

热等离子体内原子物理研究概况 与原子分子数据的联合研制

孙永盛 郑绍唐 杜祥琬

(北京应用物理与计算数学研究所 北京 100088)

摘要 本文着重介绍了两种基本原子模型的用途、研究现状及其发展趋向. 这两种模型是: 平均原子模型和细致组态计算模型. 关于热等离子体内的原子物理过程, 本文介绍电子同高电荷离子的碰撞以及双电子复合过程的研究现状, 简单介绍了实验情况. 此外, 还介绍了中国原子分子数据研究联合体(CRAAMD)的工作概况.

关键词 原子模型, 原子物理过程, 联合研制.

1 引言

原子物理属基础研究学科, 同时又具有极强的应用背景. 本世纪 20 年代是原子物理的黄金时期. 1935 年以后发展趋于缓慢, 许多物理学家转向核物理与电子学中出现的新问题. 50 年代开始复兴. 从 60 年代起实验技术与工具不断发展, 出现了新光源(激光、同步辐射光源)、新的探测方法与手段(电子谱仪、离子阱、电子与离子交叉束技术等)和新的理论方法(如用量子亏损理论、多体微扰论、群论等以很高精度计算孤立原子的结构). 到 80 年代, 国际上出现了“原子物理热”. 这种局面的出现与近年高新技术迅猛发展直接相关. 尤其是 X 光激光、可控聚变和天体物理的研究, 需要大量的、高精度的原子离子结构及相互作用运动学数据. 无论从精度和数量上来说, 这都是具有挑战性的任务, 它迫使国际上一大批原子物理学家投身于“高温等离子体内原子物理过程”的研究.

2 原子模型

由于实际应用对原子数据的需求量十分庞大, 主要靠理论计算提供, 但为使数据可靠, 必须在一些点上有实验数据的检验. 研究等离子体内的原子结构, 理论上基本分两大类型, 一是平均原子(AA: Average Atom)模型, 再是细致组态计算(DCA: Detailed Configu-

ration Accounting)模型.

2.1 AA 原子模型

AA 模型研究的是大量原子(离子)的统计性质. 应用最广泛的是“离子球模型”. 离子球的平均半径 R_0 由 Wigner-Seitz 边界决定(与密度有关). 离子球均匀地占满等离子体系统, 彼此相接, 但不交迭. 每一个离子球内包含束缚电子和自由电子, 整个离子球保持电中性. 对于局部热动平衡(LTE)系统, 离子球内的电子服从 Fermi-Dirac 分布, 以此考虑了环境温度对原子结构的影响. 决定离子能级结构的关键是系统内部的作用势. 60 年代以前, AA 模型用得最多的是 Thomas-Fermi (TF) 势及各种修正的 TF 势^[1~4]. 70 年代, Rozsnyai 最先把 Hartree-Fock-Slater (HFS) 自洽势用于相对论 AA 原子模型^[5]研究, 其中, 除直接库仑作用外, 还考虑了电子关联和交换效应. 在他之后, 许多国家, 包括俄、英、法、德、以色列等国先后建起了含温、有界原子的 HFS 计算系统. 我们国家起步较晚, 进入 90 年代, 才掌握了这种工具^[6]. AA 模型在国防课题任务需要的大量数据研制中是很有实用价值的, 正因如此, 与此相关的计算程序及其计算细节, 国际上都未公开发表. 由于这种模型提供的结构参量表现的是统计性质, 所以实验上无法对其结构参量进行直接检验, 但对由它给出的等离子体宏观物理量, 如等离子体的电导率及辐射不透明度等, 均

可进行综合性实验检验. 国外曾利用地下核爆做过这种检验, 近年西方国家也试图在实验室内进行这种检验^[7~10].

AA 原子模型的研究工作还在继续深化. 比如, 为了解决离子球模型在密度下可能出现离子球间的交迭, 从而使离子球保持电中性的假定不再成立的问题, 英国 Crowley 提出了推广的新离子球模型; 为了提高 AA 模型的计算精度, Rozsnyai 提出在 HFS 自洽场中, 去掉 Slater 近似; 此外, 以 AA 模型单电子波函数为基础, 利用 Slater 行列式组成反对称化的组态波函数, 用于分析热等离子体光谱比起从孤立原子(或自由原子)出发的理论系统更符合实际情况, 应具有更高的精度. 基于 AA 原子模型还有大量工作可做.

2.2 DCA 原子模型

为了研究非局域热动平衡(non-LTE)等离子体动力学过程及等离子体状态诊断, 人们需要各种离化和激发状态下的原子数据, 包括能级、辐射波长、振子强度、光电离截面、电子碰撞激发、碰撞电离截面、双电子复合截面等. 这些涉及单个原子(离子)结构及行为的微观参量, 只能用 DCA 模型计算. DCA 模型的原子结构程序国际上已发表了不少, 并且随着工作的深入还在完善, 不断发表. 国际上流行最广的是 4 大程序系列, 即准相对论框架下的 Cowan 程序和 Fischer 程序, 完全相对论的 Grant 程序和 Desclaux 程序. 这些程序都是 Hartree-Fock 多组态的. 我们国家的许多学者都掌握了上述程序, 有些在原有基础上还进行了改进与发展, 并且利用它们作出了有特色的工作. 但是从高技术研究工作对原子数据的需求来说, 仅会运用上述程序是远远不够的. 比如, 在类钠 Ti、Fe、Ni 和 Cu 离子的实际研究中, 常用的相对论多组态 Dirac-Fock 程序算出的能级寿命和跃迁几率同实验测量结果并不符合, 当考虑了类 Na 离子的共振跃迁过程以后, 计算结果就同实验测量符合得很好. 共振跃迁属两步过程, 某些特殊离子状态下, 其共振线是很强的, 在等

离子体动力学描述以及等离子体状态诊断中, 共振现象是必须考虑的. 由于共振过程涉及双激发态(甚至多激发态)问题, 所以近年双激发态的研究成了离子谱学研究中的热门课题. 为研究这类问题, 人们发展了多种方法, 日本学者为研究双电子系统的动力学过程, 发展了“超球坐标强耦合方法”(HSCC), 我国台湾地区黄克宁教授等在 Desclaux 程序基础上发展了“多组态相对论随机相位近似”方法, 他们用这种办法研究多电荷重离子的光激发与光离化过程与实验测量结果符合非常好. 对双激发过程研究得较早, 比较好的是由 Hagelstein 和 Juug (1984) 创立的 YODA 程序(在 LLNL). 多年来该程序成了 LLNL 发展非平衡动力学的支柱程序, 它至今尚未正式发表. 但从作者发表的多篇研究报告中可以看出, 该程序使用的数值方法与 Grant 程序是类似的, 需考虑众多物理因素, 包括: Breit 效应、自能效应、QED 效应、真空极化等. 该程序功能齐全, 除一般的离子谱数据之外, 电子碰撞过程、Auger 速率及其它共振过程都可用它计算. Hagelstein 除了最早建立 YODA 程序之外, 在双电子复合计算中做了一项很好的工作, 对于从能级到能级之间的双电子复合速率系数的计算, 本来是很繁杂的过程, 他提出了一个只用 3 个近似参数就可描述的方法. 用这个方法他具体计算了类氦 Se 的例子, 而且精度很高. 这对于研究非平衡动力学过程来说非常方便. 根据 Hagelstein 的思路, 我国李世昌研究员等, 利用 Cowan 准相对论多组态原子结构程序, 给出了类氦 Ge 离子, 类钠 Ge 离子和类氦 Ti 离子从能级到能级的双电子复合速率系数. 同 Hagelstein 全相对论的结果比较, 最大误差不超过 18.0%. 涉及双激发态的问题很多, 各国学者都在竞相研究.

3 电子离子碰撞过程研究

电子离子碰撞激发和电离是热等离子体

内最重要的物理过程之一. 60 年代后, 研究得很多, 并对不同的对象, 发展了许多方法. 常用的有强耦合(Close-Coupling)近似、扭曲波(DW)近似、库仑玻恩(Coulomb-Born)近似、库仑贝塔(Coulomb-Bethe)近似及激发共振近似等. 其中, 最常用的是 CC 近似和 DW 近似. CC 方法计算程序的编制共有 4 种方法, 即 R 矩阵方法, 代数法, 非迭代方法以及变分方法. 对于低能电子离子碰撞问题, CC 方法算出的结果最精确, 因为在低能情况各通道之间的耦合作用很强, CC 近似充分描述了这种效应. 但是这种方法太费机时, 人们只把它作为其它方法的检验. 研究 DW 方法的报告很多, 用 DW 方法研究电子离子碰撞最有成效、成果发表最多的是宾西法尼亚大学 D. H. Sampson 教授领导的研究小组. 该组使用的计算程序主要是中国访问学者张洪麟先生编制的. 几年来该组发展了一套全相对论多组态扭曲波近似的电子离子碰撞快速计算程序. 1985 年到至今, Sampson 同张一起发表了大约 30 篇文章, 提供了大量电子离子碰撞激发和电离数据, 这些数据的精度已得到 LLNL 电子束离子阱(EBIT)上的实验测量结果验证. 实验测量了钛、铬、锰、铁四种元素的类氢离子 Ti^{20+} 、 Cr^{22+} 、 Mn^{23+} 、 Fe^{24+} 的电子碰撞激发截面, 实验结果同 Sampson 的理论计算在 10% 之内相符.

4 实验研究

实验工作的进展, 实验测量的水平, 同实验设备情况直接相关. 高电荷离子实验设备中首要的部件是离子源. 离子源的种类比较多, 比如, 原来用于核物理研究的串列加速器、重离子加速器, 传统的真空火花离子源、ECR 源、电子束离子源(EBIS)、电子束离子阱(EBIT)及电子回旋共振离子源(ECRIS)等, 这些设备都可提供不同离化度的离子. 此外, 激光与物质相互作用产生的等离子体也是重要的测量对象. 其中, 对于作高电荷离

子物理实验最好的设备是几年前在美国 LLNL 实验室研制的 EBIT, 这种设备剥离能力最强, 原子剥离程度容易控制, 体积小, 造价比较低. 据研制者称, 用 EBIT 可把周期表中的所有元素, 随意剥离到人们要求的程度, 及至把原子($Z=92$)剥成裸核. 这几年也确实看到了来自 LLNL 的多种元素离子的光谱测量报告, 计有 Eu^{53+} 、 W^{64+} 、 Au^{69+} 、 Hg^{70+} 、 Th^{80+} 等. 今年已看到在 EBIT 上测出 U^{90+} 和 U^{91+} 离子的电子碰撞电离结果.

目前, 高电荷离子物理实验常用的技术是交叉束(或平行束)技术和束箔光谱技术(BFS). 交叉束方法由于反应产额低, 要求靶室具有高真空度以提高信噪比, 因而这种实验装置的真空系统必须是很先进的. 束箔光谱可以说是测量离子结构、辐射波长、振子强度的标准方法. 但是 70 年代发现, 在用 BFS 方法测定能级寿命时, 因为对激发态没有进行选择, 许多能级产生串级效应, 致使测量存在系统误差. 这一问题已用联合分析初始能级衰变曲线的办法(ANDC)解决.

我国也开展了此类研究, 建造了相关的设备, 主要有: 由于敏院士主持的“七五”国家自然科学基金重大项目“电子与离子、原子、分子微观相互作用过程的实验和理论研究”中, 由复旦大学物理二系建成了我国第一个离子束与电子束交叉实验系统. 中国原子能科学院核物理所建起了束箔光谱装置, 为我国薄弱的原子物理基础填补了一些空白.

5 原子分子数据的联合研制

在我国 863 计划提出不久, 为调动全国原子物理学界的技术力量, 共同完成我国高新技术所需原子参数的研制任务, 1987 年 2 月由北京应用物理与计算数学研究所牵头, 联合复旦大学等国内十个单位的原子物理学工作者成立了“中国原子分子数据研究联合体”(CRAAMD).

联合体得到了国防科工委、国家科委和

原核工业部的经费支持,工作上受到了朱光亚主任的关心与指导,于敏、黄祖洽、杨福家、李家明等院士直接参与了联合体的有关活动.八年来,联合体作了不少事情,这里仅把与本题相关的部分情况介绍给读者.

5.1 课题研究

虽然联合体的成员只有十个,但实际参加联合研究的涉及全国17个单位,21个课题组.八年中,联合体同这此研究组先后签定研究合同(课题)28项,投入研究经费总计约50万元.这28个课题内容,除少部分是与航天技术有关的之外,其它绝大部分题目都是同X光激光与惯性约束聚变研究相关的.当然,“相关”之中包括两种情况,多数题目在合同执行期间就可向用户提供数据服务,少数课题需要晚些时候才能提供数据服务,这种题目带有基础预研性质.例如,复旦大学物理二系王炎森小组,近两年一直从事“电子离子碰撞电离截面的理论计算”工作,该组提供C、O、Al、Fe等元素类氢、类氦、类锂离子的电离截面,已直接用于X光激光机理研究.吉林大学潘守甫研究组“关于复合机制原子参数的评估”工作,为X光激光复合机制研究提供了多种急需参数.武汉物理所吴礼金组正在承担全相对论电子离子碰撞快速计算程序的编制任务,该程序类似于前面提到的Sampson-Zhang程序,它对我国电子离子碰撞研究将是一个很大促进.

为满足高新技术研究对原子(离子)数据的需求,在国外也是采用协作、联合的办法.为保证第一个国际热核反应堆(ITER)设计对原子分子数据的需求,1988年国际原子能机构(IAEA)专门成立了原子分子数据组(A+M Unit).该小组一成立就着手建立世界性的(包括CRAAMD在内)原子分子数据网络,以便集中全世界原子数据方面的力量,共同完成这一历史性的任务.

5.2 国际学术交流

为加快我国原子物理研究的步伐,1988年秋我们请美国Los Alamos研究所著名原

子物理学家R. D. Cowan来华讲学两周,并帮助我们运行他自己编制的原子结构与光谱计算程序.在以后的几年中,一方面自己开发应用Cowan程序,为高技术研究提供了大量数据,同时在国内9个单位11个课题组推广了Cowan程序.现在国内许多学者,特别是青年学者,都已掌握了此程序.在Cowan程序的基础上,北京应用物理与计算数学研究所已建起了双电子复合速率系数计算系统,使用了Cowan程序提供的波函数.该所方泉玉等已建起了准相对论扭曲波近似下的电子离子碰撞激发与电离截面的计算系统.其它许多单位,也用Cowan程序作了很好的工作,这里不一一列举.

1993年5月,我们请美国宾西法尼亚州立大学D. H. Sampson教授来华讲学三周,讲授关于电子离子碰撞全相对论扭曲波快速计算理论及其编制程序的技术关键.参加听课的人员来自全国6个单位,共约20人. Sampson教授工作认真,每次课前他都印发讲义手稿,他把电子离子碰撞的基本理论,全相对论扭曲波的主要公式,以及提高计算速度的多种技巧,全部传授给了我们.他的这些技巧对于我国电子碰撞准相对论扭曲波计算程序以及不久即将完成的全相对论扭曲波计算程序的编制都有直接的帮助.

5.3 组织联合基金申请

为尽快改变我国原子物理学研究基础薄弱的局面,联合体成立不久,就积极组织大的课题研究,联合向国家进行基金申请.具体操办了国家“七五”期间重大基金项目的联合申请与争取立项工作.由于敏主持的国家自然科学基金重大项目:“电子与离子原子分子微观相互作用的理论与实验研究”就是国内原子物理学界联合申请的第一个重大基金项目.该项目下设7个课题,由国内七个研究单位承担,实际参加人数共78人.1987年7月立项,1994年底国家自然科学基金委已对项目进行验收,并评为优秀.在此期间,复旦物理二系建的电子离子交叉束碰撞实验装置已

达国际水平. 由中国科技大学近代物理系研制的中能高分辨电子能损谱仪和(e, 2e)电子动量谱仪, 是世界同类装置中最好的之一, 它们均用电子作探针深入物质结构的原子结构层次进行研究.

参 考 文 献

- 1 Feynman R P, et al. Phys. Rev., 1949, 75 : 1561
- 2 Cowan R D, et al. phys. Rev., 1957, 105 : 144
- 3 Carson T R, et al. Montly Notices Roy. Astron. Soc., 1968, 140 : 483
- 4 Zink J W. Phys. Rev., 1968, 176 : 279
- 5 Rozsnyai B F. Phys. Rev., 1972, A5 : 1137
- 6 Sun Yongsheng, et al. JQSRT, 1994, 51(1~2) : 411
- 7 Desilva Alan W, et al. Phys. Rve., 1994, E49 : 4448
- 8 Benage J F, et al. Phys. Rev., 1994, E49 : 4391
- 9 Springer P T, et al. JQSRT, 1994, 51 : 371
- 10 Erskine D, et al. JQSRT, 1994, 51 : 97

Survey of Atomic Physics Researches in Hot Plasmas and Associated Research for Atomic and Molecular Data

Sun Yongsheng Zheng Shaotang Du Xiangwan

(*Institute of Applied Physics and computational Mathematics, Beijing 100088*)

Abstract The uses, status and tendency of the two essential atomic models were presented emphatically. They are the average atom (AA) model and the detailed configuration accounting (DCA) model. Concerning atomic processes in hot plasmas, the electron-ion collision and the dielectronic recombination were introduced especially. However, the experimental status were less presented. The general situation were presented in this paper.

Key Words atomic model, atomic physics process, associated research.

(上接 18 页)

Development of High Pulsed Power Technology and Its Applications

Liu Xisan

(*Institute of Applied Electronics, Chengdu 610003*)

Abstract In this paper the research progress of high pulsed power technology and its applications in the past 30 years in CAEP have been briefly introduced. Meanwhile, related important topics of future development are also given. High pulsed power is a more dynamic science and technology at the front position in the world. It has a wide great future.

Key Words pulsed power technology, intense electron beam, flash X-ray radiography, nuclear hardening, free electron laser, high power microwave.