

电子离子碰撞过程中的共振激发双自电离^y

陈重阳, 齐静波, 王炎森

(复旦大学现代物理研究所, 上海 200433)

摘要: 利用相对论修正扭曲波玻恩近似, 计算了类钠离子 Ti^{11+} 和 Cr^{13+} 的电子碰撞直接电离, 激发自电离和共振激发双自电离截面. 理论数据与实验结果在整个能区内很好符合. 共振激发双自电离截面对总截面的贡献约为 20% - 30%, 对速率系数的影响较大, 不可忽略.

关键词: 电子离子碰撞; 共振激发双自电离; 扭曲波玻恩近似

中图分类号: O53; O414.22 文献标识码: A

1 引言

在与等离子密切相关的天体物理、X 射线激光和可控核聚变研究中, 电子碰撞电离截面和速率系数是必不可少的数据^[1]. 实验和理论研究表明, 对类锂和类钠离子, 间接电离过程在电离截面的计算中非常重要. 其中除了最主要的激发自电离外, 更高阶的间接电离过程(如共振激发双自电离)在某些能量范围内贡献也会非常大. 本文作者已在文献 [2] 中对电子与类锂离子碰撞过程中的共振激发双自电离 (REDA) 贡献做了系统的研究和讨论. 本文重点对类钠离子的 REDA 过程做详细地分析.

迄今为止, 对类钠离子电离截面的测量并不是很多, 例如有 Al^{2+} , Ar^{7+} , Ti^{11+} , Cr^{13+} 和 Fe^{15+} [3-8]. 在这些实验中, 某些能区范围内的 REDA 效应比较明显, 所以有必要对共振激发双自电离进行详细地计算. 在理论方面, Teng^[9] 用 R-Matrix 方法曾经对 Al^{2+} 计算过包括 REDA 和共振激发双电子电离 (READI) 过程在内的总电离截面. Reed 和 Chen 等^[10-12] 用相对论扭曲波方法对 Ar^{7+} , Fe^{15+} 和 Se^{23+} 等进行了包含碰撞直接电离 (DI)、激发自电离 (EA) 和 REDA 过程的截面计算. Tayal 和 Henry^[13, 14] 用紧耦合方法对 Ar^{7+} 和 Fe^{15+} 电子碰撞电离过程中的 REDA 做了详细研究. Linkemann 等^[8] 在他们的实验文章里也用 Breit-Pauli 扭曲波方法(包含 REDA)

对 Fe^{15+} 的电离截面进行了计算.

本文中我们利用带相对论修正的扭曲波玻恩交换近似 (DWBE) 方法, 包含了 DI, EA 和 REDA 过程, 计算了类钠 Ti^{11+} 和 Cr^{13+} 的电子碰撞电离截面. 计算数据在总的能区内和实验结果相当符合. 我们还以 Cr^{13+} 为例, 讨论了辐射退激和损失道对 REDA 截面的影响, 以及 REDA 截面对速率系数的贡献.

2 理论方法

关于直接电离和激发自电离截面的计算, 我们以前有过细致的描述^[15]. 本文中 REDA 过程可表示如下:

$$e + 1s^2 2l^8 3s \rightarrow 1s^2 2l^7 3snl'n'l' \rightarrow 1s^2 2l^7 3sn''l'' + e \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 + e + e, \quad (1)$$

在独立过程近似条件下, 总电离截面可写为

$$Q_{\text{tot}} = Q_d + \sum_j Q_{\text{exc}}(j) B_j^a + \sum_j Q_j^{\text{cap}} B_j^{\text{DA}}, \quad (2)$$

Q_d , $Q_{\text{exc}}(j)$ 和 Q_j^{cap} 分别为直接电离, 激发和双电子俘获截面. B_j^a 和 B_j^{DA} 分别为单电子和级联 Auger 电子发射的分支比, 它们可写为

$$B_j^a = \frac{\sum_m A_{jm}^a}{\sum_m A_{jm}^a + \sum_k A_{jk}^r}, \quad (3)$$

^y 收稿日期: 2002 - 03 - 07; 修改日期: 2002 - 05 - 31

* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10104005); 国家 863 高技术惯性约束聚变主题资助项目; 中国原子分子数据联合体资助项目

作者简介: 陈重阳(1972-), 男(汉族), 湖南祁东人, 博士, 从事电子离子碰撞的理论研究.

$$B_j^{DA} = \left| \frac{\sum_d \left| \frac{A_{jd}^a}{\sum_{d'} A_{jd'}^a + \sum_k A_{jk}^r} \right| \times \frac{\sum_{f'} A_{df'}^a}{\sum_{f'} A_{df'}^a + \sum_k A_{dk}^r} \right|, \quad (4)$$

A_{jm}^a 和 A_{jk}^r 分别是用相对论修正 Hartree-Fock 方法计算得到的 Auger 及辐射跃迁速率. 俘获到能级 j 的截面 Q_j^{cap} 可由逆 Auger 过程得到^[11],

$$Q_j^{cap}(E) = \frac{\pi^2 \eta^3 g_i}{2m_e E_j g_i} A_{ji}^a \delta(E - E_j), \quad (5)$$

$g_i (= 2J_i + 1)$ 和 $g_j (= 2J_j + 1)$ 是入射电子俘获前后的统计权重.

对于 REDA 过程, 我们包含了下面的一些双电子俘获态 $1s^2 2s^2 2p^5 3s 4lnl'$ ($n = 4-7$), $1s^2 2s 2p^6 3s 4lnl'$ ($n = 4-7$), $1s^2 2s^2 2p^5 3s 3lnl'$ ($n = 6-10$), $1s^2 2s 2p^6 3s 3lnl'$ ($n = 6-10$) 和 $1s^2 2s^2 2p^5 3s 5l5l'$. 其它的高 n 的 Auger 跃迁速率用 n^{-3} 规律外推到 $n = 30$. 速率系数由下式给出:

$$\alpha = \int f(v) Q_{tot}(v) dv, \quad (6)$$

$f(v)$ 为电子的速率分布, 这里假定为麦克斯韦分布.

3 计算结果和讨论

图 1 是我们的结果与 Gregory 等^[6]的实验数据. 为了和实验比较, 我们利用实验中入射电子的能量展宽 2 eV 进行高斯展宽. 由图可看见, 我们的计算值在整个能区范围内与实验相当符合. 对于 Ti^{11+} 和 Cr^{13+} , 分别在 450 到 600 eV 和 570 到 860 eV, 有很大一部分贡献来自 REDA 过程, 平均来说占总电离截面的 20%—30% 左右. 遗憾的是, 在这两个能区内实验数据都不多, 尤其对 Cr^{13+} 实验点更少.

下面以 Cr^{13+} 为例, 来讨论不同组态对 REDA 的贡献, 辐射退激和损失道对 REDA 的影响, 以及 REDA 截面对速率系数的影响. 计算表明, REDA 截面的贡献主要来自于 $2s^2 2p^5 3s 4lnl'$ ($n = 4-30$) 和 $2s^2 2p^5 3s 3lnl'$ ($n = 6-30$). 具体分析, 低于 620 eV 的共振主要来自中间态 $2s^2 2p^5 3s 3lnl'$ ($n = 6, 7$). 在 620 到 670 eV 间强烈的峰值是由于 $2s^2 2p^5 3s 4l4l'$ 和 $2s^2 2p^5 3s 3lnl'$ ($n \geq 8$) 的贡献. 对于入射电子能量大

于 670 eV 的共振结构, $2s^2 2p^5 3s 4lnl'$ ($n \geq 5$), $2s 2p^6 3s 3lnl'$, $2s 2p^6 3s 4lnl'$ 和 $2s^2 2p^5 3s 5l5l'$ 起了主要作用.

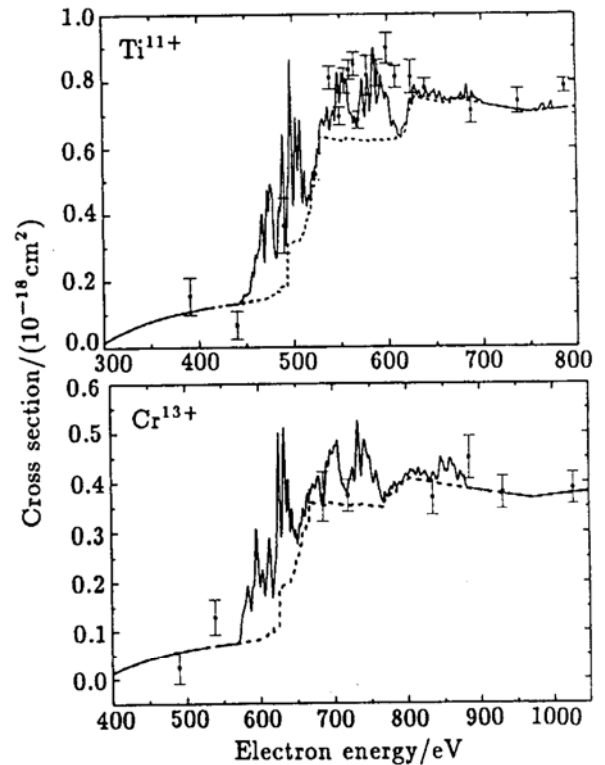


图 1 Ti^{11+} 和 Cr^{13+} 离子的总电离截面
--代表直接电离和激发自电离截面之和. —代表加入 REDA 截后的总截面. 6 为来自文献[6]的实验值.

在激发自电离和共振激发双自电离的计算中, 考虑辐射退激的影响是非常重要的. 图 2 显示的是来自于 $2l^{-1} 3s 4lnl'$ ($n = 4-7$) 的 REDA 截面. 实线和虚线分别代表有辐射退激和无辐射退激的 REDA 截面. 由图可见, 考虑辐射退激使 REDA 的截面减少大约为不考虑时的 1/2.

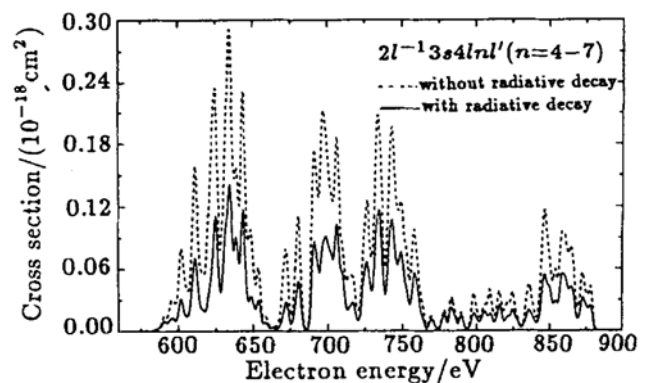


图 2 来自 $2l^{-1} 3s 4lnl'$ ($n = 4-7$) 的 REDA 截面
—和 --分别代表有辐射退激和无辐射退激.

除了辐射退激, 在 REDA 截面的计算中, 损失

道的影响也是很大的. 当入射电子被俘获后, 双电子俘获态可以自电离到一个单激发态, 这一单激发态接着不通过自电离, 而是完全通过辐射退激到基态, 这就是所谓的损失道. 计算表明, 对中间态 $2l^{-1}3s3lnl'$ ($n=6-10$) 来说, 损失道将会使 REDA 截面减少了 1 到 2 倍 (见图 3). 对中间态 $2l^{-1}3s4lnl'$ ($n=4, 5$) 来说, 损失道的影响比较小. 我们这些结果和 Zhang 等^[16]的结论也是一致的.

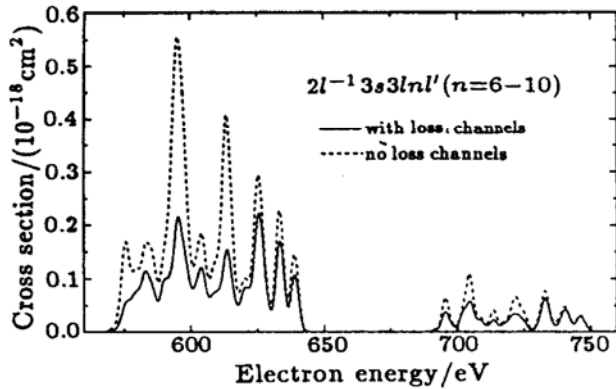


图 3 来自于 $2l^{-1}3s3lnl'$ ($n=6-10$) 的 REDA 截面
—和 --分别为考虑和不考虑损失道.

参 考 文 献:

- [1] Stephens J A, Botero J. International Bulletin on Atomic and Molecular Data for Fusion [M]. Vienna: IAEA, 1995-2000.
- [2] Teng Z X, Chen C Y, Wang Y S, *et al.* Rate Coefficients of Electron Impact Ionization for Highly Ionized Ions [J]. Acta Phys Sin, 1999, **48**(10): 1 858.
- [3] Thomason J W G, Peart B. The Electron impact Ionization of Al^{2+} Ions [J]. J Phys, 1998, **B31**(4): L201.
- [4] Rachafi S, Belic D S, Duponchelle M, *et al.* Absolute Cross Section Measurements for Electron Impact Ionization of Ar^{7+} [J]. J Phys, 1991, **B24**(5): 1 037.
- [5] Zhang Y, Reddy C B, Smith R S, *et al.* Total Cross Sections of Electron impact Ionization of Ar^{7+} [J]. Phys Rev, 1992, **A45**(5): 2 929.
- [6] Gregory D C, Wang L J, Swenson D R, *et al.* Electron impact ionization Cross-section Measurements for Ti^{11+} and Cr^{13+} [J]. Phys Rev, 1990, **A41**(11): 6 512.
- [7] Gregory D C, Wang L J, Meyer F W, *et al.* Electron impact of Iron Ions: Fe^{11+} , Fe^{13+} , and Fe^{15+} [J]. Phys Rev, 1987, **A35**(8): 3 256.
- [8] Linkemann J, Muller A, Kenntner J, *et al.* Electron impact Ionization of Fe^{15+} Ions: An Ion Storage Ring Cross Section Measurement [J]. Phys Rev Lett, 1995, **74**(21): 4 173.

利用公式(6)可得到 Cr^{13+} 的速率系数(见图 4). 我们看到电子温度在 50—600 eV 范围内, REDA 过程使总的速率系数增加到原来的 1 到 2 倍. 电子温度小于约 40 eV 时, 就间接电离过程而言, REDA 对速率系数的贡献远远比自电离要高. 高温时, REDA 所贡献的速率系数随 $(kT)^{-3/2}$ 规律递减, 在约 1 300 eV 以上, REDA 所贡献的速率系数就可忽略不计.

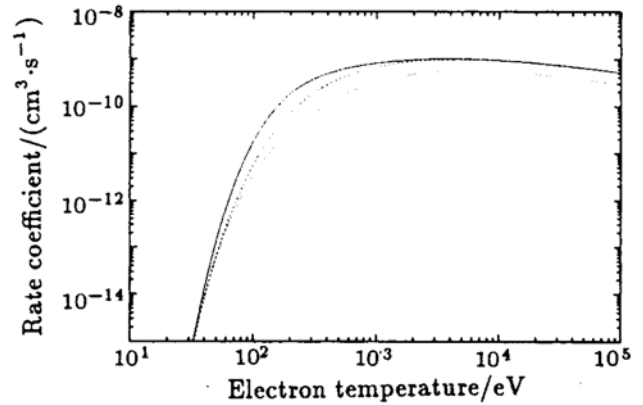


图 4 Cr^{13+} 的速率系数

...只考虑直接电离, --考虑了直接电离和激发自电离, 一考虑了直接电离、激发自电离和共振激发双自电离.

- [9] Teng H G. Electron impact Ionization of Al^{2+} Ions: A Unified R-matrix Calculation [J]. J Phys, 2000, **B33**(15): L553.
- [10] Reed K J, Chen M H. Distorted-wave Cross Sections for Electron impact Ionization of Ar^{7+} [J]. Phys Rev, 1996, **A54**(4): 2 967.
- [11] Chen M H, Reed K J, Moores D L. Contributions of Resonant Excitation Double Autoionization to the Electron impact Ionization [J]. Phys Rev Lett, 1990, **64**(12): 1 350.
- [12] Chen M H, Reed K J, McWilliams D M. Resonant Effects on Electron impact Ionization of Sodiumlike Selenium [J]. Phys Rev, 1995, **A52**(4): 2 881.
- [13] Tayal S S, Henry R J W. Role of Indirect ionization Processes in the Electron impact Ionization of Fe^{15+} [J]. Phys Rev, 1989, **A39**(8): 3 890.
- [14] Tayal S S. Electron impact Ionization of Ar^{7+} [J]. Phys Rev, 1994, **A49**(4): 2 561.
- [15] Chen C Y, Qi J B, Wang Y S, *et al.* Electron-ion Collisional Ionization Cross Sections and Rates for the Na Isoelectronic Sequence [J]. At Data Nucl Data Tables, 2001, **79**(1): 65.
- [16] Zhang H L, Nahar S N, Pradhan A K. Close coupling R-matrix Calculations for Electron ion Recombination Cross Sections [J]. J Phys, 1999, **B32**(6): 1 459.

Resonant Excitation Double-autoionization in Electron-ion Collision^{*}

CHEN Chong-yang, QI Jing-bo, WANG Yarr-sen

(*Institute of Modern Physics, Fudan University, Shanghai 200433, China*)

Abstract: Using semirelativistic distorted-wave Born approximation method, we have calculated direct ionization (DI), excitation autoionization (EA) and resonant excitation double-autoionization (REDA) cross sections of $N\alpha$ -like ions Ti^{11+} and Cr^{13+} . There is a good agreement between theoretical results and experimental data in magnitude over the entire energy region. REDA processes contribute about 20%—30% to the total ionization cross section and cannot be neglected in calculating the ionization rate coefficients.

Key words: electron-ion collision; resonant excitation double-autoionization; distorted-wave Born approximation

(上接第 50 页 continued from page 50)

Bethe Surface of Krypton^{**}

CHENG Hua-dong¹, LIU Xiao-jing¹, YUAN Zhen-sheng¹, ZHU Lir-fan¹,
ZHONG Zhi-ping², LI Wen-bin¹, XU Ke-zun¹

(*1 Key Laboratory of Bond Selective Chemistry, Department of Modern Physics,
University of Science and Technology of China, Hfei 230027, China;*

2 Department of Physics, Graduate School of Chinese Academy of Science, Beijing 100039, China)

Abstract: By means of the electron energy loss spectroscopy (EELS), the generalized oscillator strength density (GOSD) of krypton has been experimentally determined over a range $0.056 \leq K \leq 3.56$ ato. unit and $8 \leq E \leq 88$ eV, where K and E are momentum transfer and energy transfer respectively. The incident electron energy is 2.5 keV. As the function of momentum transfer and energy transfer, the characteristic of the Bethe surface is analysed.

Key words: Bethe surface; generalized oscillator strength; optical oscillator strength

* **Foundation item:** National Natural Science Foundation of China (10104005); National High-tech ICF Committee in China; Chinese Research Association of Atomic and Molecular Data

** **Foundation item:** National Natural Science Foundation of China (10134010, 10004010); Youth Foundation of University of Science and Technology of China.