DOI: 10. 16783/j. cnki. nwnuz. 2016. 02. 008

类氦钨离子 KLL 双电子复合过程的理论研究

张登红,景建强,颉录有,蒋 军,董晨钟

(西北师范大学与中科院近代物理研究所极端环境原子分子物理实验室,甘肃 兰州 730070; 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)

摘要:利用基于多组态 Driac-Fock(MCDF)理论方法发展的程序包 GRASP 及 FAC 程序包,详细计算了共振双激发态 1s2121¹的共振能量、自电离速率、辐射速率及双电子复合截面.重点讨论了 Breit 相互作用对类氦钨离子双电子复合截面的影响.

关键词:Breit 相互作用;多组态 Driac-Fock 方法;双电子复合 中图分类号:O 434,14 文献标志码:A 文章编号:1001-988 ∬ (2016)02-0034-04

Theoretical study of KLL dielctronic recombination process for Helium-like tungsten ions

 ZHANG Deng-hong, JING Jian-qiang, XIE Lu-you, JIANG Jun, DONG Chen-zhong
 (Joint Laboratory of Atomic and Molecular Physics of Northwest Normal University and Institute of Modern Physics of Chinese Academy of Sciences, Lanzhou 730070, Gansu, China; Key Laboratory of Atomic and Molecular Physics and Functional Materials of Gansu Province,
 College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, Gansu, China)

Abstract: By using the program package of GRASP and FAC which are based on the multiconfiguration Dirac-Fack method, the resonant energy, radiative decay rates, autoionization rates of the doubly excited states 1s2lsl' and the corresponding dielectronic recombination(DR) cross sections have been calculated for He-like tungsten ions. It focuses on the influence of the Breit interaction on the DR cross sections. Key words: Breit interaction; multiconfiguration Driac-Fock(MCDE) method; dielectronic recombination

KLL 双电子复合(DR)过程是指一个具有特定 能量的自由电子与离子碰撞时,离子的一个束缚电 子从 K 壳层被激发到 L 壳层的同时该自由电子被 共振俘获到 L 壳层,从而形成一个中间双激发态 1s2121['],随后该双激发态通过辐射退激而趋于稳态 的过程.

近年来,随着离子的加速和储存技术、同步辐 射技术以及超强超快激光技术等的快速发展,高电 荷态离子双电子复合截面的高分辨测量已经发展成 为研究原子结构和复合动力学的"全能"工具.目 前,这一工具已被广泛应用于原子中相对论效应、 Breit 相互作用^[1]、共振与非共振之间的干涉^[2]、 亚稳态寿命和超精细猝灭^[3]、强库仑场中量子电 动力学(QED)效应的精确研究^[4]、全相对论碰撞 理论的检验^[5]、原子中电子与核之间相互作用的 高阶效应如同位素位移、超精细劈裂等的研究^[6], 以及提供天体物理学和受控热核聚变相关的绝对复 合速率系数等诸多方面^[7].

由于熔点高、导热好、溅射率低、耐腐蚀、低 氚滞留等优点,元素钨(W)已被国际热核聚变实验 堆(ITER)选为挡板零件以及偏滤器的第一壁材料. 然而,由于溅射,第一壁材料的原子将不可避免的

收稿日期: 2015-11-02; 修改稿收到日期: 2016-01-18

基金项目:国家自然科学基金资助项目(11464042,U1330117,U1331122,11564036,11464040);甘肃省高校科研业务费项目

作者简介:张登红 (1975—),男,甘肃武威人,副教授,博士,硕士研究生导师.主要研究方向为双电子复合过程及其 逆过程. E-mail: zhangdh@nwnu edu cn

进入等离子体中,从而导致很强的电磁辐射.这种 短波辐射很难被低密磁约束等离子体有效的再次吸 收,造成了大量能量的损失.已有研究表明,在 ITER 中, 0. 01%钨杂质离子的存在就有可能熄灭 氘-氚等离子体的燃烧.因此,有关钨原子所有电 荷态的碰撞和光谱数据对模拟 ITER 中真实等离子 体的状态至关重要. 钨离子的 DR 过程已引起许多 研究小组的兴趣.利用 FAC 程序包^[8], Ma 等^[9]、Wu 等^[10]、Li 等^[11] 对 W⁴⁴⁺, W³⁷⁺ 以及类 铷、类铑和类钆钨离子的 DR 速率系数进行了计 算,并与其他理论计算结果做了比较: Badnell 等^[12]用 AUTOSTRUCTURE 程序对 W²⁰⁺ 离子的 DR 速率系数进行了详细计算并与实验结果做了比 较; Behar 等^[13]、Biedermann 等^[14]、Chen 等^[15] 用 HULLAC 程序对类镍、类钴离子的速率系数、 类硅到类氮钨离子的 DR 截面进行计算; Balance 等^[16]利用组态平均扭曲波(CADW)方法对 W³⁵⁺离 子的 DR 速率系数和 DR 截面进行了计算; Peleg 等[17] 用 DAC 程序计算了类氩钨离子总的 DR 速率系 数; Safronova 等^[18] 用相对论 Hartree-Fock 方法 (COWAN)和 HULLAC 方法分别对 W⁴⁴⁺ 到 W⁵⁴⁺ 离子的 DR 速率系数进行了计算. 上述工作主要是 对较低离化度钨离子的 DR 过程进行了研究. 对类 氦的钨离子 DR 过程,在文献中还未见报道.

本文利用基于多组态 Dirac-Fack 理论方法发展的程序包 GRASP 及 FAC 程序包,详细计算了 类氦 W 离子由初态 1s² 共振俘获电子到双激发态 1s²12*l*[']的共振能量,双激发态的辐射及自电离衰变 速率,获得了 DR 强度,重点分析了 Breit 相互作 用对类氦 W 离子 DR 截面的影响.

1 理论方法

类氦离子的 KLL 双电子复合过程可表示为

 $e^{-}+2s^{2}$ → 1s2l2l' → $2s^{2}2l + hv$. (1) (1)式中类氦离子从初态 $i(2s^{2})$ 俘获一个自由电 子形成类锂离子的中间双激发态j(1s2l2l'),进一 步通过辐射出一个光子hv衰变到末态 $k(1s^{2}2l)$ 的 双电子复合强度为

$$S_{ijk}^{\text{DR}} = \frac{\pi^2}{\epsilon_j} \frac{g_j}{2g_i} A_{ji}^a \frac{A_{jk}^r}{\sum_{k'} A_{jk'}^r + \sum_{i'} A_{ji'}^a},$$
(2)

其中,k'为对所有可能的辐射跃迁未态求和;i'表示对所有可能的自电离末态求和; g_i 和 g_i 分别为

初态*i*和中间双激发态*j*的统计权重;ε_j为自由电 子的共振能量.

(2)式中 A^a_{ji}表示共振双激发态 j 到态 i 的自 电离速率,可由(3)式得到

$$A_{ji}^{a} = 2\pi \left| \left\langle \Psi_{j} \right| \sum_{p < q} V_{pq} \left| \Psi_{i_{\epsilon_{j}}} \right\rangle \right|^{2}, \quad (3)$$

35

其中, Ψ_{j} 为中间双激发态的原子态波函数,可以 通过组态波函数的线性组合得到; $\Psi_{i_{e_{j}}}$ 由离子的束 缚态波函数和能量为 ε_{j} 的自由电子的旋-轨波函数 构成; V_{μ} 为库仑和 Breit 算符的和.

$$V_{pq} = \frac{1}{r_{pq}} - \alpha_p \alpha_q \frac{\cos(\omega r_{pq})}{r_{pq}} + (\alpha_p \nabla_p)(\alpha_q \nabla_q) \frac{\cos(\omega r_{pq}) - 1}{\omega^2 r_{pq}}.$$
 (4)

其中, α_p 和 α_q 为狄拉克矩阵; ω 为交换的虚光子的波数.在实际计算中,采用 Breit 相互作用的低频近似.

通过费米黄金定则,(2)式中从中间双激发态 *j* 到末态 *k* 自发辐射跃迁速率 *A*^{*}_k可表示为

$$A_{jk}^{r} = \frac{2\pi}{2j_{j}+1} \sum_{M_{j}} \sum_{M_{k}} |M_{jk}|^{2}.$$
 (5)

其中,*j_j* 表示态*j* 的总角动量,*M_{jk}* 是从*j* 到 *k* 的 跃迁矩阵元,*M_{ik}* 可表示为

 $M_{jk} = \langle_{\alpha}(P_{k}J_{k}M_{k}) | O^{L} | \beta(P_{j}J_{j}M_{j}) \rangle. \quad (6)$ 其中, | $\beta(P_{j}J_{j}M_{j}) \rangle$ 和 $\langle_{\alpha}(P_{j}J_{j}M_{j}) | 分别是中间双$ 激发态*j*和末态*k*的原子态波函数; O^L 为辐射电磁场的*L*阶张量算符.

2 结果与讨论

我们曾就类氦 C⁴⁺, Ar¹⁶⁺, Kr³⁴⁺, U⁹⁰⁺ 离子的 KLL 双电子复合过程做过详细研究^[20],结果表 明,组态相互作用对 DR 共振峰位置及 DR 截面均 有影响.因此,在本文的计算中,我们使用了与前 文^[20]一样的组态模型来考虑电子关联效应.表1 给出类锂钨离子基态的电离能及两个激发态的激发 能,其中 GRASP 和 FAC 分别表示用 GRASP 和 FAC 程序包计算的结果.为了比较,还列出了 NIST 数据库中相应的结果.从表1 可以看出,我 们用两种方法计算的电离能几乎完全一致,与 NIST 给出的推荐值相差也不到1 eV.对于激发 能,本文用 GRASP 程序包计算的结果与 NIST 数 据库的结果符合的很好,相差也在1 eV 之内.而

本文用 FAC 计算的激发能则高于 NIST 结果约 5 eV,但相对误差也不超过 3%. 电离能和激发能与

NIST 数据库中的一致性表明本文计算中使用的波函数是准确的.

〔1 类锂钨离子的激发能及电离	訂能
-----------------	----

Tab 1 Excitation energy and ionization energy of Lithium-like tungsten ions

原子态				电离能/eV			
	GRASP	FAC	$NIST^{[19]}$	GRASP	FAC	NIST ^[19]	
$1s^2(0)2s$				1 9687.10	19 687.02	19 686.74	
$1s^{2}(0)2p_{1/2}$	194.9	198.8	193.30				
$1s^{2}(0)2p_{3/2}$	1 695.8	1 700.8	1 696.20				

为了便于讨论,表2中列出了类锂钨离子的一 些重要的共振双激发态.表3给出了利用 FAC 和 GRASP 程序包,计算得到自由电子被共振俘获到 类锂钨离子的共振能量,以及在自电离速率的计算 中包括和不包括 Breit 相互作用的情况下,计算得 到双电子复合共振强度及自电离速率.从表3可以 看出,除了双激发态 He5 外,FAC 和 GRASP 计 算 双激发态的共振能量符合的都很好,相差在

表 2 类锂钨离子的共振双激发态

Tab 2 Resonant double excitation states of Lithium-like tungsten ions

标记	双激发态	标记	双激发态
He1	$[1s2s^2]_{1/2}$	He7	$[(1s2p_{1/2})_12p_{3/2}]_{5/2}$
He2	$[(1s2s)_12p_{1/2}]_{1/2}$	He8	$[(1s2p_{1/2})_12p_{3/2}]_{1/2}$
He3	$[(1s2s)_0 2p_{1/2}]_{1/2}$	He9	$[(1s2p_{1/2})_{0}2p_{3/2}]_{3/2}$
He4	$[(1s2s)_12p_{3/2}]_{1/2}$	He10	$[(1s(2p_{3/2})_2^2]_{5/2}]$
He5	$[(1s2s)_{0}2p_{3/2}]_{3/2}$	He11	$[(1s(2p_{3/2})_2^2]_{3/2}]$
He6	$[(1s2p_{1/2})_12p_{3/2}]_{3/2}$	He12	$\left[(1s(2p_{3/2})_0^2\right]_{1/2}$

4 eV 之内. 而 He5 的共振能量, FAC 计算的结果 比 GRASP 的结果大了 23 eV 之多. 这种差别主要 来自 FAC 和 GRASP 程序对轨道的优化方法不同. 两个程序计算得到的共振能很好的一致,再次表明 获取的波函数足够准确. 在此基础上, 进一步计算 了辐射跃迁几率和自电离几率,从而获得了双电子 复合强度.关于 DR 强度,对几个 DR 强度大的双 激发态 He1, He3, He5, He7, He9, He10, 在考虑 Breit 相互作用时, FAC 和 GRASP 的两种程序的 计算结果差别均很小,其中 He3, He5, He9, He10 的结果、FAC 的计算结果相对于 GRASP 的计算 结果差别在4%之内,Hel,He7的差别大约为 10%和9%. 不包括 Breit 相互作用时,两种程序 计算结果的差别除 He1 之外均小于 4%, 对于 He1, FAC 程序的计算结果比 GRASP 的计算结果 大了约 9%. 分析包括与不包括 Breit 相互作用的计算结果,可以发现Breit相互作用对

表 3 类锂钨离子共振双激发态的共振能(eV)、双电子复合强度和自电离速率

Tab 3 Resonant energy(eV), DR strength and auto-ionization rates of resonant double excitation states for lithium-like tungsten ions

	共振能/eV		$DR $ 强 $g/(\times 10^{-20} $ cm ² • eV)			自电离速几率/($ imes 10^{13} ext{ s}^{-1}$)				
标记	FAC	GRASP	FAC	GRASP	FAC	GRASP	FAC	GRASP	FAC	GRASP
	TAC	GRASI	(B+C)	(B+C)	(C)	(C)	(B+C)	(B+C)	(C)	(C)
He1	39 196	39 200	3.19	2.90	2.43	2.21	35.32	33.89	24.62	22.60
He2	39 251	39 253	0.73	0.72	0.01	0.02	5.85	5.76	0.11	0.17
He3	39 414	39 417	4.77	4.59	3.14	3.17	40.00	38.24	25.88	25.75
He4	40 913	40 916	0.12	0.12	0.55	0.53	1.00	0.95	4.57	4.36
He5	40 979	40 956	3.69	3.46	2.66	2.69	15.73	14.72	11.25	11.46
He6	40 981	40 982	0.38	0.35	0.08	0.22	1.58	1.46	0.33	0.90
He7	40 982	40 983	3.85	3.53	4.01	3.84	10.72	9.78	11.17	10.61
He8	41 014	41 017	0.12	0.11	0.02	0.02	1.00	0.95	0.15	0.16
He9	41 054	41 058	2.60	2.53	3.55	3.25	10.82	10.51	14.81	13.44
He10	42 541	42 540	2.28	2,24	1.85	1.80	6.59	6.48	5.35	5.16
Hell	42 603	42 606	0.50	0.48	1.02	0.93	2.17	2.07	4.40	3.96
He12	42 636	42 637	0.45	0.42	0.32	0.28	3.88	3.59	2,73	2.41

注: (B+C)表示在自电离速率的计算中包括了 Breit 相互作用,(C)表示在自电离速率的计算中没有包括 Breit 相互作用.

He1,He2,He3,He4,He6,He8,He10 这几个双激 发态的共振强度有非常重要的影响,其贡献超过了 30%,尤其是共振双激发态 He2 和 He8,几乎完 全由 Breit 相互作用所主导.包括 Breit 相互作用 后,He4,He7 和 He9 的 DR 强度降低了,而其他 共振双激发态的 DR 强度,在包括 Breit 相互作用 后都增大了.比较两种程序计算的自电离几率,发 现其与 DR 强度的变化规律是一致的,这里不再赘述.

图 1 给出了在半高全宽(FWHM)为 100 eV 时,本文计算的类氦钨离子的 DR 截面随电子能量 的变化曲线. 其中图 1a 为在自电离几率的计算中 包括 Breit 相互作用时,用 FAC 和 GRASP 程序包 计算的结果.



Fig 1 The DR cross section of Helium-like tungsten ions

从图 1a 可以看出,表示 FAC 计算结果的实线 与表示 GRASP 结果的虚线吻合的很好, 仅在共振 能为 41 keV 时有微小的差别. 从表 3 可以看出, 这种差别是由于共振能为 41 keV 附近的几个双激 发态,FAC程序包计算的自电离速率略大于 GRASP 的结果所引起的.为了更加明显地展示 Breit 相互作用对类氦钨离子 DR 过程的影响,在 图 1b 中给出了在自电离速率的计算中包括和不包 括 Breit 相互作用时,用 GRASP 程序包计算的 DR 截面随电子能量的变化曲线. 从图中可以看出, 对 于电子能量较低的前两个峰, Breit 相互具有非常 重要的贡献, 而随着入射电子能量的增加, Breit 相互作用对 DR 截面的影响逐渐减弱. 这可以解释 为,当入射电子的能量较小时,自电离初态和自电 离末态相应电子轨道间的差别要小于入射电子能量 较大时的差别,因而在入射电子能量较小时 Breit 相互作用对自电离几率的影响较大.在高电荷态离 子与自由电子相互作用的理论研究中,已经注意到 Breit相互作用可以引起共振激发截面的显著增 加^[21],这种效应在实验上也得到了很好的验证^[22].

3 结论

基于 全相 对论的 多组态 Driac-Fock 方法 (MCDF)的 GRASP 的 FAC 程序包,对类氦钨离子 的 KLL 双电子复合过程做了详细的研究,给出相应 的共振双激发态的共振能、DR 强度、自电离几率以 及类锂钨离子基态的电离能和几个激发态的激发能, 并与 NIST 数据库中已有的数据进行了比较.结果 表明,在包括和不包括 Breit 相互作用的情形下, 用两种程序包计算的结果都具有很好的一致性.在 入射电子能量较低时,Breit 相互作用对类氦钨离 子 DR 截面有着重要的影响.希望本文的计算结果 能对 ITER 相关的等离子体模拟有所帮助.

参考文献:

- [1] NAKAMURA N, KAVANAGH A P, WAFANABE H, et al. Evidence for strong Breit interaction in dielectronic recombination of highly charged heavy ions[J]. *Phys Rev Lett*, 2008, 22: 073203.
- [2] HUZM, HANXY, LIYM, et al. Experimental demonstration of the Breit interaction which dominates the angular distribution of X-ray emission in dielectronic recombination [J]. Phys Rev Lett, 2012, 108: 073002.
- [3] SCHIPPERS S, SCHMIDT E W, BERNHARDT
 D, et al. Storage-ring measurement of the hyperfine induced ⁴⁷ Ti¹⁸⁺ (2s2p ³P₀-2s2 ¹S₀) transition rate[J]. *Phys Rev Lett*, 2007, **98**: 033001.
- [4] KIESLICH S, SCHIPPERS, SHI W, et al. Determination of the 2s-2p excitation energy of lithium-like scandium using dielectronicrecombination [J]. Phys Rev A, 2004, 70: 042714.
- [5] BRAUDAU C, BARTSCH T, HOFFKNECHT A, et al. High rydberg resonances in dielectronic recombination of Pb⁷⁹ [J]. *Phys Rev Lett*, 2002, 89: 053201.
- [6] SCHUCH R, LINDROTH E, MADZUNKOV S, et al. Dielectronic resonance method for measuring isotope shifts [J]. Phys Rev Lett, 2005, 95: 183003.
- [7] SCHMIDT E W, SCHIPPERS S, MULLER A, et al. Electron-ion recombination measurements motivated by agn X-ray absorption features: Fe XIV forming Fe XIII[J]. Astrophys J, 2006, 641: L157.

(下转第67页)

with ZnCl₂, K₂CO₃, NaOH and H₃PO₄[J]. *Appl* Surf Sci, 2012, **261**: 247.

- [21] ZERIOUH A, BELKBIR L. Thermal decomposition of a Moroccan wood under a nitrogen atmosphere[J]. *Thermochim Acta*, 1995, **258**: 243.
- [22] FOO K Y, HAMEED B H. Coconut husk derived activated carbon via microwave induced activation: Effects of activation agents, preparation parameters and adsorption performance[J]. Chem Eng J, 2012, 184: 57.
- [23] ADINATA D, DAUD W M A W, AROUA M K. Preparation and characterization of activated carbon from palm shell by chemical activation with K₂CO₃
 [J]. Bioresour Technol, 2007, 98(1): 145.
- [24] HAYASHI J, KAZEHAYA A, MUROYAMA K, et al. Preparation of activated carbon from lignin by chemical activation[J]. *Carbon*, 2000, **38**: 1873.
- [25] SHAHSAVAND A, NIKNAM SHAHRAK M. Reliable prediction of pore size distribution for nanosized adsorbents with minimum information

(上接第 37 页)

- [8] GU M F. The flexible atomic code[J]. Can J Phys, 2008, 86: 675.
- [9] MA X Z, FU Y B, LI M J, et al. Theoretical investigation of dielectronic-recombination rate coefficients of W⁴⁴⁺ ions [J]. Nuclear Phys Rev, 2013, **30**(2): 214.
- [10] WU Z W, ZHANG Y Z, FU Y B, et al. Dielectronic recombination rate coefficients of initially rubidium-like tungsten [J]. Eur Phys J D, 2015, 69: 140.
- [11] LI B W, O'SULLIVAN G, Dielectronic recombination of Rh-like Gd and W[J]. Phys Rev A, 2012, 85: 052706.
- [12] BADNELL N R, BALANCE C, GRIFFIN D C, et al. Dielectronic recombination of W²⁰⁺ (4d¹⁰ 4f⁸): addressing the half-open f shell[J]. *Phys Rev* A, 2012, 85: 052716.
- BEHAR E, MANDELBAU M, SCHWOB J L.
 Dielectronic recombination of Ne-like tungsten [J].
 Phys Rev A, 1999, 59: 2787.
- [14] BIEDERMANN C, RADTKE R, SEIDEL R, et al. Dielectronic and radiative recombination of Sito N-like tungsten ions[J]. J Phys C, 2009, 163: 012034.
- [15] MENG F C, CHEN C Y, WANG Y S, et al. Total dielectronic recombination rate coefficient for

requirements[J]. Chem Eng J, 2011, 171(1): 69.

- [26] ZHU L Z, HU J Z, SHEN X Q, et al. Organobentonites as adsorbents for *p*-nitrophenol and its application in water treatment[J]. J Environ Sci, 1995, 15: 316.
- [27] THEYDAN S K, AHMED M J. Adsorption of methylene blue onto biomass-based activated carbon by FeCl₃ activation: Equilibrium, kinetics, and thermodynamic studies [J]. J Anal Appl Pyrol, 2012, 97: 116.
- [28] ZHANG T, LI Q R, LIU Y, et al. Equilibrium and kinetics studies of fluoride ions adsorption on CeO₂/Al₂O₃ composites pretreated with non-thermal plasma[J]. Chem Eng J, 2011, 168(2): 665.
- [29] AZIZIAN S, HAERYFAR M, BASHIRI H. Adsorption of methyl violet onto granular activated carbon: Equilibrium, kinetics and modeling [J]. Chem Eng J, 2009, 146(1): 36.

(责任编辑 陆泉芳)

Co-like tungsten[J]. J Q S R T, 2008, 109: 2000

- [16] BALANCE C P, LOCH S D, PINDZOLA M S. Dielectronic recombination of W³⁵⁺ [J]. J Phys B, 2010, 43: 205201.
- PELEG A, BEHAR E, MANDELBAUM P, et al. Total dielectronic recombination rate coefficient for Ar-like tungsten [J]. Phys Rev A, 1998, 57: 3493.
- SAFRONOVA U I, SAFRONOVA A S.
 Dielectronic recombination of Er-like tungsten [J].
 Phys Rev A, 2012, 85: 032507.
- [19] CLEMENTSON J, BEIERSDORFER P, BROWN G V. Tungsten spectroscopy at the livermore electron beam ion trap facility [J]. Can J Phys, 2011, 89: 571.
- [20] 张登红,董晨钟,颉录有. 氦离子的 KLL 双电子复 合过程的相对论理论研究[J]. 物理学报, 2006, 55(1): 112.
- [21] KOLLMAR K, SCHIED G N. W Effect of breit interaction on resonant excitation of highly charged heavy ions[J]. Eur Phys J D, 2000, 10: 27.
- [22] ZIMMERER P, GRIIN N, SCHEID W. Scaling of relativistic Auger rates with Z for ions with two electrons[J]. J Phys B, 1991, 24: 2633.

(责任编辑 孙对兄)