

等离子体对电子间相互作用的屏蔽效应研究^{*}李向富^{1)†} 朱晓禄¹⁾ 蒋刚²⁾

1) (陇东学院物理系, 庆阳 745000)

2) (四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

(2022 年 12 月 8 日收到; 2023 年 1 月 20 日收到修改稿)

在计算等离子体环境中的原子结构时, 一般情况下只考虑等离子体对核-电子相互作用的屏蔽, 较少考虑其对电子-电子相互作用的屏蔽. 本文采用 MCDHF (multi-configuration Dirac-Hartree-Fock) 方法结合屏蔽势研究了电子-电子相互作用的等离子体屏蔽对原子结构参数的影响随电子密度、电子温度、核电荷数和束缚电子个数的变化规律. 结果表明, 对于类氦离子的基态和第一激发态, 等离子体对电子-电子相互作用的屏蔽引起的能量移动量、跃迁能移动量和跃迁几率移动量分别随着电子密度和电子温度的升高而不断增大和减小; 随着核电荷数的增大, 能量移动量逐渐增大并趋于稳定值, 跃迁能移动量和跃迁几率移动量逐渐减小并趋于 0. 能量移动量随着束缚电子个数的增加而增大. 当满足电子密度 (束缚电子个数) 大于或者等于其临界值以及电子温度 (核电荷数) 小于或者等于其临界值任意一条件时, 等离子体对电子-电子相互作用的屏蔽效应不可忽略.

关键词: 等离子体, MCDHF 方法, 屏蔽势, 结构参数**PACS:** 31.15.ac, 31.15.xr, 31.15.ag, 52.27.Gr**DOI:** 10.7498/aps.72.20222339

1 引言

等离子体中原子结构和光谱性质一直受到人们的广泛关注^[1,2]. 在等离子体中, 离子处在自由电子和带电离子所产生的势场中, 不能再当作孤立自由离子处理. 因为等离子体环境使得离子的诸多性质发生了变化, 如能级移动、能级交叉、跃迁参数变化、谱线展宽、谱线合并和电离势降低等^[3,4]. 通过对这些独特性质的测量或者计算可以诊断等离子体的状态, 理解和识别等离子体光谱, 为等离子体物理、天体物理和高能量密度物理等方面提供理论基础和实际应用指导^[5-7].

等离子体对多电子离子的屏蔽包括对核-电子和电子-电子相互作用的屏蔽, 但由于电子-电子屏

蔽势的推导很复杂和计算量较大等原因, 早期关于等离子体中原子结构和性质的研究中仅考虑了对核-电子相互作用的屏蔽^[8]. 例如, Janev 等^[8]综述了德拜等离子体中的原子光谱性质、电子碰撞过程和重粒子碰撞过程的研究现状; 文献^[9-13]中采用模型势研究了德拜等离子体中 Li 原子和 Na 原子价电子的极化率和动力学过程; 李永强等^[14]用有限温度离子球模型研究了热稠密等离子体中类 Be 离子 ($Z = 26-36$) 原子核周围电子的空间分布、有效核势、跃迁能和振子强度随电子密度和温度的变化规律; 李向东和 Rosmej^[15,16]提出了与有限温度离子球模型对应的稠密等离子体中离子能量和谱线移动的解析表达式.

但是, 若能同时考虑等离子体对核-电子及电子-电子相互作用的屏蔽效应, 不仅计算结果更准

^{*} 国家自然科学基金 (批准号: 12265018)、甘肃省自然科学基金 (批准号: 20JR10RA131)、甘肃省教育厅青年博士基金 (批准号: 2022QB-162) 和陇东学院博士基金 (批准号: XYBY202005) 资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: lixf808@163.com

确,可能还会获得一些有趣的结果. 密度泛函理论虽然计算精度高,但计算量较大,而形式简单且适用范围广的解析势又很少^[17,18]. 就我们所知,只有关于德拜等离子体对电子-电子相互作用的屏蔽研究报道. 如张松斌等^[19]用 R-矩阵结合德拜屏蔽势研究了电子与氢原子的散射过程,发现随着屏蔽强度的增大,在 $n = 2$ (n 为主量子数) 的阈值处由 Feshbach 型共振转变为 shape 型共振. 李永强等^[20]用 MCDHF (multi-configuration Dirac-Hartree-Fork) 方法结合德拜模型对类 Be 离子能级和振子强度的研究表明,对于中 Z 元素,等离子体对核-电子相互作用的屏蔽是引起谱线蓝移的主要原因,而其对电子-电子相互作用屏蔽的贡献是比较小的. 李博文等^[21]的研究表明,随着德拜屏蔽长度的减小,只考虑等离子体对核-电子相互作用的屏蔽时, C^{4+} 离子的跃迁能总是单向减小,但包含了等离子体对电子-电子相互作用的屏蔽时,跃迁能则先增大后减小. Kar 等^[22]对类氦离子 ($Z = 6, 8, 10$) 的研究表明,考虑等离子体对电子-电子相互作用的屏蔽与否,共振能相差 3%—4%. Mukherjee 等^[23]的研究表明,考虑等离子体对电子-电子相互作用的屏蔽时,原子态能量更低,原子结构参数随屏蔽强度的变化更缓慢.

2015 年, Stanton 和 Murillo^[18] 基于无轨密度泛函理论,考虑了电子简并、有限温度梯度和量子交换关联等动态效应,提出了描述等离子体屏蔽效应的动态屏蔽模型,简称 SM 模型,其有效范围非常宽广. 利用 SM 模型已开展了一些研究工作,如 He^{2+} 离子与 H 原子的碰撞截面^[24]、高电荷态离子的光谱特性和光电离过程^[25,26]、类氢离子的跃迁参数^[27,28]和 H^+ 离子与 H 原子碰撞中的电子捕获和激发过程^[29]. 李文刚等^[30]的研究表明,除了电子密度介于 10^{17} — 10^{22} cm^{-3} 且电子温度低于 1 eV 的等离子体 SM 模型不完全适用外,其余任意的等离子体电子密度和温度均适用.

本文选取的等离子体电子密度和温度范围分别是 1.0×10^{22} — $1.0 \times 10^{25} \text{ cm}^{-3}$ 和 10—100 eV. 所研究离子对应的耦合强度 $3.4 \leq \Gamma \leq 215.8$, 不能选用德拜模型描述等离子体的屏蔽效应,因其只适用于 $\Gamma < 1$ 的弱耦合等离子体^[31]. $\Gamma \geq 1$ 的强耦合等离子体可以用离子球模型^[32]、余弦德拜模型^[33]和 SM 模型等描述,但是离子球模型和余弦德拜模型还没有关于电子-电子相互作用的解析屏蔽势表

达式. 由关于核-电子相互作用的 SM 屏蔽势表达式,很容易推导出关于电子-电子相互作用的 SM 屏蔽势表达式,且本文选取的电子密度和温度均在 SM 模型的适用范围内. 本文采用 SM 模型描述等离子体对核-电子和电子-电子相互作用的屏蔽效应,采用 MCDHF 方法描述相对论效应和束缚电子间的关联效应,分别研究了等离子体对电子-电子相互作用的屏蔽效应随等离子体电子密度、电子温度、核电荷数和束缚电子个数的变化规律,并给出了应该考虑等离子体对电子-电子相互作用屏蔽的条件. 本文第 2 节简述了 SM 模型势、MCDHF 计算方法和计算程序;第 3 节分析了等离子体对电子-电子相互作用屏蔽效应的变化规律;第 4 节为结论.

2 计算方法

2.1 SM 屏蔽势

SM 模型关于核-电子屏蔽势的表达式为^[18]

$$V_{Ze}(r) = -\frac{Z}{2r}[(1+\alpha)e^{-r/\lambda_-} + (1-\alpha)e^{-r/\lambda_+}], \quad (1)$$

式中, Z 是所屏蔽离子的核电荷数, r 是电子与原子核间的距离,屏蔽参数 λ_{\pm} 和 α 的表达式为

$$\lambda_{\pm}^2 = \frac{v\lambda_{TF}^2}{2b \pm 2\sqrt{b^2 - v}}, \quad \alpha = \frac{b}{\sqrt{b^2 - v}}. \quad (2)$$

(1) 式成立的条件是 $b > 0$, 且 $v < b^2$. 本文涉及到的等离子体密度和温度条件均满足 (1) 式成立的条件. (2) 式中 $\lambda_{TF} = \sqrt{\pi\sqrt{\beta}/[4\zeta_{-1/2}(\eta_0)]}$, $v = \sqrt{8\beta\zeta'_{-1/2}(\eta_0)/(3\pi)}$, $b = 1 - \gamma_0\lambda_{TF}^{-2}$. $\beta = 1/T_e$, T_e 表示电子温度, $\zeta_p(\eta) = \int_0^\infty dx \frac{x^p}{e^{(x-\eta)}}$ 表示 Fermi-Dirac 积分. γ_0 由下式计算:

$$\gamma_0 = \frac{1}{8}\beta\Theta[h(\Theta) - 2\Theta h'(\Theta)], \quad \Theta = \frac{2}{\beta(3\pi^2 n_e)^{2/3}}, \quad (3)$$

$$h(\Theta) = \frac{N(\Theta)}{D(\Theta)} \tanh(\Theta^{-1}),$$

$$N(\Theta) = 1 + 2.8343\Theta^2 - 0.2151\Theta^3 + 5.2759\Theta^4,$$

$$D(\Theta) = 1 + 3.9431\Theta^2 + 7.9138\Theta^4. \quad (4)$$

与 (1) 式相应的等离子体对电子-电子相互作用屏蔽的 SM 模型势表达式为

$$V_{ee}(r_{ij}) = \frac{1}{2r_{ij}}[(1+\alpha)e^{-r_{ij}/\lambda_-} + (1-\alpha)e^{-r_{ij}/\lambda_+}], \quad (5)$$

式中, $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ 表示第 i 个电子和第 j 个电子间的距离. $V_{ee}(r_{ij})$ 可以表示为如下两部分的和:

$$V_{ee}(r_{ij}) = V_1(r_{ij}) + V_2(r_{ij}). \quad (6)$$

$V_1(r_{ij})$ 和 $V_2(r_{ij})$ 可以分别表示为如下的展开式:

$$V_1(r_{ij}) = -(1 + \alpha) \lambda'_- \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) j_l(i^* \lambda'_- r_{<}) \times h_l^{(1)}(i^* \lambda'_- r_{>}) P_l(\cos \theta_{ij}), \quad (7)$$

$$V_2(r_{ij}) = -(1 - \alpha) \lambda'_+ \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) j_l(i^* \lambda'_+ r_{<}) \times h_l^{(1)}(i^* \lambda'_+ r_{>}) P_l(\cos \theta_{ij}), \quad (8)$$

式中, λ'_- 和 λ'_+ 分别表示 (2) 式中 λ_- 和 λ_+ 的倒数. P_l 是勒让德多项式, $h_l^{(1)}$ 是复变量球汉克尔函数的一阶修正, j_l 是复变量球贝塞尔函数, $r_{>} = \max(r_i, r_j)$, $r_{<} = \min(r_i, r_j)$. 本文将仅考虑等离子体对核-电子相互作用屏蔽的模型简称为模型 A, 同时考虑离子体对核-电子和电子-电子相互作用屏蔽的模型简称为模型 B.

2.2 MCDHF 计算方法

本文采用 MCDHF 方法描述相对论效应和束缚电子间的关联效应, 许多文献中已对 MCDHF 方法进行了详细的描述, 在这里仅做简要叙述. 对于含有 N 个束缚电子的离子, 其狄拉克-库仑哈密顿量 (Dirac-Coulomb Hamiltonian) 可以表示为如下的形式:

$$H = \sum_{i=1}^N H_i + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N V_{ee}(r_{ij}), \quad (9)$$

式中第一项表示单个束缚电子的能量之和, H_i 定义为

$$H_i = c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}_i + (\beta - 1)c^2 + V_{Ze}(r), \quad (10)$$

式中, 第一项和第二项是束缚电子的相对论动能项, 其中 $V_{Ze}(r)$ 表示等离子体对核-电子相互作用的屏蔽势, 其 SM 模型表达式见 (1) 式. (9) 式中的第二项表示束缚电子间的相互作用能之和, 若不考虑等离子体对电子-电子相互作用的屏蔽, 则 $V_{ee}(r_{ij})$ 等于:

$$V_{ee}(r_{ij}) = \frac{1}{r_{ij}} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} P_l(\cos \theta_{ij}). \quad (11)$$

反之, $V_{ee}(r_{ij})$ 表达式见 (6)–(8) 式. 求解狄拉克方

程组可得到单电子径向波函数, 进而由各个单电子波函数组合成的 Slater 行列式得到组态波函数, 最后由具有相同宇称的组态波函数的线性组合近似得到原子态波函数. 本文将所计算的原子态作为参考组态, 单、双激发参考组态上的束缚电子至空轨道上, 以此产生组态波函数序列. 选取激发轨道的最高主量子数 $n = 6$, 轨道量子数 $l = 4$, 此时所计算的原子结构数据已收敛, 且自由态离子的结构数据与 NIST^[34] 推荐值符合得很好.

2.3 计算程序

用描述等离子体对核-电子和电子-电子相互作用的屏蔽势替换 GRASP2K 程序^[35,36] 中相应的自由态离子程序, 用修改后的 GRASP2K 程序即可计算等离子体中的原子结构和跃迁参数. 由于 SM 屏蔽势和德拜屏蔽势的数学表达形式具有较大的相似性, 且当等离子体密度较低时, SM 模型和德拜模型的计算结果是一致的^[30]. 所以为了验证修改的 GRASP2K 程序的正确性, 也将德拜屏蔽势加入到 GRASP2K 程序中, 并分别用 SM 模型和德拜模型计算了 C^{4+} 离子 $1s^2(^1S_0)$ 原子态的能量, 结果如表 1 所列. 可以看出, 本文用德拜模型计算的结果与文献^[37] 中的德拜模型结果完全一致; 当等离子体电子密度 (德拜屏蔽强度) 较低 (小) 时, 本文 SM 模型的计算结果与德拜模型的计算结果几乎完全相同. 由此可知, 我们所改写的程序是完全正确的. 从表 1 中还可以看出, 随着电子密度的增大, 德拜模型与 SM 模型计算结果的差别越来越大. 这是因为德拜模型只适用于描述高温低密度等离子体的屏蔽效应, 随着等离子体密度的升高, 其逐渐失去有效性, 而 SM 模型仍然有效.

3 结果与讨论

3.1 等离子体对电子间相互作用的屏蔽效应随电子密度的变化

图 1 所示的是当电子温度为 50 eV 时, Al^{11+} 离子 $1s^2(^1S_0)$ 和 $1s2p(^1P_1)$ 原子态的能量移动量以及 $1s^2(^1S_0) - 1s2p(^1P_1)$ 的跃迁能移动量随电子密度的变化, 其中 ΔE 和 ΔE_{TE} 分别表示等离子体对电子-电子相互作用的屏蔽而引起的能量移动量和跃迁能移动量, 即模型 B 与模型 A 计算结果差值的绝对值. 从图 1 可以看出, 随着电子密度的增大, 等

表 1 电子温度为 50 eV 时, C^{4+} 离子 $1s^2(^1S_0)$ 原子态的能量随电子密度的变化Table 1. Energies of $1s^2(^1S_0)$ atomic state for C^{4+} ions vary with electron densities, when the electron temperature is 50 eV.

电子密度/ cm^{-3}	德拜屏蔽强度	模型A			模型B		
		E_{DB}	$E_{DB}^{[37]}$	E_{SM}	E_{DB}	$E_{DB}^{[37]}$	E_{SM}
9.87(19)	0.01	-32.3007	-32.2978	-32.3008	-32.3106	-32.3079	-32.3108
3.95(20)	0.02	-32.1811	-32.1783	-32.1817	-32.2011	-32.1982	-32.2016
2.47(21)	0.05	-31.8245	-31.8215	-31.8282	-31.8740	-31.8711	-31.8775
9.87(21)	0.1	-31.2363	-31.2324	-31.2511	-31.3345	-31.3306	-31.3482
1.54(22)	0.125	-30.9451	-30.9412	-30.9680	-31.0673	-31.0633	-31.0885
3.95(22)	0.2	-30.0830	-30.0790	-30.1395	-30.2758	-30.2717	-30.3284
6.17(22)	0.25	-29.5177	-29.5137	-29.6041	-29.7565	-29.7523	-29.8370
8.88(22)	0.3	-28.9597	-28.9557	-29.0814	-29.2436	-29.2394	-29.3571
1.58(23)	0.4	-27.8653	-27.8614	-28.0730	-28.2372	-28.2328	-28.4309
2.47(23)	0.5	-26.7992	-26.7963	-27.1109	-27.2557	-27.2522	-27.5467
3.55(23)	0.6	-25.7604	-25.7576	-26.1932	-26.2986	-26.2948	-26.7027

注1: E_{DB} 表示用德拜模型计算的能量注2: E_{SM} 表示用SM模型计算的能量

离子体对电子-电子相互作用的屏蔽引起 Al^{11+} 离子 $1s^2(^1S_0)$ 和 $1s2p(^1P_1)$ 原子态的能量移动量均不断增大. 这是由于随着电子密度的增大, 等离子体对电子-电子相互作用的屏蔽强度不断增强, 使得电子间的库仑斥力不断减小, 从而导致 $1s^2(^1S_0)$ 和 $1s2p(^1P_1)$ 原子态的能量移动量不断增大.

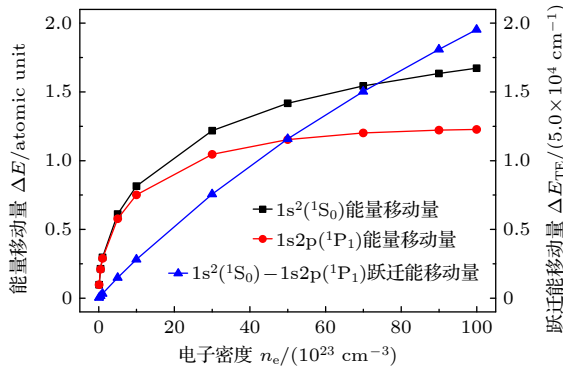
图 1 当电子温度为 50 eV 时, Al^{11+} 离子 $1s^2(^1S_0)$ 和 $1s2p(^1P_1)$ 原子态的能量移动量以及 $1s^2(^1S_0) - 1s2p(^1P_1)$ 的跃迁能移动量随电子密度的变化

Fig. 1. Energy shifts of $1s^2(^1S_0)$ and $1s2p(^1P_1)$ atomic states, and the transition energy shifts of $1s^2(^1S_0) - 1s2p(^1P_1)$ transition for Al^{11+} ions vary with electron densities, when the electron temperature is equal to 50 eV.

从图 1 还可以看出, 等离子体对电子-电子相互作用的屏蔽导致 $1s^2(^1S_0) - 1s2p(^1P_1)$ 的跃迁能移动量随着电子密度的升高近线性增大. 这是由于 $1s^2(^1S_0)$ 的能量移动量与 $1s2p(^1P_1)$ 的能量移动量的差值随着电子密度的升高而不断增大所致. 基态

$1s^2(^1S_0)$ 中的两个电子间的距离相对较近, 而激发态 $1s2p(^1P_1)$ 中的两个电子间的距离相对较远, 故等离子体对基态 $1s^2(^1S_0)$ 的屏蔽强度大于激发态 $1s2p(^1P_1)$, 随着电子密度的升高, 等离子体对基态 $1s^2(^1S_0)$ 的屏蔽程度不断大于激发态 $1s2p(^1P_1)$, 所以, $1s^2(^1S_0)$ 与 $1s2p(^1P_1)$ 的能量移动量的差值随着电子密度的增大而不断增大.

3.2 等离子体对电子间相互作用的屏蔽效应随电子温度的变化

从图 2 可以看出, 等离子体对电子-电子相互作用的屏蔽引起 Al^{11+} 离子 $1s^2(^1S_0)$ 和 $1s2p(^1P_1)$ 原子态的能量移动量均随着电子温度的升高而不断降低. 这是由于随着电子温度的升高, 原子核附近的电子密度逐渐下降, 整个原子核周围的电子趋于均匀分布, 等离子体对电子-电子相互作用的屏蔽强度逐渐减弱所致. 从图 2 还可以看出, Al^{11+} 离子 $1s^2(^1S_0) - 1s2p(^1P_1)$ 的跃迁能移动量随着电子温度的升高而不断降低. 这是由于 $1s^2(^1S_0)$ 与 $1s2p(^1P_1)$ 原子态的能量移动量的差值随着电子温度的升高而逐渐减小所致, 随着电子温度的升高, 原子核周围的电子趋于均匀分布, 等离子体对基态 $1s^2(^1S_0)$ 和激发态 $1s2p(^1P_1)$ 中的两个电子的屏蔽强度趋于相等, 从而使得 $1s^2(^1S_0)$ 与 $1s2p(^1P_1)$ 原子态的能量移动量的差值逐渐减小.

另外, 跃迁几率移动量随电子密度和温度的变化规律与跃迁能移动量的相似, 故不再赘述

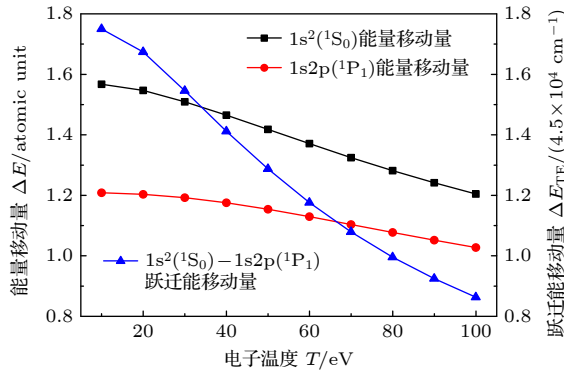


图2 当电子密度为 $5.0 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ 时, Al^{11+} 离子 $1s^2(^1S_0)$ 和 $1s2p(^1P_1)$ 原子态的能量移动量以及 $1s^2(^1S_0) - 1s2p(^1P_1)$ 的跃迁能移动量随电子温度的变化

Fig. 2. Energy shifts of $1s^2(^1S_0)$ and $1s2p(^1P_1)$ atomic states, and the transition energy shifts of $1s^2(^1S_0) - 1s2p(^1P_1)$ transition for Al^{11+} ions vary with electron temperatures, when the electron density is equal to $5.0 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$.

表2 所列等等离子体对电子-电子相互作用屏蔽引起 Al^{11+} 离子 $1s^2(^1S_0) - 1s2p(^1P_1)$ 跃迁能移动量和跃迁几率移动量所占百分比随电子密度和温度的变化, 其中 $\% \Delta E_{\text{TE}}$ 表示等等离子体对电子-电子相互作用的屏蔽而引起的跃迁能移动量与其对核-电子相互作用的屏蔽而引起的跃迁能移动量的百分比, $\% \Delta A$ 表示等等离子体对电子-电子相互作用的屏蔽而引起的跃迁几率移动量与其对核-电子相互作用的屏蔽而引起的跃迁几率移动量的百分比. 从表2 可以看出, 电子温度为 50 eV 时, 等等离子体对电子-电子相互作用屏蔽导致类氢 Al 离子 $1s^2(^1S_0) - 1s2p(^1P_1)$ 跃迁能移动量和跃迁几率移动量所占百分比随着电子密度的升高而逐渐增大, 当电子密度 $\geq 7.0 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ 时, 跃迁能移动量和跃迁几率移动量所占百分比分别 $\geq 8.66\%$ 和 10.17% . 当电子密度为 $5.0 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ 时, 跃迁能移动量和跃迁几率移动量所占百分比随着电子温度的升高而逐渐减小, 但当电子温度 $\leq 30 \text{ eV}$ 时, 跃迁能移动量和跃迁几率移动量所占百分比分别 $\geq 8.60\%$ 和 9.99% . 我们将等等离子体对电子-电子相互作用屏蔽所致的跃迁能移动量和跃迁几率移动量所占百分比为 10% 时所对应的电子密度和电子温度分别称为临界电子密度和临界电子温度. 当电子密度大于或者等于其临界值, 或者电子温度小于或者等于其临界值时, 等等离子体对电子-电子相互作用屏蔽所致的跃迁能移动量和跃迁几率移动量所占百分比将不低于 10%, 此时等等离子体对电子-电子相互作用的屏蔽效应不应该忽略.

表2 等等离子体对电子-电子相互作用屏蔽引起 Al^{11+} 离子 $1s^2(^1S_0) - 1s2p(^1P_1)$ 跃迁能移动量和跃迁几率移动量所占百分比随电子密度和温度的变化.

Table 2. The variation of percentages of the transition energy shifts and transition probability shifts of $1s^2(^1S_0) - 1s2p(^1P_1)$ transition for Al^{11+} ions caused by plasma screening on electron-electron interaction as a function of plasma electron density and temperature.

电子温度为 50 eV			电子密度为 $5.0 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$		
电子密度 / cm^{-3}	$\% \Delta E_{\text{TE}}$	$\% \Delta A$	温度 / eV	$\% \Delta E_{\text{TE}}$	$\% \Delta A$
1.0(22)	7.53	7.84	10	8.72	10.30
5.0(22)	7.51	7.59	20	8.68	10.20
1.0(23)	7.52	7.63	30	8.60	9.99
5.0(23)	7.60	7.80	40	8.50	9.73
1.0(24)	7.70	8.00	50	8.39	9.48
3.0(24)	8.08	8.77	60	8.29	9.24
5.0(24)	8.39	9.48	70	8.19	9.04
7.0(24)	8.66	10.17	80	8.11	8.88
9.0(24)	8.91	10.86	90	8.04	8.74
1.0(25)	9.04	11.27	100	7.98	8.62

3.3 等等离子体对电子间相互作用的屏蔽效应随核电荷数的变化

从图3 可以看出, 当电子密度和温度一定时, 等等离子体对电子-电子相互作用屏蔽引起的能量移动量随着核电荷数 Z 的增大而增大, 并逐渐趋于稳定值. 这是因为当等等离子体环境一定时, 随着核电荷数 Z 的增大, 核的吸引力逐渐增大, 束缚电子和自由电子均更加靠近原子核分布, 原子核附近的电子密度逐渐增大, 使得等等离子体对电子-电子相互作用的屏蔽逐渐增强, 从而逐渐降低了电子-电子间的库仑排斥势, 进而引起能量移动量随核电荷数 Z 的增大而增大. 当核电荷数 Z 较大时, 电子密度分布对核电荷数 Z 的变化不再敏感, 等等离子体对电子-电子相互作用的屏蔽强度趋于稳定, 其引起的能量移动量亦趋于稳定值.

从图3 还可以看出, 当电子密度和温度一定时, 等等离子体对电子-电子相互作用屏蔽引起的 $1s^2(^1S_0) - 1s2p(^1P_1)$ 跃迁能移动量随核电荷数 Z 的增大而减小, 并逐渐趋于 0. 这是由于随着核电荷数 Z 的增大, 等等离子体对 $1s^2(^1S_0)$ 和 $1s2p(^1P_1)$ 原子态中的两个束缚电子间相互作用的屏蔽强度趋于相等, 使得 $1s^2(^1S_0)$ 和 $1s2p(^1P_1)$ 的跃迁能移动量逐渐相等所致.

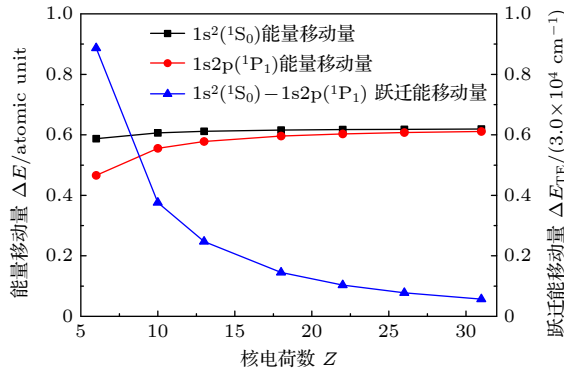


图3 当电子密度和温度分别为 $5.0 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ 和 50 eV 时,类氦离子 ($Z = 6, 10, 13, 18, 22, 26, 31$) $1s^2(^1S_0)$ 和 $1s2p(^1P_1)$ 原子态的能量移动量以及 $1s^2(^1S_0) - 1s2p(^1P_1)$ 的跃迁能量移动量随核电荷数 Z 的变化

Fig. 3. Energy shifts of $1s^2(^1S_0)$ and $1s2p(^1P_1)$ atomic states, and the transition energy shifts of $1s^2(^1S_0) - 1s2p(^1P_1)$ transition for He-like ions ($Z = 6, 10, 13, 18, 22, 26, 31$) vary with nuclear charge Z , when the electron density and temperature are $5.0 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ and 50 eV respectively.

当电子密度和温度分别为 $5.0 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ 和 50 eV 时,核电荷数 $Z = 6, 10, 13, 18, 22, 26$ 和 31 所对应的等离子体对电子-电子相互作用屏蔽引起的跃迁能量移动量所占百分比分别为 18.02%, 10.01%, 7.60%, 5.49%, 4.50%, 3.83% 和 3.24%; 跃迁几率移动量所占百分比分别为 20.06%, 10.35%, 7.80%, 5.58%, 4.57%, 3.85% 和 3.24%。很显然,当核电荷数 $Z \leq 10$ 时,跃迁能量移动量和跃迁几率移动量所占百分比均大于 10%。将等离子体对电子-电子相互作用屏蔽所致的跃迁能量移动量和跃迁几率移动量所占百分比为 10% 时所对应的核电荷数称为临界核电荷数。当核电荷数小于或者等

于其临界值时,等离子体对电子-电子相互作用屏蔽所致的跃迁能量移动量和跃迁几率移动量所占百分比将不低于 10%,此时等离子体对电子-电子相互作用的屏蔽效应不可忽略。

上述研究结论仅适用于类氦离子的基态和第一激发态。Chen 等^[38]利用 FAC 程序结合德拜模型所计算的类氦离子 ($Z = 6, 10, 18$) $1s^2(^1S_0) - 1s2p(^1P_1)$ 跃迁几率的模型 A 与模型 B 的差值在所取的屏蔽强度参数范围内总是大于 0;然而, $1s^2(^1S_0) - 1s3p(^1P_1)$ 跃迁几率的模型 A 与模型 B 的差值随着屏蔽强度的增大由大于 0 转变为小于 0,这可能是由于更加复杂的组态相互作用效应所致。屏蔽强度一定时,模型 A 与模型 B 的结果差值随着核电荷数 Z 的增大而减小,与本文的结果一致。同时, Sahat 和 Fritzsche^[39]采用 MCDHF 方法结合德拜屏蔽势所计算的类 Be 离子 ($Z = 6-8, 14, 26, 42$) $2s^2(^1S_0) - 2s2p(^1,3P_1)$ 跃迁能的模型 B 结果在整个屏蔽参数范围内总是小于模型 A 的,很显然与本文和文献^[37]的结果相反,这是由于类 Be 离子存在类氢核造成的。也就是说,等离子体对多电子离子系统的屏蔽效应远比双电子离子的复杂。

3.4 等离子体对电子间相互作用的屏蔽效应随束缚电子个数的变化

从表 3 可以看出,等离子体对电子-电子相互作用屏蔽引起不同电荷态 Al 离子的能量移动量及其所占的百分比均随着束缚电子个数的增加而增大。这是因为随着束缚电子个数的增加 (见表 3 第 2 列), 束缚电子对的个数随之增加 (见表 3 第 6 列), 而等离子体对每对束缚电子间的相互作用

表 3 当电子密度和温度分别为 $4.0 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ 和 50 eV 时,不同电荷态 Al 离子的基态能量移动量及其所占百分比

Table 3. Ground state energy shifts and their percentages of Al ions with different charge when the electron density and temperature are $4.0 \times 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ and 50 eV respectively.

离子	束缚电子个数	原子态	$\Delta E/\text{atomic unit}$	$\% \Delta E$	束缚电子对个数	$\Delta E_{EP}/\text{atomic unit}$
Al ¹¹⁺	2	$1s^2(^1S_0)$	0.556	3.83	1	0.556
Al ¹⁰⁺	3	$1s^22s(^2S_{1/2})$	1.590	7.47	3	0.530
Al ⁹⁺	4	$1s^22s^2(^1S_0)$	3.119	11.14	6	0.520
Al ⁸⁺	5	$1s^22s^22p(^2P_{1/2})$	5.152	14.82	10	0.515
Al ⁷⁺	6	$1s^22s^22p^2(^3P_0)$	7.662	18.48	15	0.511
Al ⁶⁺	7	$1s^22s^22p^3(^4S_{3/2})$	10.635	22.11	21	0.506
Al ⁵⁺	8	$1s^22s^22p^4(^3P_2)$	14.036	25.71	28	0.501
Al ⁴⁺	9	$1s^22s^22p^5(^2P_{3/2})$	17.948	29.38	36	0.499

注1: $\% \Delta E$ 表示等离子体对电子-电子相互作用的屏蔽而引起的能量移动量与其对核-电子相互作用的屏蔽而引起的能量移动量的百分比。

注2: ΔE_{EP} 表示总能量移动值对束缚电子对个数的平均值。

都产生屏蔽效应, 所以能量移动量随着束缚电子个数的增加而增大. 从表 3 还可以看出, 能量移动量对束缚电子对个数的平均值 (见表 3 第 7 列) 随着束缚电子个数的增加而缓慢减小. 这是因为在等离子体环境中, 束缚电子间的相互作用不仅受到等离子体的屏蔽, 还受到其他束缚电子的屏蔽, 随着束缚电子个数的增加, 束缚电子对电子-电子相互作用的屏蔽随之增强, 从而导致等离子体对电子-电子相互作用的屏蔽有所减弱.

对于等离子体环境中的多电子离子, 等离子体对所有束缚电子对的屏蔽效应随着束缚电子个数的增加而不断增大. 将等离子体对电子-电子相互作用屏蔽所致的跃迁能移动量和跃迁几率移动量所占百分比为 10% 时对应的束缚电子个数称为临界束缚电子个数. 当束缚电子个数大于或等于其临界值时, 等离子体对电子-电子相互作用屏蔽所致的跃迁能移动量和跃迁几率移动量所占百分比将不低于 10%, 此时等离子体对电子-电子相互作用的屏蔽效应不可忽略.

4 结 论

本文采用 MCDHF 方法结合 SM 屏蔽势研究了等离子体对电子-电子相互作用的屏蔽效应. 结果表明, 对于类氦离子的基态和第一激发态, 等离子体对电子-电子相互作用的屏蔽引起的能量移动量、跃迁能移动量和跃迁几率移动量均随着电子密度的升高而不断增大, 而随着电子温度的升高不断降低. 当等离子体密度和温度一定时, 其对电子-电子相互作用屏蔽引起的能量移动量随着核电荷数 Z 的增大而增大, 并逐渐趋于稳定值; 跃迁能移动量和跃迁几率移动量随着核电荷数 Z 的增大而减小, 并逐渐趋于 0. 等离子体对电子-电子相互作用屏蔽引起的能量移动量和能量移动量移动量所占的百分比均随着束缚电子个数的增加而增大.

等离子体对电子-电子相互作用屏蔽所致的跃迁能移动量和跃迁几率移动量所占百分比为 10% 时对应的电子密度、电子温度、核电荷数和束缚电子个数分别称为临界电子密度、临界电子温度、临界核电荷数和临界束缚电子个数. 当满足下述 4 个条件之一时, 等离子体对电子-电子相互作用屏蔽所致的跃迁能移动量和跃迁几率移动量所占百分比将大于或者等于 10%, 等离子体对电子-

电子相互作用的屏蔽效应不可忽略: 1) 电子温度一定, 电子密度大于或等于临界电子密度; 2) 电子密度一定, 电子温度小于或等于临界电子温度; 3) 电子密度和温度均一定, 核电荷数小于或等于临界核电荷数; 4) 电子密度和温度均一定, 束缚电子个数大于或等于临界束缚电子个数.

参考文献

- [1] Dornheim T, Groth S, Bonitz M 2018 *Phys. Rep.* **744** 1
- [2] Glenzer S H, Redmer R 2009 *Rev. Mod. Phys.* **81** 1625
- [3] Das M, Sahoo B K, Pal S 2016 *Phys. Rev. A* **93** 052513
- [4] Li B W, Jiang J, Dong C Z, Wang J G, Ding X B 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 5274 (in Chinese) [李博文, 蒋军, 董晨钟, 王建国, 丁晓彬 2009 物理学报 **58** 5274]
- [5] Hu S X 2017 *Phys. Rev. Lett.* **119** 065001
- [6] Papoulias A, Schiffmann S, Bieron J, Gaigalas G, Godefroid M, Harman Z, Jönsson P, Oreshkina N S, Pyykk P, Tupitsyn I I 2021 *Phys. Rev. A* **103** 022815
- [7] Ma K, Chen Z B, Huang S Z 2019 *Acta Phys. Sin.* **68** 023102 (in Chinese) [马堃, 陈展斌, 黄时中 2019 物理学报 **68** 023102]
- [8] Janev R K, Zhang S B, Wang J G 2016 *Matter and Radiation at Extremes* **1** 237
- [9] Qi Y Y, Ning L N 2014 *Phys. Plasmas* **21** 033301
- [10] Qi Y Y, Wu Y, Wang J G 2009 *Phys. Plasmas* **16** 033507
- [11] Sahoo S, Ho Y K 2006 *Phys. Plasmas* **13** 063301
- [12] Kang S, He J, Xu N, Chen C Y 2014 *Commun. Theor. Phys.* **62** 881
- [13] Li H W, Kar S 2012 *Phys. Plasmas* **19** 073303
- [14] Li Y Q, Wu J H, Hou Y, Yuan J M 2008 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **41** 145002
- [15] Li X D, Rosmej F B 2012 *EPL* **99** 33001
- [16] Li X D, Rosmej F B 2020 *Phys. Lett. A* **384** 126478
- [17] White A J, Collins L A 2020 *Phys. Rev. Lett.* **125** 055002
- [18] Stanton L G, Murillo M S 2015 *Phys. Rev. E* **91** 033104
- [19] Zhang S B, Wang J G, Janev R K 2010 *Phys. Rev. Lett.* **104** 023203
- [20] Li Y Q, Wu J H, Yuan J M 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 4042 (in Chinese) [李永强, 吴建华, 袁建民 2008 物理学报 **57** 4042]
- [21] Li B W, Dong C Z, Jiang J, Wang J G 2010 *Plasma Sci. Technol.* **12** 372
- [22] Kar S, Ho Y K 2009 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **42** 044007
- [23] Mukherjee P K, Karwowski J, Diercksen Geerd H F 2002 *Chem. Phys. Lett.* **363** 323
- [24] Chen C, Zhao G P, Qi Y Y, Liu L, Chen Z B, Wang J G 2022 *Phys. Plasmas* **29** 072901
- [25] Chen Z B, Qi Y Y, Sun H Y, Zhao G P, Liu P F, Wang K 2020 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **3** 8
- [26] Zhao G P, Xie L Y, Liu L, Wang J G, Janev R K 2018 *Phys. Plasmas* **25** 083302
- [27] Zhao G P, Liu L, Wang J G, Janev R K, Yan J 2018 *Matter and Radiation at Extremes* **3** 300
- [28] Zhao G P, Liu L, Wang J G, Janev R K 2017 *Phys. Plasmas* **24** 053509
- [29] Zhao G P, Liu L, Wang J G, Janev R K 2017 *Phys. Plasmas* **24** 103504
- [30] Li W G, Cheng Y J, Wu J Y, Wu Y, Wang J G, Zhang S B 2021 *Phys. Plasmas* **28** 012708

- [31] Murillo M S, Weisheit J C 1998 *Phys. Rep.* **302** 1
 [32] Ichimaru S 1982 *Rev. Mod. Phys.* **54** 1017
 [33] Shukla P K, Eliasson B 2008 *Phys. Lett. A* **372** 2897
 [34] NIST <https://www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database>
 [35] Jönsson P, Gaigalas G, Bieroń J, Fischer C F, Grant I P 2013 *Comput. Phys. Commun.* **184** 2197
 [36] Jönsson P, He X, Fischer C F, Grant I P 2007 *Comput. Phys. Commun.* **177** 597
 [37] Xie L Y, Wang J G, Janev R K, Qu Y Z, Dong C Z 2012 *Eur. Phys. J. D* **66** 125
 [38] Chen Z B, Ma K, Hu H W, Wang K 2018 *Phys. Plasmas* **25** 072120
 [39] Saha B, Fritzsche S 2006 *Phys. Rev. E* **73** 036405

Plasma screening effect on electron-electron interactions*

Li Xiang-Fu^{1)†} Zhu Xiao-Lu¹⁾ Jiang Gang²⁾

1) (Department of Physics, Longdong University, Qingyang 745000, China)

2) (Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610065, China)

(Received 8 December 2022; revised manuscript received 20 January 2023)

Abstract

In the calculation of atomic structures within the plasma environment, the plasma screening effect on nuclei - electron interactions is generally considered, but the plasma screening effect on electron - electron interactions is less considered. In this work, the MCDHF method combined with the screening potential is used to study plasma screening effect on the atomic structure parameters versus the electron density, electron temperature, nuclear charge and the number of bound electrons. For the ground states and the first excited states of helium-like ions, the energy shifts, transition energy shifts and transition probability shifts caused by the plasma screening effect on electron-electron interactions increase with the increase of electron densities and decrease with increasing the electron temperatures, respectively. With the increase of nuclear charge, the energy shifts increase gradually and tends to a stable value, while the transition energy shifts and transition probability shifts decrease gradually and tend to 0. The energy shifts increase with the increase of the number of bound electrons. The electron density, electron temperature, nuclear charge and number of bound electrons corresponding to the percentages of transition energy shifts and transition probability shifts caused by plasma screening on electron-electron interactions greater than or equal to 10%, are called as the critical electron density, critical electron temperature, critical nuclear charge and critical number of bound electrons, respectively. When one of the following four conditions is satisfied, the percentages of transition energy shifts and transition probability shifts caused by plasma screening on electron-electron interactions will be greater than or equal to 10%, and the plasma screening effect on electron - electron interactions can not be ignored. 1) The electron density is greater than or equal to the critical electron density, when the electron temperature is a fixed value. 2) The electron temperature is less than or equal to the critical electron temperature, when the electron density is a fixed value. 3) The nuclear charge is less than or equal to the critical nuclear charge, when the electron density and temperature are both fixed. 4) The number of bound electrons is greater than or equal to the critical number of bound electrons, when the electron density and temperature are both fixed.

Keywords: plasma, MCDHF method, screening potential, structural parameters

PACS: 31.15.ac, 31.15.xr, 31.15.ag, 52.27.Gr

DOI: 10.7498/aps.72.20222339

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12265018), the Natural Science Foundation of Gansu Province, China (Grant No. 20JR10RA131), the Young Doctor Foundation of Education Department of Gansu Province, China (Grant No. 2022QB-162) and the Doctor Foundation of Longdong University, China (Grant No. XYBY202005).

† Corresponding author. E-mail: lixfs08@163.com

等离子体对电子间相互作用的屏蔽效应研究

李向富 朱晓禄 蒋刚

Plasma screening effect on electron–electron interactions

Li Xiang-Fu Zhu Xiao-Lu Jiang Gang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 073102 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20222339

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20222339>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

等离子体屏蔽效应对Ar¹⁶⁺基态和激发态能级的影响

Influence of plasma shielding effect on ground state and excited state energies of Ar¹⁶⁺

物理学报. 2019, 68(2): 023102 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181915>

强激光等离子体相互作用驱动高次谐波与阿秒辐射研究进展

Research progress of high–order harmonics and attosecond radiation driven by interaction between intense lasers and plasma

物理学报. 2021, 70(8): 084206 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210339>

黑腔中等离子体相互作用的流体力学现象观测

Observation of hydrodynamic phenomena of plasma interaction in hohlraums

物理学报. 2018, 67(23): 235201 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20181391>

相对论强激光与近临界密度等离子体相互作用的质子成像

Proton imaging of relativistic laser–produced near–critical–density plasma

物理学报. 2019, 68(15): 155201 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190610>

磁化同轴枪操作参数对球马克产生及等离子体特性的影响

Effects of magnetized coaxial plasma gun operation on spheromak formation and plasma characteristics

物理学报. 2021, 70(20): 205202 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210709>

具有非广延分布电子的碰撞等离子体磁鞘的结构

Structure of collisional magnetized plasma sheath with non–extensive distribution of electrons

物理学报. 2021, 70(1): 015201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20200794>