CNIC-00980
SNU-0002

中国核科技报告

CHINA NUCLEAR SCIENCE AND TECHNOLOGY REPORT

电子和原子离子碰撞强度经验公式的评估

A EMPIRICAL FORMULA EVALUATION OF THE COLLISION STRENGTH FOR THE ELECTRONS WITH ATOMS AND IONS

(*In Chinese*)

中国核情报中心
原子能出版社

China Nuclear Information Centre
Atomic Energy Press

（京）新登字 077 号

图书在版编目（CIP）数据

电子和原子离子碰撞强度经验公式的评估＝A EMPIRICAL FORMULA EVALUATION OF THE COLLISION STRENGTH FOR THE ELECTRONS WITH ATOMS AND IONS/姚立山等著. —北京：原子能出版社，1995. 6

ISBN 7-5022-1345-7

Ⅰ. 电… Ⅱ. 姚… Ⅲ. ①碰撞强度②经验公式 Ⅳ. O562. 5

中国版本图书馆 CIP 数据核字（95）第 02492 号

原子能出版社出版发行
责任编辑：李曼莉
社址：北京市海淀区阜成路 43 号 邮政编码：100037
中国核科技报告编辑部排版
核科学技术情报研究所印刷
☆
开本 787×1092 1/16・印张 1・字数 18 千字
1995 年 6 月北京第一版・1995 年 6 月北京第一次印刷

姚立山：陕西师范大学物理系副教授，近代物理研究室副主任。1963年毕业于兰州大学现代物理系。

Yao Lishan: Associate professor of Physics Department, Shaanxi Teachers University. Director of Modern Physics Laboratory. Graduated from Department of Modern Physics, Lanzhou University in 1963.

CNIC-00980
SNU-0002

电子和原子离子碰撞强度经验公式的评估*

姚立山　史志强　刘绍湘**　吴苓芸

（陕西师范大学，西安）

摘　要

在调研大量有关电子和原子离子碰撞激发截面 Q (excitation cross section)，强度 Ω (collision strength) 和速率系数 R (rate coefficient) 实验数据以及理论计算的基础上，经过比较，分析和评估了各种类型的经验公式。这些经验公式都是应用严格的理论模型设计，公式推导以及程序计算，并利用计算的结果和测量值进行拟合，给出 Q,Ω 和 R 等的数值，特别是对碰撞强度 Ω 计算公式进行参数化。在评估的基础上，推荐出一套比较合理而又方便的经验公式。

* 中国原子分子数据研究联合体资助
** 西安武警学院，西安

A EMPIRICAL FORMULA EVALUATION OF THE COLLISION STRENGTH FOR THE ELECTRONS WITH ATOMS AND IONS*

(*In Chinese*)

Yao Lishan Shi Zhiqiang Liu Shaoxiang** Wu Lingyun

(SHAANXI NORMAL UNIVERSITY, XI'AN)

ABSTRACT

The experimental data and theoretical calculations have been researched for the collision excitation cross section Q, collision strength Ω and rate coefficient R on the electrons with atoms and ions. The empirical formulae of the different types have been compared, analysed and evaluated also. These empirical formulae have been given by the strict theoretical model, formulae derivation and programme calculation. A set of values of the Q, Ω and R have been given by means of the calculating results and measurering values, particularly, on the calculating formula parametrization of the collision strength Ω. On the basis of evaluating data, a set of the reasonable and convenient empirical formulae have been recommended.

* Supported by Chinese Research Association for Atomic and Molecular Data

** Armed Force Police and Technology College, Xi'an

引 言

电子与原子离子碰撞的激发截面的计算在高温低密度等离子体的研究中是非常重要的。例如，在天体物理学、磁聚束可控热核聚变反应、由堆材料的溅射产生的能量（功率）损失的计算、等离子体的诊断和大功率软 X 射线激光器的研究等方面，具有非常重要的理论和实际意义。

但是，由于实验设备和测量技术目前尚不完善，碰撞的激发截面 Q (excitation cross section)、碰撞强度 Ω (collision strength) 和激发速率系数 R (rate coefficient) 的测量数据比较缺乏，为了满足工程设计和理论研究的需要，大量的数据都是按照一定的理论模型经过计算给出的。在这些物理量中最重要的是碰撞强度 Ω，其它如截面 Q、速率系数 R、振子强度 f (oscillator strength) 和谱线强度 S (line strength) 等都可由 Ω 表达出来。因此对碰撞强度的实验测量和理论计算以及计算公式的参数化是一个重要的研究课题。为了方便起见，常常使用有效碰撞强度 Υ 代替 Ω。

理论上对这些量 Q,Ω,Υ,R 的计算都是在一定的近似条件下，解 Schrodinger 方程，涉及的主要理论方法有以下几种：

Close Coupling Approximation (CC)

Distorted Wave Approximation (DW)

Distorted Wave Static Exchange (DWSE)

Distorted Wave Born Approximation (DWB)

Coulomb Born Approximation (CB)

Coulomb Bethe Approximation (CBe)

Plane Wave Born Approximation (PWB)

R-Matrix Method (RM)

Infinite Z Hydrogenic Method (IZHM)。

在具体的计算中对不同的原子离子的组态混合 (Configuration Mixing)、中间耦合 (Intermediate Coupling) 或先辈混合 (Parentage Mixing) 等采用不同的方法，同时还要考虑跃迁的不同类型，如允许跃迁、偶极跃迁、禁戒跃迁等。为了提高计算结果的精度，对不同的碰撞电子能量及靶原子离子的电荷数 Z 还须进行各种修正，如共振效应 RE (Resonance Effect)、自电离效应 AI (Autoionization Effect) 以及双电子复合效应 DR (Dielectronic Recombination Effect) 等。

由此可见，对电子和原子离子碰撞的各种物理量的计算是一个庞大而十分复杂的研究工作，在实际应用上为了方便起见，不少原子分子数据的专家在大量的实验测量和理论研究的基础上，试图寻找简单而又合适的参数化公式，这是当前计算 Ω,Υ,Q 和 R 的一个研究的方向。这些工作中具有代表性的研究包括 T. Kato, D. H. Sampson, Honglin Zhang, R. E. H Clark 及 J. B. Mann 等人的工作，除此之外，还有 Baolin Jia 等人的研究工作。这些研究的方法基本上可分为 3 个步骤：首先进行严格的理论模型设计，公式推导以及程序计算，其次寻找一套合适的可供拟合的经验公式；第三，利用计算的结果或测量进行拟合给出一套较好的（最佳的）参数值，再用经验公式和最佳拟合参数就可方便地给出较为可靠的、具有一定实际应用价值的 Q,Ω,Υ,R 等数值。由此可见，在实际应用中并不需要由理论

计算给出大量冗繁复杂的关于Q, Ω, Υ和R的各种表格，而只要给出经验的拟合公式和一套最佳的拟合参数就可得到Q, Ω, Υ和R的数据。由于对数据实际要求的不同，所选取经验公式的形式也各不相同，如有3参数、4参数、5参数、6参数和9参数的方法。所以公式的拟合误差一般在1～10%之间，基本上可以满足实际工作的需求。

本工作主要是在对前人的工作进行分析，比较和评估的基础上，推荐一套比较合理，适用而又非常方便的经验公式和最佳拟合参数，提供给从事实际工作的科学工作者使用。

1　经验公式的收集及分析

通常电子和原子离子碰撞激发截面Q、碰撞强度Ω、激发速率系数R以及振子强度f和谱线强度S的计算，都可归结为对碰撞强度Ω或对有效碰撞强度Υ的计算。这是因为Q直接地与Ω有关，而Υ及R都可表示为对Ω的碰撞电子速度的Maxwellian分布的平均或积分。因此，对这些量的经验公式的评估基本上可以归结为对碰撞强度Ω（或Υ）经验公式的分析、比较和评估。

(1) T. Kato等人[1]对Y. Itikawa等人[2,3]的经验参数拟合公式，用国际原子能机构IAEA出版的International Bulletin on Atomic and Molecular Data for Fusion Research以及名古屋大学等离子体研究所信息中心所提供的文献引用的数据进行了评估，发现在所有的碰撞强度的计算和测量结果中，Ω随入射电子温度T_e的变化是一条比较光滑的曲线（在双对数坐标下），于是提出了用曲线拟合的方法来求拟合参数，并给出经验公式，只要知道这些参数就可方便地求出与T_e相应的Ω值来，进一步即可得到Q, Υ和R等的数值。

Kato等人计算了He-like ions的$1s^2\ {}^1S$-$1s2s\ {}^{1,3}S$以及$1s^2\ {}^1S$-$1s2p\ {}^{1,3}P$的碰撞强度，Z的范围为2～42，计算考虑了Z较小时阈附近共振效应的影响。对Z较大时（$Z \geqslant 20$），较高的电离离子除自电离AI外，IC和DR效应也是很重要的。此外，在对CC，IC和RM进行理论计算时，共振效应也需要考虑。Kato等人在对用这些方法计算的数据进行评价的基础上给出了Ω的经验证公式（分析表达式）：

$$\Omega_{ij} = A + B/x + C/x^2 + D/x^3 + E\ln x \tag{1}$$

其中i，j表示被激发原子离子的初态及末态；$x = E_e/\Delta E$为约化电子能量，即碰撞电子能量E_e以阈能ΔE为单位；ΔE为从i→j态的激发能；A, B, C, D和E为拟合参数。公式（1）可简称为5参数拟合公式。

为了消除复杂的共振结构产生的影响，碰撞强度Ω常常用有效碰撞强度表示：

$$\Upsilon_{ij} = \int_0^\infty \Omega_{ij} e^{-E_j/kT_e} d(E_j/kT_e)$$
$$= y\{(A/y + C) + (D/2)(1 - y) + e^y E_1(y)(B - Cy + y^2 D/2 + E/y)\} \tag{2}$$

其中，k为玻尔兹曼常数，

T_e为电子温度，以eV为单位，

$E_j = E_e - \Delta E$

$y = \Delta E_e/kT_e$

$E_1(y) = \int_y^\infty e^{-t}/t\,dt$　　指数积分函数

可见只要从实验测量或理论计算得到 $\Omega_{ij}(T_e)$ 或 $\Upsilon_{ij}(T_e)$ 的数据，就可以利用（1）式或（2）式进行非线性拟合，求得最佳的拟合参数 A,B,C,D 和 E 。此后利用这套参数和经验公式就可计算在一定的电子能量（T_e）下的碰撞强度 Ω_{ij}，并得到碰撞截面：

$$Q_{ij}=\frac{\pi a_0^2}{g_i E(Ry)}\cdot\Omega_{ij}\qquad (\mathrm{cm}^2)\tag{3}$$

a_0 是玻尔半径，g_i 是初态的统计权重。
利用（3）式可以得到 Υ_{ij}，于是速率系数为：

$$\begin{aligned}R&=\frac{8.010\times10^{-8}}{g_i T_e(\mathrm{eV})^{1/2}}\cdot e^{-\Delta E/kT_e}\Upsilon_{ij}\\&=\frac{8.010\times10^{-8}}{g_i T_e(\mathrm{eV})^{1/2}}\cdot e^{-y}\Upsilon_{ij}\qquad(\mathrm{cm}^3\cdot\mathrm{s}^{-1})\end{aligned}\tag{4}$$

在公式（1）中，当 $D=0$ 时适用于允许跃迁，仅有 A,B,C 和 E 项；当 $E=0$ 时，适用于禁戒跃迁，此时仅有 A,B,C 和 D 项。此外，若碰撞电子的能量较高时，Ω_{ij} 有渐近式（$4g_i f_i/\Delta E)\ln x$，这样，参数就为一固定的常数，于是拟合方程变为：

$$\Omega_{ij}=A+B/x+C/x^2\tag{5}$$

的形式，此即为最简单的 3 参数拟合公式。

Kato 等人曾仔细地对各个不同参数数目的拟合结果进行了比较，得出（5）式较 4 参数的结果仅差 8%，而（5）式的拟合误差也在 10%左右。作者认为，在要求不太高的情况下可以推荐使用经验公式(5)。电子能量越高，该公式可靠性越大，越接近于渐近值 Bethe limit。当拟合结果不太好时，须考虑共振效应 RE，此时碰撞强度为：

$$\Omega_{ij}=\Omega_{NR}(x)+\Omega_R(x)\tag{6}$$

Ω_{NR} 是无共振时的碰撞强度（$x>x_1$），Ω_R 是有共振效应时的贡献，

$$\Omega_R=Px+Q\qquad(1\leqslant x\leqslant x_1)\tag{7}$$

其中 P,Q 和 x_1 由产生共振效应的边界条件确定。有效碰撞强度可相应地写为

$$\Upsilon_{ij}=\Upsilon_{NR}+\Upsilon_R\tag{8}$$

这里，

$$\begin{aligned}\Upsilon_{NR}=&ye^{(1-x_1)y}\{(A/y+C/x_1+(D/2)(1/x_1^2-y/x_1)+(E/y)\ln x_1+\\&e^{yx_1}E_1(x_1,y)[B-Cy+(D/2)y^2+E/y]\}\end{aligned}\tag{9}$$

$$\Upsilon_R=P(1+1/y)\{1-e^{-(1-x_1)}y(x_1+1/y)(1+1/y)\}+Q[1-e^{(1-x_1)}y]$$

其中 P,Q 和 x_1 均可由方程通过计算的 Υ_{ij} 来确定。
（2）J. B. Mann 等人[4]用 DW 方法计算了电子与 He-like Fe ions 碰撞的强度 Ω，同时给出了简单的计算公式

$$\Omega(\mathrm{LS};\mathrm{L'S'})=C_0+\sum_{n=1}^{4}C_n e^{-n\alpha x}+C_5/x+C_6/x^2+C_7\ln x\tag{10}$$

同 Kato 的公式（1）比较，除了 C_0,C_5,C_6 和 C_7 项相同外，增加了带有 α 参数的指数形式 C_1，C_2,C_3 和 C_4 参数。作者得到的拟合百分偏差≤1%，而均方根偏差～0.12%。利用（10）式的 Ω 得到的碰撞截面 Q 形式与（3）式相同，而得到的速率系数形式为：

$$R=C_E[C_0y^{-1}e^{-y}+\sum_{n=1}^{4}C_n(n\alpha+y)^{-1}e^{-(n\alpha+y)}+(C_5+C_7y^{-1})E_1(y)+C_6E_2(y)]\tag{11}$$

式中：

$$y = \Delta E/T_e$$

$$C_E = \frac{8.010\times10^{-8}}{g_i T_e(\mathrm{eV})^{1/2}} y \qquad (\mathrm{cm^3\cdot s^{-1}})$$

$$E_1(y) = \int_y^\infty \mathrm{e}^{-t}/t\mathrm{d}t \text{ 和}$$

$$E_2(y) = y\int_y^\infty \mathrm{e}^{-t}/t^2\mathrm{d}t = \mathrm{e}^{-y} - yE_1(y) \tag{12}$$

$$g_i = (2L+1)(2S+1) \qquad (\text{LS 耦合})$$

显然，由于增加了拟合参数的个数，拟合误差及均方根误差均较 Kato 的结果要好。

此外，Baolin Jia 等人[5,6]分析了 CC，RM 及 DM 方法的计算结果，认为 CC 和 RM 的结果比较可靠，而 DW 法在高能时有其优点。在分析了 Kato 和 Mann 使用的公式（1）和（10）后，认为 9 参数较 3 参数或 4 参数的拟合效果要好，故作者采用 Mann 的公式（10）计算了 He-like ions 的碰撞强度，利用非线性最小二乘拟合得到 $C_0\sim C_7$ 及 α 的最佳拟合参数，并计算了速率系数，它可表示为碰撞截面对碰撞电子速度的 Maxwellian 的平均，即

$$R = \langle QV\rangle \tag{13}$$

Q,Ω 和 R 的分析表达式与 Mann 有完全相同的形式：

$$R = \frac{8.010\times10^{-8}}{g_i T_e(\mathrm{eV})^{1/2}}\mathrm{e}^{-y}\Upsilon(y) \tag{14}$$

$$\Upsilon(y) = y\{C_0y^{-1} + \sum_{n=1}^{4}\frac{C_n\mathrm{e}^{-n\alpha}}{n\alpha+y} + C_5\mathrm{e}^yE_1(y) + C_6\mathrm{e}^yE_2(y) + C_7\mathrm{e}^y y^{-1}E_1(y)\}$$

作者按上述公式计算了 He-like ions 电子碰撞激发速率系数的推荐值。有效碰撞强度评价数据取自理论计算的结果，跃迁类型为 $1\,{}^1\mathrm{s}\to 2^{(2n+1)}\mathrm{L}$ 和 $2^{(2n+1)}\mathrm{L}\to {}^{(2n'+1)}\mathrm{L}'$，$Z=2\sim44$。作者对 $1\,{}^1\mathrm{s}\to2\,{}^1\mathrm{p}$ 跃迁的计算结果与 Kato 的比较相差 10%左右，究其原因除了所选取的评价的数据外，主要的还是由于拟合公式及参数差异所引起，可以想象就 Kato 等人自己的计算也有 8%的差别。

(3) Y. Itikawa 等人[3]较早地用下述经验公式计算了 C 和 O 原子离子的电子碰撞激发截面，碰撞强度及速率系数。

类型 1

$$\Omega_{ij} = A + B/x + C/x^2 + D/x^3 + E\ln x \qquad \text{适用于一般情况} \tag{15}$$

这与 Kato 的公式完全一致。

类型 2

$$\Omega_{ij} = A/x^2 + B\mathrm{e}^{-Fx} + C\mathrm{e}^{-2Fx} + D\mathrm{e}^{-3Fx} + E\mathrm{e}^{-4Fx} \qquad \text{适用于特殊情况} \tag{16}$$

有效碰撞强度公式相应地有如下形式：

类型 1

$$\Upsilon = y(A/y + C) + (D/2)(1-y) + \mathrm{e}^yE_1(y)(B - Cy + (D/2)y^2 + E/y) \tag{17}$$

类型 2

$$\Upsilon = Ay\{1-\mathrm{e}^yE_1(y)y\} + (\frac{B}{F+y}\mathrm{e}^{-F} + \frac{C}{2F+y}\mathrm{e}^{-2F} + \frac{D}{3F+y}\mathrm{e}^{-3F} + \frac{E}{4F+y}\mathrm{e}^{-4F})y \tag{18}$$

积分函数 $E_1(y)$ 与前述相同。

上述经验公式的拟合误差≤10%。

若考虑共振效应的影响时

$$\Omega_R^{eff}(x) = Px + Q \qquad (1 \leqslant x \leqslant x_1) \tag{19}$$

Q_R 为有共振效应时对碰撞强度的贡献，此时不能用一个简单的公式去拟合，其处理方法与 Kato 的相同。

(4) D. H. Sampson 等人[7~11]考虑了原子离子中束缚电子对碰撞电子的屏蔽作用而引入有效电荷数（Z_{eff}）的概念

$$Z_{eff} = Z - \sigma \tag{20}$$

σ 为屏蔽常数，可由查表求得，这时碰撞强度 Ω 可以用一个叫做标定碰撞强度 (Scaling Collision Strength) 的量 $Z^2\Omega_{ij}$ 表示：

$$\Omega_{ij} = \frac{1}{Z_{eff}^2}[Z^2\Omega_{ij}]_{cal} \tag{21}$$

标定碰撞强度 $Z^2\Omega_{ij}$ 具有如下的经验公式形式

$$Z^2\Omega(\varepsilon) = C_0 + \frac{C_r}{(a+\varepsilon)^r} + \frac{C_{r+1}}{(a+\varepsilon)^{r+1}} + \frac{4}{3}Z^2S\ln\varepsilon \tag{22}$$

其中 r 取整数 1 或 2，$\varepsilon = E/\Delta E$ 为约化电子能量，以阈能 ΔE 为单位。若取 $a=0, r=1$ 时，(22) 式与 Kato 公式相似，只不过这里得到的是标定碰撞强度。同样地谱线强度也有相似的形式

$$S = \frac{1}{Z_{eff}^2}[Z^2S]_{cal}$$

如果从实验测量或理论计算得到 $Z^2\Omega_{ij}(\varepsilon)$ 的话，则拟合系数 C_0, C_r, C_{r+1} 和 a 就可以由最小二乘法求得。这样就可用前述公式（22）求得 Ω_{ij} 进而得到碰撞截面 Q_{ij} 及速率系数 R

$$R = \frac{\pi a_0^2}{g_i Z_{eff}^2}N_e\left(\frac{8kT}{\pi m}\right)\left(\frac{I_H}{kT}\right)\Big\{C_0y^{-1} + \frac{4}{3}Z^2SE_1(y) + ye^{ay}\Big[\frac{C_r}{(a+1)^{r-1}}E_r(ay+y) + \frac{C_{r+1}}{(a+1)^r}E_{r+1}(ay+y)\Big]\Big\} \tag{23}$$

这里 $I_H = 1, N_e$ 为电子密度，

$$g_i = \begin{cases} 2J+1 & \text{精细结构跃迁} \\ (2L+1)(2s+1) & \text{LS 耦合} \\ 2(2j+1) & \text{jj 耦合} \end{cases}$$

如果进一步改进还须考虑态电子的交换效应，则有：

$$Z_{eff}^2 = Z - \sigma^e \tag{24}$$

上述公式中引用的参数，文中均有表格给出，所以 Ω, Q, T 和 R 均可计算求得。

另外，S. J. Goett 等人[12,13]给出的标定碰撞强度的经验公式为：

$$Z^2\Omega(\varepsilon) = C_0 + \frac{C_1}{(a+\varepsilon)} + \frac{C_2}{(a+\varepsilon)^2} + \frac{5}{3}Z^2S\ln\varepsilon \tag{25}$$

作者取 $a = 0.1, \varepsilon = E/\Delta E$，对（25）式进行最小二乘拟合可求得 C_0, C_1 和 C_2 3 个参数。公式（25）与 Sampson 公式（22）无多大差别，仅仅是对数项系数由 4/3 变为 5/3。在计算有

效电荷数 Z_{eff} 时，取屏蔽系数 $\sigma=0.9$ (He-like) 和 $\sigma=2.0$ (Be-like)，这时适用于 $\Delta n=0$ 的跃迁。当碰撞电子能量非常高时，$Z^2\Omega$ 有渐近形式：

$$Z^2\Omega(\varepsilon) \sim (4/3)Z^2S\ln\varepsilon \tag{26}$$

其余的计算过程与 Sampson 的完全相同，作者给出的拟合精度为 2～3%。

(5) K. A. Berrington 等人[14]也使用两种类型的经验公式。

类型 1 (适用于禁戒跃迁)：

$$\Omega=\sum_{n=0}^{4}a_nE^{-n}=a_0+a_1E^{-1}+a_2E^{-2}+a_3E^{-3}+a_4E^{-4} \tag{27}$$

类型 2 (适用于允许跃迁)：

$$\Omega=a_0\ln E+\sum_{n=1}^{4}a_nE^{-(n-1)} \tag{28}$$

公式 (28) 和 Kato 等人的公式形式完全相同，只不过用 E 代替 $x=E_e/\Delta E$. 对 Q,Υ 和 R 的计算方法和 Kato 等人的也完全一致。拟合精度约 2%。

(6) H. L. Zhang 等人[15]用 Coulomb-Born Exchange 法把所有电子的静电相互作用及相对论效应作为一级微扰处理，因此方法不适用于低 Z，因为在这样的情况下，e-e 相互作用很大，不能作为微扰对待。作者计算了 He-like ions 的碰撞截面、强度和速率系数。其计算方法与 Sampson 等人[8]的完全相同，只不过这里考虑了电荷交换效应。此时

$$Z_{eff}^2=Z-\sigma^n \tag{29}$$

另外，H. L. Zhang 等人[16,17]还用相对论 DW 法求 Li-like ions 的碰撞强度、速率系数等（$Z=8\sim92$），给出的截面公式为

$$Q_{ij}=\frac{\pi a_0^2}{g_iK_1^2}\Omega_{ij} \tag{30}$$

其中 K 为碰撞电子的相对论波数，与电子动能有关。

$$K_1^2=E_i(Ry)[1+(\alpha^2/4)E_i(Ry)] \tag{31}$$

精细结构常数 $\alpha=e^2/hc$. 作者发现，Q^λ 随 Z 光滑地变化，可以对 Z 进行拟合，而不是 Ω 对 Z 的拟合，于是有

$$\Omega(n_al_aj_a\rightarrow n_a'l_a'j_a')=8\sum_\lambda Q^\lambda(j_a,j_a';j_a,j_a') \tag{32}$$

其中：

$j_a=n_al_aj_a$，

$j_a'=n_a'l_a'j_a'$，而

$Q^\lambda=[a_1Z^4+a_2Z^3+a_3Z^2+a_4Z+a_5+a_6Z^{-1}+a_7Z^{-2}+a_8Z^{-3}]^2$

对阈附近低 Z，如 $2p^*$，2s→2p 的计算，精度≤1%，拟合误差分别为 1.4 和 1.2%。

(7) R. E. H. Clark 等人[18~21]用 DW 法计算了复杂原子离子的电子碰撞激发速率系数，在碰撞强度的经验公式中，对自旋允许跃迁有：

$$\Omega(x)=C_0+C_1/x+C_2/x^2+C_3\ln x \tag{33}$$

这相对于 $D=0$ 时 Kato 的公式 (1)，拟合精度～5%。而对偶极允许跃迁（$\Delta n=0$）使用的公式为

$$\Omega(Z,x)=\frac{1}{(Z-b_1)^2}(C_0+\frac{C_1}{x}+\frac{C_2}{x^2})+\frac{1}{(Z-b_2)^2}C_3\ln x \tag{34}$$

对 $\Delta n = 1$ 有：

$$\Omega(Z,x) = \frac{1}{(Z+b_1+d_1/Z)^2}(C_0+\frac{C_1}{x}+\frac{C_2}{x^2}) + \frac{1}{(Z+b_2+d_2/Z)^2}(C_3\ln x + C_4) \quad (35)$$

对自旋允许的偶极跃迁，$C_0, C_3 = 0$，最小二乘法求出系数 $C_0 \sim C_4$，拟合精度约 10%。这时的速率系数可以表示为：

$$R = F_1(Z)C_E[\frac{C_0 e^{-y}}{y} + C_1E_1(y) + C_2E_2(y)] + F_2(Z)C_E[\frac{C_3}{y}E_1(y) + C_4\frac{e^{-y}}{y}] \quad (36)$$

其中：

$$C_E = \frac{8.010\times10^{-8}}{(2L+1)(2S+1)T^{1/2}}$$

$$F_1(Z) = 1/[Z+b_1+d_1/Z]^2$$

$$F_2(Z) = 1/[Z+b_2+d_2/Z]^2$$

电子碰撞阈能可利用下述公式求得

$$E_t(\Delta E) = a_0 + a_1Z + a_2Z^2 + a_3Z^3 + a_4Z^4 \qquad (\mathrm{eV}) \qquad (37)$$

计算的阈能的误差≤1%。

除了上述研究工作外，A. K. Bhatra 等人[21]计算了 Ne-like 的速率系数，使用的经验公式与 Kato、Mann 等人的完全相同，计算结果和实验比较相差 1%，激发速率系数的精度～2%。A. K. Pradhan 等人[22]也用包括相对论效应在内的 DW、CC 理论计算了 He-like ions（$Z \geqslant 20$）的电子原子离子碰撞强度及速率系数，同时还考虑了自电离 AI 及双电子复合 DR 效应的影响。M. Mohan 等人[23]应用 RM 法计算了 N_i^{19+} 从基态到激发态的激发截面，碰撞强度及速率系数，所用公式与 Kato 等人的完全相同。

2 经验公式的评估和推荐

前面我们对收集到的碰撞强度 Ω 经验公式进行了分析比较，根据拟合参数的多少基本上可划分为 3 参数、4 参数、5 参数及 9 参数等拟合公式，而按拟合类型又可划分为允许跃迁和禁戒跃迁两种类型。此外，为了提高拟合的精度，还可包括各种各样的修正：周围电子的静电屏蔽效应，共振效应，自电离效应，双电子复合效应以及态电子交换效应。不管怎样考虑上述的修正，经验公式的基本形式不会改变，基本上是以 Kato 的公式 (1) 为基础，在此之上增减参数。所以最基本的必须包括有碰撞电子能量 $x = E_e/\Delta E$ 的零次项，一次方的倒数项，二次方的倒数项，再加一个对数项或者再增加几个负指数项，其目的是为了拟合曲线更接近于实验值。从拟合的精度来看，各种拟合的精度在 1～5%之内，个别的可以在 10%。这样基本上可以满足高温等离子体的研究及等离子体诊断所要求的精度。而用标定碰撞强度的方法计算碰撞强度的经验公式，主要用于电子与复杂原子离子碰撞的情形。公式 (34)，(35) 中，拟合系数及待定的常数较多，如 a, b_1, b_2, d_1, d_2 以及 $C_0 \sim C_4$，同时还要确定屏蔽常数 σ 及 σ'（带电子交换）。因此，拟合公式中不确定因素太多，拟合精度较差。一般在 10%左右。

根据以上分析，我们认为在不太复杂的原子离子的情况下，推荐 9 参数的碰撞强度经验公式，其理由是：

(1) 9 参数的公式中除了包括常数项及一次项，二次项的倒数项和对数项外，还包括带有 α 参数的 4 个幂次项，和公式 (1) 比较，更多参数的拟合肯定对提高拟合的精度是有益

的，事实上，9 参数的拟合精度都较高，一般为 1%～5%。

(2) 和标定碰撞强度经验公式比较，没有待定常数，因此相对来看既简单又直观，方便。

(3) 如果跃迁类型比较简单时，在一定条件下，9 参数很容易化简为 3 参数，4 参数以及 7 参数的拟合公式，计算起来更为简单。

(4) 拟合的经验公式对于 Q,Ω,Υ 和 R 的计算不但快速方便，而且一般地能完全满足实际应用中对这些量的精度的要求。

推荐的 9 参数经验公式的具体形式如下：对于从初态 i 到末态 j 的电子碰撞激发强度

$$\Omega_{ij}(x) = C_0 + \sum_{n=1}^{4} C_n e^{-n\alpha x} + C_5 x^{-1} + C_6 x^{-2} + C_7 \ln x \tag{38}$$

相应的有效碰撞强度

$$\Upsilon_{ij}(y) = y\{C_0 y^{-1} + \sum_{n=1}^{4} \frac{C_n e^{-n\alpha}}{n\alpha + y} + C_5 e^y E_1(y) + C_6 e^y E_2(y) + C_7 e^y E_1(y)\} \tag{39}$$

其中，$x = E_e/\Delta E$ 是电子的约化能量，以阈能为单位，

$y = \Delta E/T_e$ 是电子温度 T_e 以 eV 为单位，

$E_1(y)$ 和 $E_2(y)$ 分别为指数积分函数：$\int_y^\infty e^{-t}/t\,dt$ 和 $\int_y^\infty e^{-t}/t^2\,dt$

由 Ω_{ij} 或 Υ_{ij} 计算碰撞截面的公式为：

$$Q_{ij} = \Omega_{ij}/g_i\Delta E \cdot x = \Omega_{ij}/g_i \cdot E_e(\mathrm{Ry}) \qquad (\pi a_0^2) \tag{40}$$

其中初态统计权重

$$g_i = \begin{cases} 2J+1 & \text{允许自旋跃迁} \\ (2L+1)(2S+1) & \text{LS 耦合} \\ 2(2j+1) & \text{jj 耦合} \end{cases}$$

由 Ω 或 Υ 计算激发速率系数的公式为

$$R = \frac{8.010 \times 10^{-8}}{g_i \sqrt{T_e(\mathrm{eV})}} e^{-y}\Upsilon(y) \qquad (\mathrm{cm^3 \cdot s^{-1}}) \tag{41}$$

这里，电子温度 T_e 若以 k 为单位，则：

$$R = \frac{8.63 \times 10^{-6}}{g_i \sqrt{T_e(\mathrm{K})}} e^{-y}\Upsilon(y) \tag{42}$$

当有共振效应的影响时，则推荐 Kato 等人的经验公式，Ω 及 Υ 分别有如下形式

$$\Omega_{ij}(x) = \Omega_{NR}(x) + \Omega_R(x) \tag{43}$$

$\Omega_{NR}(x)$ 为共振时的碰撞强度，其形式与前述相同（当 $x > x_1$ 时）。

$$\Omega_R(x) = Px + Q \qquad 1 \ll x \ll x_1 \tag{44}$$

其中，x_1 为由产生共振效应的边界条件确定。相应的碰撞强度 Υ 有以下形式：

$$\Upsilon_{ij} = \Upsilon_{NR} + \Upsilon_R$$

而 Υ_{NR} 和 Υ_R 分别为：

$$\Upsilon_{NR} = ye^{(1-x_1)y}\{(A/y + C/x_1 + (D/2)(1/x_1^2 - y/x_1) + (E/y)\ln x_1 + e^{yx_1}E_1(x_1,y)(B - Cy + (D/2)y^2 + E/y)\} \tag{45}$$

$$\Upsilon_R = P(l + 1/y)\{1 - e^{(1-x_1)y}(x_1 + 1/y)/(l + 1/y)\} + Q(1 - e^{(1-x_1)}/y) \quad (46)$$

其中 P、Q 和 X_1 可由方程决定。

有关公式中各符号的意义见前述的解释，此处不再赘述。

关于有效碰撞强度 Υ，速率系数 R 的经验公式（38）和（39）式的具体推导参见附录。

参 考 文 献

[1] Takato Kato, et al. ADNDT, 1989, 42: 313

[2] Ilikawn Y, et al. ADNDT, 1984, 31: 215

[3] Ilikawn Y, et al. ADNDT, 1985, 33: 149

[4] Mann J B. ADNDT, 1983, 29, 407

[5] Jia B L, et al. CRAAMD（内部资料）, 1992

[6] Jia B L, et al. CRAAMD（内部资料）, 1992

[7] Sampson D H, et al. ADNDT, 1985, 29: 467

[8] Sampson D H, et al. ADNDT, 1985, 32: 343

[9] Sampson D H, et al. ADNDT, 1985, 32: 435

[10] Sampson D H, et al. ADNDT, 1986, 35: 267

[11] Sampson D H, et al. JP/B, 1982, 15: 2087

[12] Goett S J, et al. ADNDT, 1980, 25: 185

[13] Goett S J, et al. ADNDT, 1983, 29: 535

[14] Berrington K A, et al. ADNDT, 1985, 33: 195

[15] Zhang H L, et al. AJSS, 1987, 63: 487

[16] Zhang H L, et al. ADNDT, 1990, 44: 31

[17] Zhang H L, et al. ADNDT, 1987, 36: 167

[18] Clark R E H. ADNDT, 1986, 34: 4151

[19] Clark R E H. ADNDT, 1987, 37: 17

[20] Clark R E H, et al. AJP, 1982, 254: 412

[21] Clark R E H, et al. AJSS, 1982, 49: 545

[22] Pradhan A K, AJSS, 1985, 59: 183

[23] Mohan M, et al. JP/B, 1990, 23: 997

附　　录

关于电子与原子离子碰撞激发速率系数及有效碰撞强度公式的推导

按定义，速率系数为：

$$R = \langle Q_{ij}V \rangle \tag{A1}$$

其中 V 为碰撞电子的速度，Q_{ij} 为碰撞截面：

$$Q_{ij} = \frac{\pi a_0^2}{g_i \Delta E \cdot x}\Omega_{ij} \tag{A2}$$

其中 Ω_{ij} 为碰撞强度，取如下经验公式：

$$\Omega_{ij}(x) = C_0 + \sum_{n=1}^{4} C_n e^{-n\alpha x} + C_5 x^{-1} + C_6 x^{-2} + C_7 \ln x \tag{A3}$$

ΔE：阈能（激发能）

$x = E_e/\Delta E$，约化电子能量

E_e：入射电子能量

g_i：初态统计权重（$2J_i + 1$）

碰撞电子速度的 Maxwellian 分布为：

$$\begin{aligned}\frac{\Delta N}{N} &= \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{m}{kT}\right)^{3/2} v^2 \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right)dv \\ &= \frac{2}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{kT}\right)^{3/2} E^{1/2} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right)dE\end{aligned} \tag{A4}$$

于是，

$$\begin{aligned}R &= \int_{\Delta E}^{\infty} \frac{\Omega_{ij}\pi a_0^2}{g_i E}\left(\frac{2E}{m}\right)^{1/2} \frac{2}{\sqrt{\pi}}\left(\frac{1}{kT}\right)^{3/2} E^{1/2} \exp\left(\frac{E}{kT}\right)dE \\ &= \int_{\Delta E}^{\infty} \frac{\Omega_{ij}}{g_i T^{1/2}} \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{m}} \frac{2}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{k}} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) d\left(\frac{E}{kT}\right) \\ &= \frac{2\sqrt{2}\pi a_0^2}{\sqrt{m\pi k}} \cdot \frac{1}{g_i T^{1/2}} \int_{\Delta E}^{\infty} \Omega_{ij} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) d\left(\frac{E}{kT}\right)\end{aligned} \tag{A5}$$

若令积分号前系数为 C_E 则：

$$C_E = \frac{2\sqrt{2}\pi a_0^2}{\sqrt{m\pi k}} \frac{1}{g_i T(\mathrm{eV})^{1/2}} \tag{A6}$$

其中，电子质量 $m = 9.109534 \times 10^{-31}\mathrm{kg}$，

玻尔兹曼常数 $k = 1.380662 \times 10^{-23}\mathrm{JK}^{-1}$，

玻尔半径 $a_0 = 0.529177 \times 10^{-10}\mathrm{m}$，

$T_e = 1\mathrm{eV/K} = 1.160 \times 10^4\mathrm{K}$。

故，

$$\begin{aligned}C_E = \frac{1}{g_i T_e(\mathrm{eV})^{1/2}} & \frac{\sqrt{8\pi}}{\sqrt{9.109534 \times 10^{-31} \times 1.380662 \times 10^{-23}}} \\ & \times (0.529177 \times 10^{-10})^2 \times 1.6021892 \times 10^{-19} \\ & \times 13.6058 \div \sqrt{1.160 \times 10^4} \times 10^6 \qquad (\mathrm{cm}^3 \cdot \mathrm{s}^{-1})\end{aligned} \tag{A7}$$

上式中考虑了能量是以 Ry 为单位，故进行换算

1Ry＝13.6058 eV

$1\mathrm{eV}=13.6058\times1.6021892\times10^{-18}\mathrm{J}$

$1\mathrm{m}^3=10^6\mathrm{cm}^3$

化简后得

$$C_E=\frac{8.010\times10^{-8}}{g_i\sqrt{T_e(\mathrm{eV})}} \tag{A8}$$

$$\begin{aligned}R&=C_E\int_{\Delta E}^{\infty}\Omega_{ij}\exp(-E/kT)\mathrm{d}(E/kT)\\&=\frac{8.010\times10^{-8}}{g_i\sqrt{T_e(\mathrm{eV})}}\int_{\Delta E}^{\infty}\Omega_{ij}\exp(-E/kT)\mathrm{d}(E/kT)\end{aligned} \tag{A9}$$

（A9）左右端积分为：

$$\begin{aligned}&\int_{\Delta E}^{\infty}\Omega_{ij}\exp(-E/kT)\mathrm{d}(E/kT)\\&=\int_{\Delta E}^{\infty}\Omega_{ij}\exp(-\frac{E_j+\Delta E}{kT})\mathrm{d}(\frac{E_j+\Delta E}{kT})\\&=\mathrm{e}^{-\Delta E/kT}\int_{0}^{\infty}\Omega_{ij}\mathrm{e}^{-E_j/kT}\mathrm{d}(E_j/kT)\end{aligned} \tag{A10}$$

其中，相对于激发态 j 的能量，

$$E_j=E-\Delta E$$

令 $y=\Delta E/kT, x=E/\Delta E$，则有

$$\begin{aligned}&\mathrm{e}^{-\Delta E/kT}\int_{0}^{\infty}\Omega_{ij}\mathrm{e}^{-E_j/kT}\mathrm{d}(E_j/kT)\\&=\mathrm{e}^{-y}\int_{0}^{\infty}\Omega_{ij}\mathrm{e}^{-(E-\Delta E)/kT}\mathrm{d}(\frac{E-\Delta E}{kT})\\&=\mathrm{e}^{-y}\int_{1}^{\infty}\Omega_{ij}\mathrm{e}^{-yx}\mathrm{e}^{y}\mathrm{d}(yx)\\&=y\int_{1}^{\infty}\Omega_{ij}\mathrm{e}^{-yx}\mathrm{d}x\end{aligned} \tag{A11}$$

故有，

$$R=\frac{8.010\times10^{-8}}{g_i\sqrt{T_e(\mathrm{eV})}}\mathrm{e}^{-y}\Upsilon(y) \tag{A12}$$

其中有效碰撞强度 $\Upsilon(y)$ 取形式：

$$\Upsilon(y)=y\mathrm{e}^{y}\int_{1}^{\infty}\Omega_{ij}\mathrm{e}^{-yx}\mathrm{d}x \tag{A13}$$

再代入 Ω_{ij} 的经验公式，并逐项进行积分得，

第一项

$$\int_1^\infty C_0 e^{-yx}dx = [-C_0/y]\cdot e^{-yx}\Big|_1^\infty = (C_0/y)\cdot e^{-y} \tag{A14}$$

第二项

$$\int_1^\infty C_n e^{-(n\alpha+y)x}dx = [-C_n/(n\alpha+y)]\cdot e^{-(n\alpha+y)x}\Big|_1^\infty$$

$$= C_n/(n\alpha+y)\cdot e^{-n\alpha}e^{-y} \tag{A15}$$

第三项

$$\int_1^\infty C_5 x^{-1}e^{-yx}dx = C_5 E_1(y) \tag{A16}$$

第四项

$$\int_1^\infty C_6 x^{-2}e^{-yx}dx = C_6(-x^{-1}e^{-yx}\Big|_1^\infty + \int_1^\infty x^{-1}(-ye^{-yx})dx)$$

$$= C_6(e^{-y} - yE_1(y)) = C_6 E_2(y) \tag{A17}$$

第五项

$$\int_1^\infty C_7 \ln e^{-yx}dx = C_7(-y^{-1}e^{-yx}\ln x\Big|_1^\infty + \int_1^\infty y^{-1}e^{-yx}x^{-1})dx$$

$$= C_7 y^{-1}E_1(y) \tag{A18}$$

于是，

$$\int_1^\infty \Omega_{ij}e^{-yx}dx = [C_0 y^{-1} + \sum_{n=1}^{4}\frac{C_n e^{-n\alpha}}{n\alpha+y} + C_5 e^y E_1(y) + C_6 e^y E_2(y) + C_7 y^{-1}e^y E_1(y)]e^{-y} \tag{A19}$$

故，

$$\Upsilon(y) = y\{C_0 y^{-1} + \sum_{n=1}^{4}\frac{C_n e^{-n\alpha}}{n\alpha+y} + C_5 e^y E_1(y) + C_6 e^y E_2(y) + C_7 y^{-1}e^y E_1(y)\} \tag{A20}$$

其中，

$$E_1(y) = \int_y^\infty e^{-t}/t\,dt$$

$$E_2(y) = y\int_y^\infty e^{-t}/t^2 dt \doteq e^y y E_1(y)$$

此外，若电子温度以 K 为单位，则（A7）式的计算中略去 $\sqrt{1.160\times10^4}$ 项，得到：

$$C_E = \frac{8.630\times10^{-6}}{g_i\sqrt{T_e(\mathrm{K})}} \qquad (\mathrm{cm^3\cdot s^{-1}}) \tag{A21}$$

此时，速率系数变成，

$$R = \frac{8.630\times10^{-6}}{g_i\sqrt{T_e(\mathrm{K})}}e^{-y}\Upsilon(y) \qquad (\mathrm{cm^3\cdot s^{-1}}) \tag{A22}$$