

类氦等电子系列离子的双电子 复合速率系数

滕华国 龚尚庆 徐至展

(中国科学院上海光机所, 上海 201800)

提要 给出了一套计算类氦等电子数系列离子双电子复合速率系数的解析公式,这套公式能快速、准确地给出类氦离子从 B^{3+} 到 Xe^{52+} 、电子温度在 0.1 keV 到 70 keV 范围内各离子的双电子复合速率系数。作为一个例子,计算了类氦硅离子双电子复合速率系数,并与 Karim 等人的理论从头计算的结果作了比较,二者十分一致。

关键词 类氦离子,双电子复合,速率系数

1 引言

最近十多年来,对双电子复合过程及其速率系数的研究一直是理论物理学家非常感兴趣的一个课题^[1,2],主要是以下两方面的原因,第一,近年来非常困难的双电子复合截面和速率系数的测量在实验上得以实现^[3~6],这使得检验理论模型的准确性和可靠性有了依据;第二,在高温等离子体模拟中,为了正确地确定能级布居,双电子复合作为一个影响能级布居的重要过程不能忽略。这就需要各种电离度下离子双电子复合速率系数数据,以前广泛使用的 Burgess 公式^[7]和 Burgess-Merts 公式^[8]已被发现是不准确的^[9]。

过去几年来,很多学者对类 He 等电子系列离子的双电子复合速率系数做了大量计算^[10~13],到目前为止,普遍认为 M. H. Chen 用相对论性多组态狄拉克-福克模型所作的计算最为准确^[14,15]。

尽管如此,双电子复合速率系数的计算是非常困难和非常耗费时间的,因为计算中要包含大量双激发的自电离态,在大量需要双电子复合速率系数的场合如高温等离子体的模拟中,理论从头计算显然是非常不适用的^[16],最好的方法就是沿着一些等电子数序列发展一套解析的计算公式,这些公式应该是建立在较为准确的理论计算的基础上,使得我们能借助于解析公式快速、准确地求出双电子复合速率系数,从而避免了用理论从头计算和进行逐个离子的计算。

本文中,我们在 M. H. Chen 用相对论性多组态狄拉克-福克模型理论从头计算的基础上,给出了类 He 等电子数序列离子从 B^{3+} 到 Xe^{52+} 、电子温度在 0.1 keV 到 70 keV 范围内双电子复合速率系数的解析公式,运用我们的公式产生的双电子复合速率系数与 H. H. Chen 的理论计算结果十分相近,一般而言,误差不超过 5%。作为一个例子,我们计算了类氦硅离子双电子

复合速率系数,并与 Karim 等人的理论从头计算的结果作了比较,二者十分一致。本文方法显著的优点是避免了繁杂的理论计算,这在聚变等离子体模拟中尤其具有重要意义。

2 理论和公式

我们使用的方法在本质上与 Roszman^[17]使用的方法相似,但是使用了不同的参数个数,另外,函数形式也略有不同。我们的方法已在文献[18]中作了详细叙述。这里只概述如下:对类 He 系列从 B^{3+} 到 Xe^{52+} 的 15 个离子,总的双电子复合速率系数^[14,15]我们用如下公式拟合

$$\alpha = \frac{1}{T^{3/2}} \sum_{i=1}^n C_i \exp(-\xi_i/T) \quad (1)$$

式中, T 是电子温度,单位是里德伯, C_i 和 ξ_i 是待定参数,方程(1)的形式与双电子复合速率系数的理论计算公式以及 Burgess 公式极其相似,这也是我们选择上述公式的一个原因。

对从类 He 离子基态到类 Li 离子态的复合,在上述温度范围内,对每一个离子,我们取 $m = 2$ 。在拟合过程中,参数 ξ_i 由一个最小化过程确定^[19],在最小化过程的每一步,系数 C_i 由线性最小二乘拟合确定。另外在上述拟合中,对 B^{3+} 到 F^{7+} 离子,我们采纳了 M. H. Chen 包含了 Coster-Kronig 效应的计算结果(更高电离度离子的 Coster-Kronig 效应可忽略)^[14]。我们编制了一个计算机程序来完成以上计算。

对 Xe^{52+} 离子的拟合与其他离子略有不同。因为 M. H. Chen 在他的计算中没有包括 Xe^{52+} 双电子复合速率系数的计算结果。幸好 Nilsen 运用与 Chen 相似的方法^[15]计算了类 He 离子从 A^{16+} 到 Xe^{52+} 八个离子的双电子复合系数,并在此基础上给出了一个解析公式。Nilsen 的计算结果与 Chen 的结果非常相近。为了包含尽可能多的类 He 离子,我们拟合了 Xe^{52+} 的计算结果。拟合分两步,首先我们用 Nilsen 给出的公式在温度范围 2.0 keV 到 70.0 keV 内计算出 Xe^{52+} 的双电子复合系数。然后,用方程(1)拟合计算得到结果,其拟合误差一般少于 4%。

为了求得类 He 离子处于 B^{4+} 和 Xe^{52+} 之间其他离子的双电子复合系数,我们使用了一个内插过程。对处于类 He 离子基态的离子,参数 ξ_i 和系数 C_i 由下面的方程确定

$$\log_{10}(C_i) = \sum_{j=1}^{15} a_{ij} [\log_{10}(z)]^{j-7} \quad (2)$$

$$\xi_i = z^2 \sum_{j=1}^8 b_{ij} z^{1-j} \quad (3)$$

上两式中, z 是初始离子的有效电荷, $z = Z - N + 1$, Z 是原子序数, N 是电子个数, a_{ij} 和 b_{ij} 是待定参数。由线性最小二乘拟合决定。

方程(2)和(3)函数形式的选择基于如下原则,函数形式尽可能简单,多项式的个数尽可能少;拟合的准确度要高。

因为双电子复合速率系数与原子序数 Z 有十分复杂的依赖关系^[2],所以公式(2), (3)的物理意义有待进一步的研究。

尽管公式(2)的待定参数较多,但这是我们找到的最为准确的函数形式。此外,与极其复杂的理论从头计算相比较,本文给出的公式仍然是简单而方便的。

这里要特别强调的是,对方程(2)和(3)的运用只限于在类 He 离子 B^{4+} 到 Xe^{52+} 之间的内插。任何外推都是错误的,因为由以上表达式可以看出,我们使用了高阶多项式,它们在拟合数据区之外是发散且无意义的,使用时应特别小心。

3 结果和讨论

如前所述,我们运用文献[2]中所述的方法拟合了 M. H. Chen 和 Nilsen 的类 He 离子双电子复合的多组态狄拉克-福克结果。系数 C_i 和参数 ξ_i 列于表 1 中。运用这些参数重新产生的双电子复合系数与原来理论计算的误差一般在 3% 之内,大多数甚至小于 1%。

Table 1 The coefficients C_i (in $10^{-13} \text{ cm}^3/\text{s}$) and parameters ξ_i for the fit of the exponential series $\alpha = T^{-3/2} \sum_{i=1}^2 C_i \exp(-\xi_i/T)$ to the directly computed DR rate coefficients by Chen and Nilsen when the initial ion is in the ground state of He-like ions

	$C_1 (10^{-13})$	ξ_1	$C_2 (10^{-13})$	ξ_2
B ³⁺	127.80912	12.136366	988.59589	14.583452
C ⁴⁺	464.38100	18.450500	2348.4228	21.860258
N ⁶⁺	1588.7268	26.184950	4161.1490	31.037421
O ⁶⁺	1210.5629	31.987827	8207.5643	40.277716
F ⁷⁺	2774.6286	41.933157	10704.933	52.031455
Ne ⁸⁺	2548.2100	49.719341	15503.910	63.663050
Mg ¹⁰⁺	7275.6534	74.200829	21234.230	94.585605
Si ¹²⁺	9597.0553	99.118810	30761.964	127.45720
Ar ¹⁸⁺	20253.163	163.58072	47093.589	212.10798
Ti ²⁰⁺	27514.529	241.46350	64476.791	307.82162
Fe ²⁴⁺	45927.656	342.48678	67049.508	448.30112
Zn ²⁸⁺	52624.210	456.44871	77287.433	594.82899
Kr ³⁴⁺	70312.419	664.76281	79739.385	882.44817
Mo ⁴⁰⁺	80704.334	912.23166	86091.775	1198.6344
Xe ⁵²⁺	70674.929	1494.6040	119715.180	1934.0385

Table 2 The coefficients of the least-squares fit to the coefficients and the parameters of the exponential fit to the directly computed DR rate coefficients when the initial ion is in the ground state of He-like ions. Where $\log_{10}(C_i) = \sum_{j=1}^{15} a_{ij} [\log_{10}(z)]^{j-1}$, $\xi_i = z^2 \sum_{j=1}^8 b_{ij} z^{1-j}$, z is the effective charge of the initial ion

	a_{1j}	b_{1j}	a_{2j}	b_{2j}
$j = 1$	-2529.1159	0.36261324	693.03829	0.41562248
$j = 2$	27246.371	19.651467	-7135.1355	30.91700
$j = 3$	-116044.87	-835.40054	29369.223	-1240.5434
$j = 4$	240082.02	17651.821	-59127.530	24559.906
$j = 5$	-195192.32	-196208.31	47103.017	-257990.70
$j = 6$	-154257.03	1175714.80	35713.189	1472544.8
$j = 7$	498749.28	-3574762.20	-113926.73	-4300044.67
$j = 8$	-415640.35	4307522.10	92544.098	5016943.35
$j = 9$	43427.308		-8060.9744	
$j = 10$	150814.70		-34176.605	
$j = 11$	-78750.491		17563.167	
$j = 12$	-19741.045		3982.5706	
$j = 13$	31634.326		-6572.5033	
$j = 14$	-11193.060		2304.2257	
$j = 15$	1384.9716		-281.7979	

表 2 中给出系数 a_{ij} 和 b_{ij} 。一般来说, 我们的拟合重新产生的 C_i 和 ξ_i 在 9% 的误差内与原来的结果吻合。除了对 C_i 的三个值误差略大, 它们分别为 17%, 27% 和 29%。用参数 a_{ij} 和 b_{ij} 产生的双电子速率系数与原来的理论结果比较, 误差一般在 5% 以内, 大多数甚至小于 2%。因此可以说就等离子体模拟而言, 这些结果是足够准确的。

在表 3 中, 我们用本文中的方程 (1) ~ (3) 及表 1, 表 2 中的参数计算了类氦硅离子双电子复合速率系数, 并与 Karim 等人^[20]的理论从头计算的结果作了比较, 从表中看出, 二者十分一致。

Table 3 A comparison of Bielectronic Recombination rate coefficients for the He-like Si ion of the present work with the results of Karim *et al.*^[20]. The units of rate coefficients are given in $10^{-13} \text{ cm}^3 \text{ s}^{-1}$

T (keV)	Present work	Karim	T (keV)	Present work	Karim
0.1	0.001	0.001	2.4	8.860	9.216
0.2	0.302	0.292	2.6	8.278	8.615
0.3	2.001	1.992	2.8	7.746	8.064
0.4	4.705	4.751	3.0	7.261	7.560
0.5	7.372	7.502	3.2	6.818	7.102
0.6	9.501	9.718	3.4	6.415	6.683
0.7	11.013	11.304	3.6	6.047	6.300
0.8	11.991	12.339	3.8	5.711	5.951
0.9	12.556	12.945	4.0	5.402	5.631
1.0	12.817	13.234	4.5	4.737	4.490
1.1	12.862	13.296	5.0	4.194	4.374
1.2	12.755	13.199	5.5	3.745	3.906
1.3	12.546	12.993	6.0	3.369	3.516
1.4	12.270	12.716	6.5	3.051	3.184
1.5	11.950	12.392	7.0	2.780	2.901
1.6	11.605	12.040	7.5	2.546	2.657
1.7	11.247	11.674	8.0	2.343	2.445
1.8	10.855	11.303	8.5	2.165	2.260
1.9	10.525	10.934	9.0	2.008	2.097
2.0	10.171	10.569	9.5	1.870	1.953
2.2	9.492	9.869	10.0	1.746	1.823

目前的工作对低密度等离子体 ($n_e < 10^{18} \text{ cm}^{-3}$) 是适用的。已经发现, 双电子复合速率系数对外场和等离子体密度效应非常敏感^[2]。当然, 假如在理论从头计算中包括了上述效应 (在 Chen 和 Nilsen 目前的计算中没有考虑这种效应), 那么, 拟合这些数据到我们的方程是非常容易的。

参 考 文 献

- 1 J. Dubau, S. Volonte. Dielectronic recombination and its applications in astronomy. *Rep. Prog. Phys.*, 1980, **43** (2): 199
- 2 Y. Hahn, K. LaGattuta. Dielectronic recombination and related resonance processes. *Phys. Rep.*, 1988, **166**(3): 195

- 3 P. F. Dittner, S. Datz, P. D. Millet *et al.*. Dielectronic recombination measurement of P^{4+} , S^{6+} and Cl^{8+} . *Phys. Rev.*, 1986, **A33**(1) : 124
- 4 P. F. Dittner, S. Datz, P. D. Miller *et al.*. Dielectronic recombination measurement for the Li-like ions; B^{2+} , C^{3+} , N^{4+} and C^{6+} . *Phys. Rev.*, 1987, **A35**(9) : 3668
- 5 L. H. Andersen, J. Bolko, P. Kvistgaard. State-selective dielectronic recombination measurements for He- and Li-like Carbon and Oxygen ions. *Phys. Rev.*, 1990, **A41**(3) : 1293
- 6 L. H. Andersen, G-Y. Pan, H. T. Schmidt *et al.*. State-selective measurements and calculations of dielectronic recombination with Li-like N^{4+} , F^{8+} and Si^{11+} ions. *Phys. Rev.*, 1992, **A45**(9) : 6332
- 7 A. Burgess. An approximation formula for dielectronic recombination. *Astrophys J.*, 1965, **141**(3) : 1589
- 8 R. D. Cowan. The Theory of Atomic structure and Spectra. Berkeley; University of California, 1981. 562
- 9 L. J. Roszman. Dielectronic recombination rate coefficients for ions of the fluorine isoelectronic sequence. *Phys. Rev.*, 1987, **A35**(5) : 2138
- 10 I. Nasser, Y. Hahn. Dielectronic recombination rates for the He-like ions. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.*, 1983, **29**(1) : 1
- 11 M. S. Younger. Dielectronic recombination rate coefficients for highly ionized Heliumlike ions. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 1983, **29**(1) : 67
- 12 F. Bely-dubau, A. H. Gabriel, S. Volonte. Dielectronic recombination rates for He-like Fe ion. *Mon. Not. Astr. Soc.*, 1979, **189**(3) : 801
- 13 C. Bhalla, T. W. Tunnell. Theoretical partial dielectronic recombination rate coefficients for ground-state Helium-like Argon. *Phys. Lett.*, 1985, **108A**(1) : 22
- 14 M. H. Chen. Multiconfiguration Dirac-Fock calculations of dielectronic recombination coefficients for the He isoelectronic sequence. *Phys. Rev.*, 1986, **A33**(2) : 994
Effect of Coster-Kronig transition on dielectronic recombination of the He-like ions. *Phys. Rev.*, 1988, **A38**(12) : 6430
- 15 J. Nilsen. Dielectronic recombination rate coefficients for Helium-like ions. *J. Phys. B, At. Mol. Phys.*, 1986, **19**(15) : 240
- 16 Hahn Y.. Improved rate formulas for dielectronic recombination. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 1993, **49**(2) : 81
- 17 L. J. Roszman. Dielectronic recombination rates for some ions of the lithium isoelectronic sequence. *Phys. Rev.*, 1987, **A35**(5) : 2138
- 18 Huaguo Teng, Baifei Sheng, Wenqi Zhang *et al.*. Unified formulas of dielectronic recombination rate coefficients for the Li-like isoelectronic sequence. *Physica Scripta*, 1994, **49**(4) : 463
- 19 Nelder J. A., Mead R.. Improved simplex method. *Computer J.*, 1965, **7**(2) : 308
- 20 K. R. Karim, C. P. Bhalla. Dielectronic recombination rate coefficients for some selected ions in the Helium isoelectronic sequence. *Phys. Rev.*, 1989, **A39**(7) : 3548

Dielectronic Recombination Rate Coefficients for He-like Ions

Teng Huaguo Gong Shangqing Xu Zhizhan

(Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Academia Sinica, Shanghai 201800)

Abstract We derived a set of analytic rate coefficients formulas for dielectronic recombination of He-like ions. By these formulas the dielectronic recombination rate coefficients may be calculated accurately and rapidly without the necessities of doing full ab initio calculations. As an example, we have calculated the rate coefficients of He-like Si ion, and compared with the explicit calculations made by Karim *et al.*, yielding an excellent agreement.

Key words He-like ion, dielectronic recombination, rate coefficients