

电子与 Ar 的高电荷态离子的碰撞电离^y

赵 永, 陈重阳, 王炎森

(复旦大学现代物理研究所, 上海 200433)

摘要: 利用扭曲波 Born 交换近似方法, 系统地计算了 Ar 的类氢到类钠离子的电子碰撞电离截面和速率系数. 同时使用精度高的拟合公式对直接电离截面、激发截面、总激发自电离截面和速率系数进行了拟合, 以满足实际应用的需要.

关键词: 高电荷态离子; 碰撞电离截面; 扭曲波近似; 拟合公式

中图分类号: O53: 0414. 22 文献标识码: A

1 引言

电子与离子碰撞是原子物理中一个基本过程. 在天体物理、等离子体物理的研究中, 需要大量的碰撞截面和速率系数的数据. 随着 X 射线激光、可控核聚变等高技术项目的发展, 电子与高电荷态离子碰撞的数据越来越有广泛的应用.

虽然 Ar 离子的电离截面已经在理论和实验方面被广泛地研究过, 但在较宽的入射电子能量范围内, 没有较多可以利用的实验数据, 尤其是对 Ar 的高电荷态离子. 理论方面也缺乏系统计算. 在本文中, (1) 我们使用半相对论修正的扭曲波 Born 交换近似方法(本方法的详细讨论, 可参见我们以前的工作^[1, 2]), 系统地计算了 Ar 的高电荷离子 Ar⁷⁺, Ar⁸⁺, ..., Ar¹⁷⁺ 的电离截面和速率系数. 对于类锂、类铍和类钠离子, 我们也考虑了组态混合下的激发自电离. (2) 我们用 4 个参量的经验公式拟合了直接电离, 直接激发以及总的激发自电离截面. (3) 我们还给出了一套经验公式, 只要利用上述计算各种截面的那些拟合参量就可以快速、精确地得到速率系数.

2 截面计算和拟合

总的电子碰撞电离截面由下式给出:

$$Q_i(E_i) = Q_d + Q_{ea} = Q_o(E_i) + Q_i(E_i) +$$

$$\sum_j Q_j^i(E_i) B_j^a, \quad (1)$$

式中的 Q_d 表示直接电离截面, $Q_o(E_i)$ 和 $Q_i(E_i)$ 分别表示外层和内层的直接电离截面. Q_{ea} 表示总激发自电离截面, $Q_j^i(E_i)$ 是内层电子到自电离能级 J 的激发截面, B_j^a 是能级 J 的自电离分支比.

对直接电离截面, 有几种方法可以来拟合我们的计算结果. 经计算^[1]发现, Younger 的公式^[3]是最好的:

$$uI_d^2 Q = A \left| 1 - \frac{1}{u} \right| + B \left| 1 - \frac{1}{u} \right|^2 + C \ln u + D \frac{\ln u}{u}, \quad (3)$$

式中, $uI_d^2 Q$ 是约化电离截面, u 是约化入射能量, $u = E_i / I_d$, 其中 E_i 是入射电子能量, I_d 是电离阈能, A, B, C, D 是拟合参量, 单位是 $Ry^2 \pi a_0^2$ (Ry 是里德堡能量, a_0 是 Bohr 半径). 拟合公式的平均偏差 F 定义为:

$$F(\%) = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{Q_{fit}(u) - Q_{cal}(u)}{Q_{cal}(u)} \right|^2} } \times 100, \quad (4)$$

其中, Q_{fit} 和 Q_{cal} 分别是拟合值和计算值, N 是被拟合的计算点的个数.

在 Ar 的类 Li, 类 Be 和类 Na 离子的激发自电离截面的计算中, 我们用下面的公式对到自电离能

^y 收稿日期: 2002 - 03 - 05; 修改日期: 2002 - 06 - 13

* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10104005); 中国原子分子联合体; 国家 863 高技术惯性约束聚变主题资助项目
作者简介: 赵 永(1974-), 男(汉族), 安徽蚌埠人, 硕士生, 从事电子与高电荷态离子碰撞的理论研究.

级 j 的激发截面进行拟合^[4]:

$$uI_e^2 Q_{\frac{j}{e}} = A + B/u + C/u^2 + D \ln u, \quad (5)$$

其中, A, B, C, D 也是拟合参量, 这里 u 是入射电子的约化能量, 这里 $u = E_i/I_e$, 其中, I_e 是激发阈能. 为了得到各能级 J 的激发自电离截面, 必需乘上相应的分支比 B_j^a .

3 速率系数的计算和拟合

当入射电子的速率有一定分布时, 需计算电离速率系数, 它的定义是:

$$\alpha = \int v f(v) Q(v) dv, \quad (6)$$

其中 $f(v)$ 是速率分布函数, 一般取 Maxwell 分布. 利用约化截面可得到速率系数同电子温度的关系:

$$\begin{aligned} \alpha(kT) &= \alpha_d + \alpha_{ea} \\ &= \frac{4}{\sqrt{2\pi m}} \times \frac{1}{(kT)^{3/2}} \int_0^\infty e^{-E/kT} Q_i(E) E dE \\ &= \frac{1.090 \times 10^{-6} (\text{cm}^3/\text{s})}{(kT)^{3/2}} \cdot \\ &\quad \left(\int e^{-uI_e/kT} uI_e^2 Q_d du + \right. \\ &\quad \left. \sum_j B_j^a \int e^{-uI_e/kT} uI_e^2 Q_e^j du \right), \quad (7) \end{aligned}$$

表 1 Ar 各价离子电离阈能 I_d (Ry), 约化截面的 4 个拟合参量 (Ry²π a₀²) 及平均偏差 F

离子态	I_d	A	B	C	D	F
Ar ¹⁷⁺ (1s)	325.55	12.692	- 4.658 6	0.334 95	- 10.393	0.22
Ar ¹⁵⁺ (2s)	67.586	7.465 4	- 2.531 3	0.639 83	- 5.192 9	0.25
Ar ¹⁴⁺ (2s)	62.581	15.221	- 5.192 8	1.247 4	- 10.771	0.25
Ar ⁹⁺ (2s)	40.626	17.641	- 6.377 2	1.230 1	- 13.797	0.25
Ar ⁹⁺ (2p)	35.539	66.680	- 26.165	1.995 9	- 53.434	0.29
Ar ⁷⁺ (2s)	4.784	19.303	- 7.257 3	1.184 7	- 15.736	0.22
Ar ⁷⁺ (2p)	29.077	81.406	- 34.060	3.900 2	- 68.213	0.28
Ar ⁷⁺ (3s)	10.564	5.863 5	- 2.268 3	0.720 95	- 3.887 2	0.41

在公式(1)和(7)中, 总自电离截面 Q_{ea} 和 α_{ea} 是来源于每一条能级的贡献之和. 为了方便计算总激发自电离截面 Q_{ea} 和速率系数 α_{ea} , 我们对严格计算得到的 Q_{ea} 也用下式拟合:

$$uI_{ea}^2 Q_{ea} = A + B/u + C/u^2 + D \ln u, \quad (10)$$

其中 $u = E_i/I_{ea}$, I_{ea} 是每个离子到最低自电离能级

的激发阈能. 现在只要将公式(10)中的 4 个参量代入公式(9)中(注意公式(9)中的 I_e 和 Q_e 相应地要用 I_{ea} 和 Q_{ea} 代替)便能直接得到 α_{ea} 值了.

表 2 列出了对 Ar⁷⁺, Ar¹⁴⁺ 和 Ar¹⁵⁺ 用公式(10)拟合时的 4 个参量和最低激发阈能. 作为拟合的一个例子, 图 1 给出 Ar⁷⁺ 的总激发自电离截面. 图中

$$\begin{aligned} \int e^{-uI_e/kT} uI_e^2 Q_d du &= \frac{e^{-x}}{x} \{ A [1 - x f_1(x)] + \\ &\quad B [1 + x - x(x+2) f_1(x)] + \\ &\quad C f_1(x) + D x f_2(x) \}, \quad (8) \end{aligned}$$

式中, $x = I_d/kT$, $f_1(x) = e^{-x} \int \frac{e^{-ux}}{u} du$, $f_2(x) = e^{-x} \int \frac{\ln u}{u} e^{-ux} du$. 同样, 利用拟合公式(5)可得到

$$\begin{aligned} \int e^{-uI_e/kT} uI_e^2 Q_e du &= \frac{e^{-x}}{x} \{ A + B x f_1(x) + \\ &\quad C x [1 - x f_1(x)] + D f_1(x) \}. \quad (9) \end{aligned}$$

关于 $f_1(x)$ 和 $f_2(x)$ 的计算, 在文献[1]中有详细的讨论.

4 结果和讨论

(1) 总电离截面

作为例子, 表 1 列出了用公式(3)计算时使用的部分离子的内外壳层直接电离的电离阈能和拟合参量, 平均偏差也在表 1 中给出. 由表可见平均偏差小于 0.5%.

实线是来自于每一条自电离能级贡献之和, 点线是来自于公式拟合. 可见拟合是相当好的.

表 2 最低激发阈能 (Ry) 和激发自电离截面拟合参量 ($Ry^2\pi a_0^2$)

离子态	I_{ca}	A	B	C	D
Ar ⁷⁺	17.9	-3.1294×10^{-13}	9.01×10^{-13}	-6.0695×10^{-13}	2.5413×10^{-13}
Ar ¹⁴⁺	225.8	-1.4013×10^{-14}	3.9172×10^{-14}	-9.5297×10^{-15}	6.3315×10^{-15}
Ar ¹⁵⁺	226.4	-1.2762×10^{-15}	9.5495×10^{-15}	1.0855×10^{-15}	8.9726×10^{-15}

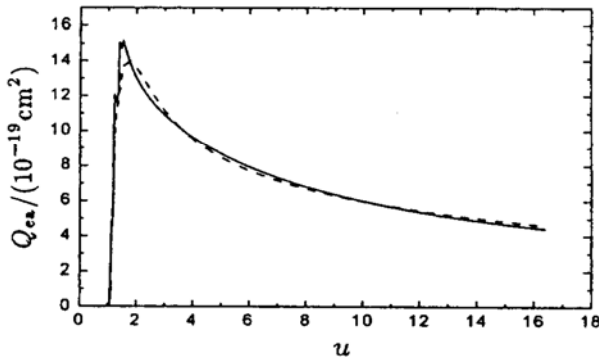


图 1 总自电离截面 ($u = E/243.9 \text{ eV}$)
— 来自于每条自电离能级贡献之和, ... 来自于拟合公式.

对于 Ar 的高电荷态离子 Ar⁷⁺, ..., Ar¹⁷⁺ 的电离截面和速率系数的计算表明, 我们的扭曲波计算与实验测量、其它量子理论计算及编评推荐数据相一致, 一般比 Lotz 公式好. 下面给出两个例子.

图 2 中, 比较了我们计算的 Ar¹⁵⁺ 的电离截面和实验数据及其它理论值. 我们的结果低于 Donets 等的测量约 15%, 高于 Lennon 等^[6] 的推荐数据约 7%, 并且低于 Reed 和 Chen^[7] 的相对论扭曲波计算结果约 10%. Lotz 公式^[8] 的结果比其它数据都高. 由图 3 可见, 我们的 Ar⁹⁺ 的电离截面计算结

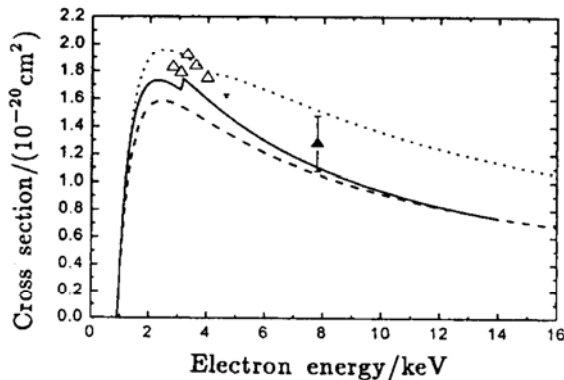


图 2 Ar¹⁵⁺ 的总电离截面
— 我们的计算; ---Lennon 的推荐数据; ...来自 Lotz 公式, Δ Reed 和 Chen 的计算结果; \blacktriangle Donets 的实验数据.

果和 Rachafi 的实验结果、Lennon^[7] 的推荐数据及 Lotz 公式^[8] 的结果都符合得比较好. 比 Laghdas 的结果了扭曲波近似的 R 矩阵理论计算结果低约 25%.

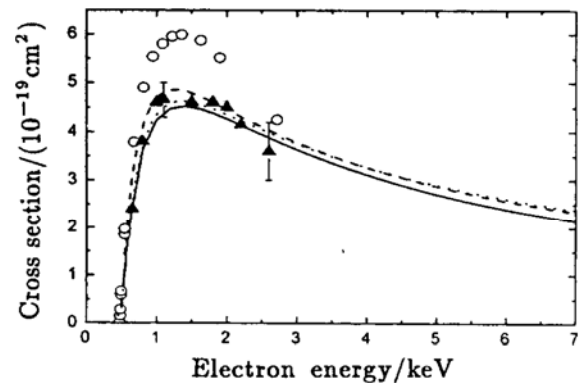


图 3 Ar⁹⁺ 的总电离截面
— 我们的计算; ---Lennon 的推荐数据; ...来自于 Lotz 公式; \circ Laghdas 的计算结果; \blacktriangle Rachafi 的实验数据.

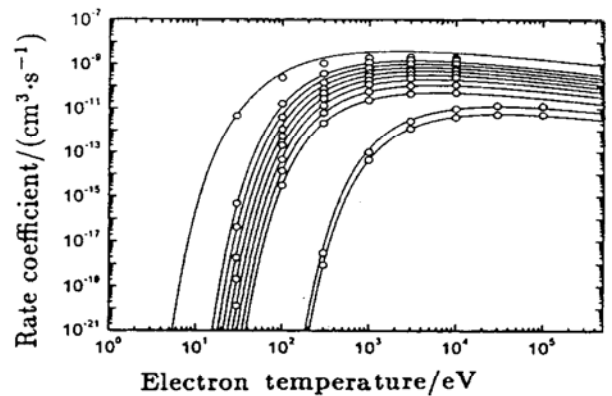


图 4 电离速率系数
— 我们的计算. \circ Voronov 推荐值. 从上到下各条曲线代表 Ar⁷⁺, ..., Ar¹⁷⁺ 的速率系数.

(2) 电离速率系数

在图 4 中, 给出了我们的速率系数计算值与 Voronov 的推荐值^[11] 的比较. 可以看出除了低电荷态 Ar⁷⁺ 以外, 我们的结果与 Voronov 的推荐值^[11] 相当符合. 我们也与 Arnaud 的编评数据^[12] 进行了比较, 符合得也不错.

参 考 文 献:

- [1] Chen C, Hu W, Fang D, *et al.* Electron-ion Collisional Ionization Cross Sections for the Li Isoelectronic Sequence[J]. Atomic Data and Nuclear Data Tables, 1996, **64**(2): 301.
- [2] Chen C, Qi J, Wang Y, *et al.* Electron-ion Collisional Ionization Cross Sections and Rates for the Na Isoelectronic Sequence[J]. Atomic Data and Nuclear Data Tables, 2001, **79**(1): 65.
- [3] Younger S M. Cross Sections and Rate for Direct Electron-impact Ionization of Sodiumlike Ions[J]. Phys Rev, 1981, **A24**(3): 1 272.
- [4] Griffin D C, Pindzola M S, Botcher C. Distorted-wave Calculations of Electron-impact Ionization of Highly Ionized Na-like Ions[J]. Phys Rev, 1987, **A36**: 3 642.
- [5] Donets E D, Ovsyannikov V P. Investigation of Ionization of Positive Ions by Electron-impact[J]. Sov Phys JETP, 1981, **53**: 466.
- [6] Lennon M A, Bell H B, Gilbody J G, *et al.* Recommended Data on the Electron-impact Ionization of Atoms and Ions Fluorine to Nickel [J]. J Phys Chem Ref Data, 1988, **17**(3): 1 285.
- [7] Chen M H, Reed K J. Electron-impact Ionization of Charged Lithlike Ions[J]. Phys Rev, 1992, **A45**(7): 4 525.
- [8] Lotz W. Electron-impact Ionization Cross-sections and Ionization Rate Coefficients for Atoms and Ions from Hydrogen to Calcium[J]. Z Phys, 1968, **216**: 241.
- [9] S Rachafi. Absolute Cross Section Measurements for Electron-impact Ionisation of Ar⁷⁺ [J]. J Phys, 1996, **B24**: 1 037.
- [10] Laghdas K, Reid R H G, Joachain C J, *et al.* Electron-impact Ionization of Ar⁹⁺ [J]. J Phys, 1995, **B28**: 4 811.
- [11] Voronov G S. A Practical Fit Formula for Ionization Rate Coefficients of Atoms and Ions by Electron-impact: $Z=1-28$ [J]. Atomic Data and Nuclear Data Tables, 1997, **65**(1): 1.
- [12] Arnaud M, Rothenflug R. An Updated Evaluation of Recombination and Ionisation Rates[J]. Astron Astrophys Suppl, 1985, **60**: 425.

Electron-impact Ionization Cross Sections and Rates for Highly Charged Argon Ions^{*}

ZHAO Yong, CHEN Chong-yang, WANG Yarr-sen

(*Institute of Modern Physics, Fudan University, Shanghai 200433, China*)

Abstract: A distorted-wave Born exchange (DWBE) approximation including relativistic correction is used to calculate the electron-impact ionization cross sections and rate coefficients for the highly charged argon ions: Ar⁷⁺, Ar⁸⁺, . . . , Ar¹⁷⁺. The comparison of the calculated results with the experimental data and other theoretical calculations shows that the DWBE method is valid for these ions. The calculated results for direct ionization cross sections and excitation autoionization are fitted by empirical formulas to meet the requirements of applications. A set of improved empirical formulas are obtained for the fast and accurate calculations of rate coefficients from the fit parameters of cross sections.

Key words: highly charged ion; ionization cross section; distorted wave approximation; fit formula

^{*} **Foundation item:** National Natural Science Foundation for China(10104005); Chinese Research Association of Atomic and Molecular Data; National High-tech ICF Committee in China