第19卷 第4期
1992年4月

中 国 激 光
CHINESE JOURNAL OF LASERS

Vol. 19 No. 4
April, 1992

# 类锂硅离子电子碰撞激发速率系数*

周忠源 朱颀人 宋迪光** 潘守甫
(吉林大学原子与分子物理研究所，长春 130023)

**提要**：本文在 $Z$ 标度类氢模型下，计算了 SiXII 的电子碰撞激发速率系数。

**关键词**：电子碰撞，类锂硅离子，速率系数，$Z$ 标度类氢模型

# Excited rate coefficients for electron collision by Li-like Si ions

*Zhou Zhongyuan, Zhu Qiren, Song Diguang, Pan Shoufu*
(Institute of Atomic and Molecular Physics, Jilin University, Changchun)

**Abstract:** The excited rate coefficients for electron collision by SiXII have been computed in $Z$-scaled hydrogenic approximation.

**Key words:** electron collision, Li-like Si ion, rate coefficient, $Z$-scaled hydrogenic approximation

## 一、引 言

在高温等离子体、受控热核反应以及激光等离子体软 X 射线激光动力学的研究中，电子与高离化原子碰撞激发速率系数是一个非常重要的参数。最近，徐至展等的"类锂硅离子软 X 射线激光实验研究"[1]，使我们对类锂硅离子电子碰撞激发速率系数产生了极大的兴趣。因为，欲深入了解该激光动力学，这一系数是不可缺少的。本文中，用 $Z$ 标度类氢模型计算了类锂硅离子电子碰撞激发速率系数。

电子碰撞激发的 $Z$ 标度类氢模型是 Burgess 等[2]在考虑了高离化原子的很强的类氢行为后首先提出的。后来，Sampson 等[3,4]对此作了大量的研究。这个理论的基础是与含时一级微扰等价的 Coulomb-Born 交换近似[2]。对于 $Z/N\geqslant 3$($Z$ 是核电荷，$N$ 是离子电子数)的离子，这个理论的误差不超过 40%，并随 $Z/N$ 的变大越来越小[3,4]。在本文的计算过程中，我们对 Sampson 等沿用多年的屏蔽常数作了重要修改[5]，目的是更有效地考虑其它电子对跃迁电子的屏蔽和跃迁电子轨道自身的相对论性收缩效应对碰撞强度的影响。

## 二、理 论 考 虑

类锂离子是只有一个价电子的简单体系，与其它原子相比其价电子轨道具有更突出的类

收稿日期：1990年4月4日。
*本文是在国家教委博士点基金和中国原子分子数据研究联合体基金的资助下完成的。
**中国人民解放军 86003 部队(长春)。

氢行为，因此有理由期望 $Z$ 标度类氢模型在这里将有更好的适用性。在电子速率的 Maxwell 分布下，电子碰撞激发速率系数 $\alpha(i\to j)$ 由下式给出[3]：

$$\alpha(i\to j)=\pi a_0^2\left(\frac{8kT}{\pi m}\right)^{1/2}\frac{1}{\omega_i}\left(\frac{I_H}{kT}\right)\langle\Omega(i\to j)\rangle \tag{1}$$

其中，$T$ 为电子温度，$k$ 为 Boltzmann 常数，$\omega_i$ 为能级 $i$ 的统计权重，$I_H$ 是氢原子的电离能，$m$ 为电子静质量，$\Omega(i\to j)$ 是碰撞强度，且

$$\langle\Omega(i\to j)\rangle=\int_Y^\infty d(E/kT)e^{-E/kT}\Omega(i\to j);\quad Y=E_{ex}/kT \tag{2}$$

上式中，$E_{ex}$ 为激发能级间隔。

对于类锂离子的价电子激发，(1)式和(2)式简化为[3,4]

$$\begin{aligned}\alpha(1s^2nl\to 1s^2n'l')=&\frac{\pi a_0^2}{Z_{eff}^2(2l+1)}\left(\frac{I_H}{kT}\right)\left(\frac{8kT}{\pi m}\right)^{1/2}[A'_{nl,n'l'}\varepsilon_1(Y)\\&+D'_{nl,n'l'}e^{-Y}+C_1(nl,\ n'l')Ye^{a_{nl,n'l'}Y}\varepsilon_1(a_{nl,n'l'}Y+Y)\\&+C_2(nl,\ n'l')Y^2e^{a_{nl,n'l'}Y}\varepsilon_2(a_{nl,n'l'}Y+Y)]\end{aligned} \tag{3}$$

(3)式中，$Z_{eff}$ 为有效核电荷，$A'$、$D'$、$C_1$、$C_2$、$a$ 为类氢离子标度碰撞强度的拟合参数[3,4]，$\varepsilon_n(x)$ 为指数积分：

$$\varepsilon_n(x)=\int_x^\infty\frac{1}{t^n}e^{-t}dt \tag{4}$$

本文仍沿用文献[5]中对 $Z_{eff}$ 的算法，即把由 MCDF 程序包中算得的跃迁电子初态轨道平均半径$\langle r\rangle$代入类氢离子的非相对论平均半径公式中，从而得到有效核电荷

$$Z_{eff}=\frac{3n^2-l(l+1)}{2\langle r\rangle} \tag{5}$$

## 三、结果与讨论

在表1中列出了我们计算得到的 SiXII 离子各轨道的有效核电荷和 Sampson 等给出的有效核电荷[6~9]。由表1可以看出，屏蔽常数强烈地依赖于 $l$，而随 $n$ 的变化较慢。在一个主壳层中，内层电子对 $s$、$p$ 价电子的屏蔽较弱，这是由于贯穿效应和相对论效应引起的；而对于 $d$、$f$ 价电子，内层两个 $1s$ 电子几乎完全屏蔽。总体上看，对于轻原子的类锂离子，Sampson 等给出的结果往往对这种屏蔽估计不足。

**Table 1 The effective nuclear charges of Li-like Si ion**

| Orbit | $2s$ | $2p$ | $3s$ | $3p$ | $3d$ | $4s$ | $4p$ | $4d$ | $4f$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| $Z_{eff}$ | 12.77 | 12.28 | 12.50 | 12.17 | 12.01 | 12.38 | 12.14 | 12.01 | 12.00 |
| $Z^s_{eff}$ | 12.7 | 12.5 | 12.6 | 12.5 | 12.4 | / | / | / | / |

Note: $Z_{eff}$ are the results of this paper, $Z^s_{eff}$ are the results of Sampson's.

利用上面所描述的方法，我们计算了 SiXII 光学电子激发的速率系数。表2列出了从基态激发到 $n\leqslant 5$ 各激发态的速率系数，其中$[n]$表示$\times 10^n$。由(3)式，我们计算的速率系数 $\alpha$ 与由 Sampson 给出的 $Z^s_{eff}$ 计算的速率系数 $\alpha^s$ 的比 $R$ 为

**Table 2　Excited rate coefficients (in $cm^3 \cdot s^{-1}$) from ground state by Li-like Si ion**

| Transition | Electron temperature (eV) 100 | 200 | 300 | 400 | 500 |
|---|---|---|---|---|---|
| 2s-3s | 1.15[−11] | 3.65[−11] | 4.96[−11] | 5.57[−11] | 5.83[−11] |
| 2s-3p | 1.28[−11] | 4.87[−11] | 7.53[−11] | 9.36[−11] | 1.07[−10] |
| 2s-3d | 2.20[−11] | 7.55[−11] | 1.07[−10] | 1.24[−10] | 1.33[−10] |
| 2s-4s | 8.23[−13] | 4.31[−12] | 6.91[−12] | 8.41[−12] | 9.25[−12] |
| 2s-4p | 1.08[−12] | 6.42[−12] | 1.14[−11] | 1.50[−11] | 1.77[−11] |
| 2s-4d | 1.36[−12] | 7.16[−12] | 1.15[−11] | 1.41[−11] | 1.56[−11] |
| 2s-4f | 8.44[−13] | 4.37[−12] | 6.95[−12] | 8.43[−12] | 9.25[−12] |
| 2s-5s | 1.98[−13] | 1.30[−12] | 2.25[−12] | 2.85[−12] | 3.20[−12] |
| 2s-5p | 2.79[−13] | 2.04[−12] | 3.84[−12] | 5.22[−12] | 6.27[−12] |
| 2s-5d | 3.22[−13] | 2.07[−12] | 3.52[−12] | 4.42[−12] | 4.96[−12] |
| 2s-5f | 2.76[−13] | 1.75[−12] | 2.97[−12] | 3.71[−12] | 4.13[−12] |
| 2s-5g | 3.38[−14] | 1.95[−13] | 3.10[−13] | 3.71[−13] | 4.01[−12] |

| Transition | Electron temperature (eV) 600 | 700 | 800 | 900 | 1000 |
|---|---|---|---|---|---|
| 2s-3s | 5.92[−11] | 5.92[−11] | 5.87[−11] | 5.80[−11] | 5.71[−11] |
| 2s-3p | 1.17[−10] | 1.24[−10] | 1.31[−10] | 1.36[−10] | 1.40[−10] |
| 2s-3d | 1.38[−10] | 1.41[−10] | 1.42[−10] | 1.42[−10] | 1.42[−10] |
| 2s-4s | 9.71[−12] | 9.94[−12] | 1.00[−11] | 1.00[−11] | 1.00[−11] |
| 2s-4p | 1.98[−11] | 2.14[−11] | 2.27[−11] | 2.37[−11] | 2.45[−11] |
| 2s-4d | 1.65[−11] | 1.70[−11] | 1.72[−11] | 1.73[−11] | 1.74[−11] |
| 2s-4f | 9.71[−12] | 9.94[−12] | 1.00[−11] | 1.01[−11] | 1.00[−11] |
| 2s-5s | 3.41[−12] | 3.53[−12] | 3.59[−12] | 3.62[−12] | 3.62[−12] |
| 2s-5p | 7.06[−12] | 7.69[−12] | 8.19[−12] | 8.59[−12] | 8.93[−12] |
| 2s-5d | 5.28[−12] | 5.46[−12] | 5.56[−12] | 5.61[−12] | 5.62[−12] |
| 2s-5f | 4.38[−12] | 4.51[−12] | 4.58[−12] | 4.60[−12] | 4.60[−12] |
| 2s-5g | 4.14[−13] | 4.19[−13] | 4.19[−13] | 4.16[−13] | 4.12[−13] |

$$R=\frac{\alpha(1s^2nl\to 1s^2n'l')}{\alpha^s(1s^2nl\to 1s^2n'l')}=\frac{[Z^s_{eff}]^2}{[Z_{eff}]^2} \tag{6}$$

对于从基态 $1s^22s$ 向各激发态 $1s^2n'l'$ 的跃迁，$R\sim0.99$；对于由较低的激发态 $1s^22p$、$1s^23s$、$1s^23p$、$1s^23d$ 向较高激发态的跃迁，$R$ 分别为 1.04、1.02、1.05 和 1.07。

在表 3 中分别列出了不同近似下的碰撞强度，其中 $\Omega_F$ 是 DW(畸变波)近似下的结果[10]，$\Omega_B$ 是 CBI(Coulomb-Born I)近似下的结果[11,12]，$\Omega$ 是我们计算的结果，$E$ 为入射电子能量。从表 3 中可以看出，除 2s-3p 跃迁外，我们的结果全部介于 DW 近似和 CBI 近似结果之间。与较好的 DW 近似结果相比，我们结果的最大误差为 20% 左右，比 CBI 结果的精度提高了 5～15%。对于 2s-3p 跃迁，结果较差是由于不同近似下径向积分相消效应相差很大所造成的。在实验误差范围内，对实验数据可得的 NV、OVI 和 NeVIII，我们的结果与实验相符合，并且随着 $Z/N$ 的增加，与实验的误差越来越小。对于 $Z/N\sim3$ 的 NeVIII，除个别跃迁外，其与实验的最大误差不超过 30%。随着比值 $Z/N$ 的增加，离子中电子轨道的类氢行为定将变得愈加突出，所以，可以肯定地期望，对于 $Z/N\sim4$ 的 SiXII，本文的计算结果与实验的误差会更小。

**Table 3 Comparison of collision strengths $\Omega(i\to j)$ of electron by li-like Si ion**

| Transition | $E=22.4$(Rys) | | | $E=30.0$(Rys) | | |
|---|---|---|---|---|---|---|
| | $\Omega$ | $\Omega_F$ | $\Omega_B$ | $\Omega$ | $\Omega_F$ | $\Omega_B$ |
| $2s$-$3s$ | 0.0538 | 0.0485 | 0.0620 | 0.0559 | 0.0534 | 0.0630 |
| $2s$-$3p$ | 0.0524 | 0.0336 | 0.0353 | 0.0675 | 0.0424 | 0.0482 |
| $2s$-$3d$ | 0.109 | 0.0984 | 0.124 | 0.117 | 0.106 | 0.131 |
| $2p$-$3s$ | 0.0119 | 0.0152 | 0.0089 | 0.0115 | 0.0145 | 0.0110 |
| $2p$-$3p$ | 0.227 | 0.209 | 0.227 | 0.222 | 0.213 | 0.230 |
| $2p$-$3d$ | 0.738 | 0.642 | 0.776 | 0.822 | 0.729 | 0.866 |

## 参 考 文 献


1 徐至展 *et al.*,中国激光, **16**, 616(1989); **17**, 104(1990)
2 A. Burgess *et al.*, *Phil. Trans. Roy. Soc. London*, **A266**, 225(1970)
3 L. B. Golden *et al.*, *Astrophys. J. Suppl.*, **45**, 603(1981)
4 R. E. H. Clark *et al.*, *Astrophys.. J. Suppl.*, **49**, 545(1982)
5 朱颀人,赵力波,潘守甫,中国激光,**18**(8), 586 (1991)
6 L. B.Golden *et al.*, *J. Phys. B*, **10**, 2229(1977)
7 D. H. Sampson *et al.*, *J. Phys. B*, **14**, 903(1981)
8 L. B. Golden *et al.*, *J. Phys. B*, **11**, 3235(1978)
9 D. L. Moores *et al.*, *J. Phys. B*, **13**, 385(1980)
10 D. R. Flower, *J. Phys. B*, **4**, 697(1971)
11 O. Bely, *Ann. Astrophys.*, **29**, 131(1966); **29**, 683(1966)
12 O. Bely *et al.*, *Astron. Astrophys.*, **6**, 318(1970)