

Au³⁴⁺ 离子双电子复合过程的理论研究

符彦彪 王旭东 苏茂根 董晨钟

Theoretical studies of dielectronic recombination for Au³⁴⁺ ions

Fu Yan-Biao Wang Xu-Dong Su Mao-Gen Dong Chen-Zhong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 65, 033401 (2016) DOI: 10.7498/aps.65.033401

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.033401>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2016/V65/I3>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

Fe²⁴⁺ 离子双电子复合以及和 H₂ 碰撞的共振转移与激发 X 射线发射过程的研究

Study of dielectronic recombination and resonance transfer and excitation with X-ray emission for Fe²⁴⁺+H₂ collision

物理学报.2014, 63(8): 083402 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.083402>

类锂离子双电子复合过程中辐射光子角分布和极化特性的理论研究

Theoretical study on angular distribution and polarization characteristics of X-ray emission following dielectronic recombination of lithium-like ions

物理学报.2013, 62(23): 233401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.233401>

Debye 等离子体中高能 H⁺+H 碰撞激发过程的研究

Research on proton-impact excitation process of hydrogen atom in Debye plasma

物理学报.2013, 62(22): 223401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.223401>

强磁场下 He²⁺+H(1s) 的碰撞激发过程的态选择截面研究

Investigation of state-selective cross-sections for excitation processes of the collisions of He²⁺+ H(1s) in strong magnetic fields

物理学报.2013, 62(7): 073401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.073401>

强磁场下 He²⁺+H(1s) 的碰撞电离微分截面及电离机理研究

The differential cross sections and mechanisms of ionization and in the collisions of He²⁺+H(1s) with strong magnetic fields

物理学报.2013, 62(3): 033401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.033401>

Au³⁴⁺ 离子双电子复合过程的理论研究*

符彦飙^{1)2)†} 王旭东¹⁾²⁾ 苏茂根¹⁾²⁾ 董晨钟¹⁾²⁾

1)(西北师范大学物理与电子工程学院, 甘肃省原子分子物理与功能材料重点实验室, 兰州 730070)

2)(西北师范大学与中科院近代物理研究所极端环境原子分子物理实验室, 兰州 730070)

(2015年9月8日收到; 2015年11月17日收到修改稿)

复杂结构离子的双电子复合 (DR) 速率系数在核聚变、极紫外光刻光源等应用研究的等离子体谱模拟中具有重要的价值. 利用基于全相对论组态相互作用理论的 FAC 程序包, 详细计算了 Au³⁴⁺ 离子的双电子复合速率系数. 研究分析了激发、辐射通道, 组态相互作用, 级联退激对 DR 速率系数的影响. 其中, 级联退激对 DR 速率系数的贡献必须予以考虑. 对双电子复合、辐射复合以及三体复合速率系数做了比较, 在温度大于 1 eV 范围, 双电子复合都大于辐射复合以及三体复合速率系数, 相应的 DR 过程对于等离子体离化态分布和能级布居以及光谱模拟都极为重要. 对基态和第一激发态的 DR 速率系数进行了参数拟合, 拟合值与计算值的偏差小于 1.73%. 研究结果将为复杂结构离子双电子复合过程的进一步研究提供参考.

关键词: 双电子复合, 速率系数, 级联退激效应, Au³⁴⁺ 离子**PACS:** 34.80.Lx, 34.50.Fa**DOI:** 10.7498/aps.65.033401

1 引言

双电子复合 (DR) 是实验室高温等离子体以及天体等离子体中影响等离子体电离平衡的一种十分重要的原子物理过程. 近年来, 由于应用研究的需要, 复杂结构离子的 DR 过程的研究引起了国内外研究者的关注^[1-8]. Badnell 等^[1]利用 AUTOSTRUCTURE 程序, 对基组态 4d¹⁰4f⁸ 结构 W²⁰⁺ 离子的 DR 过程进行了研究, 并与 Schippers 等^[2]的实验结果做了比较. Schippers 等^[3]对基组态为 4p⁶4d¹⁰4f¹³ 的 Au²⁰⁺ 离子进行了实验测量, Balance 等^[4]做了和该实验结果符合很好的理论计算. 对于基组态为 4d 壳层离子, Li 等^[5,6]研究了外壳层为 4d⁹, 4d¹⁰ 电子结构的 Gd¹⁹⁺, Gd²⁰⁺, W²⁹⁺ 离子的 DR 过程, 对 4d, 4p 电子激发的贡献进行了分析, 给出了总 DR 速率系数, 并与 Burgess-Merts 公式的结果进行了比较. Ballance 等^[7]利用组态平均扭曲波方法 (CADW) 研究了基组态 4p⁶4d³ 结构的 W³⁵⁺ 离子的 DR 过程; Badnell 等^[8]利用

CADW 方法对基组态 4p⁶4d⁹ 结构的 Sn⁴⁺-Sn¹³⁺ 离子的 DR 过程进行了研究. Fu 等^[9]利用基于全相对论组态相互作用理论的 Flexible Atomic Code (FAC)^[10] 程序对基组态 4s²4p⁶4d² 结构的 Sn¹²⁺ 离子的 DR 过程进行了研究, 比较了 4s, 4p, 4d 电子激发的贡献, 分析了组态相互作用 (CI) 对 DR 速率系数的影响. 对于涉及到开 4d, 4f 壳层结构复杂离子的 DR 过程, 计算中往往只考虑共振稳态跃迁 (RS) 和非共振稳态跃迁 (NRS)^[5-9], 辐射跃迁至自电离态且随后级联退激 (DAC) 对 DR 过程的影响往往予以忽略. Meng 等^[11]利用 FAC 程序计算了基组态为 3d⁹ 结构的 Au⁵²⁺ 离子 DR 过程, 分析得到 DAC 效应对于总 DR 速率系数在 1000 eV 处有 10% 的增大. 目前国际上对于基组态为 4dⁿ 结构的复杂离子 DR 过程中 DAC 效应的影响还没有做过细致分析.

本文利用 FAC 程序细致计算研究基组态为 4d⁹ 的 Au³⁴⁺ 离子的 DR 过程, 详细分析激发、辐射通道、CI 和 DAC 效应对复杂结构 Au³⁴⁺ 离子的 DR

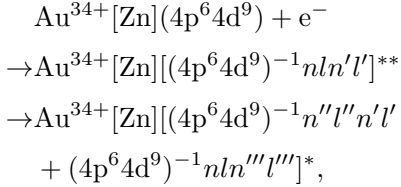
* 国家自然科学基金 (批准号: 11464043) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: fuyb@nwnu.edu.cn

速率系数的影响. 最后, 利用经验公式计算了辐射复合(RR)、三体复合(TBR)的速率系数, 并与DR速率系数进行了比较.

2 理论方法

Au^{34+} 离子由基态 i 俘获一个自由电子, 形成中间双激发态 j , 再辐射退激发到 f 的双电子复合过程可以表示为



其中, $**$ 表示中间双激发态 j , $*$ 表示辐射跃迁末态 f . 在独立共振近似下, 忽略共振结构的影响, 并根据细致平衡原理, 通过计算得到的相关辐射和俄歇跃迁速率, 可以得到由初态 i 经过双激发态 j 再到所有辐射跃迁末态 f 的DR速率系数:

$$\begin{aligned} \alpha_{ij}^{\text{DR}}(kT_e) &= \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m_e kT_e} \right)^{3/2} \frac{g_j}{2g_i} A_{ji}^a B_j \\ &\quad \times \exp\left(-\frac{E_{ji}}{kT_e}\right), \end{aligned} \quad (1)$$

其中, k 是玻尔兹曼常数, T_e 是电子温度, m_e 是电子质量, E_{ji} 是共振能量, g_i 和 g_j 分别是初态 i 和中间双激发态 j 的统计权重, A_{ji}^a 是由态 j 到 i 的自电离速率. B_j 是分支比, 其表达式为

$$B_j = \frac{\sum_f A_{jf}^r B_f}{\sum_f A_{jf}^r + \sum_{i'} A_{ji'}^a}, \quad (2)$$

这里 A_{jf}^r 是双激发态 j 到末态 f 的辐射跃迁速率, $A_{ji'}^a$ 是双激发态到俄歇末态 i' 的俄歇速率, B_f 是辐射跃迁末态 f 的分支比. 本文的计算中, $n' < 24$ 的DR速率系数通过从头计算得到, $n' = 24-1000$ 的DR速率系数通过俄歇跃迁符合 $A_{ji'}^a(n') = (n'/n_s)^{-3} A_{ji'}^a(n_s)$ 、内壳层电子跃迁符合 $A_{j'f''}^{\text{low}}(n') = A_{j'f''}^{\text{low}}(n_s)$ 、外壳层电子跃迁符合 $A_{j'f''}^{\text{high}}(n') = (n'/n_s)^{-3} A_{j'f''}^{\text{high}}(n_s)$ 标度率外推得到. 外推公式为

$$\begin{aligned} & \alpha^{\text{DR}}(n') \\ &= \sum_j \left(\frac{n'}{n_s} \right)^{-3} \alpha_j^{\text{DR}}(n_s) \frac{\sum_{f'} A_{jf'}^{\text{low}} + \sum_f A_{jf}^{\text{high}} + \sum_{i'} A_{ji'}^a}{\sum_{f'} A_{jf'}^{\text{low}} B_{f'} + \sum_f A_{jf}^{\text{high}} B_f}. \end{aligned}$$

$$\frac{\sum_{f'} A_{jf'}^{\text{low}} B_{f'} + \left(\frac{n'}{n_s} \right)^{-3} \sum_f A_{jf}^{\text{high}} B_f}{\sum_{f'} A_{jf'}^{\text{low}} + \left(\frac{n'}{n_s} \right)^{-3} \sum_f A_{jf}^{\text{high}} + \left(\frac{n'}{n_s} \right)^{-3} \sum_{i'} A_{ji'}^a}, \quad (3)$$

其中, $A_{jf'}^{\text{low}}$ 和 A_{jf}^{high} 分别是能级 j 的内壳层电子和外壳层里德堡电子 n_s 的辐射跃迁速率. 此外推公式和 Meng 等^[11] 的外推公式实际上相同, 因为具体的数据处理方式的差异, 导致表述形式不同.

RR 和 TBR 过程作为另外两种重要的电子-离子非弹性碰撞现象, 其速率系数分别由如下的经验公式简单估算得到^[12]:

$$\begin{aligned} \alpha^{\text{RR}} &= 5.2 \times 10^{-14} (V_{\text{ion}}/T_e)^{1/2} \\ &\quad Z[0.429 + 0.5 \ln(V_{\text{ion}}/T_e) \\ &\quad + 0.469(T_e/V_{\text{ion}})^{1/2}], \end{aligned} \quad (4)$$

$$n_e \alpha^{\text{TBR}} = \frac{2.97 \times 10^{-27} n_e n_Z}{[T_e V_{\text{ion}}^2 (4.88 + T_e/V_{\text{ion}})]}, \quad (5)$$

其中, V_{ion} 是电离势, Z 是电荷态, n_Z 是对应离子态离子的最外层电子数, n_e 是电子密度, 在本文的计算中取值 10^{20} cm^{-3} .

3 结果与讨论

基组态为 4d 开壳层离子的 DR 过程比较复杂, 精细计算需要耗费大量的资源. 为在有限的资源下得到较为理想的结果, 需要分析各种物理因素及通道对 DR 速率系数的贡献. Au^{34+} 离子基组态有 2 个能级, 其布居随着等离子体的温度、密度而发生变化. 在等离子体密度不是很高的条件下, 离子主要居于基态. 下面以基态作为初态进行各种因素对 DR 速率系数影响的分析. 最后的总 DR 速率系数的拟合中分别给出了基态和第一激发态作为 DR 过程初态的 DR 速率系数计算值的拟合结果.

3.1 激发和辐射通道

图 1 展示了 $j = 4d^8 n l 10 l'$, $n = 4, 5, 6$ 的 DR 速率系数. 由图可见, $n = 4$ 的 DR 速率系数最大, $n = 6$ 的最小. $n = 5$ 的 DR 速率系数峰值为 $n = 4$ 的峰值的 5%, 而 $n = 6$ 的 DR 速率系数峰值仅为 $n = 4$ 的峰值的 1%. 随着 n 的增大, DR 速率系数急剧减小. 并且对于内壳层 4p 电子激发的 DR 速率系数, $n = 6$ 的贡献会进一步降低. 在我们的计算中, $n > 6$ 的 DR 速率系数予以忽略.

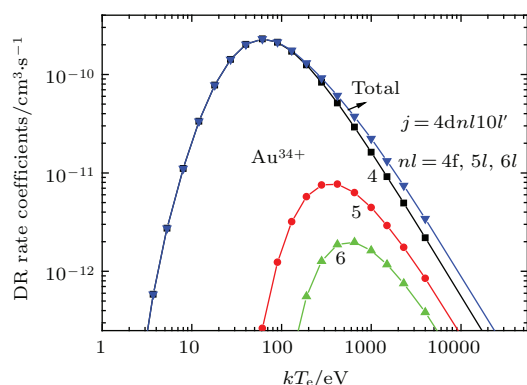


图1 (网刊彩色) 4d电子激发的DR的速率系数, $j = 4d^8nl10l'$, $n = 4, 5, 6$

Fig. 1. (color online) DR rate coefficients for 4d excitation: $j = 4d^8nl10l'$; $n = 4, 5, 6$.

图2展示了 $j = 4d^84f10f$, 辐射跃迁末态 $f = 4d^910f, 4d^94f, 4d^84f5l'', 4d^84f6l'', 4d^84f7l'', 4d^84f8l''$ 的DR速率系数. 曲线1为辐射跃迁至4l壳层, 曲线2为辐射跃迁至4l, 5l壳层的DR速率系数. 两者之间在峰值处有27%的差异. 曲线3为辐射跃迁至4l, 5l, 6l的DR速率系数, 和曲线2有7%的差异. 曲线4为辐射跃迁至4l, 5l, 6l, 7l的DR速率系数, 和曲线3有3%的差异. 曲线5包括了辐射跃迁至8l的贡献, 可以看到基本上和曲线4重叠, 峰位处有1%的差异. 考虑到不同的中间双激发态的辐射跃迁差异, 我们的计算中忽略辐射跃迁至7l以上壳层的贡献.

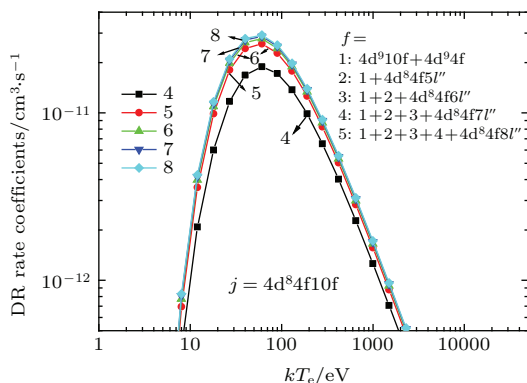


图2 (网刊彩色) 辐射跃迁至不同壳层的DR速率系数
Fig. 2. (color online) Influence of radiative channels for DR rate coefficients.

3.2 级联退激的影响

图3展示了三种辐射跃迁末态类型的DR速率系数. 辐射跃迁根据前面的分析, 考虑跃迁至4l—7l壳层. 图中, RS+NRS表示中间双激发态的辐射跃迁考虑了RS和NRS跃迁; DAC表示在考虑NRS+RS的基础上, 考虑了辐射跃迁至可

自电离态, 进一步考虑级联退激的辐射和俄歇衰变; NDAC表示考虑和DAC相同的第一步辐射跃迁, 但不考虑随后的级联退激. 图3(a)为 $j = 4d^84f10f$. 可以看到各种类型的辐射跃迁的DR速率系数相等, 原因是其辐射末态都处于电离限以下. 图4展示了4d, 4p电子激发的电离限附近的能级, 可以看到 $j = 4d^84f7l$ 的能级都在电离限以下, 相应的只有RS+NRS跃迁. 对于图3(b), $j = 4d^85l10f$, 相应为 $\Delta n = 1$ 的DR过程. 其RS+NRS和DAC在峰值处有33%的差异, 并且随着温度的增加, 差异逐渐增大, 最后保持在54.5%的差异, 这说明DAC效应非常强. DAC贡献随着温度变化的原因在于: 有DAC效应的中间双激发态, 共振能相对较大, 其DR速率系数的峰值越偏

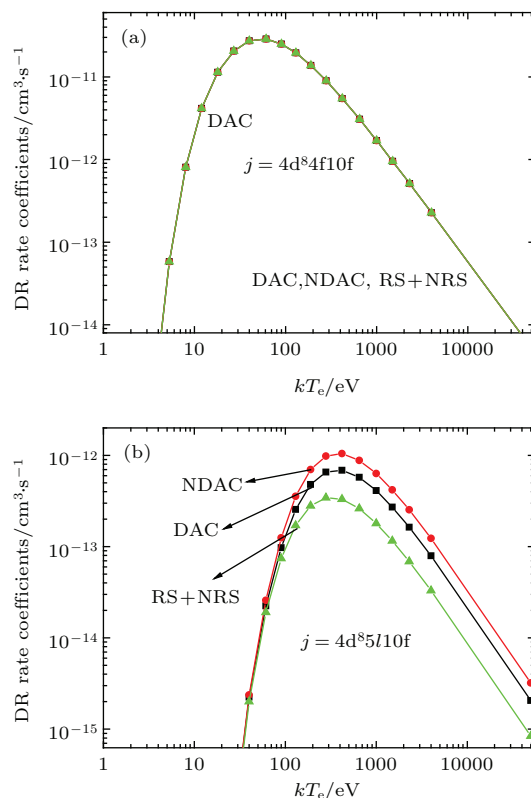


图3 (网刊彩色) 三种辐射跃迁末态类型的DR速率系数. RS+NRS表示中间双激发态的辐射跃迁考虑了RS和NRS; DAC表示在考虑NRS+RS的基础上, 进一步考虑了DAC; NDAC表示考虑和DAC相同的第一步辐射跃迁, 但不考虑随后的级联退激; (a) $j = 4d^84f10f$, (b) $j = 4d^85l10f$

Fig. 3. (color online) DR rate coefficients for three kinds of radiative transitions. The tag RS+NRS stands for radiative transition including RS and NRS transitions, DAC stands for RS+NRS and DAC transitions. The tag NDAC stands for radiative transition including all kinds of transitions except radiative cascades. (a) $j = 4d^84f10f$; (b) $j = 4d^85l10f$.

向高温. 根据(1)式, 随着共振能 E_{ji} 的增大, 在高温区域 $\exp(-E_{ji}/kT_e)$ 导致 DR 速率系数曲线的下降趋势相对平缓. 导致随着温度的增加, 共振能大的能级的 DR 速率系数的贡献比例逐渐增大. 最终导致随着温度的增加, DAC 效应的影响逐渐增大. 由图 4 看到 $4d^8 5d 6l$ 的能级都处于电离限以上, 相应的辐射跃迁到这些能级上的级联退激对 DR 速率系数都有影响. 在图 1 中, 在高温区域 $5l$ 的贡献是

$4l$ 的 12%. 相应的由于 $5l$ 的 DAC 跃迁会对总 DR 速率系数有约 5% 左右的影响. NDAC 和 DAC 在峰值处有 51% 的差异, 说明中间态的第一步辐射跃迁末态的 Auger 概率比较大, 所以计算中需要考虑第一步辐射跃迁末态分支比的影响. 由图 4 看到, $4p$ 电子激发的双激发态相对于 $4d$ 电子激发, 有更多的双激发态处于电离限以上, 其 DAC 效应的影响会更大.

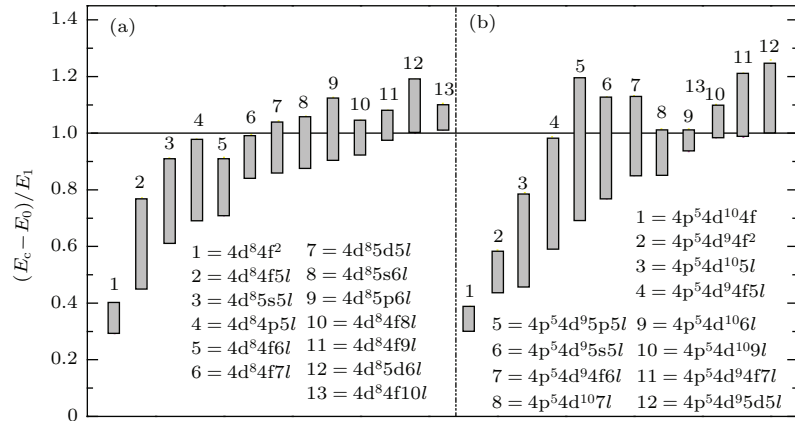


图 4 Au^{34+} 离子 $4d$, $4p$ 电子激发接近电离限附近的能级

Fig. 4. Energy levels of doubly excited configurations with $4d$ and $4p$ excitation near the first ionization limit.

3.3 组态相互作用的影响

图 5 展示了 $j = 4d^8 4f 10l$ 考虑 CI 和不考虑 CI (NCI 表示) 的 DR 速率系数. 对于初态、中间双激发态、辐射跃迁末态, 统一考虑 $4p^{-1} 4f^{+1}$ 作为 CI 组态. 由图 4(b) 可以看到, 对于 $j = (4d^8 4f 10g, 4d^8 4f 10h)$, CI 效应使 DR 速率系数略微减小. 对于 $j = (4d^8 4f 10i, 4d^8 4f 10k)$ CI 效应使其 DR 速率系数

略微增大. 减小和增大最终相互抵消, 导致求和后的 DR 速率系数几乎没有影响, 如图 4(a) 所示. 对于其他的中间双激发态也是类似的结果, 所以在总 DR 速率系数的计算中不考虑 CI 效应. 但是在温度小于 10 eV 以下的低温区域, DR 速率系数对于共振能比较敏感. 而 FAC 程序在 10 eV 以下区域的共振能计算值不够准确, 由此会带来 DR 速率系数的计算偏差.

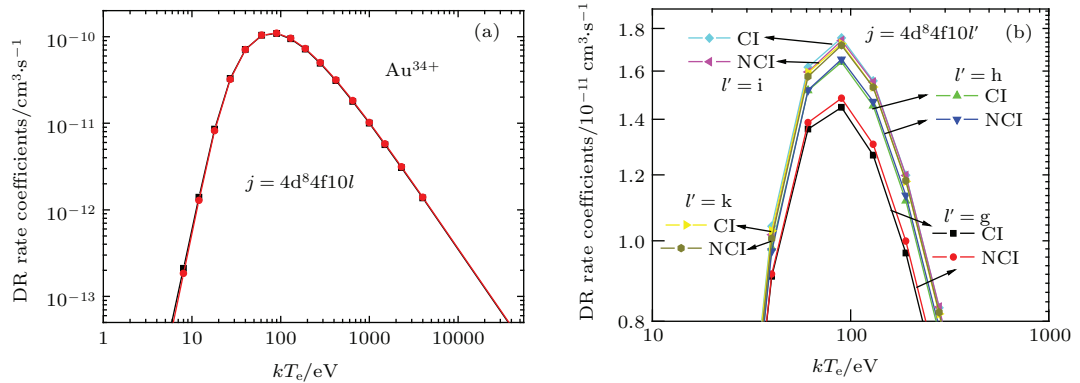


图 5 (网刊彩色) CI 效应对 DR 速率系数的影响. NCI 表示不考虑 CI 效应

Fig. 5. (color online) Influence of CI effect for DR rate coefficients. The tag NCI stand for without CI.

3.4 总DR速率系数

图6展示了Au³⁴⁺离子DR, RR, TBR速率系数. 曲线DR-DAC-4d和DR-DAC-4p分别为4d和4p电子激发的考虑了DAC效应的DR速率系数. 计算中双激发态 $j = (4p^6 4d^9)^{-1} nl n'l' (n = 4-6, n' = 4-23)$. 由图6可以看到, 4d电子激发的贡献大于4p电子激发. 在全温度范围内, 4p电子激发的DR速率系数是4d电子激发DR速率系数的24%—46%, 所以内壳层电子激发的贡献是非常重要的. 由曲线DR-DAC和DR-RS+NRS的比较显示, 在温度 $\kappa T_e < 20$ eV区域, DAC效应对DR速率系数没有影响, 在130 eV处DAC增大了DR速率系数1.15%. 之后随着温度的增高, 影响逐渐增大. 在1000 eV处, 增大总DR速率系数9.8%, 在50000 eV处增大12.0%. 而如果考虑高里德堡电子辐射跃迁而不考虑级联退激(曲线DR-NDAC), 在1000 eV处对DR速率系数有20.1%的增大, 并且随着温度的增大, 影响逐渐增大, 在50000 eV处增大到27.1%. 综合以上分析, 可以看到DAC效应对DR速率系数的影响比较大. 曲线DR-DAC($n' = 24-1000$)为通过 $n' = 23$ 的数据按照(3)式外推得到的 $n' = 24-1000$ 的DR速率系数. DR-DAC-total ($n' = 4-1000$)为总DR速率系数. 外推部分在190 eV处对于总DR速率系数的贡献为12.8%, 50000 eV处为17.7%. 而总DR速率系数在全温度范围都大于RR和TBR速率系数. 可见

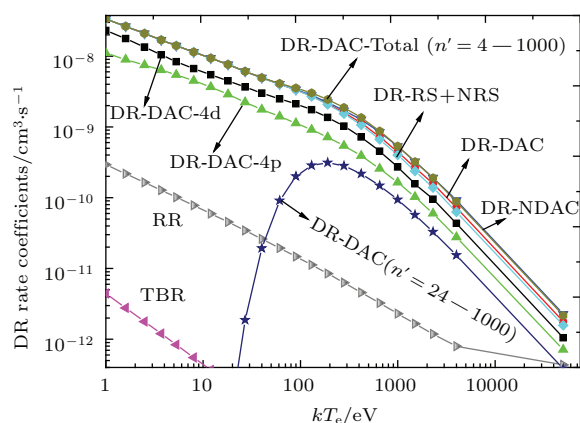


图6 (网刊彩色) Au³⁴⁺离子DR, RR, TBR速率系数, 曲线DR-DAC-4d和DR-DAC-4p分别为4d和4p电子激发的考虑了DAC效应的DR速率系数

Fig. 6. (color online) DR, RR and TBR rate coefficients. Curves DR-DAC-4d and DR-DAC-4p are DR rate coefficients for 4d and 4p excitation including DAC effect respectively.

DR过程对于等离子体离化态分布和能级布居以及光谱模拟极为重要.

4 总 结

本文详细研究了Au³⁴⁺离子的DR过程. 以4d电子作为激发电子, 基态作为初态, 考察了激发、辐射通道、CI效应、DAC效应对DR速率系数的影响. 其中, 4d电子激发至7l及更高壳层的贡献可以忽略, 辐射跃迁至8l及更高壳层的贡献可以忽略. 在中高温区域, CI效应对单个能级的DR速率系数有明显影响, 对于总DR速率系数由于增大和减小的相互抵消, 在总DR速率系数的计算中可以忽略CI效应. 在温度小于10 eV以下的区域, DR速率系数对于共振能比较敏感. 而FAC程序在10 eV以下区域的共振能计算值不够准确, 由此会带来DR速率系数的计算偏差. 在130 eV处, DAC效应增大了DR速率系数1.15%. 之后随着温度的增高, 影响逐渐增大. 在1000 eV处, 增大总DR速率系数9.8%, 在50000 eV处增大12.0%. 随着原子序数的减小, 等电子系列离子会有更多的双激发态能级处于电离限以上, 相应的DAC的影响会更大. 而如果考虑高里德堡电子辐射跃迁而不考虑级联退激, 在1000 eV处对DR速率系数有20.1%的增大, 并且随着温度的增大, 影响逐渐增大, 在50000 eV处增大到27.1%. 说明级联退激的影响是必须考虑的. 对DR, RR, TBR速率系数做了比较, 在全温度范围DR都大于RR和TBR速率系数, 相应的DR过程对于等离子体离化态分布和能级布居以及光谱模拟都极为重要. 为方便应用, 表1中分别对基态和第一激发态作为初态的总DR速率系数进行了参数拟合, 拟合公式为

$$\alpha^{\text{DR}}(\kappa T_e) = (\kappa T_e)^{-3/2} \sum_{i=1}^7 c_i e^{-E_i/\kappa T_e}. \quad (6)$$

对于基态作为初组态的DR速率系数拟合结果, 在温度为1500 eV处, 拟合偏差为1.54%, 2300 eV处为1.72%. 其他数据点处的拟合偏差都小于0.7%. 对于第一激发态作为初态的DR速率系数拟合结果, 在温度为2300 eV处, 拟合偏差为1.73%, 在5 eV时拟合偏差小于1%. 其他数据点处的拟合偏差都小于0.7%.

表1 Au³⁴⁺ 离子 DR 速率系数参数拟合
Table 1. Fitting DR rate coefficients for Au³⁴⁺ ions.

i	基态		第一激发态	
	c_i	E_i	c_i	E_i
1	7.478×10^{-7}	19.943	8.400×10^{-8}	0.889
2	2.445×10^{-7}	5.836	2.594×10^{-7}	6.126
3	1.509×10^{-6}	54.218	1.399×10^{-6}	56.821
4	1.108×10^{-5}	480.947	7.984×10^{-6}	178.166
5	8.425×10^{-6}	173.179	5.861×10^{-7}	20.101
6	8.631×10^{-8}	0.974	1.091×10^{-5}	491.735
7	2.381×10^{-6}	1350.000	1.854×10^{-6}	2590.000

参考文献

- [1] Badnell N R, Ballance C P, Griffin D C, *et al.* 2012 *Phys. Rev. A* **85** 052716
- [2] Schippers S, Bernhardt D, Muller A, Krantz C, Grieser M, Repnow R, Wolf A, Lestinsky M, Hahn M, Novotn'y O, Savin D W 2011 *Phys. Rev. A* **83** 012711
- [3] Schippers S, Bernhardt D, Grieser M, Hahn M, Krantz C, Lestinsky M, Novotn'y O, Repnow R, Savin D W, Wolf A, Muller A 2011 *Phys. Scr.* **144** 014039
- [4] Ballance C P, Griffin D C, Loch S D, Badnell N R 2012 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **45** 045001
- [5] Li B W, O' Sullivan G, Fu Y B, Dong C Z 2012 *Phys. Rev. A* **85** 052706
- [6] Li B W, O' Sullivan G, Fu Y B, Dong C Z 2012 *Phys. Rev. A* **85** 012712
- [7] Ballance C P, Loch S D, Pindzola M S, Griffin D C 2010 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43** 205201
- [8] Badnell N R, Foster A, Griffin D C, Kilbane D, O' Mul-lane M, Summers H P 2011 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **44** 135201
- [9] Fu Y B, Dong C Z, Su M G, *et al.* 2011 *Phys. Rev. A* **83** 062708
- [10] Gu M F 2008 *Can. J. Phys.* **86** 675
- [11] Meng F C, Chen C Y, Shi X H, Wang Y S, Zou Y M, Gu M F 2007 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **40** 4269
- [12] Colombant D, Tonon G F 1973 *J. Appl. Phys.* **44** 3524

Theoretical studies of dielectronic recombination for Au^{34+} ions^{*}

Fu Yan-Biao^{1)2)†} Wang Xu-Dong¹⁾²⁾ Su Mao-Gen¹⁾²⁾ Dong Chen-Zhong¹⁾²⁾

1) (Key Laboratory of Atomic and Molecular Physics and Functional Materials of Gansu Province, College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China)

2) (Joint Laboratory of Atomic and Molecular Physics, Northwest Normal University and Institute of Modern Physics of Chinese Academy of Sciences, Lanzhou 730070, China)

(Received 8 September 2015; revised manuscript received 17 November 2015)

Abstract

Dielectronic recombination (DR) rate coefficients of complex structure ions are very important for spectral simulation in some application researches, such as nuclear fusion and extreme ultraviolet lithography. Theoretical calculations are made for dielectronic recombination rate coefficients of Au^{34+} ions by using a flexible relativistic atomic code. Influences of excitation and radiation channels, configuration interactions, and decays to autoionizing levels possibly followed by radiative cascades (DAC) on DR rate coefficient are analyzed. The contribution of DAC is evident. The total DR rate coefficient is greater than either the radiation recombination coefficient or three-body recombination coefficient for electron temperature greater than 1 eV. In order to facilitate simple applications, the total DR rate coefficients for the ground state and the first excited state are fitted to an empirical formula. These results should be useful for further analyzing the DR process of complex structures ions.

Keywords: dielectronic recombination, rate coefficient, DAC effect, Au^{34+} ions

PACS: 34.80.Lx, 34.50.Fa

DOI: 10.7498/aps.65.033401

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11464043).

[†] Corresponding author. E-mail: fuyb@nwnu.edu.cn