

# 原子和分子数据研究进展

姚锦章 于洪伟

(中国原子能科学研究院, 中国核数据中心, 北京, 102413)

回顾了原子分子数据研究的历史, 概述了原子分子数据现状和近期研究重点。

**关键词** 原子分子数据 能级 波长 振子强度 跃迁几率

核科学与技术是在原子物理基础上发展起来的, 而核科学与技术(如加速器以及探测技术)的发展又反过来为原子物理的研究提供了新手段, 产生新思想, 形成了若干新的学科领域。激光、聚变等离子体、生物医学、空间物理以及材料科学等, 均渗透着原子物理的新成果。美国、日本、西欧和原苏联等发达国家, 为了聚变物理与空间技术发展的需要, 从 60 年代中后期开始, 投入了大量的资金和人力, 开展原子物理的基础研究, 国际原子能机构 IAEA 于 1976 年在核数据科内设立了原子分子组 (IAEA/INDS/A + M UNIT), 该组从 1977 年开始, 每 1-2 年召开一次原子分子数据研究顾问组会议, 我国从 1987 年起, 均派员参加。1987 年, IAEA 总干事邀集美国、日本、西欧和原苏联四方代表商讨并共同设计、建造一个世界上最大的聚变装置, 定名为国际核聚变反应堆(简称 ITER), 并每年拨出一定款项, 支持聚变等离子体基础课题和有关原子分子数据的研究。我国已决定参加 ITER 计划, 承担其中某些子项目。

在我国, 原子物理基础研究的重要性被越来越多的人所接受, 1977 年制定了我国原子分子物理发展规划, 1984 年钱学森同志提出加强我国原子分子物理应用基础研究, 建立原子分子工程。1987 年成立我国原子分子数据研究联合体; 同年, 中国原子能科学研究院核物理所成立了原子物理实验及原子分子数据研究组。1989 年, 在国家自然科学基金的支持下, 设立了电子碰撞重大课题的研究项目, 重点支持高等学校、科研院所的有关研究课题, 建立了电子碰撞实验装置。1988 年开始, 每二年举行一次全国原子与分子物理学术会议, 小型学术会议更是频繁, 这些举措有力地推进了我国的原子分子物理的发展。

## 1 数据研究现状

原子分子数据的类型可与核数据类比, 包括能级、波长、跃迁几率、振子强度、寿命等结构数据, 散射、电离、激发、退激发、电荷交换、电子俘获、辐射复合、双电子复合等碰撞数据以及与表面相互作用有关的反射、溅射、捕俘、二次电子发射、离解和解吸等数据。

收稿日期: 1994-12-20

## 1.1 结构数据

原子和低电荷态离子( $q < 4$ )的能级、波长及跃迁几率等结构数据已有比较完整的编评。主要研究单位有美国国家标准和技术研究所(NIST)的原子能级中心和跃迁几率中心,以及日本和俄罗斯的有关原子分子数据研究中心。80年代初美国国家标准局(NBS)<sup>[1-3]</sup>主编出版了 $Z = 1 - 92$ 的原子和低电荷态离子( $q < 4$ )的数据。其波长(几—4000nm)和跃迁几率的精度分别为 $< 3\%$ 和 $10\% - 50\%$ 。1987年R.L.Kelly<sup>[4]</sup>主编了波长200nm以下的 $Z = 1 - 36$ 原子和离子(电荷态 $q$ 从1至 $Z - 1$ )的谱数据。W.L.Wiese<sup>[5,6]</sup>主编出版了Fe、Ti、Cr和Ni的谱数据手册。总之,低 $Z$ ( $Z < 10$ )原子、离子的谱数据比较可靠,精度也高。 $Z < 10$ 的原子及其离子的谱数据随着 $Z$ 的增大,精度急剧下降。 $Z > 28$ 的类氢和 $Z > 63$ 的类氦谱数据,目前尚无实验值。分子谱结构数据只有少量的编纂和评价工作。

## 1.2 碰撞数据

原子碰撞数据的研究,入射粒子可以是光子、电子、原子及离子,而靶应包括所有原子及离子和某些分子及化合物。下面以入射粒子为序分别作些简单介绍。

1.2.1 光子的碰撞 光子引发的原子、离子的吸收、散射、电离和激发是广泛感兴趣的。一般入射能量 $< 100\text{eV}$ ,对于某些较重靶原子的激发电离的研究,其入射能量需高达 $100\text{keV}$ 或更高。同步辐射具有波段宽、强度高、方向性好、偏振度高和脉冲持续时间短等优点,北京电子对撞机和合肥中国科技大学的同步辐射装置,是研究原子碰撞的难得的光源,在分子及其团簇研究中尤其如此。在同步辐射装置上,可获得能量范围 $6\text{eV} - 1\text{keV}$ 的真空紫外波段光束,分子在这样高能量光子作用下,或者被激发到很高的电子态,或者被电离而产生电子、离子及中性碎片。测量其中任何一种产物都可获得有关被研究对象的能态、吸收截面、电离效率、能量转移、电离能、离解能、反应通道等重要信息。光电离、激发和吸收截面数据已进行了一些编纂,比较重要的有:(1)波长 $1 - 30\text{nm}$ 的原子真空紫外的光吸收截面<sup>[7]</sup>;(2)能量为 $10\text{eV}$ 至 $100\text{GeV}$ 的光衰减系数实验测量的述评<sup>[8]</sup>;(3)真空紫外波段的He、Ne、Ar、Kr和Xe的光电离绝对截面<sup>[9,10]</sup>;(4)He、O、N<sub>2</sub>和O<sub>2</sub>的光电离和光吸收截面<sup>[11]</sup>;(5)原子( $1 < Z < 103$ )子壳层光电离截面<sup>[12]</sup>等。

1.2.2 电子碰撞 电子在库仑场中的作用势比较确定,理论计算容易。在实验测量上,电子源(通常用电子枪)的制备比较简单,探测技术比较成熟,用电子作探针研究原子碰撞电离、转动与振动激发、电子散射和分子离解等,有其独特的长处和应用价值。这里简单地介绍电子碰撞电离和激发数据的一些情况。英国北爱尔兰Belfast大学原子分子数据研究中心<sup>[15]</sup>主编出版了H-O<sup>[13]</sup>、F-Ni<sup>[14]</sup>和Cu-U原子及其离子的电子碰撞电离截面和电离速率系数。美国ORNL<sup>[16]</sup>对C<sup>q+</sup>( $q = 0 - 5$ )和O<sup>q+</sup>( $q = 0 - 7$ )的电子碰撞电离数据进行了评价。目前的实验数据主要集中在低电荷态的原子、离子,而高 $Z$ 高电荷态的离子的电子碰撞电离数据,几乎是空白。我们用Lotz公式开展了电子碰撞电离数据的分析计算,又从IAEA和Belfast得到了大量电子碰撞电离数据,在分析评价的基础上,按国际通用的ALADDIN原子分子数据格式,初步建成了电子碰撞数据库。入射电子能量范围从 $10\text{eV}$ 至 $100\text{keV}$ ,靶原子为H-U原子、离子。对 $Z < 28$ 的靶原子,其最高电荷态为类氢离子。Cu-U只涉及某些较低电荷态的离子。上述数据在中国核数据中心的Micro-VAX II或微机上均可方便地检索。电子碰撞激发已作了大量的研究,因为该课题的研究内容广泛,目前仅涉及到其中的一部分,特别是高 $Z$ 高电荷态离子的碰撞激发的研究,实验上是空白,理论计算模型也远未完备。美国实验室空间物理联合研

究所对紧耦合近似、扭曲波近似、库仑-玻恩近似、库仑-贝泰近似以及波恩近似等电子碰撞激发理论计算方法<sup>[17]</sup>作了评价,给出了主量子数  $n = 1 - 30$  的电子碰撞激发截面,靶元素包括了 He-W 原子及其离子,数据不确定度约为 10% - 50%,某些情况下大于 50%。意大利的 Bologna 核数据中心原子分子数据组<sup>[18]</sup>对 FeI - FeXXVI 的电子碰撞激发强度数据作了理论编评。Y. Itikawa<sup>[19]</sup>和 .A. Phaneu<sup>[16]</sup>等对碳和氧原子及其离子的电子碰撞激发数据进行了评价。还有其它一些激发数据的编评工作,如碱金属原子的电子碰撞激发<sup>[20]</sup>, He 原子及类 He 离子  $\text{Li}^+$ 、 $\text{C}^+$ 、 $\text{O}^+$ 、 $\text{Mg}^{10+}$ 、 $\text{Ca}^{18+}$ 、 $\text{Ti}^{20+}$ 、 $\text{Fe}^{24+}$ 、 $\text{Ni}^{26+}$ 、 $\text{Se}^{32+}$  和  $\text{Mo}^{40+}$  的激发数据<sup>[21]</sup>等。在中国核数据中心的原子碰撞数据库中,可提供  $\text{C}^{q+}$  ( $q = 0 - 5$ )、 $\text{O}^{q+}$  ( $q = 0 - 7$ )以及  $\text{Fe}^{q+}$  ( $q = 0 - 25$ )的电子碰撞激发数据。

**1.2.3 重离子碰撞** 对重离子(包括质子和氦)入射引起的原子、离子碰撞的研究是现代原子物理学最活跃的领域之一。虽然早在 30 年代初粒子加速器诞生不久,就已有有人用它来研究离子碰撞引起的原子的电离和激发,但 30 - 50 年代,物理学家关心的对象主要是核物理,它是当时物理学的前沿。直到 70 年代,越来越多的小型加速器的主要研究领域才逐步从核物理转向了原子物理,研究内容包括束箔光谱学、共线快离子激光光谱学、运动电场的原子与原子离子碰撞、双电子复合、Lamb 位移,以及原子与固体表面相互作用等。1994 年 6 月在合肥中国科学技术大学举行的第七届全国原子与分子物理学术会议期间,有关高校和科研单位酝酿在我国设立一项基于加速器的原子碰撞物理的重大研究课题,希望能以较大的力度增加在原子碰撞研究方面的投资。中国原子能科学研究院 HI - 13 串列加速器是目前我国研究原子碰撞物理比较理想的工具,在串列加速器上,用束箔方法可获得多电荷离子,可作类氢( $Z \leq 16$ )、类氦( $Z \leq 33$ )、类氩( $Z \leq 45$ )和类氙( $Z \leq 68$ )等高电荷态离子的能级、波长、跃迁几率、寿命参数的测量。如果再配以电子或离子束,则可开展电子-离子(原子)、离子-离子(原子)交叉束的碰撞研究。重离子碰撞研究,虽然已积累了不少数据,但系统的评价工作尚不多见。美国橡树岭国家实验室(ORNL)对碳和氧原子及其离子与 H、 $\text{H}_2$ 、He 的碰撞的电荷交换,电离数据<sup>[16]</sup>以及 H、 $\text{H}_2$ 、He 和 Li 原子与离子的碰撞电子俘获,碰撞激发、电离、离解和粒子交换等<sup>[22]</sup>数据作了比较系统的评价,这些数据均可在中国核数据中心的碰撞数据库中检索到。

### 1.3 离子与固体表面相互作用

在聚变等离子体边界问题的研究中,粒子的反射和溅射直接影响等离子体的性能和能量平衡。德国慕尼黑等离子体研究所和日本名古屋等离子体研究所均对轻离子在固体表面的反射和溅射数据进行了研究<sup>[23 - 25]</sup>。

我们与四川大学罗正明等一起,对  $\text{H}^+$ 、 $\text{D}^+$ 、 $^3\text{He}^+$  和  $^4\text{He}^+$  在 Be、B、C、Al、Si、Ti、Fe、Ni、Cu、Mo、W 和 Au 固体表面的反射和溅射数据进行了系统的计算和评价,数据已存入中国核数据中心的等离子体边界相互作用数据库中,入射离子的能量范围为 10eV - 100keV。低能区( $< 100\text{eV}$ )的实验数据,目前还是空白。

## 2 今后研究的重点

激光和聚变等离子体研究需要大量原子、分子数据特别是对高 Z、高离化原子的数据,如  $Z > 30$  的 Ga、Ge、Mo、Ta、W 和 Au 的谱数据十分急需。分子谱数据方面,双原子分子  $\text{H}_2$ 、CO、 $\text{O}_2$  和 CH 等的基态和低激发态的谱数据已基本满足要求,但尚有诸多体系未涉及,特别是多原子分子(如  $\text{H}_n\text{C}_n$ )的谱数据的研究应该优先考虑。

电子碰撞数据对基态轻离子( $Z \leq 10$ ),在数据完整性和精度方面均是满意的,一般误差小于25%,激发态的数据(除H外)差得还比较多。中 $Z$ 离子,只有单电荷电离数据是完整的,但其精度随着 $Z$ 的增大很快变坏。Fe、Ni、Ti离子的激发和双电子复合截面是可用的。高 $Z$ 离子的电子碰撞数据尚不能满足需要。双电子复合和辐射复合数据、电子与分子碰撞中的离解和态选定的截面数据、反应产物能量和角分布数据都是十分急需的。

重离子碰撞,包括众多碰撞过程,其中只有某些过程如弹性碰撞、动量和能量转移以及共振过程的反应率可与电子碰撞过程竞争。在离子-原子和原子-原子的碰撞中,弹性碰撞、共振电子俘获、动量和能量转移的数据是最急需的。离子和原子弹性碰撞的实验数据是极有限的,经典的和半经典的弹性碰撞截面的理论计算方法已经建立,应用这些理论所需的基态和激发态的相互作用势(特别是激发态的),目前知道的还十分有限。

在非常低的等离子体温度时,粒子交换反应在粒子输运中变得很重要,这些数据目前还很缺乏,误差也大,入射能量小于20eV的粒子与固体表面相互作用的数据基本上是空白。

### 参 考 文 献

- 1 Wiese WL, Smith MW, Glennon BM. NSRDS - NBS - 4. 1966.
- 2 Wiese WL, Smith MW, Miles BM. NSRDS - NBS22. 1969.
- 3 Reader J, Corliss CH, Wiese WL, et al. NSRDS - NBS - 68. 1980.
- 4 Kelly RL. J Phys Chem Ref Data. 1987, Vol. 16, Supplement No. 1
- 5 Wiese WL. ONRL - 6089. 1985.
- 6 Wiese WL, Musgrove A. ONRL - 6551. 1989, 1 - 3.
- 7 Hudson RD, Kieffer LT. Atomic Data. 1971, 2:205.
- 8 Hubbell JH. Atomic Data. 1971. 3:241.
- 9 Marr GV, West JB. ADNDT. 1976, 18:497.
- 10 West JB, Morton J. ADNDT. 1978, 22:103.
- 11 Kirby K, Constantinides ER, Babeu S, et al. ADNDT. 1979, 23:63.
- 12 Yeh JJ, Lindau I. ADNDT. 1985, 32:1.
- 13 Bell K, Gilbody HB, Hughes JG, et al. J Phys Chem Ref Data. 1983, 12(4):891.
- 14 Lennon MA, Bell K, Gilbody HB, et al. CLM - R270, 1986.
- 15 Higgins MJ, Lennon MA, Hughes JG, et al. CLM - R294, 1989.
- 16 Phaneuf RA, Janev RK, Pindzola MS. ONRL - 6090, 1987.
- 17 Gallagher JW, Pradhan AK. JILA Data Center Report. 1985, 30.
- 18 Frisoi M, Ottaviani PL, Panini GC. RT/TIB/89.
- 19 Itikawa Y, Hara S, Kato T, et al. ADNDT 1985, 33:149.
- 20 Greene TJ, Williamson W. ADNDT 1974, 14:161.
- 21 Kato T, Nakazaki S. ADNDT. 1989, 42:313.
- 22 Barnett CG. ONRL - 6086. 1990.
- 23 Eckstein W, Verbeek H. Report IPP 9/32. 1979.
- 24 Ito R, Tabata T, Itoh N, et al. IPPJ - AM - 41. 1985.
- 25 Eckstein W, Garcia - Rosales C, Roth J, et al. Report IPP 9/82. 1993.

## ADVANCES IN STUDY OF ATOMIC AND MOLECULAR DATA

YAO JINZHANG YU HONGWEI

(Chinese Nuclear Data Center, China Institute of  
Atomic Energy, P. O. Box 275 - 41, Beijing, 102413)

### ABSTRACT

The situation of research in atomic and the molecular data is briefly reviewed. The state and priority of development on atomic and molecular data are discussed.

**Key words** Atomic and molecular data Energy level Wavelength Oscillator strength  
Transition probability

### 全国核化工中青年学术交流会在北戴河召开

全国核化工中青年学术交流会于 1995 年 8 月 8 日至 12 日在北戴河召开。会议由中国核学会核化工分会组织召开。参加会议的有中国核工业总公司科技局、中国核情报中心、中国核学会、北京核工程研究设计院、中国辐射防护研究院、中国工程物理研究院、宜宾核燃料元件厂、兰州铀浓缩厂、兰州核燃料厂、清华大学核能技术研究设计院、天津大学和中国原子能科学研究院等 12 个单位的有关领导和中青年代表 46 名。核化工分会理事长何建玉研究员致开幕词,核化工老专家傅依备研究员和中国科学院院士王方定先生发表了热情洋溢、语重心长的讲话,中国核学会居克飞研究员宣读了中国核学会理事长钱 先生的贺信,中国核工业总公司科技局郑华铃作了“核化工的发展和任务”的专题报告。

会议收到论文 39 篇,内容涉及乏燃料后处理、放射性废物处置、核燃料转化及民用技术等方面。会上交流了 29 篇。会议学术气氛浓厚,讨论热烈。经会议评议小组评审,评出 4 篇优秀论文,另有 4 篇论文受到会议表扬。

闭幕式上中国科学院院士、核化工分会顾问王方定先生致闭幕词,并为优秀论文获得者颁发了荣誉证书。中青年代表宜宾核燃料厂的李朝端、中国原子能科学研究院的朱志谊、清华大学核能技术研究设计院的王建晨先后发言感谢老一辈科学家的辛勤培养和学会给予他们的支持。他们一致表示再接再厉,奋发上进,学习前辈的奉献精神,努力做好工作,接好班。

会议获得圆满成功,于 8 月 12 日上午闭幕。

中国核学会核化工分会秘书长张泽甫