

Ar⁺¹⁷ 和 Ar⁺¹⁶ 谱线的电子碰撞展宽*

段斌[†] 吴泽清 颜君 李月明 王建国

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

(2010年11月28日收到; 2011年3月20日收到修改稿)

利用修改后伦敦理工大学的 UCL 扭曲波程序, 本文计算了自由电子与原子或离子的碰撞反应矩阵, 以此得到它的散射矩阵和碰撞强度. 利用碰撞强度, 研究电子碰撞对辐射谱线影响. 具体地, 以 Ar⁺¹⁷ 和 Ar⁺¹⁶ 的 α 线和 β 线为例, 计算了不同电子温度和密度下谱线的展宽和位移.

关键词: 反应矩阵, 碰撞强度, 碰撞展宽

PACS: 32.70.Jz, 34.50.Fa

1 引言

光谱诊断在等离子体物理研究和星际大气模拟中具有很重要意义. 在稠密等离子体环境中, 原子或离子辐射阻尼通过多种形式出现, 压力展宽是最重要的表现形式之一. 压力展宽指因受到外部微扰粒子 (如其他同类的原子或离子、杂质的离子和分子以及自由电子) 的作用时, 改变和改造正在发生辐射的原子或离子的光谱结构, 包括谱线的线形、中心位置和线宽. 以微扰粒子的质量和运动快慢为依据, 压力展宽可以简单地分为两种^[1]. 一种是因受到大质量、运动慢的粒子 (主要带电离子) 的微扰作用, 使正在辐射原子或离子的谱线产生的展宽称为斯塔克展宽. 另一种是与高速电子碰撞而使原子或离子的谱线产生展宽称为碰撞展宽.

在实验室等离子体或天体物理等离子体的光谱诊断理论研究中, 理论光谱模拟计算的主要任务是辐射强度和线形. 前者, 通过求解速率方程得到离子微观态布居, 结合自发辐射速率可以计算出谱线的辐射强度. 相比较而言, 谱线的线形计算要复杂得多. 首先需要计算确定辐射谱线是那一种线形, 如高斯线形、洛伦兹线形和 Voigt 线形. 其次, 需要计算谱线对应的展宽和位移. 线形计算是光谱模拟计算中的十分重要环节. 例如, 通过线形可以获得等离子体内部参数, 从而了解等离子体内部微观过程^[2].

实际应用中, 包含少数束缚电子且相对简单原子结构的类氢离子 (处在比较高的电离状态) 或氢自发辐射谱线常常被用于等离子体的诊断. 例如, 在天文、天体物理中估算 O 和 B 类型的热星和某些白矮星中等离子体状态, 或者评估恒星中的辐射输运, 氢的谱线会很有应用价值^[3]. 在惯性约束聚变中, 为了研究内爆发生时靶丸内部物理状态和等离子体状态参量, 通常在靶丸内掺入少量的示踪物质氩或硫, 研究表明在这种极端高温和高密条件下的氩或硫的离子分布往往以类氢离子为主, 且该离子自发辐射产生的共振谱线及其伴线常常用于诊断研究^[4,5].

研究者采用各种方法来计算等离子体辐射线形. Griem 用半经典方法计算氢原子的谱线, 对于电子采用了包含截断处理的碰撞近似方法, 他用准静态离子近似产生的微观电场代替几乎静止的带电离子^[6]. Barnes 等用量子力学方法处理自由电子, 结合散射数据, 计算了电子碰撞 Ca⁺ 离子产生的共振线线形和位移^[7]. 1999 年赵增绣等用 R 矩阵方法研究了锂原子与电子碰撞时对辐射共振线的影响^[8]. 此外, 分子动力学的方法被 Calist 等用来计算 He⁺ 谱线的线形^[9].

电子碰撞展宽不仅是分析和研究精确光谱的基础, 而且在等离子体光谱分析、光谱诊断和不透明度计算中具有重要的现实意义^[10]. 本文利用扭曲波近似程序 UCL 计算散射矩阵, 进而计算具有

* 国家自然科学基金 (批准号: 10675052) 资助的课题.

[†] E-mail: duan.bin@iapcm.ac.cn

少数束缚电子的氦相关谱线的电子碰撞展宽和位移, 并且研究这两个谱线参数随等离子体的温度和密度变化规律.

2 理论方法

2.1 理论方法

在自由电子与靶离子发生碰撞过程中, 设靶离子由带电为 Z 的原子核和 N 个束缚电子组成, 且该离子的两个微观状态分别用带下标的 X 表示, 即发生辐射时所涉及到的状态分别记为 a (上能级) 和 b (下能级). 原子系统在这两个能级之间因偶极跃迁发生自发辐射跃迁 $b \rightarrow a$, 即

$$X_b \rightarrow X_a + \hbar\omega. \quad (1)$$

由于原子周围存在大量的微观粒子, 它们大致分为两类. 一类是大质量、运动慢的粒子, 如与正在发生辐射的同类离子、其他的原子和离子. 另一类, 质量轻和运动快的大量自由电子. 这些粒子的存在会影响着正在发生辐射的原子, 即中断自发辐射发生, 或改变原子自身的能级以便改变其谱线的位置. 根据 Hooper 理论, 前一类粒子影响被等效为在一定的温度和密度条件下有一定概率分布的静电电场来影响着正在发生辐射原子, 且改变着其辐射谱线^[11,12]. 对于这方面的研究, 我们课题组的以前也做过, 这里不再重述^[13]. 关于自由电子的影响, 1958 年, 在考虑到自由电子与辐射原子的两次碰撞时间间隔远大于每次碰撞时间的假设下, 研究者 Baranger 采用碰撞近似^[14], 计算出辐射谱线是 Lorentz 线形函数^[10], 即

$$\phi_\omega = (\gamma/\pi)/[(\omega + x - \omega_0)^2 + \gamma^2], \quad (2)$$

其中谱线中心位置 $\omega_0 = E_b - E_a$ (E_b, E_a 是上能级和下能级) 以及谱线的位移 x 和半高宽 2γ . 进一步研究发现谱线的位移和展宽分别与散射振幅的虚部和实部有关. 在他的工作基础上, Barnes^[7] 和 Seaton^[10] 等两个研究组的研究表明在假设自由电子分布函数为玻尔兹曼分布条件下, 谱线参数 x 和 γ 由公式

$$\gamma + ix = \alpha N_e \int_0^\infty T^{-3/2} \exp(-\varepsilon/T) \Omega(\varepsilon) d\varepsilon \quad (3)$$

给出. 其中常系数 $\alpha = 2.876 \times 10^{-23}$, 单位是 $\text{eV}\cdot\text{cm}^3$. 电子温度 T 和电子能量 $\varepsilon = k^2$ 以 Ry 为单位. N_e 是电子密度, 单位为每立方厘米. 而文

献 [14] 给出碰撞强度 $\Omega(\varepsilon)$ 为

$$\begin{aligned} \Omega(\varepsilon) = & (2S_A + 1)^{-1} \sum_S \sum_{LL'\Pi\Pi'} \sum_{ll'} (2S + 1) \\ & \times (2L + 1)(2L' + 1) \begin{Bmatrix} L_a & L_b & 1 \\ L' & L & l \end{Bmatrix} \\ & \times \begin{Bmatrix} L_a & L_b & 1 \\ L' & L & l' \end{Bmatrix} [\delta_{ll'} - S_a(ESL\Pi, l, l')] \\ & \times S_b^*(E'SL\Pi', l, l'), \end{aligned} \quad (4)$$

其中, L_a 和 L_b 是微观态 a 和 b 所对应体系 X_a 和 X_b 的轨道角动量量子数, S_A 是 X_a 和 X_b 的自旋量子数 (因为电偶极辐射跃迁不改变辐射原子的上、下能级的自旋角动量). $S_a(ESL\Pi, l, l')$ 是散射矩阵, $S_b^*(ESL\Pi, l, l')$ 散射矩阵的复共轭. $S_a(ESL\Pi, l, l')$ 对应于靶离子处在下能级 a 的电子散射过程

$$X_a + e(\varepsilon, l) \rightarrow X_a + e(\varepsilon, l'), \quad (5)$$

其中 ε 是自由电子能量, l 和 l' 是它在散射前后的分波角动量量子数 (下同). 在这个散射过程中不但体系的总能量 $E = E_a + \varepsilon$ 守恒, 而且体系的总自旋、总角动量和总宇称也守恒, 分别标记为 S, L 和 Π . 散射矩阵 $S_b(E'SL'\Pi', l, l')$ 对应于靶离子处在上能级 b 的电子散射过程

$$X_b + e(\varepsilon, l) \rightarrow X_b + e(\varepsilon, l'), \quad (6)$$

在这个过程中体系的能量 $E = E_b + \varepsilon = E_a + \varepsilon + \omega$ 守恒, 它的总自旋、总角动量和总宇称也守恒, 分别记为 S, L' 和 Π' .

2.2 散射矩阵

在自由电子与靶离子的碰撞过程中, 它们组成的复合体系的总自旋 S 、总角动量 L 和宇称 Π 都是守恒量. 文献将这样的 $N + 1$ 个电子, 且具有一定对称性 S, L 和 Π 的复合体系波函数写为^[15]

$$\Psi_k = \Theta \Phi_i^N X F_i + \sum_j c_{k,j} \phi_j^{N+1}, \quad (7)$$

其中, Φ_i^N 是靶离子的 N 个束缚电子波函数. 它满足两个电子之间的交换反对称性. F_i 是体系中参与碰撞的自由电子径向波函数, 它与靶离子波函数 ϕ_i^N 通过合适的角系数 X 耦合在一起, 构成波函数 Ψ_k 中的自由通道部分. Θ 是 $N + 1$ 个电子之间的反对称算符, 它使自由通道中所有电子之间满足交换反对称性. ϕ_i^{N+1} 是 $N + 1$ 束缚电子的波函数, 代表波函数 Ψ_k 中的束缚电子部分. 它是因

为在构造波函数时,当参与碰撞的自由电子分波角动量量子数与靶离子中的某个束缚电子的轨道角动量相同时,二者必须正交性产生的.文献中指出这种正交可以施密特正交化实现,而系数 $c_{k,j}$ 由科恩 (Kohn) 范函原理求出 [15].

基于一定碰撞对称性 $SLII$ 的波函数 Ψ_k , 反应矩阵定义为 [15]

$$K_{kk'} = -\langle \Psi_k | H - E | \Psi_{k'} \rangle, \quad (8)$$

从定义看出 K 是实对称矩阵. 它与散射矩阵 S 的关系为

$$S = \frac{1 + iK}{1 - iK}. \quad (9)$$

2.3 数值计算方法

本文利用伦敦理工大学发布的 UCL 扭曲波近似计算程序计算反应矩阵 K [16]. 这个程序包含 COLALG 和 DWMODS 两个主要模块. 前者主要计算碰撞系统的角向耦合系数 (包括自由和束缚部分), 后者主要实现计算自由电子的径向波函数, 包括相移、反应矩阵 K 等物理量. UCL 程序的功能是在 LS 耦合下计算自由电子与激发态原子或离

子的碰撞强度与反应矩阵元. 在涉及到原子结构的计算时,每一种轨道对应的径向波函数都是在扭曲波近似下中心势场的解,而且自由电子的分波径向波函数也不例外.

在原始的 UCL 程序基础上,我们对程序中输入卡所对应的部分进行修改,以便能够更好地计算所需的碰撞系统 $SLII$, 进而实现与其相关的碰撞强度. 此外,对计算通道波函数所对应的部分也进行了修改,其目的是使程序着重计算碰撞强度 (4) 所关注的通道波函数.

为了研究包含少数束缚电子,且处在比较高离化态的离子辐射谱线在等离子体环境下随电子温度和电子密度的变化规律,本文以类氢、类氦的 α 和 β 线为例,对它们的电子碰撞展宽和位移进行计算. 由于碰撞中靶离子的下、上能级的轨道角动量量子数 $L_a = 0, L_b = 1$, 从而碰撞强度 (4) 式中两个 $6J$ 符合 $\left\{ \begin{smallmatrix} L_a & L_b & 1 \\ L' & L & l \end{smallmatrix} \right\}$ 和 $\left\{ \begin{smallmatrix} L_a & L_b & 1 \\ L' & L & l' \end{smallmatrix} \right\}$ 的存在使得所涉及到的角动量各量子数之间不独立,也就是在自由电子分波数 l 以及 L 和 L' (上下能级所对应的散射体系角动量体系) 产生限制: $l = L, l - 1 \leq L' \leq l + 1$, 因此在实际计算只需要选取适当的 l 即可.

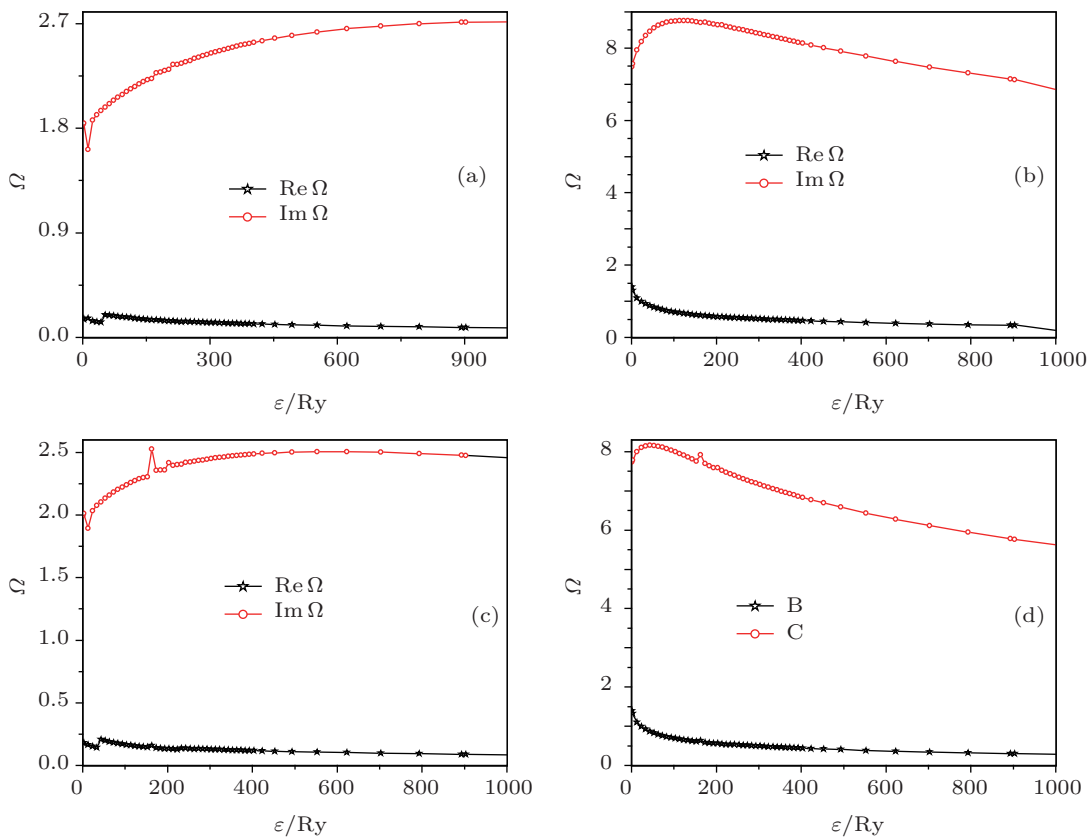


图 1 自由电子与类氢、类氦碰撞时,它们的 α 和 β 线对应的碰撞强度 (图中 Re 和 Im 分别代表实部和虚部) (a) 类氢 α 线; (b) 类氢 β 线; (c) 类氦 α 线; (d) 类氦 β 线

3 计算结果和讨论

前面讨论告诉我们, 因与自由电子发生碰撞时, 类氢、类氦离子的辐射谱线可能会发生改变, 即改变着谱线展宽和位移. 为了计算它们, 原则要求考虑基本碰撞过程 (5) 和 (6) 中每个具体过程, 并且计算出它们对应的散射矩阵. 这就要求精确地计算每一个碰撞过程中靶离子的微观状态, 即通道波函数 (7) 中自由通道和束缚通道. 为此, 在计算碰撞原子系统的微观状态时, 需要就具体问题选择好每个物理体系的参考组态. 不过, 由于本文研究的碰撞系统的特殊性, 具体地说, 计算中需要计算的原子体系组态分别如下. 计算类氢离子时其电子组态 $1s, 2s, 2p, 2s, 3s, 3p, 3d, 4s$. 而计算类氦离子时其电子的组态 $1s^2, 1s2s, 1s2p, 1s3s, 1s3p, 1s3d, 2s2p, 2s3s, 2s3p$. 计算碰撞过程中自由电子分波数最大分波 $l_{\max} \leq 10$. 最后, 对基本的碰撞过程 (5) 和 (6) 中, 入射自由电子的能量 (Ry 为单位) 进行散点, $\varepsilon = 1.0, 2.5, 13, 23, 33, 43, 53, 63, 73, 83, 93, 103, 113, 123, 133, 143, 153, 163, 173, 183, 1, 93, 203, 213,$

$223, 233, 243, 253, 263, 273, 283, 293, 303, 313, 323, 333, 343, 353, 363, 373, 383, 393, 403, 423, 453, 493, 553, 623, 703, 793, 893, 903, 1103, 1303$.

基于碰撞强度的计算公式 (4), 利用自由电子满足麦克斯韦分布后, 可以讨论拥有少数束缚电子, 且处在比较高离化态的离子辐射谱线随电子温度和密度的变化规律. 如在电子温度 $T_e = 1000 \text{ eV}$, 电子密度 $N_e = 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ 时, 类氢的 α 和 β 线展宽分别是 $0.2 \text{ eV}, 1.12 \text{ eV}$, 类氦的 α 和 β 线展宽分别是 $0.42, 1.3 \text{ eV}$.

从图 1 看到碰撞强度作为自由电子能量 ε 不是光滑函数, 这是因为在这些间断点处, 自由电子与碰撞靶离子 (处在) 碰撞时发生共振现象. 文献研究表明高里德伯态共振现象发生在靶离子激发态的位置附近, 它们对应于复合体系 (7) 中的第一展开式中的项 [17], 因为它可以看作靶离子体系与零能量自由电子组成的符合体系. 例如, 与类氢的 α 线直接相关的碰撞强度实部 $\text{Re}\Omega$ 在 $\varepsilon \approx 45, 243, 288(Ry)$ 处跳跃.

-
- [1] Griem H R 1974 *Spectral Line Broadening by Plasma* (New York Academic press: NY, USA)
- [2] Omar B 2010 *International Journal of Spectroscopy*, Article ID 983578
- [3] Dimitrijevic M S, Sahal-Br  hot S 1984 *Astron. Astrophys.* **136** 289
- [4] Duan B, Wu Z Q, Wang J G 2009 *Science in China G* **39** 43 (in Chinese)[段斌, 吴泽清, 王建国 2009 中国科学 G **39** 43]
- [5] Duan B, Wu Z Q, Wang J G 2009 *Science in China G* **39** 241 (in Chinese)[段斌, 吴泽清, 王建国 2009 中国科学 G **39** 241]
- [6] Griem H R, Baranger M, Kolb A C, Oertel G 1962 *Phys. Rev.* **125** 177
- [7] Barnes K S, Peach G 1970 *J. Phys.* **B 3** 350
- [8] Zhao Z X, Yuan J M, Sun Y S 1999 *Chin. Phys. Lett.* **16** 885
- [9] Calisti A, Stamm R, Talin B 1988 *Phys. Rev. A* **38** 4883
- [10] Seaton M J 1987 *J. Phys.* **B 20** 6431
- [11] Hooper C F Jr 1966 *Phys. Rev.* **149** 77
- [12] O'Brien J T, Hooper C F Jr 1972 *Phys. Rev. A* **5** 867
- [13] Duan B, Wu Z Q, Yan J, Li Y M, Wang J G 2006 *J. Atom. Mol. Phys.* **23** 73 (in Chinese)[段斌, 吴泽清, 颜君, 李月明, 王建国 2006 原子与分子物理学报 **23** 73]
- [14] Baranger M 1958 *Phys. Rev.* **111** 494, **112** 855
- [15] Eissner W, Seaton M J 1972 *J. Phys.* **B 5** 2187
- [16] Eissner W 1998 *Comput. Phys. Commun.* **114** 295
- [17] Berrington K A, Burke P G, Dufton P L, Kingston A E 1977 *J. Phys.* **B 8** 1465

Electron broadening of the resonance lines of Ar^{+17} and Ar^{+16} *

Duan Bin[†] Wu Ze-Qing Yan Jun Li Yue-Ming Wang Jian-Guo

(*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China*)

(Received 28 November 2010; revised manuscript received 20 March 2011)

Abstract

With the revised UCL wave code, the reactance matrix can be calculated when an electron impacts on an ion, so that the scattering matrix and the collision strength are calculated. With the collision strength, the electron broadening of the resonance line is studied. Specifically, the widths and the shifts of resonance lines emitted from Ar^{+17} and Ar^{+16} are calculated under the different values of electron temperature and electron density.

Keywords: the reactance matrix, the collision strength, electron broadening

PACS: 32.70.Jz, 34.50.Fa

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10675025).

[†] E-mail: duan_bin@iapcm.ac.cn