

溴的光电离和辐射复合*

——平均原子模型速率系数与细致组态速率系数

刘凌涛^{1,2)} 王民盛^{1,2)} 韩小英²⁾ 李家明^{1,2)}

1) 上海交通大学物理系, 上海 200030)

2) 清华大学物理系原子分子纳米科学教育部重点实验室, 北京 100084)

(2005 年 6 月 6 日收到, 2005 年 10 月 16 日收到修改稿)

根据原子自洽场理论(即 DCA), 计算了溴原子各种电离度各个壳层的 DCA 约化光电离截面. 与 AA 模型的平均电子轨道约化光电离截面进行比较, 总结出其内在规律. 在 AA 的约化光电离截面的基础上, 可以得到电离度分辨的 DCA 约化光电离截面, 进而可以得到细致组态的光电离和辐射复合速率系数. 为精密地描述非局域热动平衡(n-LTE)等离子体提供必要的基础.

关键词: 光电离, 速率系数, 平均原子模型

PACC: 5225D, 9530E

1. 引 言

高温高密等离子体辐射性质的研究是当前惯性约束核聚变(ICF)理论研究^[1-3]中一个很重要的课题. 由于适合激光聚变要求的激光强度通常是 10^{14} W/cm²— 10^{15} W/cm², 而激光脉冲宽度只有纳秒量级, 如此高的能量密度与如此短的作用时间导致了所产生的高温高密等离子体很可能是处于非局域热动平衡(n-LTE)状态. 对 n-LTE 等离子体的理论分析需要考虑等离子体中各个电离度下各种能态离子之间的各种原子反应过程, 如电子碰撞激发(逆过程: 电子碰撞退激发)、电子碰撞电离(三体复合)、辐射吸收(辐射衰减)、光电离(辐射复合)等一阶原子反应过程以及双电子复合、电子共振碰撞电离等二阶原子反应过程. 所涉及的计算量极为巨大, 因此常常采用平均原子(AA)模型^[4-8]进行简化处理. AA 模型中各种反应过程的相关参数都是与各种离子的离化度无关的, 该平均电子轨道的约化反应速率系数, 可以很好地描述等离子体中电离度丰度最大的离子的反应过程, 但对于其他丰度的离子则描述得不是很好. 这样, 基于 AA 模型得到的理论计算结果, 如等离子体

的离子布居, 就会与真实情况有所差别^[9, 10]. 因此, 有必要将 AA 模型平均电子轨道的约化反应速率系数进行进一步的校正, 得到细致组态的反应速率系数.

本文以光电离和辐射复合^[11-21]这一对反应过程为例, 探讨了如何从 AA 模型的平均电子轨道的约化速率系数校正到电离度分辨的 DCA 约化速率系数, 并最终得到平均组态层次的细致组态反应速率系数. 具体地说, 我们以溴元素为例, 分析比较了 AA 模型计算的各个壳层平均约化光电离截面与原子自洽场方法计算的对应壳层的电离度分辨的 DCA 约化光电离截面, 总结出它们之间随电离度和光子能量缓变的变化规律. 在此基础上, 对约化光电离截面提出了超越 AA 模型层次的校正方案. 接着由此计算出超越 AA 模型的电离度分辨的 DCA 约化辐射复合速率系数和约化光电离速率系数, 并进一步得到细致组态的光电离和辐射复合速率系数. 对于其他的原子反应过程, 其 DCA 约化反应截面也将有类似的随电离度和能量缓变的性质, 因此基于在一定计算量下获得的 AA 模型各种约化反应速率, 通过本文介绍的校正方案可以得到各种离化度的平均组态层次的反应速率, 而为精密描述 n-LTE 等离

* 国家自然科学基金(批准号: 10314010)、国家重点基础研究(批准号: 2001CB610508)和国家高科技 ICF 项目资助的课题.

子体建立了基础.

2. 理论方法与计算结果

当入射光子能量大于原子某一电子轨道的电离能时, 原子可以吸收光子而发射电子(称为光电子), 这就是所谓光电离过程^[11,12]. 光电子能谱一般形成数群主峰, 基本上对应于原子各个电子壳层. 这里我们不考虑光电子能谱伴峰, 它们通常是由于震激(shake up)或震离(shake off)过程而形成的^[21]. 在原子自洽场理论^[22,23]框架下, 可以很好地描述原子的壳层结构. 采用 Dirac-Slater 相对论性自洽场理论方法, 可以得到任意电离度 q 的电子壳层的轨道波函数 φ^q 、轨道能 ϵ^q 和电子共同感受到的自洽势 V^q . 各个占有壳层的电子轨道波函数 φ_l^q 满足下列波动方程(采用原子单位制, 下同):

$$h_0 \varphi_l^q = \epsilon^q \varphi_l^q, \quad (1)$$

这里 h_0 为自洽场理论下的单电子哈密顿算符,

$$h_0 = c\alpha \cdot P + \beta c^2 + V^q. \quad (2)$$

相对论性单电子波函数可写为

$$\varphi_l^q = (1/r) \begin{pmatrix} G_{n\kappa}(r) Y_{ljm}(\hat{r}) \\ i F_{n\kappa}(r) Y_{ljm}(\hat{r}) \end{pmatrix}, \quad (3)$$

下标 l 对应一组相对论量子数, 为 $n\kappa jm$ (这里 $l = j + \kappa/2 | \kappa |$); $\bar{l} = j - \kappa(2 | \kappa |)$. 它们标识原子中的电子壳层. 在光电离过程中, 原子的第 l 壳层上的电子吸收能量为 $\hbar\omega$ 的光子而电离成为光电子. 光电子能量为光子能量 $h\nu$ 减去该电离度下轨道的电离阈值 ζ_q , 即 $E_e = h\nu - \zeta_q$. 该光电子轨道波函数同样满足波动方程(1). 其电子轨道波函数可写为

$$\varphi_F^{q+1} = (1/r) \begin{pmatrix} g_{n\kappa}(r) Y_{l'j'm'}(\hat{r}) \\ i f_{n\kappa}(r) Y_{l'j'm'}(\hat{r}) \end{pmatrix}, \quad (4)$$

光电子连续单电子轨道波函数采用能量归一.

在平均组态近似下, 根据微扰论, 可用下列公式计算电离度 q , 占有壳层 l 的光电离截面

$$\sigma_{l,q}^{pi} = \frac{4\pi}{c\omega} \frac{n_l^q}{2j+1} \sum_k \sum_\beta \frac{1}{2k+1} | \langle \varphi_F^{q+1} || T_\beta^k || \varphi_l^q \rangle |^2, \quad (5)$$

其中 n_l^q 为 q 电离度 l 壳层电子占据数. 这样该壳层的 DCA 约化光电离截面定义为 $\bar{\sigma}_{l,q}^{pi} = \sigma_{l,q}^{pi} / n_l^q$, 表示该壳层上平均每一个电子的光电离截面. 同样, 根据平均原子模型理论^[4-8], 可以得到形式上与等式(3)(4)类似的一定温度密度下平均原子的占有壳层单电子波函数 φ_l^{aa} 和光电子波函数 φ_F^{aa} , 再由等式

(5) 以及约化光电离截面的定义得到该占有壳层平均原子的约化光电离截面 $\bar{\sigma}_l^{aa,pi}$. 在相对论理论处理中, 采用多极矩展开(k 为极序数, $\beta = e, m$ 分别为电极矩和磁极矩). 采用库仑规范, 其约化矩阵元可写为^[24]

$$\begin{aligned} & \langle \varphi_F^q || T_e^k || \varphi_l^q \rangle \\ &= i^k c \mathfrak{K} \left[\int g_{\epsilon\kappa} j_{k-1} F_{n\kappa} dr \right] \\ & \times [(2k-1) \mathfrak{Y}(k+1)/2]^{j^2} \\ & \times \langle \kappa' j' l' || \chi^{(k-1, \Delta 1 k)} || \kappa j \bar{l} \rangle \\ & - \left[\int g_{\epsilon\kappa} j_{k+1} F_{n\kappa} dr \right] [(2k+3)k/2]^{j^2} \\ & \times \langle \kappa' j' l' || \chi^{(k+1, \Delta 1 k)} || \kappa j \bar{l} \rangle \\ & - \left[\int f_{\epsilon\kappa} j_{k-1} G_{n\kappa} dr \right] [(2k-1) \mathfrak{Y}(k+1)/2]^{j^2} \\ & \times \langle \kappa' j' l' || \chi^{(k-1, \Delta 1 k)} || \kappa j l \rangle \\ & + \left[\int f_{\epsilon\kappa} j_{k+1} G_{n\kappa} dr \right] [(2k+3)k/2]^{j^2} \\ & \times \langle \kappa' j' l' || \chi^{(k+1, \Delta 1 k)} || \kappa j l \rangle \}, \quad (6) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \langle \varphi_F^q || T_m^k || \varphi_l^q \rangle \\ &= i^{k+1} \cdot d [(2k+1) \mathfrak{Y}/2]^{j^2} \\ & \times \mathfrak{K} \left[\int g_{\epsilon\kappa} j_k F_{n\kappa} dr \right] \langle \kappa' j' l' || \chi^{(k, \Delta 1 k)} || \kappa j \bar{l} \rangle \\ & - \left[\int g_{\epsilon\kappa} j_k G_{n\kappa} dr \right] \langle \kappa' j' l' || \chi^{(k, \Delta 1 k)} || \kappa j l \rangle. \quad (7) \end{aligned}$$

这里 $j_k(\omega r/r)$ 为球贝塞耳函数. 方程(6)和(7)中的约化矩阵元可写为

$$\begin{aligned} & \langle \kappa' j' l' || \chi^{(k, \Delta 1 k)} || \kappa j l \rangle \\ &= (-1)^j [\alpha(2j' + 1) \mathfrak{Y}(2l' + 1)] \\ & \times (2k+1) \mathfrak{Y}(2j+1) \mathfrak{Y}(2l+1)]^{j^2} \\ & \times \begin{pmatrix} l' & k' & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} l & 1/2 & j \\ k' & 1 & k \\ l' & 1/2 & j' \end{Bmatrix}. \quad (8) \end{aligned}$$

辐射复合过程是光电离过程的逆过程. 则在平均组态近似下, 两者反应截面之间满足细致平衡原理:

$$\frac{\sigma_{l,q}^{pi}}{\sigma_{q+1}^{rr}} = \frac{2c^2 E_e}{(E_e + \zeta_q)^2} \frac{g_{q+1}}{g_{l,q}}, \quad (9)$$

$g_{l,q}$ 和 g_{q+1} 分别是光电离初态和末态离子统计权重. 光电离反应初态 l 壳层上电子占据数为 n_l^q , 则统计权重之比

$$\frac{g_{q+1}}{g_{l,q}} = \frac{w_l!}{n_l^q! \cdot (w_l - n_l^q)!} \frac{(n_l^q - 1)! \cdot (w_l - n_l^q + 1)!}{w_l!}$$

$$= \frac{n_l^q}{w_l - n_l^q + 1}, \quad (10)$$

w_l 是 l 壳层的简并度, 右边分母 ($w_l - n_l^q + 1$) 为辐射复合初态(即光电离末态) l 轨道上的电子空穴数目. DCA 约化辐射复合截面定义为 $\bar{\sigma}_{q+1}^{\pi} = \sigma_{q+1}^{\pi} / (w_l - n_l^q + 1)$, 则根据(9)式, 约化辐射复合截面与约化光电离截面的关系为

$$\frac{\bar{\sigma}_{l,q}^{\pi}}{\bar{\sigma}_{q+1}^{\pi}} = \frac{2c^2 E_e}{(E_e + \zeta_q)^2}. \quad (11)$$

辐射复合的约化速率系数可以表示为电子速度与约化辐射复合反应截面的乘积的统计平均, 其中电子为随温度 T_e 的 Maxwell 分布. 因此光电离和辐射复合的约化速率系数可以表示为

$$\begin{aligned} \bar{\alpha}_{q+1}^{\pi} &= \frac{2\sqrt{2}}{\sqrt{\pi}} \frac{1}{\sqrt{T_e^3}} \bar{\beta}_{q+1}^{\pi}(T_e), \\ \bar{\alpha}_{l,q}^{\pi} &\doteq 16\pi \cdot \exp(-\zeta_q/T_e) \cdot \bar{\beta}_{q+1}^{\pi}(T_e), \\ \bar{\beta}_{q+1}^{\pi}(T_e) &= \int E_e \cdot \bar{\sigma}_{q+1}^{\pi} \cdot \exp(-E_e/T_e) dE_e \\ &= \frac{1}{2c^2} \int (E_e + \zeta_q)^2 \cdot \bar{\sigma}_{l,q}^{\pi} \\ &\quad \times \exp(-E_e/T_e) dE_e. \end{aligned} \quad (12)$$

其中 $\bar{\beta}_{q+1}^{\pi}(T_e)$ 为约化截面对电子的热力学积分, 这里假设光子和电子达到热平衡. 而总的辐射复合速率系数与光电离速率系数分别为

$$\begin{aligned} \alpha_{q+1}^{\pi} &= (w_l - n_l + 1) \times \bar{\alpha}_{q+1}^{\pi}, \\ \alpha_{l,q}^{\pi} &= n_l^q \times \bar{\alpha}_{l,q}^{\pi}. \end{aligned} \quad (13)$$

另外根据 AA 模型得到的约化光电离截面 $\bar{\sigma}_l^{\text{aa}\pi}$, 同样由(12)式可以得到对应平均原子壳层 l 的光电离和辐射复合的约化速率系数.

对于一定温度密度的等离子体, 我们可以采用 AA 模型, 计算该条件下平均原子的各个壳层的约化光电离截面 $\bar{\sigma}_l^{\text{aa}\pi}$, 对于其中各种离化态原子的占有壳层, 我们采用相对论原子自洽场方法(即 DCA), 可以计算各种电离度 q 的 DCA 约化光电离截面 $\bar{\sigma}_{l,q}^{\pi}$. 下面我们以溴元素为例, 分别具体讨论内壳层和外壳层的约化光电离截面随电离度变化的规律.

图 1 中所展示的是溴的内壳层约化光电离截面, 分别对应 1s 和 2p 轨道. 其中五角星所示为 AA 模型计算的平均约化光电离截面 $\bar{\sigma}_l^{\text{aa}\pi}$ (电子温度 $T_e = 90\text{eV}$, 离子质量密度 $\rho = 0.3\text{g/cm}^3$), 实线为相对论原子自洽场方法计算的各个电离度 DCA 的约化光电离截面 $\bar{\sigma}_{l,q}^{\pi}$. 从图 1 中可以看出, 不同电离度的内壳层的 DCA 约化光电离截面几乎彼此重合, 仅由于

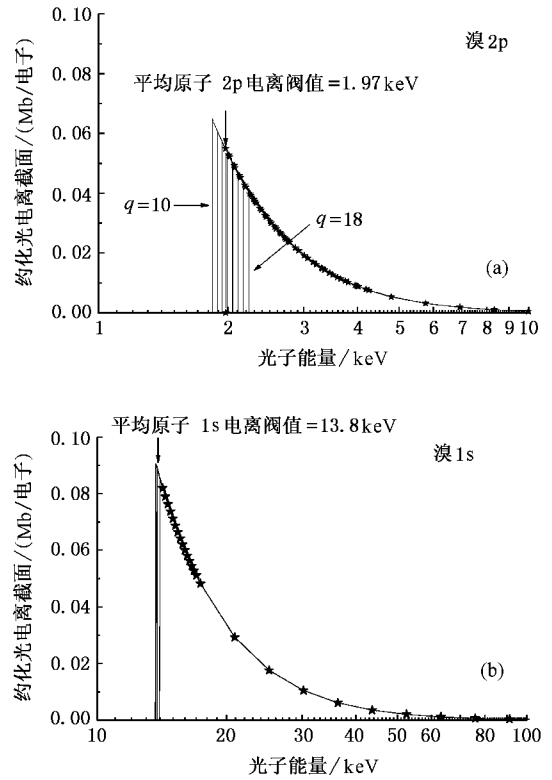


图 1 溴的内壳层约化光电离截面 (a) 为 1s 轨道 (b) 为 2p 轨道. 实线表示各电离度 DCA 约化光电离截面 $\bar{\sigma}_{l,q}^{\pi}$, 电离度范围 ($10 \leq q \leq 18$); 五角星表示相应的平均电子轨道的约化光电离截面 $\bar{\sigma}_l^{\text{aa}\pi}$ (电子温度 $T_e = 90\text{eV}$, 离子质量密度 $\rho = 0.3\text{g/cm}^3$)

电离阈值的不同, 造成各电离度的 DCA 约化光电离截面起始位置略有差异. 这是因为光电离跃迁矩阵元的主要积分区域为近核短程区域. 当电离度增加时, 最外壳层电子依次剥离, 减少的外屏蔽使得近核短程区域的原子自洽势改变一个常量. 这使得不同电离度下, 对于给定的光子能量(阈值能区除外), 内壳层束缚初态轨道波函数和连续末态轨道波函数在近核短程区域几乎维持不变. 因此外壳层电子的剥离对内壳层光电离截面不产生重要影响. 为了研究 DCA 约化光电离截面随电离度变化的规律, 我们定义了比值函数^[21]: $F_l^q = \bar{\sigma}_{l,q}^{\pi} / \bar{\sigma}_{l,0}^{\pi}$, 即某元素电离度 q 壳层 l 的 DCA 约化光电离截面 $\bar{\sigma}_{l,q}^{\pi}$ 与该元素中性原子该壳层的 DCA 约化光电离截面 $\bar{\sigma}_{l,0}^{\pi}$ 的比值. 同样地, 可以定义平均比值函数 $F_l^{\text{aa}} = \bar{\sigma}_l^{\text{aa}\pi} / \bar{\sigma}_{l,0}^{\pi}$, 即平均原子的壳层 l 的约化光电离截面 $\bar{\sigma}_l^{\text{aa}\pi}$ 与该元素中性原子该壳层的 DCA 约化光电离截面 $\bar{\sigma}_{l,0}^{\pi}$ 的比值. 根据图 1 展示的结果, 对于溴的内壳层来说, 其比值函数以及平均比值函数都是横坐标为光子能量, 纵坐标非常接近于 1 的直线. 当光子能量较大时, 由于

光电离跃迁矩阵元的主要积分区域是在近核短程区域. 理论计算的比值函数与对应初态波函数归一系数的平方比相差仅有千分之几^[24]. 根据这样的变化规律, 如果得到内壳层的平均约化光电离截面后, 只需要计算出各个电离度对应的电离阈值^[10], 就可以很方便地得到具有一定精度的不同电离度的 DCA 约化光电离截面. 特别地, 当电离阈值低于平均阈值时, 根据截面随光子能量平滑缓变的性质, 可以使用插值法求出该电离度的电离阈值与平均阈值之间能域的约化光电离截面.

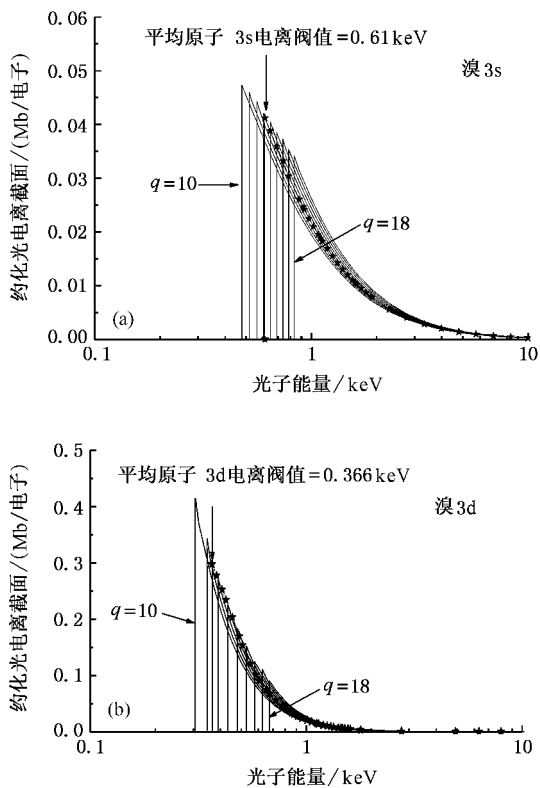


图 2 溴的外壳层电子约化光电离截面 (a) 是 3s 轨道 (b) 是 3d 轨道. 实线表示各电离度 DCA 约化光电离截面 $\bar{\sigma}_{I,q}^{PI}$, 电离度范围 ($10 \leq q \leq 18$); 五角星表示对应的平均电子轨道的约化光电离截面 $\bar{\sigma}_{I,q}^{PI}$. 电子温度 $T_e = 90\text{eV}$, 离子质量密度 $\rho = 0.3\text{g/cm}^3$

图 2 所示的是溴的外壳层电子的约化光电离截面, 分别对应 3s 和 3d 轨道. 与内壳层不同, 随着最外层电子的依次剥离, 外壳层电子感受到的屏蔽作用将会发生变化, 不同电离度的外壳层轨道波函数也将随之变化. 因此, 除了电离阈值不同外, 对应于相同光子能量, 不同电离度的 DCA 约化光电离截面不再彼此重合. 如果要从外壳层平均的约化光电离截面校正到对应不同电离度的 DCA 约化光电离截面, 除了要校正电离阈值之外, 还要利用比值函数来

校正约化光电离截面的数值.

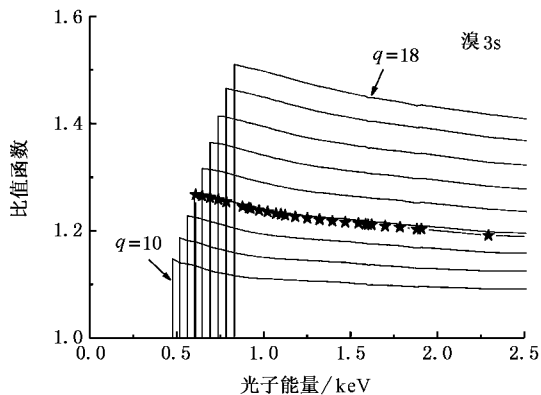


图 3 溴 3s 轨道的比值系数

下面以 3s 轨道为例, 具体说明如何进行约化光电离截面的校正. 图 3 所示为溴的 3s 轨道的比值函数. 其中实线表示各电离度的比值函数, 而五角星为平均比值函数(电子温度 $T_e = 90\text{eV}$, 离子质量密度 $\rho = 0.3\text{g/cm}^3$). 从图中可以看出, 比值函数近似为以该电离度的电离阈值为起点, 随光子能量以及电离度缓变的函数. 具体地说, 当电离度增加时, 比值函数在图上基本表现为整体向上平移, 且这种平移是平缓的. 当光子能量较大时, 理论计算的比值函数值和对应初态波函数归一系数的平方比相互符合在千分之几的精度内, 比值函数在趋向高能区域依然保持平缓变化. 根据比值函数随电离度和光子能量缓变的性质, 我们建立了一套比值函数的数据库, 包括了原子序数 $Z = 2-95$ 的各个元素各个束缚轨道 ($n \leq 10$) 的比值函数信息. 因此, 我们从平均约化光电离截面出发, 由平均比值函数可以得到中性原子的

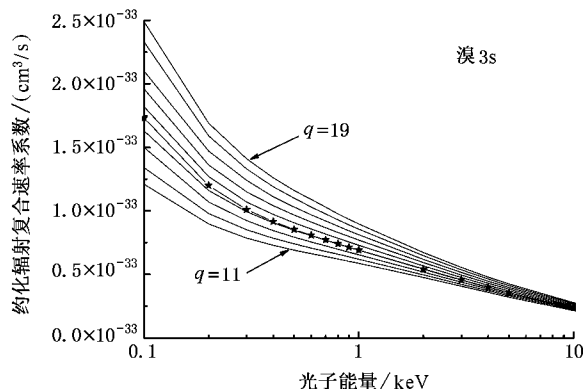


图 4 溴的 3s 电子的约化辐射复合速率系数. 细线是各电离度离子的 DCA 约化速率系数, 电离度范围 ($11 \leq q \leq 19$). 五角星为平均原子的 3s 约化速率系数(离子质量密度 $\rho = 0.3\text{g/cm}^3$)

该壳层的 DCA 约化光电离截面,再调用比值函数数据库可以得到各个电离度的 DCA 约化光电离截面.

3. 讨 论

对 n-LTE 等离子体的理论分析需要考虑等离子体中各个电离度下各种能态离子之间的各种细致原子反应过程,所涉及的计算量极为巨大,因此常常采用平均原子(AA)模型进行简化处理.在 AA 模型的处理中,各种细致组态之间反应过程被分解成对应于平均电子轨道的一个个有效的一阶反应过程,通过两个(或更多)一阶过程的组合,来等效地考虑细致组态的二阶(或高阶)原子过程^[10];而且 AA 层次的一阶反应过程,是对各个电离度下各种能态之间许多对应反应过程的统计平均的结果.相应的平均电子轨道的约化反应速率系数是与电离度无关的,不能很好地描述等离子体中各个电离度下各种组态的反应过程.而细致组态(DCA)模型的细致组态反应速率系数能够在平均组态层次比较精确地描述真实等离子体的反应过程,但受到计算量的严重制约.为了能够从实际应用的角度出发更精密地描述 n-LTE 等离子体,需要将平均电子轨道的各种约化反应速率系数进行校正,得到细致组态的反应速率系数.

本文以溴元素的光电离和辐射复合过程为例,探讨如何将 AA 的平均轨道约化速率系数校正到细致组态的速率系数.如图 1 所示,不同电离度、相同内壳层(1s 和 2p)的 DCA 约化光电离截面几乎彼此重合,仅是各自的电离阈值有所差异.因此,在对电离阈值进行校正后,AA 模型的内壳层平均约化光电离截面能够很好地描述各个电离度离子对应壳层的

光电离过程.而对于外壳层来说(如图 2 所示的 3s 和 3d),不同电离度的 DCA 约化光电离截面有所不同,但根据其比值函数随电离度以及光子能量平缓变化的规律(如图 3 所示),由平均约化光电离截面可以校正到达到一定精度要求的电离度分辨的 DCA 约化光电离截面.接下来根据(11)式,可以得到其逆过程辐射复合的 DCA 约化截面,并根据(12)式通过求截面与热电子速度的积分,得到电离度分辨的 DCA 约化辐射复合速率系数(见图 4)以及约化光电离速率系数.最后,由(13)式可以得到各种细致组态的光电离和辐射复合速率系数.需要指出的是,对于其他的一阶原子反应过程,其 DCA 约化反应截面对应的比值函数有类似的随电离度和能量缓变的性质.因此我们可以同样从 AA 模型的平均电子轨道的约化反应截面出发,来得到超越 AA 模型的该反应过程各种 DCA 约化反应截面,并进一步可以方便地得到 DCA 约化反应速率系数.在此基础上,根据各种反应过程的 DCA 模型细致组态速率系数与 AA 模型平均电子轨道约化速率系数的对应关系^[10],可以得到各个细致组态的各种反应速率系数.这就为在超越 AA 模型的层次上,计算 n-LTE 等离子体的离子布居^[9,10]提供必要的参数.

各种原子反应过程支配了 n-LTE 等离子体中离子的布居,进而决定等离子体对 X 射线的吸收和发射性质.因此对是否产生粒子数反转、X 射线在等离子体中的传播等问题的研究十分重要.本工作对于 ICF 研究中 n-LTE 等离子体的理论模拟、状态诊断以及不透明度的研究有重要意义,为更精密地描述高温高密等离子体建立重要基础.其中有关问题还需要与相关实验工作相结合,进行进一步研究.

- [1] Nuckolls J H 1982 *Phys. Today* **9** 24
- [2] Wang G C, Yuan Z S 1996 *Inertial Confinement Fusion Anhui Education Press* (in Chinese) [王淦昌、袁之尚 1996 惯性约束核聚变(安徽合肥:安徽教育出版社)]
- [3] Chang T Q 1991 *Interaction of Laser-Produced Plasmas and Laser Fusion* (Hunan Science and Technology Press) (in Chinese) [常铁强 1991 激光等离子体相互作用与激光聚变(湖南长沙:湖南科学技术出版社)]
- [4] Lax P D 1954 *Comm. Pure & Appl. Math.* **7** 159
- [5] Lee C M (Li J M), Thorsos E I 1978 *Phys. Rev. A* **17** 2073
- [6] Pei W B, Chang T Q 2000 *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer* **64** 15
- [7] Jia H X, Meng X J 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 70 (in Chinese) [贾宏祥、孟续军 2005 物理学报 **54** 70]
- [8] Meng X J, Sun Y S, Li S C 1994 *Acta Phys. Sin.* **43** 345 (in Chinese) [孟续军、孙永盛、李世昌 1994 物理学报 **43** 345]
- [9] Wang M S, Liu L T, Li J M 2005 *Chin. Phys. Lett.* **22** 1576
- [10] Wang M S, Liu L T, Han X Y, Li J M 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2371 (in Chinese) [王民盛、刘凌涛、韩小英、李家明 2006 物理学报 **55** 2371]
- [11] Fano U, Cooper J W 1968 *Rev. Mod. Phys.* **40** 441
- [12] Pratt R H, Ron A, Tseng H K 1973 *Rev. Mod. Phys.* **45** 273
- [13] Liang X L, Li J M 1985 *Acta Phys. Sin.* **34** 1479 (in Chinese) [梁晓玲、李家明 1985 物理学报 **34** 1479]

- [14] Botto D J , Pratt R H 1978 *Phys. Rev. A* **18** 580 61 032721
- [15] Reilman R F , Manson S T 1978 *Phys. Rev. A* **18** 2124 [21] Liu L , Li J M 1991 *Acta Phys. Sin.* **40** 12 1922(in Chinese) 刘磊、李家明 1991 物理学报 **40** 1922]
- [16] Tong X M , Li J M , Pratt R H 1990 *Phys. Rev. A* **42** 5348
- [17] Wu Y J , Li J M 1989 *Acta Phys. Sin.* **38** 1056(in Chinese) 巫英坚、李家明 1989 物理学报 **38** 1056]
- [18] Lan V K , Faucher P , Hibbert A , Li J M , Qu Y Z , Yan J , Chang C , Bely-Dubau F 1998 *Phys. Rev. A* **57** 21045 [22] Li J M , Zhao Z X 1981 *Acta Phys. Sin.* **30** 105(in Chinese) 李家明、赵中新 1981 物理学报 **30** 105]
- [19] Lan V K , Faucher P , Zhou H L , Hibbert A , Qu Y Z , Li J M , Dubau F B 1998 *Phys. Rev. A* **58** 3688 [23] Li J M , Zhao Z X 1982 *Acta Phys. Sin.* **31** 97(in Chinese) 李家明、赵中新 1982 物理学报 **31** 97]
- [20] Jiang Y H , Yan J , Li J M , Sun J F , Wan L D 2000 *Phys. Rev. A* [24] Li J M and Zhao Z X 1985 *Acta Phys. Sin.* **34** 1470(in Chinese) [李家明、赵中新 1985 物理学报 **34** 1470]

Photonionization and radiative recombination of Br^{*}

——Comparison of rate coefficients deduced from the average atom and detailed configuration models

Liu Ling-Tao^{1,2)} Wang Min-Sheng^{1,2)} Han Xiao-Ying²⁾ Li Jia-Ming^{1,2)}

¹⁾ Department of Physics , Shanghai Jiaotong University , Shanghai 200030 , China)

²⁾ The Key Laboratory of Atomic and Molecular NanoSciences , Ministry of Education , Department of Physics , Tsinghua University , Beijing 100084 , China)

(Received 6 June 2005 ; revised manuscript received 16 October 2005)

Abstract

For practical purposes , the ionic stage and populations of hot dense plasma are often described by the average atom(AA) model instead of the detailed average configuration accounting(DCA) model , which is more close to the reality. According to the atomic self-consistent field theory , we calculate the DCA reduced photonionization cross-sections of every subshell of Br ions in different ionic stages. Comparing these DCA reduced cross-sections with the reduced photonionization cross-section of the corresponding average electronic orbital in the AA model , we deduce the inherent rules between the reduced cross-sections. Based on the AA reduced photonionization cross-section , the DCA reduced photonionization cross-sections and detailed configuration rate coefficients of photonionization and radiative recombination can be calculated. This work is a necessary preparation for accurate description of non-local thermal equilibrium(n-LTE) plasma.

Keywords : photonionization , rate coefficient , average atom model

PACC : 5225D , 9530E

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China(Grant No. 10314010) , the State Key Development Program for Basic Research of China(Grant No. 2001CB610508) , and the National High-Tech ICF Committee of China.