

《中高 Z 元素原子、离子的电子碰撞电离与激发截面快速计算方法》的补充材料

周旭¹⁾²⁾³⁾ 王川¹⁾²⁾³⁾ 胡荣豪^{1)2)3)†} 陶冶豪¹⁾²⁾³⁾ 邓小良⁴⁾ 梁亦寒^{4)‡}

李晓亚⁴⁾ 吕蒙^{1)2)3)††} 祝文军⁴⁾

1) (四川大学物理学院, 成都 610064)

2) (高能量密度物理及技术教育部重点实验室, 成都 610065)

3) (辐射物理及技术教育部重点实验室, 成都 610065)

4) (中国工程物理研究院流体物理研究所, 绵阳 621000)

补充材料 A: 插值/拟合处理

碰撞强度与入射电子能量的函数关系是相当平滑的, 这意味着在截面的实际计算中, 常常只在几个最能反映曲线特征的能量点进行详细计算, 其他能量处的数据可以基于这些点的数据得到。FAC 的计算方案: 以跃迁前后的能量变化 (能级差) ΔE 为基准, 在 $0.05\Delta E$ — $8\Delta E$ 区间内取 6 个出射电子能量点进行详细计算, 在该区间内的数据由这 6 个数据点基于三阶 Akima 插值得到, 在区间外的数据按照固定的拟合公式得到 (见补充材料 B)。事实上, FAC 提供的原始数据只包含这 6 个能量点及对应的截面数据和附加信息, 其余能量处的数据需要经过进一步处理才能得到。

本研究关注的入射电子能量范围为 0—150 keV, 这足以使 Ta 原子的 1s 电子亚层电离或激发 (Ta 的 1s 电离能范围: 67—78 keV), 相比之下, Ta 原子的电离能最低的电子亚层为 5d 亚层, 电离能范围为 6—46 eV, 二者相差 4 个数量级。相应地, FAC 提供的原始数据的能量点也跨越 4 个数量级, 这给不同电子亚层的截面数据求和造成困难。可以在 0—150 keV 范围内选取一系列固定的能量点, 在新的能量网格上对原始数据统一进行重新插值拟合。

考虑到最低的电离能量仅有几个 eV, 而最高的电离能量达到几十个 keV, 因此, 能量点的分布应该在低能量段密集, 在高能量段稀疏。我们使用对数分布来描述原始数据的能量尺度变化。设重新插值后有 $k+1$ 个能量点, 最大的能量值 $E_{\max} = 150$ keV, 则第 i 个出射能量点为

$$E_i = E_{\min} \exp \left[\ln \left(\frac{E_{\max}}{E_{\min}} \right) \times \frac{i-1}{k} \right], \quad (\text{A1})$$

取 $E_{\min} = 1 \text{ eV}$ 。考虑到存储空间的限制、低能量段的数据损失与 Akima 插值方法的特点，这里取 $k = 30$ 。

对于碰撞激发截面，截面随能量增加呈指数式下降，这使得相邻数据点连线斜率变化过大，可导致 Akima 插值出现病态结果。由此，先对截面数据取对数的方法消除病态，即对纵坐标作如下坐标变换：

$$y = \sigma \rightarrow y = \ln(\sigma + \varepsilon), \quad (\text{A2})$$

为了避免截面为 0 的情况，在截面上加一个很小的值 ε ，后续可以通过 $y \rightarrow \exp(y) - \varepsilon$ 的变换复原。

设入射电子能量为 E_0 ，基于原始能量点插值/拟合得到的截面记为 $\sigma_{\text{原}}(E_0)$ ，基于新能量点插值得到的截面记为 $\sigma_{\text{新}}(E_0)$ ，则可以用二者之间的偏差 $\text{RD} = \frac{\sigma_{\text{新}} - \sigma_{\text{原}}}{\sigma_{\text{新}}} \times 100\%$ 评估重新插值对于原始数据的保留程度。用 Ta 原子(电子组态 $[\text{Xe}]6s^24f^14d^3$)的 s 电子亚层(1s—6s)的部分截面数据对碰撞电离和碰撞激发的重新插值效果进行了评估，如图 S1 所示。

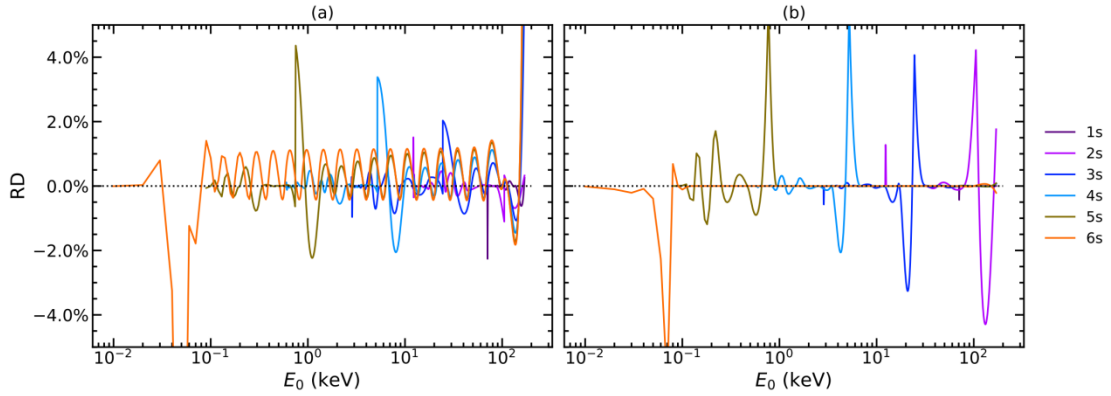
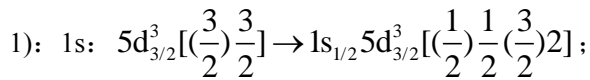


图 S1 重新插值的偏差评估 (a) 碰撞电离; (b) 碰撞激发

Fig. S1. Deviation evaluation of re-interpolation: (a) Collisional ionization; (b) collisional excitation.

在图 S1(a)和图 S1(b)中分别使用了 6 个 DLA 反应道的数据，分别为



$$\begin{aligned}
 2s: & 5d_{3/2}^3[(\frac{3}{2})\frac{3}{2}] \rightarrow 2s_{1/2}5d_{3/2}^3[(\frac{1}{2})\frac{1}{2}(\frac{3}{2})1]; \\
 3s: & 5d_{3/2}^3[(\frac{3}{2})\frac{3}{2}] \rightarrow 3s_{1/2}5d_{3/2}^3[(\frac{1}{2})\frac{1}{2}(\frac{3}{2})1]; \\
 4s: & 5d_{3/2}^3[(\frac{3}{2})\frac{3}{2}] \rightarrow 4s_{1/2}5d_{3/2}^3[(\frac{1}{2})\frac{1}{2}(\frac{3}{2})1]; \\
 5s: & 5d_{3/2}^3[(\frac{3}{2})\frac{3}{2}] \rightarrow 5s_{1/2}5d_{3/2}^3[(\frac{1}{2})\frac{1}{2}(\frac{3}{2})1]; \\
 6s: & 5d_{3/2}5d_{5/2}^2[(\frac{3}{2})\frac{3}{2}(0)\frac{3}{2}] \rightarrow 5d_{3/2}^36s_{1/2}[(\frac{3}{2})\frac{3}{2}(\frac{1}{2})1]; \\
 2): & 1s: 5d_{3/2}^3[(\frac{3}{2})\frac{3}{2}] \rightarrow 1s_{1/2}5d_{3/2}^37s_{1/2}[(\frac{1}{2})\frac{1}{2}(\frac{3}{2})2(\frac{1}{2})\frac{3}{2}]; \\
 & 2s: 5d_{3/2}^3[(\frac{3}{2})\frac{3}{2}] \rightarrow 2s_{1/2}5d_{3/2}^37s_{1/2}[(\frac{1}{2})\frac{1}{2}(\frac{3}{2})1(\frac{1}{2})\frac{1}{2}]; \\
 & 3s: 5d_{3/2}^3[(\frac{3}{2})\frac{3}{2}] \rightarrow 3s_{1/2}5d_{3/2}^37s_{1/2}[(\frac{1}{2})\frac{1}{2}(\frac{3}{2})1(\frac{1}{2})\frac{1}{2}]; \\
 & 4s: 5d_{3/2}^3[(\frac{3}{2})\frac{3}{2}] \rightarrow 4s_{1/2}5d_{3/2}^37s_{1/2}[(\frac{1}{2})\frac{1}{2}(\frac{3}{2})1(\frac{1}{2})\frac{1}{2}]; \\
 & 5s: 5d_{3/2}^3[(\frac{3}{2})\frac{3}{2}] \rightarrow 5s_{1/2}5d_{3/2}^37s_{1/2}[(\frac{1}{2})\frac{1}{2}(\frac{3}{2})1(\frac{1}{2})\frac{1}{2}]; \\
 & 6s: 5d_{5/2}^3[(\frac{5}{2})\frac{5}{2}] \rightarrow 5d_{3/2}5d_{5/2}^26s_{1/2}7s_{1/2}[(\frac{3}{2})\frac{3}{2}(4)\frac{7}{2}(\frac{1}{2})4(\frac{1}{2})\frac{7}{2}].
 \end{aligned}$$

方括号内显示耦合角动量大小及顺序，圆括号内是对应相对论性电子亚层（按照主量子数 n 、轨道角动量量子数 l 、总角动量量子数 j 区分）的总角动量，圆括号外是依顺序的耦合总角动量。如图 S1 所示，对于碰撞电离和碰撞激发，偏差值在绝大多数能量段都在 $\pm 2\%$ 以内，表明重新插值以比较高的准确度保留了原始数据的信息。

补充材料 B: 拟合公式

对于能量网格范围外的碰撞电离截面，FAC 采用以下拟合公式：

$$\sigma = \frac{1}{2J_0 + 1} \frac{1}{2E_0 + \alpha^2 E_0^2} \times \frac{p_0 E_0^3 \ln(E_0 / E_{th}) + p_1 E_0 E^2 + p_2 E_0 E_{th} E + p_3 E_{th}^2 E}{E_0^3}, \quad (\text{B1})$$

其中, p_0, p_1, p_2, p_3 为拟合参数 (由 FAC 提供), E_0, E 和 E_{th} 分别为入射电子能量、出射电子能量和反应阈能 (能级差), α 为精细结构常数, J_0 为初态能级的总角动量, 所有物理量均为原子单位制。

对于能量网格范围外的碰撞激发截面, FAC 提供以下渐近公式:

$$\sigma = \frac{1}{2J_0 + 1} \frac{1}{2E_0 + \alpha^2 E_0^2} \Omega, \quad (\text{B2})$$

其中, 对于容许跃迁:

$$\Omega = B_0 B_1 \left[\text{Born} + \frac{E_{i0} + E_{(n)}}{E_{i0} + E} \left(\frac{\Omega_{(n)}}{b_0 b_1} - \text{Bethe} \times b \right) + \text{Bethe} \times B \right]. \quad (\text{B3})$$

对于禁戒跃迁:

$$\Omega = \text{Born} + \frac{E_{i0} + E_{(n)}}{E_{i0} + E} \left(\frac{\Omega_{(n)}}{b_0 b_1} - \text{Born} \right), \quad (\text{B4})$$

式中,

$$\left\{ \begin{array}{l} B_0 = 1 + \alpha^2 E_0, \\ B_1 = 1 + \alpha^2 E, \\ b_0 = 1 + \alpha^2 E_{0(n)}, \\ b_1 = 1 + \alpha^2 E_{(n)}, \\ B = \ln \left(\frac{2E_0 + \alpha^2 E_0^2}{2E_{th}} \right) - \frac{\alpha^2 (2E_0 + \alpha^2 E_0^2)}{1 + \alpha^2 (2E_0 + \alpha^2 E_0^2)}, \\ b = \ln \left(\frac{2E_{0(n)} + \alpha^2 E_{0(n)}^2}{2E_{th}} \right) - \frac{\alpha^2 (2E_{0(n)} + \alpha^2 E_{0(n)}^2)}{1 + \alpha^2 (2E_{0(n)} + \alpha^2 E_{0(n)}^2)}, \end{array} \right. \quad (\text{B5})$$

其中, Born 和 Bethe 为拟合参数 (由 FAC 给出), 特征能量 E_{i0} 亦由 FAC 给出。 $E_{0(n)}$, $E_{(n)}$ 和 $\Omega_{(n)}$ 分别为原始数据网格中最后一个点对应的入射电子能量、出射电子能量和碰撞强度。