

原子平均离化度的研究*

孟续军 孙永盛 李世昌

北京应用物理与计算数学研究所

北京 100088

1993年3月12日收到

用相对论 Hartree-Fock-Slater 自洽场方法计算原子平均离化度 n_f 的具体方法, 作为例子给出了 Au, Cu 两种元素的具体结果, 在温度 $kT = 20\text{eV} - 20\text{keV}$, 密度 $D = 0.1D_0 - 100D_0$ 范围内, 研究了 n_f 随温度、密度的变化规律。

PACC: 3120

一、引言

在各种热等离子体过程的模拟中, 原子的平均离化度 n_f 是很重要的参量。惯性约束聚变研究, 计算冕区等离子体吸收激光能量需要 n_f ; 靶丸芯部出现了聚变点火, 高能 α 粒子慢化, 聚变条件(或燃烧波)向外传播, 理论模拟这种过程也需要 n_f 。在热传导系数计算中(包括辐射传导和电子传导), n_f 是很关键的参量。此外, n_f 也用于计算电子和离子双温状态方程。

虽然可以用多种方法计算原子平均离化度, 但在局部热动平衡情况下, 以平均原子模型的精度比较高。本文采用 Dirac 相对论 HFS (Hartree-Fock-Slater) 自洽场平均原子模型, 计算了 Cu 和 Au 两种元素原子的平均离化度, 在我们感兴趣的温度、密度范围内, 研究了它们的变化规律。

二、理论

在单一元素组成的物质中, 将物质按原子数等体积分割, 并把每个原子占有的体积等效为一个原子球胞, 若物质的原子量是 A , 密度是 D , 原子球的半径就是

$$R_0 = \left(\frac{3A}{4\pi DN_0} \right)^{1/3},$$

N_0 是阿伏加德罗常数, 这种球胞就是我们要研究的有界原子。在这种彼此等同的原子球内, 含有正能态(或自由)电子与束缚电子, 总电荷密度为

* 国家自然科学基金资助的课题。

$$\rho(r) = \rho_s(r) + \rho_f(r). \quad (1)$$

其中束缚电子密度表示为

$$\rho_s(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \sum_{i=1}^n N_i [G_i^2(r) + F_i^2(r)] \quad (2)$$

$G_i(r)$, $F_i(r)$ 分别为 Dirac 方程解出的大、小分量波函数, n 是由计算定出的束缚态个数, N_i 是轨道电子占据数, 它由 Fermi-Dirac 统计分布确定:

$$N_i = \frac{2|K_i|}{\exp[(E_i - \mu)/T] + 1} \quad (3)$$

式中, E_i 是 i 轨道电子能量, μ 是化学势, 它们同波函数 $G_i(r)$, $F_i(r)$ 一起, 由 Dirac 波动方程自洽求解一起给出. K_i 是相对论量子数, 它与轨道角动量的对应关系如下:

$$K_i = \begin{cases} -l_i - 1, & \text{当 } j_i = l_i + \frac{1}{2}; \\ l_i, & \text{当 } j_i = l_i - \frac{1}{2}. \end{cases} \quad (4)$$

这里 l_i, j_i 分别是电子的轨道角动量与总角动量.

正能态电子数密度 $\rho_f(r)$ 也满足 Fermi-Dirac 分布:

$$\rho_f(r) = \frac{1}{\pi^2} \int_{p_0(r)}^{\infty} \frac{p^2 dp}{\exp[(\sqrt{p^2 C^2 + C^4} - C^2 - V(r) - \mu)/T + 1]} \quad (5)$$

式中 $p_0(r) = \sqrt{2V(r) + \frac{V^2(r)}{C^2}}$ 是自由电子的经典动量下限.

有了电荷密度分布 $\rho(r)$, 便可以构造原子系统的自洽势, 它包含三个部分:

1. 静电库仑势 $V_c(r)$ 由 Poisson 方程定出:

$$\nabla^2 V_c(r) = 4\pi\rho(r). \quad (6)$$

2. 交换势 $V_{ex}(r)$. 考虑温度效应后, 交换势 $V_{ex}(r)$ 的表示为^[1]

$$V_{ex}(r) = \begin{cases} [1 - \lambda^2(r)]V_{ex}^0(r) + \lambda^2(r)V_{ex}^M(r), & (0 \leq \lambda \leq 1), \\ V_{ex}^M(r), & (\lambda > 1), \end{cases} \quad (7)$$

其中

$$V_{ex}^0(r) = \frac{3}{2} \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} \rho^{1/3}(r),$$

$$V_{ex}^M(r) = \pi\rho(r)/T,$$

$$\lambda(r) = \frac{2T}{[3\pi^2\rho(r)]^{1/3}}.$$

3. 电子关联势 $V_{corr}(r)$. 在零温极限近似下, $V_{corr}(r)$ 的表示^[1]为

$$V_{corr} = \begin{cases} -0.0622 \ln r_s + 0.096 - 0.0049 r_s \ln r_s, & (r_s \leq 1), \\ \frac{0.11294}{\rho^{1/3}(r) + 0.1216} \rho^{1/3}(r), & (r_s > 1). \end{cases} \quad (8)$$

式中 $r_s = \left[\frac{3}{4\pi\rho(r)} \right]^{1/3}$ 是电子占据空间半径.

这样,原子系统内,电子感受到的总的势为

$$V(r) = V_c(r) + V_{ex}(r) + V_{corr}(r). \quad (9)$$

势的公式定了以后,就可以通过求解 Dirac 波动方程给出径向波函数的大小分量 $G_i(r)$, $F_i(r)$ 以及相应的本征能量 E_i 用原子单位系统, Dirac 径向方程:

$$\begin{aligned} \frac{dG_i}{dr} + \frac{K_i}{r} G_i &= \alpha[E_i - V(r) + c^2]F_i; \\ \frac{dF_i}{dr} - \frac{K_i}{r} F_i &= -\alpha[E_i - V(r) - c^2]G_i. \end{aligned} \quad (10)$$

这里, K_i 是 i 态相对论量子数, c 是光速,

$$\text{精细结构常数 } \alpha = c^{-1} = \frac{1}{137.036}.$$

要圆满求解方程(10),必须规定合适的边界条件:

在中心 ($r = 0$), $G_i(0) = F_i(0) = 0$, 这同求解自由原子情况相同。

在原子外边界 ($r = R_0$) 处,由于原子势的周期性,

$$F_i^2(R_0) + G_i^2(R_0) = \text{常数} \quad (11)$$

由方程(10), $G_i(R_0)$ 和 $F_i(R_0)$ 必须满足下列关系:

$$G_i(R_0) = \left[\frac{R_0}{\alpha K_i} - \sqrt{\left(\frac{R_0}{\alpha K_i} \right)^2 + 1} \right] F_i(R_0) \quad (12)$$

所需常数由归一化条件定出:

$$\int_0^{R_0} [F_i^2(r) + G_i^2(r)] dr = 1 \quad (13)$$

边界条件(11)式或(12)式,是有界原子求解与自由原子求解的主要不同之点。

待求的未知量,除 $G_i(r)$, $F_i(r)$, E_i 之外,还有化学势 μ , 为使方程组封闭,电子数守恒条件必须满足

$$\sum_{i=1}^n N_i + \int_0^{R_0} 4\pi r^2 \rho_f(r) dr = Z \quad (14)$$

这里, Z 是原子核电荷。

上述方程(1)–(14),需自洽迭代求解,才能给出满足一定精度要求的各种物理量。复杂的数值程序过程这里不作讨论,只给出与本文有关的物理结果。通过自洽求解,各束缚态电子平均占据数被同时算出,与之相应的原子平均离化度为

$$n_f = Z - \sum_{i=1}^n N_i. \quad (15)$$

三、计算结果与讨论

Au 和 Cu 是两种常用元素,特别是 Au, 在惯性约束聚变研究中占有特殊的地位,考虑到实际需要,这里分别给出了 Au, Cu 两种元素,温度 $kT = 20 \text{ eV} - 20 \text{ keV}$, 密度

$D = 0.1D_0 - 10^2D_0$ 范围的原子平均离化度, 其中 D_0 是物质常密度, 对于 Au: $Z = 79$, $D_0 = 19.29\text{g/cm}^3$, Cu: $Z = 29$, $D_0 = 8.93\text{g/cm}^3$.

主要结果分别列在表 1 和表 2 之中.

表 1 Cu 原子平均离化度 n_f
 $Z = 29, \sigma = D/D_0, D_0 = 8.93\text{g/cm}^3$

n_f (keV) \ σ	0.1	0.2	0.5	1.0	2.0	5.0	10.0	20.0	50.0	100.0
0.02	3.787	3.854	4.055	3.789	3.485	11.0	11.0	17.0	19.00	19.00
0.05	7.715	7.446	7.179	7.308	6.862	11.37	11.31	17.00	19.00	19.00
0.10	12.18	11.72	11.05	10.70	10.55	9.884	12.67	17.09	19.00	19.00
0.20	16.80	16.05	15.32	14.70	14.67	13.59	15.03	17.56	19.03	19.01
0.30	19.93	19.10	18.09	17.00	17.15	15.92	16.71	18.25	19.24	19.13
0.50	24.26	23.38	22.06	21.31	20.33	19.48	18.06	20.00	20.17	19.75
1.00	26.56	26.34	25.90	25.43	24.72	24.08	22.92	23.44	22.69	21.80
2.00	28.61	28.37	27.96	27.43	27.07	26.59	25.90	25.54	25.21	24.31
5.00	28.96	28.94	28.90	28.85	28.81	28.63	28.50	28.06	27.93	27.31
10.0	28.99	28.98	28.97	28.95	28.94	28.87	28.86	28.74	28.69	28.49
20.0	28.995	28.99	28.99	28.98	28.98	28.96	28.96	28.91	28.90	28.84

表 2 Au 原子平均离化度
 $Z = 79, \sigma = D/D_0, D_0 = 19.29\text{g/cm}^3$

n_f (keV) \ σ	0.1	0.2	0.5	1.0	2.0	5.0	10.0	20.0	50.0	100.0
0.02	4.941	5.205	4.823	5.317	4.968	11.21	31.00	31.00	43.00	49.00
0.05	10.06	10.12	9.635	10.64	10.18	13.82	18.46	31.00	43.00	49.00
0.10	16.65	15.94	15.52	15.06	16.01	18.19	21.15	31.13	43.00	49.00
0.20	25.82	24.53	23.46	22.26	22.04	22.55	23.71	32.46	43.06	49.00
0.30	33.03	31.19	29.06	28.26	28.18	27.85	28.22	28.88	35.10	49.02
0.50	42.98	40.85	37.99	36.35	35.52	34.05	34.91	34.49	38.11	49.19
1.00	58.16	55.30	51.90	49.52	47.48	45.18	44.69	44.00	44.66	50.90
2.00	68.53	67.19	64.98	62.96	60.82	58.11	56.00	55.21	51.74	54.09
5.00	76.68	76.39	75.62	74.79	73.69	71.87	70.04	67.77	65.65	63.93
10.0	78.05	77.67	77.15	76.78	76.41	75.90	75.20	74.59	73.47	71.31
20.0	78.97	78.95	78.88	78.79	78.66	78.38	78.04	77.64	76.86	75.84

表中结果清楚地表明: 在所研究的范围内,物质密度低于 5 倍常密度的区域, Au 和 Cu (Au 更明显)原子平均离化度随温度升高单调地增加. 而高于 5 倍常密度范围,随温度升高,原子平均离化度的增加不是单调的,一般在低于 0.5keV 区域存在离化度的最低点. 其原因是: 温度效应使能级、化学势下降,束缚态的数目增加. 但由于所有轨道上的电子数都在下降,因此离化度是随温度增加的. 当处于某种物质密度下,温度的略微升高使得临界正能态成为束缚态时,离化度便会随温度增加而减小. 这种情况只发生在密度不是很高的情形. 当密度很高时,温度的剧烈改变都不足以引起束缚态数目增加时,离化

度又表现为随温度增加而增加。

平均离化度随密度的变化也不是单调的，对于固定的温度，在密度不断加大的过程中，在某一密度点上，出现平均离化度的最低值，比如，对于 Au 原子， $kT = 1\text{keV}$ 时，这种离化度的最低值出现在 $\sigma = 20$ 处，此时， $n_i = 44$ ，低于 $\sigma = 20$ 的区域， n_i 随密度升高而下降；过了 $\sigma = 20$ 这一点，离化度 n_i 随密度增加而单调地上升（压致离化）。显然温度越低，在密度增加的过程中，这种压致离化现象就越明显。其原因在于物质密度对于电子离化效应有二重性：密度的增加使能级、化学势上升，但又使束缚态数目减少。但由于所有轨道上的电子数都随密度增加，因此，离化度随密度的增加是减少的。当密度增加使得轨道上电子数趋于饱和、束缚态因能级上升成为正能态时，又表现出了离化度随密度的增加而增加的规律。前者多发生在低密度情况下，后者则多发生在高密度情况。

总之，由于温度、密度对于原子平均离化度影响的二重性，以及二者效应的相互竞争，就导致了原子离化度 n_i 对温度、密度变化的非单调性。这就是表中数值所表现出来的规律。

表 3 部分 Fe 原子的平均离化度 n_i 的比较

$T(\text{keV})$	$\rho(\text{g/cm}^3)$	n_i		
		Ours	LLNL ^[1]	Sesame ^[2]
0.1	0.785	11.793	11.843	13.4
0.1	7.85	10.530	9.731	12.0
0.1	157	14.192	15.740	14.8

表 3 给出了部分 Fe 原子离化度数值。其中有三组结果， $n_i(\text{Ours})$ 是我们的结果， $n_i(\text{Sesame})$ 是美国 Los Alamos^[2] 公布的结果， $n_i(\text{LLNL})$ 是 Livermore 结实实验室的果，从中可以看出我们的模型的精度。

[1] B. F. Rozsnyai, *Phys.Rev.*, **A5**, (1972) 1137.
[2] T-4 Group, Los Alamos National Laboratory Report, (1983), No. LALP-83-4.

CALCULATION OF ATOMIC AVERAGE DEGREE OF IONIZATION

MENG XU-JUN SUN YONG-SHENG LI SHI-CHANG

Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088

(Received 12 March 1993)

ABSTRACT

In this paper a detailed method is given to calculate atomic average of ionization in relativistic Hartree-Fock-Slater self-consistent field scheme. As an example, calculations are presented for the Au and Cu atoms at several temperatures (from 20eV to 20keV) and matter densities (from $0.1 D_0$ to $100D_0$). The variation of the degree of ionization following the change of temperature and matter density are discussed.

PACC: 3120