

电子与类锂离子 $2s-2p$ 碰撞激发截面

李炳乾 王永昌

(西安交通大学物理系, 西安 710049)

提要 用多通道量子数亏损理论, 从精确的类铍离子能谱数据推算出低能电子与类锂离子 Al^{10+} 和 Si^{11+} 的 $2s-2p$ 碰撞激发截面和碰撞激发速率, 并与用 Mewe 的内插公式计算得到的结果进行了比较, 计算结果表明两者差别在百分之五以内。比较可靠的低能电子与类锂离子碰撞激发截面数据对于复合泵浦类锂离子软 X 射线激光和受控聚变研究具有重要作用。

关键词 量子数亏损, 类锂离子, 碰撞激发截面

1 引言

近几年来世界各国一些具有大功率激光装置的实验室相继开展了复合泵浦类锂离子软 X 射线激光研究^[1~4], 并且成功地演示了激光等离子体类锂离子 Al^{10+} 的 $5f-3d, 4f-3d$ 跃迁和 Si^{11+} 的 $6f-3d, 5f-3d, 4f-3d$ 和 $6p-3d$ 跃迁显著的自发辐射放大, 测量了相应于这些跃迁的激光增益系数。为了从理论上探索出激光等离子体最佳泵浦状态所对应的等离子体参量如电子温度, 电子和离子密度等, 已对复合泵浦类锂离子软 X 射线增益系数进行了大量的模拟计算^[5,6], 激光增益系数的计算通常是利用与时间有关的碰撞-辐射模型求解耦合速率方程组, 然而这需要提供与这些离子有关的各种微观过程的可靠数据, 如电子碰撞激发速率、电子碰撞电离速率和三体碰撞复合速率等。特别需要低能电子(几十个 eV)与离子碰撞激发截面数据。本文根据李家明提出的方法^[7], 应用多通道量子数亏损理论(MQDT)计算了类锂离子 Al^{10+} 和 Si^{11+} 的 $2s-2p$ 电子碰撞激发截面和碰撞激发速率, 并与 Mewe^[8] 的内插公式计算得到的结果进行了比较, 两者结果基本上一致, 差别在百分之五以内。

2 理论与计算方法

根据多通道量子数亏损理论^[9], 考虑电子与类锂离子碰撞激发时可将它们看成具有一定总能量的“电子-离子”体系, 电子和离子的相互作用在位形空间上可分为两个区域——作用域外和作用域内, 在作用域内, 电子与类锂离子形成一个复合体; 在作用域外, 电子与类锂离子各具有一定的角动量和一定的耦合方式, 这样一个组合方式称为一个分解通道。由于在作用域内电子之间的关联作用, 电子和离子之间可以交换能量和角动量, 因此整个体系可以处在不同的分解通道。每个分解通道对应一个 Rydberg 能级序列的电离阈值, 每一能级在不同的分解通道

内用不同的有效量子数 v_i 来表示,即

$$E = I_i - 1/2v_i^2, \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (1)$$

其中 I_i 是第 i 个分解通道的电离阈值(用原子单位表示),因此在多通道量子数亏损理论中任一能级 E 是用一组有效量子数 $\{v_i\}$ 来表示的。另一方面,根据边界条件考虑, v_i 必须满足相容性条件

$$\det |U_{ia} \sin \pi(v_i + \mu_a)| = 0, \quad (\alpha, i = 1, 2, \dots, N) \quad (2)$$

式中 U_{ia} 是分解通道和本征通道之间的正交变换矩阵元, U_{ia} 描述入射电子与离子之间距离由域内增大到域外时它们之间耦合性质的变化,而 μ_a 则表示由于域内的相互作用使域外的库仑波向内产生的位移,其位移的大小由相位 $\pi\mu_a$ 表示。

根据对称性的考虑,具有相同总角动量和宇称性的通道可以混合,因此类铍离子的能谱可以分波形式展开为各个不同的对称块而分别考虑。

根据类铍离子 Al^{9+} 和 Si^{10+} 新近的激发能谱数据^[10,11],将 Al^{9+} 离子能级分别划分为偶宇称 ($J = 0, 1, 2, 3$) 和奇宇称 ($J = 0, 1, 2, 3$) 8 个对称块,前者包括 16 个通道,后者包括 17 个通道。这些通道分别收敛于电离阈 $I_1 = 3221080 \text{ cm}^{-1}$, $I_2 = 3397099 \text{ cm}^{-1}$, $I_3 = 3402888 \text{ cm}^{-1}$ 。对 Si^{10+} 离子也采用类似划分。拟合实验光谱数据使^[12]

$$W = \sum_n \{ [\det |U_{ia} \sin \pi(v_{i,n} + \mu_a)|]^2 / N_i \}^{1/2} \quad (3)$$

为最小 (n 为对实验能级求和, N_i 参与拟合的能级总数目),可求得 8 个对称块相应于类锂离子 $2s-2p$ 激发阈附近的本征量子数亏损 μ_a 和正交变换矩阵元 U_{ia} ,在完全连续能域中,所有分解通道是开放的,各分解通道的电子轨道能量 $E = K_i^2/2$ 是正的。当 $r \rightarrow \infty$,“电子-离子”体系的波函数可写为^[7]

$$\psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A \sum_i \varphi_i \left\{ \sqrt{\frac{1}{2\pi K_i}} \exp \left[i \left(K_i r + \frac{1}{K_i} \ln 2K_i r - \frac{l_i}{2} \pi \right) \right] \exp(i\sigma_j) \left[\frac{1}{i} \sum_a U_{ia} \exp(i\pi\mu_a) A_a \right] - \sqrt{\frac{1}{2\pi K_i}} \exp \left[-i \left(K_i r + \frac{1}{K_i} \ln 2K_i r - \frac{l_i}{2} \pi \right) \right] \exp(-i\sigma_j) \left[\frac{1}{i} \sum_a U_{ia} \exp(-i\pi\mu_a) A_a \right] \right\} \quad (4)$$

上式大括号中第一项表示外向波,而第二项表示内向波,混合系数 A_a 将由所谓内向边界条件来决定,即第 j 分解通道的内向波系数为 1 而其他分解通道 ($i \neq j$) 的内向波系数为零,所以

$$A_a^{(-j)} = -iU_{ia} \exp[i(\pi\mu_a + \sigma_i)] \quad (5)$$

为了求碰撞截面,需要知道散射矩阵 S_{ij} ,即在内向边界条件下,第 j 分解通道以单位振幅的内向波射入时,第 i 分解通道散射出的外相波负振幅为

$$S_{ij} = \exp(i\sigma_i) \sum_a U_{ia} \exp(i\pi\mu_a) A_a^{(-j)} = \exp(i\sigma_i) \left[\sum_a U_{ia} \exp(i2\pi\mu_a) U_{ja} \right] \exp(i\sigma_j) \quad (6)$$

于是类锂离子 $2s-2p$ 碰撞激发截面为^[7]

$$\sigma = \frac{\pi}{4K_{2s}^2} \sum_{j \in 2s} \sum_{i \in 2p} \sum_s \sum_L (2S+1)(2L+1) |S_{ij}|^2 \quad (7)$$

这里截面以 $h^4/(Z_i m e^2)$ 为单位,对 Al^{10+} 和 Si^{11+} , $Z_i = 10$ 和 11 , K_{2s} 是与入射电子能量相应的波矢,碰撞强度为

$$\Omega(nl \rightarrow n' l') = \frac{\sigma}{\pi} K_{n1}^2 (2l+1) \quad (8)$$

电子碰撞激发速率 $\alpha(2s-2p)$ 为

$$\alpha(2s \rightarrow 2p) = 8.63 \times 10^{-12} T^{-1/2} 10^{-5040 \Delta E/T} \Omega(2s \rightarrow 2p) \quad (9)$$

其中 T 为相应于入射电子动能的电子温度, 单位为 K, ΔE 为类锂离子 $2s-2p$ 激发阈值, 单位为 eV。

3 计算结果与结论

采用上述新近的能谱数据, 在类锂离子 $2s-2p$ 激发阈值附近得到了 Al^{9+} 和 Si^{10+} 各自 8 个对称块的 MQDT 参数, 鉴于参数较多, 这里仅列出 Al^{9+} 偶宇称 $J = 1$ 和 $J = 2$ 和 Si^{10+} 奇宇称 $J = 1$ 和 $J = 2$ 的 MQDT 参数见表 1~4, 表中 $\bar{\alpha}$ 表示纯 LS 耦合, α 表示中间耦合本征通道, i 表示分解通道, $\mu_a = \mu_a^{(0)} + \mu_a^{(1)}/v^2 + \mu_a^{(2)}/v^4$ 。

Table 1 The MQDT parameters of even parity $J = 1$ of Al^{9+}

$i \bar{\alpha} \alpha$	1	2	3	4	5	6
α	$2sns \ ^3S_1$	$2snd \ ^3D_1$	$2pnp \ ^3P_1$	$2pnp \ ^1P_1$	$2pnp \ ^3D_1$	$2pnp \ ^3S_1$
i	$(^2S_{1/2})s_{1/2}$	$(^2S_{1/2})d_{3/2}$	$(^2P_{3/2})p_{1/2}$	$(^2P_{3/2})p_{3/2}$	$(^2P_{1/2})p_{1/2}$	$(^2P_{1/2})p_{3/2}$
I_i	3221080	3221080	3402888	3402888	3397099	3397099
$\mu_a^{(0)}$	0.1698	0.0467	0.7766	0.0730	0.4143	0.1359
$\mu_a^{(1)}$	0.0028	-0.0244	-6.6254	-0.0996	-0.6554	-0.5782
$\mu_a^{(2)}$	-0.0039	0.0180	0.1322	0.0910	0.0117	0.0432
	0.9979	-0.0644	-0.0020	-0.0067	-0.0032	-0.0011
	-0.0646	-0.9921	0.0402	-0.0832	-0.0475	0.0281
U_{ia}	0.0033	0.0279	0.6974	0.3246	-0.6293	-0.1068
	0.0015	-0.0489	-0.2889	0.7007	-0.0705	0.6466
	0.0025	-0.0535	0.4906	0.3928	0.7655	-0.1270
	0.0036	0.0747	0.4334	-0.4923	0.1034	0.7440

Table 2 The MQDT parameters of even parity $J = 2$ of Al^{9+}

$i \bar{\alpha} \alpha$	1	2	3	4	5
α	$2snd \ ^3D_2$	$2snd \ ^1D_2$	$2pnp \ ^3P_2$	$2pnp \ ^3D_2$	$2pnp \ ^1D_2$
i	$(^2S_{1/2})d_{3/2}$	$(^2S_{1/2})d_{5/2}$	$(^2P_{3/2})p_{3/2}$	$(^2P_{1/2})p_{3/2}$	$(^2P_{3/2})p_{1/2}$
I_i	3210080	3221080	3402888	3397099	3402888
$\mu_a^{(0)}$	0.0529	0.0320	-0.3073	0.0462	0.0381
$\mu_a^{(1)}$	-0.0646	-0.1644	2.9429	0.2865	0.0448
$\mu_a^{(2)}$	-0.7805	-0.6813	9.7627	-0.5533	-0.1371
	0.6958	-0.5798	0.0383	-0.3110	-0.2853
	0.5791	0.7185	0.0098	-0.2832	0.2665
U_{ia}	-0.0017	0.0523	0.9915	0.0911	-0.0767
	0.0001	0.3835	-0.1008	0.1091	-0.9115
	0.4247	-0.0269	-0.0721	0.8960	0.1040

Table 3 The MQDT parameters of odd parity $J = 1$ of Si^{10+}

$i \bar{a} \alpha$	1	2	3	4	5
α	$2snp \ ^3P_1$	$2snp \ ^1P_1$	$2pns \ ^3P_1$	$2pns \ ^1P_1$	$2pnd \ ^3D_1$
i	$(^2S_{1/2})p_{1/2}$	$(^2S_{1/2})p_{3/2}$	$(^2P_{1/2})s_{1/2}$	$(^2P_{1/2})s_{1/2}$	$(^2P_{1/2})d_{3/2}$
I_i	3842100	3842100	4034162	4042338	4034162
$\mu_a^{(0)}$	0.0533	0.0654	0.0922	0.1296	0.0148
$\mu_a^{(1)}$	0.2012	0.0660	-0.0351	-0.0353	-0.0443
$\mu_a^{(2)}$	0.0992	0.1107	0.4319	0.0886	0.0216
	0.8532	0.5125	0.0798	-0.0195	-0.0512
	-0.4874	0.7513	0.4375	0.0536	0.0602
U_{ia}	0.1083	-0.2804	0.6470	-0.6528	0.2546
	0.1498	-0.2851	0.5374	0.7551	0.1928
	0.0151	0.0978	-0.2648	0.0149	0.8128

Table 4 The MQDT parameters of odd parity $J = 2$ of Si^{10+}

$i \bar{a} \alpha$	1	2	3	4	5	6
α	$2snp \ ^3P_2$	$2snf \ ^3F_2$	$2pns \ ^3P_2$	$2pnd \ ^3D_2$	$2pnd \ ^1D_2$	$2pnd \ ^3P_2$
i	$(^2S_{1/2})p_{3/2}$	$(^2S_{1/2})f_{5/2}$	$(^2P_{3/2})s_{1/2}$	$(^2P_{3/2})d_{3/2}$	$(^2P_{3/2})d_{5/2}$	$(^2P_{1/2})d_{5/2}$
I_i	3842100	3842100	4042338	4042338	4042338	4034262
$\mu_a^{(0)}$	0.0705	0.0050	0.1306	-0.4095	0.0477	0.0077
$\mu_a^{(1)}$	0.0384	0.0160	-0.0256	3.1973	-0.1461	0.0325
$\mu_a^{(2)}$	0.0262	-0.0005	0.2704	12.4931	0.0073	-0.0622
	0.9885	-0.0444	-0.1039	0.0545	0.0722	0.0438
	-0.0420	-0.9989	0.0130	-0.0115	-0.0049	-0.0116
U_{ia}	0.0885	0.0071	0.9757	0.1718	0.0934	-0.0442
	-0.0767	-0.0058	-0.1723	0.6957	0.4531	-0.2973
	-0.0608	-0.0048	0.0200	-0.2817	0.6767	0.6504
	-0.0431	-0.0120	-0.0397	0.6149	-0.3519	0.6807

将在类锂离子 $2s-2p$ 激发阈值附近得到的 Al^{9+} 和 Si^{10+} 的 8 个对称块的本征参数 μ_a 和 U_{ia} 分别代入(7),(9)式,求得的 Al^{10+} 和 Si^{11+} 的电子碰撞激发截面、碰撞激发速率列于表 5 的第四列。

Table 5 The $2s-2p$ electron impact excitation cross sections (σ) and rate coefficients (α) of Al^{10+} and Si^{11+}

Ions	The $2s-2p$ threshold		This paper results	The Mewe' s results	Rel. Errors
Al^{10+}	22.54 eV	σ (m^2)	2.22×10^{-21}	2.13×10^{-21}	4%
		α (m^3/s)	0.57×10^{-14}	0.55×10^{-14}	4%
Si^{11+}	24.83 eV	σ (m^2)	1.12×10^{-21}	1.07×10^{-21}	4%
		α (m^3/s)	0.45×10^{-14}	0.43×10^{-14}	4%

由于目前尚无 Al^{10+} 和 Si^{11+} 电子碰撞激发截面实验数据报道,所以我们用 Mewe 内插公

式得到的结果与本文计算结果加以比较。Mewe 关于电子与类锂离子 $2s-2p$ 碰撞激发截面内插公式拟合了 Coulomb-Born 交换近似法和强耦合(close-coupling)方法的计算结果,用上述公式得到 Al^{10+} 和 Si^{11+} 的结果列于表 5 第五列,由表 5 可以看出,两者结果基本一致,相差 4% 左右,表明依据精确的类铍离子能谱数据,可以用多通道量子亏损理论方法,计算出低能电子与类锂离子碰撞激发截面和碰撞激发速率。

根据 Coulomb-Born^[13] 交换近似公式,我们计算了 Al^{10+} 和 Si^{11+} 离子在 $T_e = 30$ eV 时 $2s-2p$, $2s-3d$, $2s-4f$, $2s-5f$, $2s-6p$ 和 $2s-6f$ 的碰撞激发截面和激发速率系数,列于表 6。

Table 6 The electron impact excitation cross sections (σ) and rate coefficients (a) of Al^{10+} and Si^{11+} at $T_e = 30$ eV

	Al^{10+}		Si^{11+}	
	σ (m^2)	a (m^2/s)	σ (m^2)	a (m^2/s)
$2s-3p$	1.06×10^{-25}	0.17×10^{-18}	1.32×10^{-26}	0.32×10^{-18}
$2s-3d$	1.21×10^{-25}	0.19×10^{-18}	1.42×10^{-25}	0.34×10^{-18}
$2s-4f$	3.71×10^{-28}	0.47×10^{-21}	2.66×10^{-29}	0.53×10^{-22}
$2s-5f$	6.92×10^{-29}	0.84×10^{-22}	3.88×10^{-30}	0.72×10^{-23}
$2s-6p$	7.94×10^{-29}	0.92×10^{-22}	4.04×10^{-30}	0.72×10^{-23}
$2s-6f$	2.19×10^{-29}	0.25×10^{-22}	1.10×10^{-30}	0.19×10^{-23}

由表 6 可知, $2s-2p$ 跃迁的电子碰撞激发速率比 $2s$ 至其他激发能级的大四个数量级以上,并且对 $2s$ 和 $2p$ 之间粒子数布居的转移而言,电子碰撞激发与退激发的速率比 $2p-2s$ 跃迁的自发辐射衰变快得多,使 $2s$ 和 $2p$ 能态之间能迅速交换粒子数,因此在计算复合泵浦类锂离子能级布居的耦合速率方程组时,可认为 $2s^2S_{1/2}$, $2p^2P_{1/2}$ 和 $2p^2P_{3/2}$ 这三个态组成“超基态”,其粒子数布居服从玻尔兹曼分布。

参 考 文 献

- 1 G. Jamelot, A. Klisnick, A. Carillon *et al.*. Amplification of soft X-ray spontaneous emission in aluminium and magnesium plasmas. *J. Phys. B*, 1985, **18**(23): 4647
- 2 A. Klisnick, A. Sureau, H. Guennou *et al.*. Effective rates for Li-like ions; Calculated XUV gains in Al^{10+} . *Appl. Phys.*, 1990, **B50**: 153
- 3 C. J. Keane, N. M. Ceglio, B. J. MacGowan *et al.*. Soft X-ray laser source development and applications experiments at Lawrence Livermore National Laboratory. *J. Phys. B*, 1989, **22**(21): 3343
- 4 徐至展, 范品忠, 张正泉等. 复合泵浦类锂离子软 X 射线激光. 中国科学, A 辑, 1990, **1**: 27; 1991, **4**: 414
- 5 D. Kim, C. H. Skinner, A. Wooters *et al.*. Soft X-ray amplification in lithiumlike Al XI (154A) and Si XII (129A). *J. Opt. Soc. Am. B*, 1989, **6**(1): 115
- 6 H. Guennou, A. Sureau. Ab initio Al XI and S XII spectra. Transient population inversions in laser-produced plasmas. *J. Phys. B*, 1987, **20**(5): 919
- 7 李家明. 电子与类锂离子碰撞激发. 物理学报, 1980, **29**(4): 419
- 8 R. Mewe. Interpolation formulae for the electron impact excitation of ions in the H-, He-, Li- and Ne-Sequences. *Astron. & Astrophys.*, 1972, **20**: 215
- 9 Chia-Ming Lee, K. T. Lu. Spectroscopy and collision theory. II. The Ar absorption spectrum. *Phys. Rev. A*, 1973, **8**(3): 1241
- 10 W. C. Martin, R. Zalubas. Energy levels of aluminum, Al I through Al X III. *J. Phys. Chem. Ref. Data*,

1979, 8(3) : 817

- 11 W. C. Martin, R. Zalubas. Energy levels of silicon, Si I through Si X V. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 1983, 12(2) : 323
- 12 梁 良, 王永昌, 刘学文. Ca II 能谱的多通道量子数亏损理论分析. *物理学报*, 1990, 39(6) : 853
- 13 O. Bely. Excitation of Lithium-like ions by electron impacts. *Proc. Phys. Soc.*, 1966, 88 : 587

The $2s-2p$ Excitation cross sections of Lithium-like Ions by Electron Impacts

Li Bingqian Wang Yongchang

(Department of Physics, Xian Jiaotong University, Xian 710049)

Abstract In this paper the Multichannel Quantum Defect Theory (MQDT) has been applied to the calculation of the $2s-2p$ electron impact excitation cross sections and rate coefficients of Lithium-like ions Al^{10+} , Si^{11+} through the available spectral data of the Beryllium-like ions. The results are compared with Mewe's values which are obtained by using interpolation formulae for the electron impact excitation of the Lithium-like ions. It is found that our calculated values agree within 5% with the Mewe's interpolation results.

Key words quantum defect, Lithium-like ion, impact cross-section

Li 晶体 F_2^+ , F_2^- 色心组合式室温可调谐激光器

在激光调谐腔内通过更换 $LiF:F_2^{+*}$ 和 $LiF:F_2^-$ 两块晶体,用脉冲 Nd:YAG 激光器的倍频 $0.53 \mu m$ 和基频 $1.06 \mu m$ 光作为相应的泵浦源。实现近红外波段 $0.85 \sim 1.20 \mu m$ 的宽带调谐。激光峰值功率 10 kW 量级,平均功率 mW 量级。激光能量转换效率 $1 \sim 2\%$ 。调谐腔由闪耀光栅和一部分反射输出镜组成($F_2^+ : T=17\%$, $F_2^- : T=20\%$)组成。光栅采用利特罗自准直方式,一级衍射光振荡并输出。转动光栅实现激光调谐。采用离轴斜泵浦方式,既提高了激光的信噪比,又不损坏谐振腔。

激光介质棒采用纯 LiF 晶体经 γ 射线辐照获得 $LiF:F_2^{+*}$ 晶体尺寸 $10 \times 10 \times 30 \text{ mm}^3$,辐照剂量 $1.1 \times 10^7 \text{ rad}$, $LiF:F_2^-$ 晶体的辐照剂量和尺寸分别为 $F_2^- : 2 \times 10^8 \text{ rad}$, $10 \times 10 \times 60 \text{ mm}^3$ 。此激光器在室温稳定运转数小时无漂白现象。

本研究成果得到天津市 21 世纪青年基金资助,并已通过天津市科委鉴定。

* 李 鸿 等. 中国激光, 1994, A21(2) : 86