

金等离子体中 Au^{48+} — Au^{52+} 平衡分布 的统计热力学研究*

朱志艳† 朱正和 高 涛 蒋 刚

(四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

(2003 年 5 月 29 日收到 2004 年 1 月 2 日收到修改稿)

基于全相对论多组态 Dirac-Fock 理论, 采用“多功能相对论原子结构程序(GRASP²)”, 考虑量子电动力学(QED)效应和 Breit 修正, 涉及实验谱中 Au 等离子体 M 带的几类重要跃迁, 计算了 Au^{48+} — Au^{52+} 离子的能级结构和能级简并度. 用统计热力学方法计算各离子的配分函数, 由配分函数计算等离子体内这五种离子的电离与复合平衡常数. 根据同时反应的平衡理论研究电离与复合达到平衡时等离子体内各离子的相对分布.

关键词: 金等离子体, 配分函数, 平衡常数, 离子丰度

PACC: 3130J, 5225K

1. 引 言

在金的热等离子体过程中, 离子丰度和平均离化度是很重要的参数. 对于惯性约束聚变(ICF)研究, 等离子体内各种离化度下的离子结构参数以及每种离化度下离子贡献的确定, 都必须知道各种离化度离子所占的比份. 离子丰度主要取决于等离子体内各原子过程, 如离化、复合、激发和辐射衰变等之间的平衡. 高 Z 高离化度等离子体发射谱的谱带结构的难以分辨性和各动力学过程的复杂性使得理论模型的建立遇到严峻的挑战, 为了得到热等离子体内的离化度和离子丰度, 比较常用的方法是基于局域平衡理论求解萨哈(Saha)方程, 这是一种重要的方法. 目前, 对金等离子体内离子丰度和离化度的研究正在逐渐深入^[1-9], 其中文献 [1-7] 是利用平均原子模型计算离子分布, 这也是常用方法之一, 文献 [8] 和 [9] 则是利用实验光谱数据进行的理论模拟, 其结果合理, 但具有半经验性. 本文作者也曾用动力学方法研究了指定时刻 Au 等离子体内的离子分布^[10]. 而对各种电离与复合达到平衡时的离子分布的研究未见报道.

本文采用全相对论多组态 Dirac-Fock 理论^[11]的

“多功能相对论原子结构程序(GRASP²)”, 考虑量子电动力学(QED)效应和 Breit 修正, 选用二参数 Fermi 核和扩展平均能级模型(EAL), 计算 Au^{48+} — Au^{52+} 单个离子的能级结构与简并度. 基于能级结构和简并度, 用统计热力学方法计算各离子的配分函数, 由配分函数, 计算这五种离子的电离与复合反应平衡常数. 根据同时反应的平衡理论, 由平衡常数计算金等离子体内四个电离、复合反应同时发生, 达到平衡时各离子的丰度. 本文计算采用一般 ICF 实验中的电子温度、电子密度和压力的条件, 即高温低密区电子温度为 1000—2000eV, 电子密度为 10^{18} — 10^{22} cm^{-3} , 低温高密区电子温度为 400—800eV, 电子密度为 10^{23} — 10^{26} cm^{-3} , 体系压力为 10^{11} — 10^{12} Pa.

2. 离子的配分函数和 Gibbs 函数

单个 Au 离子的配分函数为

$$q = q_t q_n q_e = 4V \left(\frac{2\pi mkT}{h^2} \right)^{3/2} \sum_i g_i e^{-\epsilon_i/kT}, \quad (1)$$

式中 q_t , q_n 和 q_e 分别为离子的平动、核运动和电子运动的配分函数, m 为 Au 离子的质量, V 为克分子体积. Au 的核自旋为 3/2, 基态 $q_n = 4$. Au 等离子体的实验谱为 Au^{48+} — Au^{52+} 离子的 $3d$ — $4p$, $3d$ — $4f$,

* 国家高新技术研究发展计划(批准号 863-804-3-4.4.9)资助的课题.

† E-mail: peonyzhu@sina.com

3d—5p, 3p—4s, 3p—4d 和 3p—5d 跃迁^[12-16]。本文采用全相对论多组态 Dirac-Fock 理论的 GRASP² 程序, 考虑 QED 包括真空极化和自能效应和 Breit 修正, 选用二参数 Fermi 核和 EAL 模型, 并根据组态状态函数(CSF)间产生相互作用的条件(组态宇称相同; 不同组态之间, 最多只能有两个电子在不同的轨道上; 不同组态间必须有相同的 J 值; 两个组态函数间的能级间隔越大, 其组态相互作用越小), 选取包含上述几类跃迁的重要组态, 例如对 Au⁴⁹⁺ 离子, 分别选取奇宇称组态为 3d¹⁰4s4p, 3d⁹4s²4p, 3d⁹4s²4f, 3d¹⁰4s4f, 3p⁵3d¹⁰4s²5d, 3p⁵3d¹⁰4s²4d; 偶宇称组态为 3d¹⁰4s²3p⁵3d¹⁰4s²4p, 3d¹⁰4p², 3d¹⁰4s4d 和 3d⁹4s4p², 计算了 Au⁴⁸⁺—Au⁵²⁺ 离子的各能级结构和能级简并度, 若体系的温度给定, 则可求出各离子的电子配分函数。表 1 列出了温度为 400—2000eV 时 Au⁴⁸⁺—Au⁵²⁺ 的电子配分函数。计算 Au 离子的电子配分函数时, 所涉及的电子能级数, 对 Au⁴⁸⁺, Au⁴⁹⁺, Au⁵⁰⁺, Au⁵¹⁺ 和 Au⁵²⁺ 分别为 208, 140, 146, 93 和 153 个。

表 1 不同温度下 Au⁴⁸⁺—Au⁵²⁺ 离子的电子配分函数

T_e/eV	$q_e(\text{Au}^{48+})$	$q_e(\text{Au}^{49+})$	$q_e(\text{Au}^{50+})$	$q_e(\text{Au}^{51+})$	$q_e(\text{Au}^{52+})$
400	6.9863	27.985	14.885	2.1966	12.780
600	21.772	48.733	34.240	9.3517	28.482
800	52.631	75.652	64.901	23.650	58.868
1000	95.142	106.28	101.86	42.600	98.666
1300	169.20	153.59	160.06	74.395	164.73
1600	245.39	198.38	215.35	106.01	229.78
2000	341.02	251.40	280.55	144.55	308.37

克分子 Helmholtz 函数 F 和 Gibbs 函数 G 分别为

$$F = -kT \ln \frac{q^N}{N!} \quad (2)$$

和

$$G = -NkT \ln \frac{q}{N}, \quad (3)$$

式中 N 为阿伏加德罗常数, q 为单个分子的配分函数。

3. 离化反应平衡常数的配分函数表示

对于一般反应



可以证明

$$\Delta G^0 = -RT \ln K_p = -RT \ln \frac{P_C^c P_D^d}{P_A^a P_B^b}, \quad (5)$$

而

$$K_p = \frac{(q_C^0/N)(q_D^0/N)^d}{(q_A^0/N)(q_B^0/N)^b} e^{-\Delta E_0^0/RT}, \quad (6)$$

q^0 为标准态下, 即逸度 $f = p = 1$ 时的单个分子的配分函数, ΔE_0^0 为标准态下在 0 K 或任意参考态下反应 (4) 的能量变化, K_p 仅是温度的函数。对于离化反应, 如



(6) 式为

$$K_p = \frac{q_{49}^0 q_e^0}{q_{48}^0} \frac{1}{N} e^{-\Delta \epsilon_0^0/RT}, \quad (7)$$

式中脚标 49 代表 Au⁴⁹⁺, 48 代表 Au⁴⁸⁺, e 代表电子, $\Delta \epsilon_0^0 = \Delta E_0^0/N = I$ 代表一个 Au⁴⁸⁺ 的电离势。单个电子的配分函数为

$$q_e^0 = (q_s^0 q_s^0)_e = 2V \left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2} \right)^{3/2},$$

$$q_s^0 = 2S + 1 = 2, \quad (8)$$

式中 m_e 为电子质量。因为 Au⁴⁹⁺ 和 Au⁴⁸⁺ 质量近似相同, 所以平动配分函数亦近似相同, 即 $(q_{49}^0)_\lambda \approx (q_{48}^0)_\lambda$, 则有

$$K_{p1} = 2 \left(\frac{2\pi m_e kT}{h^2} \right)^{3/2} \frac{V}{N} \frac{(q_{49}^0)_e}{(q_{48}^0)_e} e^{-I/kT}. \quad (9)$$

ICF 实验中, 靶腔的体积为 $7.0372 \times 10^{-4} \text{ cm}^3$, 有 $8.008549 \times 10^{-6} \text{ mol Au}$ 原子, 由 m_e , $(q_{49}^0)_e$, $(q_{48}^0)_e$ 和电离势 I 可以计算上述离化反应的平衡常数。(21) 式所述四个离化反应的平衡常数 K_{pi} ($i = 1, 2, 3, 4$) 列在表 2 中。

表 2 离化反应平衡常数 K_{pi} ($i = 1, 2, 3, 4$)

T_e/eV	K_{p1}	K_{p2}	K_{p3}	K_{p4}
400	32.343	2.8561	0.66891	0.20471
600	3.1724×10^2	75.872	26.343	11.516
800	9.6953×10^2	4.7191×10^2	1.8416×10^2	1.1083×10^2
1000	2.0725×10^3	1.5105×10^3	6.1594×10^2	4.8851×10^2
1300	4.6637×10^3	4.7229×10^3	1.9994×10^3	2.1362×10^3
1600	8.3819×10^3	1.0164×10^4	4.4180×10^3	5.7739×10^3
2000	1.4986×10^4	2.0908×10^4	9.3317×10^3	1.4622×10^4

注: 四个离化反应的电离势 I_i ($i = 1, 2, 3, 4$) 分别为^[17] 2707.43, 2870.51, 2938.29 和 4880.9eV。

4. 离化平衡分布

由于

$$K_{p1} = K_{X1} P^{\Delta n} = \frac{X_{49} X_e}{X_{48}} P \quad (\Delta n = 1), \quad (10)$$

式中 P 为总压力, Au 等离子体总压力为 10^{11} — 10^{12} Pa, 电子温度为 400—2000eV, 电子密度 n_e 为 10^{18} —

10^{26} cm^{-3} 这些为计算电离复合平衡的条件. 因为 T_e (动能) = $e^2 n_e^{1/3}$ (势能) 为经典理想等离子体与非理想等离子体的界限, 而在本文计算条件下, $T_e \gg e^2 n_e^{1/3}$ 即服从经典理想等离子体条件, 但是, 在给定温度下, 要计算总压力对平衡移动的影响. 计算压力时, 要考虑表征相互作用的构型积分, 这时

$$Q = Q_{ex} Q_{in} = \frac{1}{N!} \left\{ \frac{(2\pi m k T)^{3/2}}{h^3} \right\}^N Q_u Q_{in} = \frac{q^N}{N!}, \quad (11)$$

其中 Q, Q_{ex}, Q_{in} 均为每克分子的配分函数, $q = q_i q_j$ 均为每个分子的配分函数, Q_u 为构型积分. 克分子 Hermholtz 函数 F 为

$$F = -kT \ln \frac{q^N}{N!} = -kT \ln Q, \quad (12)$$

且

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T = kT \left(\frac{\partial \ln Q}{\partial V} \right)_T = kT \left(\frac{\partial \ln Q_{ex}}{\partial V} \right)_T. \quad (13)$$

(13) 式已考虑到 $\ln Q = \ln Q_{ex} + \ln Q_{in}$, 而且离子内部运动独立于体积. 由于

$$Q_{ex} = \frac{1}{N!} \left\{ \frac{(2\pi m k T)^{3/2}}{h^3} \right\}^N Q_u, \quad (14)$$

所以

$$P = kT \left\{ \frac{\partial \left[\ln \frac{1}{N!} \left\{ \frac{(2\pi m k T)^{3/2}}{h^3} \right\}^N + \ln Q_u \right]}{\partial V} \right\}_T = kT \left(\frac{\partial \ln Q_u}{\partial V} \right)_T. \quad (15)$$

可以证明构型积分为

$$\ln Q_u = N \ln V + \frac{1}{2} N^2 \frac{\beta}{V}, \quad (16)$$

其中因子 β 为

$$\beta = 4\pi \int_0^\infty \{ e^{-U(r)/T_e} - 1 \} r^2 dr. \quad (17)$$

若 $\beta = 0$, 则 $P = \frac{NkT}{V} = \frac{RT}{V}$, 即理想气体方程. 实际上, 金等离子体内的粒子间存在主要相互作用, 设 $-U(r)/T_e = -Z_i e^2 / (r T_e)$, Z_i 为 Au 离子正价数, r 为离子-电子间距, 因为平均动能 (T_e) 远大于平均势能, 则 $e^{-Z_i e^2 / (r T_e)} \approx 1 - \frac{Z_i e^2}{r T_e}$, 这时 (17) 式为

$$\beta = - \int_0^\infty \frac{4\pi Z_i e^2}{2T_e} dr^2. \quad (18)$$

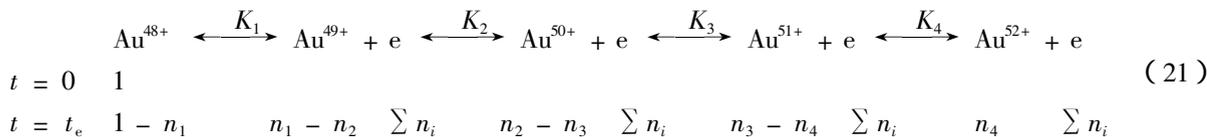
设积分上限近似取总的德拜波长 λ_D , 而

$$\lambda_D^2 = \frac{\lambda_{De}^2}{\left(1 + \frac{Z_i^2}{4.064 \times 10^{-28} n_e} \right)}, \quad (19)$$

$$\lambda_{De}^2 = \frac{T_e}{n_e e^2}. \quad (20)$$

若已知电子密度 n_e , 电子温度 T_e 和 Au 离子正价数 Z_i , 则可计算 λ_D , 进而得到 (18) 式的 β 值, 从而得到构型积分 Q_u 和总压力 P , 再由 (10) 式计算电离平衡分布.

假设金等离子体内粒子间同时存在如下电离与复合平衡过程, 起始时刻只有 Au^{48+} 一种物质, 且其初始量为 1mol, 反应过程如下:



连串反应同时达到平衡时, 系统中同一种物质的量只有一个, 所以每步反应中电子的摩尔数均相等, 应用上述关系, 则有

$$\begin{aligned} K_{p1} &= \frac{\chi_{49} \chi_e}{\chi_{48}} P = \frac{(n_1 - n_2) n_e P}{n(1 - n_1)}, \\ K_{p2} &= \frac{\chi_{50} \chi_e}{\chi_{49}} P = \frac{(n_2 - n_3) n_e P}{n(n_1 - n_2)}, \\ K_{p3} &= \frac{\chi_{51} \chi_e}{\chi_{50}} P = \frac{(n_3 - n_4) n_e P}{n(n_2 - n_3)}, \\ K_{p4} &= \frac{\chi_{52} \chi_e}{\chi_{51}} P = \frac{n_4 n_e P}{n(n_3 - n_4)}, \end{aligned} \quad (22)$$

式中 n_1, n_2, n_3 和 n_4 分别为 $\text{Au}^{48+}, \text{Au}^{49+}, \text{Au}^{50+}$ 和 Au^{51+} 离子在平衡态时离化掉的克分子数, $n_e = n_1 + n_2 + n_3 + n_4$ 为实际存在的电子克分子数, $n = 1 + n_e$ 为系统总克分子数. 令

$$\begin{aligned} F^1 &= K_{p1} n(1 - n_1) - (n_1 - n_2) n_e P = 0, \\ F^2 &= K_{p2} n(n_1 - n_2) - (n_2 - n_3) n_e P = 0, \\ F^3 &= K_{p3} n(n_2 - n_3) - (n_3 - n_4) n_e P = 0, \\ F^4 &= K_{p4} n(n_3 - n_4) - n_4 n_e P = 0, \end{aligned} \quad (23)$$

将 $F^i(n_j)$ 在 n_j^0 ($i, j = 1, 2, 3, 4$) 处按泰勒级数展

开 则

$$F^i(n_j) = F^i(n_j^0) + dF^i(n_j^0) = 0 \\ (i, j = 1, 2, 3, 4),$$

得到如下方程组

$$\begin{aligned} & F_{n_1}^1(n_j^0) \delta n_1 + F_{n_2}^1(n_j^0) \delta n_2 + F_{n_3}^1(n_j^0) \delta n_3 + F_{n_4}^1(n_j^0) \delta n_4 \\ &= -F^1(n_j^0), \\ & F_{n_1}^2(n_j^0) \delta n_1 + F_{n_2}^2(n_j^0) \delta n_2 + F_{n_3}^2(n_j^0) \delta n_3 + F_{n_4}^2(n_j^0) \delta n_4 \\ &= -F^2(n_j^0), \\ & F_{n_1}^3(n_j^0) \delta n_1 + F_{n_2}^3(n_j^0) \delta n_2 + F_{n_3}^3(n_j^0) \delta n_3 + F_{n_4}^3(n_j^0) \delta n_4 \\ &= -F^3(n_j^0), \\ & F_{n_1}^4(n_j^0) \delta n_1 + F_{n_2}^4(n_j^0) \delta n_2 + F_{n_3}^4(n_j^0) \delta n_3 + F_{n_4}^4(n_j^0) \delta n_4 \\ &= -F^4(n_j^0). \end{aligned} \quad (24)$$

用高斯主元素消去法编程解上述方程组, 设定初值 n_j^0 , 求解 δn_j , 得一级修正值 $n_j^{(1)} = n_j^0 + \delta n_j$, 重复上述过程, 直到输入 n_j 约等于输出 n_j , 得 n_1 — n_4 , 则电离与复合达到平衡时, Au⁴⁸⁺—Au⁵²⁺ 离子的相对分布为

$$\begin{aligned} X(\text{Au}^{48+}) &= 1 - n_1, \quad X(\text{Au}^{49+}) = n_1 - n_2, \\ X(\text{Au}^{50+}) &= n_2 - n_3, \quad X(\text{Au}^{51+}) = n_3 - n_4, \\ X(\text{Au}^{52+}) &= n_4. \end{aligned}$$

为了对比起见, 将总压力 $P = 10^5$ Pa 时的离子分布列在表 3, 而实际计算压力下的离子分布列在表 4, 两者分别图示在图 1 和图 2 中.

不同压力和温度下, 电离与复合达到平衡时 Au⁴⁸⁺—Au⁵²⁺ 离子的相对分布如图 1 和图 2 所示. 如

表 3 不同温度下 Au⁴⁸⁺—Au⁵²⁺ 离子的相对分布 ($P = 10^5$ Pa)

T_e/eV	$X(\text{Au}^{48+})$	$X(\text{Au}^{49+})$	$X(\text{Au}^{50+})$	$X(\text{Au}^{51+})$	$X(\text{Au}^{52+})$
400	0.98403	1.5942×10^{-2}	2.2808×10^{-5}	7.6422×10^{-9}	7.8558×10^{-13}
600	0.95085	4.8557×10^{-2}	5.9305×10^{-4}	2.5148×10^{-6}	4.6619×10^{-9}
800	0.91564	8.0831×10^{-2}	3.4732×10^{-3}	5.8240×10^{-5}	5.8782×10^{-7}
1000	0.87894	0.11053	1.0131×10^{-2}	3.7867×10^{-4}	1.1225×10^{-5}
1300	0.82326	0.14768	2.6829×10^{-2}	2.0632×10^{-3}	1.6953×10^{-4}
1600	0.76905	0.17558	4.8608×10^{-2}	5.8494×10^{-3}	9.1994×10^{-4}
2000	0.70108	0.20059	8.0073×10^{-2}	1.4266×10^{-2}	3.9826×10^{-3}

表 4 不同温度和压力下 Au⁴⁸⁺—Au⁵²⁺ 离子的相对分布

T_e/eV	n_e/cm^{-3}	P/Pa	$X(\text{Au}^{48+})$	$X(\text{Au}^{49+})$	$X(\text{Au}^{50+})$	$X(\text{Au}^{51+})$	$X(\text{Au}^{52+})$
400	10^{23}	4.3326×10^{11}	0.99727	2.7316×10^{-3}	6.6070×10^{-7}	3.7427×10^{-11}	6.4880×10^{-16}
600	10^{23}	6.4989×10^{11}	0.99301	6.9749×10^{-3}	1.1717×10^{-5}	6.8338×10^{-9}	1.7424×10^{-12}
800	10^{23}	8.6652×10^{11}	0.98942	1.0523×10^{-2}	5.4473×10^{-5}	1.1004×10^{-7}	1.3379×10^{-10}
1000	10^{18}	1.0831×10^{12}	0.98617	1.3693×10^{-2}	1.3858×10^{-4}	5.7188×10^{-7}	1.8718×10^{-9}
1300	10^{18}	1.4081×10^{12}	0.98180	1.7869×10^{-2}	3.2934×10^{-4}	2.5697×10^{-6}	2.1422×10^{-8}
1600	10^{18}	1.7330×10^{12}	0.97800	2.1421×10^{-2}	5.6897×10^{-4}	6.5688×10^{-6}	9.9112×10^{-8}
2000	10^{18}	2.1663×10^{12}	0.97369	2.5376×10^{-2}	9.2268×10^{-4}	1.4974×10^{-5}	3.8075×10^{-7}

果将图 2 作局部放大, 其形状与图 1 相同.

5. 讨 论

5.1. 配分函数的影响

由 (1) 式可知, Au⁴⁸⁺—Au⁵²⁺ 的平动 (q_t) 和核运动 (q_n) 配分函数相同, 只是电子运动配分函数 q_e 不同. 若 ϵ_i 能级分布越高, 则 q_e 会越小. 由表 1 可见, 在 400—2000eV 间, Au⁵¹⁺ 的电子配分函数 q_e 都是最

小的, 因而 Au⁵¹⁺ 对平衡分布贡献最小. 而对 Au⁴⁸⁺, Au⁴⁹⁺, Au⁵⁰⁺ 和 Au⁵²⁺, 在 400eV 到约 1300eV, Au⁴⁹⁺ 的配分函数都是最大的, 从 1300eV 到 2000eV, 它们相差不大, 所以 Au⁴⁹⁺ 对分布的贡献应该比较重要.

5.2. 平衡常数的影响

由 (6) 或 (7) 式, K_p 决定于两个部分, 即配分函数比, 例如 $\frac{q_{49}^0 q_e^0}{q_{48}^0}$, 和指数部分 $\exp(-I/kT)$. Au⁴⁸⁺, Au⁴⁹⁺, Au⁵⁰⁺, Au⁵¹⁺ 和 Au⁵²⁺ 的电离势 I 分别为 2707.43, 2870.51, 2938.29, 4880.9 和 5016.16eV, 前

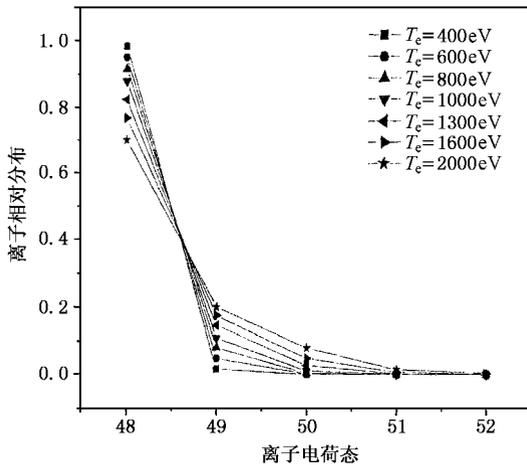


图1 金等离子体中 Au^{48+} — Au^{52+} 的平衡分布 ($P = 10^5 \text{ Pa}$)

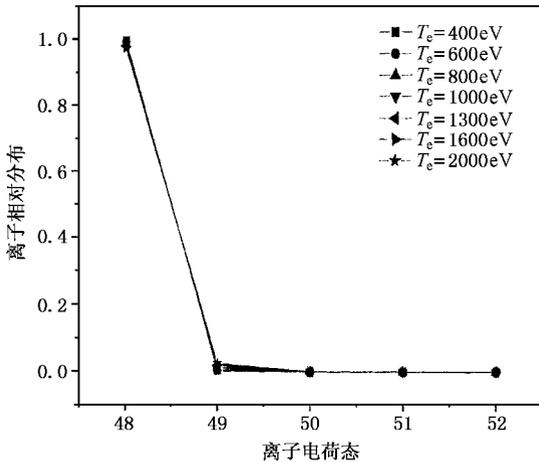


图2 金等离子体中 Au^{48+} — Au^{52+} 的平衡分布

三个离子的电离势的差别相对较小,而后两个离子的电离势则成倍增大,所以 K_{P3} 和 K_{P4} 很小,特别在电子温度低时, $\exp(-I/kT)$ 贡献更小,例如,在 400 eV 时, K_{P4} 约为 K_{P1} 的百分之一,而当增到 2000 eV

时, K_{P1} — K_{P4} 的数量级大致相同,此时,配分函数比的贡献增大.由热力学可知

$$\frac{d \ln K_p}{dT} = \frac{\Delta H}{RT^2} = \frac{I}{RT^2} > 0, \quad (25)$$

所以,对 K_{P1} — K_{P4} , K_p 都随温度升高而增大,热力学上合理.

5.3. 电子密度和压力对平衡分布的影响

K_p 仅为温度的函数,而 K_x 则同时为温度与压力的函数.每个离化过程 $\text{Au}^{n+} \rightarrow \text{Au}^{(n+1)+} + e$, 粒子数增加,即 $\Delta n = 1$,所以电子密度增加会使平衡向左移动,即趋向于离子-电子复合.例如,高压下,电子密度为 10^{23} cm^{-3} 时, Au^{52+} 的分布为 Au^{48+} 的 10^{-16} ,而当电子密度为 10^{18} cm^{-3} 时, Au^{52+} 的分布则为 Au^{48+} 的 10^{-7} .电子密度越大,分布的差距越大.体系的压力增加,也会导致平衡左移.

5.4. Gibbs 函数或化学耦合效应^[18]

在 (21) 式中,四个反应同时发生.若每个离化反应孤立发生,则随温度增高, $X(\text{Au}^{n+})$ 都会单调减小,而 $X(\text{Au}^{(n+1)+})$ 单调增加.实际上,由表 3 和表 4 可见, $X(\text{Au}^{48+})$ 均单调减小,而 $X(\text{Au}^{49+})$, $X(\text{Au}^{50+})$, $X(\text{Au}^{51+})$ 和 $X(\text{Au}^{52+})$ 都单调增大,这是 Gibbs 函数耦合所致, $X(\text{Au}^{49+})$ 为 $X(\text{Au}^{50+})$ 的 10^2 — 10^4 , $X(\text{Au}^{49+})$ 为 $X(\text{Au}^{51+})$ 的 10^3 — 10^8 .

本文所计算的是平衡分布,实际上,ICF 的时间为 ns 级,没有达到平衡.根据以上讨论,可以相信,非平衡时分布会出现极大.文中指出, Au^{49+} 对分布的贡献应该比较重要,这与前序研究中^[10] 平均正电荷为 49.24 时,即 $\text{Au}^{49.24+}$ 达到分布极大相符.本文计算不依赖于任何具体的实验光谱数据,而是从单个离子的本身性质出发,从这种意义上来讲,本文计算是符合第一原理的.

[1] Merdji H, Miballa T and Blenski T 1998 *Phys. Rev. E* **57** 1042
 [2] Wu Z Q, Li S C and Han G X 1998 *High Power Laser and Particle Beams* **10** 54 (in Chinese) [吴泽清、李世昌、韩国兴 1998 强激光与粒子束 **10** 54]
 [3] Wu Z Q 2000 *Chin. Phys.* **9** 519
 [4] Yan J, Qu Y Z and Li J M 2000 *Chin. Phys. Lett.* **17** 194

[5] Wu Z Q 2001 *J. Quant. Spectr. Radiat. Trans.* **70** 253
 [6] Meng X J and Sun Y S 1994 *Acta Phys. Sin.* **43** 345 (in Chinese) [孟续军、孙永盛 1994 物理学报 **43** 345]
 [7] Meng X J, Sun Y S and Long Y Q 1998 *Acta Phys. Sin.* **47** 625 (in Chinese) [孟续军、孙永盛、龙燕秋 1998 物理学报 **47** 625]
 [8] Foord M E, Glenzer S H, Thoe R S, Wong K L, Fournier K B,

- Albritton J R , Wilson B G and Springer P T 2000 *J. Quant. Spectr. Radia. Trans.* **65** 231
- [9] Yang T L , Jiang G and Zhu Z H 2002 *Chin. Phys. Lett.* **19** 934
- [10] Zhu Z Y , Zhu Z H and Jiang G 2003 *Communications in Theoretical Physics* **40** 713
- [11] Dyllal K G , Grant I P , Johnson C T , Par F A and Plummer E P 1989 *Comput. Phys. Commun.* **55** 425
- [12] Busquet M , Pain D , Bauche J and Luc-Koenig E 1985 *Physica Scripta* **31** 137
- [13] Gauthier J C , Monier P , P Audebert Chenais-Popovics and Geindre J P 1986 *Laser Part. Beams* **4** 421
- [14] Bauche-Arnoult C , Luc-Koenig E , Wyart J F , Geindre J P , Audebert P , Monier P , Gauthier J C and Chenais-Popovics C 1986 *Phys. Rev. A* **33** 791
- [15] Tragin N , Geindre J P , Monier P , Gauthier J C , Chenais-Popovics C , Wyart J F and Bauche-Arnoult C 1988 *Physica Scripta* **37** 72
- [16] Yang G H , Zhang J Y , Zhang B H , Zhou Y Q and Li J 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 2389 (in Chinese) [杨国洪、张继彦、张保汉、周裕清、李 军 2000 物理学报 **49** 2389]
- [17] Chen B 1998 *Dissertation for the doctoral degree* (Chengdu : Sichuan University) p99 (in Chinese) [陈 波 1998 博士学位论文(成都 : 四川大学) 第 99 页]
- [18] Prigogine I and Defay R 1954 *Chemical Thermodynamics* (London , New York and Toronto : Longmans Green and CO) p42

Statistical thermodynamics for equilibrium distribution of Au^{48+} — Au^{52+} in Au plasma *

Zhu Zhi-Yan[†] Zhu Zheng-He Gao Tao Jiang Gang

(Institute of Atomic and Molecular Physics , Sichuan University , Chengdu 610065 , China)

(Received 29 May 2003 ; revised manuscript received 2 January 2004)

Abstract

Based on the relativistic multi-configuration Dirac-Fock theory , the level energies and level degeneration of ions from Au^{48+} to Au^{52+} have been calculated using the General-purpose Relativistic Atomic Structure Program with quantum electrodynamics effect and Breit correction. The partition function of each ion is derived using statistical thermodynamics. The equilibrium distribution of Au^{48+} to Au^{52+} in Au plasma is obtained from the theory of simultaneous reactions.

Keywords : Au plasma , partition function , equilibrium constant , ionic abundance

PACC : 3130J , 5225K

* Project supported by the National High Technology Development Projrom of China (Grant No. 863-804-3-4.4.9).

[†] E-mail : peonyzhu@sina.com