

电子与类锂离子碰撞激发*

李 家 明

(中国科学院物理研究所)

提 要

本文提出一种计算电子与离子碰撞激发截面的理论方法。同时,此方法也可作为一种检验和掌握电子碰撞激发数据的手段。在电子的低能区域,利用多通道量子数亏损理论,我们可以从精确测得的能谱数据中推算出电子碰撞激发截面。在电子的高能区域,我们利用 Bethe 理论计算了电子碰撞激发截面。对中间能域,如果将截面的局部共振结构平均,则可以用内插法得到平均激发截面。比较可靠的电子与离子激发数据,对受控聚变的研究是有帮助的。本文以电子与类锂离子碰撞激发为实例说明所提出的理论方法。

一、引 言

在受控聚变的研究中,杂质离子对热核等离子体的宏观运动和能量平衡有很大的影响^[1,2]。这些杂质不可避免地是由热核等离子体与容器壁相互作用或由热核等离子体与限制器相互作用而产生的,因此有必要掌握和这些离子有关的各种微观过程的可靠数据,如电子碰撞激发率,双电子复合率(共振辐射复合率)等等。在热核等离子体的能量平衡中,相当多的能量以电磁波的方式发射出来(几乎包括所有的谱域)。这些发射谱可以作为诊断等离子体的重要信息^[3,4],因此掌握杂质离子所产生线谱的可靠数据是需要的。

离子线谱是由离子能级间的辐射跃迁产生的。复杂离子的激发能级通常成为多个里德伯系列。这些里德伯系列可能收敛于不同的阈值,同时相互间存在着强烈的干扰。对于这种包含有分立谱、自电离谱和连续谱的复杂能谱,可以用一个统一的理论即多通道量子数亏损理论来处理。这个理论的数学基础是由 Seaton 建立的^[5],其后 Fano 将该理论推广应用于分子系统^[6],并强调在多通道量子数亏损理论中本征通道的物理意义(见第二节)。多通道量子数亏损理论又不断被应用在原子与分子的光激发^[6-8]、光电离^[6,8,9]以及电子与分子离子的解离复合过程^[10]。在应用多通道量子数亏损理论统一地处理分立谱、自电离谱与连续谱时,自电离谱与连续谱中的特性是和各种低能电子与离子碰撞的过程有密切关系的。本文将它推广应用于计算低能电子与离子碰撞激发截面。(这里,低能电子是指入射电子的动能在激发阈值附近而言。)因此,多通道量子数亏损理论为我们提供了一种有效地掌握线谱数据的方法——一种计算能级的方法,同时亦可以用来检验能级数据的自洽性;另一方面,多通道量子数亏损理论也为我们提供了一种简便地计算低能

* 1979年4月10日收到。

电子与离子碰撞激发截面的方法。

最近, Bethe 理论也被一些物理工作者^[12]应用于电子与离子的碰撞激发、电离过程。在 Bethe 理论中, 截面与入射电子的能量具有较简单的关系。我们应用 Bethe 理论^[13]计算高能电子与离子碰撞激发截面。至于中间能域的碰撞激发, 可以从 Bethe 理论计算得到的高能激发截面和从多通道量子数亏损理论计算得到的低能激发截面, 应用内插法计算出平均激发截面(如果我们对中间能域一些局部的共振不感兴趣而给予平均)。我们相信计算结果的可靠程度是可以满足应用的需要的^[1,2]。

在本文中, 计算了电子与各种类锂离子(原子序 $Z = 4-9$) 的碰撞 ($2S-2P$) 激发截面。因为对类锂离子, $\Delta n = 0$ 的激发辐射是重要的线辐射。同时, 对于光学深度浅的高温等离子体, 电子温度可以从测量 ($2S-2P$) 和 ($2S-3P$) 跃迁的强度比推算出^[13]。因此对类锂系列离子的电子碰撞 ($2S-2P$) 激发截面作系统的计算与检验是必要的。我们把本文的计算结果和从其它理论计算获得的结果以及实验数据作了比较(如图 3 和图 4), 结果是令人满意的, 即使最坏的情形 (Be^{+1}), 与实验结果的差别也是在百分之五十以内。这样的可靠性基本上满足了应用的需要。

二、多通道量子数亏损理论

现在考虑一个低动能的电子和一个类锂离子相互碰撞的物理系统。作为靶的类锂离子具有电荷 z_1e 、能态为 $n^{2S+1}\bar{L}$ (例如, 类锂离子基态的主量子数 $n = 2$, 轨道角量子数 $\bar{L} = 0$ 以及自旋量子数 $\bar{S} = 1/2$; 通常用 2^2S 表示)。作为探讨用的电子则用轨道能量 $\mathcal{E}_a$ 、轨道角量子数 l 及自旋量子数 $s = 1/2$ 来描述。在本文中(除非有特别说明), 能量将以 $z_1^2mc^4/\hbar^2$ 为单位, 距离以 $\hbar^2/(z_1mc^2)$ 为单位 (m 是电子质量, $\hbar$ 是普朗克常数)。用下标 $a = n^{(2S+1)}\bar{L}$ 来区别所对应的不同的离子能态; 例如, 对应基态的类锂离子, 入射电子的轨道能是 $\mathcal{E}_{2s}$ (以下为了方便, 将用 $2S$ 代替 2^2S 而省略其重态号)。在 2^2S-2^2P 碰撞激发后, 对应激发态 2^2P 的离子, 电子轨道能量是 $\mathcal{E}_{2p} = \mathcal{E}_{2s} - \Delta E$, ΔE 是 2^2S-2^2P 激发阈值。

仔细地分析这个“电子-离子”体系的特性, 发现有两种迥然不同的情况, 也就是在位形空间中分成两个区域——作用域内与作用域外。当在作用域内时, 也就是作为探讨用的电子穿入离子内而成为一个复合体时, 电子与离子的相互作用是个多体问题, 即多电子问题, 这时必须考虑所有电子间相关联的作用。所谓作用域是一个以离子的核为球心, 以 r_0 为半径的空间球体 ($r \leq r_0$), 而 r 是电子与离子中心的距离(在本文中, r_0 的具体数字是无关的, 因总可取足够大的 r_0 值)。当在作用域外时, 作为探讨用的电子和离子间的相互作用可以很可靠地用库仑势来描述。也就是说, 现在的问题已成为量子力学中的单体问题。

然而, 作为靶的离子有不同的能态, 作为探讨用的电子也有不同的轨道角量子数与轨道能。因此这个具有一定总能量的“电子-离子”体系, 由于不同的总角动量和宇称性, 可以分波展开形成不同的对称块。在特定的对称块中, 电子与离子在作用域外可以有不同的组合方式, 即电子与离子必须适当地耦合以满足该对称块的条件。这些不同的组合方

式被称为分解通道,因为它们刻划了这个“电子-离子”体系如何分解的模式. 现举例说明: 我们现在的的问题是低能电子与类锂离子碰撞,电子的轨道能 $\mathcal{E}_{2s}$ (对应基态为 2^2S 的类锂离子) 低于或等于 2^2S-2^2P 激发阈值 ΔE . 因此,类锂离子的有关能态是 2^2S 和 2^2P . 在分波展开分析中,例如对于具有总轨道角动量 $L=0$,总自旋 $S=1$,宇称性为正的分波对称块中,这个“电子-离子”体系只有两种组合方式,即两个分解通道,它们分别是 $(2^2S)(\mathcal{E}_{2s})^3S$ 和 $(2^2P)(\mathcal{E}_{2p})^3S$. 也就是说,在 3S 对称块中,这是一个双通道的问题.

明白了分解通道的定义以后,再讨论如何处理在作用域外的问题. 在作用域外,电子与离子相互作用已简化成为一个电子在库仑势中的运动. 在某一个分解通道中(用下标号 i 来表示),该分解通道的波函数可以写成相乘型的波函数:

$$\phi_i = \mathcal{A} \varphi_i [f_i(r, \mathcal{E}_i) c_i - g_i(r, \mathcal{E}_i) d_i] \quad \text{当 } r \geq r_0, \quad (1)$$

波函数 φ_i 是一个复合的波函数——它是类锂离子波函数和电子的角度、自旋波函数的适当耦合的结果. $\mathcal{A}$ 是反对称运算符. 电子的径向波函数是 f_i 和 g_i 的线性组合,而 f_i 和 g_i 分别是规则库仑波函数和非规则库仑波函数(参阅附录). 系数 c_i 和 d_i 则必须由作用域面 ($r = r_0$) 的边界条件和无限远 ($r \rightarrow \infty$) 的边界条件来决定. 根据量子力学,该“电子-离子”体系的波函数的一般解(在作用域外)是这些所有分解通道波函数的线性叠加:

$$\begin{aligned} \Psi &= \sum_i \phi_i \\ &= \mathcal{A} \sum_i \varphi_i [f_i(r, \mathcal{E}_i) c_i - g_i(r, \mathcal{E}_i) d_i] \quad \text{当 } r \geq r_0. \end{aligned} \quad (2)$$

如前所述,系数 c_i 和 d_i 由两个边界条件 ($r = r_0$ 和 $r \rightarrow \infty$) 来决定. 为了清楚地区分这两个边界条件,我们先考虑作用域面的边界条件,由此从方程(2)可以得到特殊的一组相互独立的线性叠加

$$\phi_\alpha = \mathcal{A} \sum_i \varphi_i U_{i\alpha} [f_i(r, \mathcal{E}_i) \cos \pi \mu_\alpha - g_i(r, \mathcal{E}_i) \sin \pi \mu_\alpha] \quad \text{当 } r \geq r_0. \quad (3)$$

这些线性叠加的波函数 ϕ_α 被定义为本征通道波函数,下标号 α 表示各个本征通道;总的本征通道数等于所有分解通道数. 下面分析本征通道的物理图象. 在第 α 个本征通道中,由于作用域内的密切相互作用,使得在作用域外所有分解通道的电子径向波函数成为具有共同相移 $\pi \mu_\alpha$ 的库仑驻波,在各个分解通道中的库仑驻波则以特定的权重 $U_{i\alpha}$ 线性叠加在一起. 因为所有的本征通道都是相互独立的,所以权重 $U_{i\alpha}$ 满足正交关系而成为一个正交矩阵(也就是 $\sum_i U_{i\alpha} U_{i\beta} = \delta_{\alpha\beta}$). 这个权重矩阵 $U_{i\alpha}$ 和相对应的一组共同相移 $\pi \mu_\alpha$ 就完全地代表了作用域表面的边界条件,概括地反映了作用域内的所有密切相互作用. 参数 μ_α 称为本征量子数亏损,权重矩阵 $U_{i\alpha}$ 则称为转换矩阵,因为它描述了如何从分解通道线性叠加成为本征通道. 通常在感兴趣的能域内本征量子数亏损 μ_α 和转换矩阵 $U_{i\alpha}$ 随能量作缓慢平滑的变化,甚至有时几乎是常数.

现在,这“电子-离子”体系的波函数(在作用域外)可写成

$$\Psi = \sum_\alpha \phi_\alpha A_\alpha \quad \text{当 } r \geq r_0, \quad (4)$$

混合系数 A_α 则必须由无限远 ($r \rightarrow \infty$) 的边界条件来决定. 因为库仑波函数 f 和 g 的数

学性质是已知的,所以混合系数 A_α 是可以解析地求得的. 由于无限远的边界条件是随能域的不同而异,因此下面具体说明两种能域: 分立的能域和完全连续的能域.

1. 分立的能域

在分立的能域中,所有的分解通道都是关闭的(当第 i 分解通道关闭时,其对应的电子轨道能量 $\mathcal{E}_i = -\frac{1}{2\nu_i^2} < 0$). 能量可以用一组参数 $\{\nu_i\}$ 来表示. 如所考虑的一类锂离子只有 2^2S 和 2^2P 两个能态,就只有两个参数 ν_{2S} 和 ν_{2P} ; 它们满足下列的关系:

$$-\frac{1}{2\nu_{2S}^2} = -\frac{1}{2\nu_{2P}^2} + \Delta E. \quad (5)$$

当 $r \rightarrow \infty$ 时, (4) 式所示的波函数可写成(利用附录中 (A·8) 和 (A·9) 式)

$$\Psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_i \varphi_i \left\{ u_i(r, \nu_i) \left[\sum_\alpha U_{i\alpha} \sin \pi(\nu_i + \mu_\alpha) A_\alpha \right] - U_i(r, \nu_i) \left[\sum_\alpha U_{i\alpha} \cos \pi(\nu_i + \mu_\alpha) A_\alpha \right] \right\}. \quad (6)$$

无限远的边界条件是当 $r \rightarrow \infty$ 时 $\Psi = 0$, 因此得到下列线性方程式:

$$\sum_\alpha u_{i\alpha} \sin \pi(\nu_i + \mu_\alpha) A_\alpha = 0 \quad (\text{对所有的 } i). \quad (7)$$

(7) 式有解的条件是系数行列式为零,

$$F(\{\nu_i\}; \{\mu_\alpha, U_{i\alpha}\}) \equiv \det |U_{i\alpha} \sin \pi(\nu_i + \mu_\alpha)| = 0. \quad (8)$$

因此,当本征参数 $\{\mu_\alpha, U_{i\alpha}\}$ 已知后, (5) 和 (8) 式具有无限个能量参数解 $\{\nu_{i,n}\}$; 这里下标 n 表示第 n 个解. 这些解就产生了无限个分立的能级, 这就是为什么本能域称为分立能域的理由. 这些无限个分立能级形成通常所谓的里德伯系列. 里德伯系列间可存在强烈的干扰, 这些强烈的干扰可以在多通道量子数亏损理论中得到统一的处理.

从能谱的数据(亦即分立能级的数据^[19]), 可以由(5)式得到许多能量参数组 $\{\nu_{i,n}\}$, 然后把所有 $\{\nu_{i,n}\}$ 代入(8)式求得最佳的本征参数值 $\{\mu_\alpha, U_{i\alpha}\}$ 使满足下列条件, 即

$$\sum_n [F(\{\nu_{i,n}\}; \{\mu_\alpha, U_{i\alpha}\})]^2 \text{ 为最小值.}$$

例如, 类铍氟离子具有 3S 对称性的里德伯系列为 $(2^2S)(ns)^3S$ 和 $(2^2P)(np)^3S$; 这是两个通道的问题. 从能谱的数据^[19], 利用(5)式, 得到许多 (ν_{2S}, ν_{2P}) 数对. 图 1 中这些数对

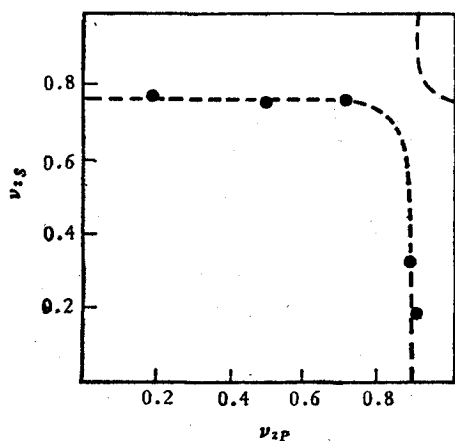


图 1 (ν_{2S}, ν_{2P}) 数对图

● 为 3S 对称性里德伯系列数对 [(5) 式], 只取小数部分; --- 为 (8) 式所代表的曲线

(ν_{2S}, ν_{2P}) 用点标出. 因为(8)式是 $\{\nu_i\}$ 的周期函数, 所以图 1 中的 (ν_{2S}, ν_{2P}) 数对只取其小数部分; 在这样的图中, (8) 式所代表的曲线应该通过所有的点. 本征通道参数 $(\mu_\alpha$ 和

U_{ia}) 则决定这曲线的形状与位置(如图 1 中的虚线所示)。因此,可以决定最适当的三个本征参数使得(8)式所代表的曲线基本上通过了实验的点(ν_{2s} , ν_{2p}); 这里,三个本征参数是 μ_1 , μ_2 和 2×2 正交转换矩阵 U (因为 2×2 正交矩阵只需要用一个角度来表示)。

利用能谱的数据^[19],系统地分析了类铍离子能级的构造(原子序从 4 到 9)。从这些系统的分析中,得到类铍离子八个对称块(1S , 3S , $^1P^0$, $^3P^0$, 1D , 3D , $^1F^0$ 和 $^3F^0$)的本征参数。由于这些本征参数的数字繁多,本文不再列出。此外,还必须指出,由于能谱数据的短缺,使得我们在作系统化的分析中不得不作些内插或外推。如果实验上能够提供更多的数据(尤其是 Be 和 B^{+1}),将肯定会有所帮助的。

2. 完全连续能域

在这个能域中,所有分解通道都是开放的,亦即各个分解通道的轨道能都是正的($\mathcal{E}_i = \frac{1}{2} k_i^2$)。当 $r \rightarrow \infty$ 时,(4)式所示的波函数可写成[利用附录中(A·6)和(A·7)式]

$$\Psi \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \mathcal{A} \sum_i \varphi_i \left\{ \sqrt{\frac{1}{2\pi k_i}} e^{i(k_i r + \frac{1}{k_i} \ln 2k_i r - \frac{l_i}{2}\pi)} \cdot e^{i\sigma_i} \left[\frac{1}{i} \sum_a U_{ia} e^{i\pi\mu_a} A_a \right] - \sqrt{\frac{1}{2\pi k_i}} e^{-i(k_i r + \frac{1}{k_i} \ln 2k_i r - \frac{l_i}{2}\pi)} \cdot e^{-i\sigma_i} \left[\frac{1}{i} \sum_a U_{ia} e^{-i\pi\mu_a} A_a \right] \right\}. \quad (9)$$

(9)式的右边{ }中,第一项表示外向波,而第二项表示内向波。混合系数 A_a 将由适当的无限远边界条件来决定。本文中的无限远边界条件应该是所谓的内向边界条件,即第 i 分解通道的内向波的系数为 1 而其它分解通道($i \neq j$)的内向波的系数为零。这种内向边界条件给出的 A_a 值为

$$A_a^{(-i)} = -iU_{ia} \exp[i(\pi\mu_a + \sigma_i)]. \quad (10)$$

为了求碰撞截面,需要知道散射矩阵 S_{ij} , 即在内向边界条件下,当第 i 通道以单位振幅的内向波射入时,第 j 通道散射出的外向波的负振幅为

$$\begin{aligned} S_{ij} &= -\frac{e^{i\sigma_j}}{i} \sum_a U_{ia} e^{i\pi\mu_a} A_a^{(-i)} \\ &= e^{i\sigma_j} \left[\sum_a U_{ia} e^{i2\pi\mu_a} U_{ja} \right] e^{i\sigma_j}. \end{aligned} \quad (11)$$

因此,类锂离子的 2^2S-2^2P 碰撞激发截面为

$$\sigma = \frac{\pi}{4k_{2s}^2} \sum_{i \in 2s} \sum_{j \in 2p} \sum_S \sum_L (2S+1)(2L+1) |S_{ij}|^2. \quad (12)$$

这里,截面是以 $\hbar^4/(z_i m e^2)^2$ 为单位。在本文中(如前节所述),我们从对类铍离子能谱的系统分析中,得到八个对称块(1S , 3S , $^1P^0$, $^3P^0$, 1D , 3D , $^1F^0$ 及 $^3F^0$)的本征参数 μ_a 和 U_{ia} (在类锂离子的 $2S-2P$ 激发阈值附近)。因此,可以利用方程(12),以分波展开的方式计算在 $2S-2P$ 阈值的电子激发截面(见表 1)。

表 1 在阈值的碰撞激发截面

类 锂 系 列	Be ⁺	B ⁺	C ⁺	N ⁺	O ⁺	F ⁺
$\sigma_{2S-2P}(10^{-16}\text{cm}^2)$	24.0	13.7	6.52	3.72	2.27	1.51

三、Bethe 理 论^[11]

本节讨论能量较高的电子碰撞激发类锂离子的情况。入射电子的动量是 $\hbar\mathbf{K}$ ，动能是 $T = \hbar^2 K^2 / 2m$ ；在 $2S-2P$ 碰撞激发后，电子的动量是 $\hbar\mathbf{K}'$ 。因此，在碰撞激发过程中，动量的转移是 $\hbar\mathbf{q} = \hbar(\mathbf{K} - \mathbf{K}')$ ，而能量的转移是 $E_{2S-2P} = (\Delta E) \cdot z_i^2 m c^4 / \hbar^2$ 。玻恩近似法给出微分截面^[11]为

$$d\sigma_{2S-2P} = 4\pi(m c^2 / \hbar^2)^2 K^{-2} q^{-4} |\mathcal{E}_{2S-2P}(q)|^2 dq^2. \quad (13)$$

这里， $\mathcal{E}_{2S-2P}(q)$ 是离子的跃迁矩阵元，

$$\mathcal{E}_{2S-2P}(q) = \langle 2P | \sum_i \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i) | 2S \rangle. \quad (14)$$

上式中符号 $\sum_i$ 表示对靶离子内所有的电子求和。在作为靶的类锂离子中，被激发的电子所感受的离子心电荷是 $(z_i + 1)e$ 。因此，(13) 式所示的微分截面通常以所谓的广义振子强度 $f_{2S-2P}(q)$ 来表示：

$$d\sigma_{2S-2P} = \frac{4\pi a^2}{(T/R)} \cdot \frac{f_{2S-2P}(q)}{[E_{2S-2P}/(z_i + 1)^2 R]} \cdot \frac{d(qa)^2}{(qa)^2}. \quad (15)$$

而所谓的广义振子强度定义为

$$f_{2S-2P}(q) = \left[\frac{E_{2S-2P}}{(z_i + 1)^2 R} \right] (qa)^{-2} |\mathcal{E}_{2S-2P}(q)|^2, \quad (16)$$

式中 $R = m c^4 / 2\hbar^2$ ， $a = \hbar^2 / (z_i + 1)m c^2$ 。

对方程 (15) 积分并取主要项，求得 $2S-2P$ 激发截面为

$$\sigma_{2S-2P} = \frac{4\pi a^2}{(T/R)} M_{2S-2P}^2 \ln \left[\frac{4C_{2S-2P}T}{(z_i + 1)^2 R} \right], \quad (17)$$

式中

$$M_{2S-2P}^2 = f_{2S-2P}(z_i + 1)^2 R / (E_{2S-2P}). \quad (18)$$

(17) 式就是熟悉的 Bethe 渐近公式。如果我们以 $(T/R)\sigma/4\pi a^2$ 为纵轴、以 $\ln[T/(z_i + 1)^2 R]$ 为横轴画出截面与能量的关系——这就是所谓的 Fano 图 (见图 2)。在 Fano 图中，更加显出 Bethe 公式的实用性；因为在图中足够高的能量部分应该成为一直线，这个直线的斜率与振子强度有关 (如 (18) 式所示)。这种图可以用来检查数据的可靠性与自洽性，同时也可用来估算截面数据。

对于类锂离子系列 (原子序 $Z = 4-9$)，参数 M_{2S-2P}^2 可从振子强度的数据^[20]求得，而参数 C_{2S-2P} 则从玻恩近似的高能渐近值归一求出。表 2 列出 M_{2S-2P}^2 和 $M_{2S-2P}^2 \ln 4C_{2S-2P}$ 值。

表 2 Bethe 公式参数值

类 锂 离 子	Be ⁺¹	B ⁺²	C ⁺³	N ⁺⁴	O ⁺⁵	F ⁺⁶
M_{2S-2P}^2	6.942	7.471	7.779	7.961	8.005	8.001
$M_{2S-2P}^2 \ln^4 C_{2S-2P}$	12.46	15.20	17.28	18.89	20.06	20.89

在图 2 中,系统地画出了类锂离子系列(原子序 $Z = 4-9$)的 $2S-2P$ 激发截面;图 2 中较高能量部分的截面都处于直线上,而实点表示阈值的截面。对于中间能量部分,则可以用内插法求得平均激发截面。在图 3 与图 4 中,分别对 Be⁺¹ 离子和 C⁺³ 离子,将本文的结果同最近报道的实验结果^[17,18]与理论结果^[14-16]作了比较。对于 C⁺³ 离子,得到满意的结果;本文计算值与其它计算值^[14,16]相差在百分之十以内;与最近的实验结果也基本符合。至于 Be⁺¹ 离子,所有理论值都比实验值高;在阈值,本文结果比实验结果高出百分之五十,而比复杂的理论计算结果高出百分之十五。要明确地指出这些差别的根源是困难的,其理由是:一方面要获得绝对测量的实验数据难度是很大的;另一方面本文的理论计算中,由于铍的能谱数据比较短缺,部分

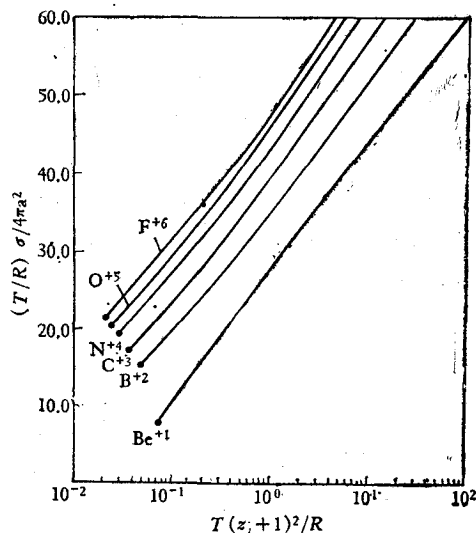
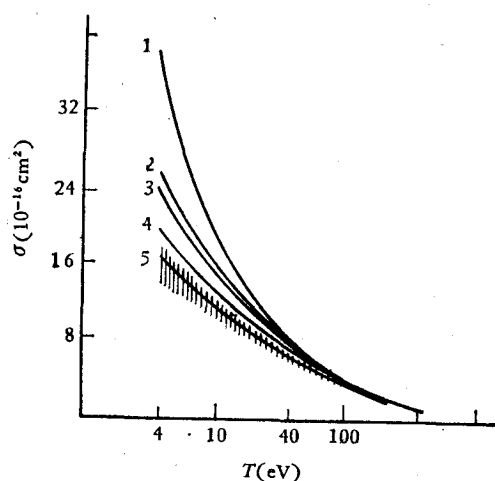
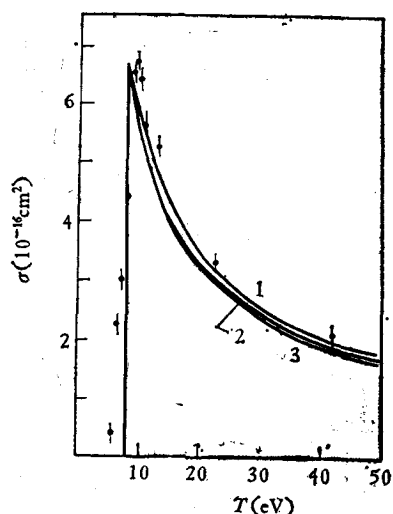


图 2 Fano 图

图 3 类锂铍离子的 $2S-2P$ 碰撞激发截面

1 为库仑玻恩近似(不考虑交换作用); 2 为库仑玻恩近似(考虑交换作用); 3 为本文结果; 4 为密切耦合近似; 5 为实验数据^[17]

图 4 类锂碳离子的 $2S-2P$ 碰撞激发截面

1 为本文结果; 2 为文献 [16] 的理论结果; 3 为文献 [14] 的理论结果; ϕ 为实验数据^[18]

铍原子的本征参数是在系统的分析类铍离子系列时用外推法得到的,因此难免引入一些误差。但是即使误差在百分之五十以内也已经满足了应用方面的需要。在高能部分,所有理论值都比实验值高出百分之十,这是十分令人困惑的;因为高能部分的理论值一般是可靠的,实验工作者通常可以用它作为标准。

四、讨论与结论

本文以实例说明了一种方便的理论方法,它既可用于计算电子碰撞激发截面,也可用来检验电子碰撞激发截面数据的可靠性。具体地说,在低能部分,利用多通道量子数亏损理论,从精确的原子或离子的激发能谱,可以推算出本征通道参数,从而计算出各种碰撞截面。在高能部分,利用 Bethe 渐近公式计算激发截面,而 Bethe 渐近公式中的参数则可从完全独立的振子强度数据求得、从可靠的高能近似计算求得。至于中间能域,如果对局部的共振结构不感兴趣而给予平均,平均截面可在 Fano 图中进行内插得到。

目前,我们只是系统地分析了有限的能谱数据,即系统地分析类铍系列(原子序 $Z = 4-9$),得到类锂离子的 $2S-2P$ 电子碰撞激发截面。如果要推广到其它离子,尚有一些理论问题必须解决,如关于多个独立能级嵌入多个通道中的问题;还有,对于高 Z 原子的离子,非相对论理论适用的条件(即 $(e^2/\hbar c) \ll 1$) 已渐动摇,可能需要将非相对论性多通道理论推广到相对论性的多通道量子数亏损理论。

此外,本文只讨论了两个能域:分立能域和完全连续能域。对于自电离能域(即共振能域),部分分解通道是关闭的,部分分解通道是开放的;在这能域中,存在着许多“电子与离子”碰撞的共振态;这些共振态在时空的形象里是瞬间复合体,它们可再放出电子——这就是自电离过程,或它们也可放出光子而稳定——这就是共振辐射复合(或所谓的双电子复合)。双电子复合是等离子体中一种非常重要的微观原子过程。

附 录

作用域外的电子径向薛定谔波动方程

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dR^2} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2mR^2} - \frac{z_i e^2}{R} - E\right) F = 0 \quad \text{当 } R \gg R_0. \quad (\text{A} \cdot 1)$$

在本文中,能量以 $z_i^2 m e^4 / \hbar^2$ 为单位,距离以 $\hbar^2 / (m e^2 z_i)$ 为单位。因此重新定义变数 R 与参数 E , 使它们与 $r, \mathcal{E}$ 有如下关系:

$$r = R m e^2 z_i / \hbar^2, \quad (\text{A} \cdot 2)$$

$$\mathcal{E} = E \hbar^2 / z_i^2 m e^4. \quad (\text{A} \cdot 3)$$

(A·1) 式可写成

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{1}{r} - \mathcal{E}\right) F = 0 \quad \text{当 } r \gg r_0. \quad (\text{A} \cdot 4)$$

(A·4) 式是二次常微分方程,其一般解可写成规则解 f 和非规则解 g 的线性组合

$$F = f(r, \mathcal{E})c + g(r, \mathcal{E})d \quad \text{当 } r \gg r_0. \quad (\text{A} \cdot 5)$$

系数 c 和 d 由边界条件决定。这组相互线性独立的规则解 f 和非规则解 g 分别被称为规则的库仑波函数和非规则的库仑波函数。它们是能量 $\mathcal{E}$ 的连续函数,具有下列数学性质^[4]:

$$(1) \quad \mathcal{E} = \frac{1}{2} k^2 \geq 0$$

$$f \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{2}{\pi k}} \sin \left(kr + \frac{1}{k} \ln 2kr - \frac{l}{2} \pi + \sigma \right), \quad (\text{A} \cdot 6)$$

$$g \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -\sqrt{\frac{2}{\pi k}} \cos \left(kr + \frac{1}{k} \ln 2kr - \frac{l}{2} \pi + \sigma \right), \quad (\text{A} \cdot 7)$$

而库仑相移 $\sigma = \text{Arg} \Gamma(l+1-i/k)$.

$$(2) \quad \mathcal{S} = -\frac{1}{2\nu^2} \leq 0$$

$$f \xrightarrow{r \rightarrow \infty} u(r, \nu) \sin \pi \nu - v(r, \nu) \cos \pi \nu, \quad (\text{A} \cdot 8)$$

$$g \xrightarrow{r \rightarrow \infty} -u(r, \nu) \cos \pi \nu - v(r, \nu) \sin \pi \nu, \quad (\text{A} \cdot 9)$$

而

$$u(r, \nu) = (-1)^l \nu^{\frac{1}{2}} \pi^{-l} (2r/\nu)^{-\nu} \exp(r/\nu) \times [\Gamma(\nu-l)\Gamma(\nu+l+1)]^{\frac{1}{2}}, \quad (\text{A} \cdot 10)$$

$$v(r, \nu) = (-1)^l \nu^{\frac{1}{2}} (2r/\nu)^{\nu} \exp(-r/\nu) \times [\Gamma(\nu-l)\Gamma(\nu+l+1)]^{-\frac{1}{2}}. \quad (\text{A} \cdot 11)$$

参 考 文 献

- [1] E. Hinnov, *Phys. Rev.*, **A14** (1976), 1533;
S. von Goeler *et al.*, *Nucl. Fus.*, **15** (1975), 301;
E. Hinnov, *J. Nucl. Mater.*, **53** (1974), 9.
- [2] D. M. Mead, *Nucl. Fus.*, **14** (1974), 289.
- [3] M. Bitter *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **42** (1979), 304.
- [4] S. Suckewer and E. Hinnov, *Phys. Rev. Lett.*, **41** (1978), 756.
- [5] M. J. Seaton, *Proc. Phys. Soc. Lond.*, **83** (1966), 801.
- [6] U. Fano, *Phys. Rev.*, **A2** (1970), 353; *ibid.*, **A15** (1977), 817.
- [7] A. F. Starace, *J. Phys.*, **B6** (1973), 76.
- [8] K. T. Lu, *Phys. Rev.*, **A4** (1971), 579;
C. M. Lee and K. T. Lu, *Phys. Rev.*, **A8** (1973), 1241;
C. M. Lee, *Phys. Rev.*, **A10** (1974), 584.
- [9] D. Dill, *Phys. Rev.*, **A7** (1973), 1979;
C. M. Lee, *Phys. Rev.*, **A10** (1974), 1598.
- [10] C. M. Lee, *Phys. Rev.*, **A16** (1977), 109.
- [11] M. Inokuti, *Rev. Mod. Phys.*, **43** (1971), 279.
- [12] Y. K. Kim and K. T. Cheng, *Phys. Rev.*, **A18** (1978), 36.
- [13] L. Heroux, *Proc. Roy. Soc. Lond.*, **83** (1964), 21.
- [14] J. N. Gau and R. J. W. Henry, *Phys. Rev.*, **A16** (1977), 986.
- [15] M. A. Hayes, D. W. Norcross, J. B. Mann and W. D. Robb, *J. Phys.*, **B10** (1977), L429.
- [16] N. H. Magee, J. B. Mann, A. L. Merts and W. D. Robb, Los Alamos Report LA-6691-MS (April 1977).
- [17] D. H. Crandall, P. O. Taylor and G. H. Dunn, *Phys. Rev.*, **A10** (1974), 141;
P. O. Taylor, G. H. Dunn and R. A. Phaneuf. (其结果在文献[15]中被引用.)
- [18] P. O. Taylor, D. Gregory, G. H. Dunn, R. A. Phaneuf and D. H. Crandall, Abstracts of Conference on Atomic Processes in High-temperature Plasmas (1977).
- [19] C. E. Moore, Atomic Energy Levels, Vol. 1 (National Bureau of Standard, U. S. A., NSRDS-NBS 35, 1971).
- [20] W. L. Weiss, M. W. Smith and B. M. Glennon, Atomic Transition Probabilities Vol. 1 (National Bureau of Standard, U. S. A. NSRDS-NBS 4, 1966).

ELECTRONIC IMPACT EXCITATION OF LITHIUM-LIKE IONS

LI JIA-MING (C. M. LEE)

(Institute of Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

We propose here a simple theoretical method to calculate excitation cross sections for electron-ion collision processes. At low energies, we apply the Multichannel Quantum Defect Theory to calculate excitation cross sections based on accurate data of energy levels which have been deduced from extensive spectroscopic measurements. At high energies, we then calculate cross sections based on Bethe Theory. At intermediate energies, we can apply interpolations to calculate mean cross sections if we smooth out local resonance structures. Reliable data for electronic impact excitations of ions are useful in the controlled thermalnuclear reaction researches. As an example, we calculate the $(2S-2P)$ excitation for lithium-like ions to illustrate our proposed theoretical method.