

Fe 离子  $M$  壳层不可分辨跃迁系不透明度研究\*

董富通 王菲鹿 仲佳勇 赵刚†

(中国科学院国家天文台, 北京 100012)

(2011 年 12 月 14 日收到; 2012 年 2 月 7 日收到修改稿)

在活动星系核吸收光谱中存在一种重要的吸收特征——铁元素的  $M$  壳层不可分辨跃迁系吸收谱, 认识这种特征对于活动星系核区的物理性质的研究具有重要的意义. 利用细致谱线模型, 对实验室中获得的吸收谱进行了理论计算和分析, 较好地重现了实验结果中主要的吸收结构, 同时计算了温度为 10—50 eV 的预测吸收谱, 用于活动星系核光谱的研究.

**关键词:** 活动星系核, 铁  $M$  壳层不可分辨跃迁系, 细致谱线模型

**PACS:** 32.30.-r, 52.25.Fi, 95.30.Ky

## 1 引言

铁元素是天体中的一种非常重要的元素, 对光谱学的研究尤为重要, 这是因为铁元素有着丰富的谱线, 普遍地存在于天体光谱中, 可以为天体的研究提供可靠的物理信息. 这些谱线的研究对于理解许多天体物理问题有着重要的意义. 例如铁  $K_{\alpha}$  线是很多活动星系核 (AGN) X 射线能谱上普遍存在的特征, 它是鉴定活动星系核内区物理性质的最好手段<sup>[1,2]</sup>. 通常认为这些铁线来源于靠近黑洞的吸积盘的最内区, 由于受到剧烈的开普勒运动导致的多普勒展宽, 加上引力红移效应, 造成谱线的展宽和红向不对称<sup>[3]</sup>, 因此, 宽的铁  $K$  线被认为是研究 AGN 中心黑洞最好的探针. 对于高速旋转的黑洞, 黑洞自旋越大, 最内稳定轨道半径越小, 铁线受到的展宽效应越大<sup>[4]</sup>. 因此, 宽的铁  $K$  线的轮廓就能反映黑洞的自旋大小. 另外, 在太阳和其他恒星内部, 铁对于其不透明度有着重要贡献. 恒星内部的铁元素对于辐射光的吸收作用显著, OPAL 不透明度计算表明, 加入了铁  $M$  壳层的跃迁过程使得不透明度的计算结果在某些波段增大了 4 倍, 成功解释了当时所面临的造父变星质量矛盾等问题<sup>[5]</sup>.

对于低电离度的铁离子, 其内壳层  $n = 2 \rightarrow 3$  的跃迁可以产生大量的吸收谱线, 这些谱线相互混合, 在观测中很难分辨出单个谱线来, 从而被称为铁  $M$  壳层不可分辨跃迁系 (UTA)<sup>[6]</sup>. 这些谱线主要由  $2p \rightarrow 3d$  的电子跃迁产生, 波长范围是 16—17 Å (1 Å = 0.1 nm). 铁元素谱线的这一吸收特征已经在很多 X 射线源中被发现, 类星体 IRAS 13349 + 2438 是第一个被辨认出 X 射线波段具有铁  $M$  壳层 UTA 的活动星系核<sup>[7]</sup>. 随后 XMM-Newton 观测到 Seyfert 1 星系 NGC3783 也具有这种结构<sup>[8]</sup>. 这种谱线结构的形成是由于能级差值小以及观测源中各种谱线展宽机制导致的谱线加宽与位移, 从而使得各种谱线相互混合而无法分辨. 这些谱线可以提供吸收物质的电离结构、柱密度、外流动力学等重要信息, 对于研究活动星系核内部结构意义重大.

在实验室中, Chenais-Popovics 等<sup>[9]</sup> 通过激光加热铁箔片, 并使用背景 X 射线照射铁等离子体, 从而测量了铁  $M$  壳层 UTA 结构. 理论上曾使用多种方法来拟合实验光谱<sup>[9]</sup>, 但是结果都不是很理想. 本文利用相对论的细致谱线模型 (DLA) 对等离子体内部的微观过程进行了研究, 对实验数据进行了拟合, 在温度为 21 eV, 密度为 0.004 g/cm<sup>3</sup> 时取得了比较好的结果, 同时计算了密度固定为 0.004 g/cm<sup>3</sup>,

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11173032, 11103040, 11135012) 资助的课题.

† E-mail: gzha@nao.cas.cn

温度为 10—50 eV 范围的预测吸收谱, 并分析了其特性的变化.

## 2 实验数据及理论拟合结果介绍

Chenais-Popovics 等<sup>[9]</sup>使用 ASTERIX IV 高能激光器测量了在温度为 18—21 eV, 密度为 0.002—0.004 g/cm<sup>3</sup> 条件下铁等离子体的透射谱, 其测量的吸收谱呈现出了 UTA 的结构, 其实验结果如图 1 所示, 同时 Chenais-Popovics 等还对实验结果进行了理论拟合, 他们分别采用了超组态不透明度模型 (SCO)、超跃迁系模型 (STA) 和自旋-轨道分裂跃迁系 (SOSA) 等三种方法对实验结果进行了拟合, 如图 1. 这三种模型都是基于不可分辨跃迁系的算法, 使用统计的方法, 把能量相近的组态归为一组进行跃迁计算<sup>[10]</sup>, 这样会节省大量的计算时间, 但是计算结果也比较粗糙, 没有显示出光谱的精细结构. 而 DLA 模型在计算不透明度时, 需要考虑原子跃迁的每一条谱线, 这样可以显示出光谱的很多细致结构.

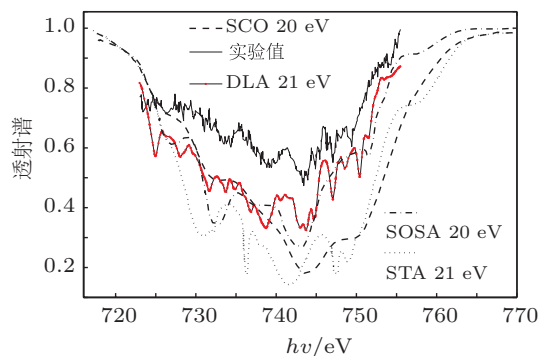


图 1 实验透射谱与各种理论拟合结果的比较

从图 1 中可以看出三种方法的拟合结果都不是很理想, 理论计算的吸收强度明显比实验结果强, 而且吸收的峰值位置也不相符合. Chenais-Popovics 等指出若要达到最佳的拟合效果, 则需要降低吸收离子的面密度, 对于 SCO 方法需要降低 2.7 倍, 而 SOSA 方法要减小 1.7 倍<sup>[9]</sup>.

## 3 DLA 模型理论

DLA 的计算需要一条一条谱线地考虑原子能级跃迁, 因此计算量巨大. 其计算主要包括四个过程: 束缚-束缚过程, 束缚-自由过程, 自由-自由过程, 电子散射过程<sup>[11]</sup>.

### 3.1 束缚-束缚过程

束缚-束缚过程主要考虑原子或离子内部电子的跃迁对于光子的吸收. 其吸收系数计算公式为

$$\mu_{bbv} = \sum N_{it}\sigma_{itt'v}, \quad (1)$$

其中  $N_{it}$  为  $i$  离子处于能级  $t$  的离子数. 在局部热动平衡近似条件下其可以表达为<sup>[12]</sup>

$$N_{it} = g_{it}N_i/Z_i e^{-\frac{E_{it}}{kT}}, \quad (2)$$

其中  $g_{it}$  是  $i$  离子能级  $t$  的统计权重,  $E_{it}$  为  $i$  离子  $t$  能级的能量,  $T$  为等离子体温度.  $N_i, Z_i$  分别为  $i$  离子的离子数密度和配分函数, 可以通过求解 Boltzmann-Saha 方程得到.  $\sigma_{itt'v}$  为束缚-束缚吸收截面, 其表达式为

$$\sigma_{itt'v} = \frac{\pi h e^2}{m_e c} f_{itt'} S_v, \quad (3)$$

$f_{itt'}$  为能级  $t-t'$  的跃迁振子强度,  $S_v$  是线形函数, 在等离子体环境中主要存在展宽机制有: 自然宽度、电子碰撞展宽、多普勒展宽和自电离共振展宽. 涉及的谱线轮廓有洛伦兹轮廓和高斯轮廓, 因此我们采用了 Voigt 轮廓, 它是高斯轮廓和洛伦兹轮廓的卷积, 其表达式为

$$S_v = \frac{2\sqrt{\ln 2}}{\sqrt{\pi}\Delta\nu_d} H(a, b), \quad (4)$$

$$H(a, b) = \frac{a}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{-x^2}}{a^2 + (b-x)^2} dx, \quad (5)$$

$$a = \sqrt{\ln 2} \Delta\nu_l / \Delta\nu_d, \quad (6)$$

$$b = 2\sqrt{\ln 2} (\nu - \nu_0) / \Delta\nu_d, \quad (7)$$

$\Delta\nu_l$  和  $\Delta\nu_d$  分别是洛伦兹轮廓和高斯轮廓的宽度.

在本文的计算中, 我们主要考虑了多普勒展宽和自电离共振展宽. Zeng 等<sup>[13]</sup>指出处于高激发态的离子, 自电离共振展宽要比电子碰撞展宽重要得多. 我们计算了 Fe 离子的自电离速率, 得到了其自电离共振宽度. 同时由于光谱仪分辨率的问题, 还必须考虑仪器展宽. 计算中谱线的自然宽度要远远小于上面几种宽度.

### 3.2 束缚-自由过程

束缚-自由过程又称为光电离过程, 是离子内电子吸收光子由束缚态到电离态的过程. 其吸收系数可以表达为

$$\mu_{bfv} = \sum N_i \sigma_{ibfv}, \quad (8)$$

其中  $N_i$  同 3.1,  $\sigma_{ibfv}$  为  $i$  离子的光电离截面, 表达式为

$$\sigma_{ibfv} = \sum \frac{g_{it} e^{-E_{it}/kT}}{Z_i} \sigma_{itv}, \quad (9)$$

式中  $g_{it}, E_{it}, Z_i$  的意义都同上一部分介绍,  $\sigma_{itv}$  为  $i$  离子  $t$  能级的光电离截面.

### 3.3 自由 - 自由过程

自由 - 自由吸收又称为逆韧致吸收, 其吸收系数为 [14]

$$\mu_{ffv} = \sum N_i \sigma_{iffv}, \quad (10)$$

$$\sigma_{iffv} = \frac{16\pi^2 e^2 h^2}{3\sqrt{3} c (2\pi m_e)^{3/2}} \frac{z_i^3 N_i g_{iff}}{(kT)^{1/2} (h\nu)^3}, \quad (11)$$

$g_{iff}$  是自由 - 自由吸收冈特因子.

### 3.4 散射过程

在本文的计算中, 因为入射光子能量处于 730 eV 附近, 远远小于电子静止能量 0.51 MeV, 所以采用了 Thomson 截面  $\mu_{scatt}$ .

### 3.5 不透明度的计算

确定了以上各个量之后, 就可以定义总的不透明度:

$$\kappa_v = [\mu_{bbv} + \mu_{bfv} + \mu_{ffv}] (1 - e^{-h\nu/kT}) + \mu_{scatt}, \quad (12)$$

这样入射光通过等离子体后的能量转移就可以表达为

$$F_v = e^{-\kappa_v l}, \quad (13)$$

$l$  为等离子体厚度.

## 4 计算结果

### 4.1 离子布居数

离子数密度  $N_i$  和  $i$  离子能级数密度  $N_{it}$  都是求解不透明度的重要参数. 在局部热动平衡近似条件下, 我们通过求解 Boltzmann-Saha 方程来得到离子数密度  $N_i$ , 进而获得  $N_{it}$ . 计算结果表明, 在温度约为 21 eV, 密度为 0.004 g/cm<sup>3</sup> 条件下, 主要存在的

离子为 Fe VI, Fe VII, Fe VIII, Fe IX 和 Fe X 如图 2 所示.

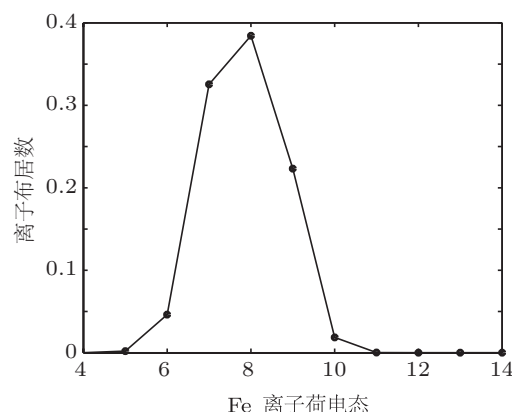


图 2 温度为 21 eV, 密度为 0.004 g/cm<sup>3</sup> 条件下 Fe 等离子体的离子数布居

### 4.2 电子跃迁振子强度

在本文的研究中, 束缚吸收过程是产生实验吸收谱的主要过程, 因此振子强度的精确程度直接影响谱线的拟合结果. 我们利用完全相对论的原子数据计算程序 (flexible atomic code, FAC) [15] 计算了 Fe 等离子体的能级和 Fe VI — Fe X 离子的 2p → 3d 电子跃迁的振子强度. FAC 方法是基于全相对论量子力学的计算方法, 采用 jj 耦合近似, 求解 Dirac 方程, 得到波函数与能量等参数. 在跃迁振子强度的计算过程中, 充分考虑了组态相互作用的影响, 包含了电子最高激发到 7s 轨道的组态. 我们同时计算了振子强度的长度规范和速度规范两种表示形式, 来验证结果的正确性, 因为长度规范和速度规范越接近就说明计算波函数越精确 [16]. 我们给出了 Fe VII 离子和 Fe VIII 离子的跃迁振子强度的长度规范与速度规范的比值  $V_{el}/L_{en}$ , 横坐标对应相应的跃迁能量.  $V_{el}/L_{en}$  的值越接近 1 说明计算结果越精确. 从图 3 可以看出对所有的跃迁, 其比值除了少数几个点偏离较远外, 大部分点都在 0.9 附近, 这说明我们的结果比较精确, 符合光谱拟合的要求.

### 4.3 光电离截面的计算

本文的计算中, 我们比较了光电离过程与束缚吸收过程对光子吸收的影响, 发现光电离过程要比束缚吸收小几个量级, 因此在光电离截面的计算中我们利用非共振 FAC 方法计算了铁离子基态和低激发态的光电离截面. FAC 采用扭曲波 (DW) 方法

来计算光电离截面, 不考虑通道耦合, 计算简单快捷, 得到非共振的光电离截面. 其计算公式为<sup>[15]</sup>

$$\sigma_{PI} = 2\pi\alpha \frac{1 + \alpha^2 \varepsilon}{1 + 0.5\alpha^2 \varepsilon} \frac{df}{dE}, \quad (14)$$

其中  $\alpha$  为精细结构常数,  $\varepsilon$  是散射电子的能量. 作为例子我们给出了 Fe VIII 离子的计算结果, 如图 4.

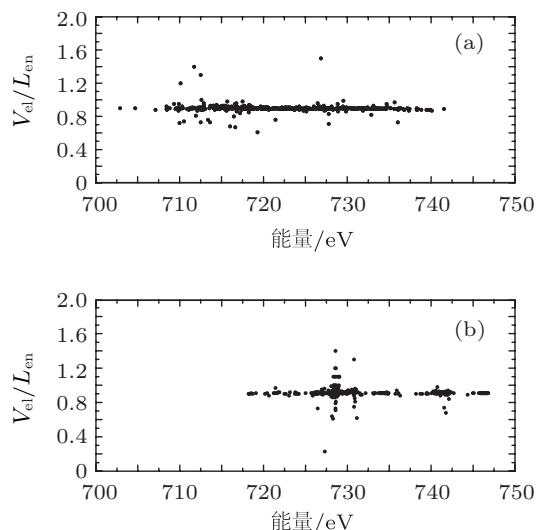


图 3  $2p \rightarrow 3d$  跃迁的振子强度速度规范与长度规范的比值随跃迁能量的变化关系 (a) Fe VII 离子; (b) Fe VIII 离子

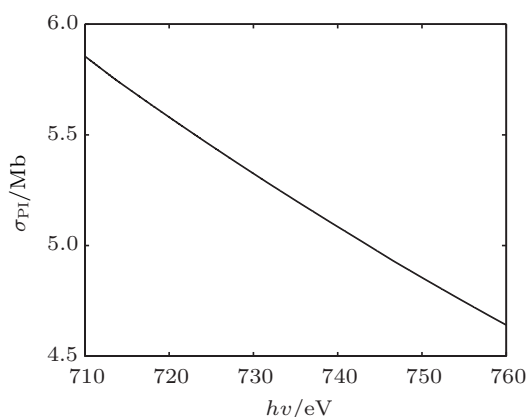


图 4 Fe VIII 离子的光电离截面

#### 4.4 实验透射谱的拟合

在实验过程中, 等离子体的温度和密度都是在变化的. Chenais-Popovics 利用流体力学模拟得到了实验光谱测量过程中等离子体的温度为 18—21 eV 密度为 0.002—0.004 g/cm<sup>3</sup>[9]. 而不同的温度密度条件对离子布居数会产生很大的影响, 进而影响到最终拟合结果. 其中温度是主要的因素. 我们使用不同的温度条件获得了不同的离子布

居数, 并产生了相应的透射谱. 通过与实验光谱的比较我们确定了等离子体的温度为 21 eV, 密度为 0.004 g/cm<sup>3</sup>. 计算结果如图 1 所示. DLA 的结果要比 SCO 和 STA 的结果好很多, 其吸收的强度与 SOSA 方法的结果相当, 但是 DLA 的吸收谱线有更多的细致的吸收结构.

DLA 计算的结果仍然比实验值低. 产生这种结果的原因可能有: 实验测量时所使用的 TIAP 晶体谱仪的二次反射会很大程度上导致测量结果的降低<sup>[9]</sup>. 实验样品的厚度测量不准确导致计算所用面密度的不确定. 等离子体温度的不确定, 以及等离子体的热动平衡条件 (LTE) 假设可能在某些地方不成立, 偏离 LTE 条件的等离子体的光谱会与 LTE 条件下的等离子体有很大的差别. 为了得到较好的拟合结果, 我们把吸收面密度作为参数来拟合实验数据, 得到了最佳拟合结果, 如图 5 所示, 此时的吸收面密度为 12  $\mu\text{g}/\text{cm}^2$ . 这一结果与 Chenais-Popovics 等人的 SOSA 方法的结果相同.

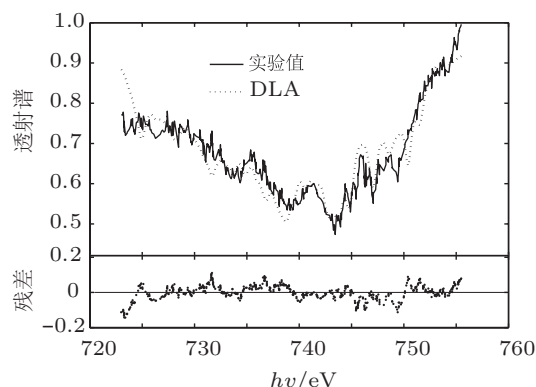


图 5 DLA 模型拟合实验透射谱的结果及残差分布图 铁等离子体温度为 21 eV, 吸收面密度为 12  $\mu\text{g}/\text{cm}^2$

#### 4.5 DLA 预测吸收谱

我们利用 DLA 模型计算了密度为 0.004 g/cm<sup>3</sup>, 温度为 10—50 eV 范围的铁的吸收谱线来分析其变化特征, 以便用于活动星系核吸收光谱的研究. 如图 6 所示, 我们给出了不同温度的吸收谱的比较图. 从图 6 可以看出, 在 10—50 eV 的温度范围内铁的吸收谱始终呈现出 UTA 的结构, 这是因为在这一温度范围内主要存在的离子为 Fe III—Fe XV, 这些较低电离的铁离子的吸收谱都是不可分辨的结构. 另外, 随着温度的升高其吸收的强度有增大的趋势, 其中最明显的变化是随着温度的升高吸收谱向高能量方向移动. 对于两个相邻的温度的吸收谱, 其吸收峰值所对应的能量值差为 19 eV 左右. 其原

因是随着温度的升高, 等离子体的电离度增大, 不同温度的等离子体中占主导地位的铁离子不同, 因此产生了这一现象.

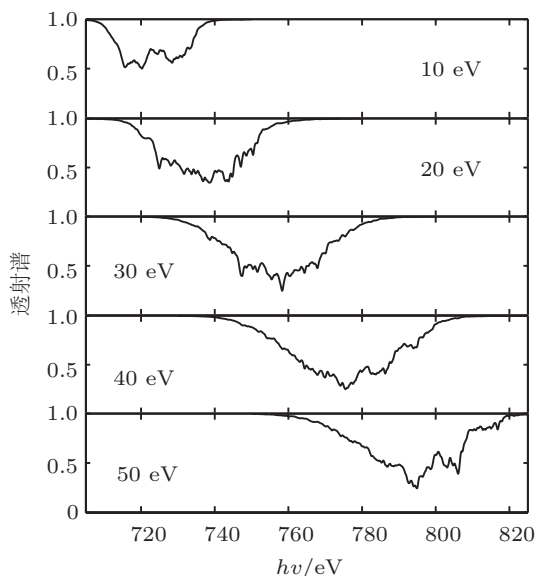


图 6 密度固定为  $0.004 \text{ g/cm}^3$ , 温度为  $10\text{--}50 \text{ eV}$  范围的铁吸收谱的变化

## 5 总结

铁  $M$  壳层 UTA 在许多活动星系核的 X 射线光谱中是一个重要的特征, 它在这些天体的光谱研究中有重要的作用. 一般认为, 这些 UTA 是由一些外流的等离子体对中心辐射的吸收造成的. Holczer 等<sup>[17]</sup> 研究了活动星系 NGC 3783 的光谱后, 发现铁  $M$  壳层 UTA 并不是由外流的等离子体造成的, 而是由周围的尘埃物质的吸收造成的. 这个结论仍在讨论当中, 主要集中在他们采用的模型和原子数据是否准确, 由此可见实验室测量就显得十分重要. Chenais-Popovics 等利用高能激光器在实验室中对 Fe  $M$  UTA 进行了研究, 并使用不同的方法拟合了光谱, 但是他们的结果与实验数据差异明显. 我们使用细致谱线模型重新拟合了实验光谱, 计算结果不仅提高了与实验的拟合程度, 而且很好地描述了实验测量中的某些精细结构, 同时给出了温度  $10\text{--}50 \text{ eV}$  范围的预测吸收谱.

感谢国家天文台的梁贵云博士对本文提出的宝贵意见.

- [1] Pounds K A, Nandra K, Stewart G C, George I M, Fabian A C 1990 *Nature* **344** 132
- [2] Nandra K, Pounds K A 1994 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **268** 405
- [3] Fabian A C, Nandra K, Reynolds C S, Brandt W N, Otani C, Tanaka Y, Inoue H, Iwasawa K 1995 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **277** L11
- [4] Liedahl D A, Torres D F 2005 *Can. J. Phys.* **83** 1177L
- [5] Rogers F J, Iglesias C A 1992 *Astrophys. Space Sci.* **79** 507
- [6] Gu M F, Holczer T, Ehud B, Kahn S M 2006 *Astrophys. J.* **641** 1227
- [7] Sako M 2001 *Astron. Astrophys.* **365** L168
- [8] Holczer T, Behar E, Kaspi S 2005 *Astrophys. J.* **632** 788
- [9] Chenais-Popovics C, Merdji H, Missalla T, Gilleron F, Gauthier J, Blenski T, Perrot F, Klapisch M, Bauche-Arnoult C, Bauche J, Bachelier A, Eidmann, Klaus 2000 *Astrophys. J. Suppl.* **127** 275
- [10] Bauche J, Bauche-Arnoult C, Klapisch M 1987 *Adv. At. Mol. Phys.* **23** 131
- [11] Li S C 1992 *High Temperature Radiation Physics and Quantum Theory* (Beijing: National Defence Industry Press) pp60–65 (in Chinese) [李世昌 1992 高温辐射物理与量子辐射理论 (北京: 国防工业出版社) 第 60–65 页]
- [12] Abdallah J, Clark R E H 1991 *J. Appl. Phys.* **69** 23
- [13] Zeng J, Jin F, Yuan J, Lu Q, Sun Y 2000 *Phys. Rev. E* **62** 7251
- [14] Rose S J 1992 *J. Phys. B* **25** 1667
- [15] Gu M F 2003 *Astrophys. J.* **582** 1241
- [16] Marketos P, Zambetaki I, Kleidis M 1993 *Z. Phys. D* **27** 17
- [17] Holczer T, Behar E, Kaspi S 2005 *Astrophys. J.* **632** 788H

# Research on the opacity of Fe $M$ -shell unresolved transition array\*

Dong Fu-Tong Wang Fei-Lu Zhong Jia-Yong Zhao Gang<sup>†</sup>

(National Astronomical Observatories, Chinese Academy of Science, Beijing 100012, China)

(Received 14 December 2011; revised manuscript received 7 February 2012)

## Abstract

$M$ -shell unresolved transition array of iron is an important diagnostic tool of the X-ray spectrum of active galactic nuclei. This array is measured in the laboratory, and compared with several theoretical models. In the present paper, we introduce a detailed line counting model. With this model, we simulate the experimental spectra, and the comparison shows a good agreement. We also calculate the absorption spectra in a temperature range of 10—50 eV.

**Keywords:** active galactic nuclei, Fe  $M$ -shell unresolved transition array, detailed line counting model

**PACS:** 32.30.-r, 52.25.Fi, 95.30.Ky

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11173032, 11103040, 11135012).

<sup>†</sup> E-mail: gzhao@nao.cas.cn