

文章编号: 1007-4627(2018)03-0327-08

Re³⁰⁺ 离子双电子复合速率系数的理论研究

田瑞^{1,2}, 符彦飙^{1,2,†}, 魏二龙^{1,2}, 董晨钟^{1,2}

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

摘要: 复杂结构离子的双电子复合速率系数在极紫外光刻光源、核聚变等应用研究的等离子体光谱模拟和诊断中具有重要的应用价值。利用全相对论组态相互作用方法, 详细计算了基组态为 $4p^6 4d^9$ 的 Re^{30+} 离子经双激发态 $(4p^6 4d^9)^{-1} nln'l'$ ($n=4\sim 6$, $n'=4\sim 23$) 的双电子复合 (DR) 过程。研究分析了激发、辐射通道, 组态相互作用, 级联退激对 DR 速率系数的影响。其中内壳层 $4p$ 电子激发的 DR 速率系数是总 DR 速率系数的 28.2%~44.9%, 所以内壳层 $4p$ 电子激发的贡献不可以忽略。级联退激对 DR 速率系数的最大贡献为 12.9%, 也必须要予以考虑。通过对双电子复合、辐射复合、以及三体复合速率系数的比较, 辐射复合速率系数的最大值为 DR 速率系数的 22.6%, 三体复合速率系数的最大值仅为 DR 速率系数的 0.3%。因此, DR 速率系数远远大于辐射复合和三体复合速率系数。该结果表明 DR 过程对于等离子体离化态分布、能级布居以及光谱模拟都极为重要。为了方便应用, 对基态和第一激发态的总 DR 速率系数进行了参数拟合。该研究结果将为 Re 激光等离子体的光谱模拟及复杂结构离子 DR 过程的进一步研究提供参考。

关键词: 双电子复合; DR 速率系数; DAC 效应

中图分类号: O562.4 **文献标志码:** A **DOI:** 10.11804/NuclPhysRev.35.03.327

1 引言

双电子复合 (DR) 过程, 是实验室高温等离子体和天体等离子体中对建立等离子体电离平衡和能级布居起着重要作用的一种原子动力学过程。近年来, 基于极紫外 (EUV) 光刻光源研究背景, 人们对于等离子体的激光诱导发射光谱特性进行了诸多的研究。2003 年, Gilleron 等^[1]研究了激光产生的 Xe 等离子体 EUV 发射光谱特性, 对涉及到的有关跃迁进行了详细的计算。2007 年, Shen 等^[2]利用组态相互作用和扭曲波近似方法系统计算了 Xe^{10+} 离子的能级、振子强度、辐射跃迁几率以及电子碰撞激发强度, 模拟了 Xe^{10+} 离子 EUV 波段的发射谱。2012 年, Zhang 等^[3]利用相对论多组态原子程序软件包 FAC^[4]计算了 Xe^{8+} 离子 DR 速率系数。2005 年, Liang 等^[5]利用 FAC 程序计算模拟了 O^{4+} 离子的 X 射线及 EUV 光谱。这些中高 Z 元素高离化态多电子离子的 EUV 光谱的相关研究, 不仅有助于与之相关的 EUV 光刻光源和实验室等离子体的诊断、模拟等的研究工作, 而且在核聚变、天体等离子体、水窗源、原子光谱学等的研究范围也有诸多的重要应用^[6-9]。

对于 Re 等离子体, 国内外研究组观测到其个别离化态的 EUV 光谱, 并进行了简单的理论计算, 但对 Re 离子的 DR 过程还没有进行详细的研究。1983 年, Mandelbaum^[10]等利用激光诱导等离子体技术在 0.6~0.9 nm 的波段范围内, 观测并且分析了激光产生的高离化态 Re 等离子体在此波段内发生的 $3d-4p$ 跃迁的光谱。1996 年, Kildiyarova 等^[11]研究了 Re^{4+} 的 $(5d^3+5d^2 6s)-5d^2 6p$ 跃迁。2015 年, Wu 等^[12]在不同的激光功率密度条件下, 利用两种 Nd:YAG 激光器产生的 150 ps, 10 ns 脉冲激光, 在 1~7 nm 波段内观测到了由复杂结构的 $\text{Re}^{14+} \sim \text{Re}^{38+}$ 离子分布引起的 ps 光谱和 ns 光谱发射特性的差异。为了更好地模拟 Re 等离子体的光谱, 对模拟所需的参数进行理论计算是十分重要的。对于基组态为 $4d^n$ 的复杂结构重离子的 EUV 光谱, 由于其相关跃迁涉及到多个 $4l$ 壳层电子, 电子的强烈耦合可以形成非常复杂的近简并能级, 这些能级之间的跃迁形成的谱线将变得非常复杂, 并且相互重叠, 形成所谓的“不可分辨的跃迁峰 (UTA)”。这就使得对这些谱线的分析和辨认变得非常困难。因此, 必须对有关离子态的能级结构和跃迁光谱特性进行详细的理论和实验方面的分析研究。在中等电子密度情况下, 有不少原子

收稿日期: 2018-04-28; 修改日期: 2018-05-25

基金项目: 国家自然科学基金资助项目 (11464043)

作者简介: 田瑞 (1993-), 女, 甘肃定西人, 硕士研究生, 从事原子结构和原子碰撞研究;

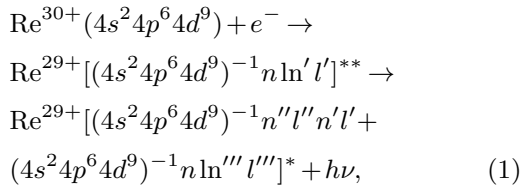
† 通信作者: 符彦飙, E-mail: fuyb@nwnu.edu.cn.

分布在激发态上, 对于这些原子数密度分布, 不仅要计算不同电离度原子的丰度, 还要计算所有重要激发态的占据率, 这就必须求解包含各种电离与复合、激发与退激发过程的速率方程。而对于基组态为 $4d^n$ 的复杂结构离子的 DR 速率系数, 在以往的光谱模拟中由于没有合适的经验公式以及计算的艰难, 从来没有被考虑过。实际上, 在很多情况下其 DR 速率系数大于辐射复合 (RR)、以及三体复合 (TBR) 速率系数^[13-16]。因而, 相关的 DR 过程参数的精确计算是非常重要的。另外, 国内外研究组对于基组态为 $4d^n$ 结构复杂离子 DR 过程的计算, 往往只考虑中间双激发态的共振稳态跃迁 (RS) 和非共振稳态跃迁 (NRS)^[17], 忽略中间双激发态辐射跃迁至自电离态且随后级联退激 (DAC) 对 DR 过程的影响。Fu 等^[14]对基组态为 $4s^2 4p^6 4d^9$ 结构的 Au^{34+} 离子的 DR 过程的理论研究结果展示 DAC 效应对总 DR 速率系数的最大贡献为 12%, DAC 效应比较重要。目前国际上对基组态为 $4d^n$ 的 Re 离子内外壳层电子激发的 DR 过程的研究还未见报道。Wu 等^[12]所做的激光等离子体 $\text{Re}^{14+} \sim \text{Re}^{38+}$ 离子 EUV 光谱识别和分析中, 也未考虑 DR 过程的贡献。因此, 细致计算分析基组态为 $4d^n$ 的 Re 离子的包括内壳层电子激发以及 DAC 效应的 DR 过程, 对于 Re 离子的激光等离子体光谱模拟和光谱识别, 以及复杂结构重离子 DR 过程的研究都具有价值和意义。

本文利用基于相对论组态相互作用方法的 FAC 程序包, 细致研究 Re^{30+} 离子的激发、辐射通道, 组态相互作用, DAC 效应对 DR 速率系数的影响。利用经验公式计算了 RR、TBR 的速率系数, 并与总 DR 速率系数进行比较。为方便应用, 对基态和第一激发态的 DR 速率系数进行了参数拟合。

2 理论方法

Re^{30+} 离子由基态 i 俘获一个自由电子, 形成中间双激发态 j , 再辐射退激发到 f 的双电子复合过程为



其中: ** 表示中间双激发态 j ; * 表示辐射跃迁末态 f ; n 表示主量子数; l 表示电子轨道角动量子数。

在热等离子体中, 自由电子的速率分布遵循 Maxwell-Boltzmann 分布, 则由初态 i 经过双激发态 j 再到所有辐射跃迁末态 f 的 DR 速率系数可以表示为

$$\alpha_{ij}^{\text{DR}}(kT_e) = \left(\frac{2\pi\hbar^2}{m_e kT_e} \right)^{3/2} \frac{g_j}{2g_i} A_{ji}^a B_j \exp\left(-\frac{E_{ji}}{kT_e}\right), \quad (2)$$

这里: T_e 是电子温度; k 是波尔兹曼常数; E_{ji} 是共振能量; m_e 是电子质量; g_i 和 g_j 分别是初态 i 和中间双激发态 j 的统计权重; A_{ji}^a 是由态 j 到 i 的自电离速率; B_j 是分支比; 其表达式为

$$B_j = \frac{\sum_f A_{jf}^r B_f}{\sum_f A_{jf}^r + \sum_{i'} A_{ji'}^a}, \quad (3)$$

其中: A_{ji}^a 是双激发态 j 到俄歇末态 i' 的俄歇速率; A_{jf}^r 是双激发态 j 到末态 f 的辐射速率; B_f 是末态 f 的分支比。本文的计算中, $n' < 24$ 的 DR 速率系数通过从头计算得到, $n' = 24 \sim 1000$ 的 DR 速率系数通过 n'^{-3} 标度率外推得到, 外推公式^[14]为

$$\begin{aligned} \alpha^{\text{DR}}(n') &= \sum_j \left(\frac{n'}{n_s} \right)^{-3} \alpha_j^{\text{DR}}(n_s) \cdot \\ & \frac{\sum_{f'} A_{jf'}^{\text{low}} + \sum_f A_{jf}^{\text{high}} + \sum_{i'} A_{ji'}^a}{\sum_{f'} A_{jf'}^{\text{low}} B_{f'} + \sum_f A_{jf}^{\text{high}} B_f} \cdot \\ & \frac{\sum_{f'} A_{jf'}^{\text{low}} B_{f'} + \left(\frac{n'}{n_s} \right)^{-3} \sum_f A_{jf}^{\text{high}} B_f}{\sum_{f'} A_{jf'}^{\text{low}} + \left(\frac{n'}{n_s} \right)^{-3} \sum_f A_{jf}^{\text{high}} + \left(\frac{n'}{n_s} \right)^{-3} \sum_{i'} A_{ji'}^a}, \end{aligned} \quad (4)$$

其中: $A_{jf'}^{\text{low}}$ 和 A_{jf}^{high} 分别是能级 j 的内壳层电子和外壳层里德堡电子 n_s 的辐射跃迁速率。

辐射复合和三体复合过程作为另外两种重要的电子-离子非弹性碰撞现象, 其速率系数分别由如下的经验公式简单估算得到^[18]

$$\alpha^{\text{RR}} = 5.2 \times 10^{-14} (V_{\text{ion}}/T_e)^{\frac{1}{2}} Z [0.429 + 0.5 \ln(V_{\text{ion}}/T_e) + 0.469(T_e/V_{\text{ion}})^{\frac{1}{2}}], \quad (5)$$

$$n_e \alpha^{\text{TBR}} = 2.97 \times 10^{-27} n_e n_z / \left[T_e V_{\text{ion}}^2 (4.88 + T_e/V_{\text{ion}}) \right], \quad (6)$$

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。在本文的计算中取值 10^{21} cm^{-3} 。

3 结果与讨论

基组态为 $4d^9$ 离子的 DR 过程能级众多, 跃迁复杂, 尤其在考虑 DAC 效应的精细计算时需要耗费大量的资

源。为在有限的资源下忽略不重要的贡献, 首先以基态作为初态, 详细分析各种效应及通道对 Re^{30+} 离子 DR 过程的贡献。

3.1 Re^{29+} 离子辐射跃迁波长比较

表 1 展示了对 Re^{29+} 离子的 $4d^9 4f-4d^{10}$, $4d^9 5p-4d^{10}$, $4d^9 5f-4d^{10}$ 跃迁波长所做的比较。其中, 上标 COWAN-Wu 为 Wu 等^[12]用 COWAN 程序包计算的理论结果。从表中可以看到, 和 COWAN 计算的波长结果比较, 利用 FAC 计算得到的结果最大偏差为 1.19%, 最小为 0.13%。和 COWAN-Wu 的计算比较, 利用 FAC 计算得到的结果最大偏差为 2.81%, 最小为 0.41%。与 COWAN-Wu 的计算相比, 我们利用 COWAN 计算得到的结果最大偏差为 2.60%, 最小为 0.005%。因为最终进行的是 DR 总速率系数的计算, 所以我们用 FAC 和 COWAN 计算的结果同 Wu 等^[12]用 COWAN 计算的结果符合得比较好。

表 1 Re^{29+} 离子 $4d^9 4f-4d^{10}$ 、 $4d^9 5p-4d^{10}$ 、 $4d^9 5f-4d^{10}$ 跃迁波长

No.	Transition	λ^{FAC}	λ^{COWAN}	$\lambda^{\text{COWAN-Wu}}$
1	$4d^{10} 1S_0-4d^9 5p^3 P_1$	2.838 4	2.834 7	2.826 3
2	$4d^{10} 1S_0-4d^9 5p^1 P_1$	2.757 0	2.736 4	2.742 7
3	$4d^{10} 1S_0-4d^9 5p^3 D_1$	2.656 1	2.635 8	2.643 6
4	$4d^{10} 1S_0-4d^9 4f^3 P_1$	6.296 3	6.238 4	6.244 0
5	$4d^{10} 1S_0-4d^9 4f^3 D_1$	5.830 8	5.800 2	5.801 3
6	$4d^{10} 1S_0-4d^9 4f^1 P_1$	4.692 9	4.748 6	4.748 3
7	$4d^{10} 1S_0-4d^9 5f^3 P_1$	2.022 6	2.014 5	2.014 4
8	$4d^{10} 1S_0-4d^9 5f^3 D_1$	2.009 0	2.001 5	1.952 5
9	$4d^{10} 1S_0-4d^9 5f^1 P_1$	1.958 5	1.950 9	2.001 7

3.2 激发和辐射通道

图 1 展示了中间双激发态为 $j = (4s^2 4p^6 4d^9)^{-1} 4l10f$ 的 DR 速率系数。由图可见, $4d$ 电子激发的 DR 速率系数最大, $4p$ 次之, $4s$ 的 DR 速率系数最小。考察曲线峰值附近, $4p$ 电子激发的 DR 速率系数是 $4d$ 的 6.4%, 其对总 DR 速率系数的贡献不可以忽略。 $4s$ 电子激发的 DR 速率系数是 $4d$ 的 0.6%, 在本文接下来对 DR 速率系数各类效应的分析讨论以及总 DR 速率系数的计算中, 忽略 $4s$ 电子激发的贡献。

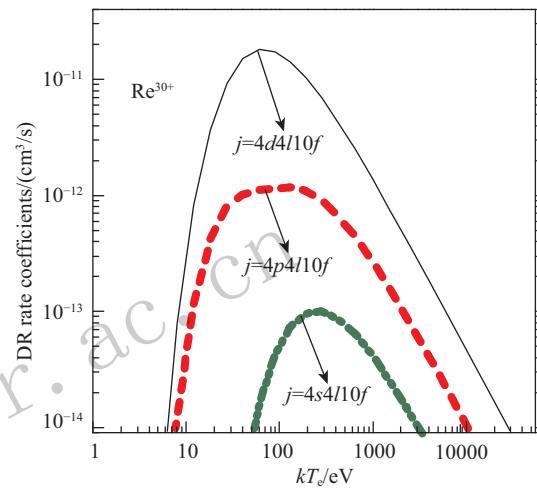


图 1 (在线彩图) $4s$, $4p$, $4d$ 电子激发对 DR 速率系数的贡献($j = (4s^2 4p^6 4d^9)^{-1} 4l10f$)

图 2 展示了 $j = (4p^6 4d^9)^{-1} nl10l'$, $n = 4, 5, 6$ 的 DR 速率系数。图 2(a) 为 $4d$ 电子激发的 DR 速率系数。由图可见, $n = 4$ 的 DR 速率系数最大, $n = 6$ 的最小。 $n = 5$ 的 DR 速率系数峰值为 $n = 4$ 的 7.5%, 而 $n =$

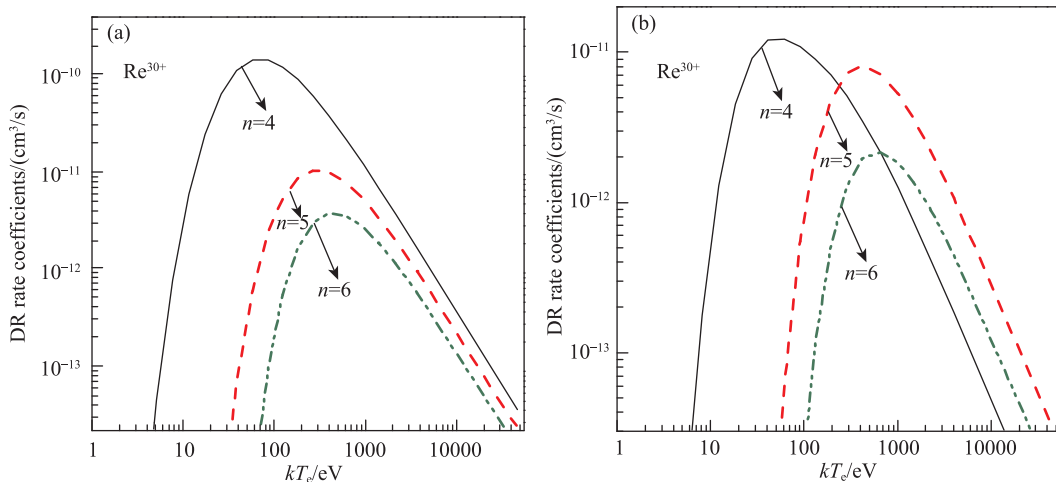


图 2 (在线彩图) $j = (4p^6 4d^9)^{-1} nl10l'$, $n = 4, 5, 6$ 的 DR 速率系数 (a) 为 $4d$ 电子激发的 DR 速率系数; (b) 为 $4p$ 电子激发的 DR 速率系数。

6 的 DR 速率系数峰值仅为 $n = 4$ 的峰值的 2.7%。图 2(b) 为 $4p$ 电子激发的 DR 速率系数。其中, $n = 5$ 的 DR 速率系数峰值为 $n = 4$ 的 66.6%, $n = 6$ 的 DR 速率系数峰值为 $n = 5$ 的 26.4%, $n = 6$ 的 DR 速率系数峰值仅为 $n = 4$ 的峰值的 17.6%。 $4p$ 电子激发的 $n = 5, 6$ 的贡献相对比较大的原因是, 中间双激发态 $4p^5 4d^{10} 10l'$ 的 $4d$ 为满壳层, 高壳层电子无法向 $4d$ 跃迁, 比如 $10f$ 无法向 $4d$ 跃迁。而 $4p$ 电子激发至 $n = 5, 6$ 的中间双激发态 $4p^5 4d^9 nl10l'$ 的高壳层电子既有向 $4p$ 的跃迁, 也有向 $4d$ 的跃迁 (比如 $10f$ 向 $4d$ 跃迁), 导致 $4p^5 4d^{10} 10l'$ 的贡献降低。 $4d$ 和 $4p$ 电子激发的 DR 速率系数的峰值相差一个数量级, 相应的 $4p^5 4d^{10} 6l10l'$ 对 $(4p^6 4d^9)^{-1} nl10l'$ 总 DR 速率系数的贡献应该在 1.7% 以下。在 $j = (4p^6 4d^9)^{-1} nl n' l'$ 的 DR 速率系数的计算中, 忽略 $n > 6$ 的贡献。

图 3 展示了 $j = 4d^8 4f10f$, 辐射跃迁末态 $f = 4d^9 10f, 4d^9 4f, 4d^8 4f5l'', 4d^8 4f6l'', 4d^8 4f7l'', 4d^8 4f8l''$ 的 DR 速率系数。曲线 4 为辐射跃迁至 $4l$ 壳层的 DR 速率系数, 曲线 5 为辐射跃迁至 $4l, 5l$ 壳层的 DR 速率系数。曲线 4 和 5 两者之间在峰值处有 30.7% 的差异。曲线 6 为辐射跃迁至 $4l \sim 6l$ 的 DR 速率系数, 和曲线 5 有 6.6% 的差异。曲线 7 为辐射跃迁至 $4l \sim 7l$ 的 DR 速率系数, 和曲线 6 有 2.9% 的差异。曲线 8 为辐射跃迁至 $4l \sim 8l$ 的 DR 速率系数, 由图可见, 曲线 8 大致与曲线 7 重合。考虑到高壳层电子的辐射跃迁以 n^{-3} 标度率递减, 我们在计算中忽略辐射跃迁至 $7l$ 以上壳层的贡献。

3.3 组态相互作用的影响

图 4 展示了 $j = 4d^8 4f10l'$ 考虑 CI 和不考虑 CI(NCI)

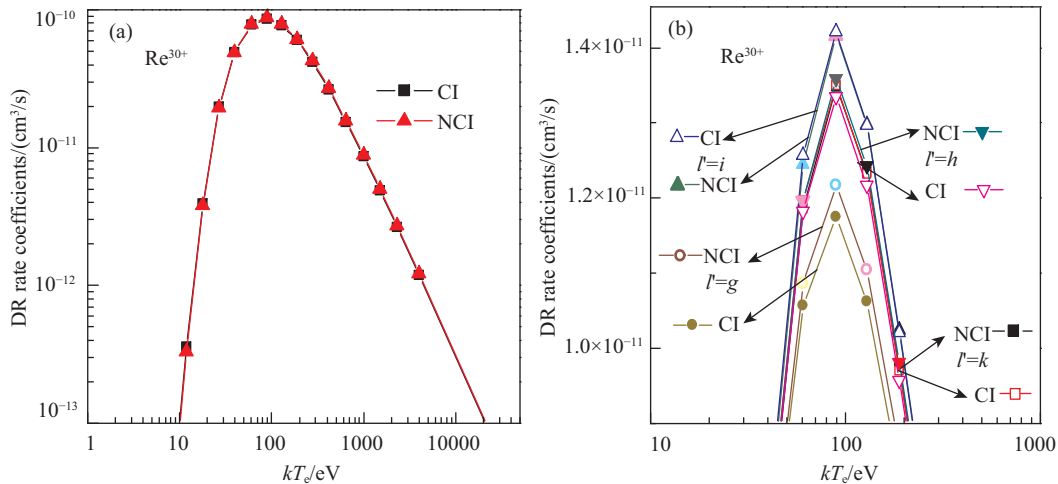


图 4 (在线彩图) CI 效应对 DR 速率系数的影响 ($j = 4d^8 4f10l'$)
CI 表示考虑了 CI 效应的 DR 速率系数, NCI 表示没有考虑 CI 效应的 DR 速率系数。

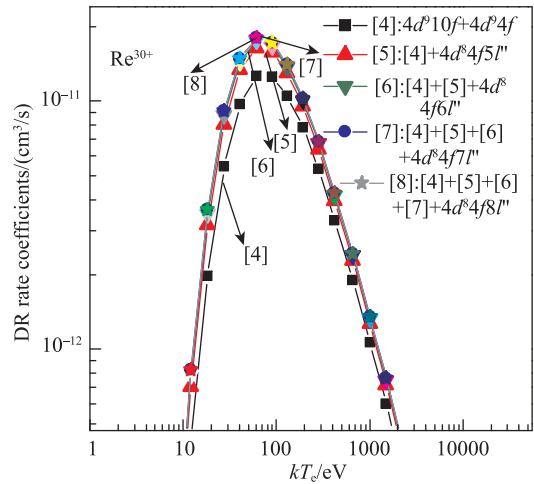


图 3 (在线彩图) 辐射跃迁至不同壳层的 DR 速率系数 ($j = 4d^8 4f10f$)
曲线 4 为辐射跃迁至 $4l$ 壳层的 DR 速率系数, 曲线 5 为辐射跃迁至 $4l, 5l$ 壳层的 DR 速率系数, 曲线 6 为辐射跃迁至 $4l \sim 6l$ 的 DR 速率系数, 曲线 7 为辐射跃迁至 $4l \sim 7l$ 的 DR 速率系数, 曲线 8 为辐射跃迁至 $4l \sim 8l$ 的 DR 速率系数。

表示) 的 DR 速率系数。对于初态, 中间双激发态, 辐射跃迁末态, 统一考虑 $4p^{-1} 4f^{+1}$ 作为 CI 组态。由 4(b) 图可以看到, 对于 $l' = g, l' = h$, CI 效应使 DR 速率系数略微减小。对于 $l' = i, l' = k$, CI 效应使其 DR 速率系数略微增大。减小和增大作用最终相互抵消, 因此导致 CI 效应对求和后的 DR 速率系数几乎没有影响, 如图 4(a) 所示。这种相互抵消对于其它的中间双激发态也是类似的结果, 所以我们在总 DR 速率系数的计算中不考虑 CI 效应。但是在温度小于 10 eV 的低温区域, DR 速率系数对于共振能比较敏感, 而 FAC 程序在 10 eV 以下区域的共振能计算值不够准确, 因此会带来 DR 速率系数的计算偏差。

3.4 级联退激的影响

图 5 展示了三种辐射跃迁末态的 DR 速率系数。辐射跃迁根据图 3 的分析, 只考虑跃迁至 $4l \sim 7l$ 壳层的贡献。在图 5 中, RS+NRS 表示中间双激发态的辐射跃迁考虑了共振稳态跃迁 (RS) 和非共振稳态跃迁 (NRS); DAC 表示在 NRS + RS 的基础上, 考虑了辐射跃迁至可自电离态及其随后的级联退激; NDAC 表示考虑和 DAC 相同的第一步辐射跃迁, 但不考虑随后的级联退激。在图 5(a) 中, $j = 4d^8 4f 10f$ 。由图可见, 这三种类型的辐射跃迁的 DR 速率系数几乎相等。原因是其辐射末态大部分都处于电离限以下。图 6 展示了 $4d, 4p$ 电子激发的电离限附近的能级, 可以看到 $j = 4d^8 4f 6l$ 的

能级都在电离限以下, 相应的辐射跃迁到这些能级的只有 RS + NRS 跃迁。图 5(b) 中 $j = 4d^8 5l 10f$, 280 eV 温度处曲线 DAC 的 DR 速率系数是 RS + NRS 的 2.1 倍, 并且随着温度的增加, DAC 的贡献逐渐增大, 在 50 000 eV 处是 2.6 倍。由图 6 的能级图可以看到 $4d^8 5d 6l$ 的能级都处于电离限以上, 相应的辐射跃迁到这些能级上的级联退激对 DR 速率系数都有影响。280 eV 处曲线 NDAC 的 DR 速率系数是 DAC 的 1.7 倍, 说明中间双激发态的第一步辐射跃迁末态的 Auger 几率比较大, 所以计算中需要考虑第一步辐射跃迁末态分支比的影响。由图 6 可以看到 $4p$ 电子激发的双激发态有更多态处于电离限以上, 其 DAC 效应的影响会更大一些。

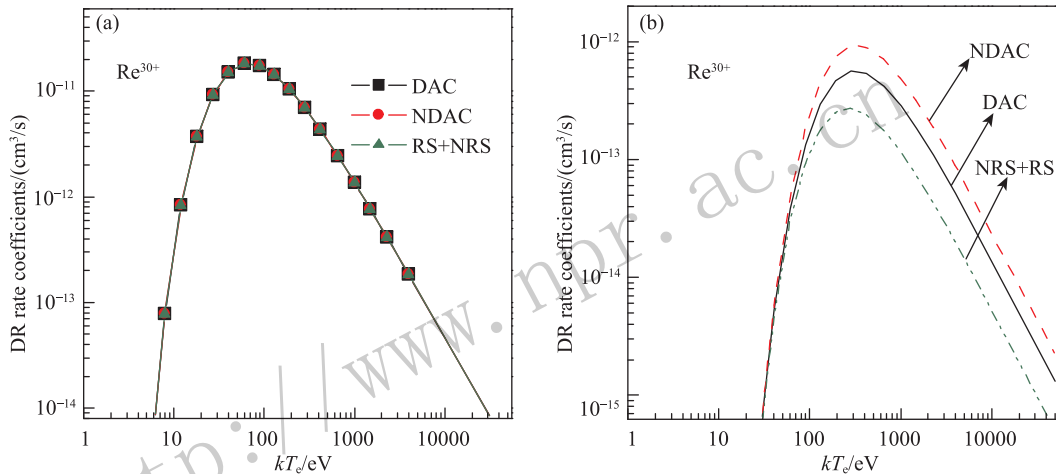


图 5 (在线彩图) 三种辐射跃迁末态的 DR 速率系数
图 (a) $j = 4d^8 4f 10f$, 图 (b) $j = 4d^8 5l 10f$ 。RS + NRS 表示中间双激发态的辐射跃迁考虑了 RS 和 NRS。DAC 表示在考虑 NRS + RS 的基础上, 进一步考虑了 DAC。NDAC 表示考虑和 DAC 相同的第一步辐射跃迁, 但不考虑随后的级联退激。

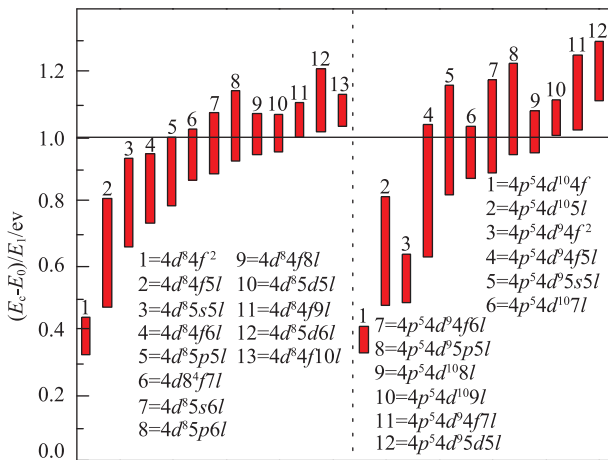


图 6 (在线彩图) Re^{30+} 离子 $4d, 4p$ 电子激发接近电离限附近的能级
 E_1 为电离限, E_0 为基态能量

3.5 总 DR 速率系数

图 7 展示了 Re^{30+} 离子 DR, RR, TBR 速率系数。曲线 DR-DAC- $4d$, DR-DAC- $4p$, DR-DAC, DR-RS+NRS 以及 DR-NDAC 为中间双激发态 $j = (4p^6 4d^9)^{-1} n l n' l'$ ($n = 4 \sim 6, n' = 4 \sim 23$) 时利用 FAC 程序从头计算得到。DR-DAC- $4d$, DR-DAC- $4p$ 分别为 $4d$ 和 $4p$ 电子激发的考虑了 DAC 效应的 DR 速率系数。由图可见, 在全温度范围内, $4d$ 电子激发的贡献大于 $4p$ 电子激发, $4p$ 电子激发的 DR 速率系数是 $4d$ 电子激发的 DR 速率系数的 47%~81.5%, 是总 DR 速率系数的 28.2%~44.9%。所以, 内壳层 $4p$ 电子激发的贡献不可以忽略。此贡献远大于 Au^{34+} 离子的 $4p$ 电子激发的贡献^[14], 原因在于 Re^{30+} 离子 $4p$ 电子激发的 DR 过程, 有更多的双激发态处于电离限之上。由曲线 DR-

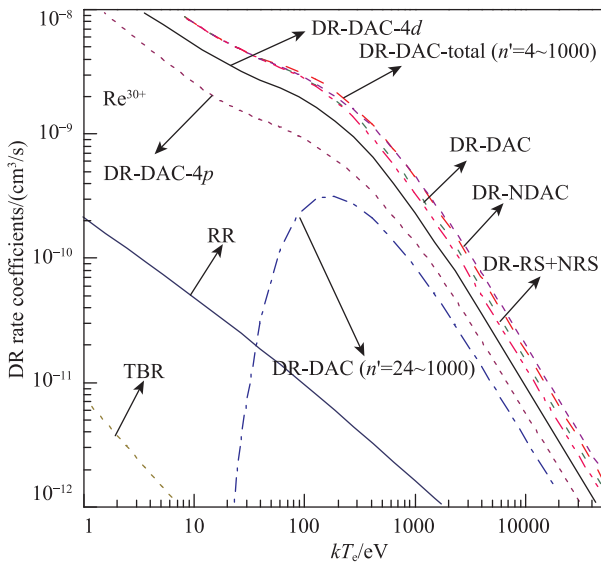


图 7 (在线彩图) Re^{30+} 离子 DR, RR, TBR 速率系数 E_l 为电离限, E_0 为基态能量曲线 DR-DAC-4d, DR-DAC-4p, DR-DAC, DR-RS+NRS 以及 DR-NDAC 为 $j = (4p^6 4d^9)^{-1} n l n' l'$ ($n = 4 \sim 6, n' = 4 \sim 23$) 的 DR 速率系数, 利用 FAC 程序从头计算得到。其中曲线 DR-DAC-4d 和 DR-DAC-4p 分别为 4d 和 4p 电子激发的考虑了 DAC 效应的 DR 速率系数, 曲线 DR-DAC, DR-RS+NRS 和 DR-NDAC 分别表示三种辐射跃迁末态类型的 DR 速率系数, 曲线 DR-DAC($n' = 24 \sim 1000$) 为通过 $n' = 23$ 的数据按照式 (4) 外推得到的 $n' = 24 \sim 1000$ 的 DR 速率系数; DR-DAC-total($n' = 4 \sim 1000$) 为总的 DR 速率系数。

DAC 和 DR-RS+NRS 的比较显示, 在温度 $kT_e < 20$ eV 区域, DAC 效应对 DR 速率系数没有影响, 在 40 eV 处 DAC 增大了 DR 速率系数 0.74%。在 90 eV 处增大了 0.8%, 在 30~100 eV 温度范围内, DAC 效应对 DR 速率系数的增大保持在 1% 以内。之后随着温度的增高, 影响逐渐增大。在 280 eV 处增大了 DR 速率系数 4.6%, 在 1000 eV 处增大 9%, 在 50000 eV 处增大 12.9%。由图 6 中展示的电离限附近的能级图, 和参考文献 [14] 中相应的能级图比较, Re^{29+} 离子相对于 Au^{33+} 离子有更多的双激发态处于电离限之上, 所以 Re^{30+} 离子 DAC 的贡献要大于 Au^{34+} 离子。如果只考虑高里德堡电子辐射跃迁而不考虑级联退激(曲线 DR-NDAC), 在温度 $kT_e < 20$ eV 区域, NDAC 对 DR 速率系数没有影响, 在 40 eV 处对 DR 速率系数(曲线 DR-DAC) 有 0.5% 的增大, 在 90 eV 处有 1.6% 的增大。并且随着温度的增高, 影响逐渐增大, 在 1000 eV 处增大到 21.3%, 在 50000 eV 处增大到 25.3%。综合以上分析, 说明在级联退激中, Auger 退激的速率比较大。曲线 DR-DAC($n' = 24 \sim 1000$) 为利用 $n' = 23$ 的数据按照式 (4) 外推得到的 $n' = 24 \sim 1000$ 的 DR 速率系数。

DR-DAC-total($n' = 4 \sim 1000$) 为总 DR 速率系数。外推部分在 90 eV 处对于总 DR 速率系数的贡献为 7.2%, 在 50000 eV 处为 19.5%。而总 DR 速率系数在全温度范围都大于 RR 和 TBR 速率系数。由于 DR 速率系数在高温处按照指数函数快速衰减, 相应的 RR 和 TBR 速率系数会随着温度的增高而贡献增大。其中 RR 速率系数的最大值为 DR 速率系数的 22.6%, TBR 速率系数的最大值为 DR 速率系数的 0.3%。可见 DR 过程对于等离子体离化态分布和能级布居以及光谱模拟极为重要。另外, 由于 TBR 速率系数的大小是随着等离子体电子密度的增加而增加的 [见式 (6)], 在选取更大的电子密度值时, TBR 速率系数的值会增大。

为方便应用, 分别对基态和第一激发态作为初态的总 DR 速率系数进行了参数拟合, 拟合公式为

$$\alpha^{\text{DR}}(\kappa T_e) = (\kappa T_e)^{-3/2} \sum_{i=1}^6 c_i e^{-E_i/\kappa T_e}, \quad (7)$$

其中: c_i (单位: cm^3/s) 和 E_i 是拟合参数; kT_e 是电子温度。对于基态作为初态的 DR 速率系数拟合结果, 在温度为 420 eV 处, 拟合偏差为 1.3%, 1500 eV 处为 1.72%, 其他数据点处的拟合偏差都小于 1.0%。对于第一激发态作为初态的 DR 速率系数拟合结果, 在温度为 420 eV 处, 拟合偏差为 1.13%, 1000 eV 处为 1.08%, 在温度为 1500 eV 处, 拟合偏差为 1.63%, 在温度为 2300 eV 处, 拟合偏差为 2.38%, 在温度为 4000 eV 处, 拟合偏差为 1.08%, 其他数据点处的拟合偏差都小于 1.0%。

表 2 Re^{30+} 离子 DR 速率系数参数拟合
M[N] 代表 $M \times 10^N$

i	C_{i0}	E_{i0}	C_{i1}	E_{i1}
1	8.486[-6]	520.831	4.156[-4]	21.221
2	1.962[-7]	6.164	4.926[-5]	1.549
3	8.309[-8]	1.031	7.562[-3]	515.834
4	8.299[-6]	175.549	7.850[-3]	182.219
5	4.135[-7]	18.838	1.667[-3]	61.419
6	1.761[-6]	57.455	1.703[-4]	6.613

4 总结

本文详细研究了 Re^{30+} 离子的 DR 过程。以基态作为初态, 考察了激发、辐射通道, CI 效应, DAC 效应对 DR 速率系数的贡献。其中, 4s 电子激发的贡献可以忽略。4d 电子激发至 7l 及更高壳层的贡献可以忽略, 中间双激发态辐射跃迁至 8l 及更高壳层的贡献可以忽略。在中高温区域, CI 效应对单个能级的 DR 速率系

数有明显增大和减小的影响,但由于不同 l' 的增大和减小作用最终相互抵消,导致求和后的DR速率系数几乎没有影响,因此在总DR速率系数的计算中可以忽略CI效应。在温度 $kT_e < 20$ eV区域, DAC效应对DR速率系数没有影响,在90 eV处DAC增大了总DR速率系数0.8%。之后随着温度的增高,影响逐渐增大。在280 eV处,增大总DR速率系数4.6%,在50000 eV处增大12.9%。由于级联退激中Auger退激速率较大,考虑高里德堡电子辐射跃迁而不考虑级联退激,在90 eV处对DR速率系数有1.6%的增大,并且随着温度的增大,影响逐渐增大,在50000 eV处增大到25.3%。对DR, RR, TBR速率系数做了比较,在全温度范围内DR都大于RR和TBR速率系数,相应的DR过程对于等离子体离化态分布和能级布居以及光谱模拟都极为重要。

参考文献:

- [1] GILLERON F, POIRIER M, BLENSKI T, *et al.* J Appl Phys, 2003, **94**: 2086.
- [2] SHEN Yunfeng, GAO Cheng, ZENG Jiaolong, *et al.* Journal of Atomic and Molecular Physics, 2007, **1000**: 0364. (in Chinese)
(沈云峰, 高城, 曾交龙. 原子与分子物理学报, 2007, **1000**: 0364.)
- [3] 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.)
- [4] GU M F. Can J Phys, 2008, **86**(5): 675.
- [5] LIANG Yaqiong, ZHANG Jiayong. Acta Astronomica Sinica, 2005, **46**(2): 151. (in Chinese)
(梁雅琼, 仲佳勇. 天文学报, 2005, **46**(2): 151.)
- [6] ZENG G M, DAIDO H, TOGAWA T, *et al.* J Appl Phys, 1991, **69**: 7460.
- [7] SULLIVAN G O, LI B W, ARCY R D. J Phys B At Mol Opt Phys, 2015, **48**: 155025.
- [8] MARTINSON I. Reports on Progress in Physics, 1989, **52**(2): 157.
- [9] YANG Zhihu, SU Hong, YIN Weiwei, *et al.* Nuclear Electronics and Detection Technology, 2004, **24**(2): 155. (in Chinese)
(杨治虎, 苏弘, 殷玮玮, 等. 核电子学与探测技术, 2004, **24**(2): 155.)
- [10] MANDELBAUM P, KLAPISCH M, BAR-SHALOM A, *et al.* Phys Scr, 1983, **27**: 39.
- [11] KILDIYAROVA R R. Phys Scr, 1996, **53**: 668.
- [12] WU T, HIGASHIGUCHI T, LI B W, *et al.* J Phys B At Mol Opt Phys, 2015, **48**(6): 165005.
- [13] LI B W, SULLIVAN G O, FU Y B, *et al.* Phys Rev A, 2012, **85**: 052706.
- [14] FU Yanbiao, WANG Xudong, SU Maogen, *et al.* Acta Phys Sin, 2016, **65**(3): 033401. (in Chinese)
(符彦飙, 王旭东, 苏茂根, 等. 物理学报, 2016, **65**(3): 033401.)
- [15] FU Y B, DONG C Z, SU M G, *et al.* Phys Rev A, 2011, **83**: 062708.
- [16] LI B W, SULLIVAN G O, FU Y B, *et al.* Phys Rev A, 2012, **85**: 012712.
- [17] BALLANCE C P, LOCH S D, PINDZOLA M S. J Phys B At Mol Opt Phys, 2010, **43**(20): 205201.
- [18] COLOMBANT D, TONON G F. J Appl Phys, 1973, **44**: 3524.

Theoretical Studies of Dielectronic Recombination Rate Coefficients for Re^{30+} Ions

TIAN Rui^{1,2}, FU Yanbiao^{1,2,†}, WEI Erlong^{1,2}, DONG Chenzhong^{1,2}

(1. College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China;

2. Key Laboratory of Atomic and Molecular Physics & Functional Materials of Gansu Province, Lanzhou 730070, China)

Abstract: Dielectronic recombination (DR) rate coefficients of complex ions are very important in some application research, such as extreme ultraviolet lithography and nuclear fusion. Based on the fully relativistic configuration interaction method, theoretical calculations are carried out to research the DR processes, in which Re^{30+} ions in the ground state $4p^6 4d^9$ to $(4p^6 4d^9)^{-1} n l n' l'$ ($n=4\sim 6$, $n'=4\sim 23$). Influence of excitation and radiation channels, configuration interaction, the effect of decays to autoionizing levels possibly followed by radiative cascades (DAC) are analyzed. The contributions through $4p$ subshell excitations to the total rate coefficient are 28.2%~44.9% in the whole temperature region. Hence the contributions from inner-shell electron excitation are very important. The contributions from the DAC transitions increase smoothly with the increasing temperature and are about 12.9% at 50 000 eV. The contributions of DAC can not be neglected. By means of compared total DR rate coefficients to radiative recombination rate coefficients and three-body recombination rate coefficients, it shows that the maximum value of the radiation recombination rate coefficient is 22.6% of the DR rate coefficient and the maximum value of the three-body recombination rate coefficient is only 0.3% of the DR rate coefficient. The total DR rate coefficient is greater than either the radiative recombination or three-body recombination coefficients in the whole temperature range. The corresponding DR process is very important for plasma ionization distribution, population level and spectrum simulation. In addition to facilitate the application, the total DR rate coefficients for the ground state and the first excited state are fitted to an empirical formula. These results will provide the reference for the further analyses of rhenium laser plasma spectrum simulation and the complex structures ions DR process.

Key words: dielectronic recombination; DR rate coefficient; DAC effect

Received date: 28 Apr. 2018; **Revised date:** 25 May 2018

Foundation item: National Natural Science Foundation of China (11464043)

† **Corresponding author:** FU Yanbiao, Email: fuyb@nwnu.edu.cn.