

锌的类氦离子 X 射线激光波长计算

顾春明 薛富增

(长春光学精密机械学院理学院, 长春130022)

摘要 本文采用球元胞、中心力场、相对论费米统计近似, 通过自洽场方法, 应用平均原子模型, 计算了热稠密物质锌的类氦离子能级 $2S \rightarrow 2P$ 跃迁波长。

关键词: X 射线激光波长; 平均原子模型; 费米统计; 压致电离

1 引言

波长很短的 X 射线激光具有十分诱人的前景。近年来进行的类氢离子 X 射线激光实验^[1]、类氦离子 X 射线激光实验^[2]、X 射线激光双程放大实验^[3]、锆的类氦离子 X 射线激光实验^[4]等以及 X 射线波段光学元件研制工作的进展, 使 X 射线激光研究成为激光科学中引人注目瞩目的领域。

X 射线产生于原子内壳层电子跃迁。由于原子内壳层电子的激发态寿命甚短, 要求有相当高的泵浦强度才能产生粒子数反转和受激辐射, 这使得在实验上产生 X 射线激光非常困难。在大量理论和实验研究的基础上, 科学工作者提出了选择原子等电子序列离子谱的方法。它以已知产生过激光的原子或离子工作能级为基础, 寻找它的等电子序列离子及相应的工作能级, 并力图使等电子序列离子在相应的工作能级上形成粒子数反转而产生 X 射线波段激光。在这类研究中, 理论计算是必不可少的。它能使人们找出 X 射线工作物质、确定相应的能级并估算可能的跃迁波长, 以供实验工作参考。

目前用以产生 X 射线激光的工作物质是处于高温高压下的激光等离子体。为寻找原子或离子在这种状态下的物理条件及其能级, 需要一个既便于求解, 又与实验结果符合得好的物理模型。

对原子求解, 较早且较成功的模型是 TF 模型 (Thomas-Fermi 模型) 和 TFD 模型^[5] (Thomas-Fermi-Dirac 模型)。这两个模型在超高温、超高压条件下, 与实验结果符合得很好。但 TF 和 TFD 模型没有考虑电子壳层效应。实验已经证实, 在温度比超高温低、压强比超高压低的高温高压条件下, 原子或离子的壳层效应不能忽略。而实际上, 现阶段我们能够实现的激发 X 射线物理条件, 也属于不能忽略壳层效应的范围。Zink 提出了具有壳层结构的原子

计算方法^[6]。他给出了考虑电子壳层间相互作用、含可调参数的解析拟合势,并讨论了确定参数的 TFS (Thomas-Fermi-Like) 和 TFS (Thomas-Fermi-Shell) 方法。Rozsngai 进一步发展了 Zink 的模型,提出了“平均原子”模型^[7]即 AA 模型 (Average Atom Model)。Rozsnyai 把原子中的电子不仅分为束缚电子和自由电子,束缚电子具有壳层结构,而且假设电子按 Fermi 统计占据单电子能级。将这些原子当作统计系统,就得出一个具有分数布居数的虚构“平均原子”。然后对这个平均原子的求解,从统计意义上代替对可能存在的孤立原子及各价离子的各种可能组态的求解。这大大地简化了计算。此模型虽然比详细考虑原子及各阶离子的各种组态的模型粗糙,但要比类氢模型精细。

本文介绍我们的研究工作,第二部分对平均原子模型做简单讨论,第三部分给出计算结果。

2 平均原子模型

假设在高温高压下,我们研究体系中的原子具有足够高的对称性。取某一原子核为球心,由原子量 A 和密度 D 决定一球元胞,其半径为 R_0 ,由下式决定^[8]

$$R_0 = \left(\frac{3A}{4\pi N_0 D}\right)^{1/3} \quad (1)$$

这里, $N_0 = 6.023 \times 10^{23}/\text{mol}$ 是 Avogadro 常数。这个球元胞即该原子所占据的空间。又设球元胞呈电中性,并且电荷分布具有球对称性,宏观高温等离子体由这些无相互作用的球元胞组成,能量、压强、熵等宏观物理量可以从单个球元胞出发计算得出。这是平均原子模型的基本假设,也是 TF 模型和 TFD 模型的基本假设。它将一个多中心的复杂问题,简化为一个球对称的单中心问题。这样在求解原子时,只考虑求解径向 Dirac-Slater 方程即可。进一步将球元胞内的电子分为束缚电子和自由电子,并假设电子按 Fermi 统计分布。这样便产生一个分数布居数的虚构“平均原子”,即 Rozsngai 的平均原子模型 (AA 模型)。

简并度为 g_{nlj} 的能级 ϵ_{nlj} 上电子布居数为

$$N_{nlj} = g_{nlj} / [e^{(\epsilon_{nlj} - \mu)/kT} + 1] \quad (2)$$

下脚标 n 为轨道主量子数, l 为角动量量子数 $j = l \pm \frac{1}{2}$ 是考虑相对论修正增加的量子数。束缚态电子密度为^[7]

$$\rho_b(r) = \frac{1}{4\pi r} \sum_{nlj} N_{nlj} [P_{nlj}^2(r) + Q_{nlj}^2(r)] \quad (3)$$

求和是对所有的束缚态。 $P_{nlj}(r)$ 和 $Q_{nlj}(r)$ 分别是相对论径向波函数的大分量和小分量。在 Hartle 原子单位下, Dirac-Slater 径向波函数方程为^[9]

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{d}{dr} + \frac{K'}{r}\right)P_{nlj}(r) &= \left(2C + \frac{\epsilon_{nlj} - V}{C}\right)Q_{nlj} \\ \left(\frac{d}{dr} - \frac{K'}{r}\right)Q_{nlj}(r) &= \frac{V - \epsilon_{nlj}}{C}P_{nlj} \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

当 $j = l - \frac{1}{2}$ 时, $K' = l$

$j = l + \frac{1}{2}$ 时, $K' = -(l + 1)$

波函数满足的边界条件是

$$P_{nl}(0) = Q_{nl}(0) = 0 \quad (5)$$

$$\frac{d}{dr} \left(\frac{P_{nl}(r)}{r} \right)_{r=R_0} = \frac{d}{dr} \left(\frac{Q_{nl}(r)}{r} \right)_{r=R_0} = 0 \quad (6)$$

我们采用设简并度 g_{nl} 是密度 D (或 R_0) 的连续函数来模拟压致电离效应。如果原子间势函数选用抛物线型, 经 WKB 计算可得^[10]

$$g_{nl} = \begin{cases} (2j+1) \{1 - \exp[-2\pi \sqrt{R_0} (1 - \frac{r_{nl}^0}{R_0})^2]\} & \leq R_0 \\ 0 & r_{nl}^0 > R_0 \end{cases} \quad (7)$$

这里, r_{nl}^0 是中性原子的平均轨道半径。从 (7) 式可以看出, 只有和 R_0 接近的轨道压致电离才明显。考虑到 Fermi 统计的相对论修正, 自由电子密度为^[7]

$$\rho_f(r) = \frac{4\pi}{h^3 C^3} (2qKT)^{\frac{3}{2}} [I_{\frac{1}{2}}^{x_0}(z) + \frac{5KT}{4q} I_{\frac{3}{2}}^{x_0}(z) + \frac{7}{32} (\frac{KT}{q})^2 I_{\frac{5}{2}}^{x_0}(z) + \dots] \quad (8)$$

其中:

$$I_{\frac{1}{2}}^{x_0}(z) = \int_{x_0}^{\infty} \frac{t^{\frac{1}{2}}}{e^{t-x} + 1} dt$$

$$x_0 = x_0(r) = -\frac{V(r)}{KT}$$

$$z = z(r) = \frac{\mu - V(r) + mc^2 - q}{KT}$$

$$q = q(r) = [m^2 C^4 + (r \frac{dv}{dr})^2]^{\frac{1}{2}}$$

C 为真空中光速, m 为电子的静止质量, μ 为化学势, $V(r)$ 为势函数。总电子密度为

$$\rho(r) = \rho_b(r) + \rho_f(r) \quad (9)$$

且满足归一化条件

$$\int_0^{R_0} 4\pi \rho(r) r^2 dr = N \quad (10)$$

N 为球元胞内总电子数, 它等于原子核电荷数。在原子单位下, 势 $V(r)$ 可表示为

$$V(r) = -\frac{N}{r} + \frac{1}{r} \int_0^r \sigma(t) dt + \int_0^{R_0} \frac{1}{t} \sigma(t) dt + V_{ex}^R(r) + V_c(r) \quad (11)$$

其中 $\sigma(t) = 4\pi t^2 \rho(t)$ 。上式第一项为核势, 第二次与第三项为电子的库伦势, 第四次为考虑相对论修正的交换势^[12], 第五次为相关势^[7]。

3 计算结果

我们是对 Rozsnyai 的 AA 模型做了一些改进后完成计算的。主要改进为:

(1) 求解 Dirac-Slater 方程时, 用 Wigner-Seitz 条件做边界条件, 而用 Rozsnyai 使用的波函数 P_{nl} 和 Q_{nl} 在 $r = R$ 处等于零的条件。实际上物质在大密度时, 存在压致电离效应, 使原子边界处出现电子的几率不为零, 即波函数在原子边界处不为零。基于这种考虑, 选用 Wigner-

Seitz 条件做为边界条件更合理。

(2) 考虑到原子所处的高温条件,我们在(11)式中选用了相对论交换而不同于 Rozsnyou 原文选用的非相对论交换势。

(3) 关于电子的能带结构处理不同。我们通过能级简并度随密度 D 或 R 的连续变化来模拟压致电离效应,从而在新的角度上考虑了电子的能带结构。这些改进在计算铁的高温高压条件的状态方程时,得到了很好的结果。^[11]

取锌的参考密度为 $D_0 = 7.14 \times 10^3 \text{kg/m}^3$ 。计算表明在密度范围 $D = (30 \sim 50)D_0$, 温度范围 $2.1 \times 10^4 \sim 2.1 \times 10^6 \text{K}$ 之间, 锌均能处于类氦离子态, 其 $2S \rightarrow 2P$ 跃迁波长在 (21~25) nm 之间、典型计算结果见下表:

表1

D	KT=1. 160450×10 ⁵ K		KT=1. 160450×10 ⁶ K	
	$2S_{\frac{1}{2}} \rightarrow 2P_{\frac{1}{2}}$ (nm)	$2S_{\frac{1}{2}} \rightarrow 2P_{\frac{3}{2}}$ (nm)	$2S_{\frac{1}{2}} \rightarrow 2P_{\frac{1}{2}}$ (nm)	$2S_{\frac{1}{2}} \rightarrow 2P_{\frac{3}{2}}$ (nm)
30 D_0	25.07	21.22	25.11	21.25
40 D_0	24.69	20.99	24.73	21.02
50 D_0	24.35	20.80	24.38	20.83

在上述温度范围和密度范围内, 热稠密物质锌的压强变化范围为 7961.2~31121 (0.1 TPa)。我们实际上还计算了热稠密物质锌处于类氦离子状态的物态方程。结果表明: (1) 在较宽的范围内 (电子最高温度是最低温度的100倍, 最大压强是最低压强的3.9倍, 最大密度是最低密度的1.8倍), 锌均处于类氦离子状态。这对激发出 X 射线十分有利。(2) 当温度或密度改变时, $2S \rightarrow 2P$ 射线激光波长也随之变化。我们的计算结果与文献^[2]中关于硒的类氦离子 X 射线激光实验的结果相类似。而获得纯净锌比获得纯净硒容易, 这可能是锌做为 X 射线激光光源的一个诱人之处。

参 考 文 献

- [1] S. Suckewer, et al., Phys. Rev. Lett, 1985, 55 (17): 1755
- [2] D. Matthews, et al., J. Opt. Soc. Am. B, 1987, 4 (4): 575
- [3] C. J. Keane, et al., J. Phys., B: At. Mol. Opt. Phys., 1989, 22: 3343
- [4] 淳于书泰等, 中国科学, A 辑, 1992, 8: 875
- [5] R. D. Cowan, et al., Phys. Rev., 1957, 105 (1): 144
- [6] J. W. Zink, Phys. Rev., 1968, 176 (1): 299
- [7] B. F. Rozsnyai Phys. Rev., 1972, A5 (3): 137
- [8] J.C. Slater, et al., Phys. Rev., 1935, 47: 559
- [9] 赵伊君, 国防科技大学学报, 1980, 4: 19
- [10] R. C. Macini, et al., JQSRT, 1985, 34: 115
- [11] 薛富增, 李招宁, 潘守浦, 高压物理学报, 1989, 3 (1): 58
- [12] D. E. Ellis, J. Phys., 1977, B10 (1): 1

Calculation of X-Ray Laser wavelength for Ne-Like Zn Ion

Gu Chunming, Xue Fuzeng

*(The Science department branch, Changchun Institute of Optics and Fine Mechanics,
Changchun 130022)*

Abstract

In the approach of spherical lattice cell, central-field, and relativistic Fermi statistic approximations, an average atom model is presented to calculate the wavelength of $2S \rightarrow 2P$ X-ray laser transition for Ne-Like Zn ion under the condition of high density and high temperature using the self-consistent field method.

Key words: X-ray laser wavelength, Average atom model, Fermi statistics, Pressure ionization