

离化态原子 K_{α} 射线移位的规律

李家明 赵中新

(中国科学院物理研究所)

1980年5月19日收到

提 要

本文从理论上对离化态原子的 K_{α} 射线所发生的移位作了初步的研究,并总结了 K_{α} 射线随离化度和原子序变化的规律,提供了有关的数据图表,这可以用来估算各种离化态原子(原子序 $Z \leq 42$) 的 K_{α} 射线移位. 最后还讨论了测量移位的 K_{α} 射线谱,这可以应用于等离子体的杂质诊断.

一、引 言

当原子处于不同的离化程度,其电子组态将随着变化,电子-电子相互作用对能量的贡献(即直接库仑作用、交换作用、组态相互作用等)也有所不同,因此导致了能级的变动. 对应的 K_{α} 射线会产生变化和分裂,形成 K_{α} 射线组. 同时,该线组中心位置也随着不同离化程度而移位.

磁约束受控聚变的研究中,较高原子序的杂质(如 C, O, Fe, Mo 等)对热核等离子体的影响是一个重要的课题. 在热核等离子体中,杂质原子通常处于不同的离化态,于是,不同离化程度所导致 K_{α} 射线组的移位可以用来监视各种离化态的杂质^[1]. 这种“杂质 K_{α} 射线谱诊断”的优点是,在较窄的波段内可以得到杂质原子各种离化态分布的信息,因此,将有利于发展杂质的时空分辨诊断. 在每次等离子体放电中,能够对各种离化态杂质的时空行为进行监视,肯定会为研究杂质的影响提供重要实验数据. 还有,利用重离子加速器进行原子碰撞的基本研究中,猛烈的离子-原子碰撞会引起非常丰富的各种激发,电离,电荷交换过程. 这些反应的产物可能是异常激发的离化态原子(即 K 电子和多个 L 电子同时被电离激发),然后再发射移位的 K_{α} 射线组^[2]. 因此对发射的 K_{α} 射线组的光子进行能谱分辨,并且还和离子-原子碰撞进行符合测量,可以用来研究各种过程的机理.

在本文中,我们对各种离化态原子(原子序 $Z \leq 42$) 的 K_{α} 射线组移位进行了初步的理论研究. 总结了 K_{α} 射线随不同离化程度而移位的规律. 最后,为了阐明离化态原子 K_{α} 射线组的移位可以被用作等离子体杂质的诊断,我们简单地计算含铁等离子体在电子温度为 1keV 时的 K_{α} 射线谱.

二、 K_{α} 射线组的移位

利用 Hartree-Slater 平均自洽场理论来估算离化态原子(原子序 $Z \leq 42$) 的 K_{α} 射线组中心位置的移动. 所谓 Hartree-Slater 自洽场理论基本上是一种独立电子平均自洽场模型^[3]. 这里“独立电子”是指原子系统中各个电子可以用各种单电子轨道函数来描述.

$$\varphi_{nlm}(r, \varrho) = U_{nl}(r)Y_{lm}(\varrho). \quad (1)$$

单电子轨道函数 φ_{nlm} 的下标代表主量子数 n , 角动量子数 l , 磁量子数 m , 它们对应着不同的原子壳层. 原子系统的多电子波函数则由这些单电子轨道函数和电子自旋函数的反对称乘积组成. 这些电子轨道函数偶合在一起, 整个原子系统具有一定的总轨道角动量 L 、总自旋 S 和总角动量 $J = L + S$, 还有其对应的磁量子数分别为 M, M_s 和 M_j . 不同的量子数组 (L, M) 或 (J, M_j) 则表示在空间中该原子的电子密度的不同排列方向(列向). 在平均自洽场模型中我们对不同排列方向平均, 因此电子密度为球对称分布即

$$\rho(r) = \frac{1}{4\pi} \sum_{(nl)} \omega_{nl} [U_{nl}(r)]^2. \quad (2)$$

这里, ω_{nl} 为 nl 次壳层的电子占有数, 满足下列关系:

$$\sum_{(nl)} \omega_{nl} = N, \quad (3)$$

N 为总电子数. 所有径向波函数 $P_{nl}(r) = rU_{nl}(r)$ 则必须满足共同的薛定谔方程(在本文中, 除非特别说明, 一律采用原子单位.)

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V_{\text{SCF}}(r) - \epsilon_{nl} \right) P_{nl}(r) = 0, \quad (4)$$

ϵ_{nl} 为电子在 nl 次壳层的轨道能; 这里 $V_{\text{SCF}}(r)$ 为自洽势, 自洽势本身则又为电子密度(即波函数平方)的函数, 因此其解答必须在满足自洽条件下求得.

在薛定谔方程(4)中自洽势具体地可以写成

$$V_{\text{SCF}}(r) = -\frac{Z}{r} + V_c(r) + V_{\text{exc}}(r), \quad (5)$$

这里第一项 $-Z/r$ 是原子核对电子的库仑吸引势能; 第二项则是电子-电子间排斥库仑势能

$$V_c = \frac{1}{r} \int_0^r 4\pi \rho(x) x^2 dx + \int_r^\infty \frac{4\pi \rho(x) x^2}{x} dx; \quad (6)$$

第三项是局部近似的交换作用势能

$$V_{\text{exc}}(r) = \frac{-3}{2\pi} \bar{\alpha} [3\pi^2 \rho(r)]^{1/3}, \quad (7)$$

式中 $\bar{\alpha}$ 为可调参数. 当 $\bar{\alpha} = 1$, 即所谓的 Slater 势^[4]; 当 $\bar{\alpha} = 2/3$, 即所谓的 Kohn-Sham 势^[5], 我们对远程的自洽势 $V_{\text{SCF}}(r)$ 还采纳了符合物理图象的修正, 即

$$V_{\text{SCF}}(r) = \text{较小值} \left[V_{\text{SCF}}(r), \frac{-(Z - N + 1)}{r} \right]. \quad (8)$$

应用 Hartree-Slater 自洽场模型($\bar{\alpha} = 1$), 对于各种离化态的原子 ($Z \leq 42$) 进行系统研究, 并分别求出其自洽势 $V_{\text{SCF}}(r)$. 还以微扰理论考虑轨道能的相对论效应修正, 即

$$\bar{\epsilon}_{nl} = \epsilon_{nl} - \frac{\alpha^2}{8} \langle P^4 \rangle_{nl} + \langle \nabla^2 V_{\text{SCF}}(r) \rangle_{nl}, \quad (9)$$

式中 α 为精细结构常数(1/137.04), 而 P 为电子的动量算符. 然后, 取 $2p$ 和 $1s$ 轨道能之差来估算 K_α 射线组中心位置:

$$(\bar{h\nu})_K = \bar{\epsilon}_{2p} - \bar{\epsilon}_{1s}. \quad (10)$$

对于中性原子, 本文计算值与实验值^[6]比较, 得到良好的符合(准确度在 1% 左右). 因此, 我们可以有信心地研究各种离化态原子 K_α 射线组移位的规律.

对于离化态原子, 其次壳层轨道能 $\bar{\epsilon}_{nl}$ 一般可以用类里德伯公式表示

$$\bar{\epsilon}_{nl} = -(Z_{nl}^*)^2/2n^2. \quad (11)$$

这里, n 为该次壳层的主量子数. $Z_{nl}^* = Z - \sigma_{nl}$ 为有效核电荷, σ_{nl} 则是其余电子对 nl 次壳层的电子产生的有效屏蔽数, 通常是总电子数 n 的函数, 几乎不随原子序 Z 而变化. 对于各种离化态原子, 其所有被占有次壳层的有效屏蔽数变化的规律将另文讨论^[7]. 利用 (10) 和 (11) 式, K_α 射线中心位置就可以写为原子序和有效屏蔽数的函数

$$(\bar{h\nu})_K = \frac{3Z^2}{8} - \frac{Z}{4} (4\sigma_1 - \sigma_2) + \frac{1}{8} (4\sigma_1^2 - \sigma_2^2). \quad (12)$$

这里, σ_1 和 σ_2 分别是 $1s$ 和 $2p$ 次壳层的有效屏蔽数. 因此, 当某离化态原子的电离度增加 1 度时, K_α 射线组发生的移位为

$$\begin{aligned} \delta(\bar{h\nu})_K &= \frac{Z}{4} (4\Delta\sigma_1 - \Delta\sigma_2) \\ &\quad - \frac{1}{8} (8\sigma_1\Delta\sigma_1 - 4\Delta\sigma_1^2 - 2\sigma_2\Delta\sigma_2 + \Delta\sigma_2^2). \end{aligned} \quad (13)$$

而 $\Delta\sigma_1$ 和 $\Delta\sigma_2$ 则分别是由于减少一个外层电子而引起 $1s$ 和 $2s$ 次壳层有效屏蔽数的减少值. (13) 式中的第一项通常较第二项为大. 当 $4\Delta\sigma_1 < \Delta\sigma_2$ 时, K_α 射线组由于电离度的增加就会产生“红移”. 例如, 离化态的铁原子当 $3d$ 次壳层电子顺序剥离时, K_α 射线组依次产生 1eV 左右的“红移”. 当 $4\Delta\sigma_1 > \Delta\sigma_2$ 时, K_α 射线组则随电离度增加而产生“紫移”. 图 1 表明了各种离化态原子的 K_α 射线组移位和总电子数 $\mathcal{N}$ 的关系. 这里总电子数 $\mathcal{N}$ 对应着 K_α 跃迁初态的总电子数. 例如 $\mathcal{N} = 8$ 代表初态的主要组态为 $(1s^2 2s^2 2p^5)$ 其对应的 K_α 射线组移位则是类氧离子(即 $\mathcal{N} = 8$) $2p - 1s$ 跃迁线和类氟离子($\mathcal{N} = 9$) 所产生的 $2p - 1s$ 跃迁线之间形成的移动. 从图 1 可见, K_α 射线组移位定性上反映出各种次壳层结构. 例如对于离化态的氩原子当 $11 \leq \mathcal{N} \leq 16$, 即 $3p$ 次壳层电子依照顺序被剥离时, K_α 射线组移位大约在 1eV 左右. 当 $9 \leq \mathcal{N} \leq 10$, 即 $3s$ 次壳层电子顺序剥离时, 移位略增而在 2eV 左右. 当 $3 \leq \mathcal{N} \leq 8$, 即 $2p$ 次壳层电子顺序剥离时, 移位则在 24eV 左右, 这与最近的实验结果符合(即利用加速器产生的离子来进行碰撞实验中, 引起靶原子的内壳层电子激发而产生的 K_α 射线线谱^[7]). 对于等电子系列的各种不同离子, 从 (13) 式可知, 其 K_α 射线组移位和原子序具有线性变化关系, 如图 2 所示. 可以利用这简

1) 中国科学院物理研究所工作报告.

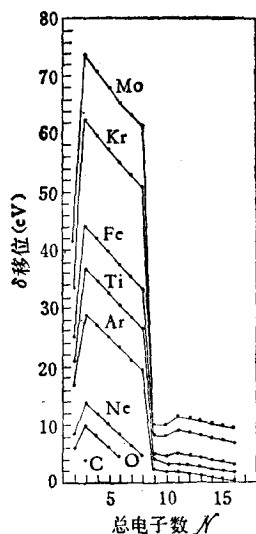


图 1 K_{α} 射线组与离化程度的关系 N 为发射 K_{α} 射线组的离化态原子所拥有的电子总数, K_{α} 射线组移位为离化态原子(总电子数为 N)的 K_{α} 射线组中心相对于低一度离化态原子(总电子数为 $N+1$)的 K_{α} 射线组中心的移动

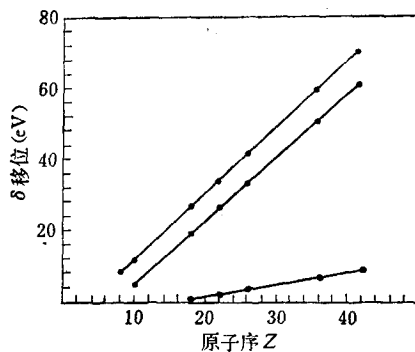


图 2 等电子系列的 K_{α} 射线组移位与原子序的关系

曲线 1—— $(1s^2 2s^2 2p) \rightarrow (1s^2 2s^2)$ 跃迁;
曲线 2—— $(1s^2 2s^2 2p^2) \rightarrow (1s^2 2s^2 2p^2)$ 跃迁;
曲线 3—— $(1s^2 2s^2 2p^3 3s^2 3p^2) \rightarrow (1s^2 2s^2 2p^3 3s^2 3p^2)$ 跃迁

单的关系进行内插而得到原子序 $Z \leq 42$ 的离化态原子的 K_{α} 射线组移位。

在总结了离化态原子的 K_{α} 射线组移位的变化规律后,我们希望能够说明,如何利用本文的结果而得到原子序 $Z \leq 42$ 的离化态原子的 K_{α} 射线组的中心位置。首先,从文献[6]所编汇的实验数据得到该原子在未离化情况下产生的 K_{α} 射线位置 $(h\nu)_{\text{exp}}$ 。然后,决定该离化态原子是正处在剥离 nl 次壳层(已剥离 i 个 nl 电子)。在图 3 中,内插得到刚开始剥离 nl 次壳层的离化态原子产生 K_{α} 射线组相对于未离化情况下原子产生 K_{α} 射线的移动 Δ 。最后,利用图 1 和图 2 可以内插得到顺序剥离 nl 电子所产生的移位,分别是 $\delta_2, \dots, \delta_i$ 。因此该离化态原子的 K_{α} 射线组中心位置可以估算为

$$(\overline{h\nu})_K = (h\nu)_{\text{exp}} + \Delta + \delta_2 + \dots + \delta_i. \quad (14)$$

例如,依照上述步骤估算 Zn^{+22} 所产生 K_{α} 射线组中心位置为 8711.1eV, 与自洽场计算结果 8711.8eV 比较,其误差在 1eV 左右。

三、讨 论

高温等离子体中含有各种离化态原子。这些离化态原子由于电子碰撞引起 $(2p-1s)$ 辐射跃迁。从前面的讨论可知,当 $2p$ 次壳层被剥离时,可以引起较大的 K_{α}

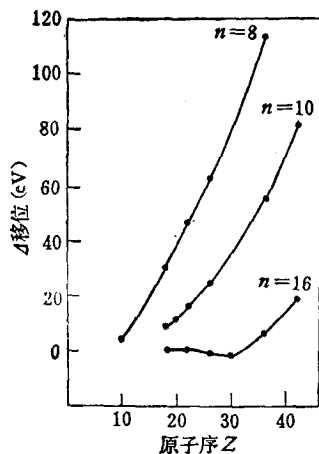
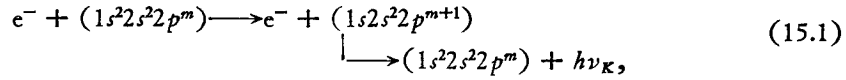


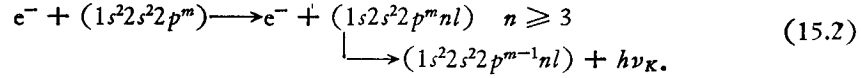
图 3 $3p, 3s, 2p$ 次壳层电子开始剥离的离化态原子所产生 K_{α} 射线组中心位置相对于未离化情况下的原子所产生 K_{α} 射线的移动 Δ

射线组移位. 因此, 现在仅讨论 $n = 2$ 的壳层被剥离的各种离化态原子. 导致 K_{α} 辐射的电子碰撞过程有

1) 电子与离子(电离度为 $\mathcal{Z}_i$)的碰撞激发过程

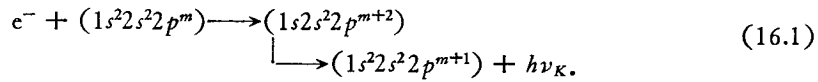


碰撞过程(15.1)式将导致电离度为 $\mathcal{Z}_i$ 的离子产生 K_{α} 射线组

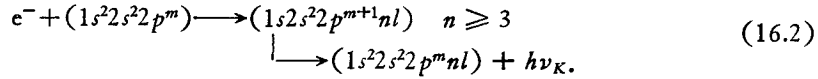


过程(15.2)所产生的 K_{α} 射线组则将包括在电离度为 $(\mathcal{Z}_i + 1)$ 的离子所产生的 K_{α} 射线组内.

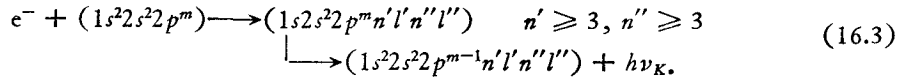
2) 电子与离子(电离度为 $\mathcal{Z}_i$)共振复合过程(即双电子复合过程)



过程(16.1)将产生电离度为 $(\mathcal{Z}_i - 1)$ 的离子的 K_{α} 射线组.

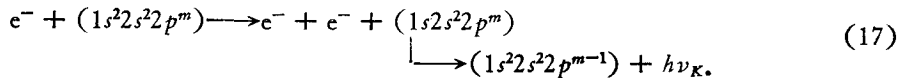


过程(16.2)所产生的 K_{α} 射线组的位置则将落于电离度为 $\mathcal{Z}_i$ 的离子所发射的 K_{α} 射线组内. 还有



过程(16.3)所导致的 K_{α} 射线组则将和电离碰撞所产生的 K_{α} 射线组重叠.

3) 碰撞电离过程



因此, 过程(17)将产生电离度为 $(\mathcal{Z}_i + 1)$ 的离子的 K_{α} 射线组.

最后, 为了进一步说明 K_{α} 射线移位与等离子体 X 射线线谱诊断的关系, 对于含铁等

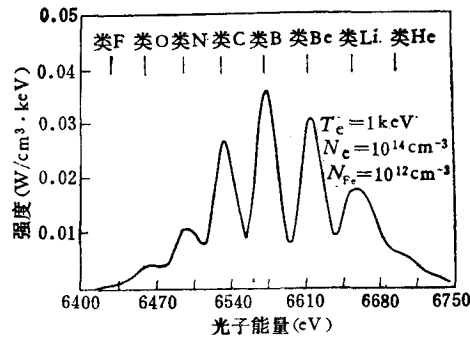


图4 含铁等离子体 K_{α} 射线谱 “类C”仅表示 K_{α} 射线组的位置, 其强度则是类N, 类C, 类B 离子由于电子碰撞[分别为(16.1), (15.1), (16.2)和(15.2)式]而产生

离子体 (电子温度 $T_e = 1\text{keV}$, 电子密度 $n_e = 10^{14}\text{cm}^{-3}$, 铁原子密度 $n_{Fe} = 10^{12}\text{cm}^{-3}$), 还简单地计算了铁离子的 K_α 射线谱. 考虑了碰撞激发过程 [(15.1)和(15.2)式]^[8], 共振复合过程 [(16.1)和(16.2)式]^[9], 在电子温度为 1keV 并无超热电子 (或高能逃逸电子) 时, 碰撞电离过程 (17) 和共振辐射复合过程 (16.3) 的影响可以忽略. 当 X 射线谱分辨能力不高时 (即 8eV 左右), 各 K_α 射线组内的分裂线则不能分辨而分别形成各个线带 (如图 4 所示).

本文计算结果基本上和美国 Los Alamos 实验室计算结果^[9]一致. 当 X 射线谱分辨能力较高时, 解释 K_α 射线组所有的详细结构则需要考虑所有的分裂线的位置和前面讨论的三类过程中的各种末态的分支比.

谨向中国科学院数学研究所电子计算机中心提供帮助的同志们表示感谢.

参 考 文 献

- [1] K. W. Hill *et al.*, Princeton Plasma Physics Laboratory Report (PPPL-1457), (1977).
- [2] P. Richard, Atomic Inner-Shell Processes, Vol. 1, edited by B. Crasemann (Academi Press, N. Y. 1975) p. 99.
- [3] F. Herman and S. Skillman, Atomic Structure Calculations (Prentice-Hall Inc. Englewood Cliffs. N. J. 1963).
- [4] J. C. Slater, *Phys. Rev.*, **81**(1951), 385.
- [5] W. Kohn and L. J. Sham, *Phys. Rev.*, **140A**(1965), 1133.
- [6] J. A. Bearden, *Rev. Mod. Phys.*, **39**(1967), 82.
- [7] T. Tonuma, Y. Awaga, T. Kambara, H. Kumgai, I. Kohuo and S. Özkök, *Phys. Rev.*, **A20**(1979), 989.
- [8] H. van Regemoter, *Astrophys. J.*, **136**(1962), 906.
- [9] A. L. Mertz, R. D. Cowan and N. H. Magee, Jr., Los Alamos Scientific Laboratory Report LA-6220-MS (1976).

SYSTEMATIC VARIATION OF LINE-SHIFT OF K_α RADIATION FROM ATOMIC IONS

LI JIA-MING (C. M. LEE) ZHAO ZHONG-XIN

(Institute of Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

We present here a preliminary theoretical study on the lineshift of the K_α radiation from atomic ions. The systematic variation of the K_α radiation shift on the degree of ionization as well as the atomic number is examined up to the intermediate- Z element Mo. We also argued that measurements on such K_α spectra are relevant to impurity diagnostics in plasmas.