文章编号: 1007-4627(2013) 02-0214-06

W⁴⁴⁺离子双电子复合速率系数的理论研究

马新泽^{1,2},符彦飙¹,李麦娟¹,张国鼎¹,张义钊¹,董晨钟¹

(1. 西北师范大学物理与电子工程学院,甘肃省原子分子物理与功能材料重点实验室,甘肃 兰州 730070;2. 昌吉学院物理系,新疆 昌吉 831100)

摘要:利用全相对论组态相互作用方法,详细研究了W⁴⁴⁺离子从基组态3s²3p⁶3d¹⁰4s² 俘获一个电子形 成双激发态(3s²3p⁶3d¹⁰4s²)⁻¹nln'l'(n=4~6, n'=4~7)的双电子复合(DR)过程。通过比较不同壳层 电子激发的DR速率系数,得知4s电子激发和3d电子激发的DR速率系数分别在低温和中高温度时给 出了主要贡献,得到了主要的电子激发DR通道。在1eV~50 keV温度范围内,计算了n=4~18 的DR 速率系数,并外推到了n=100,得到总DR速率系数。比较总DR速率系数、三体复合(TBR)以及辐射 复合(RR)速率系数,结果表明DR速率系数在研究的温度范围内远大于TBR和RR速率系数,其将明 显地影响ITER等离子体的电离平衡和离化态布居。

关键词: 双电子复合; DR 速率系数; W⁴⁴⁺ 离子

中图分类号: O562.4 文献标志码: A DOI: 10.11804/NuclPhysRev.30.02.214

1 引言

双电子复合(DR)过程作为重要的电子-离子非弹 性碰撞现象之一,是实验室高温等离子体和天体等离 子体中影响等离子体电离平衡的一种很重要的原子动 力学过程。高精度的DR 截面和速率系数对于研究高 离化态热等离子体的电离平衡极其重要^[1-2]。然而, 在许多利用碰撞辐射模型对等离子体的研究中,通常 只考虑了碰撞电离、辐射复合和三体复合过程,而对 于DR 过程,由于速率系数没有合适的经验公式可利 用,同时复杂离子的DR 过程的理论计算比较复杂, 而往往未予考虑。实际上,在许多情况下,高离化态 热等离子体中的DR速率系数往往要大于辐射复合和 三体复合^[3-5]。因此,对相关高离化态离子的DR 过 程进行细致的研究是很有必要的。

在国际热核聚变实验反应堆(ITER)的设计中, 钨(W)由于其高熔点、优良的热传导性、低溅射、耐 腐蚀和对氚的低吸附等特点,可作为腔壁和偏滤器 材料。这样,W不可避免地会成为反应中飞溅等离

子体的杂质离子。在偏滤器等离子体的辐射冷却过 程中, DR 过程是高离化态W 离子辐射损失的重要 原因之一。世界上一些研究小组已经对各种离化态 的W离子的DR过程进行了一些研究^[4-28]。为清晰 起见,表1简单总结了国内外已经发表的有关W离 子 DR 过程的研究结果, 总共涉及了 21 个离化度的 W 离子。其中有14个离化杰只涉及了简单的芯激发, 对DR速率系数进行了参数拟合的只有6个。这些研 究无论从W离子离化态的覆盖面和DR 过程研究的深 度,还是便于 ITER 项目的具体应用上来看,都远远 满足不了 ITER 项目的需求。本文利用基于全相对论 组态相互作用理论的 Flexible Atomic Code(FAC)^[29] 程 序包,细致研究了W⁴⁴⁺离子在电子温度为1eV~50 keV 范围内的DR 过程。其中,考虑了内壳层激发的 贡献以及Δn=0和1的贡献,讨论了4s和3d壳层电子 激发的各主要通道对DR 速率系数的影响。最后,为 满足ITER 项目的需求以及方便实验工作者的应用, 对总 DR 速率系数进行了参数拟合。

收稿日期: 2012-09-16; 修改日期: 2012-10-07

基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10847007,91126007,11064012); 高等学校博士学科点专项科研基金资助项目(20070736001); 昌吉学院重点建设学科项目([2012]92)

作者简介:马新泽(1966-),男,新疆昌吉人,讲师,硕士研究生,从事原子结构和原子碰撞研究。

通信作者: 符彦飙, E-mail: fuyb@nwnu.edu.cn

离子	研究方法	基组态	芯激发	拟合
$W^{72+[6-7]}$	A, B, C	$1s^{2}$	$\Delta n = 1$	_
$W^{71+[8]}$	D	$1s^2 2s$	$\Delta n=0,\ 1$	—
$W^{67+} \sim \! W^{60+[9-10]}$	B, E	$2s^22p^3-3s^23p^2$	$\Delta n = 1$	—
$W^{64+[6, 11-14]}$	A, B, C	$2s^2 2p^6$	$\Delta n = 1, 2$	—
	В	$2s^2 2p^6$	$\Delta n = 1, 2$	总DR速率系数
$W^{63+[6, 15]}$	A, B, C	$2s^22p^63s$	$\Delta n = 0, 1$	_
$W^{56+[16-17]}$	В	$2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$	$\Delta n=0,\ 1,\ 2$	_
$W^{47+[18-19]}$	F	$3s^2 3p^6 3d^4_{3/2} 3d^5$	$\Delta n = 0, 1$	总DR速率系数
$W^{46+[17, 20-21]}$	В	$3s^2 3p^6 3d^{10}$	$\Delta n = 1$	总DR速率系数
$W^{45+[17]}$	В	$3p^63d^{10}4s$	$\Delta n = 1$	_
$W^{37+[22]}$	F	$3s^23p^63d^94s^24p^64d$	$\Delta n=0,\ 1,\ 2$	_
$W^{35+[23]}$	G	$4s^24p^64d^3$	$\Delta n = 0, 1$	$\Delta n = 0, 1$
$W^{29+[5]}$	F	$4p^{6}4d^{9}$	$\Delta n=0,\ 1,\ 2$	总DR速率系数
$W^{28+[24]}$	A, B, C	$4d^{10}$	$\Delta n=0,\ 1,\ 2$	—
$W^{20+[25-26]}$	Н	$4d^{10}4f^8$	$\Delta n = 0, 1$	—
	Ι	$4d^{10}4f^8$	$\Delta n=0,\ 1,\ 2$	总DR速率系数
$W^{6+[27]}$	A, C	$4f^{14}5p^6$	$\Delta n=0,\ 1,\ 2$	—
$W^{5+[28]}$	A, B, C	$4f^{14}5p^65d$	$\Delta n=0,\ 1,\ 2$	—

表1 国内外已发表的W离子DR过程的研究情况*

* A. RMBT 程序; B. HULLAC 程序; C. COWAN 程序; D. HCR 程序; E. 柏林 EBIT 实验; F. FAC 程序; G. DRACULA 程序; H. 海德堡加速器和储存环实验; I. AUTOSTRUCTURE 和 DRACULA 程序。

2 理论方法

DR 过程可以分为两步:第一步,具有一定能量的自由电子与电离度为 q的A^{q+}离子碰撞,A^{q+}离子中一个束缚电子被激发,同时自由电子被A^{q+}离子俘获,从而形成了A^{(q-1)+}离子的双电子共振激发态; 第二步,该双电子共振激发态通过发射光子而衰变成非自电离态,完成复合过程。在独立共振近似下,忽略共振结构的影响,并根据细致平衡原理,通过计算得到的相关辐射和俄歇跃迁几率,可以得到DR速率系数。相关计算公式已经在本研究小组张国鼎等^[4]的论文中详细论述。在计算中,高里德堡态电子的主壳层考虑到n = 18,然后利用 n^{-3} 的标度律外推

到 *n* = 100:

$$\alpha^{\text{DR}}(n') = \alpha^{\text{DR}}(n_{\text{s}}) \frac{\left(\frac{n'}{n_{\text{s}}}\right)^{-3} \left(\sum A^{\text{a}}(n_{\text{s}}) + \sum A^{\text{r}}(n_{\text{s}})\right)}{\left(\frac{n'}{n_{\text{s}}}\right)^{-3} \sum A^{\text{a}}(n_{\text{s}}) + \sum A^{\text{r}}(n_{\text{s}})} \times \exp\frac{(-13.6057) \left(\frac{1}{n_{\text{s}}^{2}} - \frac{1}{n'^{2}}\right)}{kT}, \quad (1)$$

其中, A^a和A^r分别表示俄歇跃迁几率和辐射跃迁几率。

辐射复合(RR)和三体复合(TBR)过程作为另外两种重要的电子-离子非弹性碰撞现象,其速率系数分别

http://www.npr.ac.cn

由如下的经验公式简单估算得到[30]:

$$\alpha^{\text{RR}} = 5.2 \times 10^{-14} \left(\frac{V_{\text{ion}}}{T_{\text{e}}}\right)^{\frac{1}{2}} Z \left[0.429 + 0.5 \ln\left(\frac{V_{\text{ion}}}{T_{\text{e}}}\right) + 0.469 \left(\frac{T_{\text{e}}}{V_{\text{ion}}}\right)^{\frac{1}{2}}\right], \quad (2)$$

$$n_{\rm e}\alpha^{\rm TBR} = 2.97 \times 10^{-27} \frac{n_{\rm e}n_{\rm Z}}{T_{\rm e}V_{\rm ion}^2 \left(4.88 + \frac{T_{\rm e}}{V_{\rm ion}}\right)} , \qquad (3)$$

其中: V_{ion} 是电离势; Z 是电荷态; n_Z 是对应离化态 离子的最外层电子数; n_e 是电子密度。

3 结果与讨论

3.1 不同壳层电子激发的DR速率系数

W⁴⁴⁺离子的基组态为3s²3p⁶3d¹⁰4s²,其DR过 程中既可以激发4s电子,也可以激发3d,3p和3s 电子。本文利用基于全相对论组态相互作用 理论的FAC程序包,对类锌W离子经过双激发 态(3s²3p⁶3d¹⁰4s²)⁻¹nln'l'(n=4~6,n'=4~7)的DR 速率系数进行了细致计算。计算中考虑了基组态的统 计权重以及辐射和俄歇衰变过程所有可能的跃迁。在 算得态-态DR速率系数后,通过对初态平均末态求和 得到了总的DR速率系数。图1给出了W⁴⁴⁺离子4s, 3d,3p和3s壳层电子激发和总DR速率系数。由图可 见,3d和4s电子激发的DR速率系数分别在高温和低 温时对总DR速率系数有重要的贡献。其中,3d电子



图 1 双激发态 $(3s^23p^63d^{10}4s^2)^{-1}nln'l'(n=4\sim6, n'=4\sim7)$ 的 DR 速率系数

激发在 *kT*_e > 100 eV 的范围内的贡献保持在 70% 左 右,4s 电子激发在 *kT*_e = 10 eV 时对总 DR 速率系数的 贡献约为90%。随着温度的升高,4s电子激发的DR 速率系数很快减小,逐渐与内壳层3*l*(3*d*,3*p*和3*s*)电 子激发的DR速率系数接近并交叉,这是因为4s电子 激发的其振能量*E*_{ij}较小,使得其DR速率系数峰值 偏向低温,而3*l*电子激发的共振能量*E*_{ij}较大,其峰 值偏向高温。由于DR速率系数正比于exp(-*E*_{ij}/*kT*_e), 随着温度的增加,4s电子激发的DR速率系数减小 得较快,而3*l*电子激发的DR速率系数减小 得较快,而3*l*电子激发的DR速率系数减小 得较快,而3*l*电子激发的DR速率系数减小 得较快,而3*l*电子激发的DR速率系数减小 得较快,而3*l*电子激发的DR速率系数随着 电子温度的升高出现交叉现象。3*p*和3*s*电子激发在 低温范围内对总DR速率系数的贡献可以忽略,高 温范围内的贡献逐渐增加。其中,3*p*电子激发在峰 值温度为1250 eV以上范围内的贡献为10%~18%, 3*s*电子激发在峰值温度为1650 eV以上范围内的贡献 为2%~5%,在总DR速率系数的计算中可以忽略。

3.2 不同芯激发的DR速率系数

由上面的分析可以得到,4s和3d电子激发对DR 速率系数的贡献最为突出,下面针对4s和3d电子激发, 进一步考察不同芯激发对DR速率系数的贡献。图2展 示了 $\Delta n = 0, 1, 2 \pi 3$ 四类芯激发的DR速率系数。由 图可见, $\Delta n = 0$ 芯激发的双激发组态为 3 $d^{10}4s^14ln'l'$,



图 2 双激发态 $(3d^{10}4s^2)^{-1}nln'l'(n = 4 \sim 6, n' = 4 \sim 7)$ 的 DR 速率系数

由于其共振能量比较低,部分在电离限附近,导致 其在1 eV $\leq kT_e \leq 13$ eV 低温范围内对总DR 速率系 数的贡献极为突出,在73% ~ 91% 之间,为低温区 域最主要的芯激发通道;之后,随着温度的升高其 贡献很快下降,在 $kT_e = 100$ eV 时的贡献约为6%, 在1000 eV 以上时的贡献可忽略。 $\Delta n = 1$ 芯激发的 双激发组态包括 $3d^94s^24ln'l'$ 和 $3d^{10}4s^15ln'l'$ 系列,在

http://www.npr.ac.cn

整个温度范围内对 DR 速率系数都有重要贡献。其 中, $3d^94s^24ln'l'$ 组态系列在 $kT_e = 1$ eV 时对总 DR 速 率系数的贡献只有 1%, 然后较快地上升; 在 $kT_e = 10$ eV 时的贡献约为10%; 在 $kT_e > 100$ eV 时的贡献 为70% 左右, 成为高温区域最主要的芯激发通道。 $3d^{10}4s^15ln'l'$ 组态系列在 $1 \text{ eV} \leq kT_e \leq 10$ eV 的低温范 围内的贡献约为 10%, 在 $10 \text{ eV} \leq kT_e \leq 1000$ eV 的中 温范围内的贡献约为 24%, 在 $kT_e > 1000$ eV 的高温时 的贡献为 25%~9%, 所以此芯激发通道在整个温度范 围内都必须予以充分考虑。 $\Delta n = 2 \pi \Delta n = 3$ 芯激发的 双激发组态 $3d^94s^25ln'l'$, $3d^{10}4s^16ln'l' \pi 3d^94s^26ln'l'$ $系列在 <math>kT_e < 1000$ eV 时的贡献可以忽略, 在 $kT_e > 1000$ eV 高温时的贡献分别为 12%, 2.5% 和 3% 左右; 在 总 DR 速率系数的计算中, $\Delta n = 3$ 的贡献可以忽略。

3.3 总DR 速率系数

通过上面的分析,在总DR速率系数的计算中, 忽略了3s电子激发,以及Δn =3的贡献;在算得态-态DR速率系数后,采用对初态平均末态求和的方法 得到总DR速率系数。高里德堡态电子的主壳层考虑 到n= 18,然后利用n⁻³的标度律外推到n = 100。图3 给出了W⁴⁴⁺离子的DR,RR和TBR速率系数的比较。 TBR速率系数的计算中,n_e代入了ITER等离子体中心 处电子密度,约为10¹⁴ cm^{-3[11]}。由图可以看出,在整



图 3 W⁴⁴⁺离子 DR, RR 和 TBR 速率系数 α^{DR} , α^{RR} 和 $n_e \alpha^{TBR}$

 n_e 为电子密度,这里取 $n_e = 10^{14}$ cm⁻³; α^{DR} 为 $n = 4 \sim 100$ 的 DR 速率系数求和。

个温度范围内,DR速率系数始终最大,将极其明显 地影响ITER等离子体的电离平衡和离化态布居。为 了方便应用,表2列出了对类锌W⁴⁴⁺离子的总DR速 率系数的拟合参数。拟合公式为

$$\alpha^{\mathrm{DR}}(kT_{\mathrm{e}}) = (kT_{\mathrm{e}})^{-3/2} \sum_{i=1}^{6} c_{i} \mathrm{e}^{-E_{i}/kT_{\mathrm{e}}}$$
, (4)

其中: *c_i*(单位: cm³/s)和*E_i*是拟合参数; *kT*e是电子 温度。当电子温度高于5 eV时,拟合值与计算值的之 间的偏差小于1%;当电子温度小于5 eV时,DR速率 系数对共振能量的具体位置极为敏感,有着很大的不 确定性,因此在使用时应当注意。

表 2 类锌 W⁴⁴⁺离子总 DR 速率系数的拟合参数

i	c_i	E_i
1	1.1569×10^{-6}	$9.0374{ imes}10^{1}$
2	7.4592×10^{-6}	7.1384×10^{2}
3	2.5384×10^{-7}	2.2324×10^{1}
4	$1.0583\! imes\!10^{-7}$	$3.8774{ imes}10^{0}$
5	2.3367×10^{-6}	$2.1982{ imes}10^2$
6	2.0007×10^{-5}	$1.9094{ imes}10^3$

4 结论

利用基于全相对论组态相互作用理论的FAC程序 包,对W44+离子在电子温度为1eV~50keV范围内 的 DR 速率系数进行了详细的计算研究。对不同电子 激发的DR过程的研究表明,4s和3d电子激发分别 在低温和高温范围内对总DR 速率系数有重要的贡 献,3s电子激发对总DR速率系数的贡献可以忽略。 对于不同芯激发的 DR 过程的分析表明, $\Delta n = 1$ 的双 激发组态在整个温度范围内对 DR 速率系数的贡献突 出, $\Delta n = 0$ 的组态主要在低温时对 DR 速率系数有重 要贡献, $\Delta n = 2$ 在低温时的贡献可以忽略, $\Delta n = 3$ 的 芯激发贡献在计算中可以不予考虑。根据分析得到的 主要的DR 通道, 计算得到了高里德堡态电子主量子 数n = 18的DR速率系数,并利用 n^{-3} 的标度律外推 到了n = 100;外推得到的总DR速率系数和TBR以 及RR 速率系数进行了比较,表明DR 速率系数在所 研究的温度范围内远大于 TBR 和 RR 速率系数,将极 其明显地影响 ITER 等离子体的电离平衡和离化态布 居。最后,为方便应用,对总DR速率系数进行了参 数拟合,在电子温度高于5eV时拟合结果和计算值的 偏差小于1%。

参考文献(References):

- DONG Chenzhong, FU Yianbiao. Acta Phys Sin, 2006, 55(11): 1712.(in Chinese)
 (董晨钟,符彦飙.物理学报, 2006, 55(11): 1712.)
- [2] CHEN Bo, ZHENG Zhijian, ZHU Zhenghe. High Power Laser and Particle Beams, 1999, 11(4): 0455. (in Chinese)
 (陈波,郑志坚,朱正和.强激光与粒子束, 1999, 11(4): 0455.)
- [3] FU Y B, DONG C Z, SU M G, et al. Phys Rev A, 2011, 83: 062708.
- [4] ZHANG Guoding, FU Yanbiao, DONG Chenzhong, *et al.* Nuclear Physics Review, 2012, **29**(2): 178.(in Chinese)
 (张国鼎,符彦飙,董晨钟,等.原子核物理评论, 2012, **29**(2): 178.)
- [5] LI B W, O'SULLIVAN G, FU Y B, et al. Phys Rev A, 2012, 85: 052706.
- [6] SAFRONOVA U I, SAFRONOVA A S, BEIERSDORFER P. Can J Phys, 2011, 89: 581.
- [7] SAFRONOVA U I, SAFRONOVA A S, JOHNSON W R. J Phys B-At Mol Opt Phys, 2010, 43: 144001.
- [8] YE Anpei, ZHU Zhenghe, TAN Mingliang. Chinese Journal of Atomic and Molecular Physics, 1995, 12(3): 233.(in Chinese) (叶安培,朱正和,谭明亮. 原子与分子物理, 1995, 12(3): 233.)
- [9] BIEDERMANN C, RADTKE R, SEIDEL R, et al. J phys Conf Ser, 2009, 163: 012034.
- [10] BIEDERMANN C, RADTKE R. AIP Conf Proc, 2009, 1161: 95.
- [11] SAFRONOVA U I, SAFRONOVA A S, BEIERSDORFER P. At Date Nucl Date Tables, 2009, 95: 751.
- [12] BEHAR E, MANDELBAUM P, SCHWOB J L. Phys Rev A, 1999, 59: 2787.
- [13] BEHAR E, DORON R, MANDELBAUM P, et al. Phys Rev A, 2000, 61: 062708.
- [14] DALHED S, NILSEN J, HAGELSTEIN P. Phys Rev A, 1986, 33:

264.

- [15] SAFRONOVA U I, SAFRONOVA A S, BEIERSDORFER P. At Date Nucl Date Tables, 2009, 42: 165010.
- [16] PELEG A, BEHAR E, MANDELBAUM P, et al. Phys Rev A, 1998, 57: 3493.
- [17] BEHAR E, PELEG A, DORON R, et al. J Quant Spectrose Radiat Transfer, 1997, 58: 449.
- [18] MENG F C, ZHOU L, HUANG M, et al. J Phys B-At Mol Opt Phys, 2009, 42: 105203.
- [19] MENG F C, CHEN C Y, WANG Y S, *et al.* J Quant Spectrose Radiat Transfer, 2008, 109: 2000.
- [20] BEHAR E, MANDELBAUM P, SCHWOB J L. Eur Phys J D, 1999, 7: 157.
- [21] BEHAR E, DORON R, MANDELBAUM P, et al. Phys Rev A, 1998, 58: 2115.
- [22] ZHANG Yizhao, FU Yanbiao, DONG Chenzhong, *et al.* High Power Laser and Particle Beams, 2011, 23 (4): 1087.(in Chinese) (张义钊,符彦飙,董晨钟,等.强激光与粒子束, 2011, 23(4): 1087.)
- [23] BALLANCE C P, LOCH S D, PINDZOLA M S, et al. J Phys B-At Mol Opt, 2010, 43: 205201.
- [24] SAFRONOVA U I, SAFRONOVA A S, BEIERSDORFER P, *et al.* J Phys B-At Mol Opt, 2011, **44**: 035005.
- [25] BADNELL N R, BALLANCE C P, GRIFFIN D C, et al. Phys Rev A, 2012, 85: 052716.
- [26] SCHIPPERS S, BERNHARDT D, MÜLLER A, et al. Phys Rev A, 2011, 83: 012711.
- [27] SAFRONOVA U I, SAFRONOVA A S. Phys Rev A, 2012, 85: 032507.
- [28] SAFRONOVA U I, SAFRONOVA A S. J Phys B-At Mol Opt, 2012, 45: 085001.
- [29] GU M F. Astrophys J, 2003, **590**: 1131.
- [30] COLOMBANT D, TONON G F. J Appl Phys, 1973, 44: 3524.

Theoretical Investigation of Dielectronic Recombination Rate Coefficients of W⁴⁴⁺ Ions

MA Xingze^{1, 2}, FU Yanbiao¹, LI Maijuan¹, ZHANG Guoding¹, ZHANG Yizhao¹, DONG Chenzhong¹

(1. College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Key Laboratory of Atomic and Molecular Physics & Functional Materials of Gansu Province, Lanzhou 730070, China;

2. Department of Physics, Changji University, Changji 831100, Xinjiang, China)

Abstract: Based on the fully relativistic configuration interaction method, theoretical calculations are carried out to research the dielectronic recombination (DR) processes, in which W^{44+} ions in the ground state $3s^23p^63d^{10}4s^2$ trap an electron to form doubly excited states $(3s^23p^63d^{10}4s^2)^{-1}nln'l'(n = 4\sim 6, n' = 4\sim 7)$. The comparison of the DR rate coefficients of different shells shows that DR approach is as follow: the 4s subshell excitation dominates to DR at low temperature, but 3d subshell excitation attributes to DR at high temperature. Total DR rate coefficients from $n=4\sim18$ are evaluated directly, and the results are extrapolated up to n = 100 in the temperature range from 1 to 5×10^4 eV, and thus get the total DR rate coefficients. Compared total DR rate coefficients to three-body recombination (TBR) rate coefficients and radiative recombination (RR) rate coefficients, it showed that the total DR rate coefficients obviously significantly greater than other two recombination rate coefficients, and thus it obviously influence ionization equilibrium and ionization state population of ITER plasma.

Key words: dielectronic recombination; DR rate coefficient; W⁴⁴⁺ ions

Received date: 16 Sep. 2012; Revised date: 7 Oct. 2012

Foundation item: National Natural Science Foundation of China(10847007, 91126007, 11064012); Specialized Research Fund for Doctoral Program of Higher Education of China(20070736001); Key Subject Construction Project of Changji University([2012]92) Corresponding author: FU Yanbiao, Email: fuyb@nwnu.edu.cn