

电子与类锂离子碰撞激发截面和速率系数^{*}

方泉玉 蔡蔚 沈智军 邹宇 李萍 徐元光

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

(1995 年 8 月 24 日收到; 1995 年 9 月 26 日收到修改稿)

用自编的扭曲波程序 ACDW(9) 和拟合程序 FIT(9), 计算了一系列类锂离子的碰撞激发过程. 找出了约化碰撞强度 Ω_{red} 是约化电子能量 ϵ_{red} 的慢变函数, 约化速率系数因子 γ_{red} 是约化电子温度 T_{red} 的慢变函数. 对某种离子的一个激发过程, 可用 10 个参数描述, 由这 10 个参数可以得到任意电子能量下的碰撞强度和激发截面, 以及任意温度下的速率系数.

PACC: 3480B

1 引 言

电子与原子(离子)的碰撞是原子物理学中的一个基本问题, 电子与离子碰撞截面和速率系数(统称为碰撞参数), 在天体物理、等离子体物理领域中有着广泛的应用, 由于实验研究受到某些客观条件的限制, 因此要求从理论上提供比较精确的碰撞参数.

我们考虑了离子组态(平均或重心)能级之间的碰撞激发截面, 包括激发到高里德伯态的截面, 但没有处理精细结构能级, 一方面因为计算时间限制, 另一方面因为计算间隔很小的高激发态细致能级之间的激发跃迁截面不仅意义不大, 而且还可能会带来一些不应有的误差. 研究组态能级之间的碰撞激发可以在节省大量计算时间的前提下, 对电子碰撞激发过程进行一系列的探讨, 同时在实际等离子体状态的模拟中也有广阔应用前景.

类锂是除类氢外较简单的离子类型, 研究类锂离子激发的规律有其特殊的重要性. 特别是在探讨 X 射线激光复合机制时, 人们关注类锂离子的激发过程. 首先, 我们用自编的扭曲波程序 ACDW(9) 计算了一系列类锂离子的激发截面, 然后, 用最小二乘样条方法得到全能域的碰撞强度和热平均速率系数.

2 基 本 理 论

类锂离子组态 $1s^2 nl$ 从下能级 nl_i 到上能级 nl_j 的扭曲波激发截面为

$$\sigma_{ij} = \frac{1}{\epsilon_a g_i} \Omega_{ij}, \quad (1)$$

ϵ_a 为入射电子能量, g_i 为初态离子统计权重, Ω_{ij} 为碰撞强度.

^{*} 国家高技术研究发展计划及中国工程物理研究院科学基金资助的课题.

$$\Omega_{ij} = \frac{32}{k_a k_b} \sum_{l_a l_b} \left[\sum_t \frac{1}{[t]} \overline{R_d^2}(t) + \sum_\gamma \frac{1}{[\gamma]} \overline{R_e^2}(\gamma) - \sum_{t\gamma} (-1)^{t+\gamma} \begin{Bmatrix} l_i l_j t \\ l_a l_b \gamma \end{Bmatrix} \overline{R_d}(t) \overline{R_e}(\gamma) \right], \quad (2)$$

$$\overline{R_d}(t) = \langle l_i \| c^{(t)} \| l_j \rangle \langle l_a \| c^{(t)} \| l_b \rangle R_d(t), \quad (3)$$

$$\overline{R_e}(\gamma) = \langle l_i \| c^{(\gamma)} \| l_b \rangle \langle l_a \| c^{(\gamma)} \| l_j \rangle R_e(\gamma), \quad (4)$$

这里求和量 t 和 γ 的取值由角动量的三角关系决定, R_d 和 R_e 分别为直接和交换的 Slater 积分, 下标 a, b 分别表示入射和散射电子, k_a, k_b 为相应的动量. 束缚电子 i, j 和连续电子 a, b 的波函数满足加相对论修正的 Schrödinger 方程^[1]. 其中势 $V(r)$ 采用离子的初、末平均组态的 Hartree-Fock-Slater(HFS)自洽势^[2]. 当散射电子能量趋于无穷大时, 碰撞强度采用 Bethe 公式, 即对光学允许跃迁, $f_{ij}^{\text{opt}} \neq 0$,

$$\Omega_{ij}(\epsilon_b \rightarrow \infty) = \frac{4 g_i f_{ij}^{\text{opt}}}{e_{ij}} \ln \left(\frac{\epsilon_b}{e_{ij}} \right). \quad (5)$$

对光学禁戒跃迁, $f_{ij}^{\text{opt}} = 0$,

$$\Omega_{ij}(\epsilon_b \rightarrow \infty) = 8 \int_0^\infty f_{ij}(k) \frac{dk}{k} \approx \text{const}, \quad (6)$$

$f_{ij}^{\text{opt}}, f_{ij}(k)$ 分别为光学振子强度和广义振子强度, k 为动量转移, 并且 $f_{ij}^{\text{opt}} = \lim_{k \rightarrow 0} f_{ij}(k)$. $\epsilon_b = k_b^2$, ϵ_b 为散射电子能量, e_{ij} 为激发能, 以 Ry 为单位, 当入射电子能量为域值时, 通过外推给出域值的碰撞强度. 普通平面上的碰撞强度 $\Omega_{ij}(\epsilon_b)$, $\epsilon_b \in (0, \infty)$, 作如下变换可以在约化平面 $\Omega_{\text{red}}(\epsilon_{\text{red}})$, $\epsilon_{\text{red}} \in (0, 1)$ 上表示出来^[3].

对光学允许跃迁,

$$\epsilon_{\text{red}} = 1 - \frac{\ln c}{\ln(\epsilon_b / e_{ij} + c)} \quad c > 1, \quad (7)$$

$$\Omega_{\text{red}} = \Omega_{ij} \frac{1}{\ln(\epsilon_b / e_{ij} + e)}; \quad (8)$$

对光学禁戒跃迁,

$$\epsilon_{\text{red}} = \frac{\epsilon_b / e_{ij}}{(\epsilon_b / e_{ij} + c)} \quad c > 0, \quad (9)$$

$$\Omega_{\text{red}} = \Omega_{ij}, \quad (10)$$

e 为自然对数的底, 取 2.718, c 为可调参数, 当 c 增加(减少)时, 数据点向左(右)移动. 约化平面上的这些数据点经过最小二乘样条方法拟合成光滑曲线, 可以看到曲线 Ω_{red} 随 ϵ_{red} 是缓慢变化的. 基于这点可以不失精度地通过内插得到曲线上任何函数值 Ω_{red} 以及相应的 Ω_{ij} . Ω_{ij} 用电子的 Maxwell 速度分布平均后得到另一个重要物理量——反应的速率系数 $\langle \sigma v \rangle_{ij}$,

$$\langle \sigma v \rangle_{ij} = 2.1716 \times 10^{-8} \frac{\gamma_{ij}}{g_i \sqrt{T_e}} \exp \left(-\frac{e_{ij}}{T_e} \right) \quad (\text{cm}^3 \text{s}^{-1}), \quad (11)$$

$$\gamma_{ij} = \int_0^\infty \Omega_{ij} \exp(-\epsilon_b / T_e) d(\epsilon_b / T_e). \quad (12)$$

T_e 是自由电子温度, 以 Ry 为单位. γ_{ij} 称为反应速率系数因子, 是温度 T_e 的函数. 同理, 普通平面上的 γ_{ij} 也可以在约化平面上表示出来.

对光学允许跃迁,

$$T_{red} = 1 - \frac{\ln c}{\ln(T_e/e_{ij} + c)} \quad c > 1,$$

(13)

$$\gamma_{red} = \gamma_{ij} \frac{1}{\ln(T_e/e_{ij} + c)};$$

(14)

对光学禁戒跃迁,

$$T_{red} = \frac{T_e/e_{ij}}{(T_e/e_{ij} + c)} \quad c > 0,$$

(15)

$$\gamma_{red} = \gamma_{ij}.$$

(16)

γ_{red} 随 T_{red} 也是缓慢变化的. 因此这样两条曲线都可以用五个点 (0, 0.25, 0.5, 0.75, 1) 的函数值刻画出来, 其它点的函数值相当精确地由内插^[4]得到. 事实上, 从上述普通平面到约化平面变换公式以及 (11), (12) 式, 可以证明 Ω_{red} 和 γ_{red} 在区域两端的值是相同的, 即

$$\Omega_{red}(0) = \gamma_{red}(0), \quad \Omega_{red}(1) = \gamma_{red}(1).$$

于是刻画两条曲线的 10 个参数可以减少到 8 个参数.

3 结果与讨论

用加相对论修正的扭曲波方法计算了每一条曲线. 在表 1 中列出了类锂铝和类锂钼的碰撞强度, 可以看出本文结果与文献[5]完全相对论的结果在 10% 的范围内符合. 对于低能电子与类锂铝离子的碰撞强度, 本文结果与我们曾经计算的 5 态强耦合的结果^[6]在 20% 以内符合.

表 1 类锂 Al, Mo 的电子碰撞强度

Z	13				42			
ϵ'	0.008		0.75		0.008		0.75	
	本文结果	RDW ^[5]	本文结果	RDW ^[5]	本文结果	RDW ^[5]	本文结果	RDW ^[5]
2s—2p	1.96	1.97	3.79	3.74	0.165	0.167	0.301	0.334
2s—3s	0.0622	0.0609	0.0743	0.0750	0.00504	0.00536	0.00587	0.00668
2s—3p	0.0388	0.0386	0.175	0.175	0.00399	0.00402	0.0163	0.0169

应该指出, 采用平均组态的 HFS 自洽场近似计算单电子波函数, 它给碰撞激发截面带来的误差是随 Z/N 增加而减少. 一般认为这种近似适合于 $Z/N > 3$, 其中 Z 为离子的核电荷, N 是离子中的束缚电子数.

考虑到当散射电子能量增加至无穷大时, 扭曲波碰撞强度 $\Omega(\epsilon_b)$ 应该趋向于 Bethe 公式的极限值 $\Omega(\infty)$. 我们计算了极限值, 从而保证散射电子能量趋于无穷大时碰撞强度有正确的走向. 实际计算可以看到, 对光学允许跃迁, 高能电子的扭曲波碰撞强度容易偏低, 这是因为分波收敛慢造成的. 此时用平面波的碰撞强度代替扭曲波的结果. 这里计算了八个能量点 $\epsilon' = 0.004, 0.008, 0.04, 0.1, 0.21, 0.41, 0.75, 1.25$. 各点最大分波数从

25—74. 散射电子能量: $\epsilon_b = \epsilon' Z_{\text{eff}}^2$, $Z_{\text{eff}} = Z - \frac{5}{6}(N-1)$.

最小二乘样条方法首先能对与能量有关的碰撞强度进行标度, 标度(即约化)碰撞强度移去了数据中主要的能量依赖关系, 并将全部能量范围收缩到(0, 1)区间, 从而便于作出曲线图形和采用最小二乘样条拟合曲线. 这种拟合的误差往往比拟合解析公式的误差小得多^[3]. 对于每一个激发过程, 拟合参数 $\Omega_{\text{red}}(0)$, $\Omega_{\text{red}}(0.25)$, $\Omega_{\text{red}}(0.5)$, $\Omega_{\text{red}}(0.75)$, $\Omega_{\text{red}}(1)$, $\gamma_{\text{red}}(0.25)$, $\gamma_{\text{red}}(0.5)$, $\gamma_{\text{red}}(0.75)$ 以及常数 C 和 e_{ij} 共 10 个参数便可以完全决定任意能量下的碰撞强度和任意温度下的速率系数, 其中从 Ω_{red} 到 Ω_{ij} , γ_{red} 到 γ_{ij} 以及 $\langle \sigma v \rangle_{ij}$ 只经过初等运算, 是很容易实现的.

表 2 给出 $\text{Al}^{10+} 2p \rightarrow nd$ ($n=3, 4, 5, 6, 7$) 的 5 个激发过程的参数. 可以看到 Ω_{red} 和 γ_{red} 在全区域(0, 1)中变化是不大的.

表 2 $\text{Al}^{10+} 2p \rightarrow nd$ ($n=3-7$) 碰撞激发的参数

n	E_{ij}	c	Ω_{red}					γ_{red}		
			(0)	(0.25)	(0.5)	(0.75)	(1)	(0.25)	(0.5)	(0.75)
3	17.42	1.2	0.7625	0.7570	0.7529	0.7602	0.8987	0.7541	0.7488	0.7517
4	23.32	1.2	0.1621	0.1585	0.1533	0.1466	0.1282	0.1579	0.1529	0.1456
5	26.05	1.2	0.06474	0.06271	0.05936	0.05517	0.04261	0.06247	0.05941	0.05493
6	27.53	1.2	0.03334	0.03193	0.02992	0.02727	0.01980	0.03182	0.02997	0.02722
7	28.42	1.1	0.01951	0.01901	0.01833	0.01660	0.01097	0.01892	0.01822	0.01676

作为例子, 从表 2 的 $2p \rightarrow 3d$ 过程的参数中, 经过简单计算得到了速率系数, 并且演示在图 1 上. 在图 2 上还演示了不同 Z 的标度量 $q^2 \gamma_{ij}$ 随 q ($q = Z - N + 1$) 和电子温度 T_e/q^2 的变化. 可以看出 $q^2 \gamma_{ij}$ 在低 Z 部分变化稍大些, 随 Z 增加逐渐趋于不变.

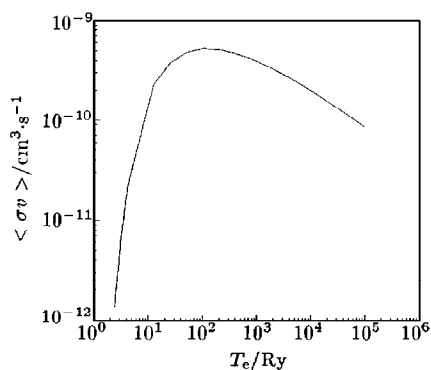


图 1 类锂 $\text{Al}(2p \rightarrow 3d)$ 的电子碰撞激发速率系数 $\langle \sigma v \rangle$ 随电子温度 T_e 的变化

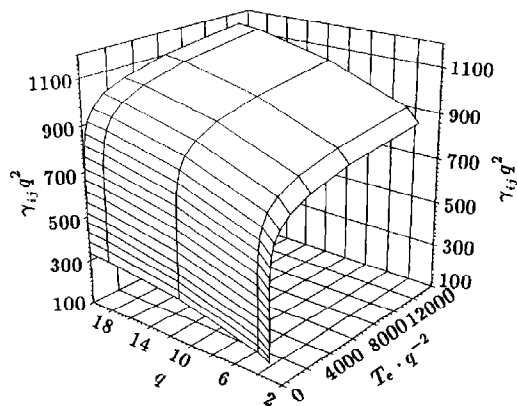


图 2 类锂离子 ($2s \rightarrow 2p$) 跃迁标度量 $q^2 \gamma_{ij}$ 随 q 和 T_e/q^2 的变化

图 3(a—d)给出 C^{3+} , O^{5+} 的 $2s-2p$, $2s-3s$, $2s-3p$, $2s-3d$ 速率系数. 同时与 Itikawa 等人的推荐数据^[7]进行了比较. 由图可见, 除 $2s-3p$ 的碰撞强度差别较大之外, 其他符合较好. 我们相信, 随着 Z/N ($Z < 60$) 增加, HFS 近似产生的误差减少, 本文计算结果的精度会有所提高.

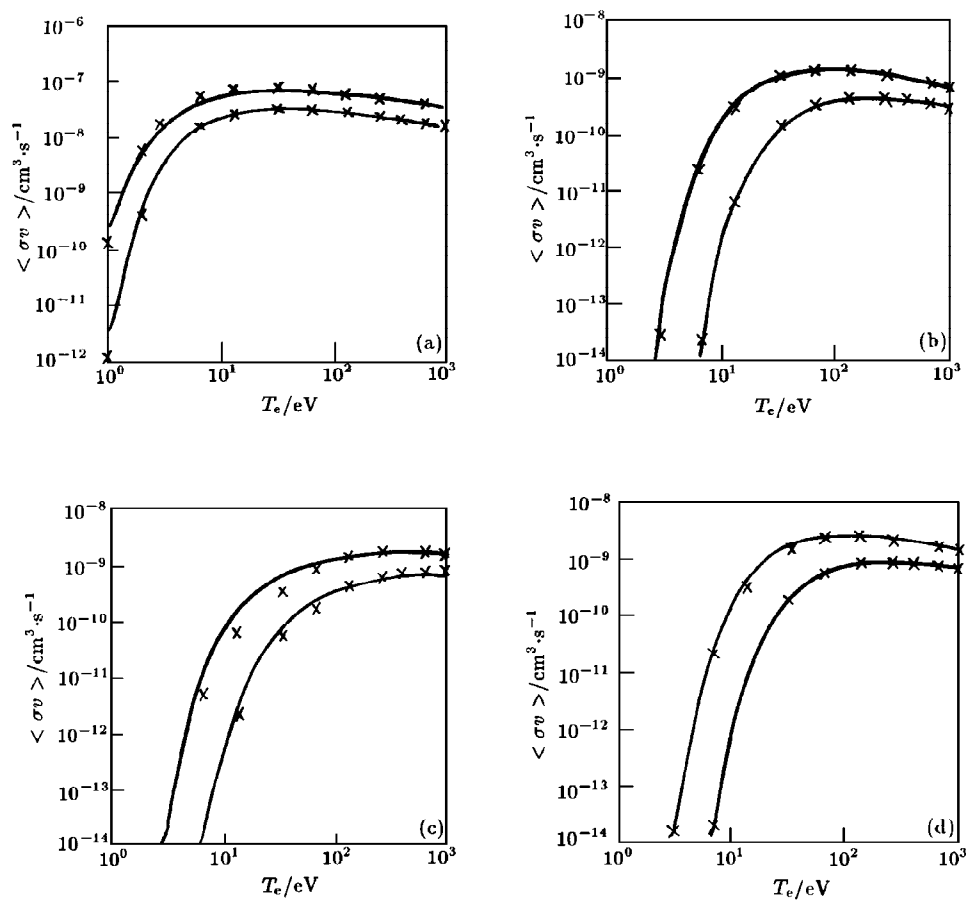


图 3 (a), (b), (c), (d) 分别为 C^{3+} , O^{5+} $2s-2p$, $2s-3s$, $2s-3p$, $2s-3d$ 的速率系数. 上下两条实线分别为文献[7]给出的 C^{3+} , O^{5+} 的结果, $\times$ 为本文的结果

- [1] R. D. Cowan, The Theory of Atomic Structure and Spectra (Univ. of California Press, Berkely. 1981).
- [2] 方泉玉、沈智军、蔡蔚等, 强激光与粒子束, **6**(1994), 607.
- [3] A. Burgess, M. C. Chidichimo, H. E. Mason and J. A. Tully, Journal de Physique IV Colloque C1, Supplement au Journal de Physique II, Vol.1(1991).
- [4] A. Burgess, H. E. Mason and J. A. Tully, Astronomy and Astrophysics, **217**(1989), 319.
- [5] H. L. Zhang, D. H. Sampson and C. J. Fontes, At. Dat. Nuc. Dat. Tab., **44**(1990), 31.
- [6] 邹宇、方泉玉, 计算物理, **9**(1992), 619.
- [7] Y. Itikawa, S. Hara, T. Kato et al., Recommended Data on Excitation of C and O Ions by Electron Collisions IPPJ-AM-27(1983).

COLLISION STRENGTHS AND RATE COEFFICIENTS OF LI-LIKE IONS BY ELECTRON IMPACT

FANG QUAN-YU CAI WEI SHEN ZHI-JUN ZOU YU LI PING XU YUAN-GUANG

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

(Received 24 August 1995; revised manuscript received 26 September 1995)

ABSTRACT

The collision strengths of excitation by electron impact from nl to $n'l'$ with $n(n') \leq 7$ of Li-like ions are computed systematically. The results agree with available data within 10%. The collision strengths are scaled and fitted with a least-square spline method. As a result, the collision strengths and thermally averaged rate coefficients in the entire range can be determined by ten parameters for one transition process.

PACC: 3480B