

等离子体效应对类氦氖 $K\alpha$ 线系电偶极辐射的影响*

张 丽^{1)†} 李向东¹⁾ 蒋新革³⁾

1) 中国科学院上海光学精密机械研究所, 强场激光物理国家重点实验室, 上海 201800)

2) 中国科学院研究生院, 北京 100049)

3) 伊犁师范学院物理与电子信息学院, 伊宁 835000)

(2005 年 12 月 13 日收到, 2005 年 12 月 28 日收到修改稿)

采用离子球模型, 通过自洽求解 Boltzmann 方程和 Poisson 方程, 得到类氦氖离子 $K\alpha$ 线系的两条电偶极辐射光谱能量随等离子体环境的漂移. 结果显示, $K\alpha$ 线系电偶极谱线随等离子体电子密度增大发生红移, 红移量与等离子体电子密度有近似的成正比关系. 随着等离子体电子温度的降低, 光谱红移对等离子体电子密度的敏感性增大. 另外, 所研究的两条谱线间的能量间隔随等离子体电子密度的增大而减小, 减小量随等离子体电子密度的变化也呈现出近似的线性规律. 值得注意的是, 类氦氖 $K\alpha$ 线系中两条电偶极谱线分别为互组合线与共振谱线, 而其能量差就是 $1s2p(^3P_1)$ 的交换能, 因此进一步发现能级中交换能将随等离子体环境变化的规律. 所观察到的光谱红移和精细结构分裂在等离子体中都有明显的变化, 对探索高密度等离子体的诊断新方法有重要意义.

关键词: 光谱漂移, 交换能, 等离子体, 类氦离子

PACC: 3120B, 3200

1. 引言

研究等离子体环境对原子结构的影响对于理解复杂系统中的辐射光谱有着重要的意义^[1-3]. 同时, 研究辐射光谱随等离子体环境的变化对于探索等离子体诊断的新方法意义重大^[4-6].

等离子体中各带电粒子间的相互作用使得处于其中的辐射离子周围的屏蔽势发生变化, 从而引起原子或离子的束缚电子结构及其光谱的变化. 因此, 研究等离子体环境对原子结构的影响, 其关键在于能否得到屏蔽势的正确表达式. 目前, 此屏蔽势的计算主要基于两种等离子体模型: Debye-Hückel 模型^[7]和离子球模型^[8,9]. 前者是线性化的, 计算相对比较简单, 一般适用于弱耦合等离子体. 后者在高密度等离子体中接近于物理真实模型, 是目前研究高温、高密度等离子体对原子结构影响的可靠方法之一, 适用于强耦合等离子体. 该模型有关高温、高密度等离子体下光谱红移的计算结果与实验结果^[10]符合得很好.

本文通过采用自洽场离子球模型, 旨在研究类

氦氖离子 $K\alpha$ 线系(即电子组态 $1s2p$ 与 $1s^2$ 之间的辐射光谱)中的两条偶极辐射随等离子体环境的变化, 并得到了该两条谱线的光谱漂移随等离子体环境变化定性及定量的规律. 在本文中, 等离子体环境参数设定范围为电子密度 10^{21} cm^{-3} — 10^{23} cm^{-3} , 电子温度 100 eV — 1000 eV . 文中在无特殊说明情况下, 电子密度的单位取 cm^{-3} , 能量和电子温度的单位取 eV .

2. 离子球模型及计算方法

离子球模型实际上是一种统计平均模型, 其物理图像可以表述为在等离子体中取一个带电量为 Z 的原子核为球心的球体, 球体内含有束缚电子数和足够的自由电子数, 但不含有其他扰动离子, 球内的自由电子数必须确保整个球体呈电中性. 因此, 离子球半径 R_0 满足方程 $\frac{4}{3}\pi R_0^3 N_e + N_b = Z$. 其中 N_b 为离子球内的束缚电子数, N_e 为平均自由电子密度(以下简称电子密度). 显然离子球半径与电子密度及离子电离度相关. 离子球模型要求离子球球面以

* 国家自然科学基金(资助号: 10274089)资助的课题.

† E-mail: zhangli@mail.siom.ac.cn

及球面以外呈电中性.因此,处于高密度等离子体中的原子结构问题就变成在离子球限定的边界条件下,求解离子球中的束缚电子及自由电子的自治分布,也就是自治求解 Dirac 方程及 Poisson 方程.

本文首先从 Poisson 方程开始,在离子球模型下,Poisson 方程可写为

$$\nabla^2 \phi_{\text{tot}}(r) = -4\pi(-en_f(r) + Ze\delta(r) - en_b(r)), \quad (1)$$

其中 $n_f(r)$ 和 $n_b(r)$ 分别为自由电子数密度和束缚电子数密度, $\phi_{\text{tot}}(r)$ 为原子核、自由电子以及束缚电子所产生的总势函数.通常情况下,等离子体电子温度要远高于 Fermi 温度.因此,自由电子数密度可用 Maxwell-Boltzmann 分布来表示,即

$$n_f(r) = n_f(R_0) \frac{4}{\sqrt{\pi}} \cdot \int_{p_0}^{\infty} \frac{p^2}{(2mkT_e)^{3/2}} dp \times \exp\left\{-\frac{1}{kT_e}\left[\frac{p^2}{2m} - e\phi_{\text{tot}}(r)\right]\right\}, \quad (2)$$

$$p_0 = p_0(r) = [2me\phi_{\text{tot}}(r)]^{1/2}, \quad (3)$$

其中 m 为电子质量; k 为 Boltzmann 常数; T_e 为等离子体电子温度; p 为自由电子动量; $n_f(R_0)$ 为自由电子在离子球半径 R_0 处的电子数密度,它可由离子球模型的电中性条件

$$n_f(R_0) = Z - N_b = 4\pi \int_0^{R_0} r^2 n_f(r) dr \quad (4)$$

得到.(2)式中的动量条件 $p \geq p_0$ 是为确保自由电子的动能在离子球内大于势能的绝对值.

考虑到离子球模型下的电中性假设,本文取离子球面及球面以外的区域势函数为零,即

$$\phi_{\text{tot}}(r \geq R_0) = 0. \quad (5)$$

对于 $r < R_0$,Poisson 方程(1)的解可表示为

$$\begin{aligned} \phi_{\text{tot}}(r) &= \phi_{\text{mic}}(r) + \phi_f(r) + \phi_b(r) \\ &= \frac{Ze}{r} + \phi_f(r) + \phi_b(r). \end{aligned} \quad (6)$$

上式包含了来自原子核、自由电子及束缚电子对总势函数的贡献.定义原子的有效势为

$$\phi_{\text{eff}}(r) = \frac{Ze}{r} + \phi_f(r). \quad (7)$$

上式将用于波动方程中束缚电子径向波函数的计算.

求解 Poisson 方程(1)式,将需要得到离子球中束缚电子的密度分布,而束缚电子密度分布和束缚电子波函数密切相关,这就需求解束缚电子的波函数.本文将通过自治求解相对论 Dirac 方程得到各能级波函数,从而得到原子各参数的值.对于包含

N 个束缚电子的原子体系,其 Dirac-Coulomb 哈密顿量可表示为

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N |\hat{r}_i - \hat{r}_j|^{-1}, \quad (8)$$

其中

$$\hat{H}_i = c \sum_{i=1}^3 \alpha_i \hat{p}_i + (\beta - 1)c^2 + U_i(r) \quad (9)$$

为单电子的能量贡献.在真空条件下 $U_i(r)$ 仅为原子核吸引势能,在等离子体条件下 $U_i(r)$ 为有效势能,由于本文采用自治场离子球模型研究等离子体环境对原子结构的影响,所以有

$$U_i(r) = e\phi_{\text{eff}}(r). \quad (10)$$

对于任意给定的束缚态,束缚电子数密度 $n_b(r)$ 与主径向波函数 $P(r)$ 和次径向波函数 $Q(r)$ 之间的关系可表示为

$$n_b(r) = \sum_{j=1}^M q_j (P_j^2(r) + Q_j^2(r)) (4\pi)^{-1}, \quad (11)$$

其中 q_j 为 j 壳层的束缚电子数.

在描述自治场离子球模型的计算方法前,我们将首先提到一个对于离子球中自由电子分布近似假定,即假定离子球中的自由电子为均匀分布,通常被称作均匀电子气模型(UEGM),由此可以得到近似有效势的解析表达式为

$$\phi^{\text{UEGM}}(r) = \frac{Ze}{r} - \frac{(Z - N_b)e}{2R_0} \left[3 - \frac{r^2}{R_0^2}\right]. \quad (12)$$

所谓的自治场离子球模型是指在离子球边界条件下将自治场方法运用于 Dirac 方程及 Poisson 方程之间以求解等离子体效应对原子结构的影响,它由以下步骤构成:1)首先,以 UEGM 所得的有效势(12)式代入方程(8),得到一个试探的束缚电子波函数.2)将所得波函数代入(11)式,得到束缚电子数密度 $n_b(r)$,从而得到 $\phi_b(r)$.3)保持 $\phi_b(r)$ 不变,并同时考虑(2)(4)(5)三式,通过迭代方法求解(1)式,可以得到 $n_f(R_0)$, $n_f(r)$, $\phi_f(r)$ 以及新的 $\phi_{\text{eff}}(r)$ 的自治值.4)将新的 $\phi_{\text{eff}}(r)$ 代入方程(8)得到一个新的束缚电子波函数,然后重复 2),3),4)步骤,直到束缚电子波函数收敛.最终,可以得到不同等离子体条件下, $\phi_{\text{eff}}(r)$, $n_f(R_0)$, $n_f(r)$, $\phi_f(r)$, $n_b(r)$, $\phi_b(r)$ 以及光谱漂移的自治结果.

3. 结果与分析

本文采用自治场离子球模型,研究了等离子体

效应对类氦氖离子 $K\alpha$ 线系中电偶极辐射光谱的影响.在电子密度从 10^{21} cm^{-3} 至 10^{23} cm^{-3} 及电子温度从 100 eV 至 1000 eV 的等离子体范围内,图 1 给出了类氦氖离子 $K\alpha$ 线系中的两条电偶极跃迁光谱 ($1s2p(^3P_1) \rightarrow 1s^2(^1S_0)$, $1s2p(^1P_1) \rightarrow 1s^2(^1S_0)$) 的能量漂移量 ΔE 随等离子体电子密度和电子温度的变化关系.其中

$$\Delta E = (E_{\text{upper}} - E_{\text{low}})_{\text{vacuum}} - (E_{\text{upper}} - E_{\text{low}})_{\text{plasma}} \quad (13)$$

表示谱线在等离子体中的位置与在真空中位置的的能量差.上式中 E_{upper} 和 E_{low} 分别对应上述跃迁的上能级能量及下能级能量,角标 plasma 和 vacuum 分别表示处于等离子体或真空中.

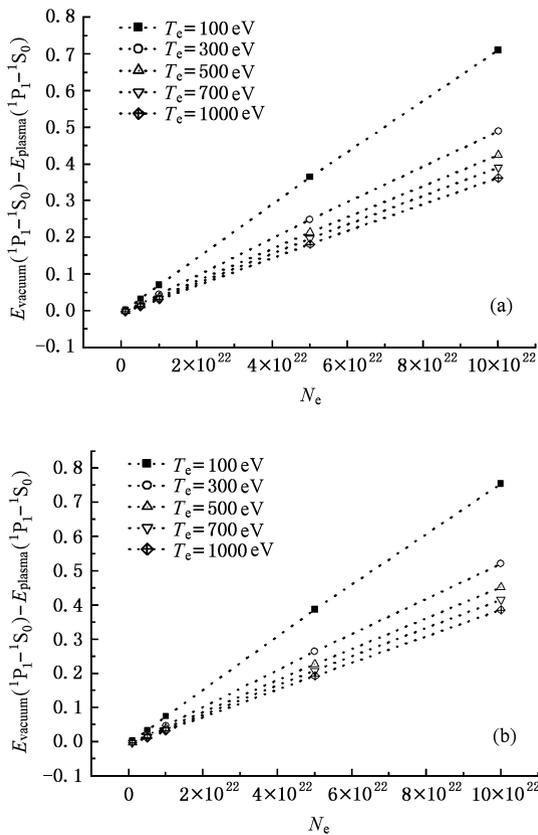


图 1 类氦氖 $K\alpha$ 线系电偶极辐射光谱的能量漂移量与等离子体电子密度和电子温度之间的变化关系 (a) (b) 分别对应于 $^3P_1 \rightarrow ^1S_0$, $^1P_1 \rightarrow ^1S_0$ 的辐射光谱

图 1 表明,在本文所考虑的等离子体参量范围内,类氦氖离子的 $K\alpha$ 线系的电偶极辐射光谱随着等离子体电子密度的增大呈现出红移规律,这与相关的理论结果和实验结果都是一致的^[6-10].束缚态电子能量随等离子体电子密度升高而升高是众所周

知的事实,光谱红移现象则表明跃迁下能级随等离子体的能量偏移量大于上能级随等离子体的能量偏移量.经分析发现, $K\alpha$ 线系的电偶极辐射光谱的能量漂移量 ΔE 与等离子体电子密度 N_e 之间呈现出很好的近似线性关系,可表示为

$$\Delta E = p_\alpha \cdot N_e, \quad (14)$$

其中 p_α 为线性参数, $\alpha = 1, 2$ 分别对应 $^3P_1 \rightarrow ^1S_0$, $^1P_1 \rightarrow ^1S_0$ 的跃迁光谱.表 1 给出了不同等离子体电子温度下 p_α 的取值.

表 1 不同的电子温度下参数 p_α 的不同取值

T_e/eV	100	300	500	700	1000
$p_1/10^{-24}$	7.1447	4.9138	4.2463	3.9116	3.6238
$p_2/10^{-24}$	7.5799	5.2195	4.5138	4.1598	3.8557

由(14)式及表 1 中给出的参量 p_α 可以方便的得到光谱随等离子体电子密度及电子温度变化的红移量,这对于使用光谱红移进行高密度等离子体诊断是十分方便的.(14)式的计算结果与自洽场离子球方法所的结果相差不大,且(14)式的计算精度随等离子体电子密度升高会进一步提高,因此(14)式更适合应用于高密度等离子体环境.由表 1 可以看出,对于类氦氖 $K\alpha$ 线系中的两条偶极谱线,随着等离子体电子温度的升高,参数 p_α 的值不断减小,这表明,光谱能量漂移量对等离子体电子密度的敏感性随着等离子体电子温度的升高而减小.

值得注意的是,表 1 显示 p_1 与 p_2 的取值有微小的不同,这表明互组合线和共振谱线随等离子体的偏移程度略有不同,这将导致随等离子体环境的变化使得这两条线的相对位置会发生变化.本文结果显示,在电子温度一定时,互组合线和共振谱线间距随等离子体电子密度升高而变小.在电子密度一定时,互组合线和共振谱线间距随等离子体电子温度升高将变大.这种类氦离子 $K\alpha$ 线系中互组合线和共振谱线间距随等离子体环境的变化已在实验中观察到^[11],不难看出这种利用光谱相对位置进行高密度等离子体诊断的新方法将大大简化实验手段,是值得进一步深入探索其在高密度等离子体诊断中的应用价值.

从原子结构计算的角度上讲,类氦离子 $K\alpha$ 线系中互组合线和共振谱线的能量间距实际上等于互组合线上能级 $1s2p(^3P_1)$ 的交换能,即

$$E_X = E(^1P_1) - E(^3P_1), \quad (15)$$

其中 E_X 为交换能.在实验中通常使用互组合线和

共振谱线的能量间距验证理论中对交换能的计算准确度. 显然, 通过本文的工作可以发现束缚态能级的交换能同样将随等离子体环境发生变化. 其规律可表述为能级 $1s2p(^3P_1)$ 的交换能随等离子体电子密度的增大而减小, 随等离子体电子温度的增大而增大. 从物理上讲交换能的这种规律可以解释为在电子温度不变的条件下, 随着等离子体电子密度的增大, 自由电子对原子核的屏蔽增强, 从而束缚电子受到核的吸引减小, 因此, 能级间的间隔减小. 同样在电子密度不变的条件下, 随着电子温度的升高, 自由电子趋向于均匀分布, 自由电子对原子核的屏蔽减小, 其能级间的间隔即会增大.

我们定义互组合线($^3P_1 \rightarrow ^1S_0$)与共振谱线($^1P_1 \rightarrow ^1S_0$)的能量间隔随等离子体环境变化的偏移量, 即交换能随等离子体环境变化的偏移量为

$$\Delta E_X = (E_X)_{\text{vacuum}} - (E_X)_{\text{plasma}}, \quad (16)$$

角标 plasma 和 vacuum 分别表示处于等离子体或真空中的交换能. 图 2 给出了交换能的偏移量 ΔE_X 随等离子体环境的变化关系.

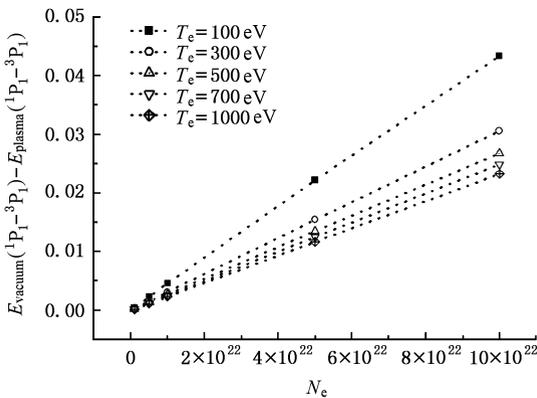


图 2 互组合线($^3P_1 \rightarrow ^1S_0$)与共振谱线($^1P_1 \rightarrow ^1S_0$)的能量间隔的偏移量随等离子体电子密度和电子温度的变化关系

从图 2 不难看出, ΔE_X 与等离子体电子密度也呈现出很好的近似线性关系. 因此, 两者之间的关系可表示为

$$\Delta E_X = p \cdot N_e, \quad (17)$$

其中 p 为线性参数, N_e 为等离子体电子密度. 表 2 给出了不同等离子体电子温度下 p 的取值.

表 2 不同的电子温度下, 参数 p 的不同取值

T_e/eV	100	300	500	700	1000
$p/10^{-25}$	4.3517	3.0575	2.6744	2.4814	2.3192

由图 2 和表 2 看出, ΔE_X 随着等离子体电子密度的增大而增大. 同时, 随着等离子体电子温度的升高, 参数 p 的值不断减小, 这表明, 互组合线与共振谱线的能量间隔对等离子体电子密度变化的敏感性随着等离子体电子温度的升高而减小. 显然, 在高密度等离子体条件下互组合线与共振谱线的能量间隔随等离子体电子密度的显著变化提供了一条利用光谱相对位置进行高密度等离子体诊断可行的便捷途径.

在我们所知的相关工作中, 仅文献 [9] 提供了电子温度为 500 eV 时 $2p(^2P_{1/2}) \rightarrow 1s(^2S_{1/2})$ 与 $2p(^2P_{3/2}) \rightarrow 1s(^2S_{1/2})$ 所产生的谱线红移与等离子体电子密度关系的非相对论计算结果. 在 $T_e = 500 \text{ eV}$, $N_e = 10^{23} \text{ cm}^{-3}$ 的等离子体条件下, 文献 [9] 所得的以上两光谱红移量分别为 0.476 eV 和 0.448 eV, 交换能为 0.0272 eV. 本文所得的以上两光谱红移量分别为 0.45146 eV 和 0.42474 eV, 交换能为 0.02672 eV. 可见理论计算结果基本一致. 到目前为止, 我们还未看到可与本文理论结果进行比较的相关实验, 但文献 [11] 已在实验上观测到交换能随等离子体密度增大而减小的现象, 这与本文所给出的交换能与等离子体的变化关系在趋势上是一致的.

4. 结 论

本文采用自洽场离子球模型, 研究了类氦 $K\alpha$ 线系电偶极谱线, 即互组合线 ($1s2p(^3P_1) \rightarrow 1s^2(^1S_0)$) 与共振谱线 ($1s2p(^1P_1) \rightarrow 1s^2(^1S_0)$) 的能量漂移量以及这两条谱线间能量差的偏移量随等离子体参数的变化关系. 结果表明, 两条谱线随等离子体电子密度增大均发生红移, 且, 互组合线与共振谱线的能量间隔随等离子体电子密度增大而减小. 同时随着电子温度的升高, 光谱红移量及这两条谱线间距的变化对等离子体电子密度变化的敏感程度降低. 定量地讲, 本文得出了光谱红移与等离子体电子密度的近似正比关系, 并得到了互组合线 ($^3P_1 \rightarrow ^1S_0$) 与共振谱线 ($^1P_1 \rightarrow ^1S_0$) 的能量间隔随等离子体环境变化的偏移量, 即交换能随等离子体环境变化的偏移量, 与等离子体电子密度的近似正比关系. 这些规律的发现对于利用等离子体光谱进行高密度等离子体诊断具有重要意义.

- [1] Zhu X R , Meng X J , Tian M F , Wang Z G , Jiang M H 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 4101 (in Chinese) [朱希睿、孟续军、田明锋、王志刚、姜 昊 2005 物理学报 **54** 4101]
- [2] Jiang M H , Meng X J 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 587 (in Chinese) [姜 昊、孟续军 2005 物理学报 **54** 587]
- [3] Li P C , Zhou X X , Dong C Z , Zhao S F 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 750 (in Chinese) [李鹏程、周效信、董晨钟、赵松峰 2004 物理学报 **53** 750]
- [4] Murillo M S , Weisheit J C 1998 *Phys. Rep.* **302** 1
- [5] Nantel M , Ma G , Gu S *et al* 1998 *Phys. Rev. Lett.* **80** 4442
- [6] Massacrier G , Dubau J 1990 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **23** 2459S
- [7] Griem H R 1997 *Principles of Plasma Spectroscopy* (Cambridge : Cambridge University Press) p1
- [8] Nguyen H , Koenig M , Benredjem D *et al* 1986 *Phys. Rev. A* **33** 1279
- [9] Koenig M , Malnoul P , Nguyen N 1988 *Phys. Rev. A* **38** 2089
- [10] Saemann A , Eidmann K , Golovkin I E *et al* 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 4843
- [11] Renner O , Adámek P , Angelo P *et al* 2006 *J. Quant. Spectros. Radiat. Transfer* **99** 532

Plasma effect on the $K\alpha$ group emission of He-like neon^{*}

Zhang Li^{1,2†} Li Xiang-Dong¹⁾ Jiang Xin-Ge³⁾

1) *State Key Laboratory of High Field Laser Physics , Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics , Chinese Academy of Sciences , Shanghai 201800 , China)*

2) *Graduate School of the Chinese Academy of Sciences , Beijing 100049 , China)*

3) *College of Physics and Electrical Information , I LI Normal University , Yining 835000 , China)*

(Received 13 December 2005 ; revised manuscript received 28 December 2005)

Abstract

The spectra shifts for the intercombination line ($1s2p(^3P_1) \rightarrow 1s^2$) and the resonance line ($1s2p(^1P_1) \rightarrow 1s^2$) of He-like neon , which are the two electronic dipole transitions in the $K\alpha$ group emissions , are studied under dense plasma conditions by using the self-consistent field ion sphere model. The results show the two electronic dipole transitions red shift nearly lineally with the increase of plasma electron density. Moreover , the red-shift energy becomes more sensitive to the plasma electron density when the plasma electron temperature is lower. It is worthy to note that the energy discrepancy between these two spectral lines is equal to the exchange energy of state $1s2p(^3P_1)$. So , it is the first time that the exchange energy varying with plasma environment is observed both qualitatively and quantitatively. This result may be useful to dense plasma diagnosis in connection with variation of the relative position and the spectral fine structure splitting in high density plasmas.

Keywords : spectra shift , exchange energy , dense plasma , He-like ion

PACC : 3120B , 3200

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10274089).

† E-mail : zhangli@mail.siom.ac.cn