

文章编号: 1001- 4322(1999)04- 0455- 06

高离化金和铅离子双电子复合速率研究*

陈 波^{1,2}, 郑志坚¹, 朱正和³

(1. 中科院核物理与化学研究所, 高温高密度等离子体物理重点实验室, 成都 525 信箱 77 分箱, 610003)

(2. 四川大学原子核科学技术研究所, 教育部辐射物理技术开放研究实验室, 成都 610064)

(3. 四川大学高温高压与原子分子物理研究所, 成都 610065)

摘 要 基于多组态准相对论自洽场方法和扭曲波方法, 理论研究了类铍金和铅离子三类双电子复合过程, 计算了这些离子在电子温度 0.6~10.0 keV 范围内的双电子复合速率系数, 并讨论了它们随电子温度、复合类型及原子序数的变化。

关键词 双电子复合; Au⁷⁵⁺ 离子; Pb⁷⁸⁺ 离子

中图分类号: O562.4 **文献标识码:** A

双电子复合是电子-离子非弹性碰撞发生共振辐射复合的过程, 即离子无辐射俘获一个自由电子形成双电子共振激发态, 随之通过自发辐射衰落到单激发态的过程。通常认为, 双电子复合是高温低密度等离子体中重要的原子动力学过程, 它对建立和维持等离子体的电离平衡以及对离子激发态布居起着主导作用^[1-3]。最近的研究表明^[4,5], 在高温高密度 ICF 激光等离子体中, 双电子复合也是不可忽略的。它对等离子体状态及 X 光转换有明显影响, 使晕区电子温度和平均电离度降低, 激光-X 光转换效率提高, 并对等离子体的光谱特性也有影响。研究与 ICF 靶材料相关的重元素金和铅在高离化态下的双电子复合过程并得到其速率系数, 有助于更好地了解激光-靶耦合物理规律, 并可为惯性约束聚变研究提供所需的相关原子参数。

在高离化条件下通过实验获得双电子复合的信息是非常困难的。近年来, 随着各种新的多电荷离子源的发展, 直接测量双电子复合截面和速率系数的工作有了较大进展^[6,7], 但主要还是限于中、低 Z 离子体系。目前, 对高荷电重离子的双电子复合研究还很不完全, 无论是理论计算还是实验测量数据都比较缺乏。我们从理论上研究了类铍离子 Au⁷⁵⁺ 和 Pb⁷⁸⁺ 的双电子复合过程, 采用多组态准相对论 Hartree-Fock 方法计算了这些离子在不同电子温度下的双电子复合速率系数, 并总结了它们随电子温度、中间自电离态、复合类型以及原子序数变化的规律。

1 理论方法

对双电子复合的处理可以近似为一个两步过程。第一步, 电离度为 q 的离子 A^{q+} 与一个具有特定能量的自由电子碰撞, A^{q+} 离子中的一个束缚电子从其占据轨道 $n_i l_i$ 激发到未占满的轨道 $n_a l_a$ 上。与此同时, 该自由电子损失部分能量被 A^{q+} 离子俘获到另一个未占满轨道 $n_r l_r$ 上, 从而形成 $A^{(q-1)+}$ 离子的共振双电子激发态, 即

$$e^- + A^{q+} (n_i l_i) \leftarrow A^{(q-1)+} (n_a l_a n_r l_r) \rightarrow \quad (1)$$

第二步, 处于双激发态的离子 $A^{(q-1)+}$ 既可以发射 Auger 电子而自电离, 也可以辐射光子退激到较低的能态 ($n_b l_b n_s l_s$):

* 国家自然科学基金资助课题(合同号 19875045)
1999 年 4 月 26 日收到原稿, 1999 年 6 月 23 日收到修改稿。
陈 波, 男, 1958 年 5 月出生, 博士后, 副研究员

$$A^{(q-1)+}(n_a l_a n_r l_r)^{**} \leftarrow A^{(q-1)+}(n_a l_b n_s l_s)^* + h\nu \quad (2)$$

如果完成上述(1)和(2)两步过程,则完成了双电子复合过程。由 A^{q+} 离子的 $m(n_i l_i)$ 态俘获一个自由电子,形成 $A^{(q-1)+}$ 离子的双激发态 $j(n_a l_a n_r l_r)$,再辐射复合为非自电离 $k(n_b l_b n_s l_s)$ 态的双电子复合速率系数可以表示为^[8]

$$\alpha_{ijk}^{\text{DR}}(T_e) = \frac{4\pi^{3/2} a_0^3}{T_e^{3/2}} \frac{g_j}{g_m} e^{-E_{jm}/T_e} \frac{A_{jm}^a A_{jk}^r}{A_{jm}^a + A_{jk}^r} \quad (3)$$

式中 T_e 为电子温度; g_m 和 g_j 分别为 m 和 j 态的统计权重; $E_{jm} = E_j - E_m$ 为 j 态与 m 态的能量差; a_0 为 Bohr 半径; A_{jm}^a 和 A_{jk}^r 分别是 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' 遍及离子 A^{q+} 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。根据量子力学微扰理论, A_{jm}^a 和 A_{jk}^r 分别为

$$A_{jm}^a = \frac{2\pi}{h} \left| j \left| \frac{1}{r_{12}} \right| m \right|^2 \quad (4)$$

$$A_{jk}^r = \frac{4E_{jk}^3}{3h^4 c^3 g_j} \left| j \left| \vec{\alpha} \right| k \right|^2 \quad (5)$$

式中 h 为 Planck 常数; c 为光速; $\vec{\alpha} = -e\vec{r}$ 为电偶极矩; $|>$ 表示体系状态波函数。总的双电子复合速率系数 α^{DR} 应是对全部通道的态-态双电子复合速率系数求和

$$\alpha^{\text{DR}}(T_e) = \frac{1}{n_N} \sum_{j, k, m} n_{j, k, m}^m \alpha_{ijk}^{\text{DR}}(T_e) \quad (6)$$

其中 $n_N = \sum_{j, k, m} n_{j, k, m}^m$ 是 A^{q+} 离子的数密度。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,多组态 HFR 的结果比非相对论的 Hartree-Fock 方法或 Hartree-Fock-Slater 方法要精确得多,而计算却比完全相对论方法简单。对于自由电子连续轨道波函数,采用扭曲波方法进行计算。另外,本文采用 jj 耦合方式,以充分考虑高 Z 高荷电离子的旋-轨耦合作用。

2 计算结果与讨论

我们研究了三种类型类铍等电子离子的双电子复合过程: $\Delta n_c = 0$ (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)

$$A^{q+}(1s^2 2s^2) + e^- \rightarrow A^{(q-1)+}(1s^2 2s 2p n l)^{**} \rightarrow A^{(q-1)+}(1s^2 2s^2 n l)^* + h\nu$$

$\Delta n_c = 0$ 时,外壳层电子衰落(B类)

$$A^{q+}(1s^2 2s^2) + e^- \rightarrow A^{(q-1)+}(1s^2 2s 2p n l)^{**} \rightarrow A^{(q-1)+}(1s^2 2s 2p n l')^* + h\nu$$

$\Delta n_c = 1$ 时,内壳层电子衰落(C类)

$$A^{q+}(1s^2 2s^2) + e^- \rightarrow A^{(q-1)+}(1s^2 2s 3l n l')^{**} \rightarrow A^{(q-1)+}(1s^2 2s 2l n l')^* + h\nu$$

2.1 类铍金离子的计算结果

类铍 Au^{75+} 离子 A、B、C 三类双电子复合的总复合速率系数 α^{DR} 随电子温度 T_e 的变化在图 1 中给出。从图 1 可以看到, A 类复合的 α^{DR} 随 T_e 的增加而逐渐增大, B 类复合的 α^{DR} 则随 T_e 的增加而下降。在电子温度大约为 1.3 keV 时, A 类复合的 α^{DR} 就超过 B 类复合的 α^{DR} 。这是由于 A、B 两类复合具有相同的中间自电离态,使得 A、B 两类复合之间存在竞争。当温度较低时,电子与离子碰撞主要复合到能量较低的自电离态即 $1s^2 2s 2p n l$ 中 n 较小的轨道,而较低的

自电离态易通过 B 类复合辐射衰落, 这时 B 类复合对总的双电子复合速率系数 α^{DR} 的贡献最大。随着电子温度的升高, 电子动能增大, 此时电子与离子碰撞更多地复合到能量较高的自电离态, 即 $1s^2 2s 2p n l$ 中 n 较大的轨道。处在较高能量的自电离态更趋于由 A 类复合衰落。所以, 随电子温度的升高, A 类复合过程取代 B 类复合而占据主导地位, B 类复合的 α^{DR} 呈继续下降的趋势。随着电子温度的进一步上升, A 类复合的 α^{DR} 也随之减小, 而 C 类复合的 α^{DR} 不断增大。当温度达到 3 2keV 以后, C 类复合的 α^{DR} 值就超过 A、B 两类复合。因为在更高的电子温度下, 电子-离子碰撞应复合到更高能量的中间自电离态, 如 $1s^2 2s 3 l n l'$, 于是 C 类复合就成为主要的双电子复合过程。

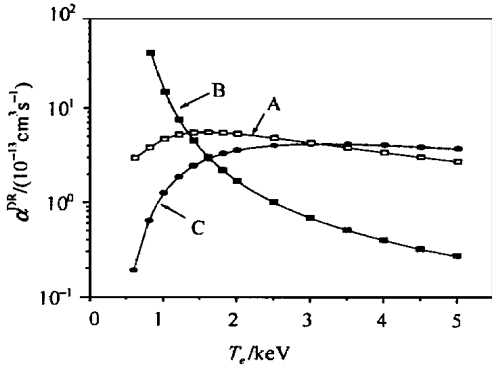


Fig 1 Total dielectronic recombination (DR) rate coefficients α^{DR} of three types for Au^{75+} ion as functions of electron temperature T_e .

图 1 Au^{75+} 离子三类双电子复合的总速率系数 α^{DR} 随电子温度 T_e 的变化

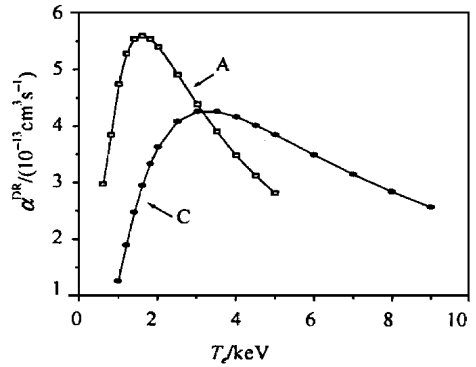


Fig 2 Total DR rate coefficients α^{DR} of type A and C for Au^{75+} ion as functions of electron temperature T_e .

图 2 Au^{75+} 离子 A、C 两类双电子复合的总速率系数 α^{DR} 随电子温度 T_e 的变化

就类铍 Au^{75+} 离子而言, 所研究的三类复合过程与电子温度密切相关。在低温段 ($T_e < 1.3 \text{ keV}$), B 类复合占优; 随电子温度的升高, 在中温段 ($1.3 < T_e < 3.2 \text{ keV}$), A 类复合起主要作用; 进入高温段后 ($T_e > 3.2 \text{ keV}$), 则以 C 类复合为主。并且当 $T_e = 1.7 \text{ keV}$ 时, C 类复合的 α^{DR} 就大于 B 类复合的 α^{DR} 。 Au^{75+} 离子的这种情况与过去研究的类铍 Ti^{18+} 离子有所不同^[9]。在 Ti^{18+} 离子双电子复合过程中, A 类复合的 α^{DR} 在所计算的温度范围内一直小于 B 类复合的 α^{DR} 。这是由于 Ti^{18+} 属于低、中 Z 离子, 在中间自电离态 $1s^2 2s 2p n l$ 所取 n 值变化范围内, 其能量差别不大。因此, 对于中、低 Z 离子, 始终是 B 类复合占优势。对于高 Z 离子, A、B 两类复合竞争的结果, 在低温阶段 B 类复合大于 A 类, 而高温部分 A 类复合超过 B 类。

图 2 给出了 Au^{75+} 离子 A 类和 C 类复合的 α^{DR} 随电子温度 T_e 变化曲线。由图可知, 对于 A 类复合, 随 T_e 的增加 α^{DR} 逐渐增大。当 $T_e = 1.6 \text{ keV}$ 时, α^{DR} 达到其峰值 $5.60 \times 10^{-13} \text{ cm}^3/\text{s}$ 。然后 α^{DR} 随 T_e 的继续升高而下降, 在 $T_e = 10.0 \text{ keV}$ 时, α^{DR} 下降至 $1.27 \times 10^{-13} \text{ cm}^3/\text{s}$ 。对于 C 类复合, 总的双电子复合速率系数 α^{DR} 在共振电子温度 $T_e = 3.5 \text{ keV}$ 时最大, 其值为 $4.26 \times 10^{-13} \text{ cm}^3/\text{s}$, 当 T_e 偏离共振温度时, α^{DR} 均下降。从图中还可看出, A 类复合的 α^{DR} 对温度变化比较敏感, 当温度偏离共振温度时, α^{DR} 迅速下降, 而 C 类复合的 α^{DR} 随 T_e 的变化较缓慢。

2.2 类铍铅离子的计算结果

在图 3 中给出了类铍离子 Pb^{78+} 的 A、B、C 三类复合的总双电子复合系数 α^{DR} 随电子温度

T_e 的变化。可以看出,在电子温度低于 2keV 时,B 类复合是主要的;当温度高于 2keV 时,C 类复合则是主要的双电子复合过程。

图 4 和图 5 分别给出了 Au^{75+} 和 Pb^{78+} 离子 A、C 两类复合的 α^{DR} 与 T_e 的关系。由图可以看到,由于 Pb^{78+} 与 Au^{75+} 离子的原子序数相差不大,它们的 α^{DR} 随 T_e 的变化规律非常相似。但在同一温度范围内, Pb^{78+} 离子的 α^{DR} 值小于 Au^{75+} 离子的值(A、C 两类均如此)。而 Pb^{78+} 离子的共振温度分别为 1.8keV (A 类复合)和 3.7keV (C 类复合),略高于 Au^{75+} 离子相应的共振温度。

图 6 反映了 Au^{75+} 和 Pb^{78+} 离子 B 类复合的 α^{DR} 随 T_e 的变化规律。与 A、C 两类不同的

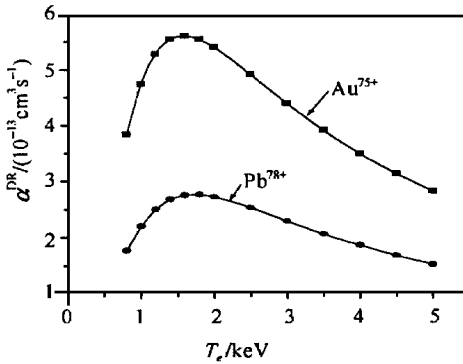


Fig 4 Comparison of total DR rate coefficients α^{DR} of type A for Au^{75+} and Pb^{78+} ions as functions of electron temperature T_e

图 4 Au^{75+} 和 Pb^{78+} 离子 A 类双电子复合总速率系数的比较

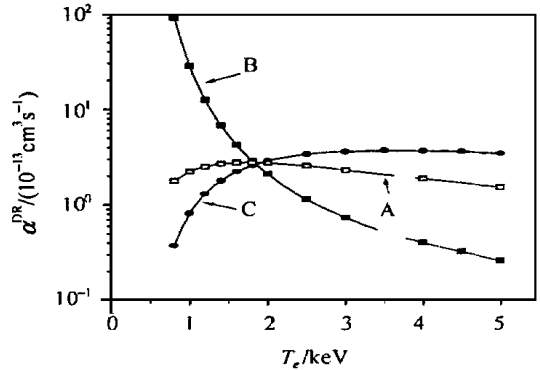


Fig 3 Total DR rate coefficients α^{DR} of three types for Be-like Pb^{78+} ion as functions of electron temperature T_e

图 3 Pb^{78+} 离子三类双电子复合的总速率系数 α^{DR} 随电子温度 T_e 的变化

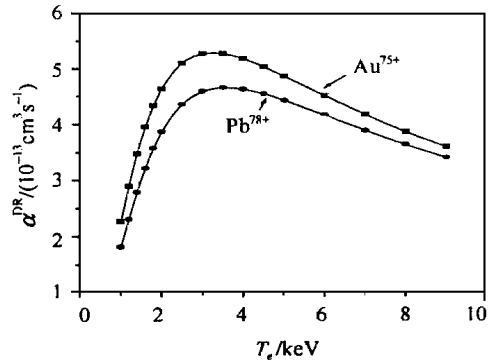


Fig 5 Comparison of total DR rate coefficients α^{DR} of type C for Au^{75+} and Pb^{78+} ions as functions of electron temperature T_e

图 5 Au^{75+} 和 Pb^{78+} 离子 C 类双电子复合总速率系数的比较

是,对于 B 类复合, Pb^{78+} 离子的 α^{DR} 值略大于 Au^{75+} 离子的值。我们知道,等电子离子具有相似的能级结构,并且随着原子序数 Z 的增大,对应的中间自电离态的能级要升高。例如,对于自电离态 $1s^2 2s 2p 14s$, Au^{75+} 和 Pb^{78+} 离子的能量分别为 86.31 和 104.54 Ry (以各自的 $1s^2 2s^2$ 为能量零点),而 Pb^{78+} 离子 $1s^2 2s 2p 11s$ 态的能量为 84.33 Ry,与 Au^{75+} 的 $1s^2 2s 2p 14s$ 的能量相当。于是,在同一温度下,即入射电子动能一定时,对等电子离子而言,重离子复合到低自电离态的几率较轻离子大一些,而较低的自电离态更易于由 B 类复合辐射衰落。所以在给定温度下, B 类复合 α^{DR} 的值沿等电子序列随着 Z 的增大而增大。

比较 Au^{75+} 和 Pb^{78+} 离子计算结果可知,对于 A、C 两类复合来说,这些离子的 α^{DR} 随电子温度 T_e 的变化均明显地表现出双电子复合的共振特性,并且沿等电子序列随原子序数 Z 的增大,双电子复合速率系数 α^{DR} 共振峰位置向高温方向移动。因为同一中间自电离态的能量随

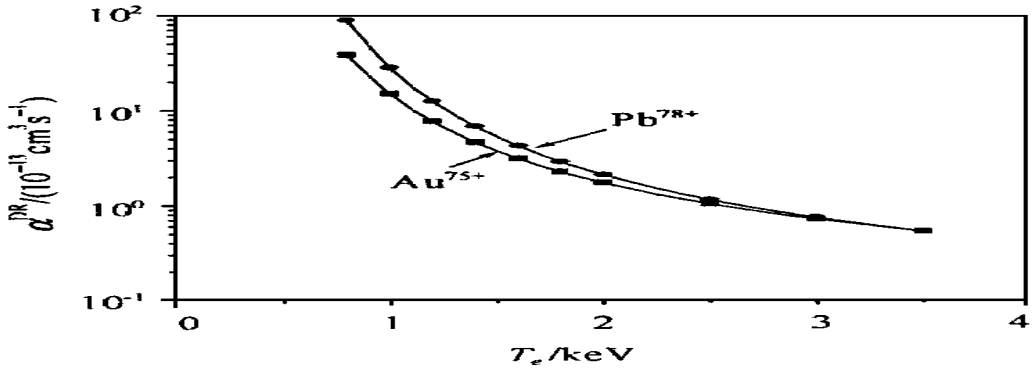


Fig 6 Comparison of total Dr rate coefficients α^{DR} of type B for Au^{75+} and Pb^{78+} ions as functions of electron temperature T_e

图 6 Au^{75+} 和 Pb^{78+} 离子 B 类双电子复合总速率系数的比较

Z 的增大而增高, 这样, 只有在更高的电子温度下, 具有更大动能的电子才能复合到更高原子序离子的相同自电离态上。所以, 双电子复合速率系数的共振温度随 Z 的增大向高温端移动。

我们还计算了 Pb^{78+} 离子 A、B 两类复合在中间自电离态不同角量子数情况下的 α^{DR} 值, 其结果列于表 1 中。从表中的数据可以看出, 偶宇称自电离态 $1s^2 2s 2p np$ 辐射衰落的双电子复合速率系数比奇宇称自电离态 $1s^2 2s 2p ns(d)$ 辐射衰落的值略大一些。但与 Ti^{18+} 离子相比^[10], 这种由于中间自电离态角量子数 l 不同所引起的双电子复合速率系数的差别, 在高原子序情况下, 已经变得很小。这表明 l 标度对于中、低 Z 离子是重要的。

Table 1 Total DR rate coefficients α^{DR} of type A and B for Pb^{78+} ion under autoionizing states with different angular number. The numbers in parentheses indicate multiplicative powers of ten

表 1 Pb^{78+} 离子 A、B 两类复合在中间自电离态不同角量子数情况下的速率系数(括号中的数值表示十的幂指数)

T_e / keV	$\alpha^{DR} / cm^3 s^{-1}$			
	A: $1s^2 2s 2p ns(d)$ $1s^2 2s^2 ns(d)$	A: $1s^2 2s 2p np$ $1s^2 2s^2 np$	B: $1s^2 2s 2p ns(d)$ $1s^2 2s 2p n \bar{p}$	B: $1s^2 2s 2p np$ $1s^2 2s 2p n \bar{s}(d)$
0.8	6.6794(-14)	1.1065(-13)	3.9915(-12)	4.8292(-12)
1.0	8.3387(-14)	1.3633(-13)	1.2718(-12)	1.5167(-12)
1.2	9.5601(-14)	1.5468(-13)	5.6833(-13)	6.7048(-13)
1.4	1.0274(-13)	1.6487(-13)	3.1085(-13)	3.6358(-13)
1.6	1.0599(-13)	1.6900(-13)	1.9393(-13)	2.2521(-13)
1.8	1.0657(-13)	1.6902(-13)	1.3249(-13)	1.5293(-13)
2.0	1.0537(-13)	1.6641(-13)	9.6643(-14)	1.1096(-13)
3.0	8.9581(-14)	1.3957(-13)	3.4421(-14)	3.8793(-14)
4.0	7.2919(-14)	1.1281(-13)	1.8813(-14)	2.0971(-14)
5.0	5.9794(-14)	9.2103(-14)	1.2345(-14)	1.3664(-14)
6.0	4.9830(-14)	7.6531(-14)	8.9350(-15)	9.8422(-15)
7.0	4.2211(-14)	6.4694(-14)	6.8714(-15)	7.5426(-15)
8.0	3.6287(-14)	5.5525(-14)	5.5063(-15)	6.0281(-15)
9.0	3.1595(-14)	4.8286(-14)	4.5457(-15)	4.9662(-15)
10.0	2.7814(-14)	4.2466(-14)	3.8383(-15)	4.1863(-15)

3 小 结

通过对类铍 Au^{75+} 和 Pb^{78+} 离子双电子复合理论计算, 得到如下主要结论。

(1) 三类复合过程与电子温度密切相关。对于高 Z 离子, 在低温段 B 类复合占主导地位, A 类复合其次, C 类复合最弱; 但在高温段, C 类复合是主要的双电子复合过程, A 类复合居中, B 类复合为最弱的过程。 A 、 B 两类复合竞争的结果, 低温时 B 类占优, 进入高温段后, A 类复合则超过 B 类复合。

(2) A 、 C 两类复合均显示出双电子复合的共振特性, 共振温度随原子序 Z 的增大均向高温端移动, 并且 C 类复合的共振温度比 A 类复合高。 Au^{75+} 和 Pb^{78+} 离子 C 类双电子复合速率系数峰值随 Z 的增大而减小。另外, A 类复合的速率系数对温度变化较敏感, 而 C 类复合的速率系数随温度的改变比较缓慢。

参考文献

- 1 Burgess A. *Astrophys J*, 1964, **139**: 776
- 2 Seaton M J and Storey P J. in: *Atomic Processes and Applications*, ed P. G Burke and B. L. Moisewitsch. Amsterdam: North-Holland Publishing Company, 1976, 133
- 3 Hahn Y. in: *Advances in Atomic and Molecular Physics*, Vol 21, ed D. R. Bate and B. Bederson. New York: Academic Press, 1985, 123
- 4 古培俊, 王建国, 常铁强. *强激光与粒子束*, 1999, **11**(1): 78
- 5 Glenger S H et al. *Phys Rev Lett*, 1999, **82**(1): 97
- 6 Schennach S et al. *J Phys D*, 1994, **30**: 291
- 7 Dewitt D R et al. *J Phys B*, 1995, **28**: L147
- 8 Cowan D R. *The Theory of Atomic Structure and Spectra*. Berkely: University of California Press, 1981
- 9 陈 波, 朱正和. *原子与分子物理学报*, 1998, 增刊: 190
- 10 陈 波, 朱正和, 郑志坚. *原子与分子物理学报*, (待发表)

D IELECTRONIC RECOMBINATION FOR Be-LIKE GOLD AND LEAD IONS

CHEN Bo^{1,2}, ZHEN G Zhi-jian¹, ZHU Zheng-he³

1. *Laboratory for Laser Fusion, Institute of Nuclear Physics and Chemistry,
CAEP, P. O. Box 525-77, Chengdu, 610003*

2. *Institute of Nuclear Science and Technology, Sichuan University, Chengdu, 610064*

3. *Institute of Atomic Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu, 610065*

ABSTRACT: Three types of dielectronic recombination process for Be-like ions Au^{75+} and Pb^{78+} are investigated. Based on multiconfiguration Hartree-Fock-Relativistic and distorted wave approaches, total dielectronic recombination rate coefficients are calculated at electron temperature 0.6~10.0keV. Variations of the coefficients with electron temperature, recombination type and atomic number are discussed in detail.

KEY WORDS: dielectronic recombination; Au^{75+} ion; Pb^{78+} ion