

双电子复合过程在激光-Au靶 耦合物理中的作用*

古培俊 王建国 常铁强

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京8009信箱12分箱, 100088)

摘 要 描述了考虑双电子复合过程的平均原子模型, 通过与流体力学耦合计算, 对双电子复合过程在激光-Au靶耦合物理中的作用进行了总体计算, 结果表明, 双电子复合对等离子体状态及X光转换等有明显影响, 特别表现在晕区电子温度、电离度的降低, 激光-X光的转换效率的提高以及X光的发光区域变宽等。

关键词 双电子复合 平均原子模型 惯性约束聚变

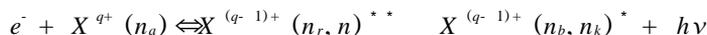
中图分类号 O433.54 TL632.1

在间接驱动惯性约束聚变研究中, 激光与高Z靶的耦合物理是重要研究内容之一。而其中所涉及的高Z物质的非平衡原子物理将对所产生的辐射场及等离子体状态等有重要影响。在许多文献^[1~6]中都曾明确指出, 双电子复合在高温、低密度等离子体中是重要的原子过程。但由于缺少参数以及认为双电子复合过程只在中、低Z元素中才重要, 在以往的激光靶耦合总体程序中并没有考虑该过程。随着惯性约束聚变研究的不断深入, 开展精密物理研究成为ICF研究的迫切要求和重要技术路线。

利用计算平均原子模型计算的Auger衰变速率系数数据库, 在激光靶耦合总体程序中考虑了双电子复合过程, 计算结果表明, 双电子复合过程在高温低密区是重要的物理过程, 特别是对较高能级, 双电子复合是主要的复合机制; 考虑双电子复合过程以后, 计算出的晕区电子温度和电离度将降低, X光的转换效率提高, X光发射的空间宽度加宽。

1 平均原子模型中考虑双电子复合的方式

所谓双电子复合过程是由下述两个原子过程组成的:



第一个过程是: 一个具有一定能量的自由电子与一个带电离子 X^{q+} 碰撞, 将带电离子中处于 n_a 能级的束缚电子激发到较高的未满能级 n_r , 同时该自由电子由于失去部分能量而被共振俘获到另一未满能级 n 从而形成一个共振双激发态, 这个过程叫双电子共振俘获过程, 其逆过程为Auger衰变过程; 第二个过程是共振双激发态通过自发辐射而衰变成为不能发生Auger衰变的稳定离子, 并放出能量为 $h\nu$ 光子。

本文以两种方式在平均原子模型中考虑双电子复合过程, 一种是将上述两个过程看作完全独立的两个过程处理, 在本文称为双电子共振俘获-Auger衰变方式。一种是将上述两个过程看作一个过程的两步, 也就是通常所说的双电子复合过程, 为了避免混淆, 将这种考虑方式

* 国家863惯性约束聚变领域以及国家自然科学基金资助课题
1998年2月4日收到原稿, 1998年12月17日收到修改稿。
古培俊, 女, 1963年9月出生, 副研究员

称为共振辐射复合方式。

1.1 双电子共振俘获-Auger衰变方式^[7]

将双电子共振俘获和共振双激发态的自发辐射衰变看作两个完全独立的过程处理, 就需要在通常的平均原子模型 P_N 方程中加入双电子共振俘获及其逆过程 Auger 衰变的贡献。以 $\alpha_i(m; n, k)$ 表示末态未求和的双电子共振俘获速率系数, 即将处于 m 能级的电子共振激发到 n 能级, 同时将一个自由电子俘获在 k 能级的速率; $A_a(n, k; m)$ 表示末态未求和的 Auger 衰变的速率系数, 即 k 能级电子自电离的同时 n 能级的电子无辐射地退激发到 m 能级的速率。 $\alpha_i(m; n, k)$ 和 $A_a(n, k; m)$ 中处于“;”前的状态为初态, “;”后的状态为末态。这样双电子共振俘获和 Auger 衰变对 P_N 方程的贡献为:

$$\begin{aligned}
 c_n \frac{dp_n}{dt} = & \sum_{m < k} \alpha_i(m; k, n) c_m p_m c_k (1 - p_k) c_n (1 - p_n) N_e \\
 & + \sum_{m < n} \alpha_i(m; n, k) c_m p_m c_k (1 - p_k) c_n (1 - p_n) N_e \\
 & - \sum_{m > n} \alpha_i(n; m, k) c_m (1 - p_m) c_k (1 - p_k) c_n p_n N_e \\
 & - \sum_{m < k} A_a(k, n; m) c_k p_k c_n p_m c_m (1 - p_m) \\
 & - \sum_{m < n} A_a(n, k; m) c_n p_n c_k p_m c_m (1 - p_m) \\
 & + \sum_{n < m} A_a(m; k, n) c_m p_m c_k p_k c_n (1 - p_n)
 \end{aligned} \tag{1}$$

其中, $p_j, c_j (j = n, m, k)$ 分别为 j 能级的电子占据概率和统计权重, $c_j = 2j^2, N_e$ 为电子数密度, Auger 衰变的速率系数由数据库提供, 其逆过程共振俘获的速率系数由细致平衡得到, 即:

$$\alpha_i(n_a; n_r, n) = \left(\frac{2\pi\hbar}{m_e k T} \right)^{3/2} e^{-\frac{\epsilon}{kT}} \frac{A_a(n_r, n; n_a)}{2C_{n_a}}$$

m_e 为电子质量, k 为玻尔兹曼常数, T 为场温度, $\hbar = h/2\pi, \epsilon$ 为离子的势能, E 为电离能。

$$\epsilon = \epsilon^{(q-1)}(n_r, n) - \epsilon^a(n_a) \quad E(n_r) + E(n) - E(n_a) \tag{3}$$

1.2 共振辐射复合方式

将双电子共振俘获以及共振双激发态的自发辐射衰变过程考虑为一个过程(共振辐射复合过程)的两步, 可以得到共振辐射复合的速率系数为:

$$\alpha_{dr}(n_r, n) = \frac{R_d(n_r, n) \quad A_r(n_r, n)}{A_r(n_r, n) + A_a(n_r, n)}$$

其中 $R_d(n_r, n)$ 为双电子共振俘获速率, $A_a(n_r, n)$ 为 Auger 衰变速率, $A_r(n_r, n)$ 为自发辐射衰变速率, 上述共振辐射复合速率系数的得到需要作如下假设: 有关共振双激发态的过程是快过程, 将共振双激发态作定态处理; 忽略电子碰撞和光吸收等过程对双激发态布居的影响。

由共振双激发态 $X^{(q-1)}(n_r, n)^{**}$ 到单激发态 $X^{(q-1)+}(n_b, n_k)^*$ 的退激发过程很多, 但到 n_a (双电子共振俘获的初态) 的退激发是最主要的, 因此仅考虑由 $X^{(q-1)}(n_r, n)^{**}$ 到 n_a 的退激发, 即由 $n_r \rightarrow n_a$ 和 $n \rightarrow n_a$ 的退激发过程。由 $X^{(q-1)}(n_r, n)^{**}$ 的 Auger 衰变过程也只考虑衰变到 n_a 能级。在上述假设条件下, 共振辐射复合的速率系数可以表示为:

$$\alpha_{dr}(n_a; n_r, n; n_r) = \alpha_i(n_a; n_r, n) \frac{A_r^q(n, n_a)}{A_a(n_r, n; n_a) + A_r^{q-1}(n, n_a) + A_r^{q-1}(n_r, n_a)} \tag{4}$$

$$\alpha_r^d(n_a; n_r, n; n_r) = \alpha_i(n_a; n_r, n) \frac{A_r^q(n_r, n_a)}{A_a(n_r, n; n_a) + A_r^{q-1}(n, n_a) + A_r^{q-1}(n_r, n_a)} \quad (5)$$

公式(4)表示将一个自由电子俘获在 n 能级同时将 n_a 能级上的电子激发到 n_r 能级形成双激发态之后, n 能级(被俘获电子所处能级)的电子通过辐射衰变的方式退回 n_a 能级, 从而在 n_r 能级上复合一个电子。公式(5)则表示被激发的电子退回 n_a 能级, 从而在 n 能级上复合一个电子。这样, 在平均原子模型中, 共振辐射复合过程对 P_N 方程的贡献为:

$$\begin{aligned} \frac{dp_n}{dt} = & \sum_{\substack{n_a=n-1 \\ n_a=1}}^{n_a=n-1} \sum_{\substack{n_1=n_0 \\ n_1=n}}^{n_1=n_0} \alpha_r^d(n_a; n, n_1; n) (1-p_n) c_m (1-p_{n_1}) c_{n_1} (1-p_{n_1}) c_{n_a} p_{n_a} N_e \\ & + \sum_{\substack{n_a=n-1 \\ n_a=1}}^{n_a=n-1} \sum_{\substack{n_1=n-1 \\ n_1=n_a+1}}^{n_1=n-1} \alpha_r^d(n_a; n_1, n; n) (1-p_n) c_m (1-p_{n_1}) c_{n_1} (1-p_{n_1}) c_{n_a} p_{n_a} N_e \end{aligned} \quad (6)$$

n_0 为复合过程中的最高能级, 在 P_N 方程中考虑共振辐射复合过程以后, 由于该过程伴随有光的发射, 因此还必须考虑由此带来的对电子、光子能量交换的影响。上述共振辐射复合过程所发射的辐射能量分别为:

$$\epsilon^{q-1}(n, n_a) = E^{q-1}(n) - E^{q-1}(n_a), \quad \epsilon^{q-1}(n_r, n_a) = E^{q-1}(n_r) - E^{q-1}(n_a).$$

2 有关速率系数的比较

下面对各种原子过程速率系数的比较均在激光强度为 $1 \times 10^{15} \text{W/cm}^2$, 脉宽为 0.8 ns, 波长为 $0.35 \mu\text{m}$ 的激光辐照平面 Au 靶 0.9 ns 时所形成的等离子体状态下进行的, 激光由右向左入射。复合速率系数见图1。图中横坐标 R 为距靶背的距离, 临界面位置为 $133.77 \mu\text{m}$ 。临界面右方是高温低密度的电晕区, 左方是低温高密度区。

比较双电子复合、三体复合和光电复合的速率系数(双电子复合速率系数为等效速率系数), 对于较高能级 ($n > 5$), 除低温、高密度区也即辐射烧蚀区以外, 双电子复合的速率系数均大于三体复合和光电复合, 如图1(a); 对于低能级 ($n < 3$), 光电复合强于双电子复合如图1(b), 但在高温低密度区, 双电子复合仍然强于三体复合。由此可见, 对于高 Z 元素, 双电子复合是重要而不可忽略的。

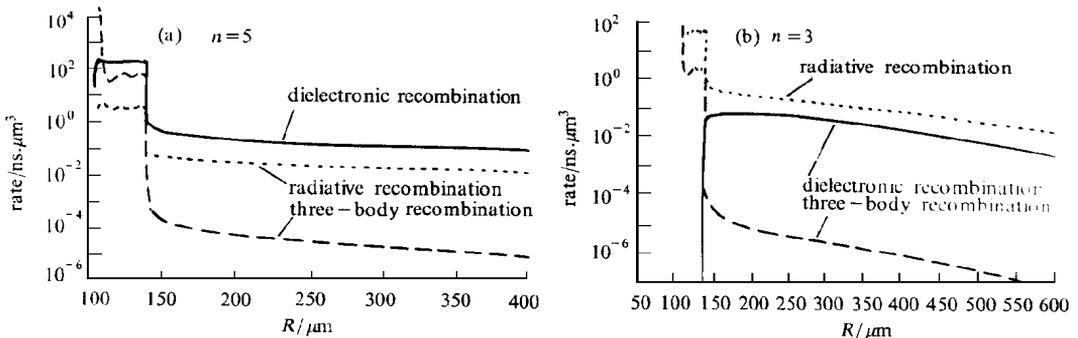


Fig1 The recombination rate coefficients for $n=3, 5$ level

图1 第3、5能级的复合速率系数

在上一节中已经指出, 在计算共振辐射复合系数时忽略了光电过程和碰撞过程对双激发态的影响而只考虑了自发辐射衰变和 Auger 衰变的影响。通过对辐射衰变、Auger 衰变、碰撞激发及去激发、光电离、碰撞电离速率系数的比较显示, 除在低温、高密度区(辐射烧蚀区)高能

级间的碰撞去激发速率大于自发辐射衰变速率以外, 其他情况下自发辐射衰变速率均远大于碰撞去激发、光电离和碰撞电离等过程的速率。因此共振辐射复合这种处理方式在整个电晕区(高温、低密度区)是适用的, 而在辐射烧蚀区(高温、低密度区)这种处理将带来一定的误差。

3 计算结果

以上述两种方式考虑双电子复合过程并与流体力学耦合计算, 计算模型为平面靶, 激光强度为 $1 \times 10^{15} \text{ W/cm}^2$, 激光波长为 $0.35 \mu\text{m}$, 激光脉宽为 0.8 ns 。在下面所有的图中, 以实线表示不考虑双电子复合过程的计算结果, 以‘+’表示以双电子共振俘获-Auger衰变方式考虑双电子复合过程的结果, 以虚线表示共振辐射复合方式考虑双电子复合过程的结果。计算结果显示, 两种方式计算的结果在定性趋势上是一致的, 有如下特点:

(1) 提高激光-X光的转换效率(计算结果如图2)。这是由于在双电子共振俘获-Auger衰变中, 增加了电子从低能级往高能级的激发机制, 而在共振辐射复合方式中, 由共振双激发态的自发辐射衰变所提供的辐射能耗在电子、光子的能量方程中进行了考虑。

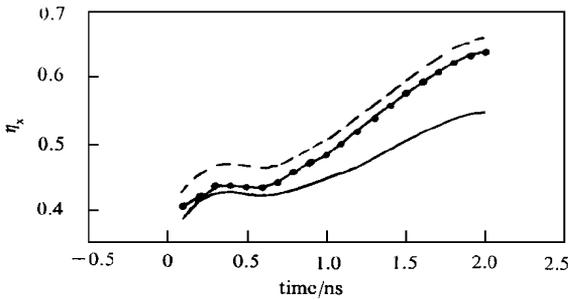


Fig2 X-ray conversion fraction vs time

图2 激光-X光转换效率随时间的变化

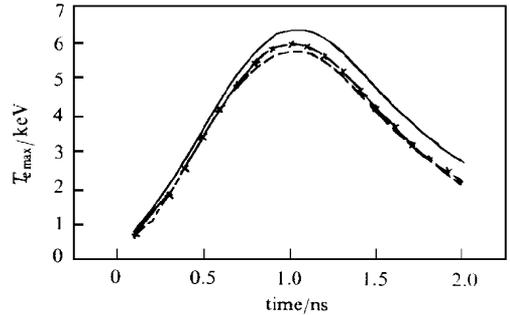


Fig 3 The Maximum of electron temperature vs time

图3 电子温度最大值随时间的变化

(2) 冕区电子温度降低(如图3)。电子温度降低是由于无论那种方式都增加了电子向光子能量的转换, 因此, 从能量守恒的角度看, 电子温度降低是必然结果。由电子温度最大值随时间变化的图3中可以看出, 时间越长, 双电子复合降温的效果越明显。这是由于随着时间增加, 电晕区的等离子体越趋于高温、低密度, 这也反映出双电子复合在高温、低密度状态下作用更明显。

(3) M、N、O带发射的空间最大值开始时与临界面比较接近, 随着时间的推移, M、N、O带发射的最大值将向高温低密度区移动, 而这种移动将由于考虑了共振辐射复合或双电子共振俘获-Auger衰变而变得更加明显(如图4、5), 图中 R_c 为临界面位置。这是因为, 没考虑双电子复合时, 电子温度比较高, 临界面附近的等离子体温度还能导致第3、4能级比较多的电离且由于临界面附近的等离子体密度高, 所以M、N、O带发射的最大值均在临界面附近, 但考虑了双电子复合过程以后, 临界面附近电子温度将不再易于将第3、4能级电离, 而需要电晕区的较高温度才能导致第3、4能级电离, 所以, M、N、O带发射的最大值位置将由于双电子复合的考虑而远离临界面。

4 总结

由上面的计算结果看, 无论是以共振辐射复合还是以双电子共振俘获-Auger衰变方式

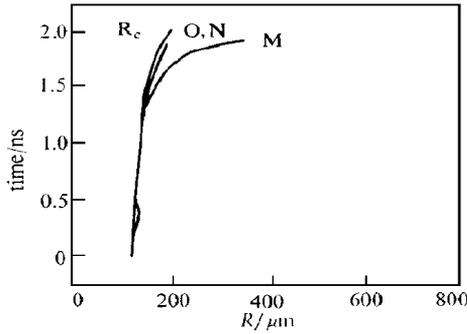


Fig4 Critical surface and the peak of M-band, N-band, O-band X-ray emission trajectories, without dielectronic recombination process included

图4 不考虑双电子复合过程时临界面以及各能带最大值发射点随时间的移动

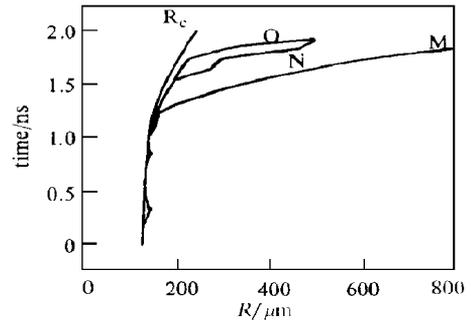


Fig 5 Critical surface and the peak of M-band, N-band, O-band X-ray emission trajectories with dielectronic recombination process included

图5 考虑双电子复合过程时临界面以及各能带最大值发射点随时间的移动

考虑双电子复合过程, 该过程对等离子体状态的影响都不可忽略, 都将导致计算出的晕区电子温度、电离度的降低和 X 光转换效率增加以及 X 光发射空间宽度的变化。

双电子共振俘获- Auger 衰变方式在平均原子模型中应用存在计算双激发态布居的近似。而共振辐射复合存在光性薄等假设, 因此, 哪种计算方式更符合实际, 还需要 Benchmark 实验的检验。从计算所用 CPU 时间看, 共振辐射复合方式所用时间更长。

参考文献

- 1 Massey H S and Bartsch D R *Rep Prog Phys*, 1942, **9**: 62
- 2 Burgess A. *Astrophys J*, 1964, **139**: 776
- 3 Burgess A and Seaton M J. *Mon Not Roy Astr Soc*, 1964, **127**: 355
- 4 Merts A L, Robert D C, Magee N H. The Calculated Power Output from a Thin Iron-Seeded Plasma LA-6220-M s, informal Report
- 5 Post D E and Jensen R V. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 1977, **20**: 397~ 439
- 6 Campbell P M. A non-LTE Atomic Physics Model for Laser Fusion and X-ray Laser Simulation. KMSF-U-1662, DE86 006487.
- 7 王建国等. 作为两个独立过程的双电子复合理论. *物理学报*, 1997, **46** (11)

DI ELECTRONIC RECOMBINATION IN LASER PRODUCED HIGH-Z PLASMA

Gu Peijun, Wang Jianguo, Chang Tieqiang

Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088

ABSTRACT The dielectronic recombination in average atom model has been studied by coupling the hydrodynamic equations with non-local thermal-equilibrium electron population equations, the effect of dielectronic recombination on the high power laser produced Au plasma has been investigated. It has been shown that in comparison with radiative and three-body recombination process the dielectronic recombination is the dominant one in a part of corona region of high temperature and low density Au plasma produced by high power laser.

KEY WORDS dielectronic recombination, average atom model, inertial confinement fusion