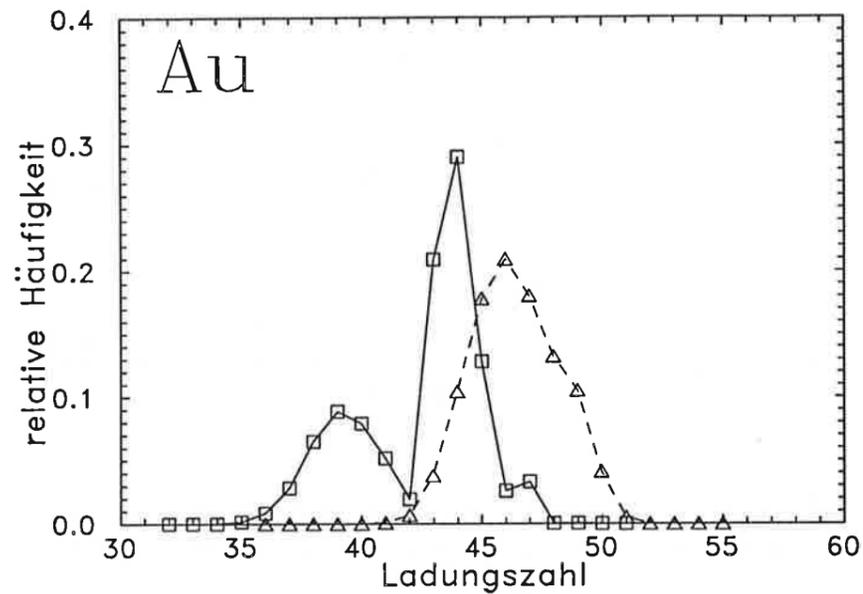


Abb. 3.13: Relative Häufigkeit der Ionisationszustände eines Goldplasma der Dichte $n_i = 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ und der Temperatur $T_e = 600 \text{ eV}$. Quadrate kennzeichnen die relativen Häufigkeiten mit Berücksichtigung der statistischen Gewichte und Dreiecke die relativen Häufigkeiten mit zu eins gesetzten statistischen Gewichten.

der Wechselwirkung zwischen den Ionen vernachlässigt, die für Dichten $n_i > 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ werden. Es wäre jedoch möglich, diese zu beschreiben (More *et al.* 1988 [105]), um den Dichtebereich gültigen Zustandsgleichungen dieser Arbeit nicht durchgeführt werden.

Die innere Energie ist durch die Summen der thermischen Energie der Ionen und der aufgewendeten Energie \mathcal{E}_{IA} gegeben

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_e + \mathcal{E}_{IA} \quad (3.79)$$

Die gespeicherte Energie \mathcal{E}_{IA} ist anhand der Rategleichungen einfach zu bestimmen, und der thermische Anteil wird durch den eines idealen Gases der Temperatur T_i (in eV) ersetzt

$$\mathcal{E}_i = 1.602 \times 10^{-19} \rho \left(\frac{3}{2} T_i \right) \quad (3.80)$$

Für den elektronischen Anteil wird der in der Entartung Rechnung getragen, indem die Elektronen als FERMI-Gas betrachtet werden. Einfache Formeln für die thermodynamischen Größen eines FERMI-Gases, die keine Berechnung von FERMI-Integralen erfordern, aber dennoch sehr genau sind, sind bei Basko (1985 [106]) zu finden. Wird die Temperatur T_e in eV, die Elektronendichte n_e in cm^{-3} und die Massendichte ρ in g/cm^3 angegeben, so gilt für das chemische Potential (in eV)

$$\mu(n_e, T_e) = 2Ry \left(\frac{1}{2} (3\pi^2 n_e a_0^3)^{2/3} + \frac{2Ry}{T_e} - \frac{3}{2} \ln \left(1 + \frac{1}{a\psi} \right) \right) \quad (3.81)$$

und für die inner Energie

$$\mathcal{E}_e = 1.602 \times 10^{-19} \frac{3Ry}{\rho a_0^3} \left[\frac{1}{5} (3\pi^2)^{2/3} (n_e a_0^3)^{5/3} + \frac{a_0^3 T_e}{2Ry} \frac{1}{1 + a\psi} \right] \quad (Jg^{-1}), \quad (3.82)$$

wobei

$$\psi = \frac{1}{2} (3\pi^2)^{2/3} \frac{2Ry}{T_e} \quad (3.83)$$

⁷In den gerechneten Werten dieser Arbeit wurde $T_i = T_e$ angenommen, in den Formeln wird jedoch zwischen den beiden Temperaturen unterschieden.

Elektronen und Ionen vernachlässigt, die für Dichten $n_i > 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ werden. Es wäre jedoch möglich, diese zu beschreiben (More *et al.* 1988 [105]), um den Dichtebereich gültigen Zustandsgleichungen dieser Arbeit nicht durchgeführt werden.

Die innere Energie ist durch die Summen der thermischen Energie der Elektronen und der aufgewendeten Energie \mathcal{E}_{IA} gegeben

$$\mathcal{E} = \mathcal{E}_e + \mathcal{E}_{IA} \quad (3.79)$$

Die gespeicherte Energie \mathcal{E}_{IA} ist anhand der Rategleichungen einfach zu bestimmen, und der thermische Anteil wird durch den eines idealen Gases der Temperatur T_i (in eV) ersetzt

$$\mathcal{E}_i = 1.602 \times 10^{-19} \rho \left(\frac{3}{2} T_i \right) \quad (3.80)$$

Für den elektronischen Anteil wird der in der Entartung Rechnung getragen, indem die Elektronen als FERMI-Gas betrachtet werden. Einfache Formeln für die thermodynamischen Größen eines FERMI-Gases, die keine Berechnung von FERMI-Integralen erfordern, aber dennoch sehr genau sind, sind bei Basko (1985 [106]) zu finden. Wird die Temperatur T_e in eV, die Elektronendichte n_e in cm^{-3} und die Massendichte ρ in g/cm^3 angegeben, so gilt für das chemische Potential (in eV)

$$\mu(n_e, T_e) = 2Ry \left(\frac{1}{2} (3\pi^2 n_e a_0^3)^{2/3} + \frac{2Ry}{T_e} - \frac{3}{2} \ln \left(1 + \frac{1}{a\psi} \right) \right) \quad (3.81)$$

und für die inner Energie

$$\mathcal{E}_e = 1.602 \times 10^{-19} \frac{3Ry}{\rho a_0^3} \left[\frac{1}{5} (3\pi^2)^{2/3} (n_e a_0^3)^{5/3} + \frac{a_0^3 T_e}{2Ry} \frac{1}{1 + a\psi} \right] \quad (Jg^{-1}), \quad (3.82)$$

wobei

$$\psi = \frac{1}{2} (3\pi^2)^{2/3} \frac{2Ry}{T_e} \quad (3.83)$$

⁷In den gerechneten Werten dieser Arbeit wurde $T_i = T_e$ angenommen, in den Formeln wird jedoch zwischen den beiden Temperaturen unterschieden.

und

$$a = 0.424665 \quad (3.84)$$

gilt. Die spezifische Wärme bei konstantem Volumen

$$c_V = \left(\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial T_e} \right)_V + \left(\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial T_i} \right)_V \quad (3.85)$$

erhält man durch numerisches Differenzieren, das heißt die innere Energie wird für zwei um ΔT verschiedene Temperaturen berechnet und der Differentialquotient durch den Differenzenquotienten ersetzt.

Zur Berechnung des Drucks werden die Ionen erneut als ideales Gas behandelt, womit für den Druck

$$\mathcal{P}_i = 1.602 \times 10^{-12} n_i T_i \quad (\text{dyn cm}^{-2}) \quad (3.86)$$

folgt. Der elektronische Anteil mit Berücksichtigung der Entartung lautet (Basko 1985 [106])

$$\mathcal{P}_e = 2.942 \times 10^{14} \left[\frac{1}{5} (3\pi^2)^{2/3} (n_e a_0^3)^{5/3} + \frac{n_e a_0^3 T_e}{2Ry} \frac{1}{1 + a\psi} \right] \quad (\text{dyn cm}^{-2}) \quad (3.87)$$

Die innere Energie und der Druck eines Goldplasmas in Abhängigkeit von der Teilchendichte bei verschiedenen Temperaturen sind in Abb. 3.14 und Abb. 3.15 dargestellt, wobei jedoch die Wechselwirkungsanteile zwischen den Ionen und zwischen Elektronen und Ionen nicht berücksichtigt sind. Es zeigt sich hierbei, daß erst für Dichten $n_i > 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ die Entartung der freien Elektronen wichtig wird. Bei den dargestellten Temperaturen ist der Anteil der Ionen zur inneren Energie gering gegenüber dem Anteil der Elektronen und dem Anteil, der in Ionisation und Anregung im Plasma gespeichert ist, was für $T_e = 100 \text{ eV}$ in der Abb. 3.16 veranschaulicht ist.

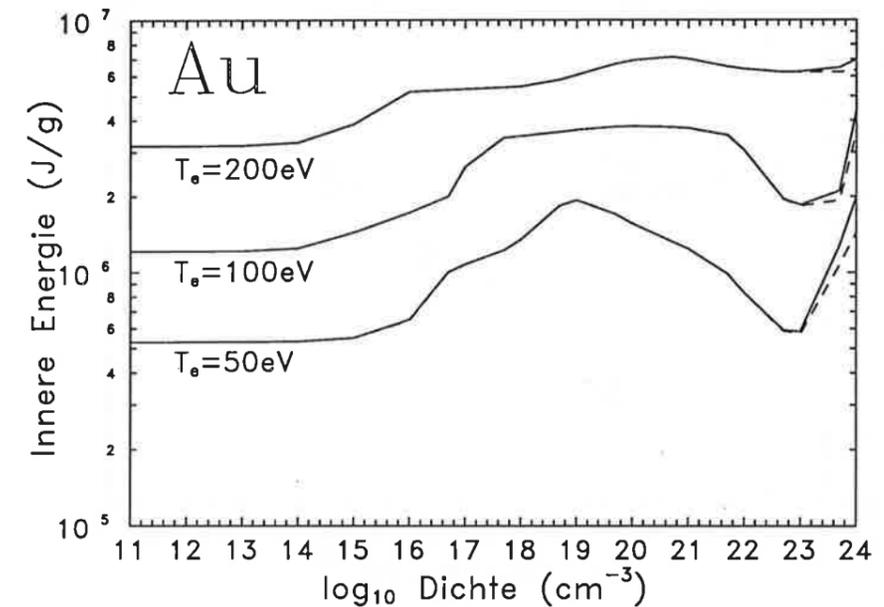


Abb. 3.14: Innere Energie eines Goldplasmas in Abhängigkeit von der Dichte bei verschiedenen Temperaturen mit (durchgezogene Linie) und ohne (gestrichelte Linie) Berücksichtigung der Entartung der freien Elektronen.

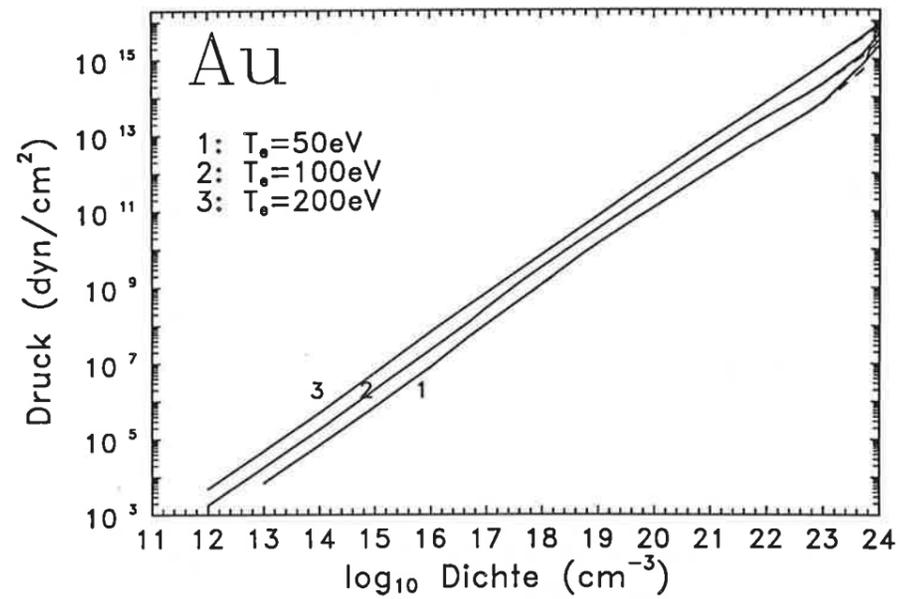


Abb. 3.15: Druck eines Goldplasmas in Abhängigkeit von der Dichte bei verschiedenen Temperaturen mit (durchgezogene Linie) und ohne (gestrichelte Linie) Berücksichtigung der teilweisen Entartung der freien Elektronen.

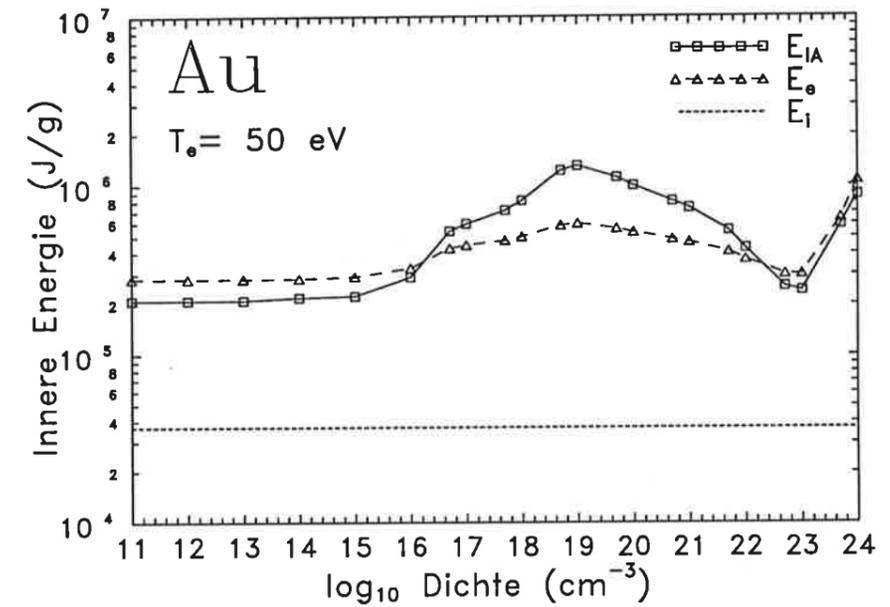


Abb. 3.16: Anteile der inneren Energie eines Goldplasmas der Temperatur $T_e = 100 \text{ eV}$ in Abhängigkeit von der Dichte mit Berücksichtigung der teilweisen Entartung der freien Elektronen.

Kapitel 4

Extinktions- und Emissionskoeffizienten

Gegenstand dieses Kapitels ist die Berechnung des Extinktions- und Emissionskoeffizienten für ein Plasma, dessen Verteilung der Ionisations- und Anregungszustände bekannt ist. Die hierfür verwendeten Modelle und Methoden sind nicht nur im Zusammenhang mit dem in Kapitel 3 besprochenen Ratengleichungsmodell sondern universell – bei Kenntnis der Häufigkeitsverteilung – anwendbar. Es werden in dieser Arbeit nur atomare Prozesse und THOMSON-Streuung betrachtet, was den möglichen Temperaturbereich auf $1 \text{ eV} \leq T \leq 10 \text{ keV}$ einschränkt. Bei niedrigeren Temperaturen sind Rotations- und Vibrationsanregungen von Molekülen wichtig, bei höheren Temperaturen tragen auch nukleare Prozesse, Photon-Photon-Streuung und COMPTON-Effekt zur Extinktion und Emission bei. Bei der Berechnung dieser Koeffizienten wird der Einfluß der Plasmaumgebung auf die atomaren Größen und die Aufspaltung der Niveaus nach dem Gesamtdrehimpuls $j = l + s$ berücksichtigt. Diese Aufspaltung konnte bisher vernachlässigt werden, weil durch thermische Elektronen nur die äußeren Niveaus beeinflusst wurden, für die die j -Aufspaltung gering ist. Es soll jedoch im folgenden der Extinktionskoeffizient auch für hohe Photonenenergien (keV) bestimmt werden, bei denen die Absorption durch Elektronen in innere Schalen eine Rolle spielt, so daß die j -Aufspaltung berücksichtigt werden muß. Hierzu wird in Abschnitt 4.1 die Bestimmung der Häufigkeiten der (n, ℓ, j) -Zustände gezeigt, das parametrisierte Potential (Gl. (2.4)) erweitert (4.2), die Lösung der

DIRAC-Gleichung für dieses Modellpotential skizziert, und die Verwendung der daraus folgenden Energien und Wellenfunktionen zur Berechnung der Wirkungsquerschnitte für Übergänge zwischen gebundenen Zuständen (4.3) und zwischen gebundenen Zuständen und Kontinuumszuständen (4.4) behandelt. Im Anschluß daran werden die Übergänge zwischen Kontinuumszuständen (4.5), die Streuung von Photonen (4.6) und im letzten Abschnitt die Bildung der Extinktions- und Emissionskoeffizienten besprochen.

4.1 Häufigkeiten der (n, ℓ, j) -Zustände

In Kapitel 3 wurde die Häufigkeit der Zustände nur in Abhängigkeit von den Quantenzahlen n und ℓ berechnet, d.h. die Aufspaltung durch die Spin-Bahn-Kopplung (Quantenzahl j) wurde vernachlässigt. Bei der Bestimmung der Extinktions- und Emissionskoeffizienten soll diese jedoch berücksichtigt werden, was unter der Annahme einer Gleichgewichtsverteilung der zu einem $n\ell$ -Orbital gehörenden relativistischen Niveaus mit $j = \ell \pm 1/2$ (Orbitale mit $\ell = 0$ zeigen keine Aufspaltung) möglich ist. Diese Annahme ist gerechtfertigt, wenn die Energieaufspaltung zwischen den Zuständen nicht viel größer als die Elektronentemperatur ist – was für die Zwecke dieser Arbeit gut erfüllt ist –, da dann durch Stöße mit den Elektronen die Häufigkeiten eine thermische Gleichgewichtsverteilung erreichen. Im thermodynamischen Gleichgewicht gilt für die Häufigkeiten $n_{n,\ell,j}$ die BOLTZMANN-Verteilung

$$\frac{n_{n,\ell,j=\ell+1/2}}{n_{n,\ell,j=\ell-1/2}} = \frac{g_{j=\ell+1/2}}{g_{j=\ell-1/2}} \exp\left(-\frac{\Delta E}{T_e}\right), \quad (4.1)$$

wobei die statistischen Gewichte g_j und die Energiedifferenz ΔE zwischen den beiden Zuständen benötigt werden. Die Gesamthäufigkeit muß erhalten bleiben

$$n_{n,\ell,j=\ell+1/2} + n_{n,\ell,j=\ell-1/2} = n_{n,\ell}, \quad (4.2)$$

womit sich für die Häufigkeiten

$$n_{n,\ell,j=\ell-1/2} = n_{n,\ell} \left(\frac{g_{j=\ell+1/2}}{g_{j=\ell-1/2}} \exp\left(-\frac{\Delta E}{T_e}\right) + 1 \right)^{-1} \quad (4.3)$$

$$n_{n,\ell,j=\ell+1/2} = n_{n,\ell} \left(1 + \left(\frac{g_{j=\ell+1/2}}{g_{j=\ell-1/2}} \exp\left(-\frac{\Delta E}{T_e}\right) \right)^{-1} \right)^{-1} \quad (4.4)$$

ergibt. Befindet sich nur ein Elektron in der $n\ell$ -Unterschale, entspricht das Verhältnis der statistischen Gewichte der beiden $n\ell j$ -Zustände dem Verhältnis der Entartungen der Niveaus. Ist vor Berücksichtigung der j -Aufspaltung die Unterschale mit mehr als einem Elektron besetzt, müssen die statistischen Gewichte der beiden Zustände gesondert berechnet werden. Ein Zustand mit p Elektronen in der $n\ell$ -Unterschale $((n\ell)^p)$ spaltet in zwei Zustände mit $(n, \ell, j\{=\ell-1/2\})^p$ und $(n, \ell, j\{=\ell+1/2\})^{p-1}$ auf. Die Besetzung aller anderen Niveaus bleibt unverändert, so daß diese nicht berücksichtigt werden müssen, wenn das Verhältnis der statistischen Gewichte der beiden Zustände bestimmt wird, womit sich ergibt

$$\frac{g_{j=\ell+1/2}}{g_{j=\ell-1/2}} = \frac{(2(\ell+1/2)+1) \binom{2(\ell-1/2)+1}{p-1}}{\binom{2(\ell-1/2)+1}{p}}. \quad (4.5)$$

Kann das Niveau mit $j = \ell - 1/2$ nur mit q Elektronen ($q < p$) besetzt werden, entspricht dem nichtrelativistischen Zustand mit $(n\ell)^p$ nur ein relativistischer Zustand mit $(n\ell j = \ell - 1/2)^q (n\ell j = \ell + 1/2)^{p-q}$.

4.2 Lösung der Dirac-Gleichung im Modellpotential

Befindet sich ein Ion mit der Ladung Z_I in einem Plasma, ändert sich das Potential gegenüber dem eines isolierten Ions. Die für niedrige Dichte geltende DEBYE-HÜCKEL-Theorie zeigt, daß zur Beschreibung des Ions im Plasma das COULOMB-Potential durch ein abgeschirmtes DEBYE-HÜCKEL-Potential zu ersetzen ist. Diese Theorie ist aber für hohe Dichten, bei denen sich nur wenige Teilchen in der DEBYE-Kugel befinden, nicht anwendbar, obwohl in diesem Falle die größten Änderungen zu erwarten sind. Bei hohen Dichten ist das Modell des homogenen Elektronengases anwendbar, das die Absenkung des Kontinuums und die Verschiebung der Linien qualitativ richtig beschreibt, bei niedriger Elektrodichte aber keine korrekte Beschreibung der Nichtidealitätseffekte erlaubt. Dies zeigte zum Beispiel Skupsky (1980 [4]) für wasserstoffähnliche Ionen in dichten Plasmen. Dennoch wird dieses Modell verwendet, da bei niedriger Elektrodichte nur kleine Veränderungen zu erwarten sind, die im Rahmen eines einfachen Modells unerheblich sind. Abweichungen von der homogenen Elektronen-

dichte wurden im Rahmen des *average-atom*-Modells von Rozsnyai (1972 [107]) betrachtet, indem er die freien Elektronen in der THOMAS-FERMI-Näherung mit einem selbstkonsistenten Potential beschreibt, das vom Kern, den gebundenen und den freien Elektronen gebildet wird. Dieses Verfahren ist bei Betrachtung der einzelnen Ionisations- und Anregungszustände jedoch numerisch zu aufwendig, was eine Verwendung für die Zwecke der vorliegenden Arbeit ausschließt.

Betrachtet man ein Ion der Ladung Z_I , das sich im Plasma mit homogener Elektronendichte n_e befindet, wird das Kernpotential zusätzlich durch die freien Elektronen abgeschirmt, wodurch eine Veränderung der Bindungsenergien und der Wellenfunktionen der Elektronen hervorgerufen wird. Im Rahmen des Modells unabhängiger Teilchen ist die relevante Größe nicht die Ladung des Ions sondern die Rumpfladung $Z_c = Z_I + 1$, da diese das asymptotische Verhalten des Potentials bestimmt. Innerhalb der Ionensphäre, die nach außen elektrisch neutral ist, befinden sich daher Z_c freie Elektronen. Der Radius dieser Ionensphäre ist durch die Beziehung

$$\frac{4\pi}{3}(R_0 a_0)^3 n_e = Z_c \quad (4.6)$$

gegeben¹, und das elektrostatische Potential der freien Elektronen lautet (Greiner 1986 [108], Seite 42)

$$V_e = \begin{cases} \frac{Z_c}{2R_0} \left[3 - \left(\frac{r}{R_0} \right)^2 \right] & \text{für } r < R_0 \\ \frac{Z_c}{r} & \text{für } r \geq R_0 \end{cases} \quad (4.7)$$

Üblicherweise wird die Veränderung der Energieniveaus in Störungsrechnung erster Ordnung mit wasserstoffähnlichen Wellenfunktionen behandelt, wobei für Mehrelektronensysteme eine effektive Kernladungszahl eingeführt wird, um die Abweichung vom COULOMB-Potential zu beschreiben (Mayer 1947 [109], Pomraning 1973 [110]). Zur Beschreibung von Linienverschiebungen wasserstoffähnlicher Ionen in dichten Plasmen löst Skupsky aber numerisch die SCHRÖDINGER-Gleichung mit einem Potential, das aus dem COULOMB-Potential des Kerns und dem Potential V_e der freien Elektronen gebildet wird.² Eine Erweiterung dieses Modells für Mehrelektronensysteme und eine relativistische Beschreibung wird

¹Der Ionensphärenradius R_0 (in Einheiten a_0) darf nicht mit dem im Kapitel 3 definierten Ionensphärenradius r_0 verwechselt werden. Letzterer hängt nur von der Gesamtdichte der Ionen ab, aber R_0 wird durch die Ladung des Ions und die Dichte der freien Elektronen bestimmt.

²Skupsky diskutiert auch noch ein selbstkonsistentes Modell, in dem die freien Elektronen eine BOTZMANN-Verteilung besitzen (siehe auch Nguyen *et al.* 1984 [111]).

erstmalig in der vorliegenden Arbeit durchgeführt, indem das Potential V_e zum parametrisierten Potential der isolierten Ionen (Gl. (2.4)) addiert wird. Für das Modellpotential V ergibt sich damit

$$V(r) = \begin{cases} \frac{1}{r} \left((Z_c - Z) \left(H \left(\exp\left(\frac{r}{d}\right) - 1 \right) + 1 \right)^{-1} - Z_c \right) \\ \quad + \frac{Z_c}{2R_0} \left[3 - \left(\frac{r}{R_0} \right)^2 \right] & \text{für } r < R_0 \\ 0 & \text{für } r \geq R_0 \end{cases} \quad (4.8)$$

Der erste Term in der eckigen Klammer ist für alle gebundenen Elektronen gleich und führt zu einer Verschiebung der Kontinuumschance. Die Änderung der Übergangsenergien zwischen gebundenen Zuständen wird durch den zweiten Term hervorgerufen, der wegen der Abhängigkeit vom Radius r für verschiedene Niveaus unterschiedlich ist. Durch Berücksichtigung der freien Elektronen in der Ionensphäre wird aus dem parametrisierten Potential mit unendlicher Reichweite ein Potential, das für Abstände $r \geq R_0$ verschwindet. Die Einteilchenbindungsenergien und die Wellenfunktionen sowohl für gebundene Zustände als auch für Kontinuumszustände erhält man durch Lösung der DIRAC-Gleichung mit dem Modellpotential, das über den Ionensphärenradius R_0 eine Abhängigkeit von der Elektronendichte besitzt. Da dieses Modellpotential nur eine endliche Reichweite besitzt, ist die Anzahl der gebundenen Zustände beschränkt, d.h. durch den Einfluß des Plasmas werden hoch angeregte, gebundene Zustände zerstört. Im Grenzfall $n_e \rightarrow 0$ reduziert sich das Modellpotential auf das parametrisierte Potential, das zur Beschreibung des isolierten Ions in Kapitel 2 verwendet wurde.

Die zeitunabhängige Dirac-Gleichung lautet in atomaren Einheiten

$$[c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \beta c^2 + V(\mathbf{r})] \Phi_{n\kappa\mu}(\mathbf{r}) = E \Phi_{n\kappa\mu}(\mathbf{r}) \quad (4.9)$$

wobei $\boldsymbol{\alpha}$ und β die DIRAC-Matrizen, \mathbf{p} der Impuls, \mathbf{r} der Ortsvektor und c die Vakuumlichtgeschwindigkeit sind. Für zentralsymmetrische Potentiale $V(\mathbf{r}) = V(r)$ kann diese mit dem Ansatz für die relativistische Wellenfunktion

$$\Phi_{n\kappa\mu}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} i(F_{n\kappa}/r)\chi_{\kappa}^{\mu} \\ (G_{n\kappa}/r)\chi_{-\kappa}^{\mu} \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

in eine radiale DIRAC-Gleichung umgeformt werden, die nur noch vom Abstand r vom Ursprung abhängt (Rose 1971 [112])

$$\frac{dF_{n,\kappa}}{dr} = -\frac{\kappa}{r} F_{n,\kappa} - \frac{E - V(r) + 2c^2}{c} G_{n,\kappa} \quad (4.11)$$

$$\frac{dG_{n,\kappa}}{dr} = \frac{E - V(r)}{c} F_{n,\kappa} + \frac{\kappa}{r} G_{n,\kappa} \quad (4.12)$$

In den oben angeführten Formeln sind $F_{n,\kappa}$ und $G_{n,\kappa}$ die große und kleine Komponente der Wellenfunktion, n ist wie bisher die Hauptquantenzahl, μ ist die magnetische Quantenzahl, und $\kappa = (l-j)(2j+1)$ ist die relativistische Quantenzahl, die sowohl den Gesamtspin $j = |\kappa| - 1/2$ als auch den Drehimpuls $l = j + \kappa/2|\kappa|$ (und damit die Parität $(-1)^l$) festlegt. Die Spin-Winkel-Funktion χ_κ^μ erfüllt die Beziehungen³(Grant 1970 [113])

$$\hat{j}^2 \chi_\kappa^\mu = j(j+1) \chi_\kappa^\mu \quad (4.13)$$

$$\hat{l}^2 \chi_\kappa^\mu = l(l+1) \chi_\kappa^\mu \quad (4.14)$$

$$\hat{s}^2 \chi_\kappa^\mu = \frac{3}{4} \chi_\kappa^\mu \quad (4.15)$$

$$\hat{j}_z \chi_\kappa^\mu = \mu \chi_\kappa^\mu \quad (4.16)$$

Zur Lösung der Radialgleichungen (Gl. (4.12)) für ein radialsymmetrisches Potential mit asymptotischen Verhalten $V(r) \rightarrow 0$ für $r \rightarrow \infty$ und endlichem $rV(r)$ bei $r = 0$ stehen verschiedene Standardmethoden und Computerprogramme in der Literatur zur Verfügung (z.B. Liberman *et al.* 1971 [30]). In der vorliegenden Arbeit werden jedoch an das Computerprogramm besonders hohe Anforderungen bezüglich Konvergenz und Flexibilität gestellt, da im Programm SAPHIR für mehrere tausend Niveaus die DIRAC-Gleichung in verschiedenen Potentialen gelöst werden muß, ohne daß bei Problemen ein Eingreifen des Benutzers in einzelnen Fällen möglich ist. Dafür geeignet ist eine Sammlung von Unterprogrammen von Salvat und Mayol (1991 [114]) zur Lösung der SCHRÖDINGER- oder DIRAC-Gleichung, die im Quellcode zur Verfügung steht. Der Benutzer übergibt diesen Unterprogrammen die Werte für $rV(r)$ an radialen Stützstellen r_i , und erhält an diesen Stützstellen den Wert für die beiden Komponenten $F_{n,\kappa}$ und $G_{n,\kappa}$ der Wellenfunktion, die Bindungsenergie für gebundene Zustände ($E < 0$) und die Phasenverschiebung für freie Zustände ($E > 0$) zurück. Dabei müssen die Stützstellen r_i geeignet gewählt werden, um alle Knoten der Wellenfunktionen zu erfassen, was zusammen mit den Eingabedaten überprüft wird. Eine Anzahl von

³Operatoren sind durch $\hat{}$ gekennzeichnet

800 Stützstellen ($i = 1, 800$), die über einen Bereich von $300 a_0$ gemäß

$$r_i = \frac{300}{\exp(800/70)} \exp\left(\frac{i}{70}\right) (a_0) \quad (4.17)$$

verteilt sind, ist für diese Arbeit ausreichend. Das Programm ist in der Lage zu erkennen, ob ein Zustand noch gebunden ist, was im Zusammenhang mit der vorliegenden Arbeit sehr wichtig ist, da die Anzahl gebundener Zustände im Potential (Gl. (4.8)) von der Elektronendichte abhängt und somit nicht *a priori* bekannt ist.

Die Tauglichkeit des Modellpotentials zur Beschreibung der Niveaustuktur und der Linienverschiebung in dichten Plasmen kann nicht anhand eines Vergleichs mit experimentellen Daten demonstriert werden, da solche Werte nach Wissen des Autors nicht zu Verfügung stehen. Deshalb werden die für Gold gemessenen Bindungsenergien im Festkörper, die experimentell leichter zugänglich sind, mit den Resultaten des Modellpotentials verglichen. Die Festkörperdichte für Gold unter Normalbedingungen beträgt $n^s = 5.84 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, womit sich unter der Annahme, daß der mittlere Ionisationsgrad $z^* \approx 1$ ist, eine Elektronendichte $n_e^s = 5.84 \times 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ ergibt. Das einfache Modell der vorliegenden Arbeit beschreibt den Festkörper als Plasma mit einem mittleren Ionisationsgrad $z^* = 1$ und einer Elektronendichte n_e^s ; hierdurch ist auch die Temperatur festgelegt. In den Abbildungen 4.1 und 4.2 sind die Bindungsenergien der Niveaus $3d_{3/2}$ und $3d_{5/2}$ sowie $4f_{5/2}$ und $4f_{7/2}$ für Au II, die aus dem Modellpotential (Gl. (4.8)) unter Verwendung der oben beschriebenen Unterprogramme folgen, in Abhängigkeit von der Elektronendichte dargestellt. Die Elektronendichte in Gold bei Festkörperdichte n_e^s ist in diesen Abbildungen durch einen senkrechten Strich markiert. Bei sehr geringer Elektronendichte liegen die Bindungsenergien für das isolierte Ion ($n_e = 0$) vor, die sich aber mit steigender Elektronendichte verringern, da die Abschirmung durch die freien Elektronen anwächst, wobei die äußere $4f$ -Unterschale stärker beeinflusst wird als die energetisch tiefer liegende $3d$ -Unterschale. Die genauen Werte der Bindungsenergien (in eV) für die M-Schale und die N-Schale für das isolierte Ion und bei einer Elektronendichte n_e^s sind zusammen mit gemessenen Bindungsenergien Tab. 4.1 zu entnehmen. Die Bindungsenergien für die Elektronendichte des Festkörpers zeigen eine gute Übereinstimmung mit den gemessenen Werten, trotz der Einfachheit des Modells betragen die Abweichungen nur einige eV. Durch die Nichtidealitätseffekte verringern sich die Bindungsenergien nur um $\approx 20 \text{ eV}$, was für die tieferliegen-

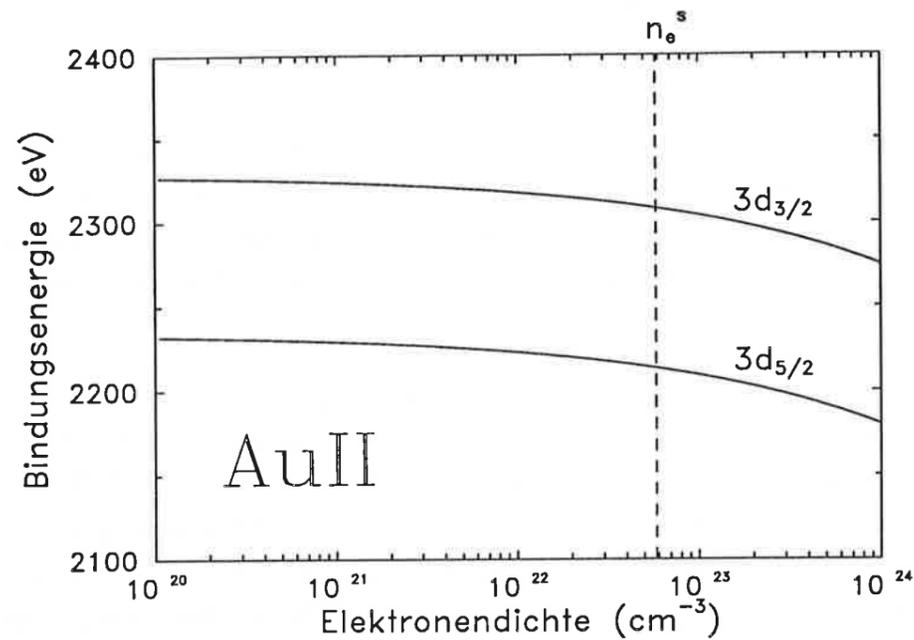


Abb. 4.1: Bindungsenergie der Niveaus $3d_{3/2}$ und $3d_{5/2}$ für Au II in Abhängigkeit von der Elektronendichte. Die senkrechte, gestrichelte Linie kennzeichnet den Wert der Elektronendichte in Gold bei Festkörperdichte.

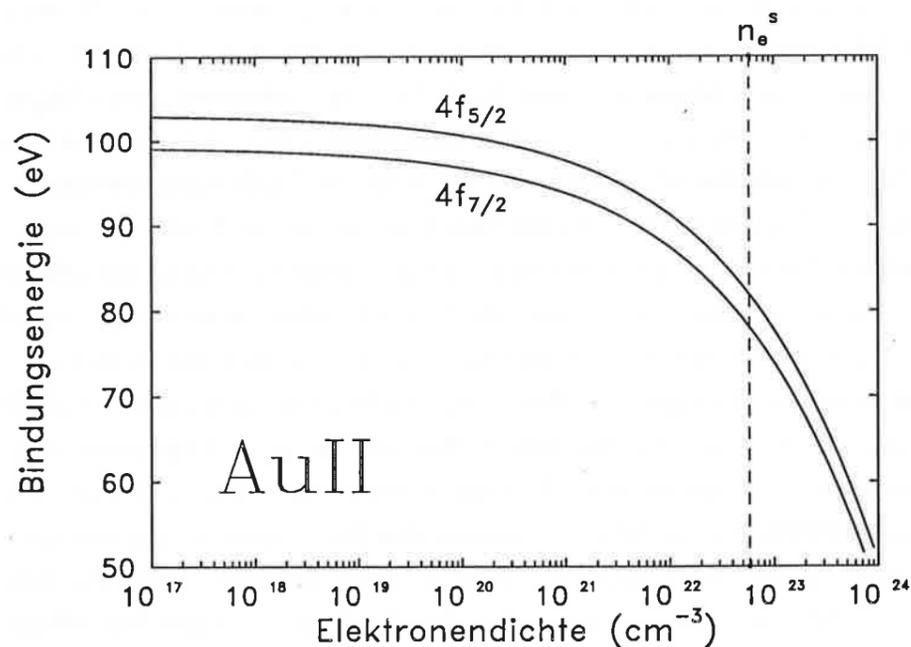


Abb. 4.2: Wie Abb. 4.1 für die Niveaus $4f_{5/2}$ und $4f_{7/2}$.

	$n_e = 0$	$n_e = n_e^s$	Exp. ^a
$3s_{1/2}$	3443	3421	3425
$3p_{1/2}$	3203	3181	3150
$3p_{3/2}$	2776	2754	2743
$3d_{3/2}$	2330	2308	2291
$3d_{5/2}$	2235	2213	2206
$4s_{1/2}$	769	747	759
$4p_{1/2}$	660	639	644
$4p_{3/2}$	559	538	546
$4d_{3/2}$	371	349	352
$4d_{5/2}$	351	330	334
$4f_{5/2}$	103	82	87
$4f_{7/2}$	99	78	83

^anach Siegbahn (1967 [115])

Tabelle 4.1: Bindungsenergien der M-Schale und der N-Schale in Au II für das isolierte Atom ($n_e = 0$) und bei der Elektronendichte des Festkörpers (n_e^s) mit dem Modell der vorliegenden Arbeit sowie die gemessenen Werte für Gold bei Festkörperdichte (Exp.).

den Niveaus nur eine kleine Veränderung bedeutet. Dennoch ist deutlich zu erkennen, daß alle Energien des isolierten Ions zu groß sind. Für die beiden $4f$ -Niveaus verringert sich die Differenz zum gemessenen Wert bei Berücksichtigung der Nichtidealitätseffekte von 26 eV auf 5 eV ($4f_{5/2}$) und von 16 eV auf ebenfalls 5 eV. Noch stärker ist der Effekt für das $2s$ -Niveau in Aluminium ($z^* = 3$, $n_e^s = 1.81 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$), dessen Bindungsenergie im isolierten Ion bei 156 eV und für eine Elektronendichte von $n_e = 1.81 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ bei 107 eV liegt, was mit dem gemessenen Wert von 118 eV (Siegbahn 1967 [115]) zu vergleichen ist. Zusammenfassend kann gesagt werden, daß eine genauere Überprüfung des Modells derzeit nicht möglich ist, die Resultate des oben angeführten Vergleichs zeigen aber, daß die Nichtidealitätseffekte im Modell der vorliegenden Arbeit in guter Näherung erfaßt werden.

4.3 Photoanregung und Photoabregung

Der Photoanregungsquerschnitt (gebunden-gebunden) für den Einfang eines Photons unter gleichzeitiger Anhebung eines gebundenen Elektrons in ein energetisch höheres Niveau ist

$$\sigma_{ij}^{gg}(\nu) = \frac{\pi e^2}{mc} f_{i \rightarrow j} \Psi_{ij}(\nu) . \quad (4.18)$$

Bei Berücksichtigung der j -Aufspaltung und nach Einsetzen der Konstanten ergibt sich für den Wirkungsquerschnitt

$$\sigma_{n\ell j, n'\ell' j'}^{gg}(\nu) = 2.65 \times 10^{-2} f_{n\ell j \rightarrow n'\ell' j'} \Psi_{n\ell j, n'\ell' j'}(\nu) \text{ (cm}^2\text{)} , \quad (4.19)$$

wobei $\Psi(\nu)$ das frequenzabhängige Linienprofil (in Sekunden) ist. Mit den statistischen Gewichten $g_{n\ell j}$ bzw. $g_{n'\ell' j'}$ und den Teilchendichten $n_{n\ell j}$ bzw. $n_{n'\ell' j'}$ der Zustände folgt für den um stimulierte Emission korrigierten Absorptionskoeffizienten für Photoanregung (Mihalas 1978 [51])

$$\chi_{\nu}^{gg} = \left[1 - \frac{g_{n\ell j} n_{n'\ell' j'}}{g_{n'\ell' j'} n_{n\ell j}} \right] n_{n\ell j} \sigma_{n\ell j, n'\ell' j'}^{gg}(\nu) \quad (4.20)$$

und durch Division mit der Massendichte ρ (in g/cm^3) der Massenabsorptionskoeffizient. Im LTE-Fall ist die Häufigkeit der beiden Zustände durch die BOLTZMANN-Verteilung gegeben, und der Korrekturfaktor für stimulierte Emission nimmt die im LTE-Fall gültige Form

$$1 - \frac{g_{n\ell j} n_{n'\ell' j'}}{g_{n'\ell' j'} n_{n\ell j}} = 1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{T_e}\right) \quad (4.21)$$

an. Der Koeffizient für spontane Emission kann mittels des Photoanregungsquerschnitts in der Form

$$\eta_{\nu}^{gg} = \left(\frac{2h\nu^3}{c^2}\right) \left(\frac{g_{n\ell j}}{g_{n'\ell' j'}}\right) n_{n'\ell' j'} \sigma_{n\ell j, n'\ell' j'}^{gg}(\nu) \quad (4.22)$$

geschrieben werden. Um die Koeffizienten für Photoanregung und Photoabregung ausrechnen zu können, müssen daher nur die relativistische Oszillatorstärke $f_{n\ell j \rightarrow n'\ell' j'}$ und das Linienprofil $\Psi_{n\ell j, n'\ell' j'}(\nu)$ für jeden Übergang bekannt sein. Die Berechnung dieser beiden Größen ist Gegenstand der nächsten beiden Abschnitte.

4.3.1 Berechnung relativistischer Oszillatorstärken

Die Ableitung der Formel für die Einteilchen-Oszillatorstärke im Rahmen der DIRAC-FOCK-SLATER-Theorie (DFS) mit relativistischen Einteilchenwellenfunktionen $\Phi_{n\kappa\mu}(\mathbf{r})$ ist bei Bhalla (1970 [116,117], 1973 [118]) gegeben. Mit der Phasenkonvention der vorliegenden Arbeit, die sich von der bei Bhalla unterscheidet, folgt für die Emissionsoszillatorstärke eines elektrischen Dipolübergangs $n'\kappa' \rightarrow n\kappa$ unter Emission eines Photons mit Energie ΔE (in atomaren Einheiten)

$$f_{n'\kappa' \rightarrow n\kappa}^{(1)} = -\frac{4}{9} \Delta E \left[(\kappa' - \kappa) I_0^+ + I_0^- - \frac{1}{2} (\kappa' - \kappa) I_2^+ - I_2^- \right]^2 \quad (4.23)$$

$$\times \frac{\lambda^2}{8\pi^2} \mathcal{S}^e(j', 1, j) , \quad (4.24)$$

mit den Abkürzungen

$$I_{\lambda}^+ = \int g_{\lambda}(kr) (FG' + GF') dr \quad (4.25)$$

$$I_{\lambda}^- = \int g_{\lambda}(kr) (FG' - GF') dr \quad (4.26)$$

und den sphärischen BESSEL-Funktionen $g_{\lambda}(kr)$ der Ordnung λ . Der Faktor $\mathcal{S}^e(j', 1, j)$, der nur von den Gesamtdrehimpulsen des Anfangs- und Endzustands abhängt, lautet

$$\mathcal{S}^e(j', 1, j) = \begin{cases} \frac{3}{4} \frac{2j'+3}{j'+1} & \text{für } j = j' + 1 \\ \frac{3}{4} \frac{1}{j'(j'+1)} & \text{für } j = j' \\ \frac{3}{4} \frac{2j'-1}{j'} & \text{für } j = j' - 1 \end{cases} , \quad (4.27)$$

wobei die Auswahlregeln $|\ell - \ell'| = 1$ und $|j - j'| = 0, 1$ erfüllt sein müssen. Die Absorptionsoszillatorstärken sind aus den Emissionsoszillatorstärken mittels der Beziehung

$$(2j + 1) f_{n\kappa\mu \rightarrow n'\kappa'\mu'}^{(1)} = -(2j' + 1) f_{n'\kappa'\mu' \rightarrow n\kappa\mu}^{(1)} \quad (4.28)$$

zu erhalten, und für die Oszillatorstärke bei teilweise gefüllten Niveaus gilt analog zum nichtrelativistischen Fall

$$f_{n\kappa \rightarrow n'\kappa'} = P_{n\kappa} \left(1 - \frac{P_{n'\kappa'}}{2|\kappa'|} \right) f_{n\kappa \rightarrow n'\kappa'}^{(1)} . \quad (4.29)$$

Die mit dem parametrisierten Potential ermittelten Oszillatorstärken werden in Tab. 4.2 mit Werten aus selbstkonsistenten DFS-Rechnungen von Bhalla (1970

[116], 1973 [118]) und mit gemessenen Werten (Andersen und Sørensen 1972 [119], Penkin und Shabanova 1963 [120], 1963 [121], 1965 [122]) für einige isolierte Elemente verglichen. Es wurden hierzu Elemente ausgewählt, die nur ein Elektron außerhalb abgeschlossener Unterschalen besitzen, da hierfür sowohl experimentelle Resultate als auch theoretische Vergleichswerte aus selbstkonsistenten DFS-Rechnungen zur Verfügung stehen. Die hierzu erforderlichen Parameter des parametrisierten Potentials, die nicht im Anhang A aufgelistet sind, können Tab. 4.3 entnommen werden. Die Resultate der vorliegenden Arbeit zeigen eine sehr gute Übereinstimmung mit den gemessenen Werten und den theoretischen Oszillatorstärken nach Bhalla, die Abweichungen liegen im Bereich der Unterschiede zwischen den gemessenen Werten – von wenigen Ausnahmen wie zum Beispiel der Übergang $5d_{3/2} \rightarrow 4p_{1/2}$ in Ga I abgesehen. Dies zeigt, daß die Berechnung der Oszillatorstärken mit Bindungsenergien und Wellenfunktionen, die aus der Lösung der DIRAC-Gleichung im analytischen Potential folgen, für isolierte Atome mit einer ähnlichen Genauigkeit wie für selbstkonsistente Rechnungen möglich ist. Für Wasserstoff und wasserstoffähnliche Ionen sind die Ergebnisse exakt (im Rahmen der numerischen Rechengenauigkeit).

Den Einfluß der freien Elektronen auf die Übergangsenergien und die Oszillatorstärken zeigen Abb. 4.3 und Abb. 4.4 für Au I und Al III. Dabei findet man, daß sich die Übergangsenergien nur wenig mit steigender Elektronendichte ändern, obwohl die einzelnen Bindungsenergien herabgesetzt werden. Dies ist auf die Abhängigkeit der Änderungen in den Bindungsenergien vom Radius zurückzuführen, der für die betrachteten Niveaus nicht sehr unterschiedlich ist. Somit verringert sich die Bindungsenergie beider Niveaus um den gleichen Betrag, und die Differenz bleibt unverändert. Erst kurz bevor das obere Niveau durch Nichtidealitätseffekte nicht mehr gebunden ist, tritt eine geringe Änderung in der Übergangsenergie ein. Da die Übergangsenergien sich nicht stark ändern und die Wellenfunktionen durch die Potentialveränderung nicht stark beeinflußt werden, zeigen die Oszillatorstärken das gleiche Verhalten. Stärkere Veränderungen in den Oszillatorstärken ergeben sich für weit auseinander liegende Niveaus, die jedoch für die Absorption nur eine geringe Rolle spielen, da für diese Übergänge die Oszillatorstärken stets sehr klein sind.

Als Beispiel für die Linienverschiebung ist in Abb. 4.5 die Veränderung der Energie des Übergangs $1s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2}$ in wasserstoffähnlichem Aluminium dargestellt.

	$n\ell j \rightarrow n'\ell' j'$	Exp.1 ^a	Exp.2 ^b	Bhalla	diese Arbeit
Al I	$3p_{3/2} \rightarrow 4s_{1/2}$	0.12	0.15	–	0.12
	$3p_{1/2} \rightarrow 4s_{1/2}$	0.13	0.15	–	0.12
Ga I	$4p_{3/2} \rightarrow 5s_{1/2}$	0.13	0.14	–	0.13
	$4p_{1/2} \rightarrow 5s_{1/2}$	0.12	0.13	–	0.13
	$4p_{1/2} \rightarrow 4d_{3/2}$	0.30	0.32	0.27	0.35
	$4p_{1/2} \rightarrow 5d_{3/2}$	–	0.054	0.09	0.11
	$4p_{3/2} \rightarrow 4d_{3/2}$	–	0.038	0.03	0.037
	$4p_{3/2} \rightarrow 4d_{5/2}$	0.34	0.29	0.25	0.34
	$4p_{3/2} \rightarrow 5d_{3/2}$	–	–	0.009	0.011
	$4p_{5/2} \rightarrow 5d_{5/2}$	0.08	–	0.078	0.10
In I	$5p_{1/2} \rightarrow 5d_{3/2}$	0.44	0.36	0.30	0.38
	$5p_{3/2} \rightarrow 5d_{3/2}$	–	0.06	0.033	0.044
	$5p_{3/2} \rightarrow 5d_{5/2}$	0.31	0.37	0.30	0.39
	$5p_{3/2} \rightarrow 6s_{1/2}$	0.15	0.16	–	0.14
	$5p_{1/2} \rightarrow 6s_{1/2}$	0.12	0.14	–	0.12
	$5p_{1/2} \rightarrow 6d_{3/2}$	0.08	0.045	0.09	0.12
	$5p_{3/2} \rightarrow 6d_{5/2}$	0.07	0.052	0.085	0.11
Tl I	$6p_{1/2} \rightarrow 6d_{3/2}$	0.34	0.29	0.29	0.33
	$6p_{3/2} \rightarrow 6d_{3/2}$	–	0.036	0.04	0.051
	$6p_{3/2} \rightarrow 6d_{5/2}$	0.37	0.31	0.34	0.45
	$6p_{1/2} \rightarrow 7s_{1/2}$	0.13	0.13	–	0.12
	$6p_{3/2} \rightarrow 7s_{1/2}$	0.14	0.14	–	0.17
	$6p_{1/2} \rightarrow 7d_{3/2}$	0.09	0.076	–	0.11
	$6p_{3/2} \rightarrow 7d_{5/2}$	0.08	0.073	–	0.12
	$6p_{3/2} \rightarrow 8d_{5/2}$	0.03	0.03	–	0.048

^anach Andersen und Sørensen (1972 [119])

^bnach Penkin und Shabanova (1963 [120], 1963 [121], 1965 [122])

Tabelle 4.2: Oszillatorstärken in relativistischer Beschreibung für Übergänge in Aluminium, Gallium, Indium und Thallium.

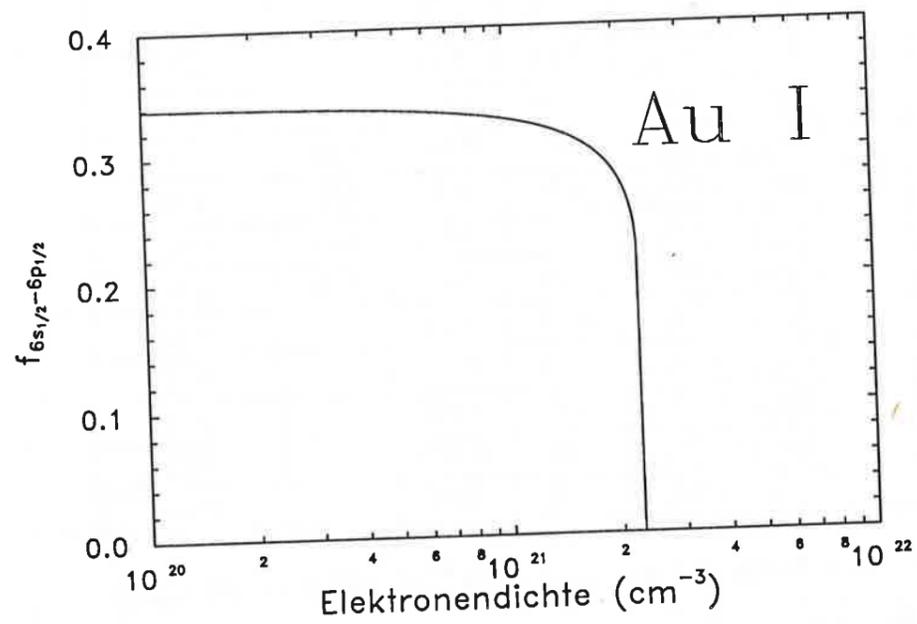
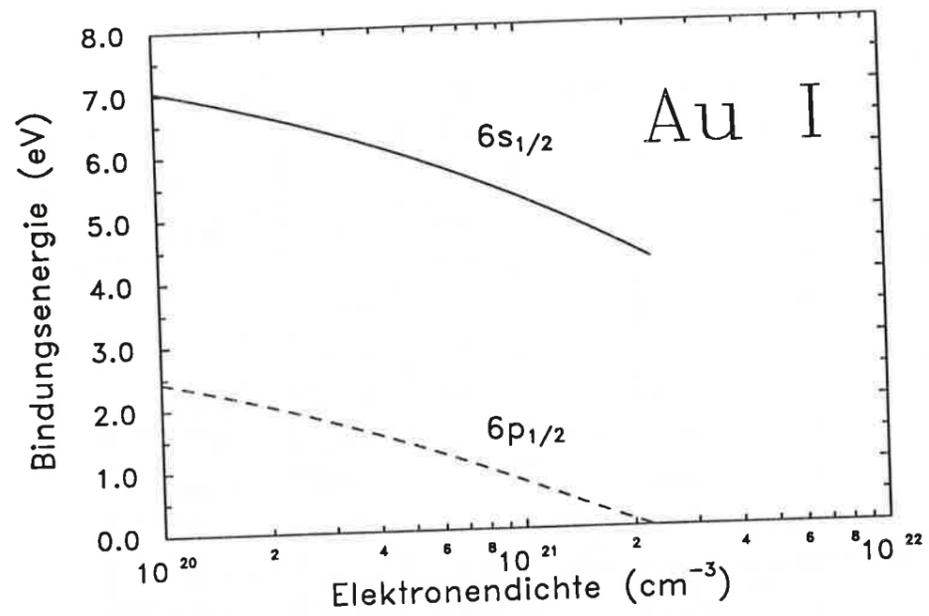


Abb. 4.3: Bindungsenergien und Oszillatorstärke des Übergangs $6s_{1/2} \rightarrow 6p_{1/2}$ für Au I in Abhängigkeit von der Elektronendichte.

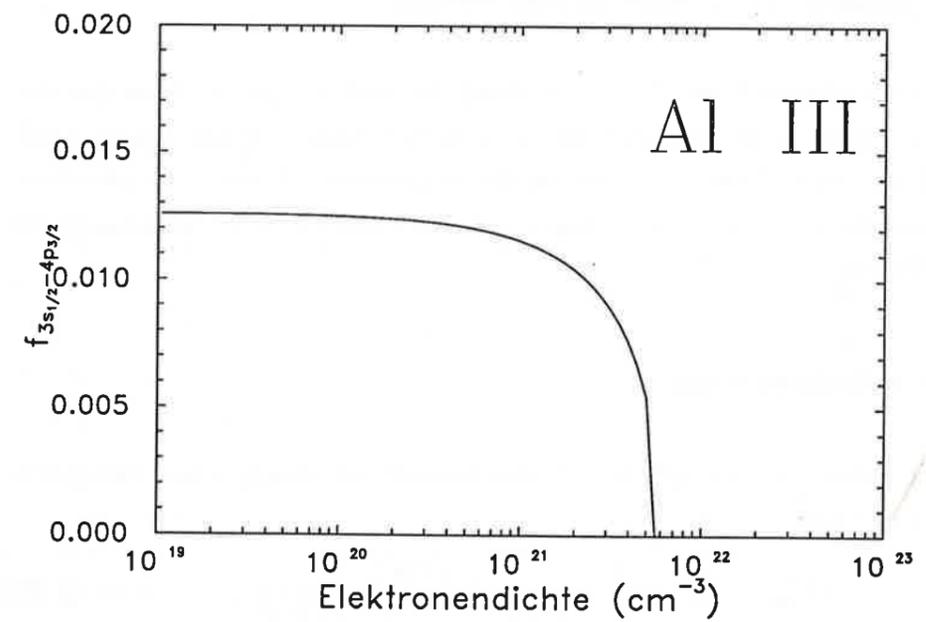
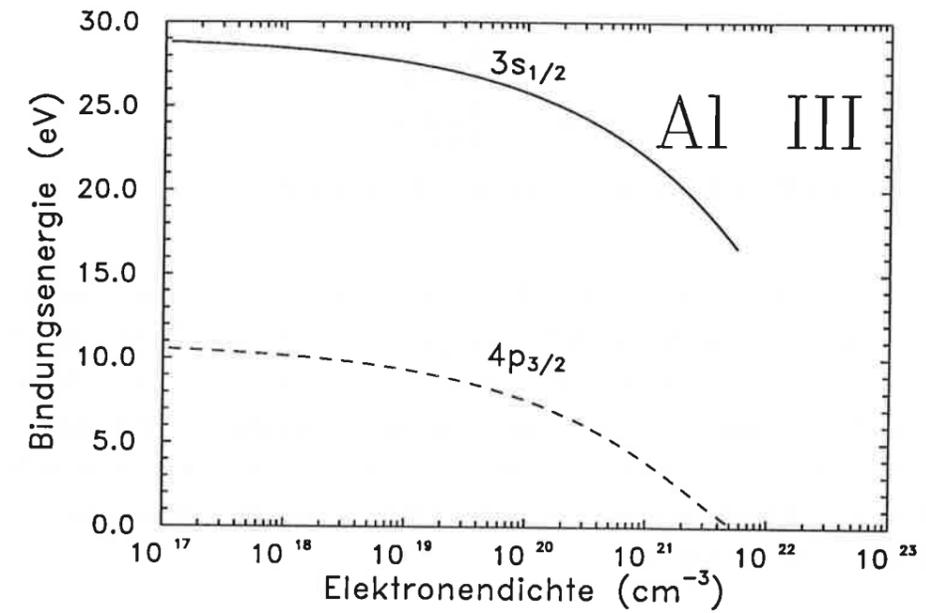


Abb. 4.4: Bindungsenergien und Oszillatorstärke des Übergangs $3s_{1/2} \rightarrow 4p_{3/2}$ für Al III in Abhängigkeit von der Elektronendichte.

	d	α
Ga I	0.6530	1.056
In I	0.7275	1.000
Tl I	0.6615	1.034

Tabelle 4.3: Parameter des analytischen Potentials.

Erst bei hohen Elektronendichten ($n_e > 3 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$) beträgt die Linienverschiebung mehr als 5 eV, was im Vergleich zur Energie des ungestörten Übergangs von 1730 eV klein ist. Zudem überlagert sich der Verschiebung der Linie mit wachsender Dichte auch ein Verbreiterung der Linie, was eine experimentelle Bestimmung sehr schwierig macht. Dennoch sollte diese Verschiebung für eine experimentelle Überprüfung ausreichend sein, was Skupsky (1980 [4]) am Beispiel des wasserstoffähnlichen Neons diskutiert.

4.3.2 Linienprofil und Linienbreite

Neben der natürlichen Linienbreite, die durch die endliche Lebensdauer des oberen Niveaus gegeben ist und auch für ein isoliertes Atom auftritt, tragen Stöße mit den Elektronen, Ionen und Atomen des umgebenden Plasmas (Stoßverbreiterung) und die thermische Bewegung der Ionen (DOPPLER-Verbreiterung) zur Linienbreite bei.

Natürliche Verbreiterung

Das Linienprofil der natürlichen Verbreiterung ist durch eine LORENTZ-Verteilung gegeben

$$\Psi_{n\ell j, n'\ell' j'}^L(\nu) = \frac{1}{\pi} \frac{(\Gamma_L/4\pi)}{(\nu_{n\ell j, n'\ell' j'} - \nu)^2 + (\Gamma_L/4\pi)^2}, \quad (4.30)$$

wobei die Halbwertsbreite (FWHM) durch

$$\Gamma_L = 2.29 \times 10^6 (\Delta E_{n\ell j, n'\ell' j'})^2 \text{ (s}^{-1}\text{)}, \quad (4.31)$$

mit der Übergangsenergie in eV, gegeben ist (Mihalas 1978 [51]).

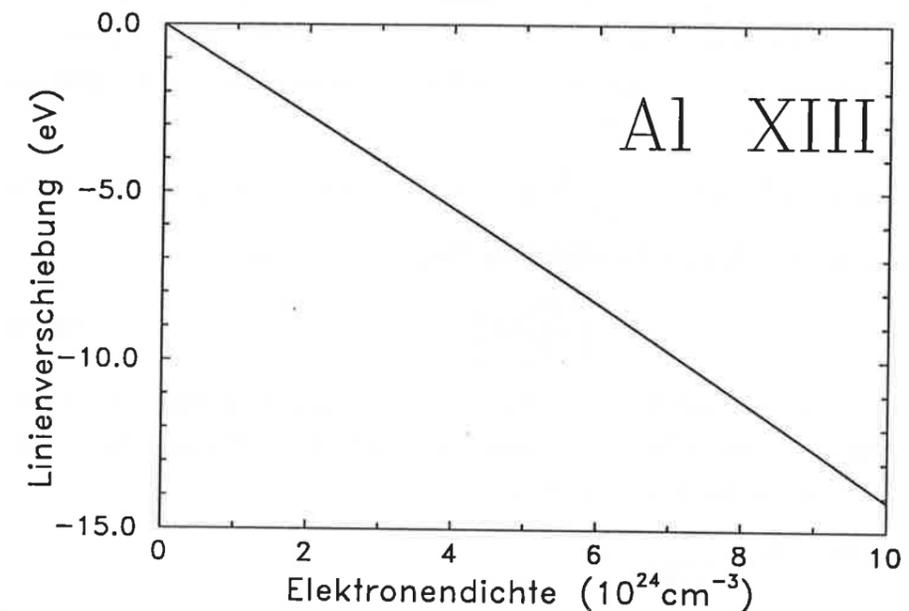


Abb. 4.5: Linienverschiebung des Übergangs $1s_{1/2} \rightarrow 1p_{3/2}$ für Al XIII in Abhängigkeit von der Elektronendichte.

Stoßverbreiterung

Durch Stöße mit neutralen oder geladenen Teilchen wird die Lebensdauer der Niveaus verkürzt, was zu einer Verbreiterung der Linien führt. Da der Einfluß der geladenen Teilchen viel größer ist, können Störungen durch neutrale Teilchen vernachlässigt werden, wenn das Plasma nur merklich ionisiert ist (Baranger 1962 [123]). Unter den geladenen Teilchen wiederum ist der Beitrag der Ionen zur Linienverbreiterung gegenüber dem der Elektronen in guter Näherung vernachlässigbar (Sobelman *et al.* 1981 [124]). Die Elektronen-Stoßverbreiterung ist im Rahmen der „*impact approximation*“ durch die Formel von Baranger (1962 [123]) gegeben, die in der Näherung nach Griem (1968 [125]) durch

$$\Gamma_S = 16 \left(\frac{\pi}{3}\right)^{3/2} \frac{h}{ma_0} n_e \sqrt{\frac{Ry}{k_B T}} \times [\langle n\ell j | r^2 | n\ell j \rangle \bar{g}_{n\ell j} + \langle n'\ell' j' | r^2 | n'\ell' j' \rangle \bar{g}_{n'\ell' j'}] \quad (4.32)$$

beschrieben werden kann. Die GAUNT-Faktoren \bar{g} weichen gewöhnlich nur wenig von eins ab, es wird daher $\bar{g} = 1$ gesetzt (Stewart und Pyatt 1961 [126], Armstrong *et al.* (1966 [127])). Die Erwartungswerte von r^2 werden mit den in Abschnitt 4.2 gewonnenen radialen Wellenfunktionen berechnet, optional kann im Programm SAPHIR der wasserstoffähnliche Wert

$$\langle n\ell j | r^2 | n\ell j \rangle = \frac{1}{2} \left(\frac{\tilde{n}}{Z_c} \right)^2 [5\tilde{n}^2 + 1 - 3\ell(\ell + 1)] (a_0^2), \quad (4.33)$$

mit der Rumpfladung Z_c und der effektiven Hauptquantenzahl

$$\tilde{n} = \left(\frac{Z_c^2 E_H}{E_{n\ell j}} \right)^{1/2}, \quad (4.34)$$

gewählt werden, der für angeregte Niveaus eine gute Näherung darstellt (Armstrong und Purdum 1966 [128]). Insgesamt ergibt sich damit für die Halbwertsbreite (FWHM) in praktischen Einheiten

$$\Gamma_S = 3.08 \times 10^{-8} \frac{n_e}{\sqrt{T} Z_c^2} \times \left[\tilde{n}^2 (5\tilde{n}^2 + 1 - 3\ell(\ell + 1)) + \tilde{n}'^2 (5\tilde{n}'^2 + 1 - 3\ell'(\ell' + 1)) \right] (s^{-1}), \quad (4.35)$$

wobei die Plasmatemperatur in eV und die Elektronendichte in cm^{-3} einzusetzen sind. Eine detaillierte Diskussion der Formel (Gl. (4.32)) und der GAUNT-Faktoren ist in dem Artikel von Griem (1968 [125]) zu finden, und einen Vergleich gemessener Stoßverbreiterungen mit Ergebnissen der Näherungsformel geben Hey (1976 [129]) und Hey und Bryan (1977 [130]). Das Linienprofil entspricht ebenfalls einer LORENTZ-Verteilung, und die Faltung zweier LORENTZ-Verteilungen ergibt wieder eine LORENTZ-Verteilung mit einer Gesamtbreite $\Gamma = \Gamma_L + \Gamma_S$ (Mihalas 1978 [51]).

DOPPLER-Verbreiterung

Ist das Ion mit der Masse M während des Übergangs in Bewegung und besitzt eine Geschwindigkeitskomponente in Richtung der Sichtlinie, ist die Linie durch den DOPPLER-Effekt in der Frequenz verschoben. Liegt eine thermische Geschwindigkeitsverteilung vor, führt dies zu einer Verbreiterung der Linie, die durch ein DOPPLER-Profil

$$\Psi_{n\ell j, n'\ell' j'}^D(\nu) = \frac{1}{\Delta\nu_D \sqrt{\pi}} \exp\left(-\frac{(\nu - \nu_{n\ell j, n'\ell' j'})^2}{\Delta\nu_D^2}\right) \quad (4.36)$$

mit

$$\Delta\nu_D = \frac{\nu_{n\ell j, n'\ell' j'}}{c} \sqrt{\frac{2T}{M}} \quad (4.37)$$

beschrieben wird. Mit der Massenzahl A des Elements und der Übergangsenergie in eV folgt in praktischen Einheiten

$$\Delta\nu_D = 1.11 \times 10^{10} \sqrt{\frac{T}{A}} \Delta E_{n\ell j, n'\ell' j'} (s^{-1}), \quad (4.38)$$

und für die Halbwertsbreite (FWHM) erhält man

$$\Gamma_D = 2\sqrt{\ln 2} \Delta\nu_D \quad (4.39)$$

$$= 1.85 \times 10^{10} \sqrt{\frac{T}{A}} \Delta E_{n\ell j, n'\ell' j'} (s^{-1}). \quad (4.40)$$

Zusammen mit dem LORENTZ-Profil ergibt sich, wenn die DOPPLER-Verbreiterung und die anderen Verbreiterungsmechanismen nicht miteinander korreliert sind, durch Faltung ein VOIGT-Profil

$$\Psi_{n\ell j, n'\ell' j'}^V = \frac{1}{\sqrt{\pi} \Delta\nu_D} \frac{a}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(-y^2)}{(v - y)^2 + a^2} dy \quad (4.41)$$

$$= \frac{1}{\sqrt{\pi} \Delta\nu_D} H(a, v), \quad (4.42)$$

das von dem Verhältnis

$$a = \frac{\Gamma_S + \Gamma_L}{4\pi \Delta\nu_D} \quad (4.43)$$

und

$$v = \frac{\nu - \nu_{n\ell j, n'\ell' j'}}{\Delta\nu_D} \quad (4.44)$$

abhängt. Die Eigenschaften der VOIGT-Funktion $H(a, v)$ werden in dem Buch von Mihalas (1978 [51]) beschrieben, wo auch Literaturhinweise zu deren Berechnung aufgeführt sind. Ein Computerprogramm, das den Wert der VOIGT-Funktion mit verschiedenen Näherungsmethoden und Tabellenwerten nach der Beschreibung von Mihalas bestimmt, kann dem Programm IONMIX von MacFarlane (1989 [6]) entnommen werden.

4.4 Photoionisation und Photorekombination

Die Ableitung der Formel für den Photoionisationsquerschnitt (gebunden-frei) im Rahmen der DIRAC-FOCK-SLATER-Theorie geben Walker und Waber (1973 [131], 1974 [132]). Als Ergebnis für den Photoionisationsquerschnitt in Dipolnäherung ergibt sich

$$\sigma_{nlj, l'j'}^{gf}(\nu) = \frac{8\pi c}{\omega k} \left[\frac{2j-1}{12j} |R_{j-1}^2| + \frac{1}{12j(j+1)} |R_j^2| + \frac{2j+3}{12(j+1)} |R_{j+1}^2| \right], \quad (4.45)$$

mit

$$|R_j^2| = \left((\kappa - \kappa' - 1) \int G_{j'} F_j dr + (\kappa - \kappa' + 1) \int F_{j'} G_j dr \right)^2, \quad (4.46)$$

wobei ω die Photonenergie und k die Wellenzahl des Elektrons im Kontinuum ist. Die beiden Komponenten $F_{j'}$ und $G_{j'}$ der Wellenfunktion im Kontinuum können erneut mittels der Sammlung von Unterprogrammen von Salvat und Mayol (1991 [114]) berechnet werden, nur ist dabei zu beachten, daß die daraus resultierenden Kontinuumswellenfunktionen nicht normiert sind. Da bei der Herleitung der Formel für den Wirkungsquerschnitt angenommen wurde, die Kontinuumswellenfunktionen mit Phasenverschiebung δ , Wellenzahl k und Energie E seien gemäß

$$F(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \left(\frac{E + 2c^2}{2(E + c^2)} \right)^{1/2} \cos(kr + \delta) \quad (4.47)$$

$$G(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \left(\frac{E}{2(E + c^2)} \right)^{1/2} \sin(kr + \delta) \quad (4.48)$$

normiert, müssen die Kontinuumswellenfunktionen nachträglich normiert werden.

Die mit dem parametrisierten Potential und Gl. (4.45) berechneten Photoionisationsquerschnitte bei einer Elektronendichte $n_e = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ wurden für einige Elemente mit Werten aus selbstkonsistenten, relativistischen Rechnungen für isolierte Atome mit Berücksichtigung aller Multipole (Band *et al.* 1979 [133]) verglichen. Dabei zeigte sich, daß bei dieser niedrigen Elektronendichte die Photoionisationsquerschnitte des isolierten Atoms sehr gut reproduziert werden, die Abweichungen betragen nur ungefähr 10 %. In Abb. 4.6 sind als Beispiele die Photoionisationsquerschnitte für die äußeren Niveaus in neutralem Aluminium und Gold abgebildet.

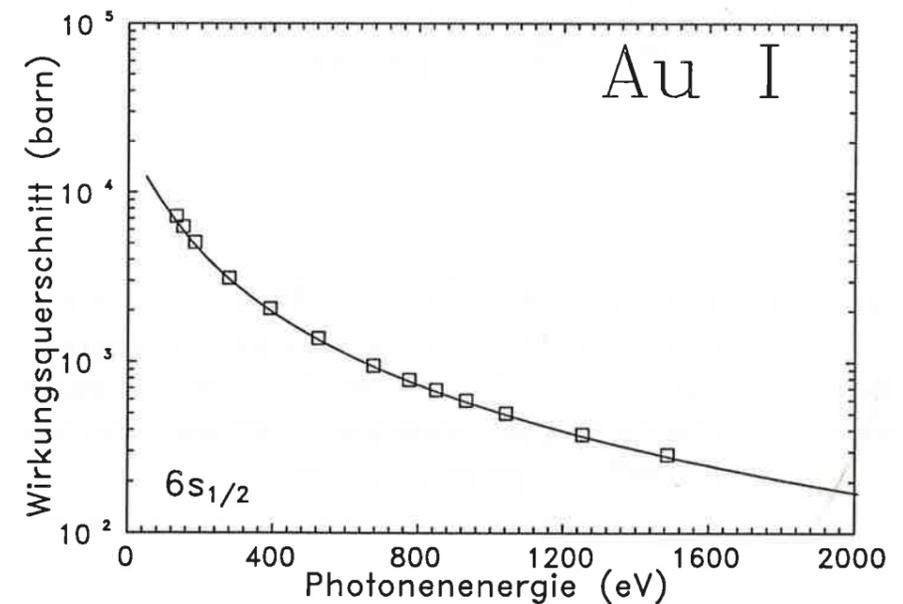
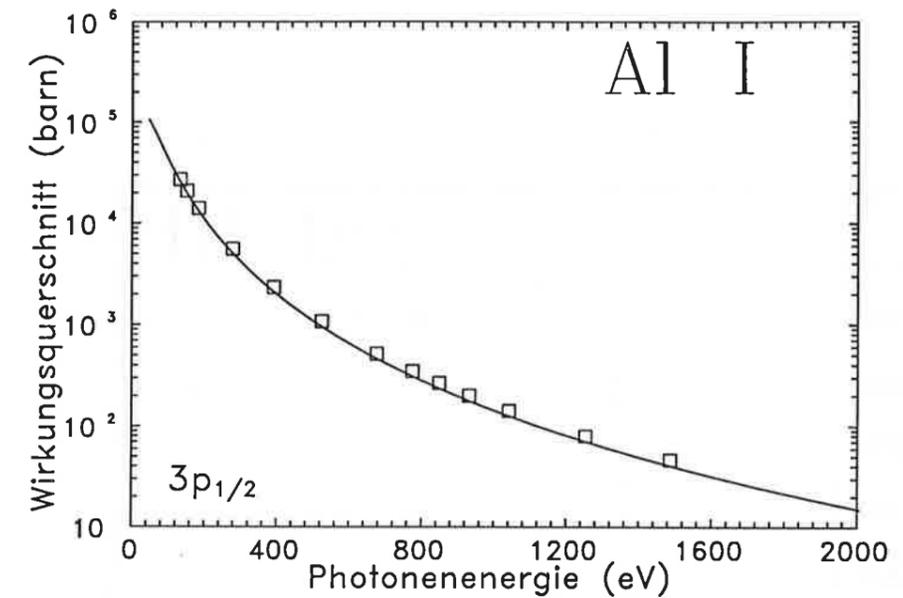


Abb. 4.6: Photoionisationsquerschnitt für die Niveaus $3p_{1/2}$ in Al I und $6s_{1/2}$ in Au I in Abhängigkeit von der Photonenergie. Die durchgezogene Linie kennzeichnet die Resultate der vorliegenden Arbeit bei einer Elektronendichte $n_e = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$. Die Ergebnisse aus relativistischen, selbstkonsistenten Rechnungen für isolierte Atom nach Band *et al.* (1979 [133]) sind durch Quadrate dargestellt.

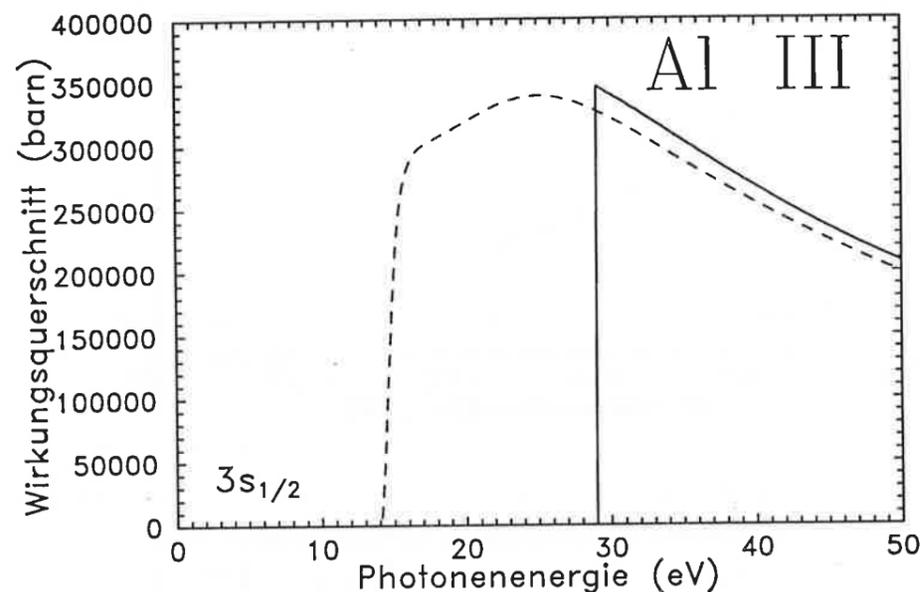


Abb. 4.7: Einfluß der freien Elektronen auf den Photoionisationsquerschnitt des Niveaus $3s_{1/2}$ in Al III. Dargestellt sind der Photoionisationsquerschnitt in Abhängigkeit von der Photonenergie nach dem Modell der vorliegenden Arbeit bei den Elektronendichten $n_e = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$ (durchgezogene Linie) und $n_e = 10^{22} \text{ cm}^{-3}$ (gestrichelte Linie).

Die Änderungen im Photoionisationsquerschnitt durch den Einfluß der freien Elektronen bei höheren Elektronendichten sind in Abb. 4.7 dargestellt. Beträgt die Elektronendichte $n_e = 10^{16} \text{ cm}^{-3}$, so liegt die Bindungsenergie des $3s_{1/2}$ -Niveaus in Al III bei 29 eV. Der Photoionisationsquerschnitt steigt an der Schwelle steil an und fällt danach mit steigender Photonenergie. Erhöht man die Elektronendichte auf $n_e = 10^{22} \text{ cm}^{-3}$, erniedrigt sich die Bindungsenergie auf 14 eV. Zudem verändert sich der Verlauf des Photoionisationsquerschnitts an der Schwelle. Der Anstieg an der Schwelle ist weniger steil als bei niedriger Elektronendichte, und der Querschnitt steigt nach der Schwelle zuerst mit steigender Photonenergie an.

Im Plasma sind im entarteten Fall die Kontinuumszustände teilweise besetzt, was durch Multiplikation mit einem Verfügbarkeitsfaktor

$$Q_e = 1 - \frac{1}{1 + \exp\left(\tilde{\alpha} + \frac{\epsilon}{T_e}\right)} \quad (4.49)$$

$$\tilde{\alpha} = -\frac{\mu}{T_e} \quad (4.50)$$

berücksichtigt wird, wobei $\epsilon = 2Ry E$ die Energie des Kontinuumelektrons in eV ist.

Bei bekanntem Photoionisationsquerschnitt kann der um stimulierte Emission korrigierte Absorptionskoeffizient mittels

$$\chi_{\nu}^{gf} = \left[1 - \frac{n_{nlj}^*}{n_{nlj}} \exp\left(-\frac{h\nu}{T_e}\right) \right] n_{nlj} \sigma_{nlj, l'j'}^{gf} \quad (4.51)$$

berechnet werden, und der Koeffizient für spontane Rekombination lautet (Michalas 1987 [51])

$$\eta_{\nu}^{gf} = \left(\frac{2h\nu^3}{c^2} \right) \exp\left(\frac{h\nu}{T_e}\right) n_{nlj}^* \sigma_{nlj, l'j'}^{gf} \quad (4.52)$$

Die Häufigkeit n_{nlj}^* des Ausgangszustands im LTE-Fall berechnet sich gemäß

$$n_{nlj}^* = 1.66 \times 10^{-22} n_0 n_e \frac{g_{nlj}}{g_0} T^{-\frac{3}{2}} \exp\left(\frac{I_{nlj}}{T_e}\right) \quad (4.53)$$

wobei g_0 das statistische Gewicht, n_0 die Häufigkeit des Grundzustands für das nach der Ionisation vorliegende Ion und I_{nlj} die Ionisierungsenergie ist. Im LTE-Fall gilt

$$n_{nlj}^* = n_{nlj} \quad (4.54)$$

und der Korrekturfaktor für stimulierte Rekombination r auf die im LTE-Fall gültig Form

$$1 - \frac{n_{nlj}}{n_{nlj}^*} \exp\left(-\frac{h\nu}{T_e}\right) = 1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{T_e}\right) \quad (4.55)$$

4.5 Bremsstrahlung und inverse Bremsstrahlung

Auch freie Elektronen können im Feld der Ionen Photonen absorbieren, indem sie in einen anderen Kontinuumszustand übergehen (z. B. durch Bremsstrahlung). Die semiklassische Rechnung für diesen Prozeß im Kontinuum wurde von Kramers durchgeführt und ergab bei einer MAXWELL-Verteilung der Elektronen für den Absorptionsquerschnitt (Zel'dovich und Reuter 1968 [136])

$$\sigma^{ff}(\nu) = \frac{4}{3} \left(\frac{2\pi}{3mk_B T}\right)^{1/2} \frac{Z_I^2 e^6}{hmc\nu^3} n_e \quad (4.56)$$

wobei n_e die Teilchendichte der Elektronen ist. Werden Temperatur T und die Photonenenergie und die Temperatur in eV angegeben, so kann man

$$\sigma^{ff}(\nu) = 2.42 \times 10^{-37} \frac{Z_I^2}{\sqrt{T} (h\nu)^3} n_e \quad (cm^2) \quad (4.57)$$

Die aus der quantenmechanischen Rechnung folgende Korrekturfaktor g_{ff} kann durch Multiplikation mit einem Faktor g_{ff} berücksichtigt werden, der erstmals von Gaunt (1930 [134]) berechnet wurde. Eine Diskussion des GAUNT-Faktors für die inverse Bremsstrahlung findet man bei Karzas und Latter (1961 [135]) zu finden. Deren Resultat kann durch die Anpassungsformel

$$g_{ff} \approx 1 + 0.44 \exp\left(-\frac{1}{4} \left(\gamma^2 + \frac{1}{4}\right)^2\right) \quad (4.58)$$

mit

$$\gamma^2 = \log_{10} \left(13.6 \frac{\overline{Z^2}}{T}\right) \quad (4.59)$$

beschrieben werden. Dabei ist der Mittelwert der quadratischen Ladungszahl $\overline{Z^2}$ durch

$$\overline{Z^2} = \sum_{I=1}^Z Z_I^2 \frac{n_I}{n_e} \quad (4.60)$$

gegeben (MacFarlane 1989 [6], siehe auch Menzel und Pekeris 1935 [136]). Bei hohen Dichten können die Elektronen entartet sein, und der Absorptionsquerschnitt muß über die FERMI-DIRAC-Verteilung und nicht über die MAXWELL-Verteilung gemittelt werden. Dies kann durch Multiplikation mit einem Faktor

$$\Phi = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\ln\left(\frac{1+\exp(-\tilde{\alpha})}{1+\exp(-\tilde{\alpha}-\frac{h\nu}{T_e})}\right)}{F_{1/2}(\tilde{\alpha}) \left(1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{T_e}\right)\right)} \quad (4.61)$$

$$\tilde{\alpha} = -\frac{\mu}{T_e} \quad (4.62)$$

berücksichtigt werden (Cox und Giuli 1968 [137]).

Mit dem Wirkungsquerschnitt für Bremsstrahlung folgt für den um stimulierte Emission korrigierten Absorptionskoeffizienten

$$\chi_{\nu}^{ff} = \left(1 - \exp\left(-\frac{h\nu}{T_e}\right)\right) n_I \sigma^{ff}(\nu) \quad (4.63)$$

und für den Emissionskoeffizienten

$$\eta_{\nu}^{ff} = \left(\frac{2h\nu^3}{c^2}\right) \exp\left(-\frac{h\nu}{T_e}\right) n_I \sigma^{ff}(\nu) \quad (4.64)$$

wobei n_I die Teilchendichte der Ionen mit Ladung Z_I ist (Mihalas 1978 [51]). Der Korrekturfaktor für stimulierte Emission besitzt für Übergänge im Kontinuum die LTE-Form, da eine thermische Verteilung der freien Elektronen vorausgesetzt wurde.

4.6 Streuung

Die Streuung von Licht an freien Elektronen kann für Photonen mit $h\nu \leq 10^4$ eV durch den frequenzunabhängigen THOMSON-Querschnitt

$$\Omega^{es} = \frac{8\pi e^4}{3m^2 c^4} = 6.65 \times 10^{-25} \quad (cm^2) \quad (4.65)$$

beschrieben werden. Alle freien Elektronen (mit Dichte n_e) und alle gebundenen Elektronen, deren Bindungsenergie kleiner als die Photonenenergie ist (mit Dichte $\tilde{n}_e(\nu)$), tragen zur Streuung bei, womit für den Streukoeffizienten folgt

$$\sigma_{\nu}^{es} = 6.65 \times 10^{-25} (n_e + \tilde{n}_e(\nu)) \quad (4.66)$$

Bei niedrigen Photonenenergien und hoher Elektronendichte ($n_e \geq 10^{19} \text{ cm}^{-3}$) ist auch Streuung von Photonen an Plasmaoszillationen wichtig. Nimmt man an, daß die Transmissionswahrscheinlichkeit der Photonen, deren Kreisfrequenz ω niedriger als die Plasmafrequenz ω_{pe} ist, nach einer Skin-Tiefe um $1/e$ reduziert ist, so folgt (Peterson und Moses 1983 [138])

$$\sigma_\nu^p = \begin{cases} \frac{(\omega_{pe}^2 - (2\pi\nu)^2)^{1/2}}{c} & \text{für } h\nu \leq \hbar\omega_{pe} \\ 0 & \text{für } h\nu > \hbar\omega_{pe} \end{cases}, \quad (4.67)$$

wobei die Plasmafrequenz durch

$$\omega_{pe} = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n_e}{m}} \quad (4.68)$$

gegeben ist.

4.7 Extinktions- und Emissionskoeffizient

Sind die Beiträge der einzelnen Absorptions-, Streuungs- und Emissionsmechanismen bekannt, so erhält man den totalen Extinktions- und den totalen Emissionskoeffizienten durch Aufsummieren aller Beiträge von allen Zuständen (a, b) und allen Ionen (I), die im Plasma mit relevanter Häufigkeit vorhanden sind

$$\chi_\nu = \sum_a \sum_{b>a} \chi_\nu^{gg} + \sum_a \chi_\nu^{gf} + \sum_I \chi_\nu^{ff} + \sigma^{es} + \sigma_\nu^p \quad (4.69)$$

$$\eta_\nu = \sum_a \sum_{b>a} \eta_\nu^{gg} + \sum_a \eta_\nu^{gf} + \sum_I \eta_\nu^{ff}. \quad (4.70)$$

Dies ist mit einem erheblichen Rechenaufwand verbunden, da man bei jeder Photonenenergie alle Beiträge aufsummieren muß. Darüberhinaus ist das Gitter der Photonenenergie hierzu fein genug zu unterteilen, um alle Linien erfassen zu können.

Ein Beispiel für den Extinktionskoeffizienten eines Goldplasmas mit $T_e = 100 \text{ eV}$ und $n_i = 3 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ zeigt Abb. 4.8. Zum Vergleich ist auch der Extinktionskoeffizient abgebildet, der aus einem *average-atom*-Modell unter der Annahme

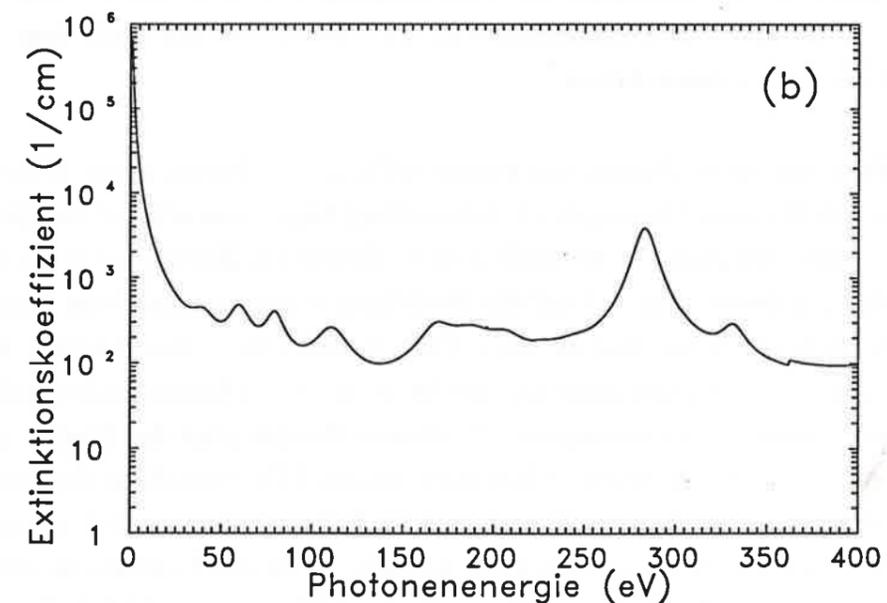
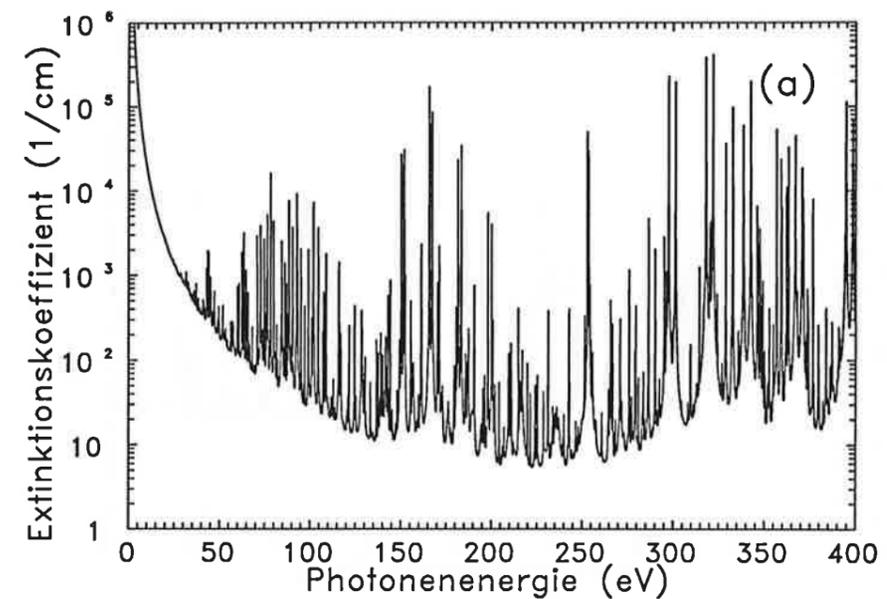


Abb. 4.8: Extinktionskoeffizient eines Goldplasmas mit $T_e = 100 \text{ eV}$ und $n_i = 3 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ in Abhängigkeit von der Photonenenergie. Die Resultate des Modells der vorliegenden Arbeit sind in (a) dargestellt. Den Extinktionskoeffizienten im LTE-Fall in der Wasserstoffnäherung mit ℓ -Aufspaltung (Rickert 1989 [8]) zeigt (b).

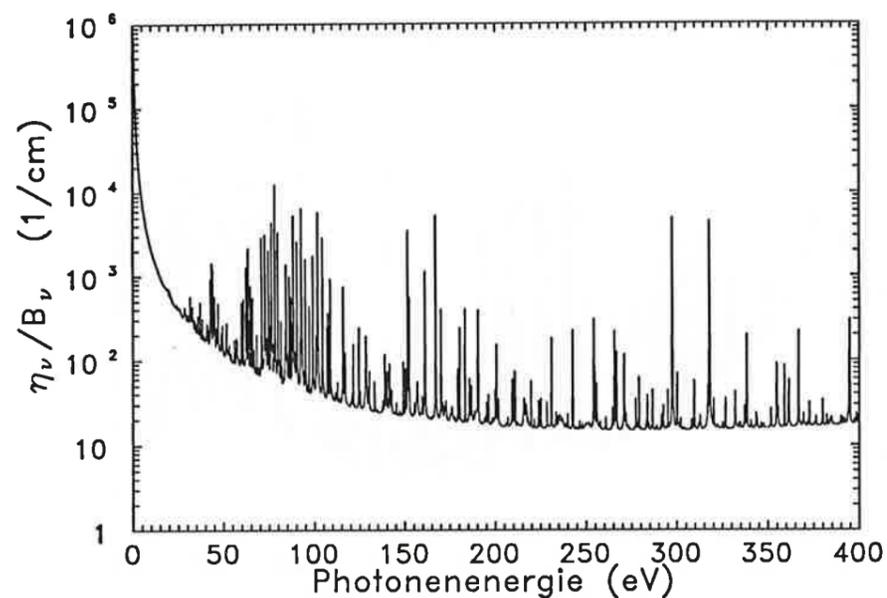


Abb. 4.9: Emissionskoeffizient eines Goldplasmas mit $T_e = 100 \text{ eV}$ und $n_i = 3 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ in Abhängigkeit von der Photonenergie nach dem Modell der vorliegenden Arbeit.

des LTE-Falls und unter Verwendung wasserstoffähnlicher Energien und Wellenfunktionen mit Berücksichtigung der ℓ -Aufspaltung folgt. Man erkennt deutlich, daß der Extinktionskoeffizient der vorliegenden Arbeit im Bereich $h\nu > 40 \text{ eV}$ mehr Struktur aufweist. Dies ist auf die Berücksichtigung der einzelnen Konfigurationen zurückzuführen, was zu einer Vielzahl von Linien verschiedener Ionen führt. Für Photonen mit einer Energie $h\nu < 40 \text{ eV}$ ist Bremsstrahlung der dominierende Absorptionsmechanismus. In diesem Bereich zeigt das Modell der vorliegenden Arbeit eine geringere Absorption als das LTE-Modell, da der mittlere Ionisationsgrad den Wert ≈ 20 und im LTE-Fall ≈ 24 hat, so daß weniger freie Elektronen zur Absorption beitragen. In Abb. 4.9 ist der Emissionskoeffizient dividiert durch die PLANCK-Verteilung B_ν abgebildet, was im LTE-Fall dem Extinktionskoeffizienten entspricht, da Emissions- und Extinktionskoeffizient im LTE-Fall über das KIRCHHOFFSche Gesetz

$$\eta_\nu = \chi_\nu B_\nu \quad (4.71)$$

miteinander verbunden sind. Ein Vergleich dieser Größe mit dem Extinktionskoeffizienten in Abb. 4.8a zeigt, insbesondere für Photonenergien $h\nu > 150 \text{ eV}$, daß ein Goldplasma der betrachteten Temperatur und Dichte sich nicht im lokalen thermodynamischen Gleichgewicht befindet.

Zusammenfassend kann gesagt werden, daß das Modell der vorliegenden Arbeit die Bestimmung der optischen Eigenschaften dichter Plasmen mit einer erhöhten Genauigkeit gegenüber bisher publizierten, vergleichbaren Modellen erlaubt, da bei der Berechnung von Bindungsenergien, Oszillatorstärken und Photoionisationsquerschnitten eine deutliche Verbesserung erzielt werden konnte.

Kapitel 5

Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurde ein umfassendes Modell und ein darauf basierendes Computerprogramm entwickelt, das es ermöglicht, den Zustand und die optischen Eigenschaften von Plasmen in einem weiten Bereich von Temperatur, Dichte und Photonenenergie – vor allem aber für sehr dichte Hoch-Z-Plasmen im Bereich der Festkörperdichte, die im Zusammenhang mit Inertialfusion derzeit intensiv untersucht werden – zu beschreiben, wobei in wesentlichen Punkten Verbesserungen gegenüber bisher publizierten Modellen erzielt wurden.

Um Abweichungen vom lokalen thermodynamischen Gleichgewicht (LTE) erfassen zu können, wurde zur Bestimmung des Plasmazustands ein Stoß-Strahlungsmodell (*collisional radiative model*) entwickelt. Das Ratengleichungsmodell berücksichtigt explizit die einzelnen Konfigurationen, die durch die Besetzung der $n\ell$ -Unterschalen festgelegt sind (*detailed configuration accounting DCA*), und weist folgende wesentliche Merkmale auf:

- Bindungsenergien werden durch Lösung der DIRAC-Gleichung für ein analytisches, parametrisiertes Potential gewonnen, was für Hoch-Z-Elemente eine deutliche Verbesserung gegenüber den bisher benutzten abgeschirmten Wasserstoffenergien darstellt. Die Parameter des analytischen Potentials wurden im Rahmen dieser Arbeit durch Anpassung an selbstkonsistente, relativistische Rechnungen ermittelt.

- Auch bei der Berechnung der Oszillatorstärken werden keine wasserstoffähnlichen Abschätzungen verwendet, sondern es wird auf ein semiklassisches Modell für das Dipolmatrixelement zurückgegriffen, das auf der *Coulomb approximation* beruht. Zusammen mit den in der vorliegenden Arbeit verwendeten Bindungsenergien konnten überraschend gute Resultate – angesichts der Einfachheit des Modells – für Oszillatorstärken erzielt werden.
- Erstmals wurde die dielektronische Rate in ein Programm der vorliegenden Art in konsistenter Weise eingebaut. Durch die ℓ -Aufspaltung der Energieniveaus ergeben sich neue Möglichkeiten der Anregung innerhalb einer Hauptschale, was zu Veränderungen in der dielektronischen Rate und zu einer Beeinflussung des Plasmazustands führt.
- Die Kopplung benachbarter Ionisationszustände über angeregte Zustände wird berücksichtigt.
- Die durch den Einfluß des Plasmas verursachte Kontinuumsabsenkung und die Druckionisierung werden in einer Weise berücksichtigt, die für den Ionisationsgrad bei hohen Dichten eine gute Übereinstimmung mit dem THOMAS-FERMI-Modell zeigt, jedoch die Schalenstruktur der Ionen berücksichtigt.
- Druck und innere Energie des Plasmas werden konsistent mit den entsprechenden Extinktions- und Emissionskoeffizienten berechnet, wobei die teilweise Entartung der freien Elektronen bei hohen Dichten berücksichtigt wird.

Die Ergebnisse dieses Stoß-Strahlungs-Modells wurden für experimentell relevante Parameterbereiche diskutiert und dabei insbesondere anhand des mittleren Ionisationsgrads gezeigt, daß sowohl die dielektronische Rekombination als auch angeregte Zustände den Plasmazustand stark beeinflussen.

Bei der Bestimmung der optischen Eigenschaften konnten wesentliche Verbesserungen erzielt werden:

- Die Aufspaltung der Energieniveaus durch die Spin-Bahn-Kopplung wird berücksichtigt, die bei hochionisierten Hoch-Z-Elementen wichtig ist. Die

freien Elektronen werden als homogenes Elektronengas behandelt und das analytische, parametrisierte Potential um einen von der Elektronendichte abhängigen Term erweitert. Durch dieses Modellpotential kann der Einfluß der im Plasma vorhandenen freien Elektronen auf Bindungsenergien und Wellenfunktionen erfaßt werden.

- Während in bisher publizierten, vergleichbaren Modellen die Photoanregungs- und Photoionisationsquerschnitte unter Verwendung abgeschirmter Wasserstoffwellenfunktionen berechnet wurden, werden in der vorliegenden Arbeit relativistische Wellenfunktionen benutzt, die aus der Lösung der DIRAC-Gleichung im Modellpotential folgen.

Es ist zu erwarten, daß numerische Simulationen, die auf den Resultaten der vorliegenden Arbeit aufbauen, eine bessere Übereinstimmung mit experimentellen Ergebnissen zeigen, als dies bisher möglich war. Die Anwendung des hier entwickelten Modells auf konkrete experimentelle Fälle unter Einschluß von Hydrodynamik und Strahlungstransport geht über den Rahmen dieser Dissertation hinaus und bleibt künftiger Arbeit vorbehalten.

Anhang A

Parameter für analytische Atompotentiale

Das in Kapitel 1 eingeführte analytische Potential ist für jedes Ion mit Kernladung Z , Rumpfladung $Z_c = Z - N + 1$ und N gebundenen Elektronen durch die beiden Parameter d und α eindeutig festgelegt

$$V(r) = \frac{1}{r} \left((Z - Z_c) \left(1 - \frac{1}{H \left(\exp\left(\frac{r}{d}\right) - 1 \right) + 1} \right) - Z \right), \quad (\text{A.1})$$

$$H = d\alpha (Z - Z_c)^{0.4}. \quad (\text{A.2})$$

Da in der Literatur für den relativistischen Fall nur Werte für einige neutrale Elemente zu finden sind und die Bestimmung von α und d sehr aufwendig ist, werden die im Rahmen der vorliegenden Arbeit ermittelten und verwendeten Parameter in diesem Anhang aufgelistet. Diese wurden, wie bereits erläutert, durch Minimierung der Summe der quadratischen Abweichungen der Energieeigenwerte – im analytischen Potential des Grundzustands – von Dirac-Fock-Slater(DFS)-Werten ermittelt. Die DFS-Energieeigenwerte wurden für den Grundzustand aller Ionen der Elemente Aluminium, Eisen und Gold mit dem Programm HEX (Liberman *et al.* 1971 [30]) berechnet.

Für wasserstoffähnliche Ionen reduziert sich das Potential unabhängig von der Wahl der Parameter auf das COULOMB-Potential des Kerns, daher ist eine spezielle Anpassung in diesem Fall nicht erforderlich.

	d	α		d	α		d	α
I	0.8968	1.147	V	0.2574	1.633	IX	0.1724	3.029
II	0.4948	1.178	VI	0.2408	1.864	X	0.1250	3.794
III	0.3413	1.252	VII	0.2233	2.122	XI	0.05647	4.496
IV	0.2744	1.462	VIII	0.2020	2.495	XII	0.02103	6.454

Tabelle A.1: Parameter des analytischen Potentials für Aluminium.

	d	α		d	α		d	α
I	0.6855	0.9666	X	0.3168	1.825	XIX	0.09777	4.049
II	0.5879	1.049	XI	0.2919	1.980	XX	0.09361	4.584
III	0.4992	1.127	XII	0.2632	2.152	XXI	0.08736	5.314
IV	0.4583	1.197	XIII	0.2277	2.326	XXII	0.07702	6.354
V	0.4285	1.276	XIV	0.1896	2.499	XXIII	0.05793	7.842
VI	0.4017	1.361	XV	0.1543	2.687	XXIV	0.02732	9.289
VII	0.3789	1.457	XVI	0.1267	2.966	XXV	0.01030	13.33
VIII	0.3587	1.566	XVII	0.1030	3.318			
IX	0.3390	1.688	XVIII	0.1006	3.641			

Tabelle A.2: Parameter des analytischen Potentials für Eisen.

	d	α		d	α		d	α
I	0.6200	1.021	XXVII	0.1832	1.721	LIII	0.07412	3.977
II	0.5421	1.025	XXVIII	0.1815	1.771	LIV	0.07403	4.152
III	0.5007	1.041	XXIX	0.1794	1.882	LV	0.07396	4.344
IV	0.4683	1.060	XXX	0.1774	1.876	LVI	0.07387	4.556
V	0.4407	1.081	XXXI	0.1754	1.932	LVII	0.07377	4.792
VI	0.4164	1.104	XXXII	0.1735	1.991	LVIII	0.07395	5.348
VII	0.3939	1.126	XXXIII	0.1716	2.056	LIX	0.07395	5.348
VIII	0.3739	1.150	XXXIV	0.1700	2.120	LX	0.07388	5.674
IX	0.3541	1.173	XXXV	0.1666	2.184	LXI	0.07371	6.044
X	0.3354	1.195	XXXVI	0.1630	2.252	LXII	0.07301	6.455
XI	0.3175	1.217	XXXVII	0.1592	2.323	LXIII	0.06955	6.907
XII	0.3012	1.241	XXXVIII	0.1552	2.397	LXIV	0.06526	7.415
XIII	0.2869	1.265	XXXIX	0.1509	2.474	LXV	0.06004	7.982
XIV	0.2730	1.289	XL	0.1470	2.559	LXVI	0.05301	8.549
XV	0.2595	1.313	XLI	0.1424	2.644	LXVII	0.04682	9.209
XVI	0.2468	1.337	XLII	0.1375	2.732	LXVIII	0.04072	10.01
XVII	0.2350	1.362	XLIII	0.1323	2.823	LXIX	0.03419	11.02
XVIII	0.2240	1.388	XLIV	0.1267	2.918	LXX	0.02810	12.21
XIX	0.2132	1.414	XLV	0.1202	3.016	LXXI	0.02765	13.38
XX	0.2033	1.441	XLVI	0.1135	3.116	LXXII	0.02694	14.89
XXI	0.1998	1.476	XLVII	0.1066	3.220	LXXIII	0.02574	16.89
XXII	0.1965	1.512	XLVIII	0.09958	3.327	LXXIV	0.02368	19.67
XXIII	0.1935	1.550	XLIX	0.09316	3.441	LXXV	0.02121	23.15
XXIV	0.1906	1.590	L	0.08696	3.562	LXXVI	0.01651	28.26
XXV	0.1880	1.631	LI	0.08041	3.687	LXXVII	0.008198	34.70
XXVI	0.1855	1.675	LII	0.07422	3.817	LXXVIII	0.003046	50.05

Tabelle A.3: Parameter des analytischen Potentials für Gold.

Anhang B

Das Programm SAPHIR

Das Programm SAPHIR zur Bestimmung des Plasmazustands und zur Berechnung der Extinktions- und Emissionskoeffizienten ist in Standard-FORTRAN77 geschrieben und besteht aus ungefähr 11000 Zeilen, wobei ungefähr 9000 Zeilen auf Vereinbarungen und Anweisungen entfallen. Die Größe des benötigten Hauptspeichers hängt von den gewählten Parametern für die Anzahl der Elemente, der Anzahl der Ionisationsstufen je Element und der gewünschten Unterteilung des Gitters der Photonenenergie ab, liegt jedoch bei mindestens 50 Mbyte. Einen Eindruck von der Struktur des Programms vermitteln Abb. B.1 bis Abb. B.4, wobei der Übersichtlichkeit wegen nur die wichtigen Unterprogramme dargestellt sind. In der Grobstruktur ist das Programm an das in der CPC-Bibliothek veröffentlichte Programm IONMIX (MacFarlane 1989 [6]) angelehnt, von dem auch einzelne Unterprogramme (VOIGT, OPACYS) in leicht veränderter Form übernommen wurden. Die zugrundeliegenden physikalischen Methoden sind jedoch völlig verschieden, so daß einzelne Unterprogramme auch bei gleichlautendem Namen *nicht* austauschbar sind.

Zunächst wird das Unterprogramm INPUT aufgerufen, das von einer Datei die Eingabedaten einliest und die Vorbesetzung aller tabellierten Werte vornimmt. Danach folgt eine Doppelschleife über Elektronentemperatur und Teilchendichte, die das gesamte Programm außer der letzten Ausgabe umfaßt. Der erste Schritt in dieser Doppelschleife besteht in der Berechnung des Plasmazustands (Kapitel 3) im Unterprogramm EOS. Danach werden die Bindungsenergie aller relevan-

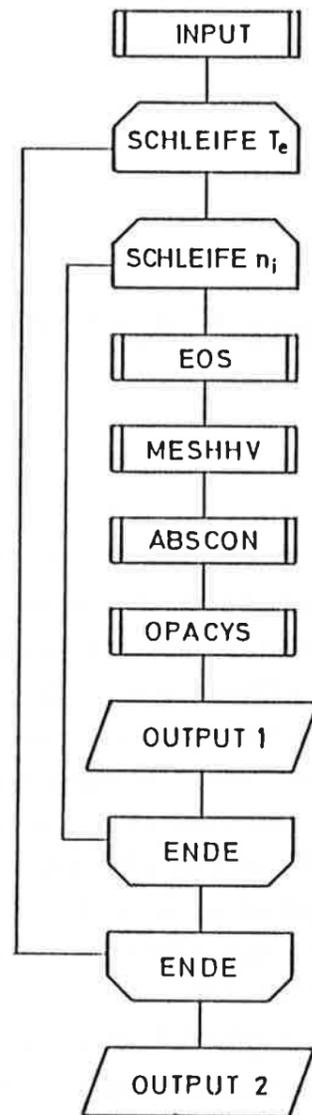


Abb. B.1: Aufbau des Programms SAPHIR

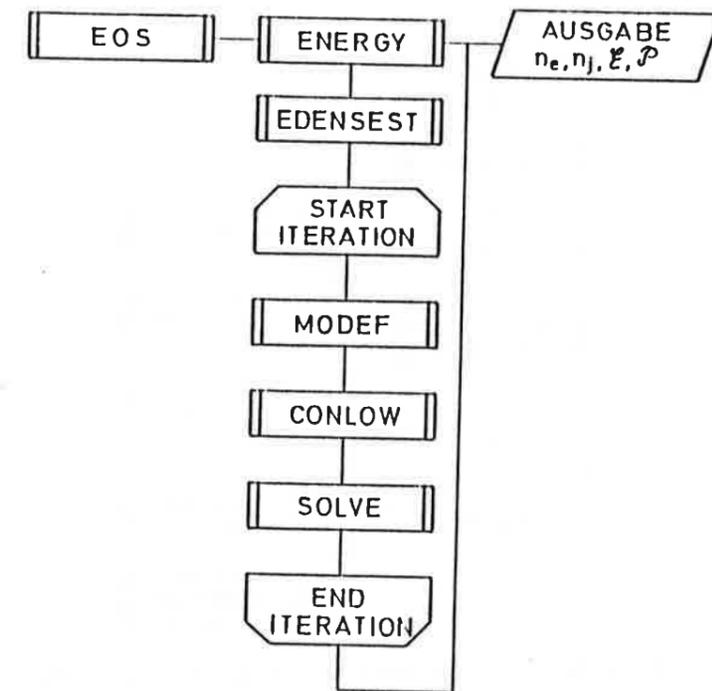


Abb. B.2: Aufbau des Unterprogramms EOS

ten Zustände durch Lösen der DIRAC-Gleichung im Modellpotential (siehe 4.2) ermittelt, und es wird ein geeignetes Gitter der Photonenenergie gesucht, das die Position der Linien und der Absorptionskanten berücksichtigt (MESHVV). An diesen Gitterstellen werden die einzelnen Beiträge zur Absorption, Emission und Streuung und anschließend der totale Extinktions- und Emissionskoeffizient berechnet (ABSCON). Das danach folgende Unterprogramm OPACYS dient der Mittelung dieser Koeffizienten mit verschiedenen Gewichtsfunktionen, um die PLANCK-Opazität, die ROSSELAND-Opazität und gruppengemittelte Emissions- und Extinktionskoeffizienten zu erhalten, die dann auf verschiedenen Dateien ausgegeben werden (OUTPUT1).

Den groben Aufbau des Unterprogramms EOS, das – in Abhängigkeit von Elektronentemperatur und Teilchendichte – die Dichte der freien Elektronen, die Häufigkeit der Zustände, die innere Energie, die spezifische Wärme und den

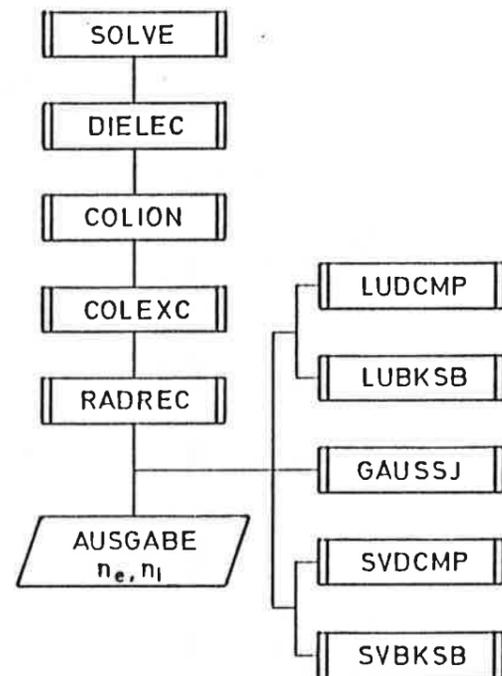


Abb. B.3: Aufbau des Unterprogramms SOLVE

Druck bestimmt, zeigt Abb. B.2. Hierzu wird mehrmals bei verschiedenen Temperaturen und Dichten ein Unterprogramm aufgerufen, das die innere Energie und die Elektronendichte bestimmt (ENERGY). Darin werden zuerst ein Startwert für die Elektronendichte abgeschätzt (EDENSEST) und die Ionisations- und Anregungszustände ausgewählt. Danach werden in MODEF die atomaren Daten mittels der in Kapitel 2 beschriebenen Methoden berechnet, die erlaubten Übergänge zwischen den Zuständen bestimmt und die Zustände eliminiert, die aufgrund des Dichtekriteriums (Gl. 3.71) nicht erlaubt sind. Die Berechnung der Kontinuumsabsenkung, die Reduzierung der statistischen Gewichte und die Verschiebung der Energie der gebunden-frei Übergänge erfolgt anschließend in CONLOW. Im Unterprogramm SOLVE (siehe Abb. B.3) werden die Raten der dielektronischen Rekombination (DIELEC), die Elektronenstoßraten (COLION, COLEXC) und die strahlenden Raten (RADREC) für alle erlaubten Übergänge bestimmt und die stationären Ratengleichungen unter Verwendung verschiedener numerischer Methoden (LUDCMP, LUBKSB, SVDCMP, SVBKSB, GAUSSJ, siehe 3.4) gelöst. Weicht die anhand der stationären Lösungen ermittelte Elektronendichte um mehr als 10^{-4} von der anfangs gewählten Elektronendichte ab,

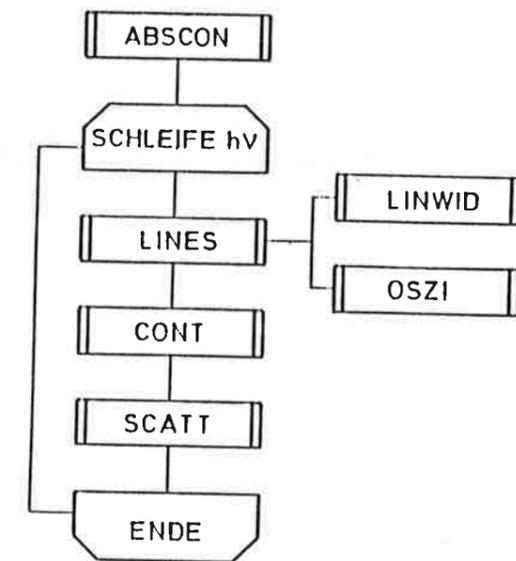


Abb. B.4: Aufbau des Unterprogramms ABSCON

so wird ein neuer Schätzwert für die Elektronendichte ermittelt und so lange iteriert, bis dieses Kriterium erfüllt ist (siehe 3.4). Im Unterprogramm ABSCON (siehe Abb. B.4) wird eine Schleife über die Photonenenergie durchlaufen, wobei zu jeder Photonenenergie jeweils der Anteil der gebunden-gebunden, gebunden-frei und frei-frei Übergänge (LINES, CONT) und der Streuung (SCATT) zum Extinktions- und Emissionskoeffizienten ermittelt und aufsummiert wird.

Das Programm wurde auf Arbeitsplatzrechnern vom Typ IBM-Risc 6000 und SUN-Sparc getestet, mit denen auch alle für die vorliegende Arbeit notwendigen Rechnungen durchgeführt wurden. Da nur der FORTRAN77-Befehlssatz verwendet wurde, ist das Programm aber sehr portabel. Die benötigte CPU-Rechenzeit hängt von den Eingabedaten und von der Rechenleistung des Arbeitsplatzrechners ab, liegt aber typischerweise im Bereich mehrerer Stunden bis Tage für einen Temperatur-Dichte-Punkt.

Literaturverzeichnis

- [1] R. C. Arnold und J. Meyer-ter-Vehn, Rep. Prog. Phys. **50**, 559 (1987).
- [2] R. Sigel, *Laser Generated Intense Thermal Radiation*, in A. Rubenchik und S. Witkowski (Hrsg.), *Handbook of Plasma Physics Vol. 3: Physics of Laser Plasma*, North-Holland, Amsterdam (1991).
- [3] W. F. Huebner, *Atomic and Radiative Processes in the Solar Interior*, in P. A. Sturrock (Hrsg.), *Physics of the Sun*, D. Reidel Publishing Company, Dordrecht (1986).
- [4] S. Skupsky, Phys. Rev. A **21**(4), 1316 (1980).
- [5] K. Eidmann, *Emission and Absorption of Radiation in Laser-produced Plasmas*, in A. Caruso und E. Sindoni (Hrsg.), *Course and Workshop of the International School of Plasma Physics Piero Caldirola: Inertial Confinement Fusion*, Editrice Compositori, Bologna (1989).
- [6] J. J. MacFarlane, Comput. Phys. Commun. **56**, 259 (1989).
- [7] M. Itho, T. Yabe und S. Kiyokawa, Phys. Rev. A **35**(1), 233 (1987).
- [8] A. Rickert, *Berechnung frequenzabhängiger Opazitäten für Hoch-Z Plasma mit ℓ -Aufspaltung*, Diplomarbeit, Technische Universität München und Report MPQ-148, Max-Planck-Institut für Quantenoptik, Garching (1989).
- [9] A. Rickert und J. Meyer-ter-Vehn, Laser Part. Beams **8** (4), 715 (1990).

- [10] A. Rickert und J. Meyer-ter-Vehn, *Opacities for High-Z Plasma Simulations*, in *High Energy Density in Matter Produced by Heavy Ion Beams: Annual Report 1990*, Report GSI-91-27 (ISSN 0171-4546), Gesellschaft für Schwerionenforschung, Darmstadt (1991).
- [11] A. E. S. Green, D. L. Sellin und A. S. Zachor, *Phys. Rev.* **184**(1), 1 (1969).
- [12] W.-D. Kraeft, D. Kremp, W. Ebeling und G. Röpke, *Quantum Statistics of Charged Particle Systems*, Plenum Press, New York und London (1986).
- [13] D. R. Hartree, *The Calculation of Atomic Structures*, J. Wiley, New York (1957).
- [14] P. S. Ganas und A. E. S. Green, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **13**, 1171 (1973).
- [15] P. S. Ganas, *J. Appl. Phys.* **62**(1), 1 (1987).
- [16] P. S. Ganas und A. E. S. Green, *J. Chem. Phys.* **73**(8), 3891 (1980).
- [17] P. A. Kazaks, P. S. Ganas und A. E. S. Green, *Phys. Rev. A* **6**(6), 2169 (1972).
- [18] A. E. S. Green, *Adv. Quantum Chem.* **7**, 263 (1973).
- [19] R. Latter, *Phys. Rev.* **99**, 510 (1955).
- [20] F. Herman und S. Skillman, *Atomic Structure Calculations*, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N.J. (1963).
- [21] J. W. Darewych, A. E. S. Green und D. L. Sellin, *Phys. Rev. A* **3**(1), 502 (1971).
- [22] F. Salvat, J. D. Martinez, R. Mayol und J. Parellada, *Phys. Rev. A* **36**(2), 467 (1987).

- [23] J. N. Bass, A. E. S. Green und J. H. Wood, *Adv. Quantum Chem.* **7**, 263 (1973).
- [24] Y. Hahn und K. M. Watson, *Phys. Rev. A* **7**(2), 491 (1973).
- [25] P. P. Szylik und A. E. S. Green, *Phys. Rev. A* **9**(5), 1885 (1974).
- [26] R. H. Garvey, C. H. Jackman und A. E. S. Green, *Phys. Rev. A* **12**(4), 1144 (1975).
- [27] F. J. Rogers, *Phys. Rev. A* **23**(3), 1008 (1981).
- [28] F. J. Rogers, B. G. Wilson und C. A. Iglesias, *Phys. Rev. A* **38**(10), 5007 (1988).
- [29] C. A. Iglesias, F. J. Rogers und B. G. Wilson, *Astrophys. J.* **322**, L45 (1987).
- [30] D. A. Liberman, D. T. Cromer und J. T. Waber, *Comput. Phys. Commun.* **2**, 107 (1971).
- [31] D. Liberman, J. T. Waber und D. T. Cromer, *Phys. Rev.* **137**(1A), A27 (1965).
- [32] J. A. Bearden und F. Burr, *Rev. Mod. Phys.* **39**(1), 125 (1967).
- [33] C. E. Moore, *Atomic Energy Levels as Derived from the Analyses of Optical Spectra*, National Bureau of Standards Circular 467 Vol.I, (1949).
- [34] C. E. Moore, *Atomic Energy Levels as Derived from the Analyses of Optical Spectra*, National Bureau of Standards Circular 467 Vol.II, (1952).
- [35] K. G. Dyall, I. P. Grant, C. T. Johnson, F. A. Parpia und E. P. Plummer, *Comput. Phys. Commun.* **55**, 425 (1989).
- [36] T. A. Koopmans, *Physica* **1**, 104 (1933).
- [37] R. D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, University of California Press, California (1981).

- [38] T. A. Carlson, C. W. Nestor Jr., N. Wasserman and J. D. McDowell, *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **2**, 63 (1970).
- [39] W. L. Wiese, M. W. Smith und 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).
- [40] J. R. Fuhr, G. A. Martin und W. L. Wiese, *Atomic Transition Probabilities, Iron through Nickel*, J. Phys. Chem. Ref. Data Vol.17, Suppl. No.4 (1988).
- [41] D. R. Lide (Hrsg.), *CRC Handbook of Chemistry and Physics*, CRC Press, Boston (1990).
- [42] F. Perrot, *Physica Scripta* **39**, 332 (1989).
- [43] P. Pankratov und J. Meyer-ter-Vehn, zur Veröffentlichung in *Phys. Rev. A* angenommen.
- [44] D. R. Bates und A. Damgaard, *Phil. Trans. Roy. Soc. Lond. A* **242**, 101 (1949).
- [45] C. E. Moore, *Atomic Energy Levels as Derived from the Analyses of Optical Spectra*, National Bureau of Standards Circular 467 Vol.III, (1958).
- [46] N. P. Penkin und I. Y. Slavenas, *Opt. Spectrosc.* **15**, 3 (1963).
- [47] W. L. Wiese, J. R. Fuhr, W. C. Martin, A. Musgrove und J. Sugar, *Z. Phys. D* **21**, Suppl. S147 (1991).
- [48] W. Ebeling, W.-D. Kraeft und D. Kremp, *Theory of Bound States and Ionization Equilibrium in Plasmas and Solids*, Akademie Verlag, Berlin (1976).
- [49] A. Förster, *Zusammensetzung, Zustandsgleichung, Phasendiagramm und Ionisationskinetik von stark gekoppelten und partiell ionisierten Plasmen*, Dissertation, Humboldt-Universität zu Berlin, Berlin (1991).

- [50] H. R. Griem, *Plasma Spectroscopy*, McGraw-Hill, New York (1964).
- [51] D. Mihalas, *Stellar Atmospheres*, W. H. Freeman and Company, San Francisco (1978).
- [52] F. J. Rogers, *Phys. Rev. A* **19**(1), 375 (1979).
- [53] F. J. Rogers, *Astrophys. J.* **310**, 723 (1986).
- [54] C. A. Iglesias und F. J. Rogers, *Astrophys. J.* **371**, 408 (1991).
- [55] W. F. Huebner, A. L. Merts, N. H. Magee, Jr. und M. F. Argo, *Astrophysical Opacity Library*, Report LA-6760-M, Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos (1977).
- [56] D. G. Hummer und D. Mihalas, *Astrophys. J.* **331**, 794 (1988).
- [57] A. K. Pradhan, *Physica Scripta* **35**, 840 (1987).
- [58] M. J. Seaton, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **20**, 6363 (1987).
- [59] C. A. Iglesias und F. J. Rogers, *Astrophysical Opacities at LLNL*, in G. Berthomieu und M. Cribier (Hrsg.), *Inside the Sun*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht (1990).
- [60] J. Abdallah, Jr., R. E. H. Clark und J. M. Peek, *Phys. Rev. A* **45**(6), 3980 (1992).
- [61] B. Kärcher und J. Meyer-ter-Vehn, *Laser Part. Beams* **8** (4), 679 (1990).
- [62] B. Kärcher, *Atomphysikalische Beschreibung Ionenstrahl-erzeugter Plasmen*, Dissertation, Technische Universität München, München (1991) und Report MPQ-158, Max-Planck-Institut für Quantenoptik, Garching (1991).
- [63] P. Wang, *Computation and Application of Atomic Data for Inertial Confinement Fusion Plasmas*, Report UWFDM-855, University of Wisconsin, Wisconsin (1991).

- [64] W. A. Lokke und W. H. Grasberger, *XSNQ-U - A Non-LTE Emission and Absorption Coefficient Subroutine*, Report UCRL-52276, Lawrence Livermore Laboratory, University of California, Livermore (1977).
- [65] G. Pollak, *Detailed Physics of XSN-U Opacity Package*, Report LA-UR-90-2423, Los Alamos Laboratory, Los Alamos (1990).
- [66] L. M. Biberman, V. S. Vorob'ev und I. T. Yakubov, *Kinetics of Nonequilibrium Low-Temperature Plasmas*, Consultants Bureau, New York (1987).
- [67] H. Van Regemorter, *Astrophys. J.* **136**, 906 (1962).
- [68] D. H. Sampson und H. L. Zang, *Phys. Rev. A* **45**(3), 1556 (1992).
- [69] M. Abramowitz und I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover Publications, New York (1972).
- [70] L. H. Auer und D. Mihalas, *Astrophys. J.* **184**, 151 (1973).
- [71] W. Lotz, *Astrophys. J. Suppl.* **14**, 207 (1967).
- [72] W. Lotz, *Z. Phys.* **206**, 205 (1968).
- [73] W. Lotz, *Z. Phys.* **216**, 241 (1968).
- [74] W. Lotz, *Z. Phys.* **220**, 466 (1969).
- [75] A. Burgess und M. C. Chidichimo, *Mon. Not. R. astr. Soc.* **203**, 1269 (1983).
- [76] R. A. Phaneuf, *Experiments on Electron-Impact Excitation and Ionization of Ions*, in F. Brouillard (Hrsg.), *Atomic Processes in Electron-Ion and Ion-Ion Collisions*, Plenum Press, New York und London (1986).
- [77] Ya. B. Zel'dovich und Yu. P. Raizer, *Physics of Shock Waves and High-Temperature Hydrodynamic Phenomena*, Academic Press, New York (1966).
- [78] M. J. Seaton, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **119**, 81 (1959).

- [79] D. J. McLaughlin und Y. Hahn, *Phys. Rev. A* **43**(3), 1313 (1991).
- [80] Y. Hahn und D. W. Rule, *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **10**(13), 2689 (1977).
- [81] Y. S. Kim und R. H. Pratt, *Phys. Rev. A* **27**(6), 2913 (1983).
- [82] C. M. Lee und R. H. Pratt, *Phys. Rev. A* **14**(3), 990 (1976).
- [83] J. C. Slater, *Quantum Theory of Atomic Structure*, McGraw-Hill, New York (1960).
- [84] D. E. Post, R. V. Jensen, C. B. Tarter, W. H. Grasberger und W. A. Lokke, *At. Data Nucl. Data Tables* **20**(5), 398 (1977).
- [85] A. Burgess, *Astrophys. J.* **141**, 1588 (1965).
- [86] K. Darée, *Two-Temperature Models for Steady-State Ionization*, Report-Vorabdruck, Deutsch-Französisches Forschungsinstitut Saint-Louis, Saint-Louis (1992).
- [87] Th. Peter, *Zur effektiven Ladung schneller Ionen in heißen dichten Plasmen*, Diplomarbeit, Technische Universität München und Report MPQ-105, Max-Planck-Institut für Quantenoptik, Garching (1985).
- [88] Th. Peter, *Energieverlust von Schwerionenstrahlen in dichten Plasmen*, Dissertation, Technische Universität München und Report MPQ-137, Max-Planck-Institut für Quantenoptik, Garching (1988).
- [89] R. M. More, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **27**, 345 (1982).
- [90] R. Marchand, S. Caillé und Y. T. Lee, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **43**(2), 149 (1990).
- [91] L. D. Landau und E. M. Lifschitz, *Lehrbuch der Theoretischen Physik, Band III: Quantenmechanik*, Akademie-Verlag, Berlin (1984).
- [92] A. M. Naqvi, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **4**, 597 (1964).

- [93] R. M. More, *Atomic Physics in Inertial Confinement Fusion*, Report UCRL-84991 I/II, Lawrence Livermore Laboratory, Livermore (1981).
- [94] J. C. Stewart und K. D. Pyatt, Jr., *Astrophys. J.* **144**, 1203 (1966).
- [95] D. D. Clayton, *Principles of Stellar Evolution and Nucleosynthesis*, McGraw-Hill, New York (1968).
- [96] G. B. Zimmerman und R. M. More, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **23**, 517 (1980).
- [97] M. Busquet, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **43**, 91 (1990).
- [98] G. D. Tsakiris und K. Eidmann, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **38**, 353 (1987).
- [99] W. Zittel, *Elektronische Struktur hochkomprimierter Materie*, Report MPQ-111, Max-Planck-Institut für Quantenoptik, Garching (1986).
- [100] J. Meyer-ter-Vehn und W. Zittel, *Phys. Rev. B* **37**(15), 8674 (1988).
- [101] W. H. Press, B. P. Flannery, S. A. Teukolsky und W. T. Vetterling, *Numerical Recipes*, Cambridge University Press, Cambridge (1986).
- [102] The Numerical Algorithms Group Ltd., *The NAG Fortran Library Manual - Mark 14*, Oxford (1990).
- [103] A. Burgess, *Astrophys. J.* **139**, 776 (1964).
- [104] C. Mahn, *Über das unterschiedliche Ionisationsgleichgewicht wasserstoff- und alkali-ähnlicher Ionen in optisch dünnen Plasmen*, Report IPP 3/52, Institut für Plasmaphysik, Garching (1967).
- [105] R. M. More, K. H. Warren, D. A. Young und G. B. Zimmerman, *Phys. Fluids* **31**(10), 3059 (1988).
- [106] M. M. Basko, *Sov. High Temper.* **23**, 388 (1985).
- [107] B. F. Rozsnyai, *Phys. Rev. A* **5**(3), 1137 (1972).

- [108] W. Greiner, *Theoretische Physik Band 3: Klassische Elektrodynamik*, Harri Deutsch, Thun und Frankfurt am Main (1986).
- [109] H. Mayer, *Methods of Opacity Calculations*, Report LA-647, Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, N.M. (1947).
- [110] G. C. Pomraning, *The Equations of Radiation Hydrodynamics*, Pergamon Press, Oxford (1973).
- [111] H. Nguyen, M. Koenig und G. Coulaud, *Phys. Lett.* **106 A**, 34 (1984).
- [112] M. E. Rose, *Relativistische Elektronentheorie I und II*, Bibliographisches Institut, Mannheim (1971).
- [113] I. P. Grant, *Adv. Phys.* **19**, 747 (1970).
- [114] F. Salvat und R. Mayol, *Comput. Phys. Commun.* **62**, 65 (1991).
- [115] K. Siegbahn (Hrsg.), *ESCA*, Almquist & Wiksells Boktryckeri AB, Upsalla (1967).
- [116] C. P. Bhalla, *Nucl. Instr. and Meth.* **90**, 149 (1970).
- [117] C. P. Bhalla, *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **3**, 916 (1970).
- [118] C. P. Bhalla, *Nucl. Instr. and Meth.* **110**, 227 (1973).
- [119] T. Andersen und G. Sørensen, *Phys. Rev. A* **5**(6), 2447 (1972).
- [120] N. P. Penkin und L. N. Shabanova, *Opt. Spectrosc.* **14**, 5 (1963).
- [121] N. P. Penkin und L. N. Shabanova, *Opt. Spectrosc.* **14**, 87 (1963).
- [122] N. P. Penkin und L. N. Shabanova, *Opt. Spectrosc.* **18**, 504 (1965).
- [123] M. Baranger, *Spectral Line Broadening in Plasmas*, in D. R. Bates (Hrsg.), *Atomic and Molecular Processes*, Academic Press, New York und London (1962).

- [124] I. I. Sobelman, L. A. Vainshtein und E. A. Yukov, *Excitation of Atoms and Broadening of Spectral Lines*, Springer, Berlin Heidelberg (1981).
- [125] H. R. Griem, Phys. Rev. **165**(1), 258 (1968).
- [126] J. C. Stewart und K. D. Pyatt, Jr., *Theoretical Study of Optical Properties*, Report AFSWC-TR-61-71, Air Force Special Weapons Center, Kirtland (1961) und Report GA-2528, General Atomic Division, San Diego (1961).
- [127] B. H. Armstrong, R. R. Johnston, P. S. Kelly, H. E. DeWitt und S. G. Brush, *Opacity of High Temperature Air*, in C. A. Rouse (Hrsg.), *Progress in High Temperature Physics and Chemistry Vol. 1*, Pergamon Press, Oxford New York (1966).
- [128] B. H. Armstrong und K. L. Purdum, Phys. Rev. **150**(1), 51 (1966).
- [129] J. D. Hey, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **16**, 575 (1976).
- [130] J. D. Hey und R. J. Bryan, J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer **17**, 221 (1977).
- [131] T. E. H. Walker und J. T. Waber, J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. **6**, 1165 (1973).
- [132] T. E. H. Walker und J. T. Waber, J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. **7**, 674 (1974).
- [133] I. M. Band, Yu. I. Kharitonov und M. B. Trzhaskovskaya, Atomic Data and Nuclear Data Tables **23**(5), 443 (1979).
- [134] J. A. Gaunt, Phil. Trans. R. Soc. London **A 229**, 163 (1930).
- [135] W. J. Karzas und R. Latter, Astrophys. J. Suppl. **6**, 167 (1961).
- [136] D. H. Menzel und C. L. Pekeris, Mon. Not. R. Astron. Soc. **96**, 77 (1935).
- [137] P. J. Cox und R. T. Giuli, *Principles of Stellar Structure*, Vol. 1, Gordon and Breach, New York (1968).

- [138] R. R. Peterson und G. A. Moses, Comput. Phys. Commun. **28**, 405 (1983).

Danksagung

Die vorliegende Dissertation wurde am Institut für Quantenoptik in Garching bei München durchgeführt.

Mein besonderer Dank gilt Herrn Prof. Dr. Gerd Rempe für die engagierte Betreuung, die diese Arbeit ermöglicht hat. Herrn Dr. Siegfried Reuter danke ich für die Aufnahme in die Laserplasma Arbeitsgruppe und Herrn Dr. Gerd Rempe für die Vergabe eines Promotionsstipendiums, das mir die Durchführung dieser Arbeit ermöglichte. Ferner möchte ich Herrn Dr. Bernd Kämpfer für die Diskussionen danken, die mir während der ganzen Zeit stets sehr hilfreich waren. Herrn Dr. Gerd Rempe danke ich für die Unterstützung in allen Fragen der elektronischen Messtechnik. An dieser Stelle möchte ich auch meiner Frau Cornelia für die Unterstützung während der ganzen Zeit stets hilfreich zur Seite stand.

Quantenoptik-Institut für Quantenoptik in

Prof. Dr. Gerd Rempe
Gelingen dieser Arbeit bei-
danke ich für die Aufnahme in
für die Vergabe eines Promo-
Arbeit ermöglichte. Ferner
Diskussionen danken, die mir
danke ich für die Unterstützung
tung. An dieser Stelle möchte
während der ganzen Zeit stets



