

类氢类氦类锂镁离子双电子复合的 旁观电子角动量研究

盛 勇 蒋 刚 朱正和

(四川大学原子分子物理研究所,成都 610065)

(2001 年 7 月 15 日收到,2001 年 9 月 14 日收到修改稿)

类氢类氦类锂镁离子经中间双激发态进行的双电子复合过程在研究惯性约束聚变电子温度中占有很重要的地位.用准相对论方法计算了双电子复合经不同 Rydberg 态跃迁通道的复合速率系数,并给出不同离化度离子的双电子复合速率系数随电子温度的变化规律.显示出离子的相关能对峰值的电子温度有很大影响,当类氢离子跃迁通道的旁观电子角动量为 1 时双电子复合系数最大,而类锂离子是旁观电子角动量为 3 时最大.

关键词:双电子复合,镁离子,角动量

PACC:3120,3280H

1 引 言

在高温低密度等离子体中,双电子复合对电离平衡的建立和维持以及离子的激发态分布起着重要的作用^[1-3].激光惯性约束聚变(laser inertial confinement fusion, LICF)中,高功率激光与靶物质相互作用产生大量的不同离化度的等离子体,这些等离子体通过各种原子过程的衰变、复合产生大量的 X 射线,形成一个具有一定温度、一定强度的辐射场.双电子复合发射的 X 射线是等离子体温度诊断的重要手段^[4-6].因此,计算出精确的电离和复合速率的数值对相应的研究领域很有必要.尤其是在复杂的双电子复合过程中确定哪些衰变跃迁通道占主要地位,对于研究在不同离化度的双电子复合伴线光谱的测量中建立起观测光谱与辐射跃迁光谱的对应关系至关重要,也是等离子体电子温度诊断的关键问题^[7,8].本文通过对镁的类氢类氦类锂离子的双电子复合速率系数的研究,分析讨论旁观电子角动量和电子温度对双电子复合系数的影响.

2 理论计算

双电子复合在高温低密度等离子体中是主要的复合过程.以类氢为例,其双电子复合过程可示意地表示为

$$1s^2 + \epsilon l_c \rightarrow (1s n l n' l')^* \rightarrow 1s^2 n' l' + h\nu, \quad (1)$$

即一个能量为 ϵ 的自由电子被类氢离子俘获并激发

一个束缚电子以形成中间自电离态 $|s = |1s n l n' l' SLJ$, 然后辐射衰变为单激发态并发出一个光子.

由 A^{q+} 离子的 $m(n_i l_i)$ 态俘获一个自由电子,形成 $A^{(q-1)+}$ 离子的双激发态 $j(n_a l_a n_r l_r)$, 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^[9]

$$\alpha_{jk}^d(T_e) = \alpha_{m_0jk}^d(T_e) = \frac{4\pi^{3/2} a_0^3}{T_e^{3/2}} \exp(-E_{jm_0}/T_e) \cdot \left(\frac{g_j}{g_{m_0}} \right) \frac{A_{jm_0}^a A_{jk}^r}{\sum_{m'} A_{jm'}^a + \sum_k A_{jk}^r}, \quad (2)$$

式中 T_e 为电子温度; g_{m_0} 和 g_j 分别为 m_0 和 j 态的统计权重, $E_{jm_0} = E_j - E_{m_0}$ 为 j 态与 m_0 态的能量差, a_0 为 Bohr 半径, A_{jm}^a 和 A_{jk}^r 分别为从 j 态到 m 态的 Auger 电离率和从 j 态到 k 态的自发辐射衰变率,求和指标 m' 遍及离子 A^{q+} 低于 j 的所有能级,求和指标 k' 遍及离子 $A^{(q-1)+}$ 低于电离限 m_0 的全部能级.根据量子力学微扰理论, A_{jm}^a 和 A_{jk}^r 分别为

$$A_{jm}^a = \frac{2\pi}{\hbar} \left| j \left| \frac{1}{r_{12}} \right| m \right|^2, \quad (3)$$

$$A_{jk}^r = \frac{4\alpha\Delta_{jk}^3}{3\hbar^3 c^2} \left| j \left| \mathbf{r} \right| k \right|^2, \quad (4)$$

式中 \hbar 为普朗克常数; c 为光速, $a = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 \hbar c}$ 为精细

结构常数, $\Delta_{jk} = E_j - E_k$, \mathbf{r} 为电偶极矩算符, $|$ 表示体系状态波函数.总的双电子复合速率系数 α^{DB} 应

是对全部通道的态-态双电子复合速率系数求和

$$\alpha^{\text{DR}}(T_e) = \frac{1}{n_N} \sum_j \sum_k \sum_m n_N^m \alpha_{mj}^{\text{DR}}(T_e), \quad (5)$$

式中 $n_N = \sum n_N^m$ 为 A^{q+} 离子的数密度. 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修正, 包括相对论速度-质量修正、Darwin 项和自旋-轨道相互作用, 并考虑了 Breit 修正, 对于自由电子连续轨道波函数, 采用扭曲波方法进行计算.

3 计算结果与讨论

本文研究了镁的类氢类氦类锂离子的双电子复合过程:

类氢、类氦和类锂离子的双电子复合过程可分别表示为

$$1s + \epsilon l_c \rightarrow (nl n' l')^* \rightarrow 1s n' l'' + h\nu,$$

$$1s^2 + \epsilon l_c \rightarrow (1s n l n' l')^* \rightarrow 1s^2 n' l'' + h\nu,$$

$$1s^2 2s + \epsilon l_c \rightarrow (1s^2 n l n' l')^* \rightarrow 1s^2 2s n' l'' + h\nu.$$

本文选取镁类氢离子 Rydberg 双激发态辐射跃迁通道:

$$(1) np n' p \rightarrow 1s n' p \quad n = 3, 4, \quad 2 \leq n' \leq 15,$$

$$(2) np n' f \rightarrow 1s n' f \quad n = 3, 4, \quad 4 \leq n' \leq 15,$$

$$(3) n f n' p \rightarrow 1s n f \quad n = 4, 5, \quad 5 \leq n' \leq 15,$$

$$(4) ns n' p \rightarrow 1s ns \quad n = 3, 4, \quad 2 \leq n' \leq 15,$$

$$(5) nd n' p \rightarrow 1s nd \quad n = 3, 4, \quad 4 \leq n' \leq 15,$$

$$(6) np n' s \rightarrow 1s n' s \quad n = 3, 4, \quad 3 \leq n' \leq 15,$$

$$(7) np n' d \rightarrow 1s n' d \quad n = 3, 4, \quad 3 \leq n' \leq 15;$$

选取镁类氢离子辐射跃迁通道:

$$(1) 1s np n' p \rightarrow 1s^2 n' p \quad n = 3, 4, \quad 4 \leq n' \leq 15,$$

$$(2) 1s np n' f \rightarrow 1s^2 n' f \quad n = 3, 4, \quad 4 \leq n' \leq 15,$$

$$(3) 1s n f n' p \rightarrow 1s^2 n' p \quad n = 4, 5, \quad 5 \leq n' \leq 15,$$

$$(4) 1s ns n' p \rightarrow 1s^2 ns \quad n = 3, 4, \quad 3 \leq n' \leq 15,$$

$$(5) 1s nd n' p \rightarrow 1s^2 nd \quad n = 3, 4, \quad 4 \leq n' \leq 15,$$

$$(6) 1s np n' s \rightarrow 1s^2 n' s \quad n = 3, 4, \quad 4 \leq n' \leq 15,$$

$$(7) 1s np n' d \rightarrow 1s^2 n' d \quad n = 3, 4, \quad 3 \leq n' \leq 15;$$

选取镁类锂离子辐射跃迁通道:

$$(1) 1s^2 np n' p \rightarrow 1s^2 2s n' p \quad n = 3, 4, \quad 2 \leq n' \leq 15,$$

$$(2) 1s^2 np n' f \rightarrow 1s^2 2s n' f \quad n = 3, 4, \quad 4 \leq n' \leq 15,$$

$$(3) 1s^2 n f n' p \rightarrow 1s^2 2s n f \quad n = 4, 5, \quad 5 \leq n' \leq 15,$$

$$(4) 1s^2 ns n' p \rightarrow 1s^2 2s ns \quad n = 3, 4, \quad 2 \leq n' \leq 15,$$

$$(5) 1s^2 nd n' p \rightarrow 1s^2 2s nd \quad n = 3, 4, \quad 4 \leq n' \leq 15,$$

$$(6) 1s^2 np n' s \rightarrow 1s^2 2s n' s \quad n = 3, 4, \quad 3 \leq n' \leq 15,$$

$$(7) 1s^2 np n' d \rightarrow 1s^2 2s n' d \quad n = 3, 4, \quad 3 \leq n' \leq 15.$$

从图 1 至图 3 中可明显看出镁的类氢、类氦和类锂离子的不同 Rydberg 跃迁通道的双电子复合系数与电子温度的变化关系都有共振峰、峰值点、半高宽和高温收敛性, 不同离化度离子的双电子复合系数变化有着显著的特点.

1. 共振峰的共振电子温度差别较大. 共振温度的大小排列为氦 ($T_e \approx 0.8 \text{keV}$) > 氢 ($T_e \approx 0.23 \text{keV}$) > 锂 ($T_e \approx 0.11 \text{keV}$). 双电子复合系数 (2) 式表明这显然决定于它们不同的共振能. 镁的类氢离子外层只有一个电子, 被激发到高能级时无须克服电子与电子间的相关能, 因为类氢离子无相关能. 而类锂离子的 $2s$ 壳层只有一个电子, 相关能为 $E_{\text{corr}} = 0.0034 \text{a.u.}$, 也容易被激发到高能级. 类氦离子要从 $1s^2$ 电子中激发一个所需的激发能较大, 因为同壳层的 $1s^2$ 电子的相关能为 $E_{\text{corr}} = 0.0421 \text{a.u.}$ 大于共振温度的共振峰下降快慢为锂 > 氢 > 氦, 这与双电子复合系数中的 $\exp(-E_{jm}/kT)$ 有关. 通过求导数, 下降曲线斜率正比于 $-\frac{1}{T} \exp(-E_{jm}/kT)$, 表明 E_{jm} 越小, 下降越快.

2. 本文所研究的三类离化态离子跃迁都是上态向 S 轨道的基态跃迁, 因此对于类氢类氦类锂双电子复合过程而言, 假如只考虑电偶极辐射复合通道, 则活动电子的轨道角动量只能为 1. 而旁观电子轨道角动量是可以变化的. 从计算数据分析, 电偶极跃迁既能由内层跃迁实现也能由外层跃迁实现, 但是内层跃迁是主要的. 如镁的类氢离子的 $3p n' d$ 和 $3d n' p$ 通道, 前者的 $\alpha^{\text{DR}} = 2.44 \times 10^{-14} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$, 后者的 $\alpha^{\text{DR}} = 7.20 \times 10^{-15} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$. 镁的类氢离子的 $1s 3p n' d$ 和 $1s 3d n' p$ 通道, 内层跃迁的 $\alpha^{\text{DR}} = 4.4 \times 10^{-14} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$, 外层跃迁的 $\alpha^{\text{DR}} = 4.1 \times 10^{-15} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$. 镁的类锂离子的 $1s^2 3p n' d$ 和 $1s^2 3d n' p$ 通道, 内层跃迁的 $\alpha^{\text{DR}} = 6.7 \times 10^{-13} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$, 外层跃迁的 $\alpha^{\text{DR}} = 2.2 \times 10^{-14} \text{cm}^3 \text{s}^{-1}$. 内外层跃迁相差最小也有 3 倍左右. 类氢类氦类锂都表现出内层跃迁的 α^{DR} 大于外层跃迁. 内层跃迁的 α^{DR} 值与旁观电子的角动量 l 有明显的变化关系. 值得注意的是, 它们的最大双电子复合系数的 Rydberg 通道形式并不相同, 对于类氢离子, 对 α^{DR} 贡献最大的 Rydberg 通道是 $1s + e \rightarrow 3p np \rightarrow 1s np + h\nu$, 类锂离子是 $1s^2 2s + e \rightarrow 1s^2 3p n f \rightarrow 1s^2 2s n f + h\nu$, 而类氦离子的 $1s^2 + e \rightarrow 1s 3p n p \rightarrow 1s^2 np + h\nu$ 与 $1s^2 + e \rightarrow 1s 3p n d \rightarrow 1s^2 nd + h\nu$ 两个通道的复

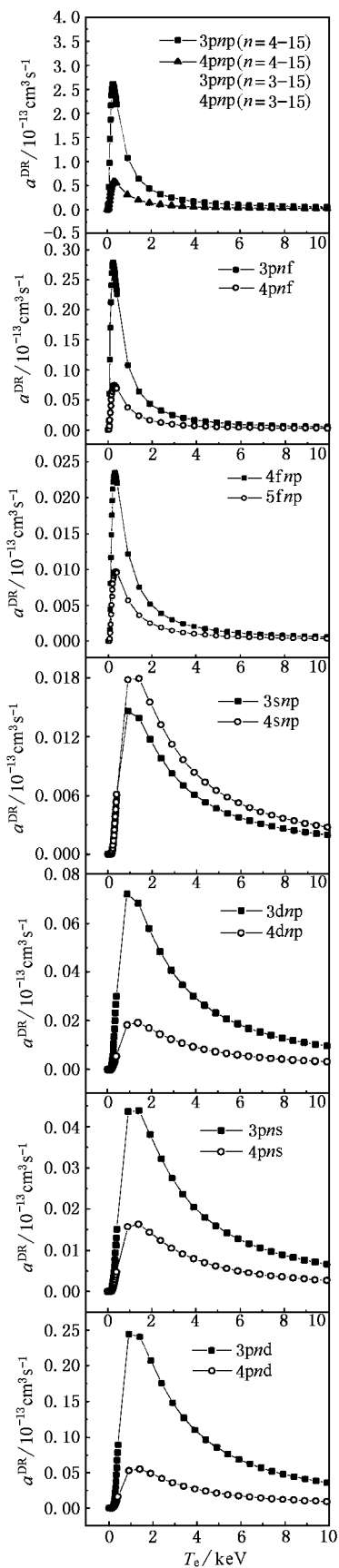


图1 镁的类氦离子不同 Rydberg 电子组态的总双电子复合系数

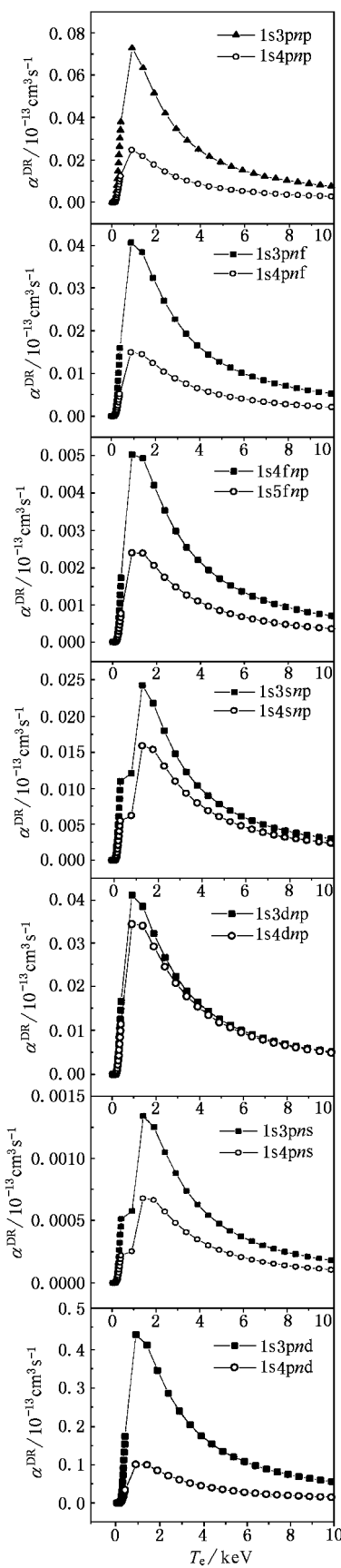


图2 镁的类氩离子不同 Rydberg 电子组态的总双电子复合系数

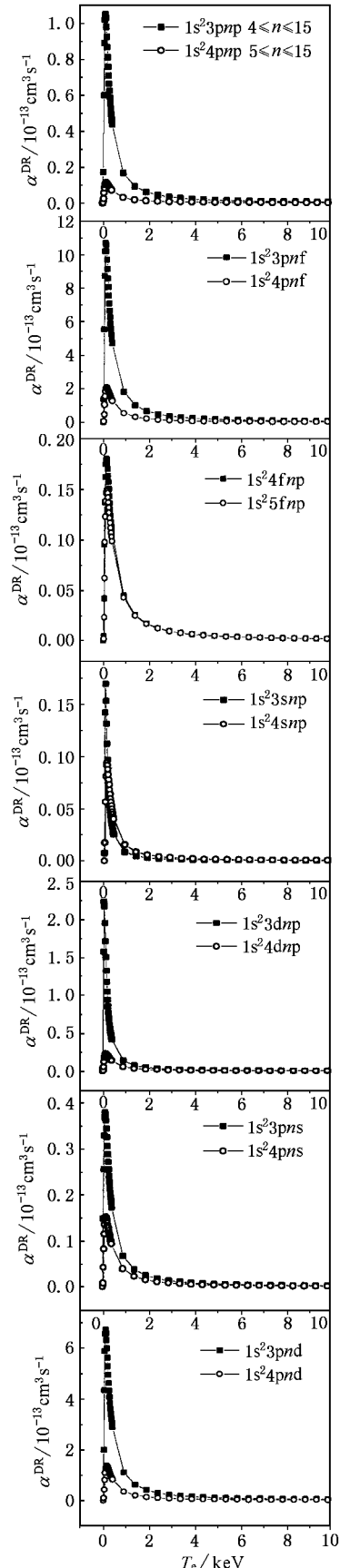


图3 镁的类锂离子不同 Rydberg 电子组态的总双电子复合系数

合通道的 α^{DR} 的数值相差不大. 从图 3 可以看出, 仅类锂离子的 $1s^2 3pn' f$ 通道的复合系数就占其 14 个通道的总双电子复合系数的 43%, 表明 $1s^2 3pn' f$ 成了类锂离子的最主要的复合通道. 居其次的是 $1s^2 3pn' d$, 而不是 $1s^2 3pn' p$. 为此, 本文分别对类氢和类锂离子旁观电子角动量 l 不同的 Rydberg 电子组态内层电子跃迁作了比较. 以活动电子的主量子数 $n = 3$ 为例, 分别列出不同旁观电子角动量的 Rydberg 电子组态的双电子复合通道, 列于表 1, 旁观电子主量子数 $n' \leq 15$.

表 1 镁的类锂和类氢离子不同旁观电子角动量的总双电子复合系数比较 (单位: $\text{cm}^3 \text{s}^{-1}$)

	$l=0$	$l=1$	$l=2$	$l=3$	$l=4$
类锂	$1s^2 3pn' s$	$1s^2 3pn' p$	$1s^2 3pn' d$	$1s^2 3pn' f$	$1s^2 3pn' g$
	3.79×10^{-14}	1.05×10^{-13}	6.71×10^{-13}	1.07×10^{-12}	6.18×10^{-13}
类氢	$3pn' s$	$3pn' p$	$3pn' d$	$3pn' f$	
	6.02×10^{-14}	2.61×10^{-13}	2.48×10^{-14}	2.70×10^{-14}	

表 1 显示不同离化度离子的旁观电子角动量的影响不同, 亦即最大双电子复合系数对应的 Rydberg 衰变跃迁通道不同. 这对于在有不同离化度离子的等离子体中观测双电子复合伴线非常重要.

3. 活动主量子数的变化特征: 本文选择的所有通道都没有 $\Delta n = 0$ 的组态跃迁, 即没有同壳层的电子跃迁. 从图 1 至图 3 可以看出, 跃迁电子主量子数增大, 导致相应的共振峰向高温端移动. 移动的温度值大小与 Rydberg 的能级相对应, 当 n 增大时, 自电离能级也增大, 因而参与共振的电子温度也相应增

大. 从类氢离子至类氦离子到类锂离子的三种离化态跃迁, 活动主量子数 n 增大, α^{DR} 则减小, 离化度低的离子主量子数 n 变化后引起的 α^{DR} 减幅大. 如通过类氢离子的 $1snpn' p$ 比较可知, n 增大后 α^{DR} 减小很快. $n = 3$ 至 $n = 4$, α^{DR} 减小为原来的 1/2.9 倍, 对 $1snpn' d$ 通道, $n = 3$ 至 $n = 4$, α^{DR} 减小为原来的 1/4.1 倍. 当 n 继续增大, 虽然减小的倍数小了, 但 α^{DR} 的数值本身也很小, 对总双电子复合系数的贡献越来越小. 因此, 实际观察和测量中只考虑 $n \leq 4$ 的活动电子主量子数的内层电子辐射衰变跃迁是可行的, n 值选得过大对 α^{DR} 的贡献没有实际意义.

4 结 论

在所选的温度范围(0.01—10keV)内, 镁的类氢类氦类锂离子不同 Rydberg 跃迁通道的总双电子复合系数都有共振峰型、峰值点、半高宽和高温收敛性. 内层电子的跃迁在 Rydberg 衰变通道中是主要的跃迁过程. 离子的相关能不同, 导致共振峰的电子温度以类锂离子最小, 类氢离子次之, 类氦离子最大. 旁观电子角动量的变化对于不同的离化度双电子复合系数影响不同, 随角动量子数的变化, α^{DR} 有几个数量级的变化, 共振峰的电子温度也有相应的变化. 这表现在角动量与 α^{DR} 的关系有极大点, 而且极大点的角动量对于不同的离化度并不相同. 对类氢离子是 $npn' p$, 即 $l = 1$; 对类锂离子是 $1s^2 npn' f$, 即 $l = 3$. 这一结论对于观察和测量等离子体的双电子复合伴线具有重要的意义.

- [1] Karim K R and Bhalla C P 1988 *Phys. Rev. A* **37** 2599
 [2] Ditter P F *et al* 1990 *Phys. Rev. A* **41** 2293
 [3] Dewitt D R *et al* 1995 *J. Phys. B* **28** L147
 [4] Farner T 1998 In "Temperature and Humidity Measurement" ed R E Bentley (Singapore: Springer-Verlag) chap. 6 pp119—131
 [5] Rosyman L J 1989 *Phys. Scr.* **36** T28

- [6] Schneider M B *et al* 1992 *Phys. Rev. A* **45** R1291
 [7] Qu L H, Wang Z W and Li B W 1999 *Acta Phys. Sin. (Overseas Edition)* **8** 423
 [8] Sheng Y *et al* 2001 *Chin. Phys.* **10** 505
 [9] Cowan R D 1981 *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (Berkeley: California University Press)

The spectator electron angular momentum study of dielectronic recombination rate for H-like He-like and Li-like Mg ions

Sheng Yong Jiang Gang Zhu Zheng-He

(*Institute of Atomic and Molecular Physics , Sichuan University , Chengdu 610065 , China*)

(Received 15 July 2001 ; revised manuscript received 14 September 2001)

Abstract

The physical process of dielectronic recombination for H-like , He-like and Li-like Mg ions by the medial double ionized states plays an important role in studying laser inertial confinement fusion electronic temperature. We have calculated the dielectronic recombination rate coefficients as the different Rydberg configuration states channels based on the multi-configuration Hartree-Fock method. Variations of the coefficients with electron temperature and spectator electron angular momentum have been discussed in detail.

Keywords : dielectronic recombination , Mg^{11+} , Mg^{10+} , Mg^{9+} ions , angular momentum

PACC : 3120 , 3280H