

类氦等电子系列离子基态的双电子复合速率系数研究*

杨建会[†] 范强 张建平

(乐山师范学院物理与电子工程学院, 乐山 614004)

(2012年1月11日收到; 2012年4月5日收到修改稿)

使用全相对论组态相互作用方法, 能级 - 能级细致计算了 $0.1E_1 \leq kT_e \leq 10E_1$ (E_1 是类钠离子基态的第一电离能) 温度范围内类氦离子基态双电子复合 (DR) 速率系数, 双激发自电离能级考虑了 $(2s2p)^7 3ln'l'$, $(2s2p)^7 4l4l'$ 以及 $(2s2p)^7 4l5l'$ 组态. 对于 $(2s2p)^7 3ln'l'$ 双激发自电离组态, 轨道角量子数 $l' > 8$ 的 $(2s2p)^7 3ln'l'$ 双激发自电离态对双电子复合速率系数的贡献可以忽略不计; $(2s2p)^7 3ln'l'$ 双激发自电离组态的高里德堡态对双电子复合速率系数的贡献满足 n'^{-3} 组态 - 组态外推法, 并且核电荷数越大, 趋于 n'^{-3} 标度的 n' 值越小; 对细致能级计算得到的类氦离子基态的总 DR 速率系数进行了拟合, 得到类氦离子基态的总 DR 速率系数随核电荷数 Z 和电子温度变化的经验公式, 该拟合公式与细致计算结果的偏差在 2% 以内, 能较准确的计算任意核电荷数 Z 的类氦离子在 $0.1E_1 \leq kT_e \leq 10E_1$ 电子温度范围的 DR 速率系数. Burgess-Merts(BM) 近似公式不适用于估算低温 ($kT_e < 0.3E_1$) 类氦离子的 DR 速率系数, 在高温 ($kT_e > 2E_1$) 时, 类氦离子的 DR 速率系数可以用 BM 近似公式表示.

关键词: 相对论组态相互作用, 双电子复合, 类氦离子, 速率系数

PACS: 31.30.Jv, 31.25.Eb, 32.80.Hd, 34.50.Fa

1 引言

双电子复合 (dielectronic recombination, DR) 过程对中高电子温度、中低电子密度等离子体中建立和维持热等离子体的电离平衡以及离子激发态布居起重要作用. 目前热核聚变实验堆 (ITER) 和惯性约束核聚变 (ICF) 的温度能达到几十 keV, 在这种高温等离子体中, 离子多处于高离化态, 如常用于 ITER 护面材料的钨离子多处于类氦电高度附近, 作为 ICF 靶材料的金离子其类氦离子的丰度也很高. 另外, 随着实验分辨率的提高, 上世纪 90 年代 Kanpp 等先后使用电子束离子阱 (electron beam ion traps, EBIT) 实验装置测得了类氦 Xe^{44+} , Au^{69+} 离子的 LMM 双电子复合过程^[1-3]. 2009 年, Biedermann 等在 Berlin EBIT 上测得了类氦 W^{64+} 的 LMn ($n = 3, \dots, 10$) 双电子复合共振强度^[4],

2007 年 Watanabe 等使用 Tokyo EBIT, 研究了 1.5 keV 到 14 keV 共振能量范围的类氦钨离子双电子复合 X 激光光谱^[5]. 通过求解速率方程来确定等离子体的离子布居需要各原子过程准确的速率系数, 双电子复合过程是其中主要的原子过程之一. 通过对类氦等电子系列离子双电子复合速率系数的系统研究, 揭示双电子复合过程的物理机理, 深入细致地掌握各种物理因素对双电子复合速率系数的影响, 为等离子体诊断提供简单易用且具有一定精确度的双电子复合速率系数解析公式是必要的. 本文继 Au^{69+} , W^{64+} 离子基态双电子复合过程的细致能级计算^[6,7], 系统研究核电荷数 $18 \leq Z \leq 92$ 的类氦等电子系列离子基态的双电子复合过程.

2 理论方法与计算过程

在孤立共振和独立过程近似下, 双电子复合可

* 四川省教育厅项目 (批准号: 10ZC109)、乐山师范学院项目 (批准号: Z1165) 和四川省科技厅项目 (批准号: 2011JYZ005) 资助的课题.

[†] E-mail: yjh20021220@126.com

以表示为两步. 第一步, 通过俘获一个自由电子, 同时激发一个束缚电子形成一个双激发自电离态的复合离子, 即自电离的逆过程; 第二步, 从双激发自电离态通过辐射衰退到不可再自电离态则完成双电子复合过程. 类氦离子基态的双电子复合过程可以表示为

$$\begin{aligned} & A^{q+}(2s^22p^6, i) + e \\ & \rightarrow A^{(q-1)+}((2s2p)^7nl'n'l', j) \\ & \rightarrow A^{(q-1)+}(2s^22p^6n''l'', k) + hv. \end{aligned} \quad (1)$$

本文计算中双激发自电离态包括 $(2s2p)^73ln'l'$, $(2s2p)^74l4l'$ 以及 $(2s2p)^74l5l'$, $(2s2p)^7$ 表示 $n = 2$ 壳层有一个空位; 能级 i 通过能级 j 到任意能级 k 的速率系数为

$$\alpha_{ij}^{\text{DR}}(kT_e) = \beta_{ij}^{\text{DC}}(kT_e)B_j^r, \quad (2)$$

其中 β_{ij}^{DC} , B_j^r 分别是能级 i 到能级 j 的双电子俘获速率系数和能级 j 通过辐射衰退到任意低于自电离能级的辐射衰退概率,

$$\beta_{ij}^{\text{DC}}(kT_e) = \frac{h^3}{(2\pi mkT_e)^{3/2}} \frac{g_j}{2g_i} A_{ji}^a e^{-E_{ij}/kT_e}, \quad (3)$$

$$B_j^r = \frac{\sum_k A_{jk}^r + \sum_{j'>i} A_{jj'}^r B_{j'}^r}{\sum_{i'} A_{ji'}^a + \sum_k A_{jk}^r + \sum_{j'} A_{jj'}^r}, \quad (4)$$

其中 $\sum_{i'} A_{ji'}^a$ 是从类钠双激发自电离能级 j 到所有类氦能级 i' 允许的自电离速率系数, 即到 $(2s2p)^73l$ 和 $2s^22p^6$ 组态的自电离速率; $\sum_k A_{jk}^r$ 表示从类钠双激发自电离能级 j 到所有双激发非自电离能级和所有单激发能级的辐射退激发概率; $A_{jj'}^r$ 表示从类钠双激发自电离能级 j 到双激发自电离能级 j' 的自发辐射跃迁概率.

辐射级联效应对类氦离子速率系数的贡献小于 5%, 除最低的双激发自电离态 $(2s2p)^73l3l'$ 和 $(2s2p)^73l4l'$, 其余高组态的辐射级联效应可以忽略不计^[6]. 忽略辐射级联效应, 则辐射分支比 B_j^r 可以表示为

$$B_j^r = \frac{\sum_k A_{jk}^r}{\sum_{i'} A_{ji'}^a + \sum_k A_{jk}^r}. \quad (5)$$

对所有通过能级 j 的速率系数求和得到基态类氦能级 $2s^22p^6$ 的总速率系数,

$$\alpha_i^{\text{DR}}(kT_e) = \sum_j \alpha_{ij}^{\text{DR}}(kT_e). \quad (6)$$

双激发自电离态的自电离末态能级考虑了类氦基态 $2s^22p^6$ 和激发态 $(2s2p)^73l$ 能级, 对类氦 $2s^22p^6$, $(2s2p)^73l$ 自电离能级的计算考虑了 $2s^22p^6$, $(2s2p)^73l$ 和 $(2s2p)^74l$ 组态之间所有可能的组态相关. 对于所考虑类钠双激发自电离能级, 考虑了相同主量子数组态之间的相互作用, 例如对于给定 n' 的 $(2s2p)^73ln'l'$ 双激发自电离态, 考虑了所有 $(2s2p)^73ln'l'$ 组态之间的相互作用. 通过 Breit 相互作用考虑了高阶量子电动力学效应, 自能和真空极化使用类氢近似. 相关原子结构数据 (包括能级, 自电离概率, 辐射跃迁概率) 的计算均使用相对论组态相互作用方法的 FAC 程序 (flexible atomic code)^[8-10], 连续态使用扭曲波方法, 该程序广泛用于研究复杂离子的 DR 过程^[6,11-13]. 对于被俘获电子处于高里德伯双激发组态 $(2s2p)^73ln'l'$ 的贡献使用 n'^{-3} 标度规律外推, 它是基于高里德伯态自电离能级的自电离速率和辐射速率遵循 n'^{-3} 标度规律, $(2s2p)^73ln'l'$ 双激发组态的 DR 速率系数表示为

$$\begin{aligned} \sum_{n'=3}^{\infty} \alpha^{\text{DR}}(n') &= \sum_{n'=3}^{n_s} \alpha^{\text{DR}}(n') \\ &+ \sum_{n'=n_s+1}^{\infty} \left(\frac{n'}{n_s}\right)^{-3} \alpha^{\text{DR}}(n_s). \end{aligned} \quad (7)$$

3 结果与讨论

首先选取十五个类氦等电子系列离子 Ar^{8+} , Ca^{10+} , Fe^{16+} , Zn^{20+} , Kr^{26+} , Mo^{32+} , Ag^{37+} , Sn^{40+} , Xe^{44+} , Sm^{52+} , Dy^{56+} , Yb^{60+} , Au^{69+} , At^{75+} , U^{82+} 进行了细致的能级-能级计算, 讨论了 DR 速率系数随被俘获电子的轨道角动量量子数 l' , 主量子数 n' 以及核电荷数 Z 的变化规律. 给出细致计算得到的各类氦离子基态 DR 速率系数的拟合, 得到了速率系数随核电荷数和电子温度变化的经验公式. 为了验证经验公式的可靠性, 细致计算了三个未参与拟合的类氦基态离子 Y^{29+} , Pr^{49+} 和 W^{64+} 的 DR 速率系数, 并与前述拟合值进行了比较. 双电子复合过程的近似计算时, 使用比较广泛的是半经验 BM(Burgess-Merts) 近似公式^[14,15], 为了评价半经验 BM 近似公式在类氦等电子系列离子 DR 速率系数计算的适用性, 比较了本工作拟合计算得到的不同离子的结果与 BM 近似公式计算得到的数据. 本文中电子温度单位取类钠离子基态的第一电离能 E_1 .

3.1 DR 速率系数随 n', l', Z 的变化规律

选取 Fe^{16+} , Mo^{32+} , U^{82+} 三种类氦离子, 考察通过 $(2s2p)^7 3ln'l'$ 双激发自电离态的速率系数随俘获电子的轨道角量子数 l' 和主量子数 n' 的变化关系. 图 1 给出通过双激发自电离态 $(2s2p)^7 3l12l'$ 在电子温度为 E_1 (E_1 是相应类钠离子基态的第一电离能) 时的速率系数随俘获电子的轨道角量子数 l' 的变化关系. 图 2 给出双激发自电离态 $(2s2p)^7 3ln'l'$ 在电子温度为 E_1 时的速率系数随俘获电子的主量子数 n' 的变化关系.

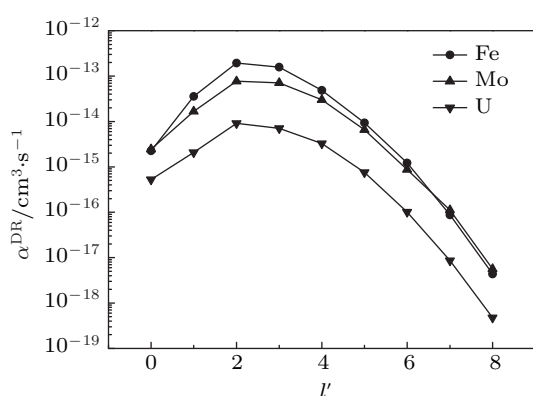


图 1 电子温度为 E_1 时, Fe^{16+} , Mo^{32+} , U^{82+} 离子通过双激发自电离态 $(2s2p)^7 3l12l'$ 的 DR 速率系数随俘获电子轨道角量子数 l' 的变化关系

电子温度为 E_1 时, Fe^{16+} , Mo^{32+} , U^{82+} 离子通过双激发自电离态 $(2s2p)^7 3l12l'$ 的 DR 速率系数都在俘获电子的轨道角量子数 $l' = 2$ 时达到最大值; 当 $l' > 2$ 时随着 l' 的增加速率系数迅速下降. 以 Fe^{16+} 为例, $l' = 2$ 时的速率系数是 $1.95 \times 10^{-13} \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$, 而 $l' = 8$ 时的速率系数仅为 $4.35 \times 10^{-18} \text{ cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$. 其他双激发自电离态 $(2s2p)^7 3ln'l'$ ($n' \neq 12$) 的 DR 速率系数随 l' 的变化与双激发自电离态 $(2s2p)^7 3l12l'$ 的 DR 速率系数随 l' 的变化具有相同规律. 双激发自电离态 $(2s2p)^7 3ln'l'$ 的 DR 速率系数从 $l' = 0$ 到 $l' = 2$ 上升的主要原因是打开了新的自电离通道; 从 $l' = 2$ 开始 DR 速率系数随着 l' 的增加而迅速下降的原因是自电离概率随 l' 的增加迅速下降.

图 2 中, 点是本文的细致能级 - 能级计算结果, 点与点之间的连线是为了方便观察而做的, 虚线是 n'^{-3} 标度规律. 可以看出, Fe^{16+} , Mo^{32+} , U^{82+} 离子随着 n' 的增加通过双激发自电离态 $(2s2p)^7 3ln'l'$ 的速率系数都趋向 n'^{-3} 标度规律, Fe^{16+} , Mo^{32+} ,

U^{82+} 离子分别在 $n' = 15$, $n' = 13$, $n' = 10$ 时开始趋向于 n'^{-3} 标度规律. 从图 2 可以得到两点结论, 第一, 类氦离子基态通过双激发自电离态 $(2s2p)^7 3ln'l'$ 的速率系数在一定俘获电子的主量子数时都将趋于 n'^{-3} 标度规律; 第二, 随着核电荷数的增加, 趋于 n'^{-3} 标度规律的 n' 值越来越小.

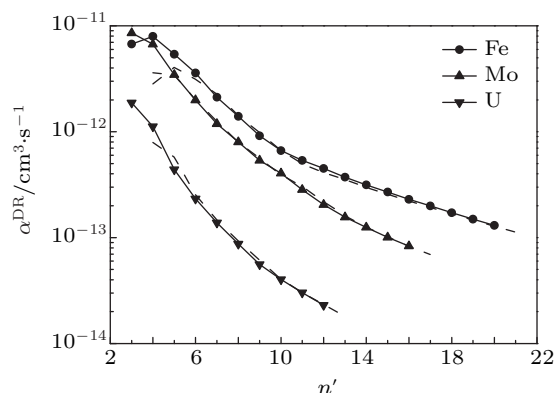


图 2 电子温度为 E_1 时, Fe^{16+} , Mo^{32+} , U^{82+} 离子通过双激发自电离态 $(2s2p)^7 3ln'l'$ 的 DR 速率系数随俘获电子主量子数 n' 的变化关系

电离速率 A_{ji}^a 满足 n'^{-3} 标度规律, 在高 Rydberg 双激发自电离态情况下, 双电子俘获速率系数 $\beta_{ij}^{\text{DC}}(kT_e)$ 也满足 n'^{-3} 标度规律, DR 速率系数 $\alpha_{ij}^{\text{DR}}(kT_e)$ 是否满足 n'^{-3} 标度规律则取决于辐射分支比 B_j^r 是否为一常数. 对不考虑辐射级联效应的辐射分支比 B_j^r (5) 式中的辐射衰退概率 $\sum_k A_{jk}^r$ 可以进一步分为两部分, 其一是通过双激发自电离态的内壳层退激发到低单电离能级, 用 $\sum_k A_{jk}^{r,1}$ 表示 (如 $2p^5 3ln'l' \rightarrow 2p^6 n'l'$), 对于高 Rydberg 双激发自电离态, $\sum_k A_{jk}^{r,1}$ 可以近似看做常数; 其二是通过双激发自电离态的外壳层退激发到低单电离能级, 用 $\sum_k A_{jk}^{r,2}$ 表示 (如 $2p^5 3ln'l' \rightarrow 2p^6 3l$), 对于高 Rydberg 双激发自电离态, $\sum_k A_{jk}^{r,2}$ 相对于 $\sum_k A_{jk}^{r,1}$ 可以忽略不计, 所以对于高 Rydberg 双激发自电离态, 辐射分支比 B_j^r 趋于常数. 另外, 随着核电荷数的增加, 趋于 n'^{-3} 标度规律的 n' 值越来越小, 究其原因自电离概率随核电荷数 Z 的变化很小, 而辐射退激发概率随 Z 的增加迅速增大, 使得双激发自电离态的辐射衰退概率与自电离概率的比值越来越大, 从辐射分支比的公式可以看出, 辐射退激发概率与自电离概率的比值越大, 则使得辐射分支比为常数的 n' 值越小. 本文对双激发自电离态 $(2s2p)^7 3ln'l'$, 统一

考虑为 $n' \leq 18, l' \leq 8$ 的双电子激发自电离态, 对高于 $n' > 18$ 的双电子激发自电离态对速率系数的贡献使用 n'^{-3} 组态 - 组态标度近似.

3.2 类氦等电子系列离子 DR 速率系数拟合

使用相对论组态相互作用方法分别对十五个类氦等电子系列离子 $\text{Ar}^{8+}, \text{Ca}^{10+}, \text{Fe}^{16+}, \text{Zn}^{20+}, \text{Kr}^{26+}, \text{Mo}^{32+}, \text{Ag}^{37+}, \text{Sn}^{40+}, \text{Xe}^{44+}, \text{Sm}^{52+}, \text{Dy}^{56+}, \text{Yb}^{60+}, \text{Au}^{69+}, \text{At}^{75+}, \text{U}^{82+}$ 的 DR 速率系数做了细

致计算, 将 DR 速率系数展开成以下指数函数求和的形式:

$$\alpha_i^{\text{DR}}(kT_e) = \tau^{-1.5} \sum_{t=1}^3 \exp(A_t - B_t/\tau), \quad (8)$$

其中 $\tau = \frac{kT_e}{E_1}$.

表 1 列出 $\text{Ar}^{8+}, \text{Ca}^{10+}, \text{Fe}^{16+}, \text{Zn}^{20+}, \text{Kr}^{26+}, \text{Mo}^{32+}, \text{Ag}^{37+}, \text{Sn}^{40+}, \text{Xe}^{44+}, \text{Sm}^{52+}, \text{Dy}^{56+}, \text{Yb}^{60+}, \text{Au}^{69+}, \text{At}^{75+}, \text{U}^{82+}$ 十五个离子的 DR 速率系数按 (8) 式拟合的参数值.

表 1 类氦等电子系列离子的 DR 总速率系数拟合参数

	A_1	B_1	A_2	B_2	A_3	B_3
Ar^{8+}	-26.73343	0.95238	-24.30067	1.41982	-23.52406	1.96057
Ca^{10+}	-25.95835	0.87805	-24.14948	1.30983	-23.32714	1.80249
Fe^{16+}	-25.42222	0.69560	-24.06291	1.12282	-23.25401	1.54765
Zn^{20+}	-25.21564	0.62388	-24.13258	1.03714	-23.38671	1.45431
Kr^{26+}	-25.04809	0.54827	-24.33213	0.94260	-23.69644	1.36184
Mo^{32+}	-25.17759	0.49619	-24.56008	0.88944	-24.05336	1.30893
Ag^{37+}	-25.24866	0.46666	-24.76375	0.85038	-24.33046	1.27555
Sn^{40+}	-25.35908	0.44989	-24.88654	0.82982	-24.47630	1.25891
Xe^{44+}	-25.48312	0.42757	-25.05659	0.79793	-24.66792	1.23775
Sm^{52+}	-25.89493	0.39397	-25.38915	0.75113	-25.02081	1.20807
Dy^{56+}	-26.07858	0.37678	-25.51829	0.73469	-25.20526	1.19611
Yb^{60+}	-26.21847	0.36275	-25.63935	0.71079	-25.38522	1.18575
Au^{69+}	-26.67782	0.32589	-25.92487	0.67225	-25.71052	1.16795
At^{75+}	-26.97977	0.30119	-26.10830	0.64879	-25.94541	1.15585
U^{82+}	-27.33801	0.26996	-26.35507	0.61926	-26.19827	1.14694

拟合的最大残差平方是 7.82461×10^{-29} (Kr^{26+} 离子), $\text{Adj. } R^2$ 决定系数均为 1, 由此说明拟合结果是可靠的, 拟合公式能真实反应类氦离子 DR 速率系数随约化温度的变化关系, 误差范围在 2% 以内.

通过反复比较, 将参数 A_t, B_t 与离子价 r ($r = Z - 10$) 拟合成以下形式最为合适:

$$A_t = \sum_{j=-3}^3 A_{tj} r^j, B_t = \sum_{j=-3}^2 B_{tj} r^j. \quad (9)$$

拟合的参数列于表 2 和表 3.

图 3 和图 4 中分别给出了参数 A_t, B_t 随离子价 r 的变化关系, 点是参数 A_t, B_t 的值, 曲线是

按 (9) 式拟合的结果, 拟合参数见表 2, 表 3.

表 2 根据 (9) 式拟合 A_t 的拟合参数 (其中 $a[b]$ 表示 $a \times 10^b$)

j	A_{1j}	A_{2j}	A_{3j}
$j = -3$	-9047.01828	-1916.77838	772.09955
$j = -2$	2638.12782	671.97154	-190.58359
$j = -1$	-301.49630	-98.28038	-3.06666
$j = 0$	-10.20546	-17.21441	-20.70024
$j = 1$	-0.32007	-0.21124	-0.13096
$j = 2$	0.00273	0.00214	0.00126
$j = 3$	-1.07670[-5]	-9.24240[-6]	-5.78464[-6]

表 3 根据 (9) 式拟合 B_t 的拟合参数 (其中 $a[b]$ 表示 $a \times 10^b$)

j	B_{1j}	B_{2j}	B_{3j}
$j = -3$	-74.07517	134.48445	16.17323
$j = -2$	-8.84814	-50.26127	-13.27374
$j = -1$	7.91490	10.40579	8.64563
$j = 0$	0.23302	0.64963	1.05735
$j = 1$	0.00188	-9.57272[-4]	-2.35460[-4]
$j = 2$	-3.15172[-5]	-1.07085[-5]	7.27760[-7]

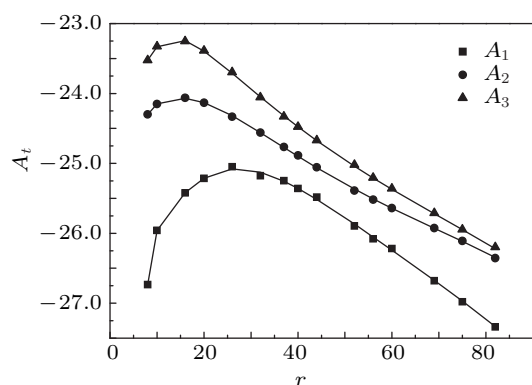


图 3 参数 A_t 及按 (9) 式拟合的曲线随离子价 r 的变化关系

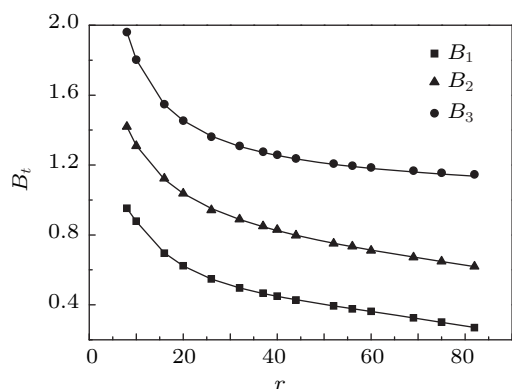


图 4 参数 B_t 及按 (9) 式拟合的曲线随离子价 r 的变化关系

从图 3 和图 4 可以清晰的看出, 按 (9) 式能准确的计算不同离子价 r 的参数 A_t 和 B_t . 使用表 2 和表 3 拟合参数可以方便的拟合出任意核电荷数 Z 的参数 A_t, B_t 值, 再将拟合出来的 A_t, B_t 值代入 (8) 式就能得到从 Ar ($Z = 18$) 到 U ($Z = 92$) 任意核电荷数 Z 的类氙离子在任意约化温度 τ 的 DR 总速率系数.

3.3 精确计算的类氙离子 DR 速率系数与拟合值的比较

利用拟合公式计算了十八个类氙离子基态在电子温度为 $0.1E_1, 0.3E_1, 1.0E_1, 3E_1, 8E_1, 10E_1$ 时的 DR 总速率系数, 能级 - 能级细致计算结果也列于表 4 中, 表中第二列是相应离子的类钠离子基态的电离能.

表 4 比较了参与拟合的细致能级 - 能级计算得到的十五个类氙离子的 DR 速率系数和相应的由 (8) 和 (9) 式给出的 DR 速率系数拟合值, 发现在 $0.1E_1 \leq kT_e \leq 2E_1$ 温度范围内, 拟合值与精确计算值的偏差小于 2%, 在 $2E_1 \leq kT_e \leq 10E_1$ 温度范围内大部分拟合值和精确计算值的偏差在 0.5% 以内. 另外, 表 4 中同时给出了没有参与拟合的 $Y^{29+}, Pr^{49+}, W^{64+}$ 三个离子由 (8) 和 (9) 式拟合得到的 DR 总速率系数及相应的能级 - 能级细致计算结果. 在 $0.1E_1 \leq kT_e \leq 2E_1$ 温度范围内, 拟合值与未参与拟合的精确计算值的偏差小于 2%, 在 $2E_1 \leq kT_e \leq 10E_1$ 温度范围内, 拟合值与未参与拟合的精确计算值的偏差在 1% 以内. 由此可以看出, (8) 和 (9) 式可以较为精确的描述类氙等电子系离子的 DR 速率系数.

双电子复合过程近似计算时, 使用比较广泛的是半经验 BM(Burgess-Merts) 近似公式 [14,15]. BM 近似公式是基于组态平均近似, 将靶离子通过某一双激发态系列对双电子复合共振强度的贡献与靶离子相应的芯激发吸收振子强度利用类氢近似关联得到, 本文考虑了 $2s^2 2p^6 - (2s 2p)^7 3l$ 电偶极跃迁, 图 5 给出使用 (8) 和 (9) 式拟合的 $Y^{29+}, Pr^{49+}, W^{64+}$ 离子的 DR 总速率系数, 以及使用 BM 近似公式得到的结果, 同时给出 Behar 等细致能级 - 能级计算的 W^{64+} 总 DR 速率系数结果以及拟合曲线 [16], 其中实线是使用 (8) 和 (9) 式拟合的类氙离子 DR 总速率系数, 虚线是 BM 近似, 短划线是 Behar 等细致能级 - 能级计算的 W^{64+} DR 总速率系数, 以及根据 (8) 式拟合类氙 W^{64+} 的拟合曲线, 拟合参数见文献 [16].

使用 (8) 和 (9) 式拟合的类氙 W^{64+} 离子 DR 速率系数与 Behar 等细致计算的 W^{64+} 离子 DR 速率系数, 以及 Behar 等拟合的类氙 W^{64+} 离子 DR 速率系数在整个温度范围内的偏差不超过 3%, Behar 等的拟合值与其精细计算值在 $0.1E_1 \leq kT_e \leq 10E_1$ 温度范围偏差不超过 2%. 使用 (8) 和 (9) 式拟合的

表 4 使用拟合公式得到的类氙离子在不同温度下的 DR 速率系数 (其中上标 a, b) 表示相应的能级 - 能级细致计算结果, a) 类数据参与了拟合过程, b) 类数据没有参与拟合过程, $x[y]$ 表示 $x \times 10^y$, 单位: $\text{cm}^3 \cdot \text{s}^{-1}$)

	E_I/eV	kT_e					
		$0.1E_I$	$0.3E_I$	$1.0E_I$	$3E_I$	$8E_I$	$10E_I$
Ar ⁸⁺	142.73	6.28[-15]	2.66[-12]	1.63[-11]	9.78[-12]	3.23[-12]	2.42[-12]
		6.30[-15] ^{a)}	2.66[-12] ^{a)}	1.63[-11] ^{a)}	9.78[-12] ^{a)}	3.23[-12] ^{a)}	2.42[-12] ^{a)}
Ca ¹⁰⁺	210.50	2.81[-14]	5.34[-12]	2.32[-11]	1.26[-11]	4.04[-12]	3.01[-12]
		2.88[-14] ^{a)}	5.36[-12] ^{a)}	2.32[-11] ^{a)}	1.26[-11] ^{a)}	4.04[-12] ^{a)}	3.01[-12] ^{a)}
Fe ¹⁶⁺	488.44	2.87[-13]	1.34[-11]	3.32[-11]	1.53[-11]	4.65[-12]	3.44[-12]
		2.93[-13] ^{a)}	1.33[-11] ^{a)}	3.30[-11] ^{a)}	1.52[-11] ^{a)}	4.63[-12] ^{a)}	3.43[-12] ^{a)}
Zn ²⁰⁺	736.44	7.38[-13]	1.82[-11]	3.39[-11]	1.45[-11]	4.29[-12]	3.17[-12]
		7.28[-13] ^{a)}	1.82[-11] ^{a)}	3.40[-11] ^{a)}	1.45[-11] ^{a)}	4.31[-12] ^{a)}	3.18[-12] ^{a)}
Kr ²⁶⁺	1204.23	1.76[-12]	2.28[-11]	3.09[-11]	1.21[-11]	3.49[-12]	2.56[-12]
		1.81[-12] ^{a)}	2.34[-11] ^{a)}	3.13[-11] ^{a)}	1.22[-11] ^{a)}	3.52[-12] ^{a)}	2.59[-12] ^{a)}
Y ²⁹⁺	1482.08	2.30[-12]	2.37[-11]	2.86[-11]	1.08[-11]	3.08[-12]	2.27[-12]
		2.29[-12] ^{b)}	2.35[-11] ^{b)}	2.83[-11] ^{b)}	1.07[-11] ^{b)}	3.06[-12] ^{b)}	2.25[-12] ^{b)}
Mo ³²⁺	1789.85	2.77[-12]	2.38[-11]	2.61[-11]	9.56[-12]	2.71[-12]	1.99[-12]
		2.67[-12] ^{a)}	2.31[-11] ^{a)}	2.56[-11] ^{a)}	9.43[-12] ^{a)}	2.68[-12] ^{a)}	1.97[-12] ^{a)}
Ag ³⁷⁺	2370.83	3.36[-12]	2.26[-11]	2.19[-11]	7.75[-12]	2.17[-12]	1.59[-12]
		3.34[-12] ^{a)}	2.26[-11] ^{a)}	2.19[-11] ^{a)}	7.75[-12] ^{a)}	2.17[-12] ^{a)}	1.59[-12] ^{a)}
Sn ⁴⁰⁺	2761.27	3.57[-12]	2.14[-11]	1.96[-11]	6.82[-12]	1.90[-12]	1.39[-12]
		3.54[-12] ^{a)}	2.13[-11] ^{a)}	1.96[-11] ^{a)}	6.84[-12] ^{a)}	1.91[-12] ^{a)}	1.40[-12] ^{a)}
Xe ⁴⁴⁺	3332.21	3.73[-12]	1.95[-11]	1.69[-11]	5.76[-12]	1.60[-12]	1.17[-12]
		3.91[-12] ^{a)}	2.00[-11] ^{a)}	1.71[-11] ^{a)}	5.83[-12] ^{a)}	1.62[-12] ^{a)}	1.18[-12] ^{a)}
Pr ⁴⁹⁺	4129.68	3.78[-12]	1.71[-11]	1.39[-11]	4.68[-12]	1.29[-12]	9.44[-13]
		3.71[-12] ^{b)}	1.69[-11] ^{b)}	1.38[-11] ^{b)}	4.64[-12] ^{b)}	1.28[-12] ^{b)}	9.37[-13] ^{b)}
Sm ⁵²⁺	4654.58	3.75[-12]	1.58[-11]	1.25[-11]	4.14[-12]	1.14[-12]	8.33[-13]
		3.66[-12] ^{a)}	1.54[-11] ^{a)}	1.23[-11] ^{a)}	4.12[-12] ^{a)}	1.13[-12] ^{a)}	8.30[-13] ^{a)}
Dy ⁵⁶⁺	5410.96	3.69[-12]	1.41[-11]	1.08[-11]	3.54[-12]	9.70[-13]	7.09[-13]
		3.62[-12] ^{a)}	1.38[-11] ^{a)}	1.06[-11] ^{a)}	3.51[-12] ^{a)}	9.63[-13] ^{a)}	7.04[-13] ^{a)}
Yb ⁶⁰⁺	6234.74	3.60[-12]	1.26[-11]	9.32[-12]	3.04[-12]	8.30[-13]	6.07[-13]
		3.65[-12] ^{a)}	1.28[-11] ^{a)}	9.42[-12] ^{a)}	3.07[-12] ^{a)}	8.30[-13] ^{a)}	6.14[-13] ^{a)}
W ⁶⁴⁺	7129.46	3.51[-12]	1.12[-11]	8.09[-12]	2.62[-12]	7.13[-13]	5.21[-13]
		3.52[-12] ^{b)}	1.13[-11] ^{b)}	8.16[-12] ^{b)}	2.64[-12] ^{b)}	7.20[-13] ^{b)}	5.23[-13] ^{b)}
Au ⁶⁹⁺	8353.94	3.40[-12]	9.77[-12]	6.81[-12]	2.18[-12]	5.92[-13]	4.33[-13]
		3.37[-12] ^{a)}	9.74[-12] ^{a)}	6.81[-12] ^{a)}	2.18[-12] ^{a)}	5.94[-13] ^{a)}	4.34[-13] ^{a)}
At ⁷⁵⁺	9991.73	3.26[-12]	8.24[-12]	5.53[-12]	1.75[-12]	4.74[-13]	3.46[-13]
		3.21[-12] ^{a)}	8.18[-12] ^{a)}	5.51[-12] ^{a)}	1.75[-12] ^{a)}	4.75[-13] ^{a)}	3.46[-13] ^{a)}
U ⁸²⁺	12160.88	3.09[-12]	6.70[-12]	4.29[-12]	1.34[-12]	3.63[-13]	2.65[-13]
		3.09[-12] ^{a)}	6.64[-12] ^{a)}	4.28[-12] ^{a)}	1.34[-12] ^{a)}	3.64[-13] ^{a)}	2.66[-13] ^{a)}

类氦 W^{64+} 离子 DR 速率系数与 BM 近似结果的偏差在电子温度为 $0.1E_1$ 时是 83%, 随着电子温度增加, 本文拟合结果与 BM 近似结果的偏差减小, 在 $0.3E_1 \leq kT_e \leq 2E_1$ 温度范围内, 两者的偏差在 10% 以内, 在 $2E_1 \leq kT_e \leq 10E_1$ 温度范围内, 偏差在 3% 以内, 对于 Y^{29+} , Pr^{49+} 离子也有相似的结论. 由此可以得出, BM 近似公式不适用于估算低温 ($kT_e < 0.3E_1$) 类氦离子的 DR 速率系数, 在高温 ($kT_e > 2E_1$) 时, 类氦离子的 DR 速率系数可以用 BM 近似公式表示.

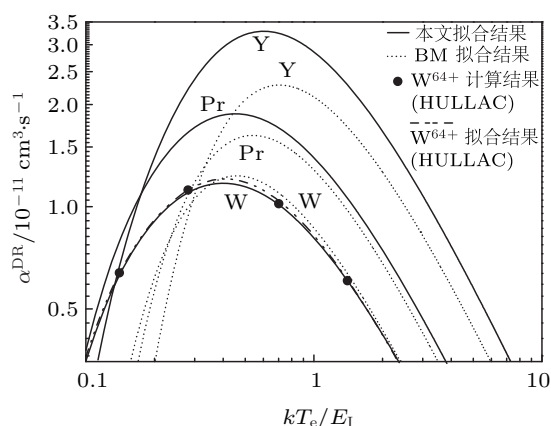


图 5 类氦 Y^{29+} , Pr^{49+} , W^{64+} 离子的 DR 总速率系数随约化电子温度 E_1 的变化

4 结论

本文使用全相对论组态相互作用方法, 能级 - 能级细致计算了 $0.1E_1 \leq kT_e \leq 10E_1$ (E_1 是类钠离子基态的第一电离能) 温度范围内类氦离子基态双电子复合 (DR) 速率系数, 双激发自电离能级考虑了 $(2s2p)^7 3ln'l'$, $(2s2p)^7 4l4l'$ 以及 $(2s2p)^7 4l5l'$ 组态.

对于 $(2s2p)^7 3ln'l'$ 双激发自电离组态, 轨道角量子数 $l' > 8$ 的 $(2s2p)^7 3ln'l'$ 组态对双电子复合速率系数的贡献可以忽略不计; $(2s2p)^7 3ln'l'$ 组态双电子激发自电离态的高里德堡态对双电子复合速率系数的贡献满足 n'^{-3} 组态 - 组态外推法, 并且核电荷数越大, 趋于 n'^{-3} 标度的 n' 值越小.

对细致计算得到的各类氦离子基态 DR 速率系数进行了拟合, 得到类氦离子基态的总 DR 速率系数随核电荷数 Z 和电子温度变化的经验公式, 该拟合公式与细致计算结果的偏差在 2% 以内, 能较准确的计算任意核电荷数 Z 的类氦离子在 $0.1E_1 \leq kT_e \leq 10E_1$ 温度范围的 DR 速率系数. BM 近似公式不适用于估算低温 ($kT_e < 0.3E_1$) 类氦离子的 DR 速率系数, 在高温 ($kT_e > 2E_1$) 时, 类氦离子的 DR 速率系数可以用 BM 近似公式表示.

- [1] Schneider M B, Knapp D A, Chen M H, Scofield J H, Beiersdorfer P, Bennett C L, Henderson J R, Levine M A, Marrs R E 1992 *Phys. Rev. A* **45** R1291
- [2] Dewitt D R, Schneider D, Chen M H, Clark M W, McDonald J W, Schneider M B 1992 *Phys. Rev. Lett.* **68** 1694
- [3] Knapp D A 1990 *Conference: 5 international conference on the physics of highly charged ions Giessen* (Germany, F.R.) September 10-14, 1990 E91001757
- [4] Biedermann C, Radtke R, Seidel R, Behar E 2009 *Journal of Physics: Conference Series* **163** 12034
- [5] Watanabe H, Nakamura N, Kato D, Nakano T, Ohtani S 2007 *Plasma and Fusion Research* **2** 27
- [6] Yang J H, Cheng X L, Deng B L 2010 *Phys. Scr.* **81** 15304
- [7] Wu H, Yang J H, Zhang J P, Zhu L 2012 *Journal of Sichuan University* (Natural Science Edition) **49** 843 (in Chinese) [吴华, 杨建会, 张建平, 朱林 2012 四川大学学报 (自然科学版) **49** 843]
- [8] Gu M F 2004 *Phys. Rev. A* **70** 62704
- [9] Gu M F 2003 *The Astrophysical Journal* **582** 1241
- [10] Gu M F 2003 *The Astrophysical Journal* **590** 1131
- [11] Yang J H, Zhang H, Cheng X L 2010 *Chin. Phys. B* **19** 63201
- [12] Zhang Y, Chen C Y, Wang Y S, Zou Y M 2009 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **110** 2180
- [13] Yang J H, Li X M, Zhang J P, Shu X Q, Zhu L 2010 *J. At. Mol. Phys.* **27** 888 (in Chinese) [杨建会, 李雪梅, 张建平, 舒晓琴, 朱林 2010 原子与分子物理学报 **27** 888]
- [14] Mitnik D, Mandelbaum P, Schwob J L, Bar-Shalom A, Oreg J, Goldstein W H 1994 *Phys. Rev. A* **50** 4911
- [15] Burgess A 1965 *Astrophys. J.* **141** 1588
- [16] Behar E, Mandelbaum P, Schwob J L 1999 *Phys. Rev. A* **59** 2787

The study of dielectronic recombination (DR) rate coefficient for ground state of Ne-like isoelectronic sequence ions*

Yang Jian-Hui[†] Fan Qiang Zhang Jian-Ping

(College of Physics and Electronic Engineering, Leshan Normal University, Leshan 614004, China)

(Received 11 January 2012; revised manuscript received 5 April 2012)

Abstract

The dielectronic recombination (DR) rate coefficients for Ne-like isoelectronic sequence ions in the ground state $2s^22p^6$ are calculated by using relativistic configuration interaction (RCI) method over a wide temperature ranging from $0.1E_I$ to $10E_I$ where E_I is the ionization energy of corresponding Na-like ion. The $(2s2p)^73ln'l'$, $(2s2p)^74l4l'$ and $(2s2p)^74l5l'$ complexes are considered as autoionizing doubly excited states of Ne-like ions in the calculation. The contribution of $(2s2p)^73ln'l'$ complex with $l' > 8$ is found to be negligible. The contribution of high Rydberg states of $(2s2p)^73ln'l'$ complex obeys the complex-complex n'^{-3} extrapolation, and the larger the nuclear charge, the smaller the value of n' is. On the basis of the detailed level-by-level results, a general analytic formula for the total DR rate coefficient for all the ions along the Ne-like isoelectronic sequence is constructed. This formula can generally reproduce the calculated DR rate coefficients within 2% for electron temperature between $0.1E_I$ and $10E_I$. Burgess-Merts semiempirical formula is found to be inadequate for predicting the DR rates of Ne-like ions at low electron temperatures ($kT_e < 0.3E_I$) and may be used for high electron temperatures ($kT_e > 2E_I$).

Keywords: relativistic configuration interaction(RCI), dielectronic recombination(DR), Ne-like isoelectronic sequence ions, rate coefficient

PACS: 31.30.Jv, 31.25.Eb, 32.80.Hd, 34.50.Fa

* Project supported by the Education Bureau of Sichuan Province (Grant No. 10ZC109), the Leshan Normal University (Grant No. Z1165), and the Science & Technology Department of Sichuan Province (Grant No. 2011JYZ005).

[†] E-mail: yjh20021220@126.com