

含温有界原子模型下电子与离子碰撞激发 和电离截面的理论研究^{*}

田明锋[†] 孟续军 朱希睿 姜 昊 王志刚

(北京应用物理与计算数学研究所, 计算物理实验室, 北京 8009 信箱 100088)

(2005 年 1 月 7 日收到, 2005 年 3 月 2 日收到修改稿)

采用扭曲波玻恩交换近似方法, 在自由原子模型下计算了电子与离子碰撞激发、电离截面, 计算值与实验一致, 在含温有界平均原子模型下, 系统研究了不同温度、密度等离子体中离子的电子碰撞直接电离截面, 发现由于温度、密度效应导致离子的能级漂移, 引起等离子体中离子的碰撞电离截面比自由原子情形发生较大变化。

关键词: 平均原子模型, 扭曲波波恩交换近似, 电离截面

PACC: 3480D, 3120B

1. 引 言

电子与离子碰撞过程在天体物理研究、惯性约束聚变以及辐射输运问题中具有重要意义。为了得到精确的电子数布居情况, 模拟出等离子体在各种离化度下的相对丰度, 往往需要大量的电子离子碰撞截面数据。等离子体诊断也需要大量相关的截面数据。在辐射不透明度研究领域, 电子离子碰撞的影响日益重要。因为, 电子与离子的碰撞造成了束缚态电子的激发、电离, 由之引发了电子的退激发, 再发射等多种间接过程。这些过程不仅影响能级上的电子布居数, 而且影响束缚态能级的寿命。寿命的降低增大了谱线的宽度, 加大了等离子体对光的吸收程度。在高温稀薄等离子体内部, 由于离子类型比较简单, 数目较少, 这种宽度的改变对等离子体的光吸收影响甚微。但当等离子体温度密度低到一定范围时, 等离子体内谱线的天然宽度、Doppler 宽度变得微不足道, 碰撞展宽就成为等离子体谱线吸收的主要宽度机制。这在辐射不透明度 DTA 模型中非常重要。由于等离子体中离子类型众多, 逐一计算等离子体中各种离子类型的电子离子碰撞激发、电离截面是不现实和不经济的。由于电子离子碰撞实验多在低温极稀密度下进行, 所以国内外在这方

面开展的研究大多以零温自由原子模型(FAM)为主, 给出的数据多为不含温度密度效应的细致组态数据。国外的 Younger^[1], Sampson^[2], Chen^[3]等研究组以及国内的王炎森^[4]研究组等均属这种情况。这种数据精度高、数据量大, 应用时前处理复杂。为了能够解决等离子体内部电子离子碰撞过程对谱线吸收的贡献问题, 需要研究一种快速、简单、但是完整实用的计算模式。本文首先选用含温有界平均原子模型(AAM)简化等离子体中大量的离子类型, 用一个“平均”的离子代替了众多的离子, 因而使计算等离子体中离子的电子离子碰撞激发、电离截面简洁快速, 更主要的是计算结果从最基本的微观参数方面就自动包含了温度、密度效应。在碰撞公式方面采用了扭曲波波恩交换近似方法。在本文中, 所有公式取原子单位, 能量单位取里德堡。

2. 理论与计算公式

2.1. 含温有界原子结构

本文采用非相对论 Hartree-Fock-Slater 自洽场平均原子模型下的原子结构。在此模型下, 原子胞中的电子被分为束缚电子和自由电子, 其数密度可以写为:

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 10174010)和冲击波物理与爆轰物理国防科技重点实验室基金(批准号: 51478030203ZW0902)资助的课题。

[†] 通讯联系人。E-mail: tian_mingfeng@iapcm.ac.cn

$$\rho(r) = \rho_b(r) + \rho_f(r), \quad (1)$$

自由电子的数密度 $\rho_f(r)$ 本应由自由电子的正能态波函数来确定,但由于正能态能量、轨道量子数都是无限的,为了快速计算,采用统计的方法解决,并且具有较高的精度. 由 Fermi-Dirac 统计,自由电子数密度 $\rho_f(r)$ 可以写为^[5]:

$$\rho_f(r) = \frac{1}{\pi^2} \int_{p_0(r)}^{\infty} \frac{p^2 dp}{\exp((p^2/2 - V(r) - \mu)/T) + 1}, \quad (2)$$

其中, $V(r)$ 是自洽势, μ 是化学势, T 是温度, p 是自由电子动量, $p_0(r)$ 是自由电子的动量下限,由经典方法确定

$$p_0(r) = \sqrt{2V(r)}, \quad (3)$$

束缚电子数密度 $\rho_b(r)$ 由束缚电子的径向波函数获得,电子占据数满足 Fermi-Dirac 统计分布^[5]

$$\rho_b(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \sum_i \frac{2l_i(l_i + 1)}{\exp((\epsilon_i - \mu)/T) + 1} P_i^2(r), \quad (4)$$

其中, l_i 是角动量; ϵ_i 是单电子能级,径向波函数 $P_i(r)$ 由 Schrödinger 径向方程获得

$$\left(-\frac{d}{dr^2} + \frac{l_i(l_i + 1)}{r^2} + 2V(r) \right) P_i(r) = \epsilon_i P_i(r), \quad (5)$$

势函数 $V(r)$ 包含了电子关联修正

$$V(r) = V_c(r) + V_{ex}(r) + V_{cor}(r), \quad (6)$$

$V_c(r)$ 是通常的库仑势,由泊松方程求得. $V_{cor}(r)$ 是关联势,含温度的交换势 $V_{ex}(r)$ 由 Thomas-Fermi-Kirzhnits 模型中的含温交换势能密度对电子密度变分得到^[5],形式如下

$$V_{ex}(r) = \frac{\pi \rho(r)}{T} \left(1 + 6 \frac{\rho(r)}{T^{3/2}} + \frac{\pi^4}{3} \frac{\rho^2(r)}{T^3} \right)^{-1/3}, \quad (7)$$

该式在高温情况下,自动过渡到 Maxwell 形式

$$V_{ex}^M(r) = \frac{\pi}{T} \rho(r), \quad (8)$$

在低温情况下退化为零温交换势的 Kohn-Sham 形式^[6]

$$\lim_{T \rightarrow 0} V_{ex}(r) = \left(\frac{3}{\pi} \rho(r) \right)^{1/3}, \quad (9)$$

电子关联势 $V_{cor}(r)$ 采用零温极限下的形式^[7]

$$V_{cor}(r)$$

$$= \begin{cases} -0.0622 \ln r_s + 0.096 - 0.0049 r_s \ln r_s & (r_s \leq 1) \\ \frac{0.11294}{\rho^{1/3} + 0.1216} \rho^{1/3} & (r_s > 1) \end{cases} \quad (10)$$

上述方程组就是本文采用的含温有界原子结构的主要计算公式,它是一个积分微分方程组,通过自洽迭代计算求解.

2.2. 电子离子碰撞电离截面

在扭曲波波恩交换近似下,电子离子碰撞直接电离截面的计算公式为^[1]:

$$Q(E_i) = \int_0^{E/2} \sigma(E_e, E_i) dE_e, \quad (11)$$

其中, E 是末态出射电子和散射电子的总能量,能量微分截面 $\sigma(E_e, E_i)$ 为:

$$\sigma(E_e, E_i) = \frac{16q_b}{\pi E_i} \sum_{l_i, l_e, l_f} \frac{2L+1}{2l_b+1} I_{l_i, l_e, l_f}(E_e, E_i), \quad (12)$$

式中 l_i 、 l_e 和 l_f 分别是入射、出射和散射电子的角动量; L 是体系的总角动量; E_i 与 E_e 分别是入射电子和出射电子能量; q_b 是靶电子所在壳层的电子占据数. 其中

$$I_{l_i, l_e, l_f}(E_e, E_i) = |f|^2 + |g|^2 - \alpha |f| |g|, \quad (13)$$

f 和 g 分别是直接和交换分波散射振幅^[1], α 是干涉因子,通常采用最大干涉近似: $\alpha = 1$.

2.3. 电子离子碰撞激发截面

对于直接激发过程,如果把激发电子看作出射电子,则可以把直接激发看作与直接电离同样的跃迁过程来考虑. 直接电离过程中的出射电子的角动量可变的,并且能量连续,而直接激发过程中的激发电子的角动量和能量都是固定的,因此,只需将直接电离截面公式中对出射电子角动量的求和与对能量的积分去掉,并考虑激发电子所在壳层的电子占据数,就得到直接激发截面公式^[4]:

$$Q_{exc}(E_e, E_i) = \frac{8q_b(4l_2 + 2 - q_2)}{\pi E_i(2l_b + 1)(2l_2 + 1)} \times \sum_{l_1, l_f} (2L + 1) I_{l_1, l_f}(E_i), \quad (14)$$

其中, l_2 是激发电子的角动量, q_2 是初态时,靶电子将被激发到的壳层的电子占据数. 其余变量和函数的定义与(12)式相同. 本文考虑了直接电离和激发

自电离两个过程,那么总电离截面 Q_{tot} 可以写成:

$$Q_{\text{tot}} = \sum_d Q_d + \sum_j Q_{\text{exc}}(i \rightarrow j) B_j^a, \quad (15)$$

其中, Q_d 是不同壳层的直接电离截面, $Q_{\text{exc}}(i \rightarrow j)$ 是从初能级 i 到自电离能级 j 的激发截面, B_j^a 是能级 j 的自电离分支比. 对低 Z 元素 B_j^a 接近 1^[8], 本文把该分支比取作 1.

在数值计算中,截面值采用 5 点高斯积分公式计算,自由电子的角动量求和采取自然截断方法,即当所计算的分波的贡献低于之前所有分波贡献之和的 0.2% 时,对角动量的求和截断. 角动量求和最大到 50, 并采用简单外推法估计其余分波的贡献修正截面值,即认为其余分波的贡献是以相同的比例下降,比例因子为截断处分波贡献与上一分波贡献的比值. 经过这样截断和修正以后,得到的截面值与直接全分波计算值相比,偏差小于 1%.

3. 计算结果与讨论

由于高温稠密等离子体所处的物理条件极端,实验室很难测量含等离子体环境效应的碰撞截面. 为了检验物理方案和计算体系的可靠性,我们计算了零温自由原子模型下电子离子碰撞激发、电离的截面,并与实验数据做了比较. 零温自由原子结构数据由 Cowan 的原子结构程序包^[9]算得. 我们用上面的截面计算公式计算了自由原子模型下碳 3 价离子和氧 5 价离子 $2s-2p$ 跃迁的直接激发截面,如图 1、图 2 所示,计算结果与实验基本一致. 接着,计算了氧 5 价离子和氩 7 价离子的总电离截面. 总截面取直接电离截面和直接激发截面之和. 如图 3、图 4 所示,计算结果与实验符合得也较好. 通过这些算例表明本文的电子离子碰撞激发、电离截面计算程

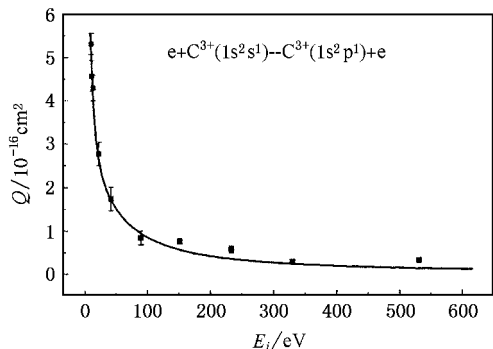


图 1 碳 3 价离子 $2s-2p$ 跃迁的直接激发截面 实线是本文的计算值; ■ 是实验值^[10]

序是准确可靠的.

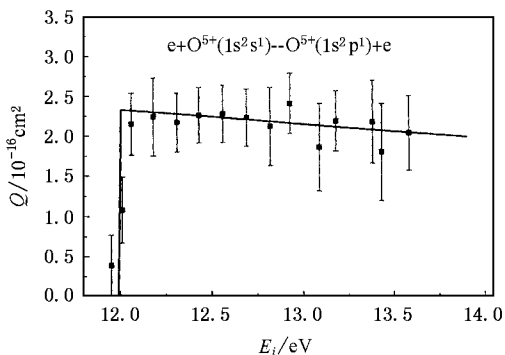


图 2 氧 5 价离子 $2s-2p$ 跃迁的直接激发截面 实线是本文的计算值; ■ 是实验值^[11]

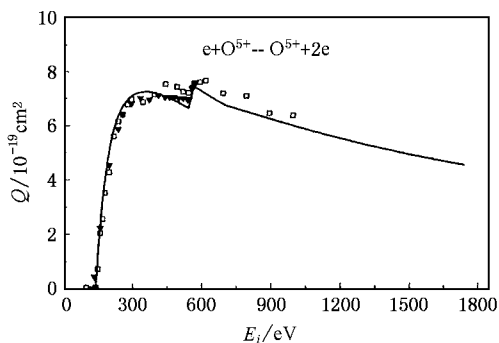


图 3 氧 5 价离子总电离截面 实线是本文的计算值; □^[12]和 ▽^[13]是实验值

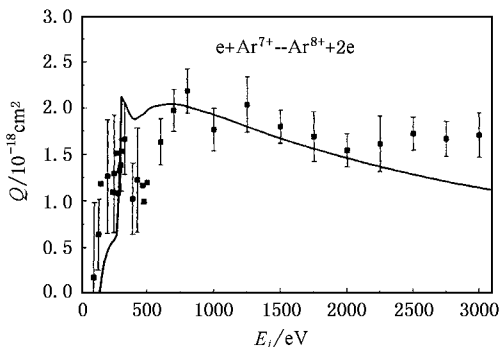


图 4 氩 7 价离子的总电离截面 实线是本文的计算值; ■ 是实验值^[14]

为了检验本文的含温有界原子结构的可靠性,表 1 列出了本文计算的铁离子单电子能级与 Rozsnyai^[7]的全相对论 HFS 自洽场方法下的原子结构的比较,两者符合较好. 表中第一列是相对论的电子壳层,括号内是对应的非相对论的电子壳层,

HFS 是本文的非相对论 Hartree-Fock-Slater 自洽场方法下求解的原子结构 ;RHFS 表示采用本文的含温有界原子结构程序包在全相对论 HFS 自洽场方法

下求解的原子结构 ,具体方法文中未列出 ;RHFS* 表示 Rozsnyai 的全相对论 HFS 自洽场方法下的原子结构^[7] .

表 1 Fe 离子单电子能级比较 ($T = 100\text{eV}$ 密度 $D = 0.785\text{g/cm}^3$)

Orbital	HFS	RHFS	RHFS*	Orbital	HFS	RHFS	RHFS*
$1s_{1/2}(1s)$	-269.437	-271.833	-273.430	$4f_{7/2}(4f)$	-1.84773	-1.83591	-1.84090
$2s_{1/2}(2s)$	-41.1840	-41.6640	-42.0750	$5s_{1/2}(5s)$	-0.96122	-0.97668	-0.97639
$2p_{1/2}(2p)$	-37.3869	-37.7811	-38.1970	$5p_{1/2}(5p)$	-0.76714	-0.77743	-0.77688
$2p_{3/2}(2p)$	-37.3869	-37.2928	-37.7300	$5p_{3/2}(5p)$	-0.76714	-0.76584	-0.76572
$3s_{1/2}(3s)$	-11.1455	-11.2522	-11.3410	$5d_{3/2}(5d)$	-0.48035	-0.47115	-0.47341
$3p_{1/2}(3p)$	-9.96007	-10.0429	-10.1250	$5d_{5/2}(5d)$	-0.48035	-0.46899	-0.47147
$3p_{3/2}(3p)$	-9.96007	-9.94047	-10.0250	$5f_{5/2}(5f)$	-0.22670	-0.21006	-0.21211
$3d_{3/2}(3d)$	-8.19822	-8.16740	-8.24290	$5f_{7/2}(5f)$	-0.22670	-0.20944	-0.21155
$3d_{5/2}(3d)$	-8.19822	-8.14857	-8.22490	$5g_{7/2}(5g)$	-0.01337	> 0	> 0
$4s_{1/2}(4s)$	-3.56582	-3.59968	-3.63020	$5g_{9/2}(5g)$	-0.01337	> 0	> 0
$4p_{1/2}(4p)$	-3.11536	-3.14219	-3.16900	$6s_{1/2}(6s)$	-0.09687		-0.07869
$4p_{3/2}(4p)$	-3.11536	-3.11205	-3.13940	$6p_{1/2}(6p)$	-0.01900		> 0
$4d_{3/2}(4d)$	-2.44304	-2.43691	-2.45880	$6p_{3/2}(6p)$	-0.01900		
$4d_{5/2}(4d)$	-2.44304	-2.43134	-2.45350	$6d_{3/2}(6d)$	> 0		
$4f_{5/2}(4f)$	-1.84773	-1.83745	-1.84240				

注 :第 1 列是相对论的电子壳层 .

有了可靠的含温有界原子结构模型和碰撞截面公式 ,我们研究了等离子体中的电子离子碰撞激发、碰撞电离截面 .作为算例 ,计算了碳等离子体 3 种碰撞激发过程的直接激发截面 ,如图 5 所示 ;计算了

碳等离子体 $1s, 2s, 2p$ 三个壳层电子的直接碰撞电离截面 ,考虑到 $1s-2s$ 和 $1s-2p$ 两个自电离通道 ,再加上 $1s-2s$ 和 $1s-2p$ 两个激发过程截面 ,得到总电离截面 ,如图 6 所示 .

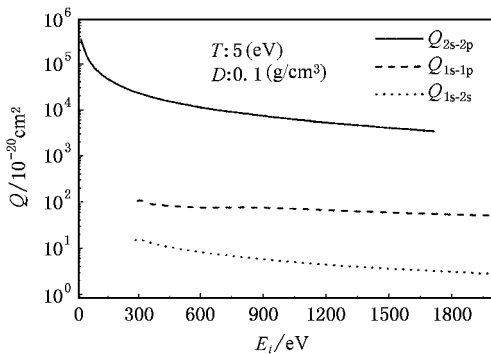


图 5 碳等离子体的直接激发截面 等离子体温度 5eV ,密度 : 0.1g/cm^3

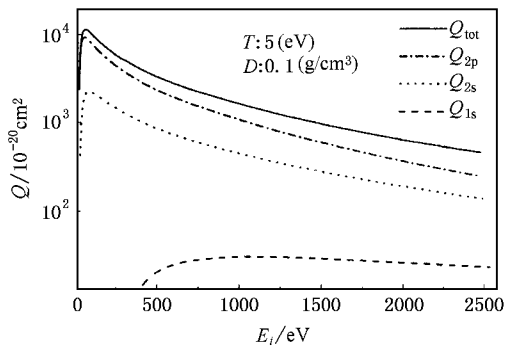


图 6 碳等离子体的电离截面 等离子体条件同图 5

为了研究含温有界原子模型(AAM)下电离截面与自由原子模型(FAM)下电离截面的差别 ,我们计

算了稀密度情况下 AAM 模型下氧离子的单个 $2s$ 电子的碰撞电离截面 ,并与 FAM 模型下的单个 $2s$ 电

子碰撞电离截面作比较,等离子体条件是温度 100eV、密度 0.1g/cm^3 ,如图 7 所示. 由图可见,两种模型下的直接电离截面曲线是相似的,但 AAM 模型下的电离截面要小一些. 简单说,这是由于有界原子模型下的离子半径较小造成的. 因为,由于有界原子模型下的离子半径较小,较高分波需要较高的能量才能在原子胞内存在. 在电子能量一定时,有限的半径限制了高分波的存在. 另外高分波电子远离原子核心,在有限原子半径内,重叠积分太小,也不可能对电离截面有较大的贡献. 在此情形下,碰撞电离截面是比较小的. 对于自由原子,半径相当于无穷大,对分波没有选择,只有靠重叠积分随分波的衰减来进行截断,因而电离截面相对要大一些. 下面考虑电离截面随密度的变化情况. 图 8 是在图 7 基础上增加了两条较高密度氧等离子体 2s 电子电离截面曲线,等离子体温度仍为 100eV. 从图中可看出,随着等离子体密度增大,碰撞电离截面增大,电离阈值移向低能方向,且截面的最大值可能比自由原子大很多. 其原因是随着等离子体密度增大,离子的能级普遍抬升,电离阈值减小,导致电离过程更容易发生. 图 9 是考察等离子体密度对电离截面影响的另一个算例,同样包括了与 FAM 模型下碰撞电离截面的比较,所用元素为铁,反映出了与图 8 相同的规律. 通过这两个算例不难看到:碰撞直接电离截面随密度的变化规律不是单调关系,它取决于与碰撞因素有关的综合效果. 这一点与自由原子模型的结论又有所不同.

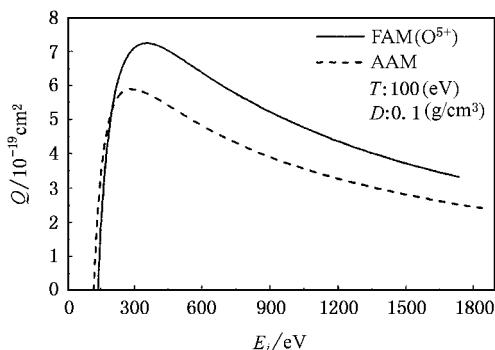


图 7 氧离子 2s 电子的直接电离截面

图 10 展示了温度对单个电子的电子碰撞电离截面的影响. 所用元素为银,等离子体密度为 10.5g/cm^3 . 可以看到,随着等离子体温度升高,碰撞电离截面减小. 这是由于随着等离子体温度升高,离子电离度增大,束缚电子数减小,导致离子的能级

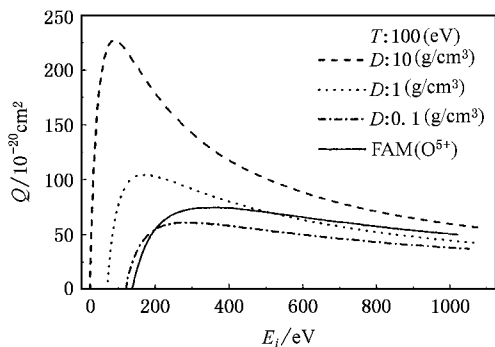


图 8 不同密度氧等离子体 2s 电子的直接电离截面

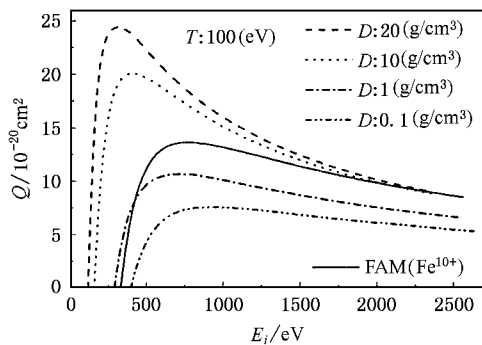


图 9 不同密度铁等离子体 3s 电子的直接电离截面

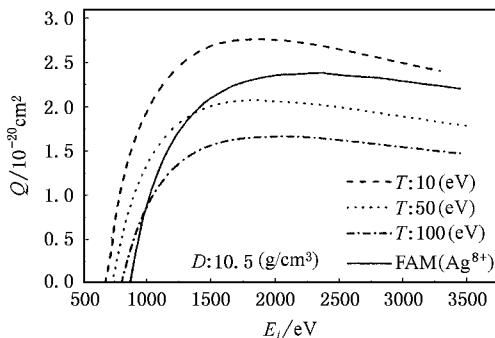


图 10 不同温度银等离子体 3s 电子的直接电离截面

下降,电离阈值增大,碰撞电离变得比较困难. 当然电离所需的能量增高,会使径向波函数振荡加剧,矩阵元贡献降低,这也是电离截面下降的又一原因. 与前面相同图中也包括了与 FAM 模型下碰撞电离截面的比较,同样反映了能级相近时 AAM 模型下的电离截面要小一些.

关于碰撞直接激发过程,从计算方面看要比碰撞电离简单,其物理规律与碰撞电离有很多相似之处,这里就不作分析了.

4. 结 论

用含温有界原子模型建立了计算等离子体电子离子碰撞直接激发、离化过程的计算体系。在自由原子情形下计算结果与实验一致。有界原子的计算结果显示出了大体与自由原子模型相似的规律,更

显示出了与温度密度有关的特有规律。通过系统研究不同温度、密度等离子体的碰撞电离截面,得出结论:由于温度、密度效应导致等离子体中离子的能级漂移,引起碰撞电离截面发生显著变化,基本关系是随等离子体密度增大,碰撞电离截面增大,随等离子体温度升高,碰撞电离截面减小。

-
- [1] Younger S M 1980 *Phys. Rev. A* **22** 111 ;1982 *Phys. Rev. A* **26** 3177
- [2] Sampson D H 1986 *Phys. Rev. A* **34** 986
Zhang H L and Sampson D H 1990 *Phys. Rev. A* **42** 5378
Sampson D H and Zhang H L 1997 *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **30** 1449
- [3] Chen M H and Reed K J 1989 *Phys. Rev. A* **40** 2292
- [4] Yan S X , Chen C Y , Teng Z X *et al* 1998 *Acta Phys. Sin.* **47** 583
(in Chinese)[颜士翔、陈重阳、滕舟轩 等 1998 *物理学报* **47** 583]
- [5] Xu X S and Zhang W X 1986 *An Introduction to Practical Theory of Equation-of-State* (Beijing : Science Press) pp138—231 (in Chinese)[徐锡申、张万箱 1986 *实用物态方程理论导引*(北京 科学出版社) pp138—231]
- [6] Kohn W and Sham L J 1965 *Phys. Rev.* **140** 1133
- [7] Rozsnyai B F 1972 *Phys. Rev. A* **5** 1137
- [8] Sampson D H 1982 *J. Phys. B At. Mol. Opt. Phys.* **15** 2087
- [9] Cowan R D 1981 *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (Bekeley : University of California)
- [10] Gregory D , Dunn G H , Phaneuf R A *et al* 1979 *Phys. Rev. A* **20** 410
- [11] Bell E W , Guo X Q , Forand J L *et al* 1994 *Phys. Rev. A* **49** 4585
- [12] Crandall D H , Phaneuf R A , Gregory D C *et al* 1986 *Phys. Rev. A* **34** 1757
- [13] Rinn K , Gregory D C , Wang L J *et al* 1987 *Phys. Rev. A* **36** 595
- [14] Rachafi S , Belic D S , Duponchelle M *et al* 1991 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **24** 1037

Theoretical study of cross sections of excitation and ionization for electron-ion impact in average-atomic model^{*}

Tian Ming-Feng[†] Meng Xu-Jun Zhu Xi-Rui Jiang Min-Hao Wang Zhi-Gang

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

(Received 7 January 2005 ; revised manuscript received 2 March 2005)

Abstract

By using a distorted-wave Born exchange approximation method in averaged-atomic model , we calculated the direct excitation and direct ionization cross sections of several ions in plasmas. The ionization cross sections of ions at different temperatures or different plasma densities are systematically studied. It is found that due to the shift of the energy levels produced by the effects of the temperature and the density of plasma , the ionization cross sections of ions in plasmas are rather different from those of free atoms .

Keywords : average-atomic model , distorted-wave Born exchange approximation , ionization cross section

PACC : 3480D , 3120B

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China(Grant No. 10174010) , and the Foundation of National Key Laboratory of Science and Technology for Shock Wave and Detonation Physics(Grant No.51478030203ZW0902).

[†] Corresponding author . E-mail : tian_mingfeng@iapcm.ac.cn