

文章编号: 1001-4322(2006)08-1375-04

高 Z 等离子体中的双电子复合与电子碰撞激发*

张继彦, 郑志坚, 杨国洪, 杨家敏, 丁耀南, 韦敏习, 李 军

(中国工程物理研究院 激光聚变研究中心, 四川 绵阳 621900)

摘 要: 采用准相对论性 Hartree-Fock-Relativistic 方法与不可分辨跃迁组模型相结合, 对 Au 和 Ta 元素的类 Ni 离子的双电子复合速率, 以及 Au 元素类 Cu 离子的电子碰撞激发速率进行了计算。计算结果表明, 对于 Au 类 Ni 离子的 $3d^{10}-3d^9 4f 5f-3d^{10} 4l$ 双电子复合过程以及类 Cu 离子的 $3d^{10} 4l-3d^9 4f 5f$ 电子碰撞激发过程, 当电子温度高于 1.0 keV 时, 电子离子碰撞激发速率随电子温度增加而增加, 双电子复合速率随电子温度增加而减小, 并且电子碰撞激发对谱线辐射的贡献要比双电子复合大得多。

关键词: 金激光等离子体; 双电子复合; 电子碰撞激发; 自离化

中图分类号: O53 **文献标识码:** A

金激光等离子体冕区存在着复杂的原子物理过程, 如碰撞电离和三体复合、碰撞激发和碰撞退激发、光电离和光电复合、自电离和双电子复合以及光激发和辐射衰减等, 这些过程决定了等离子体的电离平衡及谱线辐射过程^[1]。对于高 Z 材料激光等离子体冕区的 M 带辐射, 最重要的激发态占据机制是双电子复合(DR)与电子离子直接碰撞激发(CE), 深入研究这两种原子物理过程对于实验诊断和理论模拟都具有重要意义。

自 20 世纪 40 年代以来, 对双电子复合过程的研究已取得了很大进展^[2-4], 建立了相对完善的准相对论性和全相对论性理论计算方法, 在中低 Z 元素的双电子复合过程的计算方面开展了大量工作, 获得了丰富的数据。基于 Bauche 等人的自旋-轨道劈裂跃迁组(SOSA)模型^[5], 对高 Z 元素的双电子复合过程的计算也取得了很大的成功。在电子离子碰撞激发过程方面, Perusse 等人也提出了基于自旋-轨道劈裂跃迁组模型的组态平均计算方法, 并开展了相应的研究工作^[6], 但其计算过程仍然相当复杂。

在本工作中, 采用原子结构计算程序 HFR(Hartree-Fock-Relativistic), 并结合自旋-轨道劈裂跃迁组模型, 计算了 Au 元素类 Cu 离子的 $3d^9 n l 5f$ 自离化组态以及 Ta 元素类 Cu 离子的 $3d^9 n l 4f$ 自离化组态的组态平均自离化速率和辐射跃迁几率, 给出了双电子复合速率。同时, 采用基于经典公式直接作组态平均近似处理的方法, 计算了 Au 元素类 Cu 离子的组态平均碰撞激发速率。另外, 本文还讨论了双电子复合过程与电子离子碰撞激发过程对金 M 带 $5f-3d$ 辐射跃迁的影响。

1 理论模型

在激光等离子体冕区, 谱线发射主要有两种机制: 一种是通过电子与离子的直接碰撞激发; 另一种是双电子复合。电子离子直接碰撞激发过程相对简单, 它是指一个能量足够高的入射电子与离子相碰, 入射电子损失部分动能并将离子的一个束缚电子激发到激发能级的物理过程。在这一过程中, 入射电子的动能必须大于束缚电子的激发能。双电子复合则不同, 它描述的过程是: 当一个动能为 ϵ 的入射电子与离化度为 I 的离子碰撞时, 激发该离子的一个电子, 同时失去全部动能而被离子俘获, 产生一个离化度为 $(I-1)$ 的离子的自电离态。对于处于自电离能级的谱线辐射而言, 电子直接碰撞激发布居对入射电子的初始动能要求要比双电子复合高得多。

实验和理论研究表明^[7], 对于金激光等离子体 M 带的 $5f-3d$ 辐射跃迁谱系, 谱线辐射主要有两种类型, 即共振线及其伴线。共振线的激发态布居机制相对简单, 主要是电子离子直接碰撞激发; 而伴线的激发机制则要复杂一些, 除了电子离子直接碰撞激发外, 还有双电子复合过程。

通常, 对于从自离化组态 C' 通过辐射跃迁到组态 C'' 这样一个谱线辐射过程, 如果仅考虑通过双电子复合和内壳层电子激发对处于自电离能级的双激发态的占据机制, 其辐射强度可表示为^[3]

* 收稿日期: 2005-12-12; 修订日期: 2006-05-28

基金项目: 国家自然科学基金资助课题(10275056)

作者简介: 张继彦(1971—), 男, 副研究员, 从事原子分子碰撞理论及激光等离子体研究; zhangjiyanzyj@sina.com。

$$I_{C'C} = E_{C'C} N_e \left(N_C^I R_{CC'} \frac{A_{C'C}^{I,C'}}{\Gamma_{C'}} + \sum_{C''} N_{C''}^{I-1} Q_{C''C'} \frac{A_{C''C'}^{I,C'}}{\Gamma_{C'}} \right) \quad (1)$$

式中: $E_{C'C}$ 是光子的能量; N_e 是电子密度; $R_{CC'}$ 和 $Q_{C''C'}$ 分别是由组态 C' 到组态 C 的双电子俘获速率系数和由组态 C'' 到组态 C' 内壳层电子碰撞激发激发速率系数; N_C^I 和 $N_{C''}^{I-1}$ 分别是离化度为 I 的离子基态和离化度为 $(I-1)$ 的离子的单激发组态(或基组态)的布居数密度; $\Gamma_{C'}$ 是组态 C' 的总辐射跃迁和自离化速率。

应用细致平衡原理, 双电子俘获速率系数为

$$R_{CC'} = \frac{1}{2g_C} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mkT_e} \right)^{3/2} \exp[-(E_{C'}/kT_e)] A_{C'C}^a \quad (2)$$

式中: T_e 是电子温度; $E_{C'}$ 是由双电子复合占据组态 C' 的自由电子的平均能量; $A_{C'C}^a$ 是由离化度为 $(I-1)$ 的离子组态 C' 通过自电离到离化度为 I 的离子基组态 C 的组态平均自离化速率; $g_{C'}$ 和 g_C 分别是离化度为 $(I-1)$ 的离子的自电离组态和离化度为 I 的离子基组态的统计权重。

对于电子离子直接碰撞激发, 本文采用在经典公式的基础上进行组态平均的办法进行计算。电子离子碰撞激发速率的半经验计算公式为

$$Q_{(i,j)} = 1.6 \times 10^{-5} \frac{\langle \bar{g} \rangle f_{(i,j)} N_e}{E_{(i,j)} \sqrt{T_e}} \exp\left[-\frac{E_{(i,j)}}{T_e}\right] \quad (3)$$

式中: $\langle \bar{g} \rangle$ 是 gaunt 因子; $f_{(i,j)}$ 是吸收振子强度; $E_{(i,j)}$ 是激发跃迁能。对式(3)取组态平均, 即取零级近似, 忽略一阶以上的小量。最后得到的组态平均电子离子碰撞激发速率近似为

$$Q_{(C,C')} = 1.6 \times 10^{-5} \frac{\langle \bar{g} \rangle f_{(C,C')} N_e}{E_{(C,C')} \sqrt{T_e}} \exp\left[-\frac{E_{(C,C')}}{T_e}\right] \quad (4)$$

式中: $f_{(C,C')}$ 表示组态平均振子强度; $E_{(C,C')}$ 表示组态平均单电子跃迁能。组态平均振子强度采用 Peyrusse 等人建议的理论公式^[6]进行计算, 其表达式如下:

$$f_{(C,C')} = \frac{(E_C - E_{C'}) N_\alpha (g_\beta - N_\beta)}{g_\alpha g_\beta} 2[l_\alpha, l_\beta] \begin{pmatrix} l_\beta & 1 & l_\alpha \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 P_{\alpha\beta}^2 \quad (5)$$

式中: α 和 β 表示发生电子跃迁的原子轨道; E_C 和 $E_{C'}$ 分别表示上组态和下组态的组态平均能量; N_α 和 N_β 分别表示轨道占据数; g_α 和 g_β 分别表示轨道统计权重; l_α 和 l_β 分别表示轨道角量子数; $P_{\alpha\beta}$ 表示电偶极跃迁积分。

2 计算结果

在数值计算中, 采用多组态 Dirac-Fock 程序计算次组态平均能、跃迁波长等原子参数, 并采用组态平均近似模型与准相对论的 HFR 程序相结合计算了自离化速率、辐射跃迁速率以及双电子复合伴线强度因子 F_2 。

表 1 Au 元素的双电子复合伴线计算及实验测量结果

Table 1 Theoretical calculation and experimental measurement of the dielectronic recombination of Au

C''	C'	$\lambda_{\text{exp}}/0.1 \text{ nm}$	$\lambda_{\text{cal}}/0.1 \text{ nm}$	$g_{C'} A_{C''C'}^{I,C'}/10^{14} \text{ s}^{-1}$	$g_{C'} A_{C''C'}^{I,C'}/10^{14} \text{ s}^{-1}$	$F_2/10^{14} \text{ s}^{-1}$
3d ¹⁰ 4s	3d _{3/2}^3 4s6f_{5/2}}}	3.200	3.197	1.233	7.513	0.847
3d ¹⁰ 4p	3d _{3/2}^3 4p6f_{5/2}}}	3.200	3.197	1.145	22.54	0.872
3d ¹⁰ 4d	3d _{3/2}^3 4d6f_{5/2}}}	3.200	3.197	44.74	37.59	16.34
3d ¹⁰ 4f	3d _{3/2}^3 4f6f_{5/2}}}	3.200	3.200	111.3	52.52	28.54
3d ¹⁰ 4s	3d _{5/2}^3 4s6f_{7/2}}}	3.274	3.273	1.233	7.513	1.211
3d ¹⁰ 4p	3d _{5/2}^3 4p6f_{7/2}}}	3.274	3.274	1.145	22.54	1.246
3d ¹⁰ 4d	3d _{5/2}^3 4d6f_{7/2}}}	3.274	3.274	44.74	37.59	23.35
3d ¹⁰ 4f	3d _{5/2}^3 4f6f_{7/2}}}	3.274	3.277	111.3	52.52	40.78
3d ¹⁰ 4s	3d _{3/2}^3 4s5f_{5/2}}}	3.626	3.625	2.990	14.78	1.99
3d ¹⁰ 4p	3d _{3/2}^3 4p5f_{5/2}}}	3.626	3.625	2.089	44.37	1.596
3d ¹⁰ 4d	3d _{3/2}^3 4d5f_{5/2}}}	3.626	3.625	85.78	74.00	31.78
3d ¹⁰ 4f	3d _{3/2}^3 4f5f_{5/2}}}	3.626	3.629	230.0	103.2	56.98
3d ¹⁰ 4s	3d _{5/2}^3 4s5f_{7/2}}}	3.718	3.721	2.990	14.78	2.842
3d ¹⁰ 4p	3d _{5/2}^3 4p5f_{7/2}}}	3.718	3.720	2.089	44.37	2.280
3d ¹⁰ 4d	3d _{5/2}^3 4d5f_{7/2}}}	3.718	3.722	85.78	74.00	45.40
3d ¹⁰ 4f	3d _{5/2}^3 4f5f_{7/2}}}	3.718	3.725	230.0	103.2	81.40

对 Au 元素,类 Ni 离子俘获一电子变成类 Cu 离子,根据自旋-轨道劈裂跃迁组模型(SOSA),计算了双激发自电离组态 $3d^3_{3/2}nlmf_{5/2}$ ($n=4; l$ 代表 s, p, d, f; $m=5, 6$) 与 $3d^3_{5/2}nlmf_{7/2}$ ($n=4; l$ 代表 s, p, d, f; $m=5, 6$) 的组态平均自电离速率和辐射跃迁几率,并计算出双电子复合伴线强度因子,结果见表 1。在表中,给出了 Au 元素类 Cu 离子在上组态为 $3d^9nlmf, n=4, l$ 代表 s, p, d, f 以及 $m=5$ 和 6 条件下的双电子复合过程。对于 $n \geq 5$,其伴线强度非常弱,实验无法测量,故未对其进行计算。此外,表中未给出 $3d^94s4f$ 和 $3d^94p4f$ 等组态的计算结果,这主要是因为组态平均能量未超过电离阈,属非自电离组态,其占据机制与双电子复合无关。

为了考察本计算结果的可靠性,将本文计算的 Ta 元素类 Cu 离子通过自电离组态 $3d^9nlm4f$ ($n=4, 5, 6, 7; l$ 代表 s, p, d, f) 的组态平均自电离速率及辐射跃迁几率与 Bauche 等人的计算^[2]进行了比较,结果见表 2。从表中可以看出,本文采用准相对性的 HFR 方法计算得到的自电离速率与 J. Bauche 等人采用相对论多参数势方法计算所得结果相比,偏差在 15% 以内,并且辐射跃迁几率也与之符合得相当好。

表 2 Ta 元素类 Cu 离子自电离速率系数及辐射跃迁速率系数的理论计算结果

Table 2 Theoretical calculation of ionization rates and radiative transfer rates of Cu-like Ta ion

$C'; 3d^9 4fnl$	$g^c A_{cc}^c / 10^{14} s^{-1}$ C; $3d^{10}$		$g^c A_{cc}^c / 10^{14} s^{-1}$ C''; $3d^{10} nl$		$g^c A_{cc}^c / 10^{14} s^{-1}$ C'''; $3d^{10} 4f$	
	By J. Bauche	By this work	By J. Bauche	By this work	By J. Bauche	By this work
$3d^9 4d4f$	212.0	202.0	132.0	118.0		
$3d^9 4f^2$	302.0		172.0			
$3d^9 4f5s$	4.8	5.4	26.8	24.0		
$3d^9 4f5p$	4.4	4.8	80.3	71.9	2.0	1.4
$3d^9 4f5d$	64.0	62.0	134.0	120.0		
$3d^9 4f5f$	207.0	219.0	187.0	168.0	79.0	67.0
$3d^9 4f6s$	2.5	2.8	26.9	24.1		
$3d^9 4f6p$	2.5	2.8	80.7	72.2	1.0	0.7
$3d^9 4f6d$	30.0	30.0	134.0	120.0		
$3d^9 4f6f$	101.0	106.0	188.0	168.0	41.0	34.0
$3d^9 4f7s$	1.5	1.7	26.9	24.1		
$3d^9 4f7p$	1.5	1.7	80.8	72.3	0.6	0.4
$3d^9 4f7d$	17.0	17.0	135.0	121.0		
$3d^9 4f7f$	58.0	61.0	189.0	169.0	24.0	20.0

基于组态平均近似模型,对 Au 元素类 Cu 离子的内壳层电子离子碰撞激发速率以及类 Ni 离子的双电子复合速率进行了计算,结果如图 1 所示。从图中可以看出,在 $0.3 \text{ keV} < T_e < 3.0 \text{ keV}$ 温度区间,电子离子碰撞激发速率系数随温度升高呈单调上升趋势,而双电子复合速率系数则单调下降,两者在电子温度 $T_e \approx 1.0 \text{ keV}$ 处相交。在类 Ni 与类 Cu 离子数密度相当的情况下,当 $T_e < 1.0 \text{ keV}$ 时,双电子复合在自电离能级的占据中居主导地位,当 $T_e > 1.0 \text{ keV}$ 时,电子碰撞激发速率系数对自电离能级占据的贡献更大。当 $T_e \approx 2.0 \text{ keV}$ 时,即在典型的金腔靶等离子体条件下,电子碰撞激发速率系数几乎是双电子复合速率系数的 6 倍。这表明,对于通常的高温金激光等离子体,其 M 带 5f-3d 辐射跃迁主要来自于电子碰撞激发对上能级的占据,而双电子复合的影响相对较小。

3 结 论

Au 元素类镍离子的双电子复合伴线跃迁组 $3d^{10}nl-3d^9nl4f$ 的上组态,除 $nl=4s$ 和 $4p$ 以外,其组态平均能量均已超过该离子的第一电离能,处于自电离态,因而其上能级的电子布居不仅有内壳层电子碰撞激发过程,还有双电

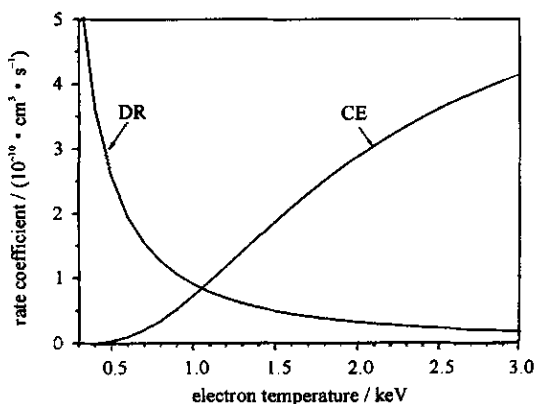


Fig. 1 Theoretically calculated configuration-averaged rate coefficients of the $3d^{10}-3d^9nl5f-3d^{10}nl$ dielectronic recombination(DR) of Ni-like Au ion and the $3d^{10}nl-3d^{10}nl5f$ electron collisional excitation(CE) of Cu-like Au ion

图 1 Au 元素类 Ni 离子的 $3d^{10}-3d^9nl5f-3d^{10}nl$ 双电子复合(DR)速率系数以及类 Cu 离子 $3d^{10}nl-3d^{10}nl5f$ 电子碰撞激发(CE)过程速率系数的组态平均模型计算结果

子复合过程。本文采用组态平均近似模型与准相对论性的多组态 Hartree-Fock 方法,计算了 Au 元素类 Cu 离子通过自电离组态 $3d^9 nl5f$ 的组态平均双电子复合速率,以及 Ta 元素通过自电离组态 $3d^9 nl4f$ 的双电子复合速率。与 J. Bauche 等人采用的相对论多参数势方法相比,本文采用的准相对论 Hartree-Fock 方法结合组态平均近似模型的计算方法在具有计算简便和速度快等优点的情况下,还具有相当高的精度,本文的计算结果与 J. Bauche 计算结果的相对偏差在 15% 以内。

本文还采用在经典电子碰撞激发速率公式基础上取组态平均的方法,计算了 Au 元素类 Cu 离子 $3d^{10} nl-3d^9 nl5f$ 跃迁的碰撞激发速率,并与通过 $3d^9 nl5f$ 组态的双电子复合速率进行了比较。结果表明,当电子温度 T_e 高于 1.0 keV 时,电子离子碰撞激发速率随电子温度增加而增加,双电子复合速率随电子温度增加而减小。最后,本文讨论了这两种原子物理过程对金激光等离子体冕区离化平衡与谱线发射的影响,初步结果表明,当金激光等离子体电子温度高于 1.0 keV 时,对实验中我们观察到的类 Ni 离子的伴线跃迁系 $3d^{10} nl-3d^9 nl5f$ 和 $3d^{10} nl-3d^9 nl6f$,电子离子碰撞激发过程对上能级电子布居的贡献更大。

参考文献:

- [1] Foord M E, Glenzer S H, Thoe R S, et al. Accurate determination of the charge state distribution in a well characterized highly ionized Au plasma[J]. *J Quant Spectrosc and Radiative Transfer*, 2000, **65**:231-241.
- [2] Bauche-Arnoult C, Bauche J, Klapisch M, et al. Dielectronic recombination process in laser-produced tantalum plasmas[J]. *Phys Rev A*, 1989, **39**:1053-1065.
- [3] Mandelbaum P, Mitnik D, Behar E, et al. Excitation-autoionization, dielectronic recombination and line intensities in highly ionized Cu-like ions[J]. *J Quant Spectrosc Radiative Transfer*, 1995, **54**(1/2): 261-269.
- [4] Oreg J, Goldstein W H, Klapisch M, et al. Autoionization and radiationless electron capture in complex spectra[J]. *Phys Rev A*, 1991, **44**(3):1750-1758.
- [5] Bauche-Arnoult C, Bauche J, Klapisch M. Variance of distributions of energy levels and of the transition arrays in atomic spectra. III: Case of spin-orbit-split arrays[J]. *Phys Rev A*, 1985, **31**(4): 2248-2259.
- [6] Peyrusse O. Atomic configuration averages and non-local thermodynamical equilibrium plasma spectroscopy calculations[J]. *J Phys B: At Mol Phys*, 1999, **32**:683-700.
- [7] Bauche-Arnoult C, Luc-Koenig E, Wyart J F, et al. Interpretation of the spectra of a laser-irradiated Au plasma in the 3~4 keV range[J]. *Phys Rev A*, 1986, **33**:791-793.

Dielectronic recombination and electron collisional excitation in high-Z plasmas

ZHANG Ji-yan, ZHENG Zhi-jian, YANG Guo-hong, YANG Jia-min,

DING Yao-nan, WEI Min-xi, LI Jun

(Research Center of Laser Fusion, CAEP, P. O. Box 919-986, Mianyang 621900, China)

Abstract: In this paper, the quasi-relativistic Hartree-Fock-Relativistic atomic structure code and the unresolved transition array model were used to calculate the dielectronic recombination rate and the electron-ion collisional excitation rate of two high-Z elements: Au and Ta. The calculated results show that for $3d^{10}-3d^9 4l5f-3d^{10} 4l$ dielectronic recombination of Ni-like gold ion and $3d^{10} 4l-3d^9 4l5f$ electron collisional excitation of Cu-like gold ion, the dielectronic recombination rates tend to rise and the collisional excitation rates tend to fall when electron temperature increases. Furthermore, electron collisional excitation contributes more to the line emission of $5f-3d$ transition than dielectronic recombination.

Key words: Laser-produced gold plasma; Dielectronic recombination; Collisional excitation; Autoionization