

Bi⁸⁰⁺ 辐射复合过程的计算^{*}

曾思良[†] 逢锦桥 李 萍 李月明 颜 君 王建国

(北京应用物理与计算数学研究所计算物理重点实验室,北京 100080)

(2004 年 7 月 29 日收到,2004 年 11 月 13 日收到修改稿)

基于 Dirac-Slater 自洽场方法,计算了 Bi⁷⁹⁺ 离子从低能到高能的光电离截面以及其逆过程 Bi⁸⁰⁺ 的辐射复合截面;分析了 Kramers 公式的适用性,考察了多极效应、相对论效应在不同能区对辐射复合截面的影响,计算了 Bi⁸⁰⁺ 离子在电离阈值附近的辐射复合截面和辐射复合速率系数,考察了自由电子分布函数及电子的温度变化对速率系数的影响,并将计算结果同高精度的储存环合并束实验进行了对比.

关键词:多极计算,辐射复合,光电离

PACC:3130J,3280F

1. 引 言

辐射复合(Radiative Recombination)是等离子体中电子与离子碰撞的主要复合过程之一.它是光电离的逆过程,对等离子体中电离平衡的建立和维持以及等离子体的辐射输运都起着重要作用^[1,2].在惯性约束聚变(ICF), α 射线激光和天体物理等研究领域,辐射复合截面和速率系数是模拟和诊断高温等离子体状态必不可少的原子参数^[3].此外,高精度的辐射复合截面计算对 EBIT(电子束离子阱)也是重要的,因为 EBIT 实验一般只能测得相对的截面,利用高精度的辐射复合截面数据可以对实验结果进行绝对标定.

对于辐射复合的理论研究可以追溯到 20 世纪 20 年代^[4,5],Kramers 给出了类 H 离子 n 层次的光电离截面的半经典的解析公式.1930 年,Stobbe 等人,在非相对论的框架下,采用偶极近似,得到了 nl 层次严格的量子力学计算的辐射复合截面^[6].Bethe 和 Salpeter^[7]使用量子力学,根据对应原理,也得到了 n 层次的辐射复合截面的解析公式.到了最近几年,人们又开展了高剥离态离子辐射复合过程中光子极化效应^[8]和 QED 效应^[9]等新方向的理论研究.

辐射复合的理论研究已经开展了多年,但是直到上个世纪 80 年代末,才开始陆续出现直接测量辐

射复合过程的实验报道^[10].典型实验装置细节的描述可以参见文献[11].电子和离子束的相对速度可以调节得很低,以至于电子和离子束之间的相对碰撞能量低到 meV 的量级.在这样的实验中,辐射复合过程是主要的,双电子复合和三体复合可以忽略不计^[12].但在大量的 meV 能区实验中人们发现:实验测得的辐射复合速率系数往往比理论预期的速率系数大 1—400 倍^[12].理论模拟一般在偶极近似的基础上,采用半经验公式或者采用非相对论的量子力学计算^[12,13].尽管 2002 年 Heerlein 等人提出一个唯象经验理论^[14]对这一现象给予了定性的解释,但是和实验符合得较好的定量的理论计算结果尚未见报道.因此在阈值附近,辐射复合速率系数理论计算结果与实验测量的巨大差异,至今还是一个未解决的问题.

在 ICF 中,人们所关注的元素多为高核电荷数(Z)的元素,所关心的能量也比较高.另外人们在储存环和 EBIT 上也做了很多关于高 Z 、高离化度体系的实验.目前,对于这样的体系,大量的理论计算是在偶极近似的基础上采用类氢近似或半经验公式进行^[4,6,12],考虑了相对论和多极效应^[15—17]的工作相对较少.我们希望考察一下,对于这样的体系,Kramers 公式的适用性以及多极效应、相对论效应的影响.本文利用完全相对论自洽场方法计算 Bi⁷⁹⁺ 离子从低能到高能的光电离截面以及其逆过程

^{*} 国家自然科学基金(批准号:10344001 和 10174009)资助的课题.

[†] E-mail: zeng_siliang@mail.iapcm.ac.cn

Bi^{80+} 的辐射复合截面,研究了 Kramers 公式的适用性,考察了多极效应、相对论效应在不同能区对辐射复合截面的影响,计算了 Bi^{80+} 离子在电离阈值附近的辐射复合截面和辐射复合速率系数,考察了自由电子分布函数及电子的温度对速率系数的影响,并将计算结果同高精度的储存环合并束实验^[4]进行了对比.

2. 计算方法

Bi^{79+} 的核电荷数为 83. 这是高核电荷数、高电离度的系统,预期电子的关联效应不是很重要,因此可在独立电子近似下较真实地描述 Bi^{79+} 的光电离过程. 在独立电子近似下,原子中的电子都可以看作彼此独立地在同一自洽场中运动. 根据已建立的 Dirac-Slater 自洽场方法^[18],首先求解出原子的相对论自洽势. 在自洽势的基础上求解 Dirac 方程,得到初末态能级位置和相应的波函数,从而计算出有关的多极跃迁矩阵元和跃迁概率、光电离截面,进而算出电子的辐射复合截面和辐射复合速率系数^[19,20].

对于光电离过程,其光电离截面可写为

$$\sigma = (e^2 \pi / mc) \left(\frac{df_{\epsilon'k',nk}}{d\epsilon} \right), \quad (1)$$

其中 $\frac{df_{\epsilon'k',nk}}{d\epsilon} = \frac{2\omega}{3g_{nk}} |\tilde{D}_{\epsilon'k',nk}|^2$ 为振子强度密度, ϵ 标记电子能量, n 为主量子数, $|k| = j + \frac{1}{2}$, $\hbar\omega$ 为光子能量, g_{nk} 为初态简并度, $\tilde{D}_{\epsilon'k',nk}$ 为末态能量归一化的跃迁矩阵元^[19].

为了与低能合并束实验相对比,需要近阈值处的光电离截面. 由于数值精度问题,直接的数值求解近阈值处的电子波函数很困难. 我们利用量子亏损理论解决了这一问题. 根据量子亏损理论 (quantum defect theory, 简称 QDT), 具有相同角动量特征的无数个分立态和相应的连续态可以形成一个通道. 从一个初态到一个末通道的光激发和光电离过程可以统一处理^[19,21], 定义光激发振子强度密度:

$$\frac{df_{n'k',nk}}{d\epsilon} = f_{n'k',nk} N_{n'k'}^2, \text{ 和末态能量归一化的光激发跃迁矩阵元: } \tilde{D}_{n'k',nk} = D_{n'k',nk} \cdot N_{n'k'},$$

其中 $D_{n'k',nk}$ 为态归一化的光激发跃迁矩阵元, $N_{n'k'}^2 = \nu_{n'k'}^3 (q+1)^2$ 为态密度, q 为电离度, $\nu_{n'k'}$ 为有效量子数. 光激发的能量归一化的跃迁矩阵元将和前述的光电离的能量归一化的跃迁矩阵元在电离阈值上下平滑连接.

因而通过有限的计算构成样点插值,便能得到所有能量归一化的跃迁矩阵元,进而得到靠近阈值的跃迁截面 σ .

辐射复合截面为^[2]

$$\bar{\sigma}_i = \frac{C_i}{C^+} \left(\frac{h\gamma}{mc} \right)^2 \sigma_i. \quad (2)$$

这里 C_i 为 i 态的简并度, C^+ 为相应的离子的简并度, $h\gamma$ 为光子能量, m 为电子的质量, v 为电子的速度, c 为光速. 辐射复合的速率系数为

$$v\bar{\sigma} = \int v\bar{\sigma}(v) dv. \quad (3)$$

为了和高精度的储存环的实验相对比,本文选择电子的速度分布函数^[12,22]为

$$f(v) = \frac{m}{2\pi\kappa T_y} e^{-mv_y^2/2\kappa T_y} \left(\frac{m}{2\pi\kappa T_x} \right)^{1/2} \times e^{-n\kappa v_x - \Delta^2/2\kappa T_x}. \quad (4)$$

这里 v_y 和 v_x 分别为垂直和平行于离子束方向的电子速度分量, T_y 和 T_x 分别为 v_y 和 v_x 对应的电子温度, $\frac{1}{2} m\Delta^2$ 是电子与离子的相对动能.

3. 计算结果及讨论

利用上述的计算方法,在大约 0keV 到 100keV 的能量区间内,我们计算了 Bi^{79+} 基态及主量子数 n 小于 6 的各个激发态光电离截面 σ . 并利用细致平衡关系,计算了自由电子辐射复合到 Bi^{79+} 基态和激发态的辐射复合截面和速率系数.

3.1. 辐射复合截面的计算及 Kramers 公式适用性讨论

如计算方法部分所述,一般来说,光电离的计算常常采用偶极近似,通过数值积分求得 $\langle \psi_{nk} | r | \psi_{\epsilon'k'} \rangle$ 的值,进而得到束缚电子的光电离截面. 但是由于数值计算精度的影响,高里德堡态和靠近电子电离阈值的电子波函数不易计算精确,所以使用数值积分方法无法得到阈值附近精确的电离截面.

根据 QDT,光激发的能量归一化的跃迁矩阵元和光电离的能量归一化的跃迁矩阵元在电离阈值上下平滑连接. 因而通过有限的计算构成样点插值,便能较为精确地得到阈值附近能量归一化的跃迁矩阵元,进而得到光电离截面 σ .

图 1 为能量归一化的偶极跃迁矩阵元. 每条曲线对应一个初态 $n_{s1/2}$ (或 $n_{p1/2}$) 到一个末通道 $p_{1/2}$ "

(或“ $d_{3/2}$ ”)的跃迁过程. 在未态能量(电子的动能)小于零时,为束缚-束缚的光激发过程,在未态能量大于零时,为束缚-自由的光电离过程. 从图中可见,每条曲线随末态能量连续变化,并在能量零点光滑连接. 这样通过有限的计算构成样点,一个初态到一个未通道的无限个跃迁过程可以统一处理^[9]. 通过内插得到靠近电离阈值的能量归一化跃迁矩阵元.

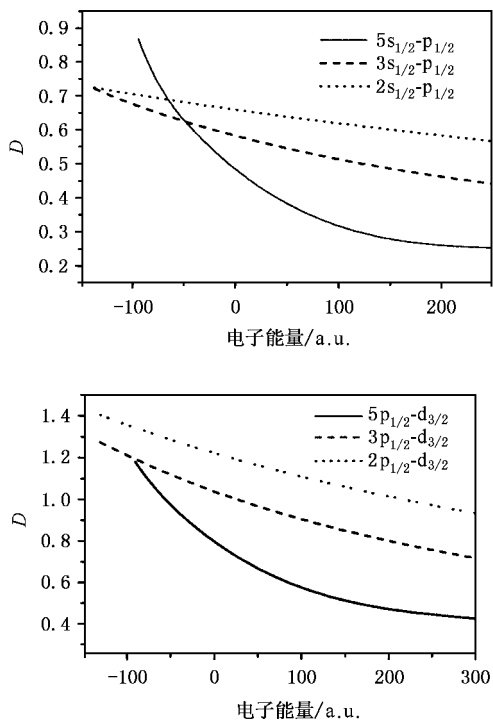


图1 不同的初态 $n s_{1/2}$, $n p_{1/2}$ 分别到末通道 $p_{1/2}$, $d_{3/2}$ 能量归一化偶极跃迁矩阵元

文献[14]中提到:电子能量比较低时,加 Gaunt 因子修正的 Kramers 同严格的非相对论偶极量子力学计算符合得很好. 表1为主量子数分别等于2,3,4时,用内插得到的相对论偶极辐射复合截面 $\bar{\sigma}_D$ 和 Kramers^[7]公式算得的辐射复合截面加 Gaunt 因子修正 $g_n \times \bar{\sigma}_{Kramers}$ 的比值.

$$\bar{\sigma}_{Kramers} = 2.1 \times 10^{-22} \frac{Z^4 E_0^2}{(E_0 Z^2 + n^2 E_e) n E_e} (\text{cm}^2), \quad (5)$$

这里, Z 是有效核电荷数, E_0 等于 0.5 a.u. , E_e 是电子动能. g_n 是束缚-自由跃迁的 Gaunt 因子^[2]. 从 $n=2$ 的这列数据可以看出:随着电子能量的增大,辐射复合截面不断减小,Ratio 不断增大,即相对论效应不断增大. 当 $n=2$, $E_e = 1 \times 10^{-10} \text{ a.u.}$ 时,相对论偶极的辐射复合截面为: $3.31 \times 10^{-9} \text{ cm}^2$, Ratio =

1.12 ; $E_e = 279.07 \text{ a.u.}$ 时,相对论偶极的辐射复合截面为 $9.58 \times 10^{-22} \text{ cm}^2$, Ratio = 1.16 . $n=3$ 和 $n=4$ 的数据呈现了类似的规律:随着电子能量的增大,辐射复合截面不断减小,相对论效应不断增大. 从表1还可以看到:相同 E_e ,辐射复合截面和相对论效应均随着 n 的增大而减小,两种计算结果随着 n 的增大在阈值附近逐渐吻合. 比如: $n=3$, $E_e = 1 \times 10^{-10} \text{ a.u.}$ 时,辐射复合截面为 $2.15 \times 10^{-9} \text{ cm}^2$, Ratio = 1.06 ; $n=4$ 时,辐射复合截面为: $1.57 \times 10^{-9} \text{ cm}^2$, Ratio = 1.02 . $n=4$ 的数据中,有部分 Ratio 的数据小于1,这是由于插值误差造成的. 由于接近阈值的高里德伯态和连续态电子波函数不易准确计算,插值计算所选取的电子动能样点要和电离阈值有相当的距离,才能保证光激发和光电离能量归一化的偶极跃迁矩阵元在能量零点(阈值点)光滑连接. 而且所研究系统的有效核电荷数越大,这段距离也要随之增大. 表1各个能量点离计算采样的能量点的距离不完全一致,而插值数值误差又依赖于这些不同的距离,所以各个能量点的插值误差也不完全一样. 这就是导致部分 Ratio 的数据小于1的原因. 但插值误差不会显著影响总的计算精度.

表1 不同电子动能、不同 n , $\bar{\sigma}_D$ 数据和 Ratio = $\bar{\sigma}_D / (g_n \bar{\sigma}_{Kramers})$ 的比值

E_e /a. u.	$n=2$		$n=3$		$n=4$	
	$\bar{\sigma}_D/\text{cm}^2$	Ratio	$\bar{\sigma}_D/\text{cm}^2$	Ratio	$\bar{\sigma}_D/\text{cm}^2$	Ratio
1×10^{-10}	3.31×10^{-9}	1.12	2.15×10^{-9}	1.06	1.57×10^{-9}	1.02
23.26	1.39×10^{-20}	1.12	8.78×10^{-21}	1.06	6.04×10^{-21}	0.99
46.51	6.84×10^{-21}	1.13	4.18×10^{-21}	1.06	2.73×10^{-21}	0.98
69.77	4.47×10^{-21}	1.13	2.67×10^{-21}	1.06	1.67×10^{-21}	0.98
93.02	3.29×10^{-21}	1.14	1.92×10^{-21}	1.07	1.17×10^{-21}	0.99
116.28	2.59×10^{-21}	1.15	1.48×10^{-21}	1.08	8.85×10^{-22}	1.00
139.54	2.12×10^{-21}	1.14	1.19×10^{-21}	1.09	7.06×10^{-22}	1.02
162.79	1.78×10^{-21}	1.15	9.83×10^{-22}	1.09	5.84×10^{-22}	1.05
186.05	1.53×10^{-21}	1.15	8.33×10^{-22}	1.10	4.94×10^{-22}	1.07
209.30	1.34×10^{-21}	1.15	7.17×10^{-22}	1.10	4.24×10^{-22}	1.09
232.56	1.19×10^{-21}	1.16	6.25×10^{-22}	1.11	3.66×10^{-22}	1.11
255.81	1.06×10^{-21}	1.16	5.51×10^{-22}	1.11	3.18×10^{-22}	1.10
279.07	9.58×10^{-22}	1.16	4.90×10^{-22}	1.12	2.78×10^{-22}	1.11

根据 Stobbe 等人^[6]的非相对论偶极近似计算的结果,在阈值附近,当 $n=5$ 时,非相对论的结果是 $\bar{\sigma}_{Kramers}$ 的 0.94 倍, n 越大时,两种计算就越接近. 也就是说,高 n 低能时, Gaunt 因子约等于 1, Kramers

公式是个较好的近似. 由于高 n 低能时, 相对论效应很小, 且 Kramers 公式是个较好的近似, 所以在计算低能区总的速率系数时, 可以对低 n 部分采用内插的方法计算, 对高 n 部分采用 Kramers 公式计算.

3.2. 多极效应对 Bi^{79+} 光电离截面的影响

设 σ_D 为偶极近似下的光电离截面, σ_M 为考虑多极效应的光电离截面. 表 2 为不同能量、不同主量子数 n , σ_M 数据和 σ_M/σ_D 的值. 表 2 的数据表明: 多极效应主要随光子能量的增大而增大, 定性地说, σ_M/σ_D 值的大小同 n 的变化不敏感. 如: 对于不同 n 的 s 壳层, 光子能量为 50keV 的时候, σ_M/σ_D 均约为 1.04; 光子能量为 100keV 时, σ_M/σ_D 均约为 1.16, 多极效应的影响约为 16%, 此时应当考虑其影响; 光子能量为 500keV 的时候, σ_M/σ_D 已达到 2.97. 可见

在高能区, 多极效应的影响不可忽视. 另外多极效应的影响对 n 的依赖很弱, 不同 n 的 s 壳层, 相同能量 σ_M/σ_D 相差不超过 1%.

表 3 为不同能量、不同 l , σ_M 数据和 σ_M/σ_D 的值. 表 3 的数据显示: 相同的 n , 不同的 l , 相同的光子能量时, 多极效应的影响很不一样. 如: 光子能量为 500keV 的时候, s, p, d, f 壳层, σ_M/σ_D 分别约为 2.97, 4.82, 9.84, 27.51. 多极效应的影响随 l 的增大而增大. 分别综合整理表 3 和表 4 中的 p, d, f 壳层数据, 同样发现有类似的规律. 即多极效应定性地说只和光子能量和 l 有关, 而和 n 无关. 这条经验性的结论对多极效应的估算是有帮助的. 如果它是普遍成立的话, 我们仅需要挑选少数几个典型子壳层进行多极计算并结合相对论偶极近似的计算结果便可推算出不同 n , 不同 l 的多极计算的数据.

表 2 不同能量, 不同 n , σ_M 数据和 σ_M/σ_D 的比值

$h\nu/\text{keV}$	$2S_{1/2}$		$3S_{1/2}$		$4S_{1/2}$		$6S_{1/2}$	
	σ_M/bar	σ_M/σ_D	σ_M/bar	σ_M/σ_D	σ_M/bar	σ_M/σ_D	σ_M/bar	σ_M/σ_D
50	4.14×10^2	1.03	1.19×10^2	1.04	4.90×10^1	1.04	1.40×10^1	1.04
60	2.74×10^2	1.05	7.82×10^1	1.06	3.20×10^1	1.06	9.15	1.07
100	8.21×10^1	1.15	2.31×10^1	1.16	9.41	1.17	2.68	1.17
200	1.47×10^1	1.5	4.13	1.51	1.68	1.52	4.79×10^{-1}	1.52
300	5.34	1.94	1.51	1.95	6.14×10^{-1}	1.96	1.75×10^{-1}	1.96
400	2.65	2.45	7.48×10^{-1}	2.45	3.05×10^{-1}	2.46	8.69×10^{-2}	2.46
500	1.57	2.97	4.43×10^{-1}	2.97	1.81×10^{-1}	2.97	5.14×10^{-2}	2.97

表 3 $n=5$ 不同 l , σ_M 数据和 σ_M/σ_D 的比值

$h\nu/\text{keV}$	$5S_{1/2}$		$5P_{1/2}$		$5D_{3/2}$		$5F_{5/2}$	
	σ_M/bar	σ_M/σ_D	σ_M/bar	σ_M/σ_D	σ_M/bar	σ_M/σ_D	σ_M/bar	σ_M/σ_D
50	2.46×10^1	1.04	1.77×10^1	1.17	2.80	1.45	2.32×10^{-1}	1.93
60	1.61×10^1	1.06	1.08×10^1	1.21	1.45	1.57	1.03×10^{-1}	2.18
100	4.71	1.17	2.61	1.42	2.24×10^{-1}	2.07	1.06×10^{-2}	3.38
200	8.42×10^{-1}	1.52	3.68×10^{-1}	2.04	1.79×10^{-2}	3.59	5.19×10^{-4}	7.76
300	3.07×10^{-1}	1.96	1.19×10^{-1}	2.81	4.34×10^{-3}	5.41	9.93×10^{-5}	13.6
400	1.53×10^{-1}	2.46	5.53×10^{-2}	3.74	1.66×10^{-3}	7.49	3.27×10^{-5}	20.06
500	9.03×10^{-2}	2.97	3.11×10^{-2}	4.82	8.18×10^{-4}	9.84	1.47×10^{-5}	27.51

表 4 $2P_{1/2}, 3P_{1/2}, 3D_{3/2}, 4F_{5/2}$ 的 σ_M 数据和 σ_M/σ_D 的比值

$h\nu/\text{keV}$	$2P_{1/2}$		$3P_{1/2}$		$3D_{3/2}$		$4F_{5/2}$	
	σ_M/bar	σ_M/σ_D	σ_M/bar	σ_M/σ_D	σ_M/bar	σ_M/σ_D	σ_M/bar	σ_M/σ_D
50	3.36×10^2	1.17	8.80×10^1	1.17	9.98	1.49	3.03×10^{-1}	1.96
60	1.97×10^2	1.23	5.33×10^1	1.21	5.02	1.61	1.32×10^{-1}	2.21
100	4.37×10^1	1.45	1.26×10^1	1.43	7.25×10^{-1}	2.13	1.31×10^{-2}	3.43
200	5.65	2.11	1.73	2.06	5.48×10^{-2}	3.72	6.27×10^{-4}	7.92
300	1.78	2.92	5.58×10^{-1}	2.85	1.30×10^{-2}	5.61	1.19×10^{-4}	13.86
400	8.08×10^{-1}	3.90	2.57×10^{-1}	3.79	4.92×10^{-3}	7.76	3.90×10^{-5}	20.52
500	4.50×10^{-1}	5.05	1.44×10^{-1}	4.89	2.41×10^{-3}	10.18	1.70×10^{-5}	27.41

上述的这条经验性规律,我们可以这样去理解.我们知道,光电离截面的大小正比于矩阵元 $\langle \psi_i | \mathbf{p} \cdot \mathbf{e} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | \psi_f \rangle$ 的平方. ψ_i 是体系的初态波函数, ψ_f 是体系的末态波函数.当 $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \approx 1$ 时,偶极近似才能成立.这里 k 是光的波矢量, r 是原子半径.当光子能量很大的时候,偶极近似失效, $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$ 不再近似地取为 1,一般说,

$$e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = 1 + i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \frac{1}{2}(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})^2 + \dots \quad (6)$$

当光子能量越大的时候,需要考虑的多极效应就越多,所以多极效应随光子能量增加而增加.当多极效应重要的时候,光子能量很大,远远大于由于初态 n 的不同导致的能量差别.所以当光子能量一定的时候, l 相同, n 的不同,即初态的能量不同,多极效应基本一致.而 n 相同, l 不同导致矩阵元 $\langle \psi_i | \mathbf{p} \cdot \mathbf{e} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} | \psi_f \rangle$ 角度部分的差异会使得多极效应的大小明显地依赖于 l .

表 2、表 3、表 4 的数据还表明:相同能量,相同 l, m 越大,光电离截面越小; l 越大,光电离截面越小. σ_M/σ_D 的比值越大.在阈值附近,多极效应的影响几乎为 0.随着光子能量的增大,多极效应的影响也随之增加.如果我们关心的是阈值附近的辐射复合截面和辐射复合速率系数,即便是 Bi⁸⁰⁺ 这样的高 Z 体系,只考虑偶极效应就足够了.但对高能电子复合或高能光子电离,则必须考虑多极效应.

3.3. 辐射复合速率系数的计算

3.3.1. 单温 Maxwell 分布辐射复合速率系数的计算

算得辐射复合截面以后,如计算方法所述,通过积分 $v\bar{\sigma} = \int v\bar{\sigma} f(v) dv$,便能得到辐射复合速率系数.假设电子的速率分布函数为 Maxwell 分布:

$$f(v) = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} e^{-mv^2/2kT} v^2. \quad (7)$$

我们取 kT 的变化范围从 10^{-4} eV—11.66eV, n 的变化范围从 $n = 2$ 到 $n = 200$. n 小于 5 辐射复合截面使用 $\bar{\sigma}_D$ 的值, n 大于、等于 5,辐射复合截面使用 $\bar{\sigma}_{Kramers}$ 的值.需要注意的是当 $n = 2$ 时,对于 2s 壳层的辐射复合截面要乘系数 0.5,而其他的壳层的辐射复合截面直接相加即可,因为 Bi⁸⁰⁺ 外面只有三个电子.

从图 2、3 的数据,可以看到这样的规律:各个壳层的速率系数均随电子温度的提高而减小,当 kT 较小时,速率系数的变化较为剧烈. kT 较大时,

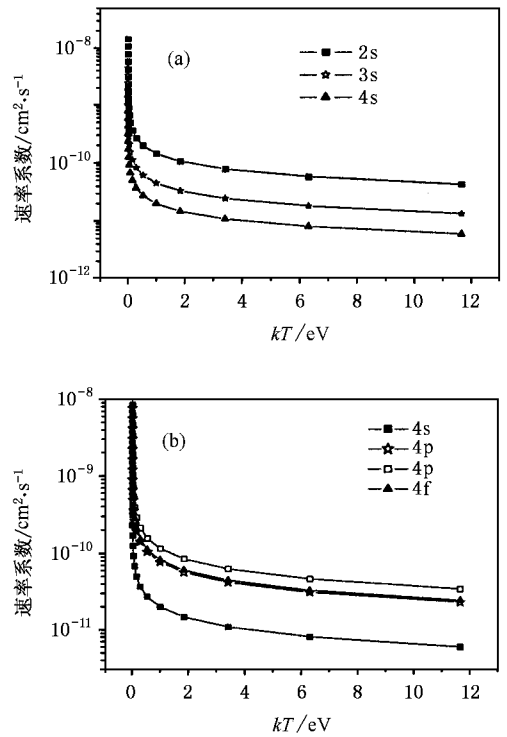


图 2 不同壳层速率系数随电子温度的变化

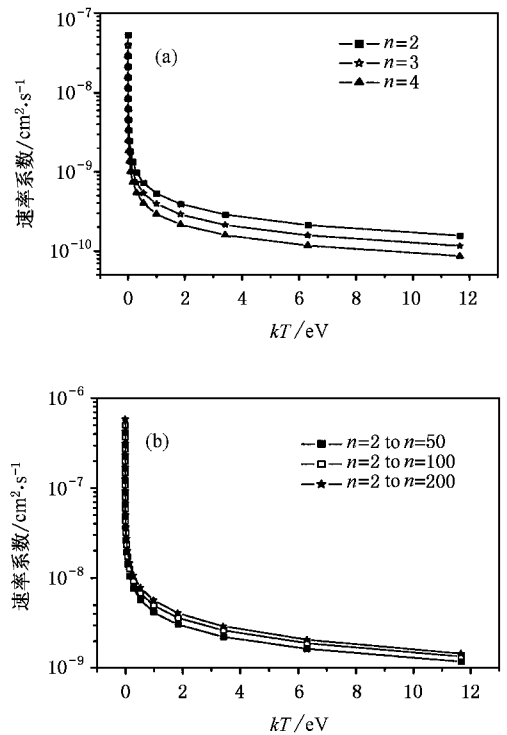


图 3 不同 n 以及总的速率系数随电子温度的变化

自由电子的高能成分相对较大,而高能电子的辐射复合截面较小,造成了整体速率系数的减小.对速

率系数贡献较大的部分,主要还是集中在 n 较小的壳层. 对于相同 l , 不同 n 的情形, 速率系数随 n 的增大而减小. 对于相同 n , 不同 l 的情形, d 壳层的速率最大. 这可能是因为以下原因造成的. 在计算 s 壳层的辐射复合截面时, 我们要考虑 $s_{1/2}-p_{1/2}$ 通道和 $s_{1/2}-p_{3/2}$ 通道两种跃迁, 对于 p 壳层, 要考虑 $p_{1/2}-s_{1/2}$ 通道等 5 种跃迁, 而对于 d, f 等壳层, 要考虑 6 种跃迁, 所以 d 和 f 壳层的速率系数要比 s 和 p 壳层的大. 由于 d 壳层的 l 比 f 壳层的 l 小, 所以 d 壳层的速率系数比 f 壳层的大.

3.3.2. 双温 Maxwell 分布辐射复合速率系数的计算
低能区高精度的储存环实验中, 常常使用双温的 Maxwell 分布模拟电子的速度分布. 假设电子的

速度分布函数为(4)式, 辐射复合的速率系数为

$$\bar{\sigma} = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_0^{+\infty} 2\pi v_y \sum_n \bar{\sigma}(0.5 \times m \times (v_y^2 + v_x^2)) \times \sqrt{v_y^2 + v_x^2} f(v) dv_y dv_x, \quad (8)$$

这里, n 的求和取值范围均为 2 到 140, 具体的求和范围取决于具体的实验条件. 同样当 $n=2$ 时, 对于 $2s$ 壳层的辐射复合截面要乘 0.5, 而其他的壳层都是直接相加即可. n 小于 5, 辐射复合截面使用 $\bar{\sigma}_D$ 的值, n 大于、等于 5, 辐射复合截面使用 $\bar{\sigma}_{Kramers}$ 的值. 我们取电子与离子的相对动能 $\frac{1}{2} m \Delta^2$ 的范围为 $10^{-5} \text{ eV} - 10 \text{ eV}$.

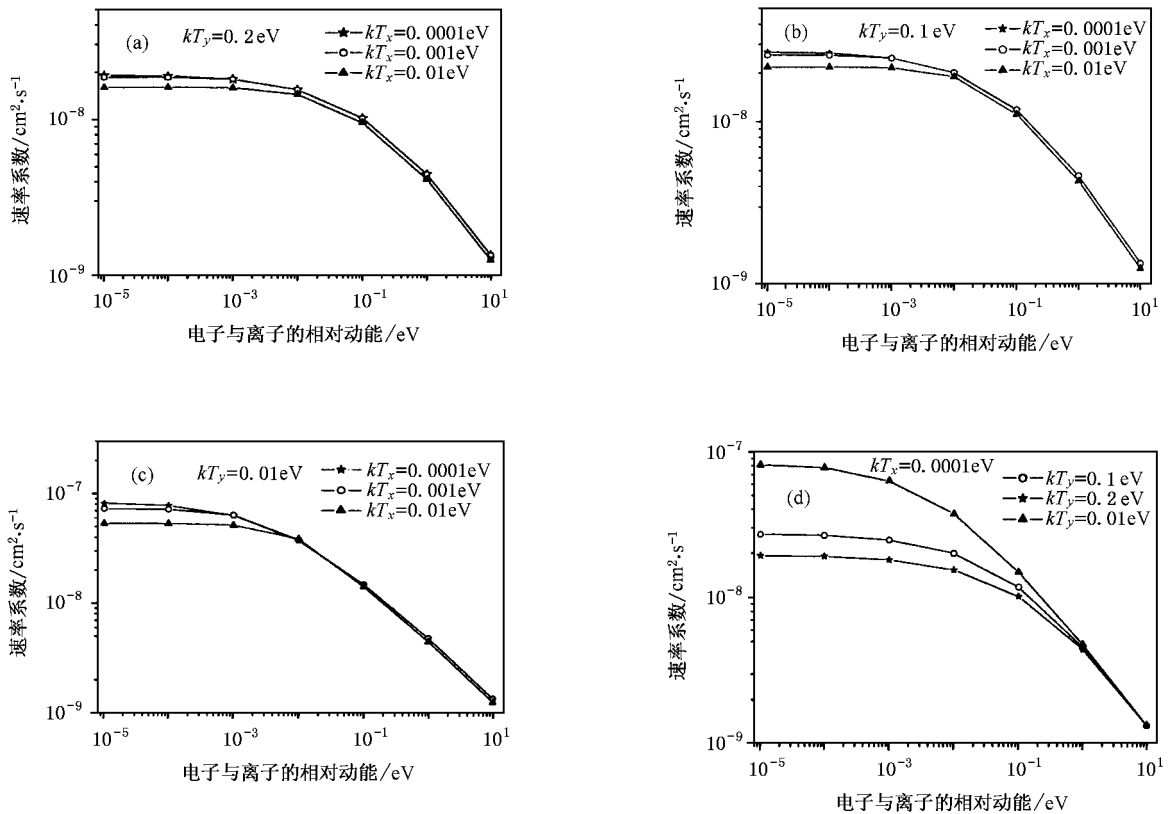


图 4 不同电子温度时, 总的速率系数随电子离子相对动能的变化

图 4 给出刻画自由电子分布的两种温度 kT_x 和 kT_y 对总的速率系数的影响. 当相对能量较高的时候, 温度对速率系数的影响很小. 当相对能量很低的时候, kT_y 对速率系数的影响很显著, 而 kT_x 对其影响不明显. 比如: $kT_x = 0.0001 \text{ eV}$, $kT_y = 0.01 \text{ eV}$ 相对能量为: 10^{-5} eV 时, 速率系数为: $7.6 \times 10^{-8} \text{ cm}^2/\text{s}$, $kT_x = 0.0001 \text{ eV}$, $kT_y = 0.1 \text{ eV}$, 相对能量为: 10^{-5} eV

时, 速率系数为 $2.7 \times 10^{-8} \text{ cm}^2/\text{s}$. 可见由 kT_y 的不同导致的自由电子分布的不同对速率系数产生了不可忽略的影响. 从(7)式, 可以看到 kT_x 和 kT_y 对 $f(v)$ 的影响是不一样的. kT_y 发生改变时, 它对 $f(v)$ 的影响正比于 $\frac{m}{2\pi kT_y}$, 而 kT_x 发生改变时, 它对 $f(v)$ 的影响正比于 $\left(\frac{m}{2\pi kT_x}\right)^{1/2}$, 所以由于 kT_y 的不同导致的自由



电子分布的不同对总的速率系数的影响较为敏感.

3.3.3. 模拟 Bi^{80+} 辐射复合过程储存环合并束实验结果

文献 [12] 通过实验研究了 Bi^{80+} 离子在电离阈值附近的辐射复合速率系数. 研究发现: 当电子和离子的相对能量小于等于 10meV 时, 实验测得的辐射复合速率系数远远超过了理论计算的结果. 文献 [12] 里使用了 Stobbe 等人采用的非相对论量子力学计算进行理论模拟. 为了和实验结果对比, 本文取实验推定的纵向和横向温度^[12] $kT_y = 0.15\text{eV}$, $kT_x = 0.0004\text{eV}$, n 的求和取值范围为 2 到 140. n 的取值范围由具体的实验参数决定, $n_{\max} = (6.2 \times 10^8 Z^3 / E)^{1/4}$, Z 是有效核电荷数, E 是电磁场的强度^[10]. n 小于 5 辐射复合截面使用 $\bar{\sigma}_D$ 的值, n 大于、等于 5, 辐射复合截面使用 $\bar{\sigma}_{\text{Kramers}}$ 的值. 取电子离子的相对动能 $\frac{1}{2} m\Delta^2$ 的范围为: $10^{-5}\text{eV} - 10\text{eV}$.

本文的计算结果和文献 [12] 的理论计算结果基本吻合, 请参见图 5. 这是因为, 当相对能量很低的时候, 相对论的效应较小, n 小于 5 时, 所考虑的相对论修正对速率系数的影响不大. 此外, 高 n 时 Kramers 公式是个较好的近似, 所以两种理论计算符合的较好. 也就是说, 相对论效应的影响不能解释阈值附近实验测得的辐射复合速率系数远远超过了理论计算结果这一现象. 当相对能量大于 0.01eV 时, 实验结果和理论结果符合得很好. 现有的 EBIT 实验还很难实现低于 0.01eV 的相对能量, 所以现有的理论模拟可以为其实验结果定标.

在文献 [14] 中, 作者认为这种实验辐射复合增大的现象, 是由于自由电子分布的改变造成的. 离子进入电子束时, 电子会获得负的能量, 在高 Rydberg 态布居. 很低能时, 这些负能量电子的复合会对结果产生较为显著的影响. 辐射复合的速率系数 $\alpha^{\text{RR}} = \alpha^{\text{RR}}_{\text{free}} + \alpha^{\text{RR}}_{\text{bound}}$, $\alpha^{\text{RR}}_{\text{free}}$ 可以通过标准的辐射复合计算方法计算获得, $\alpha^{\text{RR}}_{\text{bound}}$ 通过观察 $\alpha^{\text{RR}}_{\text{free}}$ 和实验测量值的不同来确定. 这种唯象经验理论能对这一现象给予解释, 但是从头算的理论计算和实验符合得较好的结果尚未见报道.

在精密的辐射复合储存环合并束实验中, 本已达到平衡的自由电子(符合双温的 Maxwell 分布), 可能会由于外界环境的影响(比如: 磁场)改变其原来的速度分布. 从 3.3.2 节的讨论, 可以得知, 在相对能量很低时, 自由电子的分布状况会对速率系数

产生显著的影响. 如图 4(c) 和 4(d) 都可以产生与实验很接近的结果. 在近期, 我们希望使用从头算的计算方案考察一下, 在相对能量较低时, 外界环境对电子速度分布的影响, 以及由于电子分布的改变引起的速率系数的变化.

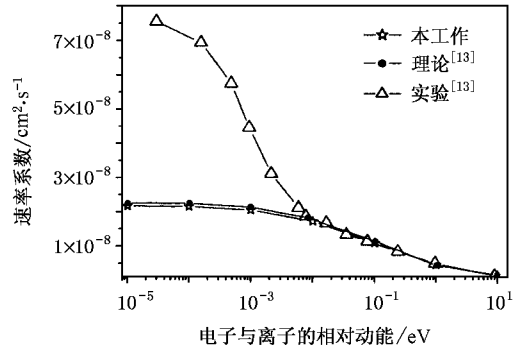


图 5 文献 [4] 给出的速率系数和本工作的理论模拟结果比较图

4. 结 论

利用 Dirac-Slater 自洽场方法, 计算了 Bi^{79+} 离子从低能到高能的光电离截面以及 Bi^{80+} 的辐射复合截面, 并考察了相对论多极效应的影响. 在阈值附近, 使用内插的方法仔细计算了 n 小于 5 的辐射复合截面, 并跟 Kramers^[7] 公式算得的结果进行比较. 结果表明: 相对论效应的大小随电子动能增加而增加, 随 n 的增加而减小. 高 n 时, Kramers 公式在低能区是个较好的近似. 定性地说, 相对论多极效应的大小同 n 无关, 只随光子能量的增大而增大, 阈值附近相对论多极效应几乎为 0. 观察还发现: 对于 s, p, d, f 壳层而言均有不同的 n , 相同光子能量时, $\bar{\sigma}_m / \bar{\sigma}_D$ 值基本相同, 多极效应随 l 增加而增加. 通过各种不同双温自由电子速度分布辐射复合速率系数的计算发现: 电子温度 kT 较小的时候, 速率系数的变化较为剧烈. 电子和离子相对能量较高的时候, 温度对速率系数的影响很小. 相对能量很低的时候, kT_y 对速率系数的影响很显著, 而 kT_x 对其影响不明显. 本文还模拟了 Bi^{80+} 辐射复合过程储存环合并束实验结果. 计算结果同文献的理论计算结果基本吻合, 即便采用全相对论计算也不能解释阈值附近实验测得的辐射复合速率系数远远超过了理论计算结果这一现象. 由于在相对能量很低时, 自由电子的分布状况会对速率系数产生显著的影响. 在不久的将来, 希望考察一下, 在相对能量较低时,

外界环境对电子速度分布的影响,以及由于电子分布的改变引起的速率系数的变化.

- [1] Cowan R D 1981 *Theory of Atomic Structure and Spectra* (Berkeley CA :University of California Press) p547
- [2] Li S C 1992 *Physics of High Temperature Radiation and the Quantum Theory of Radiation* (Beijing : Defence Industry Publishing House) p60 (in Chinese) [李世昌 1992 高温辐射物理与量子辐射理论 (国防工业出版社,北京) 第 60 页]
- [3] Hahn Y 1985 *Advances in Atomic and Molecular Physics* (New York : Academic Press) p123
- [4] Kramers H A 1923 *Philos. Mag.* **46** 836
- [5] Oppenheimer J R 1928 *Phys. Rev.* **31** 349
- [6] Stobbe M 1930 *Ann. Phys.* **7** 661
- [7] Bethe H and Salpeter E 1957 *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Systems* (Berlin : Springer)
- [8] Jörg Eichler and Akira Ichihara 2002 *Phys. Rev. A* **65** 52716
- [9] Shabaev V M , Yerokhin V A , Beier T and Eichler J 2000 *Phys. Rev. A* **61** 52112
- [10] Andersen L H , Bolko J and Kvistgaard P 1990 *Phys. Rev. Lett.* **64** 729
- [11] Hoffknecht A *et al* 2001 *Phys. Rev. A* **63** 12702
- [12] Shi W *et al* 2002 *Phys. Rev. A* **66** 22718
- [13] Andersen L H and Jakob Bolko 1990 *Phys. Rev. A* **42** 1184
- [14] Heerlein C *et al* 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 83202
- [15] Tong X M , Liu L and Li J M 1994 *Phys. Rev. A* **49** 4641
- [16] Lee C M 1978 *Phys. Rev. A* **17** 566
- [17] Lee C M and Pratt R H 1975 *Phys. Rev. A* **12** 1825
- [18] Li J M and Zhao Z X 1982 *Acta Phys. Sin.* **31** 97 (in Chinese) [李家明、赵中新 1982 物理学报 **31** 97]
- [19] Wang J G , Tong X M and Li J M 1996 *Acta Phys. Sin.* **45** 13 (in Chinese) [王建国、仝晓民、李家明 1996 物理学报 **45** 13]
- [20] Chen Zhu *et al* 1998 *Phys. Rev. A* **57** 1747
- [21] Fano U and Cooper J W 1968 *Mod. Phys.* **40** 441
- [22] Andersen L H , Pan G Y and Schmidt H T 1992 *Phys. Rev. A* **45** 7868

Radiative recombination processes of Bi^{80+} *

Zeng Si-Liang[†] Pang Jin-Qiao Li Ping Li Yue-Ming Yan Jun Wang Jian-Guo

(The Key Laboratory of Computational Physics , Institute of Applied Physics and Computational Mathematics , Beijing 100088 , China)

(Received 29 July 2004 ; revised manuscript received 13 November 2004)

Abstract

The Dirac-Slater method is used to calculate the photoionization cross sections of Bi^{79+} from low to high energy. The numerical results are compared with those calculated by the quasi-classical Kramers formula, and the validity of Kramers formula is analyzed. The relativistic effects and multipole contributions of the photoionization processes are also discussed. For the comparison with the merged-beam rate coefficients, the theoretical rate coefficients were evaluated with the experimental electron-velocity distribution function (characterized by the temperatures) parallel and perpendicular to the electron-beam direction. Though the effects of relativity are considered in the present work, the measured rate coefficients exceed our results in the energy range close to the threshold.

Keywords : multipole calculation , radiative recombination , photoionization

PACC : 3130J , 3280F

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10344001 and 10174009).

[†]E-mail : zeng_siliang@mail.iapcm.ac.cn