

电子碰撞类锂离子直接和非直接电离速率系数*

周忠源 朱顺人 潘守甫

(吉林大学原子与分子物理研究所, 长春市 130023)

摘要: 用库仑-玻恩交换近似以及由我们改进了屏蔽常数定义和算法的 Z 标度类氢模型, 计算了类锂离子壳层电子的直接碰撞电离和非直接激发自电离的电离速率系数。

关键词: 类锂离子软 X-射线激光, 电子碰撞电离、激发自电离

Ionization rate coefficients for Li-like Si including contributions due to inner-shell ionization and excitation-autoionization

Zhou Zhongyuan, Zhu Shunren, Pan Shoufu

(Institute of Atomic and Molecular Physics, Jilin University, Changchun)

Abstract: The electron-impact ionization results for Li-like silicon including inner-shell ionization and excitation-autoionization have been obtained by using Coulomb-Born-exchange approximation and Z -scaled hydrogenic model in which the definition and evaluation of the screening constant were improved.

Key words: Li-like Si soft-X-ray lasers, electron-impact ionization

一、引言

在激光等离子体软 X-射线激光的动力学研究中, 高电离化离子的内、外壳层电子被电子碰撞的直接电离和非直接的激发自电离的速率系数, 是一个重要的原子参数^[1]。最近, 徐至展等在用硅作靶材的类锂离子等离子体中, 发现了四条软 X-射线波长的激光谱线^[2]。这引起了人们的极大兴趣。类锂硅离子的电子碰撞电离速率系数在文献中尚没见报道。因为类锂离子具有很好的类氢行为, 我们利用改进了的屏蔽常数定义和算法的 Z 标度类氢模型^[2~5], 计算了这二种电子碰撞电离的速率系数。

二、理论公式与结果

在不考虑各电离过程之间的干涉效应的情况下, 对于类锂离子基态 $1s^2 2s$ 包含内、外壳层

电子直接电离和内壳层电子激发自电离在内的电子碰撞电离截面为^[4]

$$\begin{aligned} \frac{Q(1s^2 2s^2 S, E)}{\pi a_0^2} = & \frac{4I_H}{I_{2s} Z_{eff}^2(2s)} H(E - I_{2s}) Q_R^H(2s, u_{2s}) \\ & + \frac{\beta I_H}{Z_{eff}^2(1s) E} [H(E - E_{ea}(1s - 2s)) [Z^2 \Omega_H(1s - 2s)]_{z=\infty} \\ & + 2H(E - E_{ea}(1s - 2p)) [Z^2 \Omega_H(1s - 2p)]_{z=\infty} \\ & + 2 \sum_{n'=3}^{\infty} \sum_{l'=0}^{n'-1} H(E - E_{ea}(1s - n'l')) [Z^2 \Omega_H(1s - n'l')]_{z=\infty}] \\ & + \frac{2I_H}{I_{1s} Z_{eff}^2(1s)} H(E - I_{1s}) \cdot Q_R^H(1s, u_{1s}), \end{aligned} \quad (1)$$

式中, I_H 为氢原子的电离能, I_{nl} 是类锂离子 nl 轨道上电子的电离能, $Z_{eff}(nl)$ 为 nl 轨道电子的有效核电荷, E 为入射电子能量, $E_{ea}(1s - n'l')$ 为电子从 $1s$ 轨道激发到 $n'l'$ 轨道的激发能量, $H(x)$ 为阶跃函数, 其定义为

$$H(x) = \begin{cases} 0 & x \leq 0, \\ 1 & x > 0, \end{cases} \quad (2)$$

$Q_R^H(nl, u)$ 为类氢离子 nl 轨道上电子的标度电离截面, $[Z^2 \Omega_H(1s - n'l')]_{z=\infty}$ 为类氢离子 $1s$ 轨道电子激发到 $n'l'$ 轨道的标度碰撞强度, u_{nl} 是以 nl 电离阈能作为单位的入射电子能量, β 为分支比, 对于类锂离子, 应用 Hahn 的近似方法^[6,7]得

$$\beta = \frac{1}{1 + 2 \times 10^{-4} Z^3}, \quad (3)$$

Z 为核电荷, a_0 是玻尔半径。(1)式中的第一项为外层的 $2s$ 电子的直接电离截面, 第二项为内壳层 $1s$ 电子的激发自电离截面, 第三项为内壳层 $1s$ 电子的直接电离截面。

在电子速度 v 按 Maxwell 分布时, 电子碰撞电离的速率系数为

$$\alpha(1s^2 2s^2 S) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \int_{v_0^*}^{\infty} v^2 e^{-\frac{mv^2}{2kT}} Q(1s^2 2s^2 S, E) dv, \quad (4)$$

式中, m 为电子的静质量, k 为 Boltzmann 常数, T 为电子温度, v 为电子速度, v_0^* 为电子速度阈值, 它是电离过程的函数, 对于外层 $2s$ 电子的直接电离 $v_0^{di} = \sqrt{\frac{2I_{2s}}{m}}$, 对于内壳层 $1s$ 电子的激发自电离 $v_0^{ea} = \sqrt{\frac{2E_{ea}(1s - n'l')}{m}}$, 对于内壳层 $1s$ 电子的直接电离 $v_0^{di} = \sqrt{\frac{2I_{1s}}{m}}$ 。

在低密度等离子体中, 类锂离子基态一般包含 $1s^2 2s$ 和 $1s^2 2p$ 两个组态。对于 $1s^2 2p$ 组态的电离截面, 只要把(1)式中与 $2s$ 有关的量换为与 $2p$ 相应的量, 同时, 把激发自电离中的第一项乘以因子 2, 第二项中 2 换为 $3/5$, 那么, (1)、(4)式完全适用于计算 $1s^2 2p$ 组态的电离。

在计算过程中, 我们采用[4]中类似的方法, 所不同的是: (1)在我们的计算中, 考虑了辐射对自电离的影响, 即在激发自电离截面中乘以分支比 β , 而在[4]中, $\beta=1$ 。(2)对于内壳层电子的激发自电离, 我们计算了直到 $n'=5$ 的各次壳层对自电离的贡献。(3)在 $n' \geq 6$ 的激发自电离的处理过程中, 我们仍采用[4]的方法, 即把它与内壳层直接电离一并考虑, 只是把[4]中(9)式的 S_{1s}^q 换成了 $S_0 = E_{ea}(1s - 6l')/I_{1s}$, 同时把 S_{1s}^{q2} 换成了 $S_0^{2[3]}$ 。(4)在有效核电荷的处理上, 我们与原始的 Z 标度类氢模型作了较大的修改^[5]。一方面, 这是订正了原始理论中, 对屏蔽常数物理意义的不正确的定义和算法; 另一方面是更有效地考虑了其它电子对电离电子的屏蔽作用和电离电子轨道自身的相对论性收缩效应二者对碰撞强度的影响。具体算法是

把由 MCDF 程序包^[8]中算得的电离电子的初态轨道半径 $\langle r \rangle$ 代入类氢离子的非相对论平均半径公式中,从而求得有效核电荷

$$Z_{\text{eff}}(nl) = \frac{3n^2 - l(l+1)}{2\langle r \rangle} \quad (5)$$

用上述一系列公式计算了类锂硅离子的电子碰撞电离截面和电离速率系数(见表 1、2)。

Table 1 The ionization cross sections of SiXII $1s^22s$ and $1s^22p$ configurations (10^{-20}cm^2)

u_{2s} 和 u_{2p}	$Q(1s^22s)$	$Q(1s^22p)$
2.0	5.245	7.146
3.0	5.258	6.969
4.0	5.480	6.928
5.0	5.331	6.517
6.0	5.009	6.041
7.0	4.705	5.612

Table 2 The ionization rate coefficients of SiXII $1s^22s$ and $1s^22p$ configurations ($10^{-10}\text{cm}^2/\text{s}$)

$T(\text{eV})$	$\alpha(1s^22s)$	$\alpha(1s^22p)$
200	0.084	0.130
300	0.219	0.321
400	0.360	0.509
500	0.489	0.674
600	0.602	0.814
700	0.701	0.933
800	0.787	1.033
900	0.862	1.119
1000	0.928	1.192
1200	1.037	1.311
1500	1.159	1.437

我们算得的类锂硅离子的有效核电荷为 $Z(1s) = 13.65$, $Z(2s) = 12.78$, Sampson 等^[3]给出的该值分别为 13.2 和 12.7。其结果比我们的值小。

我们用本文给出的公式,对 CII、NV 和 OVI 所作的同样的计算与实验数据和畸变波理论的计算结果之比较^[9],我们可以确信理论结果的误差在 10~20% 之间。

参 考 文 献

- 1 徐至展 *et al.*, 中国激光, **16**, 616 (1989); **17**, 104 (1990)
- 2 L. B. Golden *et al.*, *J. Phys.*, **B10**, 2229 (1977)
- 3 R. E. H. Clark *et al.*, *J. Phys.*, **B17**, 3311 (1984)
- 4 D. H. Sampson *et al.*, *J. Phys.*, **B12**, L785 (1979)
- 5 朱硕人, 赵立波 *et al.*, 中国激光, **18**(8), 586 (1991)
- 6 D. H. Sampson *et al.*, *J. Phys.*, **B14**, 903 (1981)
- 7 Y. Hahn, *Phys. Rev.*, **A18**, 1028 (1978)
- 8 I. P. Grant *et al.*, *Comp. Phys. Comm.*, **21**, 207 (1980)
- 9 周忠源, 朱硕人 *et al.*, 原子分子物理学报, **8**(2), 1817 (1991)