

$\text{Au}^{q+} (q = 47, 55)$ 离子的电子碰撞 强度与速率系数^{*}

方泉玉 蔡蔚 邹宇 李萍 徐志瑾

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

(1996 年 5 月 22 日收到; 1996 年 9 月 17 日收到修改稿)

用准相对论扭曲波方法计算了 $\text{Au}^{q+} (q = 47, 55)$ 离子的组态重心能级之间的电子碰撞激发强度和速率系数(简称激发参数). 着重分析了高能区光学允许跃迁的碰撞强度的行为, 探讨了平面波近似的适用范围. 与其他完全相对论数据比较, 表明剩余的相对论效应是不大的. 阐述了由约化量的 5 点样条值内插可得任意能量的碰撞强度和任意温度的速率系数. 演示了碰撞强度随能量的变化, 有效碰撞强度和速率系数随温度的变化. 结果表明在类镍金两侧各延伸的 4 种不同电荷离子, 其单电子激发参数变化小于 10%, 这对于使用平均原子模型模拟等离子体动力学过程是十分有利的.

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. 在天体物理学、等离子体物理学和实验高温等离子体领域中, 电子碰撞强度(或激发截面)和速率系数有广泛的应用. 由于在间接驱动惯性约束聚变中, 黑洞靶使用 Au, Pb, W 等重元素作为工作介质, 因此研究这些物质在高温下产生的高剥离态离子的碰撞过程是很重要的. 特别是类镍金及其邻域离子的碰撞强度和速率系数, 对于数值模拟激光—X 射线转换效率有重要影响. 但是电子与离子碰撞截面的实验测量受到一些客观条件的限制, 因此从理论上提供比较精确的碰撞参数显得十分必要.

实际上, 对于这样复杂的 Au^{q+} 离子, 精确理论计算也是相当困难的, 需要作一些近似, 我们采用准相对论扭曲波近似, 即束缚和连续电子的径向波函数由 Cowan 程序解带相对论修正的 Schrödinger 方程^[1]得到. 其中采用了平均的 Hartree-Fock-Slater(HFS)自洽势, 平均量子数 $k = -1$, 以及忽略相对论波函数的小分量. 同时只考虑离子组态重心(或平均)能级之间的碰撞激发过程, 包含激发到高里德伯态的截面.

激发截面或碰撞强度用我们自编的 ACDW(9)程序计算. 计算了 9 类 Au 离子 $\text{Au}^{q+} (q = 47, 55)$. 离子的初、末态主量子数限制在 7 以内, 更高里德伯态的碰撞强度可通过激

^{*} 国家高技术计划惯性约束聚变领域基金和国家自然科学基金资助的课题.

发-电离曲线^[2,3]内插得到,也可由 n 标度碰撞强度^[4]外推得到.

我们还给出碰撞电子能量为无穷和阈值情况下的碰撞强度,后者是外推得到的.采用最小二乘样条方法,用自编程序 Fit(9)拟合了全能域碰撞强度,同时得到电子与离子碰撞激发的热平均速率系数 $\langle \sigma v \rangle$.

2 基本理论^[5,6]

采用与初、末离子组态有关的平均组态,产生 HFS 自洽势,并且假定束缚电子与连续电子都是在自洽势中独立运动,即单电子径向波函数满足相对论修正的 Schrödinger 方程(以 Ryd 为能量单位),

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + V_{\text{scf}}(r) - \frac{\alpha^2}{4} [\epsilon - V_{\text{scf}}(r)]^2 - \frac{\alpha^2}{4} \left[1 + \frac{\alpha^2}{4} [\epsilon - V_{\text{scf}}(r)] \right]^{-1} \right. \\ \left. \times \frac{dV_{\text{scf}}}{dr} \left(\frac{1}{\varphi} \frac{d\varphi}{dr} - \frac{1}{r} \right) \right\} \varphi(r) = \epsilon \varphi(r), \quad (1)$$

式中等号左边第四项为质量-速度修正项,第五项为 Darwin 修正项, $V_{\text{scf}}(r)$ 为在平均组态下的 HFS 势,

$$V_{\text{scf}}(r) = -\frac{2z}{r} + V_c(r) - \left[\frac{24}{\pi} \rho(r) \right]^{1/3}, \quad (2)$$

式中 $V_c(r) = \sum_{m=1}^q w_m \int_0^\infty \frac{2}{r_{<}} \varphi_m^2(r_2) dr_2$ 为电子在平均场中的经典势能, $r_{<}$ 取在 r 与 r_2 中的较小者, q 为轨道数, w_m 为 m 轨道电子占据数, $\rho(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \sum_{m=1}^q w_m \varphi_m^2(r)$ 为球平均的电子密度.

离子从下能级 $n_i l_i$ 激发到上能级 $n_j l_j$ 的截面为

$$\sigma_{ij}^{\text{tot}} = w_i (1 - p_j) \sigma_{ij}, \quad (3)$$

这里为了简单,只用作用电子 $n_i l_i, n_j l_j$ 表示下,上能级的离子组态,而省写了组态中的旁观电子.例如,电子组态 $3s^2 3p^6 3d^{10}$ 激发到 $3s^2 3p^6 3d^9 4p$, 简写为 $3d-4p$. $p_j = \frac{w_j}{4l_j + 2}$ 为离子初态的 j 轨道电子占据概率. σ_{ij} 为单电子激发截面.碰撞强度 $\Omega_{ij}^{\text{tot}} = \epsilon_a G_i \sigma_{ij}^{\text{tot}}$, ϵ_a 为入射电子能量, G_i 为离子初(组)态的统计权重.为了方便,定义单电子碰撞强度 $\Omega_{ij} = \epsilon_a g_i \sigma_{ij}$, $g_i = 4l_i + 2$.对于类氢离子,由于 $w_i = 1, w_j = w_{m \neq i} = 0$,初组态的统计权重 G_i 等于 g_i ,所以类氢离子的总截面等于 σ_{ij} ,总碰撞强度等于 Ω_{ij} . Ω_{ij} 表达式如下:

$$\Omega_{ij} = \frac{32}{k_a k_b} \sum_{l_a l_b} \left[\sum_t \frac{1}{[t]} \bar{R}_d^2(t) + \sum_\gamma \frac{1}{[\gamma]} \bar{R}_e^2(\gamma) - \sum_{t\gamma} (-1)^{t+\gamma} \begin{Bmatrix} l_i l_j t \\ l_a l_b \gamma \end{Bmatrix} \bar{R}_d(t) \bar{R}_e(\gamma) \right], \quad (4)$$

$$\bar{R}_d(t) = \langle l_i || c^{(t)} || l_j \rangle \langle l_a || c^{(t)} || l_b \rangle R_d(t), \quad (5)$$

$$\bar{R}_e(\gamma) = \langle l_i || c^{(\gamma)} || l_b \rangle \langle l_a || c^{(\gamma)} || l_j \rangle R_e(\gamma), \quad (6)$$

式中 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 的径向波函数由方程(1)得到. 求和量 t , γ 的变化范围由 $6j$ 符号中的三角关系决定.

当散射电子能量趋于无穷时, 碰撞强度采用 Bethe 公式, 即对光学允许跃迁, $f_{ij}^{\text{opt}} \neq 0$,

$$\Omega_{ij}(\epsilon_b \rightarrow \infty) = \frac{4g_i f_{ij}^{\text{opt}}}{e_{ij}} \ln\left(\frac{\epsilon_b}{e_{ij}}\right), \quad (7)$$

对光学禁戒跃迁, $f_{ij}^{\text{opt}} = 0$,

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

f_{ij}^{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, 且 $f_{ij}^{\text{opt}} = \lim_{k \rightarrow 0} f_{ij}(k)$. e_{ij} 为激发能. 普通平面上的碰撞强度 $\Omega_{ij}(\epsilon_b)$, $\epsilon_b \in (0, \infty)$, 作如下变换可在约化平面 $\Omega_{\text{red}}(\epsilon_{\text{red}})$, $\epsilon_{\text{red}} \in (0, 1)$ 上表示出来^[5,7], 对光学允许跃迁,

$$\epsilon_{\text{red}} = 1 - \frac{\ln c}{\ln(\epsilon_b/e_{ij} + c)} \quad c > 1, \quad (9)$$

$$\Omega_{\text{red}} = \Omega_{ij} \frac{1}{\ln(\epsilon_b/e_{ij} + c)}, \quad (10)$$

对光学禁戒跃迁,

$$\epsilon_{\text{red}} = \frac{\epsilon_b/e_{ij}}{(\epsilon_b/e_{ij} + c)} \quad c > 0, \quad (11)$$

$$\Omega_{\text{red}} = \Omega_{ij}, \quad (12)$$

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} 变化比较缓慢. 基于这点可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 $\langle \sigma v \rangle$.

$$\langle \sigma v \rangle_{ij} = 2.1716 \times 10^{-8} \frac{\gamma_{ij}}{g_i \sqrt{T_e}} \exp\left(\frac{-e_{ij}}{T_e}\right) (\text{cm}^3/\text{s}), \quad (13)$$

$$\gamma_{ij} = \int_0^\infty \Omega_{ij} \exp(-\epsilon_b/T_e) d(\epsilon_b/T_e), \quad (14)$$

式中 T_e 为自由电子温度, 以 Ryd 为单位. γ_{ij} 为温度 T_e 的函数, 称为有效碰撞强度. 在 (9)–(12) 式中分别用 T_e , γ_{ij} , T_{red} , γ_{red} 代替 ϵ_b , Ω_{ij} , ϵ_{red} , Ω_{red} , 可得与 $\gamma_{ij}(T_e)$, $T_e \in (0, \infty)$ 对应的曲线 $\gamma_{\text{red}}(T_{\text{red}})$, $T_{\text{red}} \in (0, 1)$. 与 $\Omega_{\text{red}}(\epsilon_{\text{red}})$ 一样, $\gamma_{\text{red}}(T_{\text{red}})$ 曲线变化也较缓慢. 因此这样两条曲线都可用 5 个点 (0, 0.25, 0.5, 0.75, 1) 的函数值刻画出来, 其他点的函数值相当精确地由内插^[8]得到. 事实上从上述普通平面到约化平面变换公式以及 (13) 和 (14) 式, 可证明 Ω_{red} 和 γ_{red} 在区域两端的值相同, 即 $\Omega_{\text{red}}(0) = \gamma_{\text{red}}(0)$, $\Omega_{\text{red}}(1) = \gamma_{\text{red}}(1)$, 于是刻画两条曲线的 10 个参数可减少到 8 个参数.

3 结果讨论

我们的计算以扭曲波方法为主, 辅之以平面波方法. 用 ACDW(9) 程序计算了 Au^{q+}

($q=47, 55$) 的碰撞强度. 每条碰撞强度曲线有 8 个能量点. 选取的能量点为 $\epsilon' = 0.001, 0.003, 0.008, 0.04, 0.1, 0.21, 0.41, 0.75$, 实际上散射电子能量为 $\epsilon_b = Z_{\text{eff}}^2 \epsilon'$, 其中 $Z_{\text{eff}} = Z - \frac{5}{6}(N-1)$. 这批计算数据与 Zhang 和 Sampson 等人^[9]的数据作了比较^[6]. 对于类镍金基态的跃迁 $3l - n'l'$ ($n'=4, 5$), 大部分数据符合较好, 差别在 (20—30)% 以内, 这种差别主要来自组态相互作用, 其次是剩余的相对论效应 (即相对论修正未包括的部分) 和数值计算误差. 之所以把这些数据差别主要归结为组态相互作用, 是从类铜金数据比较中看到的. 对于类铜金基态跃迁 $4l - 5l'$, 除了 $4s - 5p$ 过程的 $\Omega^{\text{our}}(\epsilon' = 0.04) = 5.67 \times 10^{-3}$, $\Omega^{\text{Zhang}}(\epsilon' = 0.04) = 6.86 \times 10^{-3}$, 其差别超过 10% 外, 其余数据符合很好, 差别在 10% 以内. 这里类铜离子基态跃迁没有组态相互作用, 数据差别 (包括计算误差在内) 很小. 这反映了剩余相对论效应是不大的.

现在讨论散射电子能量高的区域 (简称高能区) 的碰撞强度. 众所周知, 在高能区如果扭曲波方法没有分波收敛困难, 那么它的碰撞强度应该与平面波碰撞强度一致. 虽然平面波方法不适合中低能区, 但是它适合高能区, 且简单易行、物理图象清晰、具有独特的优越性. 平面波碰撞强度为

$$\Omega(\epsilon_b) = \frac{8g_i}{\Delta E} \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} f(k) d \ln k, \quad (15)$$

式中为了方便, 省略了碰撞强度和广义振子强度的下标 ij , 并令 $\Delta E = e_{ij}$. 动量转移的上下限分别为 $k_{\max} = k_a + k_b$ 和 $k_{\min} = k_a - k_b$. 对于光学允许跃迁 $f^{\text{opt}} \neq 0$ 和 ϵ_b 较大的情况, 可以在广义振子强度曲线上确定两点 a, b ($0 < a < b$), 使其满足 $f(a) = f^{\text{opt}}, f(k \geq b) = 0$, 于是定义一个 k_0 , 使得 f^{opt} 从 a 到 k_0 的矩形积分面积等于被积函数 $f(k)$ 从 a 到 b 的积分面积. 从而得到 Bethe 理论的近似公式^[10, 11],

$$\Omega(\epsilon_b) = \frac{4f^{\text{opt}}g_i}{\Delta E} \ln \left(\frac{k_0}{k_{\min}} \right)^2 = \frac{4f^{\text{opt}}g_i}{\Delta E} \ln \frac{x\eta(x)}{\Delta E/4k_0^2}, \quad (16)$$

式中最后一步是将 $k_{\min} = \Delta E / (2\sqrt{\epsilon_b \eta(x)})$ 代入得到的, 其中

$$x = \epsilon_b / \Delta E, \quad \eta(x) = \left[2x \left(\sqrt{1 + \frac{1}{x}} - 1 \right) \right]^{-2} = 1 + \frac{1}{2x} + O\left(\frac{1}{x^2}\right),$$

当 $x \gg 1$ 时, $\eta(x) \rightarrow 1$, 碰撞强度随 ϵ_b 对数上升. 当 $x \rightarrow \infty$ 时, (16) 式退化为 (7) 式.

现在对平面波近似适用范围作进一步讨论. 通常认为入射电子能量比束缚电子激发能 (或电离能) 大得多时, 激发 (或电离) 是个快过程, 电子的波函数来不及接受原子场的影响, 可以作平面波近似, 其中半定量判据往往是 $x > 10$. 此外, 我们认为还需要附加一个半定量判据, 这是由于对 Ω 贡献主要来自小角度散射的低动量转移的部分, 必须要求 x 足够大, 使得 $k_{\min}$ 足够小. 为此, 对于 ξ 值较大的情况引出半定量判据, 即

$$\frac{k_0}{k_{\min}} > 2 \quad \text{或者} \quad x > 4\xi \quad (\xi = \Delta E / 4k_0^2).$$

另一方面, 为了所定义的 k_0 值有效, 要求 $k_{\max}$ 足够大, 这就对于 ξ 较小的情况引出半定量判据, 即

$$\frac{k_{\max}}{k_0} > 2 \quad \text{或者} \quad x > \frac{1}{4\xi} \quad (k_{\max} \approx 2\sqrt{x\Delta E}).$$

因此,平面波近似适用范围应为

$$\begin{aligned} x &> \max(10, 4\xi) && \text{对于 } \xi > 1 \text{ 的情况,} \\ x &> \max(10, \frac{1}{4\xi}) && \text{对于 } \xi < 1 \text{ 的情况.} \end{aligned} \quad (17)$$

与(16)式相应的约化碰撞强度为

$$\Omega_{\text{red}}(\epsilon_b) = \frac{4f^{\text{opt}}g_i}{\Delta E} \frac{\ln(k_0/k_{\min})^2}{\ln\left(\frac{\epsilon_b}{\Delta E} + e\right)}, \quad (18)$$

或者写为

$$y(x) \equiv \frac{\Omega_{\text{red}}(x)}{\Omega_{\text{red}}(x=\infty)} = \frac{\ln \frac{x\eta(x)}{\xi}}{\ln(x+e)}, \quad (19)$$

式中 $\Omega_{\text{red}}(x=\infty) = \frac{4f^{\text{opt}}g_i}{\Delta E}$, ξ 参变量只与跃迁过程有关. 为了方便, 先讨论 $\eta=1$ 时 $y(x)$ 的行为.

图 1 示出约化碰撞强度比值 y 随散射电子能量 x (以激发能为单位) 的变化. 实线是用(19)式严格计算的, 虚线是在(19)式中取 $\eta(x)=1$ 近似计算的, 各 8 条曲线. 这些曲线按照由上而下的次序排列, 相应的 ξ 值分别为 0.1, 0.25, 0.5, 0.8, 1.0, 2.0, 4.0, 8.0. 前 4 条曲线 $\xi < 1$, 在 $\eta(x)=1$ 近似下, y 随 x 增加先上升后下降, 其中所经过的极大值可由 $\frac{dy}{dx}=0$ 得到, x_0 和 y_0 满足如下关系式:

$$\xi \equiv x_0(x_0+e)^{-\frac{x_0+e}{x_0}}, \quad y_0 = \frac{x_0+e}{x_0}, \quad (20)$$

x_0 和 y_0 完全由 ξ 值决定. 后 4 条曲线 $\xi \geq 1$, 在 $\eta(x)=1$ 近似下, y 随 x 增加单调上升. 在平面波近似的适用范围 ($x > x_{\min}$, $x_{\min} = \max(10, 4\xi)$) 内, $\eta(x) \neq 1$ 的曲线与 $\eta(x)=1$ 近似曲线趋于一致, 其中 $\xi < 1$ 的曲线的极大值不明显. 每条曲线的 $y(x_{\min})$ 值基本上反应了高能区的约化碰撞强度最大的相对变化. 当 $x \gg e$ 时,

$\frac{dy}{dx} = \frac{1}{x \ln^2 x} \ln \xi$, $\frac{dy}{dx}$ 符号由 ξ 值决定. $\xi > 1$, y 的斜率为正, $y(x)$ 随 x 增加而上升. $\xi < 1$, y 的斜率为负, $y(x)$ 随 x 增加而下降. 当 $x \rightarrow \infty$ 时, 所有不同 ξ 值的曲线的 y 都趋于 1. 就 Au^{q+} ($q=47, 55$) 的成

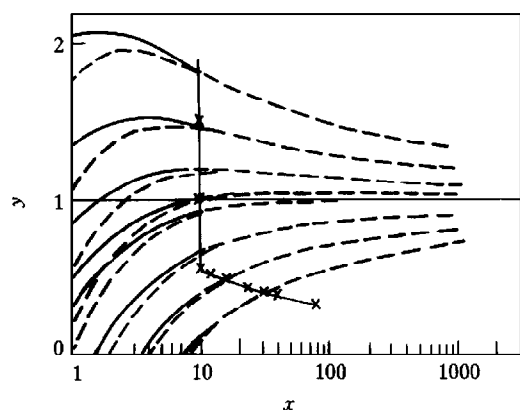


图 1 约化碰撞强度比值 y 随散射电子能量 x (以激发能为单位) 的变化. 实线为 $\eta(x) \neq 1$ 的结果; 虚线为 $\eta(x)=1$ 的结果. 由上而下曲线的 ξ 值分别为 0.1, 0.25, 0.5, 0.8, 1.0, 2.0, 4.0, 8.0. $\times - \times - \times$ 线右侧 (或右上侧) 为平面波近似的适用范围

千上万的激发过程而言, 绝大多数过程的 ξ 值在 0.2—5 之间, 由图 1 看到, 高能区中这些过程的 y 值变化幅度(约在 1 附近上下两倍的范围内)不大.

表 1 给出 $4p-5s, 5p, 5d$ 和 $4s-np$ ($n=4, 7$) 的样条值, 由表 1 可看到, 当 ϵ_{red} 较大时, 对于光学允许跃迁: $\xi < 1$, Ω_{red} 随 ϵ_{red} 上升而下降, $\xi > 1$, Ω_{red} 随 ϵ_{red} 上升而上升. 这与前面阐述的 $y(x)$ 随 x 的变化规律一致; 对于光学禁戒跃迁: Ω_{red} 随 ϵ_{red} 增加而趋于常数. 约化的有效碰撞强度 γ_{red} 与约化的碰撞强度 Ω_{red} 有类似的变化规律. 利用 5 点样条值进行内插, 可得任意能量的碰撞强度和任意温度的有效碰撞强度或速率系数. 这里除了很低能区的碰撞强度由于扭曲波方法不够精确以及外推阈值误差较大外, 其他区域计算和拟合误差(典型拟合误差为 (1—2)%) 都较小.

图 2 至图 5 都是对 Au^{q+} ($q=47, 55$) 离子的不同跃迁过程给出的曲线. 图 2(a) 和 (b) 和图 3(a) 和 (b) 分别示出 $3d-4f$ 和 $4p-5d$ 激发过程的碰撞强度和速率系数变化, $3d-4f$ 曲线由上而下(以下均如此考虑) q 的排序大致为 47—55, $4p-5d$ 曲线的 q 排序为 55—47. 鉴于有效碰撞强度是从碰撞强度过渡到速率系数的一个重要物理量, 我们用两张图展示有效碰撞强度随温度和 q 的变化. 图 4 的前三组曲线为 $\Delta n=0$ 的 $4s-4p, 4p-4d, 4d-4f$ 光学允许跃迁, q 值为 47—55. 后三组曲线为 $\Delta n=1$ 的 $3d-4f, 3p-4d, 3s-4p$ 光学允许跃迁, q 值为 55—47. 这里 $\Delta n=0$ 比 $\Delta n=1$ 的有效碰撞强度大 1—3 个数量级, 且 q 次序不同. 图 5 中, 有两组曲线随温度上升而上升, 它们是光学允许跃迁 $4p-5d$ 和 $4p-5s$. 第一组 q 为 55—47, 第二组 q 为 47—55, 另外一组曲线随温度变化小, 它是光学禁戒跃迁 $4p-5p$, q 为 47—55. 这里需要强调的是, 上述表和图的数据都是对单电子而言的.

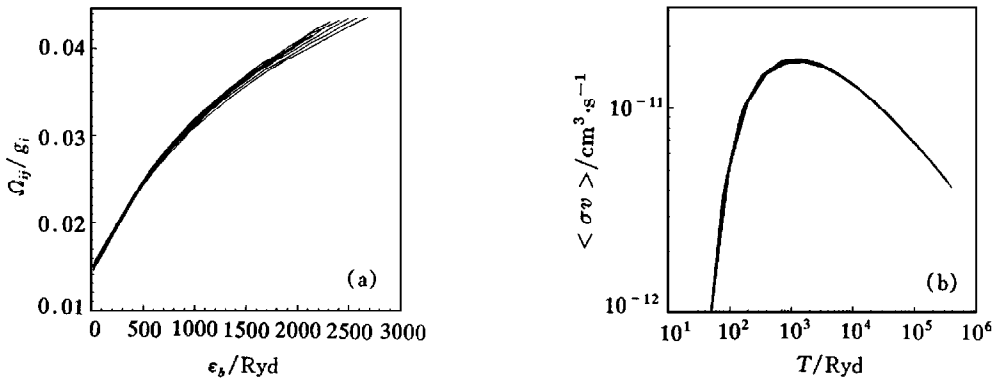


图 2 Au^{q+} ($q=47, 55$) $3d-4f$ (a) 为碰撞强度 Ω_{ij}/g_i ($g_i=9$) 随散射电子能量 ϵ_b 变化, 曲线由上而下大致相应于 $q=47-55$; (b) 为速率系数 $\langle \sigma v \rangle$ 随电子温度 T 的变化, 曲线由上而下大致相应于 $q=47-55$

综观全部曲线, 可以看到以 Au^{51+} 类镍金为中心的荷电离子, 在向高或低电离度各延伸 4 种离子时, 不管单电子碰撞强度、有效碰撞强度、还是速率系数随电离度 q 的变化都是缓慢的, 幅度不大, 差别均在 10% 以内. 在实际的高温等离子体中, 对于一定的电子温度和密度, 通常有一种最大布居数离子和数种相邻的电离度离子, 在这种情况下, 各种离子的碰撞激发参数可使用最大布居数离子的参数, 以 Au^{51+} 为例, 在它周围 8 种电离度离

子的激发参数变化都在 10% 以内, 这对于使用平均原子(AA)模型模拟等离子体的动理学过程十分有利.

表 1 Au^{q+} 离子的部分约化碰撞强度和约化有效碰撞强度的样条值以及 k_0 , ξ , e_{ij} 和 c 值

过程	q	ξ	e_{ij}	c	Ω_{red}	Ω_{red}	Ω_{red}
					(0.25)	(0.5)	(0.75)
4p—5s	51	3.342	72.96	2.651	1.300×10^{-2}	1.811×10^{-2}	2.717×10^{-2}
4p—5p	51		80.35	3.972	1.065×10^{-1}	1.124×10^{-1}	1.154×10^{-1}
4p—5d	51	3.710	88.43	2.465	1.988×10^{-2}	2.776×10^{-2}	4.312×10^{-2}
4s—4p	55	0.2308	15.65	5.308	0.5548	0.4298	0.3832
	51	0.2432	15.35	5.087	0.6022	0.4612	0.4116
	47	0.2537	15.24	4.836	0.6246	0.4832	0.4404
4s—5p	55	4.461	104.4	2.418	3.460×10^{-3}	5.182×10^{-3}	9.282×10^{-3}
	51	4.393	95.70	2.394	3.680×10^{-3}	5.172×10^{-3}	9.096×10^{-3}
	47	4.407	90.03	2.341	3.754×10^{-3}	5.060×10^{-3}	8.864×10^{-3}
4s—6p	55	3.122	150.3	2.122	8.854×10^{-4}	1.308×10^{-3}	2.254×10^{-3}
	51	3.130	136.8	2.107	9.352×10^{-4}	1.330×10^{-3}	2.256×10^{-3}
	47	3.267	127.2	2.072	9.530×10^{-4}	1.300×10^{-3}	2.248×10^{-3}
4s—7p	55	2.644	177.2	2.007	3.778×10^{-4}	5.472×10^{-4}	9.286×10^{-4}
	51	2.676	160.6	1.996	3.978×10^{-4}	5.590×10^{-4}	9.328×10^{-4}
	47	2.836	148.5	1.967	4.082×10^{-4}	5.498×10^{-4}	9.380×10^{-4}

过程	γ_{red}	γ_{red}	γ_{red}	γ_{red}	γ_{red}
	(0)	(0.25)	(0.5)	(0.75)	(1.0)
4p—5s	1.025×10^{-2}	1.288×10^{-2}	1.717×10^{-2}	2.557×10^{-2}	3.902×10^{-2}
4p—5p	9.930×10^{-2}	1.052×10^{-1}	1.107×10^{-1}	1.142×10^{-1}	1.183×10^{-1}
4p—5d	1.713×10^{-2}	1.989×10^{-2}	2.621×10^{-2}	4.046×10^{-2}	6.786×10^{-2}
4s—4p	0.8980	0.5452	0.4124	0.3730	0.3134
	0.9546	0.5908	0.4434	0.4006	0.3374
	0.9770	0.6166	0.4678	0.4274	0.3540
4s—5p	3.204×10^{-3}	3.518×10^{-3}	4.956×10^{-3}	8.654×10^{-3}	1.577×10^{-2}
	3.628×10^{-3}	3.740×10^{-3}	4.962×10^{-3}	8.480×10^{-3}	1.546×10^{-2}
	3.988×10^{-3}	3.830×10^{-3}	4.848×10^{-3}	8.262×10^{-3}	1.511×10^{-2}
4s—6p	8.092×10^{-4}	8.988×10^{-4}	1.253×10^{-3}	2.096×10^{-3}	3.588×10^{-3}
	9.136×10^{-4}	9.518×10^{-4}	1.275×10^{-3}	2.098×10^{-3}	3.618×10^{-3}
	9.926×10^{-4}	9.742×10^{-4}	1.260×10^{-3}	2.086×10^{-3}	3.618×10^{-3}
4s—7p	3.562×10^{-4}	3.840×10^{-4}	5.258×10^{-4}	8.626×10^{-4}	1.435×10^{-3}
	4.020×10^{-4}	4.062×10^{-4}	5.364×10^{-4}	8.672×10^{-4}	1.464×10^{-3}
	4.678×10^{-4}	4.166×10^{-4}	5.330×10^{-4}	8.704×10^{-4}	1.479×10^{-3}

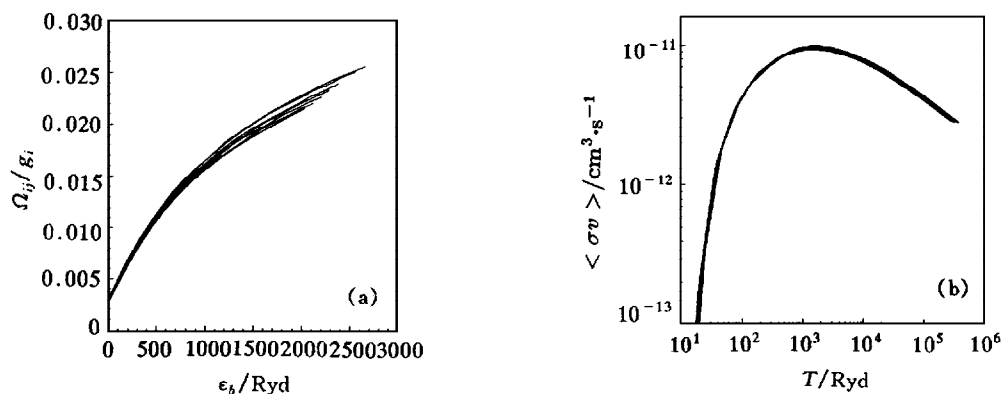


图3 Au^{q+} ($q=47, 55$) $4p-5d$ (a) 为碰撞强度 Ω_{ij}/g_i ($g_i=6$) 随散射电子能量 ϵ_b 变化, 曲线由上而下依次相应于 $q=55-47$; (b) 为速率系数 $\langle \sigma v \rangle$ 随电子温度 T 的变化, 曲线由上而下大致相应于 $q=55-47$

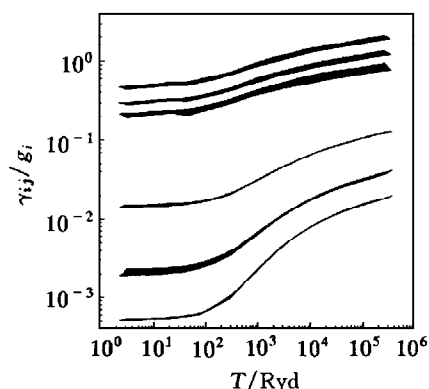


图4 Au^{q+} ($q=47, 55$) $nl-4(l+1)$ ($n=3, 4$, $l=0, 1, 2$) 光学允许跃迁的有效碰撞强度 γ_{ij}/g_i ($g_i=(4l+2)$) 随电子温度 T 的变化. 由上而下前三组 $\Delta n=0$, 分别表示 $4s-4p$, $4p-4d$, $4d-4f$, 每组的 $q=47-55$; 后三组 $\Delta n=1$, 分别表示 $3d-4f$, $3p-4d$, $3s-4p$, 每组的 $q=55-47$

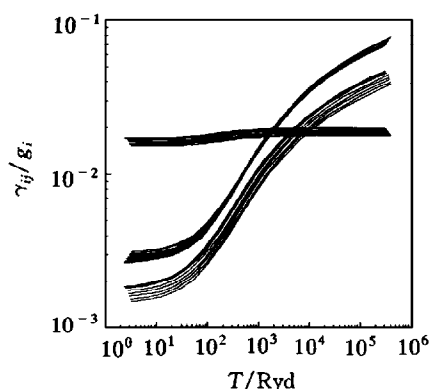


图5 Au^{q+} ($q=47, 55$) $4p-5l$ ($l=0, 1, 2$) 激发过程的有效碰撞强度 γ_{ij}/g_i ($g_i=6$) 随电子温度 T 变化, 左端上、中、下三组曲线分别为 $4p-5p$, $4p-5d$, $4p-5s$; 上、下两组曲线的 q 值分别为 $47-55$; 中间一组曲线的 q 值分别为 $55-47$

令 $N(q)$ 为电离度 q 的离子数, $\alpha = \langle \sigma v \rangle$, 则

$$\alpha_{ij}^{\text{AA}} = \frac{\sum_q N(q) w_i(q) (1 - \bar{P}_j(q)) \alpha_{ij}^{\text{DCA}}(q)}{N \bar{w}_i (1 - \bar{P}_j)}, \quad (21)$$

式中上标 AA 为平均原子模型, DCA 为细致组态模型, 即上述研制激发参数所使用的模型. 下标 ij 为跃迁过程, 可以为 $nl-n'l'$, 也可以为 $n-n'$, α_{nn}^{DCA} 由 $\alpha_{nl-n'l'}^{\text{DCA}}$ 加权平均得到.

$N = \sum_q N(q)$ 为离子总数, $\bar{w}_i = \frac{1}{N} \sum_q N(q) w_i(q)$ 为 i 壳层平均电子占据数, $(1 - \bar{P}_j)$ 为 j 壳层平均空穴概率. 由于上述原因, 可假定不同电离度离子的单电子速率系数都近似取为

最大布居数离子的 α_{ij}^{DCA} . 这样 α_{ij}^{DCA} 可提到求和号外, 一般 $w_i(q)$ 与 $(1 - P_j(q))$ 乘积的平均不等于各自平均的乘积. 因此 $\frac{1}{N} \sum_q N(q) w_i(q) (1 - P_j(q))$ 需要利用二项式分布公式 (即从平均电子占据数得到细致组态离子分布概率的近似公式) 求出. 但是在大多数情况下, 空穴占据概率为 1, 于是得

$$\alpha_{ij}^{\text{AA}} = \alpha_{ij}^{\text{DCA}}. \quad (22)$$

- [1] R.D.Cowan, The Theory of Atomic Structure and Spectra (University of California Press, Berkely, 1981), p. 201, 432.
- [2] 方泉玉、李 萍等, 物理学报, **44**(1995), 1703.
- [3] 蔡 蔚、方泉玉等, 强激光与粒子束, **7**(1995), 442.
- [4] 方泉玉、沈智军等, 强激光与粒子束, **6**(1994), 607.
- [5] 方泉玉、蔡 蔚等, 物理学报, **45**(1996), 1641.
- [6] 方泉玉、蔡 蔚等, 计算物理, **13**(1996), 415.
- [7] A. Burgess, M. C. Chidichimo *et al.*, *J. de Physique* IV, Colloque C1, Supplement au *J. de Physique* II, **1**(1991), C1-303.
- [8] A. Burgess, H. E. Mason and J. A. Tully, *Astronomy and Astrophysics*, **217**(1989), 319.
- [9] Hong Lin Zhang, D. H. Sampson and C. J. Fontes, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **48**(1991), 91.
- [10] M. Inokutt, *Rev. Mod. Phys.*, **43**(1971), 297.
- [11] 田伯刚、李家明, 物理学报, **35**(1986), 203.

EXCITATION COLLISION STRENGTH AND RATE COEFFICIENT OF Au^{q+} ($q = 47, 55$) IONS BY ELECTRON IMPACT

FANG QUAN-YU CAI WEI ZOU YU LI PING XU ZHI-JIN

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

(Received 22 May 1996; revised manuscript received 17 September 1996)

ABSTRACT

The collision strength of excitation among configuration-average levels by electron impact in Au^{q+} ($q = 47, 55$) ions are computed systematically by using the quasirelativistic distorted-wave (QRDW) methods. We discuss the behavior of the collision strengths in high energy range and applicable condition of the plane-wave approximation. It is shown that the QRDW method can reproduce major relativistic effects as compared with the fully relativistic distorted wave results of Zhang and Sampson *et al.* In this paper the collision strength are scaled and fitted with a least-square spline method. As a result thermal average rate coefficients in the entire range can be determined by five parameters for one transition process. We also offers some typical curves which demonstrate the variation of the collision strengths with electron energy and the variation of effective collision strengths and rate coefficients with electron temperature. The result shows that the discrepancy of single electron excited data of eight kinds of ions around Ni-like gold is lower than 10%. This is very favorable for the average atom (AA) model which simulates dynamics process in thermal plasma.

PACC: 3480B