

金等离子体平均离化度随电子温度变化关系的研究*

张 红¹⁾ 程新路¹⁾ 杨向东¹⁾ 谢方军²⁾ 张继彦³⁾ 杨国洪³⁾

¹⁾ 四川大学物理科学与技术学院, 成都 610065)

²⁾ 四川大学计算机学院, 成都 610065)

³⁾ 中国工程物理研究院激光聚变研究中心, 绵阳 621900)

(2003 年 4 月 25 日收到, 2003 年 6 月 2 日收到修改稿)

用 Cowan 的原子结构从头算程序和自旋轨道劈裂阵模型计算各阶电离的金离子能级和跃迁, 在碰撞辐射模型下求解能级布居数方程, 计算给定等离子体密度和电子温度下等离子体中离子的分布, 给出了平均离化度随电子温度的变化关系. 发现稀薄的金等离子体中, 在一定的电子温度范围内电子温度的升高平均电离度反而下降的反常现象. 讨论了电离势对平均离化度的影响.

关键词: 金等离子体, 碰撞辐射模型, 布居数, 平均电离度

PACC: 5220, 5225, 5265, 3200

1. 引 言

金等离子体的研究对惯性约束聚变和 x 射线激光等有重要意义. 目前, 在感兴趣的激光金等离子体中, 电子密度和电子温度的典型值分别为 10^{19} 到 10^{24} cm^{-3} 和 10^2 — 10^3 eV 量级^[1], 既不能用局域热力学平衡(LTE)也不能用日冕平衡来描述. 在这样的温度、密度范围内等离子体中非局域热力学平衡起重要作用. 高度离化的等离子体的离化平衡对于等离子体的参数诊断是非常重要的. 例如, 平均电离度 Z 对于声速、电子密度、碰撞速率以及等离子体热传导性的研究都是非常重要的, 也与聚变等离子体的能量有密切联系^[2].

在非局域热力学平衡等离子体中, 电离态是由离化、复合、激发、辐射衰退、自离化、双电子复合等过程决定的. 在高 Z 元素中, 在非局域热力学平衡系统中包含大量的能级和跃迁, 难以详细地计算. 为此, 人们提出了很多近似计算方法. 包括平均原子模型(AAM)、类氢细致组态模型(DCA), 以及更详细的超组态碰撞辐射模型(SCROLL). 然而, 很多方法计算出来的结果与实验值却相差很大, 在某些情况下, 平均电荷状态与实验值误差超过 10 个单位^[3].

本文基于自旋-轨道劈裂阵(SOSA)的方法结合碰撞辐射模型来确定金等离子体中的电荷态分布以及平均离化度随电子温度的变化关系. 我们用 Cowan 的原子结构从头算程序^[4]和 SOSA 模型计算各阶电离的金离子的能级和跃迁^[5], 并用非局域热力学模型计算在给定温度和密度下的等离子体中离子的分布, 给出了平均离化度随电子温度的变化关系以及电离势所起的作用.

2. 理论模型和计算方法

用碰撞辐射模型(CRM)求离子的能级布居^[6]. 在 CRM 中, 忽略激发态对离子布居的贡献, 仅仅考虑基态碰撞激发、复合、三体复合和双电子复合对离子布居的贡献, 并采用光学薄近似. CRM 可表示为如下的速率方程:

$$\begin{aligned} \frac{dN(n, l, g)}{dt} = & N(n, l, g)N_e S(T_e, n, l, g) \\ & - N(n+1, l, g)N_e [\alpha(T_e, n+1, l, g) \\ & + N_e R_{3b}(T_e, n+1, l, g) \\ & + \alpha^{\text{DR}}(T_e, n+1, l, g)], \end{aligned} \quad (1)$$

式中, N_e 是电子密度, $N(n, l, g)$ 是电离度为 n 的离

* 国防科技重点实验室基金(批准号: JW1901, SC0303)、高等学校博士学科点专项科研基金(批准号: 20020610001)资助的课题.

† 通讯联系人. Tel: 028-8540552(0), Fax: 028-85405515, E-mail: xdyang@scu.edu.cn

子基态占有数. S , α , R_{3b} 和 α^{DR} 分别表示碰撞电离、辐射复合、三体复合以及双电子复合速率系数. 通常原子物理过程的时间是非常短的, 能级布居数容易达到平衡, 则方程 (1) 在稳态近似下可以写成

$$\frac{dN(n, g)}{dt} = 0. \quad (2)$$

由方程 (1) 可见, 计算能级布居数的关键是计算各过程的速率系数. 碰撞电离、自电离、辐射复合包括三体复合以及双电子复合速率系数, 而这些系数的计算比较困难^[7]. 为了简化, 我们用平均速率和经验公式进行计算.

对于一个离子的能级、电离势和辐射跃迁速率, 我们用基于 Cowan 的原子结构程序包的 SOSA 模型. 对于从初始组态 C 到末态 C' 的跃迁, 自旋轨道相互作用比静电作用大得多, 组态分裂为子组态, 子组态之间的跃迁形成了自旋轨道劈裂阵 (SOSA).

从 A 阵跃迁到 B 阵总的波数为

$$\lambda(A-B) = 1/T_{av}(A-B), \quad (3)$$

这里

$$T_{av}(A-B) = \mu_1 + \Delta E = E_{av}(B) - E_{av}(A) + \Delta E.$$

$E_{av}(B)$, $E_{av}(A)$ 是初态和末态的平均能量, 并且有

$$\begin{aligned} & \Delta E (j_1^{N_1+1} - j_1^{N_1} j_2) \\ &= N_1 \left[- \sum_{\substack{k \neq 0 \\ k \text{ 为偶数}}} \frac{(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)}{2j_1} \right. \\ & \quad \times \begin{Bmatrix} k & j_1 & j_1 \\ 1 & j_2 & j_2 \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & k & j_1 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_2 & k & j_2 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \\ & \quad \times F^k(l_1, l_2) + \sum_k \frac{(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)X(k, l) - 3}{6j_1} \\ & \quad \left. \times \begin{pmatrix} j_1 & k & j_2 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{pmatrix}^2 \pi(l_1, l_2, k) G^k(l_1, l_2) \right], \quad (4) \end{aligned}$$

式中

$$\pi(l_1, l_2, k) = \frac{[1 + (-1)^{l_1+l_2+k}]}{2}.$$

对于 A 跃迁到 B 的半高宽 (FWHM) 为

$$\text{FWHM}(A-B) = (2 \ln 2 \sigma^2)^{\frac{1}{2}}. \quad (5)$$

式中 σ^2 为均方差,

$$\begin{aligned} \sigma^2 &= \sum_i N_i \left[\sum_{k, k'} x_i(k, k', l, l', \dots) \right. \\ & \quad \left. \times X_i^{kk'}(nl, n'l', \dots) \right], \quad (6) \end{aligned}$$

式中 N_i 是电子数, x_i 有 $3j$, $6j$ 或 $9j$ 符号组成, X_i 是

按 k, k' 的 Slater 积分, 详细计算可参见 Bauche-Amoult 等的公式计算^[5].

跃迁阵 A 到 B 的总强度为 I ,

$$\begin{aligned} & I (j_1^{N_1+1} j_2^{N_2} - j_1^{N_1} j_2^{N_2+1}) \\ &= I_{\max} \begin{pmatrix} 2j_2 \\ N_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2j_1 \\ N_1 \end{pmatrix} \alpha_{l_1 l_2 j_1 j_2} (I_{n_1 l_1 n_2 l_2}). \quad (7) \end{aligned}$$

(7) 式的详细表达式见文献 [5].

电子碰撞激发的速率 $S(n)$ 和三体复合速率 $R_{3b}(n+1)$ 可由下式计算^[8]:

$$\begin{aligned} S(n) &= \frac{0.9 \times 10^{-5} \xi(n) (T_e/I_n)^{1/2}}{I_n^{3/2} (4.88 + T_e/I_n)} \\ & \quad \times N_e \exp\left(-\frac{I_n}{T_e}\right) (s^{-1}), \quad (8) \end{aligned}$$

$$R_{3b}(n+1) = \frac{2.97 \times 10^{-27} \xi(n) N_e^2}{I_n^2 T_e (4.88 + T_e/I_n)} (s^{-1}), \quad (9)$$

其中 $\xi(n)$ 是最外层电子数, I_n 是 n 阶离化势, T_e 是电子温度, N_e 是电子密度.

电子碰撞激发的速率公式为

$$\begin{aligned} X(g, p) &= 1.6 \times 10^{-5} \frac{\langle \bar{g} \rangle f(p, g) N_e}{E(p, g) \sqrt{T_e}} \\ & \quad \times \exp\left[-\frac{E(p, g)}{T_e}\right] (s^{-1}). \quad (10) \end{aligned}$$

这里 $\langle \bar{g} \rangle$ 是 Maxwell 分布的 Gaunt 因子.

对于碰撞去激发,

$$Y(p, g) = \frac{g_p}{g_p} X(g, p) \exp\left(\frac{E(p, g)}{T_e}\right) (s^{-1}). \quad (11)$$

对于自离化和双电子复合, 我们用 Burgess-Merts 公式,

$$\alpha_{jk}^{DR}(T_e) = T_e f(k, j) F_1 F_2 \exp\left(-\frac{\bar{E}}{T_e}\right), \quad (12)$$

式中 $E(k, j)$ 是激发能, $f(k, j)$ 是振荡强度, Z 为核电荷数, I_H 是氢原子的激发能.

辐射复合速率可以由下式计算:

$$\begin{aligned} \alpha(n) &= 5.16966 \times 10^{-14} \left(\frac{I_n}{T_e}\right)^{1/2} N_e \\ & \quad \times \left\{ 0.429 + \frac{1}{2} \ln\left(\frac{I_n}{T_e}\right) + 0.469 \left(\frac{I_n}{T_e}\right)^{-1/3} \right\} (s^{-1}), \quad (13) \end{aligned}$$

式中 I_n 是 n 阶离化的电离能, 电子温度 T_e 的单位为 eV.

通过在给定的电子温度和密度下解方程, 可以得到布居数.

3. 计算结果

基于 SOSA 模型和 CRM, 我们计算了给定密度和电子温度条件下等离子体中的电荷分布. 图 1 是等离子体密度为 0.001 g/cm^3 , 电子温度为 3500 eV 时的离子分布情况. 关于计算所得离子分布的可靠性, 可借助 SOSA 模型通过用所得的离子分布、能级占有数等模拟该温度、密度条件下的光谱^[9], 将计算光谱和实验光谱比较得到证明(另文发表). 对所得的离子分布求平均值即可得到平均离化度. 改变电子温度, 计算出不同温度下的离子分布及平均离化度, 得出平均离化度随电子温度的变化关系.

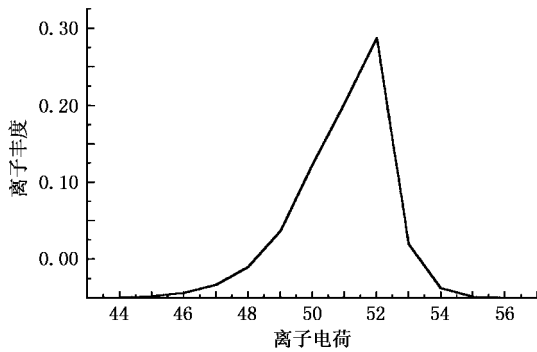


图 1 Au 等离子体离子丰度图 电子温度为 3500 eV

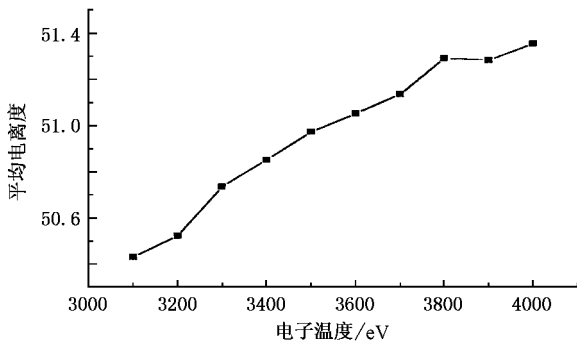


图 2 平均离化度随电子温度的变化关系

图 2 给出了等离子体密度为 0.001 g/cm^3 , 金等离子体平均离化度随电子温度的变化关系. 由图 2 可见, 随着电子温度的增加平均离化度急剧增加, 但在平均离化度为 51.2 附近, 电子温度从 3800 eV 增加至 3900 eV 附近时, 平均离化度没有增加, 反而减小. 对于平均离化度下降区域, 从 3800 eV 起, 我们以电子温度每次增加 20 eV 的步长计算平均电离度

随电子温度的变化关系. 结果如图 3 所示. 由图 3 可以明显看出平均电离度的下降现象. 发生此现象的主要原因之一是金的电离势在 51 和 52 之间由 2938 eV 跃跳式增大至 4880 eV ^[10]. 图 4 给出了金的电离势和离子电荷的变化关系, 由图 4 可见, 从中性 Au 原子开始随着核外电子的不断电离, 电离势缓慢增加, 但在 51 到 52 之间, 电离势陡峭增加.

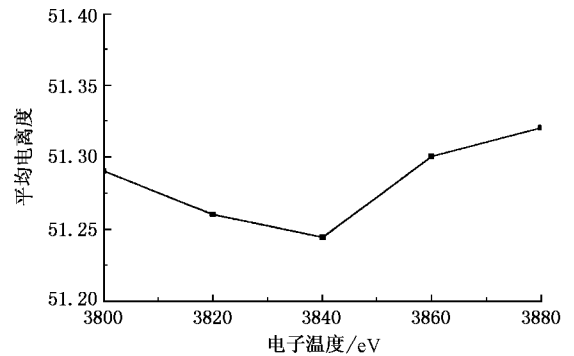


图 3 $3800\text{—}3880 \text{ eV}$ 范围内平均离化度随电子温度的变化关系

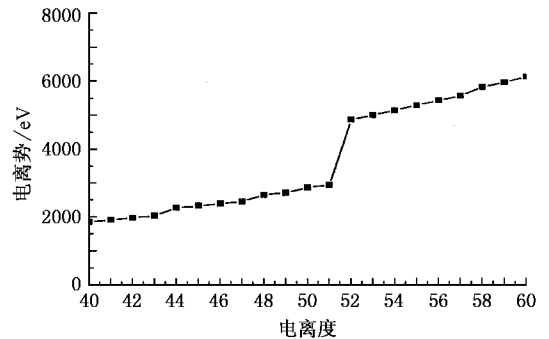


图 4 金的电离势随电离度的变化关系

4. 结 论

等离子体的平均电离度 Z 对于声速、电子密度、碰撞速率以及等离子体的热传导性的研究都是非常重要的. 本文基于 SOSA 的方法结合 CRM 来确定金等离子体中的电荷态分布以及平均离化度随电子温度的变化关系. 发现稀薄的金等离子体中(密度为 0.001 g/cm^3) 在一定的电子温度范围内, 电子温度的升高平均电离度反而下降的反常现象. 通过研究金的电离势和离子电荷的变化关系, 指出此反常现象出现的原因是金的电离势在 51 和 52 之间由 2938 eV 跳跃式增大至 4880 eV .

- [1] Yang J M , Ding Y N *et al* 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 411(in Chinese) 杨家敏、丁耀南等 2003 物理学报 **52** 411]
- [2] Hoarty D , Willi O , Watt R *et al* 2000 *Inertial Fusion Science and Applications* 99 (Northern Holland :Elsevier) 269
- [3] Abdallah J , Zhang H L , Fontes C J *et al* 2001 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **71** 107
- [4] Cowan R D 1981 *The Theory of Atomic Structure and Spectra* Berkeley :University of California Press)
- [5] Bauche-Amoult C , Luc-Koenig E , Wyart J F *et al* 1986 *Phys. Rev. A* **33** 791
- [6] Glenzer S H , Fournier K B *et al* 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 45002
- [7] Jiao R Z , Cheng X L *et al* 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1755(in Chinese) 焦荣珍、程新路等 2002 物理学报 **51** 1755]
- [8] Wang T C , Wang Y Z 1986 *Chin. J. Atom. Mol. Phys.* **3** 231 (in Chinese) 王泰春、王玉芝 1986 原子与分子物理学报 **3** 231]
- [9] Yang G H , Zhang J Y *et al* 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 2389 (in Chinese) 杨国洪、张继彦等 2000 物理学报 **49** 2389]
- [10] Cheng X L , Zhu Z H , Gou Q Q 1994 *Chin. J. Atom. Mol. Phys.* **11** 281(in Chinese) 程新路、朱正和、勾清泉 1994 原子与分子物理学报 **11** 281]

Study on the relationship of average ionization stage with the electron temperature for Au laser produced plasma^{*}

Zhang Hong¹⁾ Cheng Xin-Lu¹⁾ Yang Xiang-Dong¹⁾ Xie Fang-Jun²⁾ Zhang Ji-Yan³⁾ Yang Guo-Hong³⁾

¹⁾ College of Physics Science and Technology , Sichuan University , Chengdu 610065 , China)

²⁾ College of Computer Science , Sichuan University , Chengdu 610065 , China)

³⁾ Research Center of Laser Fusion , China Academy of Engineering Physics , Mianyang 621900 , China)

(Received 25 April 2003 ; revised manuscript received 2 June 2003)

Abstract

A collisional radiative model based on the spin-orbit-split-arrays was developed and used to determine the charge state distributions. The atomic structure code of Cowan and the spin-orbit-split-arrays model is used to calculate all the emission spectra of the different gold species , and a non-local thermodynamic equilibrium model is coupled to calculate the ion populations and the charge state distributions at a given density and temperature. The relationship between average charge state and the electron temperature is given. In general , the average charge state increases with electron temperature , except between 3800 and 3900 eV. The reason for this unusual region is that the ionization potential increases much sharply between Au51 and Au52.

Keywords : Au plasma , collision radiative model , ion population , average ionization stage

PACC : 5220 , 5225 , 5265 , 3200

* Project supported by the Key Laboratory Foundation of National Defense Science and Technology of China(Grant Nos. JW1901 and SC0303) , and the Doctoral Program Foundation of Institutions of Higher Education of China(Grant No. 20020610001) .