

基于双激发态对稠密等离子体中双电子复合速率系数的研究

王 巍 蒋 刚[†]

(四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

(2009 年 11 月 30 日收到; 2010 年 1 月 29 日收到修改稿)

讨论了稠密等离子体中双电子复合速率系数的计算方法, 推导出了在双激发态间跃迁过程和关于双激发态的碰撞电离和自电离过程的影响下双电子复合速率系数作为关于电子密度函数的计算公式, 并以类氦镍离子为例进行了计算. 计算结果展示了双电子复合速率系数随电子密度增大的具体变化趋势. 此外, 还给出了在不同原子过程影响下双电子复合速率系数的数据, 并进行了分析.

关键词: 双电子复合, 电子密度, 双激发态, 原子过程

PACC: 3480L

1. 引 言

随着实验条件和实验仪器的发展, 人们对惯性约束聚变中热稠密等离子体的关注越来越高. 先进而精密的测量设备使得研究人员能够深入的研究等离子体的各种物理性质. 然而, 由于热稠密等离子体的特殊环境, 很多重要的物理量不能够进行直接而精确的测量; 并且, 对热稠密等离子体的研究需要大规模的数值模拟, 而这些模拟所需要的原子物理数据和一般的等离子体差异很大. 所以, 基于原子分子物理来对这些物理量进行理论研究就显得特别的重要. 这样一来, 物理学家面临的问题就是如何计算热稠密环境下的原子结构和原子过程. 由于在热稠密的环境下, 等离子体中各种粒子间的相互作用非常的复杂和强烈, 以至于离子的稳定状态和状态间的动力学变换都显示出与一般等离子体中同类物理性质非常不同的特性, 因此这种研究和过去对等离子体的研究尤为不同. 在稠密等离子体中, 双电子复合过程的速率随密度的变化改变明显^[1], 而该过程不仅是等离子体中最重要的复合过程之一, 决定着离化平衡, 其双电子伴线更是等离子体诊断的有效工具, 甚至辐射运输的研究极大程

度上依赖于对双电子复合的研究. 因此, 在热稠密等离子体的研究中, 人们不可避免地需要研究双电子复合过程和双电子伴线. 于是对含有密度效应的双电子复合速率系数的精确研究十分关键. 但是, 在热稠密的环境中, 原子结构和原子过程随粒子间相互作用的加强发生了明显的变化, 所以, 要得到适用的精确数据很困难. 由于在密度极高但离子与离子间相互作用可以不采取准分子模型描述方法时, 我们仍然可以通过考虑等离子体中粒子密度对离子势函数的影响来建立离子的 Hamiltonian, 所以, 尽管电子-离子碰撞的散射算符会因离子结构的改变而有一定程度的变化, 但此时电子-离子的复合过程仍然存在, 并且散射理论的完备性依然成立, 因此可以通过先直接考虑动力学过程速率系数随密度的变化来研究稠密等离子体中的双电子复合过程. 就我们所知, 最近研究含密度双电子复合的人比较少, 而这方面的研究却又是必须的. 因此, 我们对稠密等离子体中双电子复合过程的研究就可以为含密度效应原子动力学过程的理论的进一步精确研究提供理论依据, 从而为我国惯性约束聚变的进一步研究提供有效的基础.

过去几十年中, 人们对双电子复合进行了很多研究^[2-4], 但是由于最初人们感兴趣的等离子体密

[†] 通讯联系人. E-mail: gjiang@scu.edu.cn

度大多都很低,并且离子大多都处于其基态,所以人们提出的根据 Coronal 模型^[5]来计算双电子复合过程的公式既不适用于高密度等离子体又没有体现出双电子复合过程和密度的关系.后来,从文献[6—8],人们开始质疑该公式的使用范围,并提出了一些简单的新公式.从这些公式得到的计算结果表明,在电子密度为 $3 \times 10^{20} \text{ cm}^{-3}$ 温度为 1.0 keV 的时候,类氩硒离子的双电子复合速率系数为 $1.8 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$,是零密度时的一半;而类氟硒离子的速率为 $1.3 \times 10^{-11} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$,是零密度时候的三分之一.在文献[9]中引入了量子力学的方法来计算双电子复合速率系数.其后,随着计算机的发展,在碰撞辐射模型的基础上, Jacobs 和 Blaha^[9] 计算发现由于动力学过程的影响,双激发态上的离子数,随密度发生明显的变化.这一理论结果后来被 Zigler 等人^[10] 的实验中验证.直到 2000 年, Behar 等人^[11] 关于类氩铁离子的计算结果显示,在温度为 200 eV 时,密度为 10^{24} cm^{-3} 的双电子复合速率系数是零密度时的两倍,而在温度为 100 eV 时,密度为 10^{24} cm^{-3} 的双电子复合速率系数是零密度时的 10 倍.

上述事实促使我们重新仔细思考电子密度是如何影响双电子复合过程的速率的.并且它们让我们相信,原子动力学过程通过改变双激发自电离态的离子布居数有效地影响了双电子复合过程的速率系数.因此,我们选择把研究重点放在双激发自电离态上.为得到能够反映随等离子体中密度变化的双电子复合速率系数,需要建立速率系数和双激发态离子布居数的关系.而在稠密等离子体中对双激发自电离态离子布居数有影响的动力学过程很多,对这些动力学过程的研究可以让我们更加深刻的理解含密度效应的双电子复合过程.但是有效而又精确的方法是对这些动力学过程进行分类研究.一方面是因为为了更加深入了解动力学过程通过影响双激发自电离态来影响双电子复合速率系数的方式,我们需要研究不同类型动力学过程对双电子复合速率系数影响的程度;另一方面,为了获得相当精确的含密度效应的双电子复合速率系数,我们需要大量而精确的动力学过程的速率,这是一个长期的工作.此文中,考虑到双激发态之间的各种跃迁过程,自电离过程和碰撞离化过程是影响双激发自电离态离子布居数的最主要的基本原子动力学过程,我们讨论了双激发态(尤其是与双电子复

合通道中双激发自电离态邻近的属于同主量子数组态的双激发态)间的动力学过程和离化过程对双电子复合速率系数的影响,并比较了各种过程对双电子复合速率系数的影响.值得注意的是,本文给出的数据是我们近期的一系列对含密度双电子复合过程的计算中具有代表性的数据.我们的目的是预测双电子复合速率系数随温度密度变换的趋势而不是讨论不同复合通道下速率的差异,因此我们选择用最简洁的数据来表达足够的信息.我们的数据以关于温度密度的函数的形式给出,通过这种形式我们才可以看到共振峰的变化(这对进一步计算更加精确的数据十分重要),并且可以更清晰的了解双电子复合速率系数在不同密度下随温度的变化情况,而这些在诸如文献[12]的计算结果中无法显示.这样一来,我们的结果与分析就可以给接下来聚变研究中更精确的含密度效应动力学研究提供基础.

2. 理 论

双电子复合过程是一个非弹性碰撞过程,通常可以看作是一个两步过程.第一步是双电子俘获过程,一个处在 m 态的离子俘获一个自由电子共同形成一个双激发自电离态 j . 在第二步过程中,由于双激发态不稳定,俘获后的离子会通过辐射跃迁或碰撞退激发到稳定的单激发态 k , 以此来完成双电子复合过程.在低密度等离子体中,通常碰撞退激发过程被忽略而只计入辐射衰变过程.这里值得注意的是,尽管双激发态从数学上只是计算非弹性碰撞截面时矢量展开的中间态,但这里的两部过程模型可以提供给我们一个非常清楚的物理图像,并且它的适用性早已被无数研究所证实.此外它使得我们能在这个物理图像下通过碰撞辐射模型来考虑对双激发自电离态的分布有影响的原子动力学过程.

为得到含密度效应的双电子复合速率系数,我们需要建立该速率系数与双激发自电离态上离子布居数的关系.在稠密等离子体中,双激发态离子布居数和多种动力学过程有关.其中包括双激发态与束缚能级间的碰撞和辐射跃迁过程以及双激发态与连续能级间的离化,俘获以及辐射复合过程.由于在编写计算的程序中,双激发态的布居数和与双激发态相关的动力学过程速率都以矩阵的形式表示,同时也为了表述的简洁,在下列推导中用粗

体符号来表示代表动力学过程的方矩阵与代表束缚能级布居数的列矩阵. 因此, 在稳态下, 双激发自电离态的速率方程可以写为如下形式:

$$\frac{d}{dt}N_l = \beta_l + (D_{en} - D_{re} - I_l)N_l = 0. \quad (1)$$

其中, 列矩阵 N_l 的第 l 行是束缚能级 l 的离子布居数 N_l ; 列矩阵 β_l 的第 l 行是增加束缚能级 l 离子布居数的总的俘获和复合过程数率; 方阵 D_{en} 的矩阵元 $[D_{en}]_{l'l}$ 是从束缚能级 l' 到束缚能级 l 的增加 N_l 的总的动力学过程的速率; 对角矩阵 D_{re} 的矩阵元 $[D_{re}]_{ll}$ 是从束缚能级 l 到其他所有束缚能级动力学过程的总速率; 对角矩阵 I_l 的矩阵元 $[I_l]_{ll}$ 是从束缚能级 l 发生离化过程的总速率. 并且, 如果从某一束缚能级或连续能级到某一束缚能级的跃迁是禁戒的, 那么相对应的矩阵元就为零. 于是, 基于(1)式, 可以把束缚能级的布居数表示为

$$N_l = (D_{re} + I_l - D_{en})^{-1}\beta_l = D^{-1}\beta_l. \quad (2)$$

其中矩阵 D 代表了与束缚能级相关的各种离化与跃迁过程. 接下来我们需要建立双电子复合速率系数与双激发自电离态之间的关系. 在本文中, 我们讨论的是各种与双激发态相关的跃迁过程和自电离与碰撞电离对双激发自电离态离子布居数的影响, 各种动力学过程如图 1 所示,

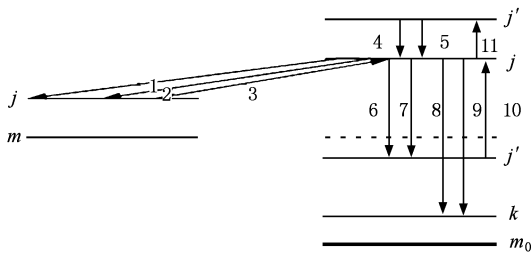


图 1 与双激发态相关的跃迁和离化过程对双激发态 j 的影响.

1 自电离, 2 碰撞电离, 3 从连续能级到 j 的双电子俘获, 4 从能量较高双激发态到 j 的辐射跃迁, 5 从能量较高双激发态到 j 的碰撞退激发, 6 从 j 到能量较低双激发态的辐射跃迁, 7 从 j 到能量较低双激发态的碰撞退激发, 8 从 j 到稳定单激发态 k 的辐射跃迁, 9 从 j 到稳定单激发态的碰撞退激发, 10 从能量较低双激发态到 j 的碰撞激发, 11 从 j 到能量较高双激发态的碰撞激发

因此, 在这种情形下, 通过假设 N_j 完全决定于关于初态的双电子俘获, 以及随后的各种关于双激发态的过程, 我们可以认为单位体积等离子体中发生从初态 m_0 到双激发自电离态 j 再到稳定单激发态 k 的双电子复合的离子数等于 N_j 乘以总的从 j 到 k 的稳定跃迁速率系数, 即

$$N_m N_e \alpha_{mjk} = S N_j. \quad (3)$$

其中列矩阵 α_{mjk} 的矩阵元 $[\alpha_{mjk}]_j$ 为从 m 到 j 再到 k 的双电子态复合速率系数^[12], 并且由于考虑的束缚能级只包括双激发态, 所以各列矩阵的矩阵元分别代表一个双激发能级 j . 因此以 m 为初态的总的双电子复合速率系数为

$$\alpha_m = \sum_j \sum_k [\alpha_{mjk}]_j. \quad (4)$$

(3) 式中代表总的从双激发态到单激发态的跃迁对角矩阵 S 的矩阵元 $[S]_{jj}$ 等于 $\delta_{jj}(A_{jk} + N_e Q_{jk})$, 其中 A_{jk} 为从 j 到 k 的辐射跃迁速率系数, Q_{jk} 为从 j 到 k 的碰撞退激发速率系数.

(3) 式给出了双电子复合速率系数与双激发自电离态离子布居数的关系, 由此得到

$$\alpha_{mjk} = \frac{S(D^{-1}\beta_j)}{N_m N_e}, \quad (5)$$

其中列矩阵 β_j 的矩阵元 $[\beta_j]_j$ 为 $N_m N_e \beta_{mj}$, 即从初态 m 到双激发态 j 的双电子俘获速率. 而代表双激发态间跃迁与电离过程的矩阵 D 的矩阵元

$$[D]_{j'j'} = \delta_{j'j'} (N_e \sum_j Q_{j'j} + \sum_{j' < j} A_{j'j} + A_j^a + S_j + N_e \sum_k Q_{jk} + \sum_k A_{jk}) - N_e Q_{j'j} - A_{j'j}. \quad (6)$$

其中 Q 代表碰撞激发和退激发过程, A 代表辐射跃迁过程, A^a 代表自电离过程, S 代表碰撞电离过程.

(5) 式就给出了计算考虑双激发态间跃迁过程和关于双激发态的碰撞电离和自电离过程影响的稠密等离子体中的双电子复合速率系数. 并且通过(6)式看出该速率是等离子体中自由电子密度的函数. 基于此式, 可研究随着密度的变化, 在我们所考虑的对双激发态有影响的原子动力学过程的影响下, 双电子复合的速率系数是如何变化的.

我们注意到矩阵 D 不是对角化的, 而当双激发态间的间隔很小, 以至于在局部热动平衡状态下可以近似认为它们的离子布居数近似相等的时候,

$$[D]_{j'j'} = \delta_{j'j'} (N_e \sum_j Q_{j'j} + \sum_{j' < j} A_{j'j} + A_j^a + S_j + N_e \sum_k Q_{jk} + \sum_k A_{jk}) - N_e \sum_j Q_{j'j} - \sum_j A_{j'j}. \quad (7)$$

此时, (5) 式中的每个方阵都对角化了. 我们进而可以得到(5)式左边列矩阵的矩阵元, 也即态态双电子复合速率系数

$$[\alpha_{mjk}]_j = \beta_{mj} \times \frac{A_{jk} + N_e Q_{jk}}{N_e \sum_j Q_{jj'} + \sum_{j' < j} A_{jj'} + A_j^a + S_j + N_e \sum_k Q_{jk} + \sum_k A_{jk} - N_e \sum_{j'} Q_{jj'} - \sum_{j'} A_{jj'}}. \quad (8)$$

考虑到在局部热动平衡条件下电子俘获的速率正比于自电离的速率,即 $\beta_{mj} = \frac{4\pi^{3/2} a_0^3}{T_e^{3/2}} \frac{g_j}{g_m} A_{jm}^a \exp[-E_j(kT_e)^{-1}]$.

(8)式又可写为

$$[\alpha_{mjk}]_j = \frac{4\pi^{3/2} a_0^3}{T_e^{3/2}} \frac{g_j}{g_m} A_{jm}^a \exp[-E_j(kT_e)^{-1}] \times \frac{A_{jk} + N_e Q_{jk}}{N_e \sum_{j'} Q_{jj'} + \sum_{j' < j} A_{jj'} + A_j^a + S_j + N_e \sum_k Q_{jk} + \sum_k A_{jk} - N_e \sum_{j'} Q_{jj'} - \sum_{j'} A_{jj'}}. \quad (9)$$

其中 g 代表能级简并度, T_e 代表等离子体中自由电子温度. 我们可以发现(9)式与低密度下的双电子复合速率系数表达式相比,其差异在于原来的分支比^[13]的分母和分子加入了双激发态间的跃迁过程和与双激发态有关的离化过程. 新的分支比的物理意义就在于表达了在稠密等离子体中,从双激发态跃迁衰落到稳定单激发态的离子数与参与各种相互竞争影响双激发态离子布居数的原子动力学过程的离子数的比值.

3. 类氦镍离子双电子复合的计算

为得到关于稠密等离子体环境中,类氦镍离子的双电子复合速率系数在双激发态间跃迁过程和关于双激发态的碰撞电离和自电离过程的影响下随密度的变化趋势,我们以 Cowan 程序为基础编写了新的计算程序. 由于编写完全新的计算程序或者合并大型计算程序是相当耗时的,所以我们暂时在 Cowan 程序中用文献[14,15]中的方法来计算电子碰撞激发,退激发和离化过程的速率系数. 值得注意的是,尽管这些方法提供出来的数据没有最新的计算方法提供的精确,但是在描述原子动力学过程的速率系数随温度的变化趋势时,它们能够提供足够精确的数据.

由于在离子电荷数很高的情况下,关于双激发态的碰撞过程对双电子复合速率系数的影响很不明显^[12],所以这里我们展示了具有代表性的关于类氦镍离子的 $2p-3d, 2p-4d$ 通道的双电子复合数据. 一方面也是因为对类氦镍离子的双电子复合研究比较广泛,并且它的数据能够全面的展示双激发态间跃迁过程和关于双激发态的碰撞电离和自电离过程的影响下稠密等离子体中双电子复合过程随密度和温度的变化趋势的特点.

事实上,选择最重要的或是最有代表性的双电子复合通道是困难的,所以,尽可能多地考虑复合通道来进行计算是一个好办法,并且计算结果也可以更加直接的去和实验结果进行比较. 但是,为了研究双电子复合速率系数随等离子体密度变化的趋势,这种方法是不妥当的,因为多复合通道结果的叠加会掩盖一些双电子复合随密度变化的重要特征. 然而,从另一方面来说,我们不可以完全依赖态态双电子复合速率系数来对它随密度的变化进行研究,因为在现在的原子结构计算框架下,人们还不能非常精确的计算出描述原子的 rigged Hilbert space 中原子结构相关的所有物理量. 因此,完全依赖于对态态复合的计算来分析双电子复合速率系数随密度和温度的变化是不实际的. 本文中,我们的目的并不是研究关于不同复合通道的不同的双电子复合速率系数,而是选择具有代表性的结果来分析在双激发态间跃迁过程和关于双激发态的碰撞电离和自电离过程的影响下双电子复合速率系数随密度温度变化的趋势,所以,下文中,我们给出类氦镍离子的关于 $2p-3d$ ($3p, 3d, 4p, 4d$) 和 $2p-4d$ ($4d$) 的具体五个通道以及它们总和的以(5)式为理论基础的双电子复合计算数据. 这些数据清楚并全面地反映了我们所有计算的结果.

表 1 中展示了关于通道 $e + 1s^2 2s^2 2p^6 \leftrightarrow 1s^2 2s^2 2p^5 3dnl \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^6 nl$ 的双电子复合速率系数随等离子体中自由电子温度和密度的变化情况. 总的来说,当电子温度小于 900 eV 时,随着电子密度的增加,双电子复合速率系数有所增加,而当温度大于 900 eV 时,随着电子密度的增加,速率系数有所下降. 对于确定的密度,双电子复合速率系数随着温度的增加达到某一峰值,然后减少,这正体现了双电子复合过程的共振特征. 接下来我们将看到,关于具体通道的计算结果会给出速率系数非常

明显的变化,而只有这种明显的变化趋势才能为将来进一步的研究提供足够的基础.

表1 类氦镍离子的关于通道2p-3d(旁观电子3p, 3d, 4s, 4p和4d)的总双电子复合速率系数. 其中 T_e 为自由电子温度, N_e 为自由电子密度

T_e/keV	双电子复合速率系数 $\times 10^{-12} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$						
	$N_e/\text{cm}^{-3} = 10^{18}$	$N_e/\text{cm}^{-3} = 10^{19}$	$N_e/\text{cm}^{-3} = 10^{20}$	$N_e/\text{cm}^{-3} = 10^{21}$	$N_e/\text{cm}^{-3} = 10^{22}$	$N_e/\text{cm}^{-3} = 10^{23}$	$N_e/\text{cm}^{-3} = 10^{24}$
0.2	19.3211	19.2501	19.1331	19.0831	18.9922	18.9391	19.8773
0.3	19.6918	19.6438	19.5148	19.4488	19.3829	19.2717	19.5859
0.4	17.5042	17.4732	17.3622	17.2892	17.2372	17.151	17.8621
0.5	15.1189	15.0989	15.0109	14.9379	14.8959	14.8396	15.4708
0.6	13.0386	13.0256	12.9566	12.8856	12.8516	13.2448	13.0925
0.7	11.3179	11.3089	11.2539	11.1879	11.1579	11.087	11.6608
0.8	9.9073	9.9003	9.8573	9.7953	9.7703	9.7143	11.0414
0.9	8.74827	8.74227	8.70827	8.65327	8.62927	8.58031	8.53526
1	7.78911	7.78511	7.75711	7.70631	7.68331	7.64194	7.65568
1.1	6.98627	6.98327	6.96127	6.91347	6.89347	6.85859	6.81824
1.2	6.30912	6.30712	6.28812	6.24522	6.22533	6.19504	6.15409
1.3	5.73162	5.72962	5.71362	5.67562	5.65572	5.63703	5.60658
1.4	5.23615	5.23415	5.22115	5.18625	5.16825	5.14676	5.11332
1.5	4.80807	4.80607	4.79507	4.76217	4.74518	4.72568	4.68994
1.6	4.43237	4.43137	4.42147	4.39227	4.37527	4.35888	4.33574

图2到10分别展示了关于通道2p-3d的考虑旁观电子3p, 3d, 4p和4d的双电子复合速率系数以及关于通道2p-4d的考虑旁观电子4d的双电子复合速率系数.

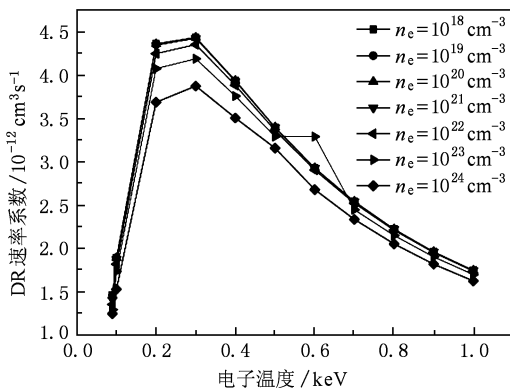


图2 类氦镍离子关于通道2p-3d且旁观电子为3p时的双电子复合速率系数

从图2中可以看出,除了在温度从0.4到0.7 keV的一段范围内以外,双电子复合速率系数在任何温度下都会随着电子密度的增加而减少.并且速率系数的增长只发生在电子密度为 10^{23} cm^{-3} 的情况下,这种增加并不是随着密度增大的单调增加.与图2不同的是,图3和图4中,双电子复合速率系

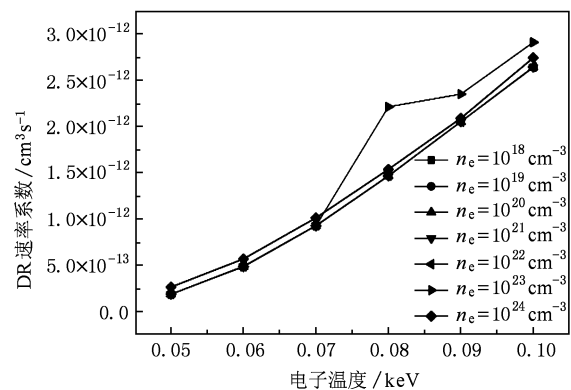


图3 类氦镍离子关于通道2p-3d且旁观电子为3d在电子温度低于0.1 keV时的双电子复合速率系数

数有所增长的温度范围更宽,从0.05到0.9 keV都可以观察到速率系数随电子密度的增长.然而,综合图2和图3可以发现,随着电子密度的增加,当电子温度高于某一个特定的值的时候,双电子复合速率系数会逐渐减小,并当电子温度增大时,速率系数的减小幅度会迅速变小.在图4,图5中,展示了双电子复合速率系数除上述特征外的另外一些特征,也就是密度效应引起的双电子复合共振峰的变化.这种变化不仅包括共振峰峰值的变化,还包括共振峰位置的变化.在图6和图7中,可以发现,对

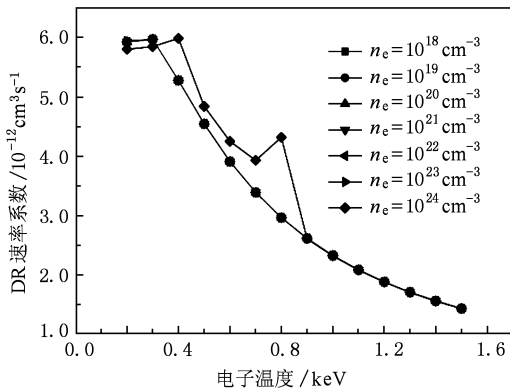


图4 类氦镍离子关于通道 2p—3d 且旁观电子为 3d 在电子温度高于 0.1 keV 时的双电子复合速率系数

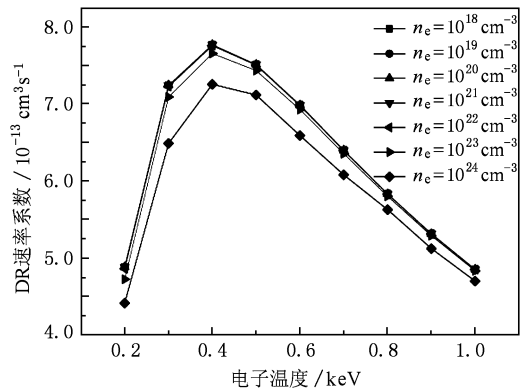


图7 类氦镍离子关于通道 2p—4d 且旁观电子为 4d 时的双电子复合速率系数

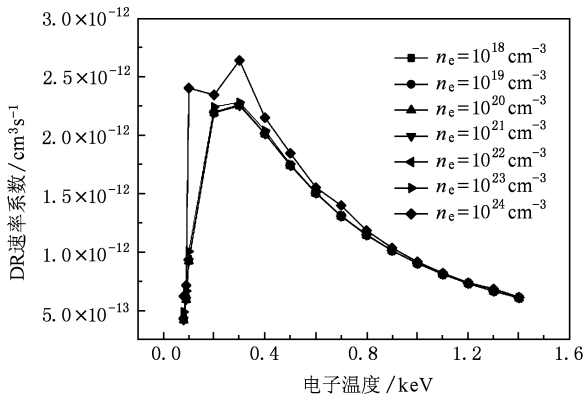


图5 类氦镍离子关于通道 2p—3d 且旁观电子为 4p 时的双电子复合速率系数

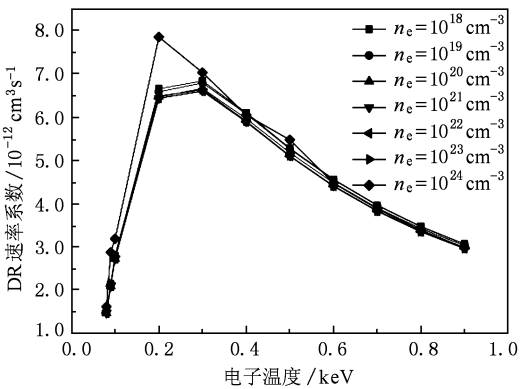


图6 类氦镍离子关于通道 2p—3d 且旁观电子为 4d 时的双电子复合速率系数

不同的具体复合通道而言,密度效应引起双电子复合速率系数的变化方式各不相同,并且速率系数随电子密度增大而增加所对应的温度范围也不同.例如,在图7中,双电子复合速率系数在任何温度下都

显示出了随电子密度增大而单调减少的变化趋势,而这种变化趋势与前几幅图中所显示出的有明显差异.总之,可以把关于具体复合通道的双电子复合速率系数随密度的变化情况归纳如下:对于具体的复合通道存在一个确定的温度范围(一般情况下是从 0.1 到 1.0 keV),在该范围中,双电子复合速率系数随电子密度的变化明显;但温度较低时,双电子复合速率系数可能会随电子密度的增大而增加,而当温度高于某个特定的值时,速率系数随电子密度增大而减小;并且速率系数的具体变化方式依赖于不同的复合通道,而且在不同的通道中,双电子复合共振峰的位置,峰值和数量也会有不同方式的变化.上述特征概括了在双激发态间跃迁过程和关于双激发态的碰撞电离和自电离过程的影响下双电子复合速率系数随密度温度变化的趋势.我们的计算结果给出了新的更具体的变化特征,并且,由于我们选择的电子温度范围比较宽,这一变化趋势可以看作以前文献中的计算数据所描述的不同情况^[6-8,11]的综合(即一些文献中只显示了双电子复合速率系数随电子密度增大而减小,而另一些文献中只显示出相反的情况).

上述结论反映了密度效应对态态双电子复合过程的一些影响.之所以观察到双电子复合速率系数随密度增大而增加,是因为双激发态间的碰撞跃迁过程使得离子从自电离速率很高的双激发态跃迁到了自电离速率较低的双激发态,而这些双激发态的辐射跃迁速率却基本不变.而之所以在温度大于某一个特定值的时候双电子复合速率系数会随电子密度的增大而减少,是因为离化速率会随着温度的增加而明显增加,然而稳定跃迁的速率却不会有如此大的增加.这就说明了我们计算结果的合

理性.

另一方面,可以从描述低密度等离子体中双电子复合过程速率系数的公式中看出,包含电子温度的项是 $e^{-E_j/k_e T_e^{3/2}}$. 因此,这就从数学上说明了决定双电子复合共振峰位置和峰值的因子分别是具体双激发态的能量值和与该双激发态有关的分支比中原子动力学过程的速率系数. 然而,在我们的计算框架下,与双激发态有关的碰撞过程被考虑了进来,这些动力学过程不仅能够改变双激发态的离子布居数,而且它们的速率系数是关于电子温度的函数. 因此,对具体的态态双电子复合通道而言,决定共振峰位置的因素就不仅仅是双激发态的能量值,它们还包括了作为电子温度函数的动力学过程的速率系数. 并且,随着电子密度的增加,动力学过程对共振峰的影响也随之增加. 这一结论可以清楚的从(9)式推导出来. 这就对图 4 图 5 中双电子复合速率系数随电子密度变化的趋势进行了初步的解释,但更加深入而精确的解释还需要更加精确的原子结构计算数据.

上述计算结果的理论依据是(5)式,其中包括了与双激发态相关的跃迁过程和离化过程. 为了说明双电子复合速率系数随电子密度变化趋势的特点是这些相互竞争的原子动力学过程共同作用的结果,图 8 到图 10 分别展示了类氦镍离子关于 2p—3d 通道在旁观电子为 3p 时,考虑不同原子动力学过程对双激发态影响的双电子复合速率系数随密度温度的变化情况. 图 8 中的计算结果是在只考虑减少双激发态离子布居数的碰撞退激发过程的影响下计算得出的数据;图 9 只考虑了减少双激发态离子布居数的碰撞离化过程的影响;图 10 只考虑了增加双激发态离子布居数的碰撞辐射跃迁过程.

从上面几幅图中可以看出不同的原子动力学过程对双电子复合过程的影响是不同的. 在图 8 和图 9 中,双电子复合速率系数几乎在任何温度下都会随电子密度的增大而减少. 这一特点与图 2 中所展示的速率系数变化趋势(考虑所有双激发态间跃迁过程和与双激发态相关的离化过程的影响时)相同. 然而在图 2,8,9 三幅图中的双电子复合速率随电子密度增大而减小的速度并不相同. 由于在图 2,8,9 三幅图中,在确定的温度下,双电子复合速率系数在相邻的电子密度之间的差值具有相当的数量级,所以,图 8 和图 9 中考虑的任何动力学过程对双

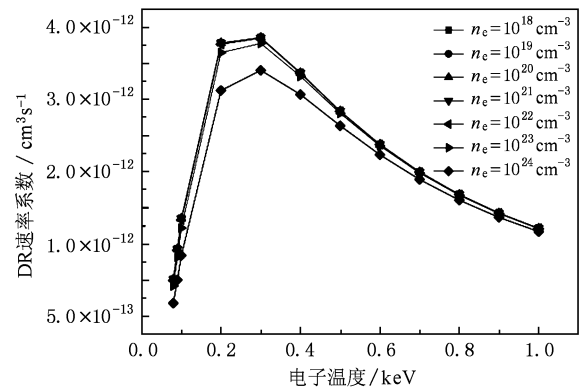


图 8 只考虑减少双激发态离子布居数的碰撞退激发过程影响而计算得出的双电子复合速率系数

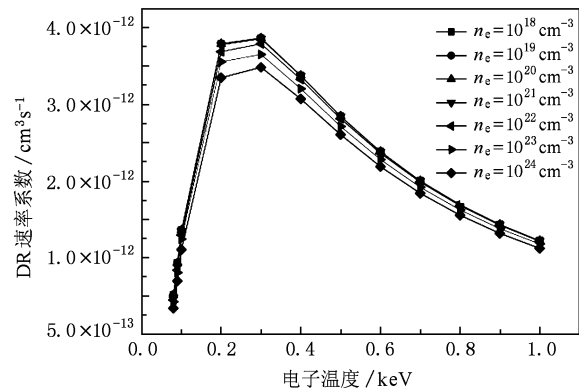


图 9 只考虑减少双激发态离子布居数的碰撞离化过程影响而计算得出的双电子复合速率系数

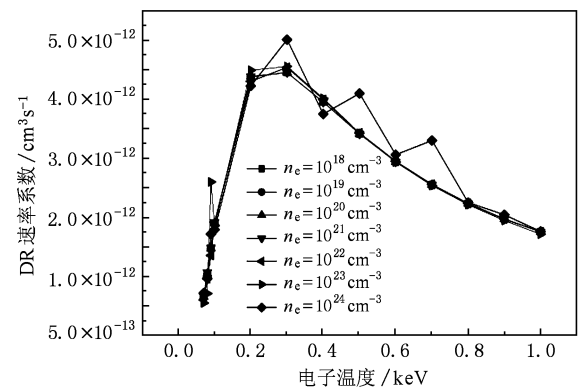


图 10 只考虑增加双激发态离子布居数的碰撞辐射跃迁过程影响而计算得出的双电子复合速率系数

电子复合速率系数的影响都是不能忽略的. 但是可以看出图 8 和图 9 并没有展示出一些图 2 中所展示出的双电子复合速率系数随电子密度增大而发生的生长,以及共振峰的变化等特点. 而图 10 却展现了这一点. 在图 10 中,一方面,在几乎所有温度下,

双电子复合速率系数都随电子密度的增大而增加;另一方面,双电子复合共振峰随着电子密度的增加发生了明显的变化.结合图 2 和图 8,9,10,双电子复合速率系数随温度、密度变化的增长方式受到了与双激发态相关的各种原子过程的影响.值得注意的是图 2 中双电子复合速率系数在温度为 0.6 keV,密度为 10^{23} cm^{-3} 的区域附近发生了突然地增长,然而在图 8,9,10 中却并没有明显的变化.这是因为:首先,总的双电子复合速率系数并不是考虑不同原子过程时速率系数的线性叠加;其次,考虑不同原子过程影响时,双电子复合速率系数在同一密度下随温度增长的变化率是不同的,各原子过程与电子温度的关系也是不同的,而在 0.6 keV 和 10^{23} cm^{-3} 的条件下,与双激发态有关的辐射跃迁,碰撞退激发和碰撞离化速率的差值相对更小,并且他们分别会增加或者减少双激发态的离子布居数,因此,在综合考虑他们对双激发态的影响时(6)式的值或者(8)式中分母的值会有明显减少,然而从双激发态到单激发态的跃迁速率却不会因各原子过程的综合效应而发生明显的变化,于是这就使得双电子复合速率系数发生突然的增大.这一特点进一步佐证了稠密等离子体中,在双激发态间跃迁过程和电离过程的影响下,双电子复合速率系数随密度和温度的变化趋势源于各种相互竞争的原子动力学过程对双激发自电离态的共同作用.总的来说,减少双激发态离子布居数的过程使得双电子复合速率系数随电子密度增加而减小;增加双激发态离子布居数的过程使得双电子复合速率系数有所增加,并可以引起共振峰位置的变化.从这一点我们也可以看到,为全面的了解稠密等离子体中双电子复合过程随密度的变化,需要全面的考虑各种与双激发自电离态有关的原子动力学过程对双电子复合过程的影响.

在我们最近的工作中发现,在考虑原子动力学过程对双激发自电离态的影响下计算出来的两条双电子伴线的强度比值在电子温度从 0.1 到 2 keV,

电子密度从 10^{21} 到 10^{24} cm^{-3} 的范围内对电子温度和密度的变化十分敏感,可以作为非常好的诊断等离子体温度和密度的工具.

4. 结 论

本文中,我们讨论了计算稠密等离子体中双电子复合速率系数随密度变化的方法,并推导出了在双激发态间跃迁过程和关于双激发态的碰撞电离和自电离过程的影响下双电子复合速率系数作为电子温度和密度函数的计算公式.我们以类氦镍离子为例进行了计算,将计算结果以电子温度和密度函数的形式展示出来,显示出了双电子复合速率系数随密度变化趋势的一些具体的新的特性,并说明了结果的合理性.通过计算数据,我们可以把双电子复合速率系数随密度和温度的总体变化趋势归纳为:速率系数在相对低的温度区域会随电子密度增大而增加,而当温度大于某个特定的值时,速率系数随电子密度的增大而单调下降.由于没有直接的实验数据,尚未与实验进行比较,但与以往文献中的计算结果相比,这一变化趋势可以看作是以前文献关于含密度双电子复合速率系数随电子密度变化趋势的不同计算预测结果的综合,即包含了以前文献中对双电子复合随电子密度变化趋势的预测的不同情况.此外,观察到了跟具体复合通道相关的更加具体的双电子复合速率系数随密度的变化趋势.并且,由于我们把双电子复合速率系数作为电子密度和温度的函数来展示,因此,观察到了共振峰的峰值和位置随电子密度增大而发生的变化.通过计算不同原子动力学过程影响下的双电子复合速率系数,我们说明了双电子复合速率系数和共振峰的变化来源于与双激发自电离态相关的相互竞争的原子动力学过程的影响.这样一来,我们的理论和具体计算数据就为更进一步研究热稠密等离子体中密度效应影响下的原子动力学过程提供了基础.

- [1] Glenzer S H, Rozmus W, MacGowan B J, Estabrook K G, De Groot J D, Zimmerman G B, Baldis H A, Harte J A, Lee R W, Williams E A, Wilson B G 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 97
 [2] Kallman T R, Palmeri P 2007 *Rev. Mod. Phys.* **79** 79
 [3] Yang T L, Jiang G, Zhu Z H 2004 *Chin. Phys.* **13** 850

- [4] Sheng Y, Jiang G, Zhu Z H 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 501 (in Chinese) [盛 勇,蒋 刚,朱正和 2002 物理学报 **51** 501]
 [5] Seaton M J, Storey P J 1976 *Atomic Processes and Applications* (North Holland: Amsterdam) p133
 [6] Goldberg L, Dupree A K 1967 *Nature* **215** 41

- [7] Burgess A, Summers H P 1969 *Astrophys. J.* **157** 1007
2000 *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*
[8] Hagelstein P L, Rosen M D 1986 *Phys. Rev. A* **34** 1931 **65** 83
[9] Jacobs V L, Blaha M 1980 *Phys. Rev. A* **21** 525
[12] Behar E, Doron R, Mandelbaum P, Schwob J L 2000 *Phys. Rev. A* **61** 062708
[10] Zigler A, Jacobs V L, Newman D A, Burkhalter P G, Nagel D J, Luk T S, McPherson A, Boyer K, Rhodes C K 1992 *Phys. Rev. A* **45** 1569
[13] Shore Bruce W 1969 *Astrophys. J.* **158** 1205
[14] Regemorter H V 1962 *Astrophys. J.* **136** 906
[11] Behar E, Doron R, Mandelbaum P, Schwob J L, Jacobs V L
[15] Younger S M 1981 *Phys. Rev. A* **24** 1272

Study on rate coefficient of dielectronic recombination in dense plasma based on doubly excited state

Wang Wei Jiang Gang[†]

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

(Received 30 November 2009; revised manuscript received 29 January 2010)

Abstract

The method to calculate the rate coefficient of dielectronic recombination (DR) in dense plasma is discussed in this paper. The formula for calculating the DR rate coefficient as a function of electron density is derived under the effects of transition processes among doubly excited states, collisional ionization and autoionization corresponding to doubly excited states. And the calculation results for DR of Ne-like Ni based on the formula are given. The results show the trend of the change in DR rate coefficient as electron density increases. Additionally, the DR rate coefficients under the effects of different atomic processes are given and analyzed.

Keywords: dielectronic recombination, electron density, the doubly excited state and atomic process

PACC: 3480L

[†] Corresponding author. E-mail: gjiang@scu.edu.cn