Au 激光等离子体的双电子复合速率系数*

易有根12) 郑志坚2) 颜 君3) 李 萍3) 方泉玉3) 邱玉波3)

1(湘潭师范学院物理系 湘潭 411201)

²(中国工程物理研究院 高温高密度等离子体物理国家重点实验室 绵阳 621900) ³(北京应用物理与计算数学研究所 北京 100088) (2002年4月14日收到 2002年5月29日收到修改稿)

基于准相对论多组态 Hartree-Fock 理论和扭曲波近似 ,采用组态平均的方法,从头计算了类铁金离子-类镓金离子的双电子复合速率系数,计算中包含了大量稠密的自电离能级,由于宽广的自电离能级分布和极其复杂的级联效应,造成高 Z 材料 Au 的双电子复合速率系数不同于低 Z 元素的特征,与现有文献的类镍金离子比较,结果表明,在"神光 II"实验装置诊断的电子温度约为 2 keV 电子密度约为 $6 \times 10^{21} \, \text{cm}^{-3}$,Au 激光等离子体不同理论之间的双电子复合速率系数误差不到 10%,这对于使用超组态碰撞辐射模型模拟 Au 的激光等离子体 M 带细致谱 5 f—3 d 跃迁的平均电离度和电荷态分布,推动诊断学的发展是切实可行的。

关键词:双电子复合,类铁金离子-类镓金离子,复合速率系数

PACC: 3130, 3480L

1. 引 言

强激光辐照高原子序数(如 Au)可实现高吸收率(约为90%)和高 X 射线转换效率(约为70%).因此 ,Au 的 X 射线辐射特性在惯性约束聚变(ICF)及其应用研究中倍受关注.特别是高功率激光加热 Au产生的高 Z 等离子体的辐射光谱呈非平衡(non-LTE)特性 ,带谱结构偏离 Planck 谱 ,为研究带来了新的热点[1-3].

众所周知,平衡态黑体辐射呈 Planck 谱,它只依赖于物质的温度,而与其材质无关.然而,对非平衡的等离子体,其辐射谱则强烈依赖于靶材料的等离子体的状态及与之相关的原子动力学过程.目前,对此问题,在理论上常作局域热动力学平衡假设(LTE),而实验证实 Au 辐射谱等离子体呈非局域non-LTE 热动力学平衡.求解原子动力学过程的速率方程,须对相关原子过程中的电子离子碰撞电离和辐射复合等参量进行切实的研究.

2000 年至 2001 年 美国 Livermore 实验室 Glenzer 等^{4.5.}报道了在惯性约束聚变(ICF)金腔靶研究中 利用 Au 5f—3d 跃迁 M 带发射谱和超组态碰撞辐射模型^{6.7.1}获得了非局域 non-LTE Au 激光等离子

体的复杂电离态特性的平均电荷态分布 ,离子丰度及离子内各能级的布居数 . 在强激光打靶功率密度为 $2 \times 10^{14} \, \text{W} \cdot \text{cm}^{-2}$ 的条件下 ,实验结果表明 Au 的 M 谱带很宽 ,谱线很多 ,主要由类镓金到类铁金等光谱所组成 ,其中类铜金光谱所占的分额最大 ,实验给出的平均离化度为 $\text{Z}^* = 49.3 \pm 0.5$. 目前 ,令人可喜地是 ,我所已开始起步 Au 激光等离子体 M 带谱 5f—3d 跃迁离化度 ,电荷态分布及能级布居数这一等离子体重要物理参量的诊断工作 .

非局域 non-LTE 等离子体的电离度和电荷态分布由电子离子碰撞电离,辐射复合及双电子复合等原子过程所支配,当高 Z 材料离化成" 开 M 或 N 壳层",单激发或多激发能态将形成大量的电离和复合通道,non-LTE 平衡系统包含了目前还无法细致处理的无数能级和跃迁种类.在重元素高荷电等离子体中,双电子复合是高温高密度等离子体中的一种极其复杂的不可忽视的原子动力学过程,它对建立和维持等离子体的电离平衡及对离子态的布居起着不可忽视的作用[8—10].近几年来,有关高 Z 高荷电离子的双电子复合理论取得了很大的进展 Behar等^{11,12]}在考虑组态混合、非共振稳态跃迁(NRS)和辐射级联, DCA)作用下,对重离子的态-态双电子复

^{*}中国工程物理研究院预研基金(批准号 20010208 和 20020210)资助的课题。

合速率系数做了系统的研究,但大部分研究工作主要集中在类镍金离子,而对 Au 的其他离子却缺乏系统地研究.为了探讨高 Z 等离子体的电离态特性 给出其平均电离度,离子丰度,并起步离子内各能级的布居数,以对 Au 等离子体的非平衡态 non-LTE 进行深入研究,很有必要提供金的准确的双电子复合速率系数,并获得其随温度变化的清晰图像.为此,我们计算的 Au 激光等离子体的双电子复合速率系数研究工作,不仅将丰富等离子状态参量的物理内容[3-15],且将在 ICF 特别是在 Au 激光等离子体中探索 M 带谱 5f—3d 跃迁细致谱的平均电离度和电荷态分布方面得到重要应用.

2. 理论方法

双电子复合是电子-离子非弹性碰撞发生共振复合过程,即离子无辐射俘获一个自由电子形成双电子共振激发态,随之通过自发辐射衰落到单激发态的过程.双电子复合过程的处理可以近似看作一个两步过程.第一步,电离度为q的离子 A^{q+} 与一个具有特定能量的自由电子碰撞, A^{q+} 离子中的一个束缚电子从其占据轨道 $n_i l_i$ 激发到未占满的轨道上 $n_a l_a$ 与此同时,该自由电子损失部分能量并被 A^{q+} 离子俘获到另一个未占满轨道 $n_i l_i$,从而形成 $A^{(q-1)+}$ 离子的共振双电子激发态,即

 $e^- + A^{q+}(n_i l_i) \rightarrow A^{(q-1)+}(n_a l_a n_r l_r)^{**}$; (1) 第二步 ,处于双激发态的离子 $A^{(q-1)+}$ 的能量一般高于该离子的第一电离势 ,既可以发射 Auger 电子而自电离 ,也可以辐射光子退激到较稳定的低能态 $(n_b l_b n_r l_s)$,

$$A^{(q-1)+}(n_a l_a n_r l_r)^{**} \longleftrightarrow A^{(q-1)+}(n_b l_b n_s l_s)^{*} + h\nu.$$
(2)

如果完成上述两步过程 ,则完成了双电子复合过程.

由 A^{q+} 离子的 $m(n_i l_i)$ 态俘获一个自由电子 ,形成 $A^{(q-1)+}$ 离子的共振双电子激发态 $j(n_a l_a n_r l_r)$,再辐射复合为非自电离 $k(n_b l_b n_s l_s)$ 态的双电子复合速率系数可以表示为

$$\alpha_{mjk}^{DR}(T_{e}) = \frac{h^{3}}{2(2\pi m_{e}k_{B}T_{e})^{3/2}} \frac{g_{j}}{g_{m}} \exp(-\frac{E_{jm}}{k_{B}T_{e}})$$

$$\times \frac{A_{jm'}^{a}A_{jk}^{r}}{\sum_{k'}A_{jm'}^{a} + \sum_{k'}A_{jk'}^{r}}, \qquad (3)$$

式中 $k_{\rm B}$ 为玻耳兹曼常量 $m_{\rm e}$ 和 $T_{\rm e}$ 分别为电子质量

和温度, g_m 和 g_j 分别为m 和j 态的统计权重, $E_{jm} = E_j - E_m$ 为j 态和m 态的能级差, a_0 为玻尔半径, A_{jm} 和 A_{jk} " 分别为从j 态到m 态的俄歇衰变率和从j 态到m 态的自发辐射衰变率,求和指标 m" 遍及离子 a0 低于a1 的所有能级,求和指标 a2 遍及离子 a3 他,于电离限 a3 的全部能级,根据量子力学微扰理论,a3 和 a3 和 a3 分别为

$$A_{jm}^{a} = \frac{4\pi^{2}}{h} |j| \frac{1}{r_{12}} |m|^{2} ,$$

$$A_{jk}^{r} = \frac{4(2\pi)^{4} E_{jk}^{3}}{3h^{4} c^{3} g_{j}} j |\alpha| k^{2} ,$$
(4)

$$\alpha^{\mathrm{DR}}(T_{\mathrm{e}}) = \frac{1}{n_{N}} \sum_{j} \sum_{k} \sum_{m} n_{N}^{m} \alpha_{mjk}^{\mathrm{DR}}(T_{\mathrm{e}}), \quad (5)$$

在计算离子的束缚态轨道波函数时,采用多组态准相对论 Hartree-Fock 方法,其中考虑了主要的相对论效应修正,包括相对论速度-质量修正,达尔文关联效应项和自旋-轨道相互作用项,并考虑了 Breit修正.多组态准相对论 Hartree-Fock 的结果比非相对论 Hartree-Fock 方法或 Hartree-Fock-Slater 方法要精确得多,而计算却比完全相对论方法简单.对于自由电子连续轨道波函数,采用扭曲波方法进行计算.在计算离子的能量时,在我们自编程序的基础上采用组态平均的方法.另外,角动量耦合本文采用jj 耦合方式,以充分考虑高Z高荷电离子的旋-轨耦合作用

本文通过采用多组态准相对论 Hartree-Fock 理论和扭曲波近似,组态平均的方法,从理论上计算Au 的类铁金离子-类镓金离子的双电子复合速率系数,并分析了其随温度的变化趋势.计算过程中通过对组态求平均,改进了自电离的准确程度,使计算的总双电子复合速率系数比较准确,这将为进一步模拟 Au 的激光等离子体的 M 带谱 5f—3d 跃迁细致谱的电荷态分布及离子数布居提供重要的双电子复合速率参数.

3. 计算结果与讨论

在计算高 Z 材料高荷电态离子 Au 的双电子复

合速率系数时,首先选取相应的电子组态,采用多组态准相对论的 Hartree-Fock(MCRHF)方法,扭曲波近似,在我所自编程序的基础上,采用组态平均的方法,得到组态平均能级,俄歇衰变率,自发辐射衰变率,振子强度和跃迁波长,最后(5)式得到类铁金离子-类镓金离子辐射衰减发生在 M 带谱 5f—3d 跃迁的双电子复合速率系数.

图 1 为组成高 Z 材料 Au 激光激光等离子体的 M 带 5f-3d 跃迁细致光谱的类镍金离子和类铜金 离子耦合的电荷态的有关能级和跃迁示意图 取裸核 的能量作为能量起点,对类镍金离子的双电子复合, 选取类镍金离子基态的电子组态 3s23p63d10和单激发 电子组态 3d°4l,类铜金离子的基态电子组态 3s²3p⁶3d¹⁰4s 单激发电子组态 3s²3p⁶3d¹⁰4l,双激发电 子组态 3s²3p⁶3d⁹4l4l', 3s²3p⁶3d⁹4l5l', 3s²3p⁵3d¹⁰ $4l4l' \ \beta s^2 3p^5 3d^{10} 4l5l' \ \beta s^1 3p^6 3d^9 4l4l' \ \beta s^1 3p^6 3d^9 4l5l'$ 对类铜金离子双激发态而言,由于它们之间自电离 能级相当靠近 且具有太多的开壳层 我们甚至无法 考虑这些组态之间的相互作用,只计算这些组态之 间的平均能级和在单组态框架之内的相应参量,而 忽略了这些组态之间的相互作用 图 1 显示了计算 的类镍金离子和类铜金离子耦合的组态平均能,显 然,有些类铜金离子的双激发态在类镍金离子的电 离限之下,而不在类铜金离子的自电离态之上,在双 电子复合过程当中,它们当作在电离限之上带有相 反宇称的自电离态衰减的稳定态存在 ,为了简化 ,它 们对双电子的复合效应没有考虑,自电离态也能辐 射衰减到另一个在电离限之上的自电离态 ,经过几 个连续的级联辐射跃迁 最终完成双电子复合过程, 由于它们之间的极其复杂性,级联效应在目前的理 论计算当中也没有考虑,研究结果表明,有许多自电 离态的能级极靠近电离限的域值,它们对双电子复 合过程的影响起着很大的作用.

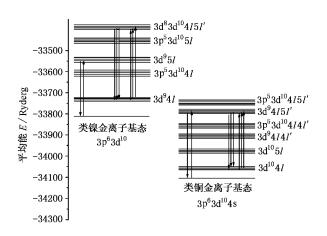


图 1 类镍金离子和类铜金离子耦合的组态平均能和 M 带 5f—3d 跃迁示意图

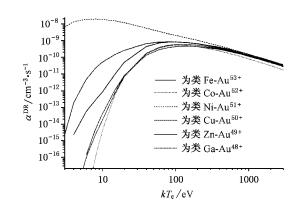


图 2 类铁金离子-类镓金离子双电子复合速率系数(注意:不同的线形对应于不同的荷电离子)

电子为 41 时双电子复合速率系数在温度比较低时 随温度T的升高而增加,双电子复合速率系数在T=100eV 附近达到峰值 ,达到峰值后则随 T 的升高 而迅速减小,在低温段,电子温度小于 100eV 时,由 于不同组态之间的自电离程度不同,造成了复合过 程中的自电离态系数不同,低温段的双电子复合速 率系数差别很大,不同态之间的双电子复合速率系 数在不同的温度达到不同的峰值,我们认为低温段 时的双电子复合速率系数主要依赖于 T-3/2 和 $\exp(-E_{im}/k_{\rm B}T)$,由于许多自电离态能级分布范围 很广,有些甚至靠近电离限的域值,这意味着能级差 E_m 很小,这些态明显地增强甚至支配着低温段的整 个双电子复合过程,应该指出这样一些特殊的能级 在 X 射线激光研究中有着特殊的作用 .因为对这些 自电离态能级的强烈俘获有可能导致布居反转 从 而产生 X 射线激光, 诚然, 低温段的双电子复合过 程并非是我们所感兴趣的区域.

在高温段,双电子复合速率系数随电子温度的增加而迅速减小.在我所"神光 II"强激光打靶实验装置上,用 Thomson 散射诊断的电子温度范围在2keV 左右,这一诊断电子温度范围正是我们感兴趣的温度区域.表1列举了我们计算的 Au 的不同电荷态离子类铁金离子-类镓金离子在不同的电子温度下的总双电子复合速率系数.限于篇幅,在计算双电

子复合速率系数过程中,由于包含大量的跃迁概率系数和相关的原子数据,我们无法一一列出相应的双电子复合过程中的细致结构,以及影响总双电子复合速率系数的态-态之间的双电子复合速率系数,本文我们仅仅列出一些对我们有用的计算结果和双电子复合速率系数.

表 1 类铁金离子-类镓金离子在不同的电子温度下的总双电子复合速率系数

					$T_{ m e}/{ m eV}$			
离子	10	100	200	400	800	1000	2000	3000
Au ^{53 +}	8.25×10^{-13}	8.31×10^{-10}	6.34×10^{-10}	3.63×10^{-10}	1.74×10^{-10}	1.34×10^{-10}	5.52×10^{-11}	3.37×10^{-11}
Au ^{52 +}	4.56×10^{-15}	5.23×10^{-10}	4.38×10^{-10}	2.43×10^{-10}	1.09×10^{-10}	8.22×10^{-11}	3.22×10^{-11}	2.39×10^{-11}
Au ^{51 +}	1.85×10^{-8}	2.06×10^{-9}	1.04×10^{-9}	4.90×10^{-10}	2.08×10^{-10}	1.55×10^{-10}	5.95×10^{-11}	3.61×10^{-11}
Behar 等 ¹¹]的结果	2.21×10^{-9}	6.97×10^{-10}	4.81×10^{-10}	3.02×10^{-10}	1.68×10^{-10}	1.32×10^{-10}	6.22×10^{-11}	3.94×10^{-11}
Au ^{50 +}	1.83×10^{-14}	5.88×10^{-10}	5.30×10^{-10}	3.26×10^{-10}	1.61×10^{-10}	1.24×10^{-10}	5.18×10^{-11}	3.22×10^{-11}
Au ^{49 +}	5.14×10^{-11}	8.50×10^{-10}	6.72×10^{-10}	4.08×10^{-10}	2.01×10^{-10}	1.55×10^{-10}	6.40×10^{-11}	3.94×10^{-11}
Au ^{48 +}	4.30×10^{-14}	4.38×10^{-10}	4.47×10^{-10}	2.98×10^{-10}	1.51×10^{-10}	1.17×10^{-10}	4.89×10^{-11}	3.04×10^{-11}

为了验证数据的可靠程度 ,我们比较了类镍金离子的双电子复合速率系数 ,计算结果连同 Behar 等 111 的理论结果显示在图 3 中 ,Behar 等是以半相对论扭曲波近似计算自电离系数 ,多组态相对论方法计算能级和自发辐射衰变率 . 我们的计算结果与Behar 等结果符合得很好 ,在我所" 神光 11 "激光装置上诊断的电子温度 10 2keV 范围内 ,其误差估计不到 10 96 .譬如 ,电子温度 2 2keV ,Behar 等的计算结果为 2 6.22 × 10 10 cm 3 · s $^{-1}$,我们的计算结果为 5 95 ×

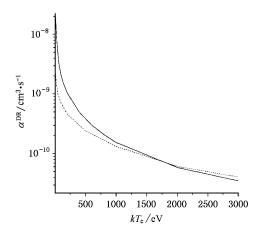


图 3 类镍金离子的双电子复合速率系数的比较 实线为本文 结果 虚线为 Behar 的结果

10⁻¹¹/cm³·s⁻¹ 两者之间的平均偏差为 4.44%. 这表明我们的计算结果是极其可靠的. 同时我们的计算结果可为特定的电子温度和电子密度范围内的非局

域热动力学平衡(non-LTE)金激光等离子体 M 带光谱 5f—3d 跃迁的谱线强度模拟,各种复杂离子的电离态特性,诸如离子的平均电离度相对丰度,电荷态分布和能级布居数,提供十分精确的双电子复合速率系数参量.

4. 结 论

采用多组态准相对论 Hartree-Fock 方法和扭曲 波近似理论,在组态平均的基础上,利用我们自编的 计算双电子复合速率系数程序计算了类铁金离子-类镓金离子的双电子复合速率系数,并分析了其随 温度的变化趋势,计算过程中通过对态求平均,改进了自电离的准确程度,使计算的总双电子复合速率系数比较准确,同时将本文计算数据与有关文献数据进行了比较,在用 Thomson 诊断的电子温度约为2keV 电子密度约为 6×10²¹ cm⁻³ 范围内,其误差估计不到 10% 结果表明我们计算的双电子复合速率系数是极其可靠的,这将为我们进一步模拟 Au 的激光等离子体的 M 带的 5f—3d 跃迁的平均电离度,电荷态分布及能级的离子数布居提供重要的双电子复合速率参量

另外,在计算双电子复合速率系数时,我们发现,由于自电离态能级分布的范围较宽,尤其是有些能级相当靠近离子的电离能域值,造成低温段的双电子复合速率系数偏大,组态之间的强烈相互作用和自电离态之间的级联跃迁效应(Cascade effect),使

得高 Z 元素离子低温时的双电子复合速率系数不同于低 Z 元素的特征仍有待于作进一步的研究 $_{i}$ 高

Z 元素高剥离态离子的双电子复合速率系数的研究仍是当前离子谱学领域中最具挑战性的课题.

- [1] Glenzer S H , Rozmus W , MacGowan B J et al 1999 Phys. Rev. Lett. 82 97
- [2] Fontes C J , Abdallah J Jr , Clark R E H ,Kilcrease D P et al 2000 J. Quantum Spectr Rad . Trans . 65 223
- [3] Klapisch M, Bar-Shalom A, Oreg J et al 1998 Phys. Plasmas 5 1919
- [4] Foord M E, Glenzer S H, Thoe R S et al 2000 J. Quantum Spectr. Rad. Trans. 65 231
- [5] Glenzer S H , Fournier K B , Wilson B G et al 2001 J. Quantum Spectr . Rad . Trans . 71 355
- [6] Bar-Shalom A , Oreg J ,Klapisch M et al 1997 Phys . Rev . E 56
- [7] Bar-Shalom A, Oreg J, Klapisch M et al 1997 J. Quantum Spectr. Rad. Trans. 58 427

- [8] Albritton J R and Willson B G 2000 J. Quantum Spectr. Rad. Trans. 65 1
- [9] Foord M E , Glenzer S H ,Thoe R S et al 2000 Phys . Rev . Lett . 85 992
- [10] Albritton J R and Willson B G 1999 Phys. Rev. Lett. 83 1594
- [11] Behar E , Mandelbaum P Schwob J L et al 1995 Phys . Rev . A 52 3770
- [12] Doron R , Behar E , Mandelbaum P , Schwob J L et al 2001 J .

 Quantum . Spectr . Rad . Trans . 71 305
- [13] Yi Y G, Wang R Zhu Z H et al 2000 Acta Phys. Sin. 49 1953 (in Chinese] 易有根、汪 蓉、朱正和等 2000 物理学报 49 1953]
- [14] Yi Y G, Zhu Z H, Tang Y J et al 2001 Acta Phys. Sin. 50 37 (in Chinese] 易有根、朱正和、唐永建等 2001 物理学报 50 37]
- [15] Yan J , Qiu Y B ,Fang Q Y et al 2001 Chin . Phys . 10 1124

Dielectronic recombination from Fe-like Au⁵³⁺ to Ga-like Au⁴⁷⁺ ions *

Yi You-Gen¹ Zheng Zhi-Jian² Yan Jun³ Li Ping³ Fang Quan-Yu³ Qiu Yu-Bo³

1 Department of Physics ,Xiangtan Normal College ,Xiangtan 411201 ,China)

2 State Key Laboratory of Laser Fusion ,China Academy of Engineering Physics ,Mianyang 621900 ,China)

3 Institute of Applied Physics and Computational Mathematics ,Beijing 100088 ,China)

(Received 14 April 2002 ; revised manuscript received 29 May 2002)

Abstract

Ab initio calculations of the rate coefficients for dielectronic recombination from Fe-like Au^{53} ⁺ to Ga-like Au^{48} ⁺ ions are performed based on Cowan 's quasi-relativistic multi-configuration Hartree-Fock-Relativistic code and distorted wave approaches. A large number of single excited states and doubly-excited states are included in the present calculation. Because of the extensive distribution of autoionization state energy levels and complicated cascade effects, the dielectronic recombination rate coefficients at higher Z are different from those at lower Z's. The results indicate that the error between our work and other theories is less then 10% in the diagnosed electron temperature and density. It is feasible to simulate the average ionized state and charge state distributions in a well characterized highly ionized Au plasma.

Keywords: dielectronic recombination , Fe-like $\text{Au}^{53\,+}$ -Ga-like $\text{Au}^{48\,+}$ ions , rate coefficients

PACC: 3130, 3480L

^{*} Project supported by the Science Foundation of China Academy of Engineering Physics ,China Grant Nos. 20010208 and 20020210).