

Debye 屏蔽自洽势下 Au^{50+} 离子的 能级与振子强度^{*}

冯 蓉¹⁾ 邹 宇²⁾ 方泉玉²⁾

1)(中国工程物理研究院北京研究生部, 北京 100088)

2)(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

(1997 年 11 月 26 日收到)

以惯性约束聚变实验中感兴趣的金的类铜离子(Au^{50+})为例, 讨论了等离子体中自由电子对复杂原子中电子行为的影响. 采用受 Debye 屏蔽的 Hartree-Fock-Slater 自洽势, 计算了 Au^{50+} 离子的主量子数 n 从 1 到 7 的 28 个本征态, 得到了对应于一系列 Debye 长度 Λ 的能量本征值 E_{nl} , 即轨道束缚能, 和能级之间的光学振子强度. 与类氢情况相似: 自由电子的屏蔽作用使所有能级均从无屏蔽时的位置向连续态移动, 即电离限下移; 对于每个能量本征态 (n, l) , 存在一个临界屏蔽长度 $\Lambda_0(n, l)$, 相应于该 Λ_0 的轨道能 E_{nl} 为零; 当 Λ 值较小时, 在较大 n 处会出现能级交错. 此外, 用“外屏蔽”的概念, 解释了在 $\Lambda > 5a_0$ 情况下, Debye 屏蔽对 Au^{50+} 离子激发能、振子强度、平均轨道半径等均不产生影响, 而仅使各轨道能平移同一常数.

PACC: 3130L; 3120L

1 引 言

等离子体环境对处于其中离子的屏蔽问题在许多物理学领域都具有很重要的意义, 特别是应用于等离子体物理学、半导体物理学、天体物理学等方面. 近些年来, 关于高温高密度等离子体特性的研究越来越多, 特别是在高温高密度惯性约束等离子体中, 对于发射谱线的解释需要详尽的离子能谱和碰撞特性方面的知识. 由于目前在惯性约束聚变(ICF)和 X 射线激光研究中所采用的是孤立原子模型, 尚未将等离子体环境的影响考虑进去, 于是对于靶离子在屏蔽效应下行为的讨论就显得很有必要.

对于自由电子会导致谱线移动可能性的讨论已进行了很长一段时间, 这种可能性通常称为等离子体极化移动(plasma polarization shift)^[1]. 并且在不同温度、不同密度的等离子体环境下, 就如何选取物理模型的问题, 也已有许多讨论. 通常, 用静态屏蔽库仑势(SSCP)^[2]研究类氢离子的能级移动, 该有效屏蔽势在高温低密度极限下, 趋近于 Debye-Hückel(D-H)势. 在低温高密度极限下, 趋近于离子球势^[3], 为了能将这两种极限情况统一起来, Skupsky^[1]还提出了可用于低密度和高密度两种不同环境下的“非线性 D-H

^{*} 国家高技术计划惯性约束聚变领域基金和国家自然科学基金资助的课题.

模型”。

对于散射问题,D-H 势是一个很好的近似.Stewart 和 Pyatt^[4]已经证明等离子体中离子势在远离离子中心处接近于 D-H 势,并且 Rozsnyai^[5]也已发现 D-H 势在热等离子体中远离离子中心处是 Hartree-Fock-Slater(HFS)势很好的近似。

以前一些文献对等离子体屏蔽效应影响的讨论主要是针对类氢离子进行的,我们在这里选取 D-H 模型,势场采用受 Debye 屏蔽的 HFS 自洽势,将这种讨论推广到复杂原子.本文讨论 ICF 实验中金靶离子—— Au^{50+} ,等离子体环境为密度约为 10^{21} — 10^{24} cm^{-3} ,温度约为 1.5 keV 。

研究了 Au^{50+} 在屏蔽自洽势下的行为,并与类氢离子的情况作了比较,发现这种高电离度离子与类氢离子有很多相似处.根据等离子体温度密度范围,我们将屏蔽效应分为外屏蔽和内屏蔽两种情况.在高温低密度环境下,即受外屏蔽影响时,各轨道能级均向连续态平移,即电离限下移,但这时的屏蔽效应不会对激发能、振子强度、平均轨道半径和跃迁矩阵元产生太大影响.在高密度环境下,即受内屏蔽作用时,屏蔽效应对以上各量的影响相对会大一些.由于本文研究高温低密度情况,所以在文中对外屏蔽效应下 Au^{50+} 的行为作了较为详尽的讨论.在计算过程中,我们用 Cowan 程序求解带相对论修正的 Schrödinger 方程^[6],得到束缚电子径向波函数、轨道能和平均轨道半径,同时还求出了跃迁激发能和光学振子强度.其中离子的初、末态主量子数均限制在 7 以内,并且给出了以上各量在无 Debye 屏蔽下的值,与加 Debye 屏蔽后的值作了比较。

2 基本理论

束缚电子在自洽场中运动,为了便于讨论,暂时忽略相对论效应,则单电子径向波函数满足 Schrödinger 方程:

$$\frac{d^2 R_{nl}}{dr^2} + \left[E_{nl} - V_0(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{nl} = 0, \quad (1)$$

式中自洽势 $V_0(r)$ 与轨道能 E_{nl} 均采用 Ryd 单位, r 采用 a_0 单位,取 V_0 为 HFS 自洽势。

处于电子密度为 N_e , 热平衡温度为 T 的等离子体中金的类铜离子—— Au^{50+} ,屏蔽后的自洽势为

$$V(r) = V_0(r) \exp(-r/\Lambda), \quad (2)$$

式中

$$\Lambda = \left[4\pi e^2 \frac{N_e}{kT} \right]^{-1/2} = 0.518 \sqrt{\frac{T}{N_e}}, \quad (3)$$

Λ 称为 Debye 屏蔽长度, N_e 为等离子体中的电子密度, T 为电子热平衡温度. Λ , T , N_e 分别采用 a_0 , Ryd 和 10^{24} cm^{-3} 为单位。

在定义 Λ 时,只考虑了等离子体电子,因为靶离子的动能大致等于平均离子能量,从而不能被其他等离子体离子有效屏蔽^[7]. (2) 式中当 Λ 取值小时,称此情况为强屏蔽,当 Λ 取值大时,称此情况为弱屏蔽,当 $\Lambda \rightarrow \infty$ 时,可看出极限即为无屏蔽。

现对屏蔽势下的 Schrödinger 方程作一些定性讨论, (2) 式在屏蔽势下写为

$$\frac{d^2 R_{nl}}{dr^2} + \left[E_{nl} - V_0 e^{-r/\Lambda} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{nl} = 0. \quad (4)$$

当 $\Lambda \rightarrow \infty$ 时, $e^{-r/\Lambda} \rightarrow 1$, 则 $\lim_{\Lambda \rightarrow \infty} E_{nl}$ 为无屏蔽下的轨道能量. 当 $r/\Lambda \ll 1$ 时, 即在弱屏蔽下, 可将 $e^{-r/\Lambda}$ 作级数展开, 并取一级近似:

$$e^{-r/\Lambda} \approx 1 - r/\Lambda,$$

则(4)式可写为

$$\frac{d^2 R_{nl}}{dr^2} + \left[(E_{nl} + V_0 r/\Lambda) - V_0 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{nl} = 0.$$

令 $\epsilon_{nl} = E_{nl} + V_0 r/\Lambda$, 上式写为

$$\frac{d^2 R_{nl}}{dr^2} + \left[\epsilon_{nl} - V_0 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{nl} = 0. \quad (5)$$

可看出方程(5)即为无屏蔽下的径向波函数满足的 Schrödinger 方程, 且当 $r/r_c \gg 1$ 时, 存在如下关系:

$$E_{nl} = \epsilon_{nl} + |V_0| r/\Lambda \longrightarrow \epsilon_{nl} + \frac{2(Z - N + 1)}{\Lambda}, \quad (6)$$

式中 r_c 为离子芯部的半径^[6], ϵ_{nl} 为无屏蔽下的能量本征值.

若 r 的主要取值范围在平均轨道半径 $\langle r \rangle$ 附近, 这时弱屏蔽基本上相当于外屏蔽状态, 且满足条件 $\langle r \rangle \ll \Lambda$. 令 $\Delta \equiv \frac{2(Z - N + 1)}{\Lambda}$, 则(6)式可以解释为: 在外屏蔽近似下, 每个能级均向上移动了 Δ , 所以可以推想, 对于一定值的 Λ , 原本为 $-\Delta$ 的能级将升高到连续态, 即对于这些 Δ 值, 某些 E_{nl} 将大于零, 原来对应的束缚态 $-\Delta \leq \epsilon_{nl} < 0$ 将不存在, 即这些能态在其临界屏蔽长度 Λ_0 处被截断, 屏蔽前原有的无限多个束缚态在被屏蔽后将成为有限个. 并且从(6)式可看出每个 (n, l) 态都有着相应的 $\Lambda_0(n, l)$ 值, 较高能态对应于较大的 Λ_0 值.

当 $r/\Lambda \sim 1$, 即在强屏蔽状态下时, 会出现明显的内屏蔽效应. 在这种高密度环境下, 屏蔽效应会导致激光聚变实验中出现明显的频率移动, 但这些不是我们要讨论的温度与密度范围.

对于类氢离子, Rogers 等人^[8]已证明存在如下近似关系:

$$E = - (Ze^2/r)(\Lambda - r) \Delta e^{-r/\Lambda}, \quad (7)$$

可看出对于小于平均轨道半径的 Λ 值, 该轨道能不会为负值, 即类氢离子 (n, l) 轨道对应的临界屏蔽长度 $\Lambda_0(n, l) \sim \langle r \rangle_{nl}$.

从以上讨论可以得出一些定性结论, 并且该结论对于复杂离子在考虑相对论效应之后, 仍然成立: 在等离子体 Debye 屏蔽下, 所有能级均从未屏蔽态向连续态移动, 即对于同一个 (n, l) 态, 能级 E_{nl} 随 Λ 减小而增大. 并且可以预言, 在强屏蔽作用下, 即 Λ 值很小时, 屏蔽将导致电离, 且对于较大 n 值, 将会出现能级交错, 此外, 在电离限附近的高能态上原本容易发生的能级交错现象, 在考虑屏蔽后随着电离限下移而提前发生.

3 结果与讨论

本文用 HFS 方法计算了 Au^{50+} 在 Debye 屏蔽下的轨道能 E_{nl} , 平均轨道半径 $\langle r \rangle$ 以

及自洽势 V_0 , 从而得到屏蔽势 V 与 r 的变化关系, 以及两个态 i, j 之间的跃迁激发能 ΔE_{ij} , 与此同时还计算了光学振子强度 f_{ij}^e . 这里 Au^{50+} 所处的等离子体环境为密度约为 $10^{16} \sim 10^{24} \text{ cm}^{-3}$, 温度约为 $0.05 \sim 5 \text{ keV}$. 由(3)式可以看出 Δ 约在 $1 \sim 10^5 a_0$ 之间变化, 我们所说的强屏蔽指 $\Delta \sim \leq 2a_0$, 弱屏蔽指 $\Delta \sim \geq 5a_0$.

图 1 给出不同 Debye 长度 Δ 下, $rV(r)$ - r 关系, 最上面一条曲线对应于 $\Delta = 1a_0$, Δ 取值为 $1a_0 \sim \infty$.

从图 1 可看出, 在强屏蔽作用下, $V(r)$ 随 r 的增大很快趋于零, 在 $r \sim 4a_0$ 时, $V(r)$ 就非常接近于零. 随着屏蔽作用的逐渐减弱, $V(r)$ 较缓慢地随 r 变化. 当 $\Delta > 1000a_0$ 时, $V(r)$ 值已非常趋于无屏蔽状态. 当 $\Delta \rightarrow \infty$ 时, 在 r 取值约大于 $5a_0$ 情况下, 有 $rV(r) \rightarrow -102$, 即 $V(r) \rightarrow -2$ ($Z - N + 1$)/ r .

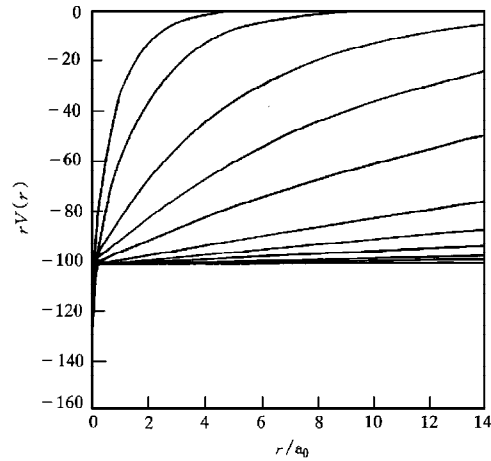
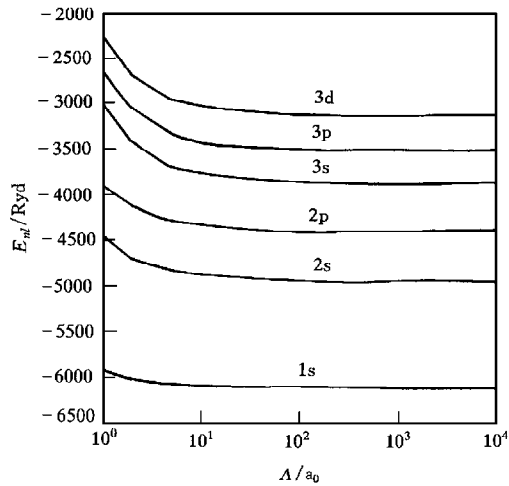
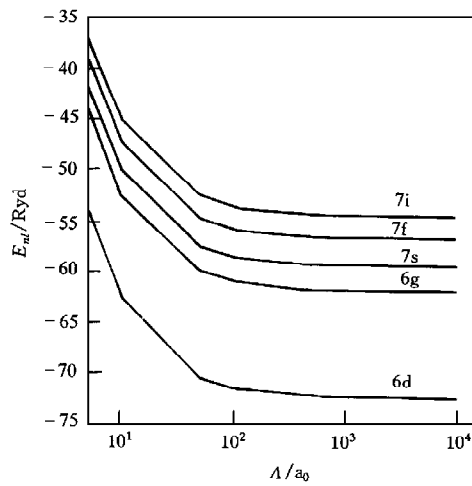


图 1 不同 Debye 长度 Δ 下 Au^{50+} 离子 $rV(r)$ - r 关系

图 2(a) 给出较低能级 $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d$ 6 个轨道的 E_{nl} - Δ 变化曲线. 当 $\Delta < 10a_0$ 时, 屏蔽后的轨道能随 Δ 变化很快, 当 $\Delta \sim 100a_0$ 时, E_{nl} 已趋于未屏蔽值. 图 2(b) 给出较高能级 $6d, 6g, 7s, 7f, 7i$ 5 个轨道的



(a) $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d$ 能级轨道能



(b) $6d, 6g, 7s, 7f, 7i$ 能级轨道能

图 2 较低与较高能级轨道的 E_{nl} - Δ 变化曲线

E_{nl} - Δ 变化曲线. 图 2(a) 与 (b) 比较, 可看出 Δ 对外层轨道电离能 ($I_{nl} = -E_{nl}$) 的相对影响比内层轨道大. 越是接近连续态, 电离能随 Δ 的相对变化越大.

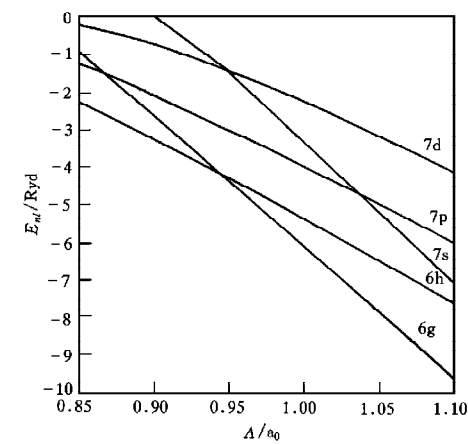


图 3 强屏蔽情况下 Au^{50+} 离子 6g, 6h, 7s, 7p, 7d 轨道能的交错现象

图 3 给出较高能级 6g, 6h, 7s, 7p, 7d 在强屏蔽作用下的交错现象.

表 1 列出 E_{nl} 在 $\Delta = 5-1000a_0$, 即弱屏蔽作用下的数值, 最后一列列出无屏蔽极限下 E_{nl} 值.

表 2 列出在强屏蔽 $\Delta = 0.2-2a_0$ 下 E_{nl} 值, (n, l) 为从 1s 态到 7i 态. 可以看出, 对于每个 (n, l) 轨道, 确实存在一个临界 Debye 屏蔽长度 $\Delta_0(n, l)$. 当 $\Delta < \Delta_0$ 时, 该态无负能级, 且在强屏蔽作用下, 在较大 n 处, 的确出现了能级交错. 从表 2 可看出强屏蔽作用下的能级交错现象. 如当 $\Delta = 1a_0$ 时, 6h 与 7s, 6h 与 7p 交错. 当 $\Delta = 0.7a_0$ 时, 5g 与 6s 交错.

表 1 弱屏蔽情况下 Au^{50+} 离子的轨道能 E_{nl} (单位: Ryd)

Δ	5	10	50	100	500	1000	∞
1s	-6064.9386	-6082.9488	-6097.3837	-6099.1898	-6100.6349	-6100.8156	-6100.9782
2s	-1212.9973	-1226.0487	-1236.5584	-1237.8764	-1238.9315	-1239.0634	-1239.1821
2p	-1076.5624	-1089.6785	-1100.2351	-1101.5586	-1102.6181	-1102.7506	-1102.8698
3s	-410.8982	-421.7091	-430.4987	-431.6063	-432.4938	-432.6048	-432.7047
3p	-370.8501	-381.6463	-390.4246	-391.5308	-392.4171	-392.5280	-392.6279
3d	-328.5268	-339.4091	-348.2460	-349.3589	-350.2505	-350.3620	-350.4624
4s	-195.2050	-205.1377	-213.3406	-214.3824	-215.2184	-215.3231	-215.4173
4p	-179.9141	-189.8309	-198.0269	-199.0682	-199.9040	-200.0086	-200.1028
4d	-163.2362	-173.1529	-181.3454	-182.3861	-183.2213	-183.3258	-183.4200
4f	-148.2743	-158.1268	-166.2483	-167.2788	-168.1056	-168.2091	-168.3023
5s	-110.3658	-119.8319	-127.8149	-128.8394	-129.6633	-129.7666	-129.8596
5p	-103.0211	-112.4641	-120.4392	-121.4634	-122.2872	-122.3904	-122.4834
5d	-95.0407	-104.4764	-112.4482	-113.4721	-114.2958	-114.3990	-114.4920
5f	-88.4122	-97.8405	-105.7924	-106.8129	-107.6336	-107.7365	-107.8291
5g	-85.1529	-94.6001	-102.5310	-103.5465	-104.3627	-104.4650	-104.5571
6s	-67.9338	-76.9463	-84.7484	-85.7627	-86.5807	-86.6833	-86.7758
6p	-63.8863	-72.8661	-80.6573	-81.6713	-82.4892	-82.5918	-82.6843
6d	-59.4697	-68.4319	-76.2168	-77.2306	-78.0483	-78.1509	-78.2434
6f	-55.8561	-64.8184	-72.5946	-73.6067	-74.4230	-74.5254	-74.6177
6g	-53.9439	-62.9453	-70.7212	-71.7311	-72.5451	-72.6473	-72.7393
6h	-53.4073	-62.5189	-70.3295	-71.3399	-72.1537	-72.2558	-72.3478
7s	-43.8872	-52.4157	-60.0360	-61.0423	-61.8562	-61.9585	-62.0507
7p	-41.4450	-49.9324	-57.5385	-58.5443	-59.3582	-59.4605	-59.5527
7d	-38.7623	-47.2213	-54.8176	-55.8230	-56.6368	-56.7391	-56.8313
7f	-36.5672	-45.0235	-52.6141	-53.6185	-54.4314	-54.5336	-54.6256
7g	-35.3619	-43.8620	-51.4606	-52.4640	-53.2757	-53.3777	-53.4697
7h	-34.9241	-43.5268	-51.1594	-52.1635	-52.9751	-53.0771	-53.1690
7i	-34.6789	-43.4253	-51.1091	-52.1149	-52.9270	-53.0290	-53.1208

表 2 强屏蔽情况下 Au^{50+} 离子的轨道能 E_n (单位:Ryd)							
Λ	0.2	0.4	0.6	0.7	0.9	1.0	2.0
1s	-5243.21676	-5660.85623	-5805.03137	-5846.68737	-5902.55095	-5922.19047	-6011.1307
2s	-688.90662	-937.87212	-1032.16392	-1060.20506	-1098.37288	-1111.94465	-1174.4081
2p	-544.06128	-798.40283	-894.09583	-922.48104	-961.06343	-974.76770	-1037.7405
3s	-78.24388	-210.32965	-273.08181	-292.97280	-320.92978	-331.11364	-379.6104
3p	-43.91343	-171.19566	-233.42087	-253.21431	-281.06787	-291.22154	-339.6110
3d	-0.42226	-124.85860	-188.71738	-208.98577	-237.44158	-247.79319	-296.9518
4s	-0.81930	-45.23846	-84.41072	-98.46098	-119.38651	-127.33452	-167.4362
4p	-0.19406	-32.47678	-70.18895	-83.95397	-104.57222	-112.43081	-152.2379
4d	-0.00386	-17.14184	-53.62153	-67.27557	-87.83803	-95.69431	-135.5403
4f		-2.00271	-37.91230	-51.74535	-72.58196	-80.52854	-120.6286
5s		-3.95114	-22.55062	-31.40709	-46.09631	-52.08025	-85.1025
5p		-0.91192	-16.92954	-25.31956	-39.51322	-45.35381	-77.9045
5d			-10.26558	-18.15684	-31.92615	-37.66681	-69.9726
5f			-3.97427	-11.45804	-25.06786	-30.81258	-63.2815
5g			-0.01000	-5.84096	-15.43138	-26.18799	-59.7174
6s			-2.82672	-6.80403	-12.43371	-19.46124	-45.2602
6p			-1.18332	-4.49453	-8.84658	-16.26600	-41.4163
6d				-1.75163	-5.44553	-12.48156	-37.1183
6f					-2.61614	-8.94637	-33.4666
6g					-0.02941	-6.13913	-31.2557
6h					-3.25795	-3.38317	-30.0587
7s					-2.08483	-5.40908	-23.9529
7p					-0.73077	-3.99473	-21.7591
7d						-2.31251	-19.2657
7f						-0.72933	-17.0939
7g							-15.6388
7h							-14.6515
7i							-13.6274

表 1 数据表明在 $\Lambda \geq 5a_0$ 时,1s—7i 轨道均为束缚态,且对于给定 Λ 值,能级无交错,在相同 n 值下,小 l 值的态位于较低能级.能级的这种排列规律与类氢离子情况相类似^[8].我们还看到能级移动数值的确可用前面理论分析中估算出的 $\Delta = \frac{2(Z-n+1)}{\Lambda}$ 来描述.

以上数据很好地证实了临界屏蔽长度 $\Lambda_0(n, l)$ 和强屏蔽下能级交错的存在.

表 3 列出较低能态 1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d 和较高能态 6g, 6h, 7s, 7p, 7d, 7f 的平均轨道半径 $\langle r \rangle$ 在不同 Λ 下的值.当 Λ 在 5—1000 a_0 范围内变化时,屏蔽对外层轨道的影响稍大于内层轨道,但总体来看,屏蔽效应对于平均轨道半径的影响不大.从表 3 可看出,对于相同 n 值,不同 l 值的轨道,其平均轨道半径变化规律为:小 l 轨道平均半径较大.这一规律也与类氢离子情况相类似.

表 3 内层轨道和外层轨道平均半径 $\langle r \rangle$ 在不同 Δ 下的值

Δ	1s	2s	2p	3s	3p	3d
5	0.01696	0.07140	0.06415	0.1812	0.1810	0.1634
100	0.01696	0.07124	0.06408	0.1810	0.1807	0.1626
∞	0.01696	0.07124	0.06408	0.1809	0.1807	0.1626

Δ	6g	6h	7f	7g	7h	7i
5	0.8633	0.7683	1.307	1.258	1.168	1.037
100	0.8527	0.7626	1.281	1.232	1.144	1.028
∞	0.8526	0.7625	1.280	1.231	1.144	1.027

表 4 与表 5 列出对于光学允许跃迁 $f_{ij}^e \neq 0$, 在某些 $(n, l) \rightarrow (n', l')$ 下的跃迁激发能 ΔE_{ij} 和光学振子强度 f_{ij}^e 随 Δ 的变化, 并与极限值 $\Delta = \infty$ 下的情况作了比较. 表 4 为几个内层轨道之间的跃迁, 可以看出, 对于低 n 值轨道间跃迁, Debye 屏蔽对激发能和光学振子强度的影响均不大.

表 4 内层轨道跃迁激发能 ΔE_{ij} 和光学振子强度 f_{ij}^e 在不同 Δ 下的值

	4s	4p	4p	5s	4f	5g
Δ	ΔE_{ij}	f_{ij}^e	ΔE_{ij}	f_{ij}^e	ΔE_{ij}	f_{ij}^e
5	15.310	1.3333	71.650	0.73860	65.833	17.822
10	15.271	1.3272	71.416	0.7324	65.441	17.689
20	15.255	1.3248	71.216	0.72896	65.167	17.603
50	15.247	1.3236	71.068	0.72670	64.978	17.545
100	15.244	1.3232	71.014	0.72592	64.910	17.525
500	15.241	1.3229	70.968	0.72528	64.854	17.508
5000	15.241	1.3228	70.958	0.72514	64.842	17.504
∞	15.241	1.3228	70.957	0.72512	64.840	17.504

表 5 外层轨道跃迁激发能 ΔE_{ij} 和光学振子强度 f_{ij}^e 在不同 Δ 下的值

	7f	7g	7h	7i	7g	7h
Δ	ΔE_{ij}	f_{ij}^e	ΔE_{ij}	f_{ij}^e	ΔE_{ij}	f_{ij}^e
5	1.2049	4.6681	0.2222	0.5229	0.3845	1.4119
10	1.1496	4.3876	0.0974	0.2187	0.2842	0.9972
20	1.1397	4.3321	0.0622	0.1380	0.2582	0.8944
50	1.1401	4.3283	0.0518	0.1145	0.2517	0.8686
100	1.1414	4.3324	0.0503	0.1110	0.2512	0.8663
500	1.1428	4.3374	0.0499	0.1100	0.2514	0.8669
5000	1.1432	4.3389	0.0498	0.1099	0.2515	0.8673
∞	1.1432	4.3389	0.0498	0.1099	0.2510	0.8673

表 5 为几个外层轨道之间的跃迁,从表 5 中可看出,对于高 n 值,即接近于连续态处的跃迁,Debye 屏蔽对激发能和光学振子强度的影响与低 n 值相比要大许多。

表 5 还给出未加 Debye 屏蔽时的 ΔE_{ij} 和 f_{ij}^0 值,通过与 Δ 取 $5000a_0$ 下的 ΔE_{ij} , f_{ij}^0 值作比较,可看出当 $\Delta \rightarrow \infty$ 时,两种势下的结果相等。

本文还得到了从 4s 到 7i 能级的每一种光学允许跃迁下的激发能和光学振子强度。从整体变化规律来看,若对于某一结定跃迁,Debye 屏蔽对其激发能影响较大时,光学振子强度相应地随 Δ 明显地变化。屏蔽对激发能影响很小时,光学振子强度几乎不随 Δ 变化。这就可以在一定程度上说明 Debye 屏蔽对于跃迁矩阵元没有多少影响。在观察每种跃迁激发能 ΔE_{ij} 随 Δ 的变化规律时,我们发现随 Δ 的减小,即电子密度的增大, ΔE_{ij} 的整体变化趋势是向增大的方向变化,特别是在强屏蔽即电子密度很大时,预计这种趋势将更加明显。Skupsky^[1]通过“非线性 D-H 模型”指出:对于低密度情况,谱线移动的变化特征尚无一个比较合理的解释,但谱线移动的方向受所采用的模型影响很大,在高密度情况下,谱线移动较为显著,且向增大的方向改变这一总体变化趋势是不变的。

4 结 论

D-H 势在高温低密度环境下是一个较好的近似,在 ICF 实验中,所感兴趣的等离子体环境为密度约为 $10^{21}—10^{24} \text{ cm}^{-3}$ 、温度约为 $1.5—10 \text{ keV}$ 。当 Δ 在 $\geq 5a_0$ 范围内变化时,等离子体屏蔽效应表现为:在外屏蔽下,能级发生平移,即轨道电离限下移,预期这种电离限的下移会对平均电离度产生影响,通过本文推出的 Δ 值,可以方便地估算电离限下移的数值。但这种外屏蔽效应不会对波函数的形状产生影响,因而振子强度亦不会受其影响。可以预期在波函数形状无变化的情况下,所有过程的跃迁概率,跃迁矩阵元都不会发生较大变化,而且外屏蔽也很好解释了当 $\Delta \geq 5a_0$ 时,平均轨道半径随 Δ 变化很小这一现象。

当 $\Delta < 5a_0$ 时,就会出现内屏蔽的影响,但由于 D-H 模型的适用范围^[9],在电子密度大的情况下,采用这种屏蔽势的近似性会差一些^[10]。从整体计算结果来看,与内层轨道相比,外层轨道的平均轨道半径和轨道能的相对变化在 Debye 屏蔽下较为明显。

在孤立原子近似下,原子(离子)有无限多个里德伯轨道,考虑 Debye 屏蔽后,平均轨道半径大于临界屏蔽长度的里德伯轨道将不存在,这可作为速率方程中高里德伯态的截断条件。

[1] S. Skupsky, *Phys. Rev.*, **A21** (1980), 1313.

[2] G. M. Harris, *Phys. Rev.*, **125**(1962), 1131.

[3] B. L. Whitten, N. F. Lane, J. C. Wesisheit, *Phys. Rev.*, **A29**(1984), 945.

[4] J. C. Stewart, K. D. Pyatt, *Astrophys. J.*, **144**(1966), 1203.

[5] B. F. Rozsnyai, *J. Quant. Spsctrosc. Radiat. Transfer*, **22**(1979), 337.

[6] R. D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (University of California Press, Berkely, 1981).

[7] N. A. Krall, A. W. Trivelpiece, *Principles of Plasma Physics* (McGraw-Hill, New York, 1973).

[8] F. J. Rogers, H. C. Graboske, Jr., D. J. Harwood, *Phys. Rev.*, **A1**(1970), 1578.

- [9] D. Clayton, *Principles of Stellar Evolution and Nuclear Synthesis* (McGraw-Hill, New York, 1965).
 [10] U. Gupta, A. K. Rajagopal, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **14**(1981), 2309.

THE ENERGY LEVELS AND OSCILLATOR STRENGTH OF A COMPLEX ATOM— Au^{50+} IN A SELF-CONSISTENT POTENTIAL

FENG RONG¹⁾ ZOU YU²⁾ FANG QUAN-YU²⁾

1)(*Graduate School of China Academy of Engineering Physics, Beijing 100088*)

2)(*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088*)

(Received 26 November 1997)

ABSTRACT

The effects of free electrons in a plasma on a complex atom are discussed, here we are interested in the target ion — Au^{50+} in inertia confined fusion(ICF). The results are compared with those in the case of hydrogenic ions. Accurate numerical solutions have been obtained for Schrödinger's equation through Debye screened Hartree-Fock-Slater self-consistent potential. Solutions have been computed for 28 eigenstates, 1s through $n=7$, $l=6$, yielding the energy eigenvalues for a wide range of Debye screening length Λ . As in the case of hydrogenic ions, under screening, all energy levels are shifted away from their unscreened values toward the continuum, that is, the ionization limits are shifted downward. Conclusions have been made that when $\Lambda > 5a_0$, that is, in the weak screening case, Debye screening has little effect on oscillator strength, average orbital radius, transition matrix elements, etc., of Au^{50+} . For each (n, l) eigenstate, there is a finite value of screening length $\Lambda_0(n, l)$, for which the energy becomes zero. When Λ is sufficiently small, level crossing appears at high n states. Optical oscillator strength for Au^{50+} has also been calculated, the results are compared with those under unscreened potential.

PACC: 3130L; 3120L