

类Na离子电子碰撞电离产生类Ne离子 激发能级布居的速率系数*

朱顺人 赵力波 潘守甫

(吉林大学原子与分子物理研究所, 长春 130023)

摘要: 本文采用 Sampson 等的“ Z 标度类氢模型和库仑-玻恩交换近似”方法, 修改了 Sampson 理论中关于屏蔽常数的定义, 在计算屏蔽常数时, 选用电子轨道的平均半径标准, 使用多组态狄拉克福克程序包(MCDF)计入了高荷电靶离子的相对论效应, 计算了类Ne离子激发能级通过类Na离子内层电子碰撞电离布居的反应速率系数。

关键词 类Ne离子软X光激光, 类Na离子内层电子碰撞电离

Rate coefficients for populating excited levels of Ne-Like ions by electron-impact ionization of Na-like ions

Zhu Qiren, Zhao Libo, Pan Shoufu

(Institute of Atomic and Molecular Physics, Jilin University, Changchun)

Abstract: In order to further clarify the soft-X-ray laser kinetics of Ne-like ions, the rate coefficients for populating excited levels of Ne-like ions by electron-impact ionization of inner-subshell electrons of Na-like ions have been calculated by using Coulomb-Born exchange method and the Z -scaled hydrogenic model, in which the screening constant was defined and evaluated with the Multi-Configurational Dirac-Fock' (MCDF) mean radius of the initial orbital of the active electron to consider the combined-effects of relativity and screening in an actual transition calculation.

Key words: soft-X-ray laser of Ne-like ions, electron-impact ionization of the inner subshell electrons of Na-like ions

一、引言

1985年, 美国 Lawrence Livermore 实验室首次在激光等离子体实验中观察到元素 Se 和 Y 的类 Ne 离子 $3p-3s$ 跃迁放大的自发发射^[1], 在随后的对元素 Mo 的实验^[2]和对元素 Cu^[3] 等一系列实验表明: 对软 X 光激光的泵浦机制需要更广泛地开拓研究; 并且对所涉及的过程要有更准确的近似计算方法。依此原则, 我们对该激光物理所涉及的所有基元过程的反应速率系数在统一的物理框架下作一番彻底考察。首先, 将在多组态狄拉克-福克(MCDF)的

收稿日期: 1989年9月11日。

* 本工作受国家教委博士点基金和中国原子分子数据研究联合体支持。

结构计算框架下,重新计算类 Na 离子的 L 层电子碰撞电离过程的反应速率系数。

D. H. Sampson 和 Zhang^[4] 计算了待选元素 Fe、Se 和 Mo 的这一反应速率系数。他们选用了“ Z 标度类氢模型和库仑-玻恩交换近似”方法^[5~7] (Z -scaled hydrogenic model and Coulomb-Born exchange approximation)。这种方法物理图像明晰,计算简单,但是,它的适用性将受到来自两方面的限制: 其一是,当处理原子序数 Z 小而电子个数 N 又不很少的离子时,原子核势场相对于其它电子所形成的势场而言,并不占压倒优势,这时类氢模型很难成立; 其二是,当处理原子序数 Z 大而电子个数 N 又很小的离子时,这本来是该方法最能成立的条件,但这时电子波函数的相对论性收缩将急剧增加,因而需要将相对论效应引入进去。考虑到前者是该方法的固有局限且又不是短波激光的应用领域,所以本文的目的在于,讨论如何在 Sampson 的理论框架之内较为合理地计算屏蔽常数,从而使这一非相对论性理论在其自身的框架内全面地相对论化,以适应短波激光物理应用的需要。重点讨论在“ Z 标度类氢模型和库仑-玻恩近似”理论中屏蔽常数 σ 或有效核电荷数 Z_{eff} 的定义和算法; 并直接运用这些数值代入 Sampson 等的相应公式,计算给出元素 Cu、Y 和 Sn 的类 Na 离子的 L 层电子碰撞电离速率系数,并作简短讨论。

二、跃迁计算中的屏蔽常数

对于碰撞截面 Q 和碰撞强度 Ω 的关系,有一般表达式:

$$\frac{Q_k(nl_j, u)}{\pi a_0^2} = \frac{1}{g_k u} \cdot \frac{1}{I_{nl_j}} \Omega_k(nl_j, u) \quad (1)$$

其中, k 表示原子初态能级 $|k\rangle$; nl_j 表示直接参与跃迁的电子初态旋轨函数: n 是其主量子数, l 是其角量子数, j 是其总角动量量子数; a_0 为玻尔半径; g_k 为初态 $|k\rangle$ 的统计权重; I_{nl_j} 为 $|nl_j\rangle$ 电子在能级 $|k\rangle$ 时的离化能(以里德堡为单位); u 表示碰撞电子的初始能量,以离化能为单位,即

$$u = E/I_{nl_j} \quad (2)$$

式(2)中, E 即是碰撞电子的初始能量(里德堡单位)。Sampson 等的方法,就是在 $Z = \infty$ 的假想下,首先在其计算 Ω 的反应矩阵中代入非相对论的类氢轨道波函数,在库仑-玻恩交换近似下,算得 Z 标度碰撞强度 $[Z^2 \Omega(nl, u)]_{Z=\infty}$, 这个解,在 $Z = \infty$ 和非相对论的双重前提下,是严格准确的。为了实现从 $Z = \infty$ 这个假想前提向 Z 为有限的实际情况的过渡,他们引入一般的近似表达式:

$$\Omega_k(nl, u) \simeq \frac{1}{Z_{eff}^2} [Z^2 \Omega(nl, u)]_{Z=\infty} \quad (3)$$

由(3)可以清楚看出,他们的本意,是想通过引入有效核电荷 Z_{eff} , 将 Z 为有限时多电子原子中电子轨道的非类氢行为对碰撞强度 Ω 的影响考虑进去。但是,我们看到,多年来他们对 Z_{eff} 或屏蔽常数 $\sigma = Z - Z_{eff}$ 的考察,从理论上讲,有两条值得研究: (1) 当他们欲从第一原理计算 Z_{eff} 时,至今滞留在 Mayer 1947 年的理论^[8] 框架内,他们似乎没有充分注意到, Mayer 当年的屏蔽常数理论所考虑的基点,是电子轨道的非类氢行为对原子能级结构的影响,并不是这种行为对碰撞强度或广义振子强度的影响。在这个意义上,我们应当明确指出, Sampson 等对屏蔽常数的考虑,与其理论总体并不自洽。(2) 当所考察的对象再也不能用 Mayer 理论给出近似

的屏蔽常数时,他们往往只好经验地给出相应数值^[10]。尤其是,当经验迫使他们只能给出负值屏蔽常数时,他们也未曾明确说明过它的物理意义。事实上,上述两点早在1966年就被Garstang和Mayers仔细地研究过^[10]。他们的基本思想是,当我们研究复杂原子任何轨道性质 $f(nl_j)$ 时,均可通过引入相应的屏蔽常数 σ 表示为非相对论类氢轨道的对应性质,即

$$f(nl_j) = f_H(nl, Z - \sigma) = f_H(nl, Z_{eff})。 \quad (4)$$

这就是说,原则上,考察轨道的什么性质,即应由(4)式得到只能与该性质相联系的屏蔽常数。可是,在实际运用上,这常常是不必要的。我们可以只由轨道的几个少数性质,通常是轨道的能量 E 、平均半径 \bar{r} 和方均半径 \bar{r}^2 等,得到相应的屏蔽常数 $\sigma(E)$ 、 $\sigma(\bar{r})$ 和 $\sigma(\bar{r}^2)$,并以它们作为标准,当考察任何其它性质时,只须从中选用物理上合理的屏蔽常数。注意到, $\sigma(\bar{r})$ 与 $\sigma(\bar{r}^2)$ 在数值上总是十分接近,而它们同 $\sigma(E)$ 却常常相差甚大,所以,屏蔽常数标准的选用十分重要。Garstang等曾明确指出,当考察跃迁几率时,由于这一性质主要地决定于电子波函数在 r 较大处的行为,所以最好由 $\sigma(\bar{r}^2)$ 来近似地代表 $\sigma(f)$,这里 f 指广义振子强度 f 值。如此说来,取消屏蔽常数理论中轨道能量标准的普适性,已是二十年前的研究成果,此其一;其二是,Garstang等的屏蔽理论,早已涵盖了对非相对论类氢轨道的相对论修正。实际上,Sampson等在若干算例中经验给出的负屏蔽常数值已经生动地反映了这一物理内涵,只是未曾得以阐释罢了。

依此原则,我们的实际作法是,通过求解MCDF方程组得到跃迁初态中直接参与跃迁的电子旋轨函数的平均半径 \bar{r}_{nl_j} ,然后将它代入人们熟知的非相对论类氢原子平均半径表达式

$$\bar{r}_{nl_j} = \frac{3n^2 - l(l+1)}{2Z_{eff}} = \frac{3n^2 - l(l+1)}{2(Z - \sigma)}, \quad (5)$$

从而,方便地求得 $Z_{eff}(\bar{r}_{nl_j})$ 或 $\sigma(\bar{r}_{nl_j})$ 。这里,需要稍加说明的是,我们针对跃迁矩阵元的修正而实际选取的 Z_{eff} 标准是 \bar{r} ,而不是Garstang和Mayers当年所建议的 \bar{r}^2 。这是因为我们考虑到,通常跃迁算符首项正是 r 而不是 r^2 ,因此,在对 Z_{eff} 标准的选取上也作出了相应的决定。

通过(5)式,我们看到,实际原子中电子旋轨函数对于非相对论类氢轨道的任何偏离(这里是指其它电子对该电子的屏蔽以及其自身的相对论性收缩)均可由于代入 \bar{r}_{nl_j} 的MCDF解而在 Z_{eff} 或 σ 上一并统计地得到反映。而这种偏离对碰撞强度的影响量只有 $\sigma(\bar{r})$ 或 $\sigma(\bar{r}^2)$ 标准才能较实际地加以反映,而不是 $\sigma(E)$ 能够作到的。这一点,是本文与文献[4]的本质不同。

表1对照给出了我们如此算得的 σ_{nl_j} 值和Sampson等基于Mayer理论在文献[4]中求得的 σ_{nl} 值。它们所反映的理论上的分歧,前文已经充分阐明。实际上,考虑到光学线强度 S 和碰撞强度 Ω 的直接相关性^[9],我们已经由类氢模型下的线强度表达式

$$S = \frac{1}{Z_{eff}^2} [Z^2 S]_{Z=\infty}, \quad (6)$$

分别代入我们的和Sampson等的屏蔽常数值,求得各自的光学跃迁线强度,然后再把它们拿去同完全由第一原理准确计算得到的线强度比较(对如此高离化阶的离子,已经没有相应的实验数据)。大量的数据比较结果表明,前者总是一致地比后者更接近准确的计算值。可以认为,这是我们前述有关屏蔽理论正确性的直接说明。进而,在使类氢模型得以成立的最有利的情况下,比如,对Fe、Mo和W的类He离子的若干光学跃迁,在(6)式中代入我们算得的

Table 1 Values for the screening constants of Na-like ions in the ground (Cu) configurations, for values of sub-levels nl ,

configuration	Track								
	σ_{nlj}					$\sigma_{nl}(\text{Sampson et al.})$			
	$1s_{1/2}$	$2s_{1/2}$	$2p_{1/2}$	$2p_{3/2}$	$3l$	$1s$	$2s$	p	$3l$
$3s_{1/2}$	0.192	2.94	4.04	4.41	5.88	2.20	6.11	6.82	7.59
$3p_{1/2}$	0.197	2.97	4.03	4.43	7.06	2.21	6.13	6.85	8.65
$3p_{3/2}$	0.196	2.97	4.05	4.41	7.24	2.21	6.19	6.90	9.20
$3d_{3/2}$	0.190	2.97	4.07	4.41	8.71				
$3d_{5/2}$	0.190	2.97	4.03	4.43	8.75				

(Y)

configuration	Track								
	σ_{nlj}					$\sigma_{nl}(\text{Sampson et al.})$			
	$1s_{1/2}$	$2s_{1/2}$	$2p_{1/2}$	$2p_{3/2}$	$3l$	$1s$	$2s$	$2p$	$3l$
$3s_{1/2}$	-0.429	2.30	3.28	4.26	5.35	2.20	6.11	6.82	7.59
$3p_{1/2}$	-0.424	2.34	3.27	4.28	6.52	2.21	6.13	6.85	8.65
$3p_{3/2}$	-0.425	2.34	3.30	4.27	7.01				
$3d_{3/2}$	-0.432	2.34	3.32	4.27	8.39	2.21	6.19	6.90	9.20
$3d_{5/2}$	-0.432	2.34	3.28	4.29	8.54				

(Sn)

configuration	Track								
	σ_{nlj}					$\sigma_{nl}(\text{Sampson et al.})$			
	$1s_{1/2}$	$2s_{1/2}$	$2p_{1/2}$	$2p_{3/2}$	$3l$	$1s$	$2s$	$2p$	$3l$
$3s_{1/2}$	-1.69	1.02	1.77	3.99	4.41	2.20	6.11	6.82	7.59
$3p_{1/2}$	-1.68	1.06	1.76	4.02	5.55	2.21	6.13	6.85	8.65
$3p_{3/2}$	-1.68	1.05	1.78	4.00	6.68				
$3d_{3/2}$	-1.69	1.06	1.81	4.00	7.98	2.21	6.19	6.90	9.20
$3d_{5/2}$	-1.69	1.05	1.77	4.02	8.35				

Z_{eff} 以后,常常同准确计算的 S 值符合到第二位有效数字,一般误差也不超过 10%,这是连我们自己也始料未及的高准确度。如果在(6)式中代入 Sampson 等推荐的 Z_{eff} 值,即使是他们经验修正了以后的值^[9],也已明显偏离了准确计算的 S 值。 Z 越大,这种偏离越大。这是他们屏蔽理论中非相对论缺陷的必然后果。

在表 1 中,可以看到,我们计算的屏蔽常数值总要比 Mayer 理论值来得小。这是一个适合于任何离子任何轨道的普遍规律。同 Garstang 等在文献[10]中的研究结果完全一致。

最后,以数据实例给出我们即将在第三节中算出的速率系数与 Sampson 等的对应值间的比值。中等原子序数元素的类 Na 离子的 L 层电子碰撞电离的速率系数,据我们所知,迄今只有 Sampson 等的计算值,尚无其它理论的或实验的数据可作直接比较。而且,仅存的 Sampson 等的计算值还是针对元素 Fe、Se 和 Mo 的。不过,由于本文在第三节中所述的算法同 Sampson

等的相应算法是完全相同的,所以,两种算法所得碰撞强度乃至速率系数的比,基本上就是两种屏蔽常数反比的平方(见公式(3)),即

$$\frac{C_{\text{our}}}{C_{\text{Sam}}} = \frac{\Omega_{\text{our}}}{\Omega_{\text{Sam}}} \approx \frac{(Z_{\text{eff}})_{\text{Sam}}^2}{(Z_{\text{eff}})_{\text{our}}^2} \quad (7)$$

这里, C 表示反应速率系数。下角标 our 表示我们的计算值, Sam 表示 Sampson 等的计算值。

例如,欲知元素 Y ($Z=39$) 的两种算法的反应速率系数比,对于 $1s^2 2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3s$ — $1s^2 2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3s$ 跃迁,查表 1 可知:在元素 Y 的类 Na 离子组态 $1s^2 2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3s$ 中,其跃迁电子 $2p_{3/2}$ 的屏蔽常数的我们计算值为 3.28, Sampson 等的计算值为 6.82,代入(7)式得

$$\frac{C_{\text{our}}}{C_{\text{Sam}}} \approx \left(\frac{39 - 6.82}{39 - 3.28} \right)^2 \approx 0.81。$$

三、反应速率系数

首先,引入本文对组态的简单记法。对类 Na 离子,本文所要考虑的只是其基组态 $1s^2 2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3l_{b_j}$ (本文尽量沿用文献[4]中的光谱记号),将它们简记为 $3l_{b_j}$;对类 Ne 离子,本文所要考虑的只是其对应的类 Na 离子基组态去掉 L 层中某支层的一个电子后所形成的那些组态,它们是

$$[1s^2 2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^3 3l_{b_j}]_{J'_{ab}}, [1s^2 2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3l_{b_j}]_{J''_{ab}} \text{ 和 } [1s^2 2s^2 2p_{1/2}^2 2p_{3/2}^4 3l_{b_j}]_{J'_{ab}}。$$

分别将它们简记为 $[2p_{3/2} 3l_{b_j}]_{J'_{ab}}$ 、 $[2p_{1/2} 3l_{b_j}]_{J''_{ab}}$ 和 $[2s 3l_{b_j}]_{J'_{ab}}$ 。注意,这里的 $2l_j$ 一律表示在该支层中的空穴占据数。因此,又可将它们统一简记为 $[2l_j 3l_{b_j}]_{J'_{ab}}$ 。

高荷电离子的一个重要特点,是其能级主要地由主量子数决定,而各种角量子数的作用随着比值 Z/N 的增加而变得愈加不重要。(这一事实,又使人联想到类氢离子。)因此,(1)可以将五个类 Na 离子组态 $3l_{b_j}$ 均看成是其基组态;(2)可以近似地认为组态相互作用只发生在一个复合体中,即发生在主量子数集相同、宇称相同、总角动量子数相同的组态集合之中。在此近似下,在类 Na 离子基组态复合体内自然没有组态相互作用;但是,对类 Ne 离子激发态复合体 $\{[2l_j 3l_{b_j}]_{J'_{ab}}\}$,组态相互作用应发生在所有具有相同宇称和相同总角动量 J'_{ab} 的组态之间。

本文所用的主要公式,对应于文献[4]中的(20)和(13)以及文献[6]中的(6)。它们是

(1) 类 Na 离子 Z 基态 $3l_{b_j}$ 的 L 层电子碰撞离化截面为

$$Q(3l_{b_j} - U_i) = \frac{4\pi a_0^2}{I(3l_{b_j} - U_i)} \frac{2J''_{ab} + 1}{2j_b + 1} Q_R^H(2l, u) \sum_j \frac{b^2 [U_i, (2l_j 3l_{b_j})_{J'_{ab}}]}{[Z - \sigma_{2l_j}(3l_{b_j})]} \quad (8)$$

其中, U_i 代表类 Ne 离子某激发能级,而 $b [U_i, (2l_j 3l_{b_j})_{J'_{ab}}]$ 则是组态 $(2l_j 3l_{b_j})_{J'_{ab}}$ 在能级 U_i 中的混合系数。 $I(3l_{b_j} - U_i)$ 为离化能(里德堡单位)。 $\sigma_{2l_j}(3l_{b_j})$ 表示处于组态 $3l_{b_j}$ 中的 $2l_j$ 电子的屏蔽常数。 $Q_R^H(2l, u)$ 是在文献[7]中在库仑-玻恩交换近似下算得的类氢离子 $2l_j$ 电子离化约化截面,其中, u 是阈值单位下的碰撞电子能量 E ,即

$$u = E / I(3l_{b_j} - U_i)。$$

在激光等离子体的局部热力学平衡(LTE)条件下,略去 $(2s 3l_{b_j})_{J'_{ab}}$ 和 $(2p 3l_{b_j})_{J'_{ab}}$ 间较小的组态相互作用后,(8)式又可近似地回到没考虑组态相互作用的截面表达式^[4]

$$Q = \frac{4\pi a_0^2}{I_{2l_j}^{ik} [Z - \sigma_{2l_j}(3l_{b_j})]^2} \left[\frac{2J''_{ab} + 1}{2j_b + 1} \right] Q_R^H(2l, u) \quad (9)$$

Table 2 Calculated values for threshold energies and rate coefficients(Cu)

Transition	Threshold energy(eV)	T(eV)						
		150	300	600	900	1200	1800	2400
$8s_{1/2}-(2s_{1/2}3s_{1/2})_0$	1805.17	2.69[-17]*1.42[-14]	3.53[-13]	1.06[-12]	1.84[-12]	3.21[-12]	4.23[-12]	
$3s_{1/2}-(2s_{1/2}3s_{1/2})_1$	1797.57	8.50[-17]	4.38[-14]	1.08[-12]	3.21[-12]	5.57[-12]	9.70[-12]	1.28[-11]
$3s_{1/2}-(2p_{1/2}3s_{1/2})_0$	1655.14	1.10[-16]	3.44[-14]	6.50[-13]	1.76[-12]	2.90[-12]	4.76[-12]	6.06[-12]
$3s_{1/2}-(3p_{1/2}3s_{1/2})_1$	1656.54	3.26[-16]	1.03[-13]	1.94[-12]	5.26[-12]	8.69[-12]	1.43[-11]	1.82[-11]
$3s_{1/2}-(2p_{3/2}3s_{1/2})_1$	1636.26	3.89[-16]	1.14[-13]	2.09[-12]	5.60[-12]	9.18[-12]	1.50[-11]	1.90[-11]
$3s_{1/2}-(2p_{3/2}3s_{1/2})_2$	1633.92	6.59[-16]	1.92[-13]	3.50[-12]	9.36[-12]	1.53[-11]	2.51[-11]	3.17[-11]
$3p_{1/2}-(2s_{1/2}3p_{1/2})_0$	1795.40	2.89[-17]	1.48[-14]	3.61[-13]	1.08[-12]	1.87[-12]	3.25[-12]	4.27[-12]
$3p_{1/2}-(2s_{1/2}3p_{1/2})_1$	1796.06	8.62[-17]	4.41[-14]	1.08[-12]	3.22[-12]	5.60[-12]	9.74[-12]	1.28[-11]
$3p_{1/2}-(2p_{1/2}3p_{1/2})_0$	1674.07	9.57[-17]	3.20[-14]	6.24[-13]	1.71[-12]	2.83[-12]	4.68[-12]	5.97[-12]
$3p_{1/2}-(2p_{1/2}3p_{1/2})_1$	1653.46	3.33[-16]	1.04[-13]	1.95[-12]	5.29[-12]	8.71[-12]	1.43[-11]	1.82[-11]
$3p_{1/2}-(2p_{3/2}3p_{1/2})_1$	1629.46	4.09[-16]	1.18[-13]	2.12[-12]	5.66[-12]	9.26[-12]	1.51[-11]	1.91[-11]
$3p_{1/2}-(2p_{3/2}3p_{1/2})_2$	1632.95	6.64[-16]	1.93[-13]	3.51[-12]	9.39[-12]	1.54[-11]	2.51[-11]	3.18[-11]
$3p_{1/2}-(2s_{1/2}3p_{3/2})_1$	1797.84	4.26[-17]	2.19[-14]	5.39[-13]	1.60[-12]	2.79[-12]	4.86[-12]	6.39[-11]
$3p_{3/2}-(2s_{1/2}3p_{3/2})_2$	1795.72	7.20[-17]	3.68[-14]	9.02[-13]	2.69[-12]	4.67[-12]	8.12[-12]	1.07[-11]
$3p_{3/2}-(2p_{1/2}3p_{3/2})_1$	1654.03	1.66[-16]	5.19[-14]	9.78[-13]	2.64[-12]	4.36[-12]	7.16[-12]	9.10[-12]
$3p_{3/2}-(2p_{1/2}3p_{3/2})_2$	1654.77	2.75[-16]	8.63[-14]	1.63[-12]	4.40[-12]	7.26[-12]	1.19[-11]	1.52[-11]
$3p_{3/2}-(2p_{3/2}3p_{3/2})_0$	1643.66	6.15[-17]	1.85[-14]	3.43[-13]	9.23[-13]	1.52[-12]	2.48[-12]	3.15[-12]
$3p_{3/2}-(2p_{3/2}3p_{3/2})_1$	1632.78	1.99[-16]	5.80[-14]	1.05[-12]	2.81[-12]	4.61[-12]	7.52[-12]	9.52[-12]
$3p_{3/2}-(2p_{3/2}3p_{3/2})_2$	1635.26	3.26[-16]	9.57[-14]	1.75[-12]	4.67[-12]	7.66[-12]	1.25[-11]	1.58[-11]
$3p_{3/2}-(2p_{3/2}3p_{3/2})_3$	1631.83	4.68[-16]	1.36[-13]	2.46[-12]	6.57[-12]	1.08[-11]	1.76[-11]	2.22[-11]
$3d_{3/2}-(2s_{1/2}3d_{3/2})_1$	1789.79	4.51[-17]	2.26[-14]	5.48[-13]	1.63[-12]	2.82[-12]	4.89[-12]	6.43[-12]
$3d_{3/2}-(2s_{1/2}3d_{3/2})_2$	1790.12	7.49[-17]	3.76[-14]	9.12[-13]	2.71[-12]	4.70[-12]	8.16[-12]	1.07[-11]
$3d_{3/2}-(2p_{1/2}3d_{3/2})_1$	1660.29	1.59[-16]	5.08[-14]	9.66[-13]	2.62[-12]	4.34[-12]	7.13[-12]	9.08[-12]
$3d_{3/2}-(2p_{1/2}3d_{3/2})_2$	1649.68	2.86[-16]	8.81[-14]	1.65[-12]	4.45[-12]	7.32[-12]	1.20[-11]	1.52[-11]
$3d_{3/2}-(2p_{3/2}3d_{3/2})_0$	1623.94	7.08[-17]	2.00[-14]	3.58[-13]	9.50[-13]	1.55[-12]	2.52[-12]	3.19[-12]
$3d_{3/2}-(2p_{3/2}3d_{3/2})_1$	1625.39	2.10[-16]	5.96[-14]	1.70[-12]	2.84[-12]	4.65[-12]	7.56[-12]	9.57[-12]
$3d_{3/2}-(2p_{3/2}3d_{3/2})_2$	1630.79	3.37[-16]	9.74[-14]	1.76[-12]	4.70[-12]	7.70[-12]	1.25[-11]	1.59[-11]
$3d_{3/2}-(2p_{3/2}3d_{3/2})_3$	1628.68	4.79[-16]	1.37[-13]	2.48[-12]	6.61[-12]	1.08[-11]	1.76[-11]	2.23[-11]
$3d_{5/2}-(2s_{1/2}3d_{5/2})_2$	1795.85	4.80[-17]	2.45[-14]	6.01[-13]	1.79[-12]	3.11[-12]	5.41[-12]	7.10[-12]
$3d_{5/2}-(2s_{1/2}3d_{5/2})_3$	1789.91	7.00[-17]	3.51[-14]	8.52[-13]	2.53[-12]	4.38[-12]	7.61[-12]	9.99[-12]
$3d_{5/2}-(2p_{1/2}3d_{5/2})_2$	1650.04	1.89[-16]	5.85[-14]	1.09[-12]	2.95[-12]	4.86[-12]	7.97[-12]	1.01[-11]
$3d_{5/2}-(2p_{1/2}3d_{5/2})_3$	1650.97	2.63[-16]	8.16[-14]	1.53[-12]	4.13[-12]	6.80[-12]	1.12[-11]	1.42[-11]
$3d_{5/2}-(2p_{3/2}3d_{5/2})_1$	1638.39	1.28[-16]	3.79[-14]	6.95[-13]	1.86[-12]	3.06[-12]	4.99[-12]	6.33[-12]
$3d_{5/2}-(2p_{3/2}3d_{5/2})_2$	1627.21	2.31[-16]	6.59[-14]	1.19[-12]	3.16[-12]	5.16[-12]	8.40[-12]	1.06[-11]
$3d_{5/2}-(2p_{3/2}3d_{5/2})_3$	1631.58	3.13[-16]	9.07[-14]	1.64[-12]	4.39[-12]	7.19[-12]	1.17[-11]	1.48[-11]
$3d_{5/2}-(2p_{3/2}3d_{5/2})_4$	1627.24	4.16[-16]	1.19[-13]	2.13[-12]	5.68[-12]	9.29[-12]	1.51[-11]	1.91[-11]

* 单位为 cm^3/sec , 括号 [] 中的数表示 10 的幂次。

Table 3 Calculated values for thresholds energies and rate coefficients (Y)

Transition	Threshold energy (eV)	$T(\text{eV})$						
		350	800	1200	1600	2000	2500	3500
$3s_{1/2}-(2s_{1/2}3s_{1/2})_0$	3779.29	3.36[-17]	1.95[-14]	1.06[-13]	2.49[-13]	4.19[-13]	6.36[-13]	1.03[-12]
$3s_{1/2}-(2s_{1/2}3s_{1/2})_1$	3767.61	1.05[-16]	5.94[-14]	3.21[-13]	7.54[-13]	1.27[-12]	1.92[-12]	3.10[-12]
$3s_{1/2}-(2p_{1/2}3s_{1/2})_0$	3561.20	8.89[-16]	3.54[-14]	1.73[-13]	3.85[-13]	6.24[-13]	9.20[-13]	1.43[-12]
$3s_{1/2}-(2p_{1/2}3s_{1/2})_1$	3563.10	2.65[-16]	1.06[-13]	5.17[-13]	1.15[-12]	1.87[-12]	2.76[-12]	4.28[-12]
$3s_{1/2}-(2p_{3/2}3s_{1/2})_1$	3484.93	3.57[-16]	1.26[-13]	5.93[-13]	1.03[-12]	2.09[-12]	3.05[-12]	4.69[-12]
$3s_{1/2}-(2p_{3/2}3s_{1/2})_2$	3481.35	6.02[-16]	2.10[-13]	9.92[-13]	2.17[-12]	3.49[-12]	5.09[-12]	7.83[-12]
$3p_{1/2}-(2s_{1/2}3p_{1/2})_0$	3763.41	3.54[-17]	2.00[-14]	1.08[-13]	2.53[-13]	4.24[-13]	6.44[-13]	1.04[-12]
$3p_{1/2}-(2s_{1/2}3p_{1/2})_1$	3764.73	1.06[-16]	5.98[-14]	3.22[-13]	7.57[-13]	1.27[-12]	1.93[-12]	3.11[-12]
$3p_{1/2}-(2p_{1/2}3p_{1/2})_0$	3581.57	8.34[-17]	3.43[-14]	1.69[-13]	3.78[-13]	6.15[-13]	9.09[-13]	1.42[-12]
$3p_{1/2}-(2p_{1/2}3p_{1/2})_1$	3557.39	2.70[-16]	1.07[-13]	5.20[-13]	1.16[-12]	1.88[-12]	2.76[-12]	4.29[-12]
$3p_{1/2}-(2p_{3/2}3p_{1/2})_1$	3475.81	3.68[-16]	1.27[-13]	5.99[-13]	1.31[-12]	2.10[-12]	3.07[-12]	4.71[-12]
$3p_{1/2}-(2p_{3/2}3p_{1/2})_2$	3478.90	6.07[-16]	2.11[-13]	9.96[-13]	2.17[-12]	3.50[-12]	5.10[-12]	7.85[-12]
$3p_{3/2}-(2s_{1/2}3p_{3/2})_1$	3767.22	5.24[-17]	2.98[-14]	1.61[-13]	3.78[-13]	6.34[-13]	9.63[-13]	1.55[-12]
$3p_{3/2}-(2s_{1/2}3p_{3/2})_2$	3764.33	8.82[-17]	4.98[-14]	2.69[-13]	6.31[-13]	1.06[-12]	1.61[-12]	2.59[-12]
$3p_{3/2}-(2p_{1/2}3p_{3/2})_1$	3558.21	1.35[-16]	5.34[-14]	2.60[-13]	5.79[-13]	9.39[-13]	1.38[-12]	2.15[-12]
$3p_{3/2}-(2p_{1/2}3p_{3/2})_2$	3559.95	2.23[-16]	8.87[-14]	4.33[-13]	9.64[-13]	1.56[-12]	2.60[-12]	3.58[-12]
$3p_{3/2}-(2p_{3/2}3p_{3/2})_0$	3502.23	5.64[-17]	2.02[-14]	9.71[-14]	2.14[-13]	3.44[-13]	5.03[-13]	7.76[-13]
$3p_{3/2}-(2p_{3/2}3p_{3/2})_1$	3477.82	1.83[-16]	6.35[-14]	2.99[-13]	6.54[-13]	1.05[-12]	1.53[-12]	2.35[-12]
$3p_{3/2}-(2p_{3/2}3p_{3/2})_2$	3482.73	3.00[-16]	1.05[-13]	4.95[-13]	1.09[-12]	1.74[-12]	2.54[-12]	3.91[-12]
$3p_{3/2}-(2p_{3/2}3p_{3/2})_3$	3477.60	4.27[-16]	1.48[-13]	6.97[-13]	1.53[-12]	2.45[-12]	3.57[-12]	5.49[-12]
$3d_{3/2}-(2s_{1/2}3d_{3/2})_1$	3754.31	5.46[-17]	3.03[-14]	1.63[-13]	3.82[-13]	6.40[-13]	9.70[-13]	1.56[-12]
$3d_{3/2}-(2s_{1/2}3d_{3/2})_2$	3755.64	9.06[-17]	5.05[-14]	2.71[-13]	6.36[-13]	1.07[-12]	1.62[-12]	2.60[-12]
$3d_{3/2}-(2p_{1/2}3d_{3/2})_1$	3564.71	1.32[-16]	5.29[-14]	2.59[-13]	5.77[-13]	9.36[-13]	1.38[-12]	2.14[-12]
$3d_{3/2}-(2p_{1/2}3d_{3/2})_2$	3550.82	2.30[-16]	9.00[-14]	4.37[-13]	9.72[-13]	1.58[-12]	2.32[-12]	3.60[-12]
$3d_{3/2}-(2p_{3/2}3d_{3/2})_0$	3464.22	6.35[-17]	2.16[-14]	1.01[-13]	2.20[-13]	3.53[-13]	5.14[-13]	7.89[-13]
$3d_{3/2}-(2p_{3/2}3d_{3/2})_1$	3467.38	1.89[-16]	6.46[-14]	3.02[-13]	6.60[-13]	1.06[-12]	1.54[-12]	2.36[-12]
$3d_{3/2}-(2p_{3/2}3d_{3/2})_2$	3472.70	3.09[-16]	1.07[-13]	5.01[-13]	1.09[-12]	1.75[-12]	2.56[-12]	3.93[-12]
$3d_{3/2}-(2p_{3/2}3d_{3/2})_3$	3471.66	4.35[-16]	1.49[-13]	7.02[-13]	1.53[-12]	2.46[-12]	3.59[-12]	5.51[-12]
$3d_{5/2}-(2s_{1/2}3d_{5/2})_2$	3763.41	5.89[-17]	3.33[-14]	1.79[-13]	4.20[-13]	7.07[-13]	1.07[-12]	1.73[-12]
$3d_{5/2}-(2s_{1/2}3d_{5/2})_3$	3754.49	8.47[-17]	4.72[-14]	2.53[-13]	5.94[-13]	9.95[-13]	1.51[-12]	2.43[-12]
$3d_{5/2}-(2p_{1/2}3d_{5/2})_2$	3551.27	1.53[-16]	5.98[-14]	2.91[-13]	6.47[-13]	1.05[-12]	1.54[-12]	2.39[-12]
$3d_{5/2}-(1p_{1/2}3d_{5/2})_3$	3553.17	2.13[-16]	8.35[-14]	4.06[-13]	9.04[-13]	1.46[-12]	2.16[-12]	3.35[-12]
$3d_{5/2}-(2p_{3/2}3d_{5/2})_1$	3489.79	1.17[-16]	4.16[-14]	1.97[-13]	4.32[-13]	6.94[-13]	1.01[-12]	1.56[-12]
$3d_{5/2}-(2p_{3/2}3d_{5/2})_2$	3472.36	2.07[-16]	7.12[-14]	3.34[-13]	7.31[-13]	1.17[-12]	1.71[-12]	2.62[-12]
$3d_{5/2}-(2p_{3/2}3d_{5/2})_3$	3476.25	2.86[-16]	9.91[-14]	4.66[-13]	1.02[-12]	1.63[-12]	2.39[-12]	3.67[-12]
$3d_{5/2}-(2p_{3/2}3d_{5/2})_4$	3469.43	3.75[-16]	1.29[-13]	6.04[-13]	1.32[-12]	2.11[-12]	3.08[-12]	4.73[-12]

Table 4 Calculated values for threshold energies and rate coefficients (Sn)

Transition	Threshold energy (eV)	T (eV)							
		650	1000	1500	2000	2500	3000	4000	
$3s_{1/2}-(2s_{1/2}3s_{1/2})_0$	6852.18	1.83[-17]	8.55[-16]	9.58[-15]	3.26[-14]	6.86[-14]	1.13[-13]	2.12[-13]	
$3s_{1/2}-(2s_{1/2}3s_{1/2})_1$	6835.64	5.64[-17]	2.61[-15]	2.91[-14]	9.89[-14]	2.08[-13]	3.42[-13]	6.40[-13]	
$3s_{1/2}-(2p_{1/2}3s_{1/2})_0$	6550.70	3.97[-17]	1.56[-15]	1.57[-14]	5.02[-14]	1.02[-13]	1.63[-13]	2.94[-13]	
$3s_{1/2}-(2p_{1/2}3s_{1/2})_1$	6553.93	1.19[-16]	4.68[-15]	4.68[-14]	1.50[-13]	3.04[-13]	4.88[-13]	8.84[-13]	
$3s_{1/2}-(2p_{3/2}3s_{1/2})_1$	6316.89	1.94[-16]	6.71[-15]	6.20[-14]	1.91[-13]	3.77[-13]	5.95[-13]	1.06[-12]	
$3s_{1/2}-(2p_{3/2}3s_{1/2})_2$	6311.97	3.26[-16]	1.13[-14]	1.04[-13]	3.19[-13]	6.30[-13]	9.94[-13]	1.76[-12]	
$3p_{1/2}-(2s_{1/2}3p_{1/2})_0$	6829.00	1.90[-16]	8.79[-16]	9.77[-15]	3.31[-14]	6.95[-14]	1.14[-13]	2.14[-13]	
$3p_{1/2}-(2s_{1/2}3p_{1/2})_1$	6831.16	5.69[-17]	2.63[-15]	2.93[-14]	9.93[-14]	2.08[-13]	3.43[-13]	6.42[-13]	
$3p_{1/2}-(2p_{1/2}3p_{1/2})_0$	6574.88	3.82[-17]	1.52[-15]	1.54[-14]	4.94[-14]	1.00[-13]	1.61[-13]	2.92[-13]	
$3p_{1/2}-(2p_{1/2}3p_{1/2})_1$	6545.78	1.20[-16]	4.72[-15]	4.71[-14]	1.51[-13]	3.05[-13]	4.90[-13]	8.86[-13]	
$3p_{1/2}-(2p_{3/2}3p_{1/2})_1$	6304.70	1.98[-16]	6.81[-15]	6.27[-14]	1.93[-13]	3.80[-13]	5.99[-13]	1.06[-12]	
$3p_{1/2}-(2p_{3/2}3p_{1/2})_2$	6307.75	3.28[-16]	1.13[-14]	1.04[-13]	3.20[-13]	6.32[-13]	9.97[-13]	1.77[-12]	
$3p_{3/2}-(2s_{1/2}3p_{3/2})_1$	6834.99	2.82[-17]	1.31[-15]	1.46[-14]	4.95[-14]	1.04[-13]	1.71[-13]	3.21[-13]	
$3p_{3/2}-(2s_{1/2}3p_{3/2})_2$	6831.18	4.73[-17]	2.19[-15]	2.44[-14]	8.27[-14]	1.74[-13]	2.89[-13]	5.35[-13]	
$3p_{3/2}-(2p_{1/2}3p_{3/2})_1$	6547.41	6.00[-17]	2.36[-15]	2.36[-14]	7.55[-14]	1.53[-13]	2.45[-13]	4.43[-13]	
$3p_{3/2}-(2p_{1/2}3p_{3/2})_2$	6550.38	9.95[-17]	3.92[-15]	3.92[-14]	1.26[-13]	2.54[-13]	4.08[-13]	7.38[-13]	
$3p_{3/2}-(2p_{3/2}3p_{3/2})_0$	6345.33	3.08[-17]	1.08[-15]	1.01[-14]	3.13[-14]	6.20[-14]	9.80[-14]	1.74[-13]	
$3p_{3/2}-(2p_{3/2}3p_{3/2})_1$	6306.78	9.85[-17]	3.40[-15]	3.13[-14]	9.61[-14]	1.90[-13]	2.99[-13]	5.30[-13]	
$3p_{3/2}-(2p_{3/2}3p_{3/2})_2$	6313.91	1.62[-16]	5.61[-15]	5.18[-14]	1.60[-13]	3.15[-13]	4.97[-13]	8.80[-13]	
$3p_{3/2}-(2p_{3/2}3p_{3/2})_3$	6306.92	2.29[-16]	7.92[-15]	7.29[-14]	2.24[-13]	4.42[-13]	6.98[-13]	1.24[-12]	
$3d_{3/2}-(2s_{1/2}3d_{3/2})_1$	6816.86	2.91[-17]	1.34[-15]	1.48[-14]	5.01[-14]	1.05[-13]	1.72[-13]	3.22[-13]	
$3d_{3/2}-(2s_{1/2}3d_{3/2})_2$	6820.08	4.83[-17]	2.22[-15]	2.46[-14]	8.33[-14]	1.75[-13]	2.87[-13]	5.37[-13]	
$3d_{3/2}-(2p_{1/2}3d_{3/2})_1$	6554.27	5.94[-17]	2.34[-15]	2.35[-14]	7.53[-14]	1.52[-13]	2.44[-13]	4.43[-13]	
$3d_{3/2}-(2p_{1/2}3d_{3/2})_2$	6537.04	1.01[-16]	3.98[-15]	3.96[-14]	1.27[-13]	2.56[-13]	4.10[-13]	7.42[-13]	
$3d_{3/2}-(2p_{3/2}3d_{3/2})_0$	6288.92	3.39[-17]	1.16[-16]	1.06[-15]	3.24[-14]	6.38[-14]	1.00[-13]	1.78[-13]	
$3d_{3/2}-(2p_{3/2}3d_{3/2})_1$	6293.55	1.00[-16]	3.45[-15]	3.16[-14]	9.69[-14]	1.91[-13]	3.01[-13]	5.32[-13]	
$3d_{3/2}-(2p_{3/2}3d_{3/2})_2$	6300.60	1.66[-16]	5.70[-15]	5.24[-14]	1.61[-13]	3.17[-13]	5.00[-13]	8.85[-13]	
$3d_{3/2}-(2p_{3/2}3d_{3/2})_3$	6297.86	2.33[-16]	8.01[-15]	7.35[-14]	2.26[-13]	4.45[-13]	7.01[-13]	1.24[-12]	
$3d_{5/2}-(2s_{1/2}3d_{5/2})_2$	6828.61	3.17[-17]	1.47[-15]	1.63[-14]	5.53[-14]	1.16[-13]	1.91[-13]	3.57[-13]	
$3d_{5/2}-(2s_{1/2}3d_{5/2})_3$	6817.81	4.52[-17]	2.08[-15]	2.30[-14]	7.78[-14]	1.63[-13]	2.68[-13]	5.02[-13]	
$3d_{5/2}-(2p_{1/2}3d_{5/2})_2$	6537.92	6.77[-17]	2.65[-15]	2.63[-14]	8.43[-14]	1.70[-13]	2.73[-13]	4.94[-13]	
$3d_{5/2}-(2p_{1/2}3d_{5/2})_3$	6540.73	9.43[-17]	3.69[-15]	3.68[-14]	1.18[-13]	2.38[-13]	3.81[-13]	6.90[-13]	
$3d_{5/2}-(2p_{3/2}3d_{5/2})_1$	6325.03	6.38[-17]	2.22[-15]	2.06[-14]	6.43[-14]	1.25[-13]	1.98[-13]	3.51[-13]	
$3d_{5/2}-(2p_{3/2}3d_{5/2})_2$	6298.37	1.11[-16]	3.81[-15]	3.50[-14]	1.07[-13]	2.12[-13]	3.34[-13]	5.91[-13]	
$3d_{5/2}-(2p_{3/2}3d_{5/2})_3$	6304.64	1.54[-16]	5.30[-15]	4.88[-14]	1.50[-13]	2.96[-13]	4.66[-13]	8.25[-13]	
$3d_{5/2}-(2p_{3/2}3d_{5/2})_4$	6295.14	2.01[-16]	6.89[-15]	6.32[-14]	1.94[-13]	3.82[-13]	6.02[-13]	1.06[-12]	

事实上,文献[7]中的表 I~III 中的速率系数数据,均是由(9)式算得的。

(2) Sampson 等多年在库仑-玻恩交换近似下,已陆续计算了好多类氢轨道的电子碰撞电离截面。进而,通过数值拟合又将相应的约化截面在 5% 的精度内表示为解析式^[6]

$$Q_R^H(2l, u) = \frac{1}{u} \left[A''(2l) \ln(u) + D''(2l) \left(1 - \frac{1}{u}\right)^2 + \left(\frac{c''(2l)}{u} + \frac{d''(2l)}{u^2} \right) \left(1 - \frac{1}{u}\right) \right] \quad (10)$$

由[6]中表 2 知,对 2s 轨道,方程(10)中的拟合参数 A'' 、 D'' 、 c'' 和 d'' 分别为 0.823、3.69、0.620 和 1.79; 对 2p 轨道,它们分别为 0.530、5.07、1.20 和 2.50。

(3) 设等离子体中电子速度按麦氏分布,由方程(6)和(10),以 $\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$ 为单位,可得速率

$$\begin{aligned} \text{系数 } C = & \frac{8.63 \times 10^{-6}}{T^{1/2}} \times \frac{4(2J_{ab}'' + 1)}{(2j_b + 1)} \times \frac{1}{[Z - \sigma_{2l_j}(3l_{b_j})]^2} \\ & \times \{ D''(2l) e^{-y} - y d''(2l) E_3(y) + [A''(2l) + y c''(2l) - 2y D''(2l)] E_1(y) \\ & + y [D''(2l) + d''(2l) - c''(2l)] E_2(y) \}, \end{aligned} \quad (11)$$

式中,温度 T 的单位是 K。 $E_r(y)$ 为指数积分

$$E_r(y) = \int_y^\infty t^{r-1} e^{-t} t^{-r} dt, \quad y = I^{ik}/kT, \quad k \text{ 为玻尔兹曼常数。}$$

本文不同于文献[4]的另一个地方在于所使用的程序是统一的。方程(11)中的所有结构参数,包括阈能、组态混合系数和屏蔽常数,均统一地纳入 MODF 理论框架之下,通过运行 Grant 等(1980)的 MODF 程序包^[11],对上述所有参数一次求解。而在文献[4]中,Sampson 等的具体作法是:使用 Cowan 的相对论 Hartree-Fock 程序 HF+R^[12] 计算组态混合系数,使用 Cowan 的改进型 Hartree-Fock 程序 HFR^[13] 计算离化阈能。人们知道,在这两套程序中,相对论效应仅以 Breit-Pauli 近似的方式引入。尤其是前者,那里对相对论效应的处理仅以一级微扰的方法进行。不过,应明确指出:在实际的速率系数计算上,上述差别并不造成结果的明显分歧。这是因为,考虑到文献[4]中表 I~III 所列速率系数值已是作者做了单组态近似处理(源于 LTE)的结果,为了与他们的数据直接可比,我们也作了相应处理,于是组态混合系数计算上的分歧并未造成实际影响;而在阈能计算上,HFR 和 MODF 所得结果又总是十分接近,也不造成什么可观的差别。在表 2~4 中,分别列出了本文计算的元素 Cu、Y 和 Sn 的类 Na 离子 L 层电子直接电子碰撞电离速率系数。尽管 Sampson 等未对这些元素的同类过程作过计算,但由(7)式,可以可靠地推断出他们的计算值将比我们的高 20% 左右。

参 考 文 献

- 1 D. L. Matthews *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **54**, 110(1985)
- 3 B. J. MacGowan *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **61**, 5243(1987)
- 2 T. N. Lee *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **59**, 1185(1987)
- 4 D. H. Sampson, H. Zhang, *Phys. Rev. Lett.*, **A36**, 3590(1987)
- 5 L. B. Golden, D. H. Sampson, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **10**, 2229(1977)
- 6 D. L. Moores, L. B. Golden, D. H. Sampson, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **13**, 385(1980)
- 7 D. H. Sampson, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, **15**, 2087(1982)
- 8 H. Mayer, Los Alamos National Laboratory Report No. LA-647(unpublished)
- 9 D. H. Sampson *et al.*, *At. Data Nucl. Data Tables*, **28**, 299(1983)
- 10 R. H. Garstang, D. F. Mayers, *Proc. Camb. Phil. Soc.*, **62**, 777(1966)
- 11 I. P. Grant *et al.*, *Comp. Phys. Commun.*, **21**, 207(1980)
- 12 R. D. Cowan, *Theory of Atomic Structure and Spectra*, Berkeley: University of California Press, 1981, 586
- 13 R. D. Cowan, *ibid*, 202