

类钠 Ni^{17+} 离子双电子复合过程理论研究^{*}

李传莹^{1)†} 刘晓菊²⁾ 孟广为¹⁾ 王建国¹⁾

1) (北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

2) (中国科学院等离子体物理研究所, 合肥 230031)

(2009 年 9 月 28 日收到; 2009 年 12 月 16 日收到修改稿)

使用基于相对论多组态方法的 FAC 程序, 研究了类钠 Ni^{17+} ($3s$) 离子通过双激发态 Ni^{16+} ($3pnl, 3dnl$) ($\Delta n = 0$ 激发) 的双电子复合过程, 得到了态选择的双电子复合截面和速率系数, 并与文献中的实验和理论数据进行了对比. 结果发现, 计算通过 $3p_{3/2}10l$ 和 $3p_{1/2}11l$ 共振态的双电子复合积分截面在实验误差范围内与实验测量很好地符合, 并好于全相对论的多体微扰理论计算结果. 结合量子亏损理论, 发现包含高里德伯态的共振双激发态的辐射跃迁和自电离速率具有较好的标度关系, 利用该关系给出了近激发阈值的所有共振态的双电子复合积分截面和速率系数. 比较 $3pnl$ 和 $3dnl$ 两个系列, 发现在低温 (大约小于 100 eV) 等离子体情况下前者速率系数比后者大, 更高的温度后者大.

关键词: 双电子复合过程, FAC 程序, 量子亏损理论, 速率系数

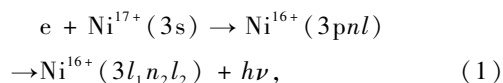
PACC: 3120A, 3120T, 3400, 3485D

1. 引言

双电子复合过程是高温等离子体中影响等离子体电离平衡以及光谱特性的一种重要原子物理过程, 其发射的双电子伴线光谱也是等离子体物理温度密度诊断的一种重要手段. 双电子复合原子过程参数在惯性约束聚变 (ICF)、磁约束聚变和天体物理中都具有重要应用. 同时由于涉及复杂的双电子激发态, 电子关联效应将对原子结构和动力学过程有重要影响, 因此这也是研究原子物理多体效应的一个标准物理过程. 目前兰州重离子储存环、上海电子束离子阱 (EBIT) 装置都可以对该过程进行细致的实验测量.

过去的实验和理论工作主要集中在入射电子能量较高的双电子复合过程, 这些过程涉及的双激发态与基态的主量子数相差 1 以上 ($\Delta n \geq 1$). 随着高精度的储存环合并束技术的发展, 近年来有大量工作测量低能的双电子复合过程, 涉及的双激发态靠近电离阈值, 两个电子中一个电子的主量子数与基态相同 ($\Delta n = 0$), 另一个电子处在高里德伯态, 如类锂离子 $\text{Ar}^{15+ [1]}$, $\text{N}^{4+ [2]}$ 和 $\text{F}^{6+ [3]}$ 等的双电子

复合过程. 对于这些靠近电离阈值的双激发态, Auger 电子的能量接近零值, 准确计算电子双激发态的能量和自电离速率是对理论研究的一个重要挑战. 特别是电子关联、相对论效应等都会对理论计算结果的准确性有很大影响. 最近, Fogle 等^[4] 利用储存环上的合并束技术测量了类钠 Ni^{17+} 离子的双电子复合过程



给出了自由电子能量低于 6.5 eV 的双电子复合积分截面和速率系数. 类 Na 体系比类 Li 体系更为复杂, 要准确给出双电子复合过程的共振位置和积分截面更为困难, 尤其是对于激发电子 $\Delta n = 0$ 的跃迁过程. Fogle 等^[4] 利用相对论多体微扰的方法对该过程进行了计算, 但一些积分截面, 如 $3p_{3/2}10s$ 共振态, 与实验符合得并不好. 另外, 理论工作只给出了实验测量的能量范围的计算结果, 从应用和规律研究的角度看都应该扩展到更高的能区. 因此有必要对该过程进行更深入的研究.

本文使用基于相对论多组态方法的 FAC (flexible atomic code) 程序^[5-7] 计算了类钠 Ni^{17+}

^{*} 国家自然科学基金 (批准号: 10974021) 资助的课题.

[†] E-mail: li_chuanying@iapcm.ac.cn

(3s) 离子的双电子复合过程, 给出了双激发态 $3p_{1/2}nl(n = 11-16)$ 和 $3p_{3/2}nl(n = 10-16)$ 的能级、自电离速率、辐射跃迁速率, 进一步计算了经过这些中间态的双电子复合积分截面和速率系数, 并与文献[4]中的实验和理论数据进行了对比和分析. 结果表明, 我们的理论计算积分截面在实验误差范围内与实验测量很好地符合, 总体上要比全相对论多体微扰计算的结果^[4]要好. 根据量子亏损理论, 对于更高的里德伯态 $3pnl(n = 17-35)$, 我们使用 $3p16l$ 的双激发态能级、自电离速率和辐射跃迁速率进行了外推, 得到了相应的积分截面和速率系数. 此外, 我们还计算了双激发态 $3d_{3/2}nl(n = 7-12)$ 和 $3d_{5/2}nl(n = 7-12)$ 的能量、自电离速率、辐射跃迁速率、积分截面和速率系数, 对于更高的里德伯态 $3dnl(n = 13-31)$, 我们使用 $3d12l$ 的双激发态能级、自电离速率和辐射跃迁速率进行了外推, 得到了相应的积分截面和速率系数.

2. 理论方法

我们采用孤立共振近似计算双电子复合过程. 在该近似下, 双电子复合过程可以看作两步过程^[8], 第一步: 一个具有一定能量的自由电子与一个带电离子 X^{q+} 碰撞, 将带电离子中一个束缚电子激发到较高激发态, 同时该自由电子由于失去部分能量而被共振俘获到一个束缚态, 从而形成一个共振双激发态, 这个过程叫双电子共振俘获过程; 第二步: 共振双激发态通过自发辐射而衰变成为不能发生自电离的离子, 并放出特定能量的光子, 该双激发态也可以通过自电离与自发辐射过程相竞争.

2.1. 双电子复合的积分截面

双电子复合过程的第一步是双电子共振俘获过程, 其逆过程是自电离过程, 这一对正逆过程之间满足细致平衡关系. 所以双电子俘获的截面可以由自电离速率表示出来, 将双电子俘获的截面对入射电子的能量进行积分就得到双电子俘获的积分截面, 即双电子俘获强度

$$S_{ij}^{\text{DC}} = \frac{\pi^2 \hbar^3}{(m_e E_{ij})} \frac{g_j}{2g_i} A^a(j \rightarrow i), \quad (2)$$

其中 m_e 是电子的质量, g_j 和 g_i 分别是双电子俘获所形成的双激发态 j 和初态 i 的统计权重, $A^a(j \rightarrow i)$ 是自电离速率, E_{ij} 是共振能量. 双激发态 j 既可

以通过发射光子而衰变到较低的态 d , 也可以通过自电离而衰变. 如果自发辐射过程的末态 d 的能量仍然高于电离阈值, 那么它可以进一步通过自发辐射过程或者自电离过程而衰变, 这样的过程叫做级联辐射过程. 当考虑级联辐射时, 双电子复合过程的分支比是

$$B_j^r = \frac{\sum_f A^r(j \rightarrow f) + \sum_d A^r(j \rightarrow d) B_d^r}{\sum_i A^a(j \rightarrow i) + \sum_f A^r(j \rightarrow f) + \sum_d A^r(j \rightarrow d)}, \quad (3)$$

其中 A^r 是辐射速率, f 和 d 分别代表能量低于电离阈值和高于电离阈值的态, i 是自电离过程的末态.

对我们研究的双电子复合过程, 由于我们计算出来的自电离速率远大于辐射速率, 一般大两个量级以上, 因此(3)式中的 B_d^r 很小, 并且由于能级差小, 辐射末态高于电离阈值的辐射速率 $\sum_d A^r(j \rightarrow d)$ 远远小于辐射末态低于电离阈值的辐射速率 $\sum_f A^r(j \rightarrow f)$, 因此对我们研究的这个体系, 级联辐射过程是不重要的, 本文忽略其效应, 则双电子复合过程的分支比是

$$B_j^r = \frac{\sum_f A^r(j \rightarrow f)}{\sum_i A^a(j \rightarrow i) + \sum_f A^r(j \rightarrow f)} \quad (4)$$

其中 f 代表能量低于电离阈值的态.

双电子复合过程的积分截面, 即双电子复合强度可以表示为

$$S_{ij}^{\text{DR}} = S_{ij}^{\text{DC}} \times B_j^r = \frac{\pi^2 \hbar^3}{(m_e E_{ij})} \frac{g_j}{2g_i} A^a(j \rightarrow i) B_j^r. \quad (5)$$

2.2. 双电子复合的速率系数

当自由电子的速度分布是麦克斯韦速度分布时, 双电子复合的速率系数为

$$\alpha_i^{\text{DR}}(T_e) = \frac{h^3}{(2\pi m_e T_e)^{3/2}} \sum_j \frac{g_j}{2g_i} A^a(j \rightarrow i) B_j^r \times \exp\left(-\frac{E_{ij}}{T_e}\right), \quad (6)$$

其中 $T_e = kT$, T_e 是电子温度, k 是玻尔兹曼常数.

在储存环的实验中, 自由电子的速度分布是双温型的^[9-11], 即

$$f(v_0, v) = \left(\frac{m_e}{2\pi k T_{\parallel}}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{m_e(v_{\parallel} - v_0)^2}{2k T_{\parallel}}\right] \times \frac{m_e}{2\pi k T_{\perp}} \exp\left(-\frac{m_e v_{\perp}^2}{2k T_{\perp}}\right), \quad (7)$$

这里 $v_{\perp}$ 和 $v_{\parallel}$ 分别为垂直和平行于离子束方向的电子速度分量, $T_{\perp}$ 和 $T_{\parallel}$ 分别为 $v_{\perp}$ 和 $v_{\parallel}$ 对应的电子温度, $T_{\parallel} \ll T_{\perp}$.

相应的双电子复合的速率系数为^[11]

$$\alpha^{\text{DR}}(v_0) = \frac{s^{\text{DR}} v_d}{m_e \sigma_{\perp}^2 \zeta} \exp\left(-\frac{v_d^2 - v_0^2 \zeta^{-2}}{\sigma_{\perp}^2}\right) \times \left[\operatorname{erf}\left(\frac{v_0 + v_d \zeta^2}{\sigma_{\parallel} \zeta}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{v_0 - v_d \zeta^2}{\sigma_{\parallel} \zeta}\right) \right], \quad (8)$$

其中 v_d 是相应于共振能量 E_{ij} 的速度, $v_d = \sqrt{2E_{ij}/m_e}$, v_0 是相应于质心能量 E_0 的速度, $v_0 = \sqrt{2E_0/m_e}$, $\sigma_{\parallel, \perp} = \left(\frac{2kT_{\parallel, \perp}}{m_e}\right)^{1/2}$, $\zeta = \left(1 - \frac{T_{\parallel}}{T_{\perp}}\right)^{1/2}$, $\operatorname{erf}(x) = \int_0^x e^{-u^2} du$ 为误差函数.

3. 计算结果及讨论

利用 FAC 程序,我们计算了双激发态 $3p_{1/2}nl$ ($n = 11 - 16$), $3p_{3/2}nl$ ($n = 10-16$), $3d_{3/2}nl$ ($n = 7-12$) 和 $3d_{5/2}nl$ ($n = 7-12$) 的能级、自电离速率、

辐射跃迁速率,然后利用(2)—(8)式计算了 Ni^{17+} 离子经过这些中间态的双电子复合积分截面和速率系数. 对于更高的里德堡态 $3pnl$ ($n = 17-35$), 根据量子亏损理论,我们对双激发态能级、自电离速率和辐射跃迁速率进行了外推,得到了相应的积分截面和速率系数.

表 1 给出了 $3p_{3/2}10l$ 和 $3p_{1/2}11l$ 的部分双激发态能量、自电离速率、辐射跃迁速率,以及 Ni^{17+} 离子经过这些中间态的双电子复合积分截面,并与文献[4]中的理论数据进行了对比. 需要指出的是,与文献[4]一样,我们根据 NIST 数据库的能级表对 $3p_{1/2} - 3s_{1/2}$, $3p_{3/2} - 3s_{1/2}$, $3d_{3/2} - 3s_{1/2}$ 和 $3d_{5/2} - 3s_{1/2}$ 的能级差进行了修正. 这些是对双电子复合过程贡献最大的双激发态. 可以看到,本文计算的双激发态能级与文献[4]的结果很好地符合,最大差别也小于 1%,特别是靠近阈值的态,由于积分截面反比于共振能量,因此这些态对积分截面的贡献最大. 两种方法计算的自电离速率和辐射跃迁速率大部分差别在 15% 以内,但由于自电离速率比辐射跃迁速率大两个量级左右,因此从(5)式可以看到,积分截面主要由辐射跃迁速率决定. 我们计算的辐射跃迁速率大部分比文献[4]高约 10%—20% 左右,因此大部分态的积分截面也高约 10%—20% 左右.

表 1 Ni^{16+} 离子双激发态 $3p_{1/2}11l$ 和 $3p_{3/2}10l$ 的部分能级、自电离速率、辐射跃迁速率,以及 Ni^{17+} 离子通过这些中间态的双电子复合积分截面,并和 Fogle 等^[4]的理论结果的比较

	共振位置 /eV		自电离速率 A^a/ns^{-1}		辐射速率 A^r/ns^{-1}		积分截面 $/10^{-20} \text{ eV cm}^2$	
	本文	文献[4]	本文	文献[4]	本文	文献[4]	本文	文献[4]
$(3p_{3/2}10s_{1/2})_2$	0. 203	0. 206	$1. 472 \times 10^4$	$1. 356 \times 10^4$	70. 4	62. 8	213. 0	187. 5
$(3p_{3/2}10s_{1/2})_1$	0. 245	0. 243	$4. 684 \times 10^4$	$4. 347 \times 10^4$	89. 0	69. 7	134. 7	106. 5
$(3p_{3/2}10p_{3/2})_3$	1. 134	1. 139	$2. 215 \times 10^4$	$2. 164 \times 10^4$	74. 6	64. 1	56. 8	48. 6
$(3p_{3/2}10d_{3/2})_3$	2. 323	2. 311	$1. 769 \times 10^3$	$1. 952 \times 10^3$	126. 8	110. 5	44. 1	39. 2
$(3p_{3/2}10f_{7/2})_5$	2. 884	2. 901	$1. 164 \times 10^4$	$1. 297 \times 10^4$	113. 0	104. 7	52. 8	48. 7
$(3p_{1/2}11d_{5/2})_3$	5. 540	5. 537	$9. 346 \times 10^2$	$1. 028 \times 10^3$	80. 1	70. 0	11. 5	10. 3
$(3p_{1/2}11f_{5/2})_3$	5. 959	5. 987	$5. 596 \times 10^3$	$6. 053 \times 10^3$	85. 7	77. 5	12. 3	11. 7
$(3p_{1/2}11f_{7/2})_3$	5. 987	6. 016	$7. 993 \times 10^3$	$7. 871 \times 10^3$	87. 8	78. 6	12. 6	11. 2
$(3p_{1/2}11f_{5/2})_2$	6. 013	6. 020	$1. 143 \times 10^4$	$1. 973 \times 10^4$	90. 6	103. 6	9. 3	10. 6
$(3p_{1/2}11f_{7/2})_4$	6. 004	6. 022	$1. 180 \times 10^4$	$1. 066 \times 10^4$	84. 6	78. 1	15. 6	14. 3

通过对双激发态的精细结构能级求和,我们在表 2 给出了 Ni^{17+} 离子经过双激发态 $3p_{3/2}10l$ 和 $3p_{1/2}11l$ 的不同角量子数的双电子复合积分截面,并和文献[4]中的实验和理论数据进行了对比. 可以看到,我们计算的积分截面在实验误差内与实验完

全符合. 文献[4]采用多体微扰理论计算的一些积分截面与实验符合得并不好,特别是 $3p_{3/2}10s$ 共振态,主要是辐射跃迁速率的计算精度问题,或者他们采用的辐射末态不够,也可能是电子关联效应考虑的不好. 在的计算中,我们不但考虑了相同主量

子数组态之间的相互作用,也包含了近邻主量子数组态之间的相互作用.

表 2 Ni¹⁷⁺ 离子经过 3p_{3/2}10*l* 和 3p_{1/2}11*l* 共振态的双电子复合积分截面,并与 Fogle 等^[4] 的理论及实验结果的对比

	本文 /10 ⁻²⁰ eV cm ²	理论值 ^[4] /10 ⁻²⁰ eV cm ²	实验值 ^[4] /10 ⁻²⁰ eV cm ²
3p _{3/2} 10s	347.7	294.0	409(96)
3p _{3/2} 10p	192.9	169.0	205(46)
3p _{3/2} 10d	155.9	152.0	195(43)
3p _{3/2} 10f, ... ^{b)}	924.4	913.3	1003(181)
3p _{1/2} 11s	7.3	6.1	— ^{a)}
3p _{1/2} 11p	18.2	16.4	— ^{a)}
3p _{1/2} 11d	31.4	27.7	32(9)
3p _{1/2} 11f, ... ^{c)}	203.9	216.4	232(48)

a) 实验未测出;b) 包括了所有 3p_{3/2}10*l* 的共振,其中 *l* = 3—9;c) 包括了所有 3p_{1/2}11*l* 的共振,其中 *l* = 3—10.

为了与储存环的高精度实验^[4] 进行对比,我们计算了自由电子速度分布满足(7)式时的双电子复合速率系数.我们选 $kT_{\perp} = 1\text{ meV}$, $kT_{\parallel} = 0.1\text{ meV}$ 与实验一致,计算的速率系数与文献[4]中的理论及实验结果进行了对比,如图 1 所示.可以看到,不论共振峰的位置还是强度与实验测量的结果都非常符合.

通过我们的理论计算和实验测量结果的对比,检验了我们的理论计算的可靠性.接着我们进一步把计算扩展到高里德堡态,更高能量的双电子复合过程.

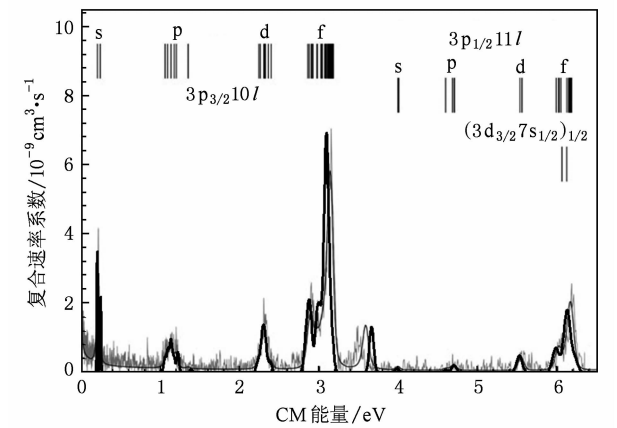


图 1 Ni¹⁷⁺ 离子的双电子复合速率系数及与其他实验和理论的对比(计算中取 $kT_{\perp} = 1\text{ meV}$, $kT_{\parallel} = 0.1\text{ meV}$. 粗黑实线是本文结果,细灰色实线是 Fogle 等^[4] 采用多体微扰理论计算的结果,具有噪声背景的灰色线是 Fogle 等^[4] 的实验结果)

根据量子亏损理论,对于更高的双激发共振里德堡态 3p*nl* (*n* = 17—35) 或 3d*nl* (*n* = 13—31),我们利用 3p16*l* 或 3d12*l* 的双激发态能级、自电离速率和辐射跃迁速率进行了外推,得到了相应的积分截面和速率系数.对能级进行外推的公式如下:

$$\begin{aligned} E_{3pnl} - E_{3p16l} &= 13.6 \times \left(\frac{17^2}{(16 - \mu_l)^2} - \frac{17^2}{(n - \mu_l)^2} \right) (\text{eV}), \\ (n &= 17-35), \\ E_{3dnl} - E_{3d12l} &= 13.6 \times \left(\frac{17^2}{(12 - \mu_l)^2} - \frac{17^2}{(n - \mu_l)^2} \right) (\text{eV}), \\ (n &= 13-31), \end{aligned} \tag{9}$$

这里 μ_l 为高激发态电子的量子亏损,可以通过相邻的能级差计算得到,这里采用单通道近似^[12].

对辐射跃迁过程,当只有一个活动电子时,对自发辐射速率的外推分成两种情况:一是 3p*nl* 到 3s*nl* 的跃迁过程,由于 *nl* 为高里德堡态,它对内层 3p 到 3s 跃迁过程的影响应该随着 *n* 的增加越来越小,见图 2(a),因此当 *n* > 16 我们就用 *n* = 16 的值来近似.由于 3p12*l* 已经是双激发态,而本文忽视级联辐射过程,所以我们对 3d12*l* 的辐射速率进行外推时不需考虑这种情况.二是外层电子从 3p*nl* 到 3p*n'l'* 或者从 3d*nl* 到 3d*n'l'* 的跃迁过程.根据量子亏损理论,辐射速率随主量子数 *n* 的增大逐渐呈现 n^{-3} 标度^[13],从图 2(b)可以看到 $n^3 A^r$ 随主量子数 *n* 的增大逐渐趋向常数,因此对 *n* > 16 的情况,可以用 n^{-3} 标度关系进行外推.由于考虑了组态相互作用,所以计算结果中包括了辐射过程中存在两个活动电子的情况,考虑到这样过程的辐射跃迁速率很小,我们仍按照 n^{-3} 标度律来外推这类辐射跃迁速率.对自电离过程,对 *n* > 16 的情况,自电离速率也存在近似 n^{-3} 标度关系^[13].图 2(c)给出了几个计算的例子,可以看到 $n^3 A^a$ 随着主量子数 *n* 的增大逐渐趋向常数^[13],因此我们仍然按照 n^{-3} 标度律来外推自电离速率.

图 3 是对应于 3p_{3/2}*nl* (*n* = 10—0) 和 3p_{1/2}*nl* (*n* = 11—20) 的不同角量子数的积分截面.可以看到,积分截面不仅随着主量子数 *n* 的增加而逐渐减小,而且随着角量子数 *l* 的增加而减小.对我们计算的体系, $A^a \gg A^r$, 根据(5)式,积分截面 $S_{ij}^{\text{DR}} \propto A^r$ 近似成立.由于 A^r 随着 *n* 的增大存在趋于常数和 n^{-3} 标度变化两种情况,所以 S_{ij}^{DR} 随着 *n* 的增大不一定符

合 n^{-3} 标度. 对于本文计算的体系, 当从 $3p16l$ 到 $3s16l$ 的辐射速率远远小于以 $3p16l$ 为初始能级的

其他所有辐射速率之和时, S_{ij}^{DR} 随着 n 的增大才基本符合 n^{-3} 标度.

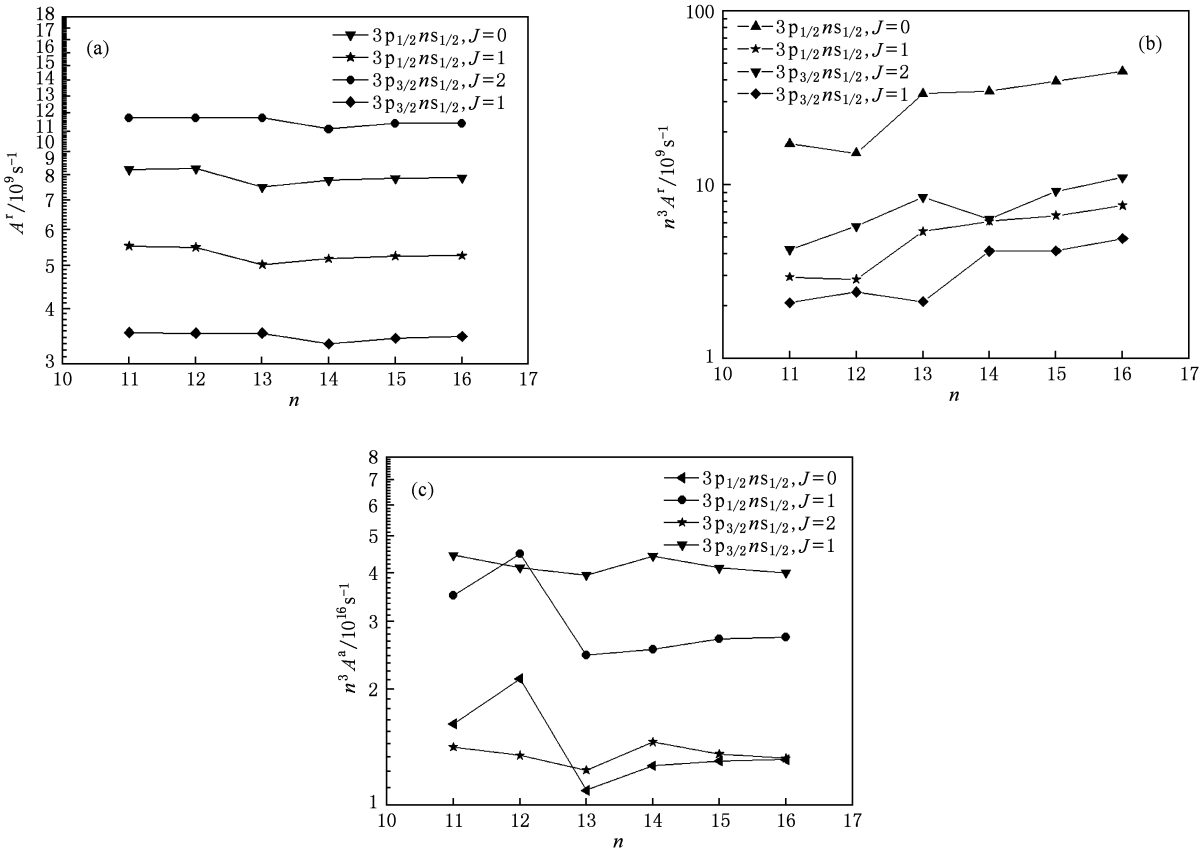


图 2 Ni^{16+} 离子双激发态 $3p_{1/2,3/2}ns_{1/2}$ ($n = 11-16$) 四个通道中辐射速率和自电离速率随主量子数 n 的变化规律 (a) $3p_{1/2,3/2}ns_{1/2}$ ($n = 11-16$) 到 $3s_{1/2}ns_{1/2}$ ($J = 1$) 的辐射速率随 n 的变化规律; (b) $3p_{1/2,3/2}ns_{1/2}$ ($n = 11-16$) 到能级 $3p_{1/2}3p_{3/2}$ ($J = 1$) 的辐射速率随 n 的变化规律; (c) $3p_{1/2,3/2}ns_{1/2}$ ($n = 11-16$) 的自电离速率随 n 的变化规律

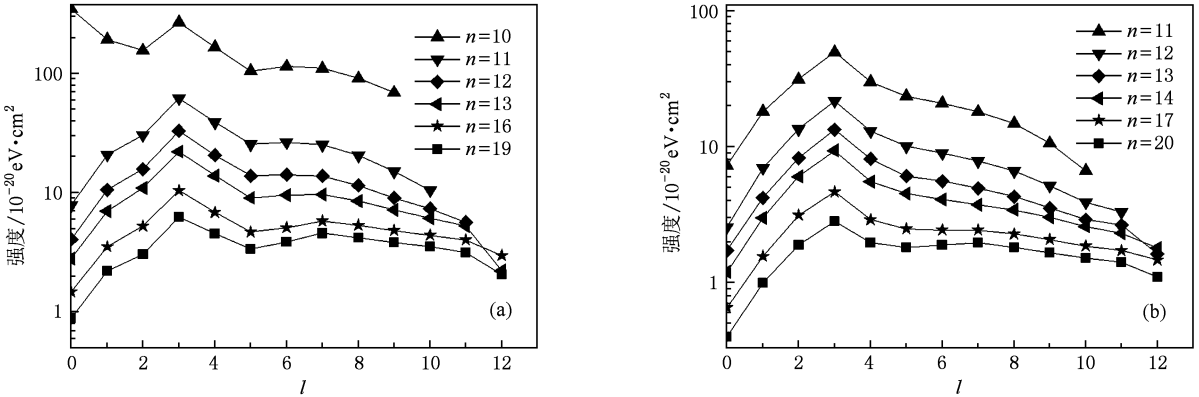


图 3 Ni^{17+} 离子经过双激发态 $3pnl$ 的不同角量子数 l 的积分截面 (a) 对应 $3p_{3/2}nl$ ($n = 10-20$) 中间态; (b) 对应 $3p_{1/2}nl$ ($n = 11-20$) 中间态

包含这些外推的高里德伯态, 我们仍然采用文献 [4] 的实验双温分布: $kT_{\perp} = 1 \text{ meV}$, $kT_{\parallel} = 0.1 \text{ meV}$ 重新计算了通过双激发态 $3pnl$ ($n \leq 35$) 和 $3dnl$ ($n \leq$

31) 的双电子复合速率系数, 如图 4. 可以看到速率系数, 随着共振能量增加逐渐降低, 并在较高的能区收敛于连续态. 另外, 对比两个共振态 $3pnl$ ($n \leq 35$) 和

$3\text{dnl}(n \leq 31)$ 的速率系数,可以发现 $3\text{pnl}(n \leq 35)$ 有两个系列 $3\text{p}_{1/2}\text{nl}(n \leq 35)$ 和 $3\text{p}_{3/2}\text{nl}(n \leq 35)$, 而 $3\text{dnl}(n \leq 31)$ 只有一个系列,这是由于实验分辨率不

足以分开 $3\text{d}_{3/2}\text{nl}(n \leq 31)$ 和 $3\text{d}_{5/2}\text{nl}(n \leq 31)$. 希望兰州近代物理研究所的储存环实验可以测量到 $\Delta n = 0$ 的这几个双电子复合系列.

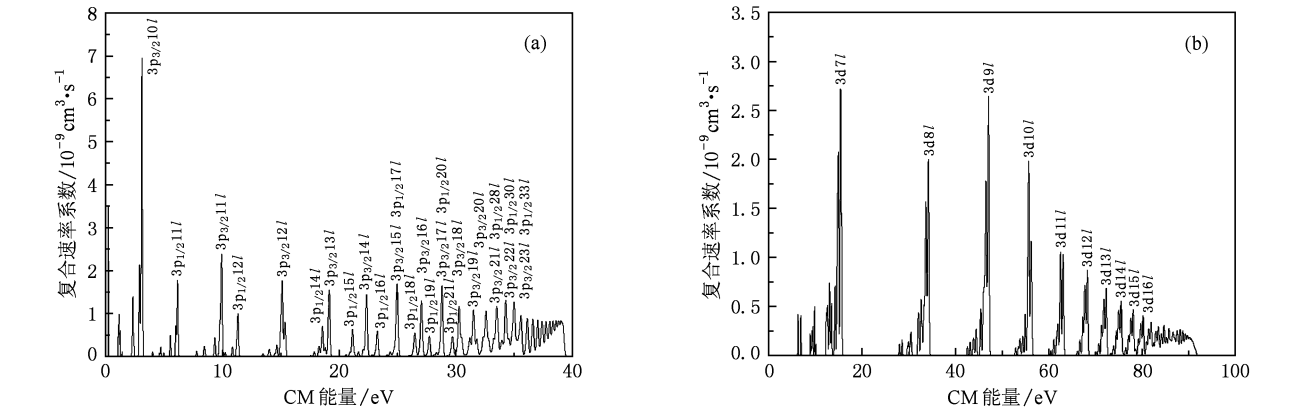


图4 Ni^{17+} 离子通过双激发态 $3\text{pnl}(n \leq 35)$ (a) 和 $3\text{dnl}(n \leq 31)$ (b) 的双电子复合速率系数(计算中取 $kT_{\perp} = 1 \text{ meV}$, $kT_{\parallel} = 0.1 \text{ meV}$)

在实际的应用中,不论是天体物理或实验室环境中,等离子体的自由电子都是麦克斯韦分布的,因此我们也计算了该分布下 Ni^{17+} 离子 $\Delta n = 0$ 跃迁的双电子复合速率系数,见图 5. 可以看到,速率系数随主量子数 n 的增加而逐渐减小,但并没有明显

的标度关系,这是与图 3 中的积分截面一致的. 对比 3pnl 和 3dnl 系列,可以发现当温度大约小于 100 eV 时,前者的速率系数大,这主要是由于前者有很多靠近阈值的共振态;而当温度约大于 100 eV 时,后者的速率系数大,这主要是由于后者的统计权重大.

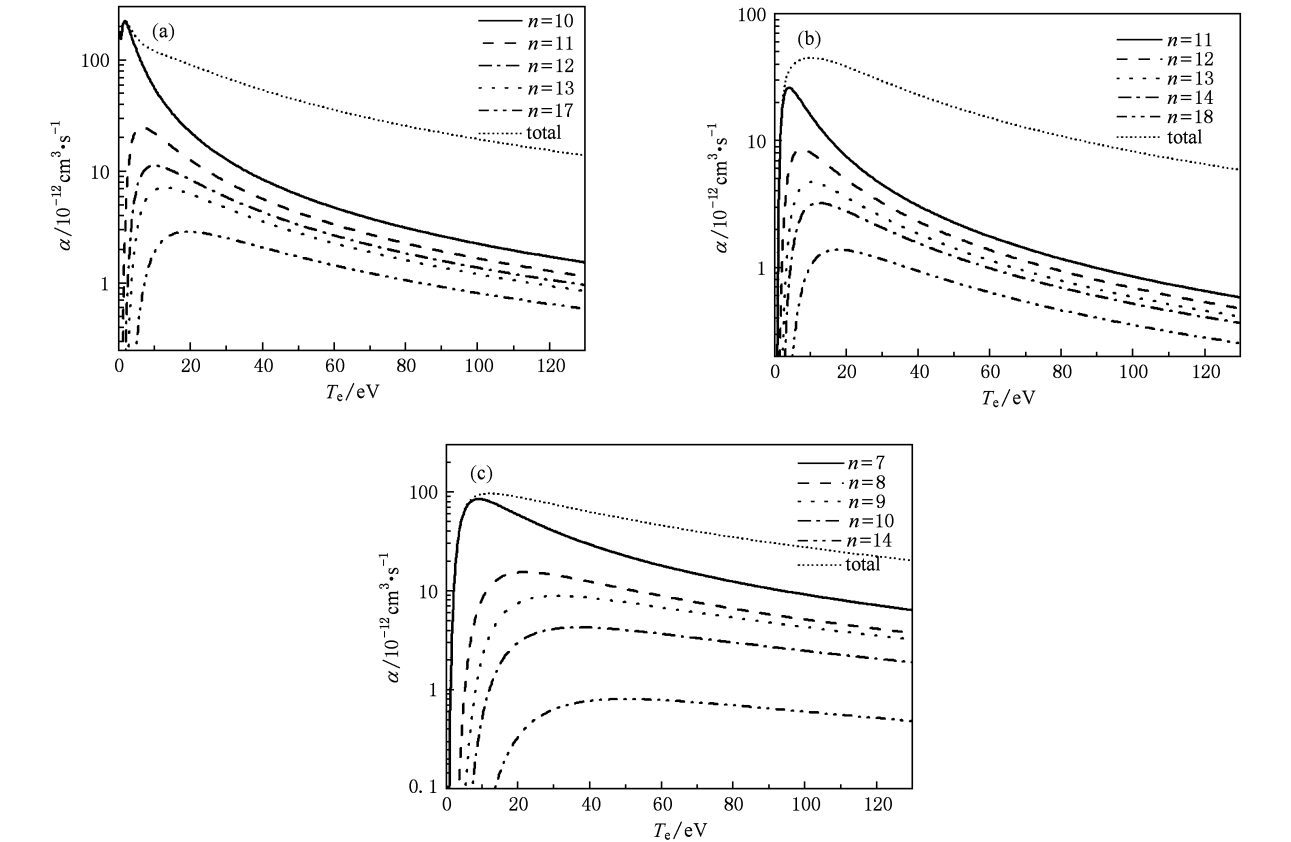


图5 利用自由电子麦克斯韦分布计算的 Ni^{17+} 离子双电子复合速率系数 (a) 通过共振激发态 $3\text{p}_{3/2}\text{nl}(n \leq 35)$; (b): 通过共振激发态 $3\text{p}_{1/2}\text{nl}(n \leq 35)$; (c): 通过共振激发态 $3\text{dnl}(n \leq 31)$

4. 结 论

本文使用相对论多组态方法研究了类钠 Ni^{17+} 离子 $\Delta n = 0$ 的双电子复合过程,得到了通过 $3pnl$ ($n \leq 16$) 和 $3dnl$ ($n \leq 12$) 各双激发态的积分截面和速率系数. 靠近阈值的共振态积分截面在实验误差内与 Fogle 等^[4] 的实验很好地符合,并好于他们的多体微扰理论计算. 基于量子亏损理论,我们研究了包含高里德堡态的共振双激发态的标度性质,发现辐射跃迁和自电离速率仍能保持较好的 n^{-3} 标度

关系,利用该标度关系我们得到了接近激发阈值的所有共振积分截面,并计算了对应的速率系数. 电子数小于 9 的离子的 $\Delta n = 0$ 双电子复合过程,主要是离子 2s 到 2p 的激发并俘获一个自由电子,但类钠 Ni^{17+} 离子不但有 3s 到 3p 的激发过程,还有 3s 到 3d 的激发,特别是我们发现后者的速率系数在电子温度约大于 100 eV 时,要比前者大. 值得提醒的是,我们的计算并没有包含 $\Delta n = 1$ 的双电子复合过程,在较高的温度, $\Delta n = 1$ 的双电子复合速率系数要大于 $\Delta n = 0$ 的情况,一些低共振态会进入 $\Delta n = 0$ 系列中,本文不再详细讨论.

[1] Zong W, Schuch R, Lindroth E, Gao H, DeWitt D R 1997 *Phys. Rev. A* **56** 386

[2] Glans P, Lindroth E, Badnell N R, Eklow N, Zong W, E Justiniano, Schuch R 2001 *Phys. Rev. A* **64** 043609

[3] Tokman M, Eklow N, Glans P, Lindroth E, Schuch R 2002 *Phys. Rev. A* **66** 012703

[4] Fogle M, Eklow N, Lindroth E, Mohamed T, Schuch R, Tokman M 2003 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **36** 2563

[5] Gu M F 2003 *Astrophys. J.* **582** 1241

[6] Gu M F 2003 *Astrophys. J.* **589** 1085

[7] Gu M F 2003 *Astrophys. J.* **590** 1131

[8] Wang J G, Zou Y, Chang T Q 1997 *Acta Phys. Sin.* **46** 11 (in Chinese) [王建国、邹 宇、常铁强 1997 物理学报 **46** 11]

[9] Shi W, Bartsch T, Bohme C, Brandau C, Hoffknecht A, Knopp H, Schippers S 2002 *Phys. Rev. A* **66** 22718.

[10] Andersen L H, Pan G Y, Schmidt H T 1992 *Phys. Rev. A* **45** 7868.

[11] Kilgus G, Habs D, Schwalm D, Wolf A 1992 *Phys. Rev. A* **46** 5730

[12] Wang J G, Tong X M, Li J M 1996 *Acta Phys. Sin.* **45** 1 (in Chinese) [王建国、全晓民、李家明 1996 物理学报 **45** 1]

[13] Wang J G, Takako Kato, Izumi Murakami 1999 *Phys. Rev. A* **60** 2104, 3750

Theoretical study of the dielectronic recombination process of Ni^{17+} ions^{*}

Li Chuan-Ying^{1)†} Liu Xiao-Ju²⁾ Meng Guang-Wei¹⁾ Wang Jian-Guo¹⁾

1) (*Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China*)

2) (*Institute of Plasma Physics, Chinese Academy of Sciences, Hefei 230031, China*)

(Received 28 September 2009; revised manuscript received 16 December 2009)

Abstract

We studied the dielectronic recombination processes of Ni^{17+} ($3s$) through the resonant doubly excited states $\text{Ni}^{16+}(3pnl, 3dnl)$ ($\Delta n = 0$) using the Flexible Atomic Code (FAC) which is based on a relativistic configuration interaction method. We obtained the cross sections and the rate coefficients and compared them with the experimental data and other theoretical results. The integrated cross sections through the resonant doubly excited states $3p_{3/2}10l$ and $3p_{1/2}11l$ are in a good agreement with the measurements within the experimental errors. In combination with quantum defect theory, we have found out that the radiative rates and the Auger rates of the resonant doubly excited states involving high Rydberg states obey a good scaling law, by means of which we obtained the integrated cross sections and the rate coefficients of all the resonances close to the thresholds. A comparison of the series $3pnl$ and $3dnl$ indicates that the rate coefficients of the former are larger when the temperature is below ~ 100 eV, and are smaller when the temperature is higher.

Keywords: dielectronic recombination, FAC code, quantum defect theory, rate coefficient

PACC: 3120A, 3120T, 3400, 3485D

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10974021).

[†] E-mail: li_chuanying@iapcm.ac.cn