

高离化金离子态-态双电子复合速率系数*

陈 波¹⁾ 朱正和²⁾

¹⁾中国工程物理研究院核物理与化学研究所, 绵阳 621900)

²⁾四川大学原子分子物理研究所, 成都 610065)

(2002 年 6 月 7 日收到, 2002 年 9 月 6 日收到修改稿)

研究了类铍 Au⁷⁵⁺ 离子三类态-态双电子复合过程, 基于多组态准相对论自洽场方法和扭曲波方法, 计算了该离子在电子温度 0.6—10.0keV 范围内的态-态双电子复合速率系数, 并讨论了它们随电子温度、复合类型和上下能态的变化.

关键词: Au⁷⁵⁺ 离子, 态-态双电子复合

PACC: 3480D, 3280D

1. 引 言

双电子复合是一种重要的原子动力学过程. 在高温等离子体中, 它对建立和维持等离子体的电离平衡和离子激发态分布起着重要作用, 对等离子体状态及光谱特性也有明显影响^[1-3]. 对于双电子复合过程的研究, 在天体物理、磁约束和惯性约束聚变、x 射线激光以及等离子体模拟和诊断等领域都有重要的实际应用意义. 多年来, 双电子复合一直是人们感兴趣的研究课题, 许多学者进行了这方面的理论和实验研究^[4-8]. 但从目前情况看, 大部分工作只给出了总的双电子复合速率系数, 而对于态-态 (state-to-state) 双电子复合速率系数, 无论是理论计算还是实验测量, 其数据都比较缺乏, 特别是高荷电重离子更是如此. 在进行诸如能级占据数密度的动力学研究和 x 射线激光粒子数反转机理研究时, 需要了解态-态之间细致的双电子复合过程, 并需要态-态之间细致的双电子复合速率系数的数据. 这方面的研究工作有待进一步开展.

本文从理论上研究了类铍离子 Au⁷⁵⁺ 的态-态双电子复合过程, 采用多组态准相对论 Hartree-Fock 方法和扭曲波方法计算了这种离子在不同电子温度下的态-态双电子复合速率系数, 并总结了它们随电子温度、复合类型、上下能态以及旁观电子(或跃迁电

子)量子数变化的规律.

2. 理论方法

对双电子复合过程的处理方法, 在文献 [9] 中有较详细的叙述, 现简述如下. 由 A^{q+} 离子的 m 态俘获一个自由电子, 形成 A^{(q-1)+} 离子的双激发自电离态 j, 再辐射复合为非自电离 k 态的双电子复合速率系数可以表示为

$$\alpha_{mjk}^{DR}(T_e) = \frac{4\pi^{3/2} a_0^3}{T_e^{3/2}} \frac{g_j}{g_m} \exp(-E_{jm}/T_e) \times \frac{A_{jm}^a A_{jk}^r}{\sum_{m'} A_{jm'}^a + \sum_{k'} A_{jk'}^r}, \quad (1)$$

A^{(q-1)+} 离子由 j 态到 k 态的态-态双电子复合速率系数应是对离子 A^{q+} 所有初始能态 m 的加权平均, 即

$$\alpha_{jk}^{DR}(T_e) = \frac{1}{n_N} \sum_m n_N \alpha_{mjk}^{DR}(T_e). \quad (2)$$

考虑到离子基组态的能级范围比产生该离子所需的温度小得多, Boltzmann 因子 $e^{-E_m/T_e} \sim 1$, 于是有^[10]

$$\frac{n_N^m}{n_N} = \frac{g_m e^{-E_m/T_e}}{\sum_m g_m e^{-E_m/T_e}} \approx \frac{g_m}{\sum_m g_m} = \frac{g_m}{G_m}, \quad (3)$$

从而可得

$$\alpha_{jk}^{DR}(T_e) = \frac{4\pi^{3/2} a_0^3}{T_e^{3/2}} \frac{g_j}{G_m} \exp(-E_s/T_e)$$

* 国家高技术研究发展计划(批准号 863-416-3-4.2)资助的课题.

$$\times \frac{\sum_m A_{jm}^a A_{jk}^r}{\sum_{m'} A_{jm'}^a + \sum_{k'} A_{jk'}^r}, \quad (4)$$

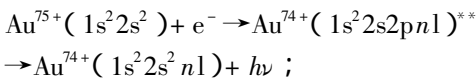
式中 T_e 为电子温度(以 eV 为单位), g_j 为 j 态的统计权重, $G_m = \sum_m g_m$ 是 A^{q+} 离子基组态总的统计权重, E_s 是 $E_{jm} = E_j - E_m$ 对 m 的平均值, a_0 为 Bohr 半径. A_{jm}^a 和 A_{jk}^r 分别是从 j 态到 m 态的 Auger 衰变率和从 j 态到 k 态的自发辐射衰变率. 求和指标 m 遍及 A^{q+} 离子基组态的所有能态; 求和指标 m' 遍及离子 $A^{(q-1)+}$ 低于 j 的所有能级; 求和 k' 指标遍及离子 $A^{(q-1)+}$ 低于电离限 m_0 的全部能级.

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-Relativistic (HFR) 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. 角动量耦合采用 jj 耦合方式, 以充分考虑高 Z 高荷电离子的旋-轨耦合作用.

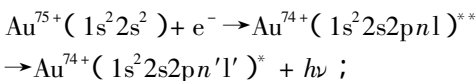
3. 计算结果与讨论

本文研究了下面三种类型类铍金离子的双电子复合过程:

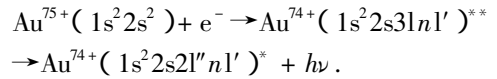
1) $\Delta n_c = 0$ (n_c 为离子实活动电子的主量子数) 时, 内壳层电子衰落 (A 类)



2) $\Delta n_c = 0$ 时, 外壳层电子衰落 (B 类)



3) $\Delta n_c = 1$ 时, 内壳层电子衰落 (C 类)



上面 A, B 两类复合具有相同的中间双激发态, 并且在电子与离子碰撞而被俘获时, 离子实中活动电子的主量子数不变, 即 $\Delta n_c = 0$. 对于 C 类复合, 离子实中活动电子的主量子数要发生改变 $\Delta n_c = 1$. 另外, 本文的原子态符号采用 Grant 的方法^[11], 即 $p = p_{3/2}$, $\bar{p} = p_{1/2}$, $d = d_{3/2}$, $\bar{d} = d_{1/2}$ 等等. 例如 $(1s^2 [2s 2p] 11\bar{d})_{3/2} = (1s^2 [2s 2p_{3/2}] 11d_{3/2})_{3/2}$.

在表 1 中给出了类铍 Au^{75+} 离子 A 类态-态双电子复合两组速率系数 α_{jk}^{DR} 随旁观电子主量子数 n 及电子温度 T_e 的变化. 这两组跃迁旁观电子角量子数 $l = l(p \text{ 电子})$, 有相同的下能态 $(1s^2 2s^2 n p)_{3/2}$, 但上能态不同, 它们的 α_{jk}^{DR} 相差约一个量级, 说明此双电子复合过程中上能态对 α_{jk}^{DR} 影响较大. 由于两组双电子复合过程的上态能量相差不大, 如 $(1s^2 [2s 2p] 11p)_{3/2} = 23684.0608 \text{ km}^{-1}$, $(1s^2 [2s 2p] 11\bar{p})_{1/2} = 23684.1856 \text{ km}^{-1}$, 所以, α_{jk}^{DR} 的差别主要是由不同 A_{jm}^a 引起的. 在表 1 的第一组跃迁中, 对同一电子温度 α_{jk}^{DR} 随着 n 的增大而减小, 由此可见, 电子复合到 n 越大的 Rydberg 态, 其对双电子复合的贡献越小. 由表 1 的第二组跃迁数据可知, 对于不同的 n 值, α_{jk}^{DR} 相差很小, 即对 n 的变化不敏感, 说明在此双电子复合过程中, 不同能量 (n 不同) 的中间自电离态对总双电子复合速率系数的贡献相当. 另外, Au^{75+} 离子 A 类态-态双电子复合的共振温度约为 1.2 keV, 比类铍 Ti^{18+} 离子同类态-态双电子复合的共振温度高得多^[12].

表 1 Au^{75+} 离子 A 类态-态双电子复合速率系数 (p 旁观电子)

| T_e/keV | $\alpha_{jk}^{\text{DR}}/\text{cm}^3 \text{ s}^{-1}$ | | | | | |
|------------------|---|-----------|-----------|---|-----------|--|
| | $(1s^2 [2s 2p] 1np)_{3/2} \rightarrow (1s^2 2s^2 np)_{3/2}$ | | | $(1s^2 [2s 2p] 1n\bar{p})_{1/2} \rightarrow (1s^2 2s^2 n\bar{p})_{1/2}$ | | |
| | $n = 8$ | $n = 11$ | $n = 14$ | $n = 8$ | $n = 11$ | |
| 0.6 | 9.6(-16) | 8.9(-16) | 7.5(-16) | 1.7(-14) | 1.9(-14) | |
| 0.8 | 1.4(-15) | 1.3(-15) | 9.4(-16) | 2.7(-14) | 2.8(-14) | |
| 1.0 | 1.7(-15) | 1.5(-15) | 9.9(-16) | 3.2(-14) | 3.3(-14) | |
| 1.2 | 1.8(-15) | 1.6(-15) | 9.8(-16) | 3.4(-14) | 3.5(-14) | |
| 1.6 | 1.8(-15) | 1.5(-15) | 8.8(-16) | 3.4(-14) | 3.4(-14) | |
| 2.0 | 1.7(-15) | 1.4(-15) | 7.6(-16) | 3.2(-14) | 3.1(-14) | |
| 3.0 | 1.3(-15) | 1.0(-15) | 5.4(-16) | 2.4(-14) | 2.3(-14) | |
| 4.0 | 1.0(-15) | 8.2(-16) | 3.9(-16) | 1.8(-14) | 1.8(-14) | |
| 5.0 | 8.0(-16) | 6.5(-16) | 3.0(-16) | 1.5(-14) | 1.4(-14) | |
| 6.0 | 6.5(-16) | 5.2(-16) | 2.4(-16) | 1.2(-14) | 1.1(-14) | |
| 8.0 | 4.6(-16) | 3.7(-16) | 1.7(-16) | 8.6(-15) | 8.1(-15) | |
| 10.0 | 3.5(-16) | 2.8(-16) | 1.2(-16) | 6.4(-15) | 6.1(-15) | |

注: 表中括号中的数值表示 10 的幂指数.

表 2 显示了旁观电子为 d 电子时 A 类态-态双电子复合两组跃迁对应的速率系数 α_{jk}^{DR} 随 n 及 T_e 的变化. 对 $(1s^2[2s2p]n\bar{d})_{3/2} \rightarrow (1s^22s^2n\bar{d})_{3/2}$ 跃迁, 在低温段, 不同 n 值的 α_{jk}^{DR} 非常接近, 但在高温段, 能量较低 (n 较小) 的自电离态的 α_{jk}^{DR} 明显比能量高 (n

大) 的 α_{jk}^{DR} 值大. 比较表 2 中第一组和第二组跃迁数据可知, 这两组双电子复合过程对应着相同的下态, 而两组的 α_{jk}^{DR} 值相差不大, 说明上态的差异对 α_{jk}^{DR} 的影响较小.

本文还计算了 Au^{75+} 离子部分 B 类态-态双电

表 2 Au^{75+} 离子 A 类态-态双电子复合速率系数 (d 旁观电子)

| T_e/keV | $\alpha_{jk}^{DR}/\text{cm}^3\text{s}^{-1}$ | | | | | |
|------------------|---|-----------|-----------|---|-----------|-----------|
| | $(1s^2[2s2p]n\bar{d})_{3/2} \rightarrow (1s^22s^2n\bar{d})_{3/2}$ | | | $(1s^2[2s2p]n\bar{d})_{3/2} \rightarrow (1s^22s^2n\bar{d})_{5/2}$ | | |
| | $n=8$ | $n=11$ | $n=14$ | $n=8$ | $n=11$ | $n=14$ |
| 0.6 | 1.77(-15) | 1.73(-15) | 1.26(-15) | 1.13(-15) | 1.16(-15) | 1.00(-15) |
| 0.8 | 2.54(-15) | 2.16(-15) | 1.46(-15) | 1.73(-15) | 1.74(-15) | 1.47(-15) |
| 1.0 | 2.91(-15) | 2.29(-15) | 1.47(-15) | 2.05(-15) | 2.05(-15) | 1.72(-15) |
| 1.2 | 3.04(-15) | 2.27(-15) | 1.41(-15) | 2.20(-15) | 2.18(-15) | 1.81(-15) |
| 1.6 | 2.93(-15) | 2.04(-15) | 1.23(-15) | 2.19(-15) | 2.15(-15) | 1.77(-15) |
| 2.0 | 2.65(-15) | 1.78(-15) | 1.04(-15) | 2.02(-15) | 1.98(-15) | 1.61(-15) |
| 3.0 | 1.98(-15) | 1.26(-15) | 7.16(-16) | 1.55(-15) | 1.50(-15) | 1.22(-15) |
| 4.0 | 1.51(-15) | 9.33(-16) | 5.22(-16) | 1.19(-15) | 1.16(-15) | 9.30(-16) |
| 5.0 | 1.18(-15) | 7.22(-16) | 4.01(-16) | 9.45(-16) | 9.14(-16) | 7.34(-16) |
| 6.0 | 9.60(-16) | 5.79(-16) | 3.19(-16) | 7.70(-16) | 7.43(-16) | 5.96(-16) |
| 8.0 | 6.74(-16) | 4.01(-16) | 2.20(-16) | 5.45(-16) | 5.25(-16) | 4.20(-16) |
| 10.0 | 5.06(-16) | 2.99(-16) | 1.63(-16) | 4.10(-16) | 3.95(-16) | 3.15(-16) |

注: 表中括号中的数值表示 10 的幂指数.

子复合速率系数. 结果表明, B 类复合主要发生在跃迁电子主量子数的变化 $\Delta n \leq 2$ 的情况下. 随着中间自电离态 $1s^22s^2pn\bar{l}$ 跃迁电子主量子数 n 的增大, B 类双电子复合过程迅速减弱. 对于 $n \geq 10$ 的自电离态的 B 类双电子复合过程可以忽略.

图 1 和图 2 中给出了几组 Au^{75+} 离子 C 类态-态双电子复合速率系数 α_{jk}^{DR} 随电子温度 T_e 变化的曲线. 比较这两图可以看到, 通过 $3s \rightarrow 2p$ 辐射衰落而

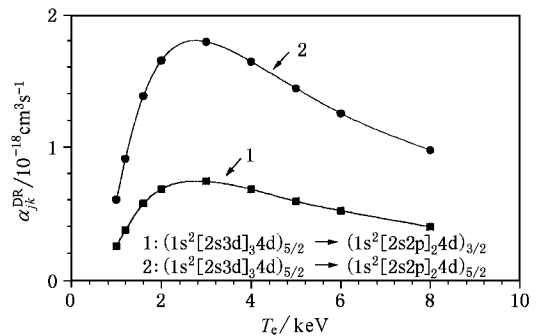


图 2 Au^{75+} 离子 C 类态-态双电子复合速率系数 α_{jk}^{DR} 随电子温度 T_e 的变化

复合的 C 类态-态双电子复合速率系数 α_{jk}^{DR} 比通过 $3d \rightarrow 2p$ 复合的 α_{jk}^{DR} 值约大三个量级, 前者是更主要的双电子复合过程. 这是由于前一过程中间自电离态的自电离概率比后一过程的自电离概率大得多, 例如, 对 $(1s^2[2s3s]4\bar{d})_{3/2}$ 自电离态, 其自电离概率为 $2.09 \times 10^{14} \text{ s}^{-1}$, 而 $(1s^2[2s3d]_3 4\bar{d})_{3/2}$ 态的自电离概率为 $2.53 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$. 另外, 从图 2 还可看到, 仅由于跃

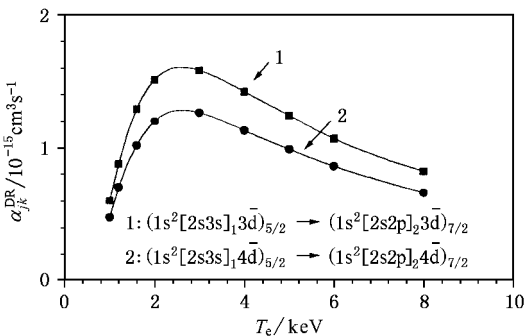


图 1 Au^{75+} 离子 C 类态-态双电子复合速率系数 α_{jk}^{DR} 随电子温度 T_e 的变化

迁下态的耦合谱项不同可以使复合速率系数相差数倍.

4. 结 论

通过对 Au^{75+} 离子三类态-态双电子复合速率系数的理论计算,得到如下主要结论.

1. 在 A 类态-态复合中,旁观电子虽然不直接参与辐射衰落跃迁,但对复合速率系数 α_{jk}^{DR} 仍有较大影响,表现出较为复杂的变化情况.

2. B 类态-态双电子复合主要发生在跃迁电子主量子数的变化 $\Delta n \leq 2$ 的情况下,较高 Rydberg 态对 B 类复合的贡献非常小.对于 C 类态-态复合,不同的耦合谱项和不同的上、下能态均对其有明显影响.

- | | |
|--|---|
| <p>[1] Seaton M J and Storey P J 1976 <i>Atomic Processes and Applications</i> (Amsterdam :North-Holland Publishing Company)p133</p> <p>[2] Hahn Y 1985 <i>Advances in Atomic and Molecular Physics</i> (New York : Academic Press)p123</p> <p>[3] Glenger S H <i>et al</i> 1999 <i>Phys. Rev. Lett.</i> 82 97</p> <p>[4] Dubau J and Volonte S 1980 <i>Rep. Prog. Phys.</i> 43 199</p> <p>[5] DeMichelis C and Mattioli M 1981 <i>Nucl. Fusion</i> 21 677</p> <p>[6] Hahn Y and LaGattuta K J 1988 <i>Phys. Rep.</i> 166 195</p> <p>[7] Wang J G <i>et al</i> 1997 <i>Acta Phys. Sin.</i> 46 2146 [in Chinese] 王建国等 1997 物理学报 46 2146]</p> | <p>[8] Jiao R Z <i>et al</i> 2002 <i>Acta Phys. Sin.</i> 51 1755 [in Chinese] 焦荣珍等 2002 物理学报 51 1755]</p> <p>[9] Chen B <i>et al</i> 1999 <i>High Power Laser and Particle Beams</i> 11 455 [in Chinese] 陈 波等 1999 强激光与粒子束 11 455]</p> <p>[10] Cowan R D 1981 <i>The Theory of Atomic Structure and Spectra</i> (Berkeley :University of California Press)549</p> <p>[11] Grant I P <i>et al</i> 1980 <i>Comput. Phys. Commun.</i> 21 207</p> <p>[12] Chen B <i>et al</i> 2000 <i>High Power Laser and Particle Beams</i> 12 405 [in Chinese] 陈 波等 2000 强激光与粒子束 12 405]</p> |
|--|---|

State-to-state dielectronic recombination for Be-like gold ions^{*}

Chen Bo¹⁾ Zhu Zheng-He²⁾

¹⁾*Institute of Nuclear Physics and Chemistry, China Academy of Engineering Physics, Mianyang 621900, China*

²⁾*Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610065, China*

(Received 7 June 2002 ; revised manuscript received 6 September 2002)

Abstract

Three types of state-to-state dielectronic recombination processes for Be-like ions Au^{75+} have been investigated. Based on multi-configuration Hartree-Fock-Relativistic and distorted wave approaches, state-to-state dielectronic recombination rate coefficients have been calculated at electron temperatures 0.6 – 10.0keV. Variations of the coefficient with electron temperature, recombination types and up-or down-states have also been discussed in detail.

Keywords : state-to-state dielectronic recombination, Au^{75+} ion

PACC : 3840D, 3280D

* Project supported by the National High Technology Development Program of China(Grant No. 863 – 416 – 3 – 4.2).