

高 Z 元素类镍离子谱研究*

周裕清 张保汉 杨国洪 雷安乐

(西南核物理与化学研究所, 成都 610003)

董 晨 钟

(西北师范大学物理系, 兰州 730070)

(1993 年 9 月 3 日收到)

用 PET 平晶谱仪测量了 Hf, Ta, W 和 Re 激光等离子体发射波长范围为 $5-8 \text{ \AA}$ 的软 X 射线谱, 重点研究了其类镍离子谱线, 精确测量和准确辨认出四种高 Z 元素的 37 条 $n=3-4$ 的类镍离子共振跃迁线和内壳层跃迁线。整个测量范围内谱线精确波长值的绝对误差小于 $0.005 \text{ \AA}$ 。与 MCDF 方法和 HFR 方法得到的理论计算结果比较, 两者符合相当好。

PACC: 5225P; 3220R; 5250J

1 引 言

高剥离态离子谱学研究在 X 射线激光、可控聚变、原子谱学和等离子体诊断等方面具有重要的学术意义和广泛的应用价值, 特别是近 10 年来, 高 Z 元素高剥离态离子的能级结构、光谱特性, 越来越受到有关专家的重视。已有理论和实验证实^[1,2], 部分高 Z 元素的类镍离子的某些 $4-4$ 跃迁已实现了软 X 射线放大, 这无疑使类镍谱的研究具有更深远的意义; 在原子结构计算^[3]方面, 相对论效应、量子电动力学效应以及组态相互作用等因素的影响相当明显, 必须要有精确的实验数据来检验。另外, 高剥离态离子谱包含了其热等离子体的丰富信息和许多特征, 所以系统、精确地研究谱的结构、受激态全部机制等问题, 对等离子体诊断和激光等离子体的动力学研究都是十分有意义的。

从 80 年代开始, 国外研究者相继发表了一些高 Z 元素的离子谱实验数据。Zigler 等人^[3]测量和辨认了 Tm^{+4} , Yb^{+4} , Hf^{+4} , Ta^{+5} , W^{+6} 和 Re^{+7} 的 $3d-4p$, $4f$ 和 $3p-4s$, $4d$ 跃迁线; Seely 等人^[4]先后报道了 W, Re 的类铁、类钴、类铜和类锌离子的 $3-3$, $4-4$ 和 $4-5$ 跃迁线以及 Ta, Au, Pb, Bi 和 Th 的类铜离子 $4-5$ 跃迁线, 并计算了 $Ru^{+15}-U^{+63}$ 的类铜等电子序列离子能级, 但没有发表类镍离子的数据。

本文报道利用星光强激光装置产生的 Hf, Ta, W, Re 等离子体, 研究其发射的软 X 射线谱的初步结果, 观测的这四种元素离子谱中包含了十分丰富的类铁, 类钴, 类镍, 类铜和类锌等电子序列的 $n=3-4$ 强跃迁线及其它跃迁线。本文给出软 X 射线区的类镍离子跃迁线的测量和分类结果, 并与 MCDF (multiconfigurational Dirac-Fock) 方法和

* 国家自然科学基金及中国工程物理研究院科学基金资助的课题。

2 实验技术

实验在 100GW 钽玻璃激光装置上进行。激光光束经聚焦后垂直入射平面厚靶, 入射光束为倍频光, 能量为 12—24J, 脉宽为 650—950ps, 用针孔相机监测的靶点直径约为 120 μm , 如此, 入射在平面靶上的光束功率密度在 8×10^{13} — $2 \times 10^{14} \text{W/cm}^2$ 之间。

使用 PET($2d = 8.74 \text{\AA}$) 平面晶体谱仪测量 Hf, Ta, W, Re 四种元素的高离化态等离子体发射的波长范围为 5—8 $\text{\AA}$ 的软 X 射线谱, 谱仪与入射激光光束的夹角约为 45° , 狭缝距光源 20mm, 单发胶片记录, 采用 Kodak AA-5 型 X 射线胶片。狭缝处用 35 μm 的 Be 箔挡掉可见光。

实验所用靶均为平面固体靶, 包括研究元素靶、Al 靶和两者构成的复合靶。靶材料纯度均在 99.99% 以上。将厚度为 1000 $\text{\AA}$ 的 Al 镀在被研究元素的表面, 构成复合靶, 利用 Al 的类氢, 类氦强跃迁线进行谱的波长刻度。用一台针孔相机随机监测打靶激光的光斑大小, 针孔直径为 15 μm , 放大倍数约为 10 倍, 空间分辨率小于 5 μm 。用一台可见光条纹相机监测每一发打靶时的激光脉冲宽度。

3 谱线处理、波长计算及辨认

胶片记录的 X 射线谱经 PDS-1010M 黑度计扫描后形成位置-黑度数据文件。将此文件移植在 Compaq 386/33 微机上进行处理, 包括用离散函数褶积滑动变换法作谱数据光滑, 其变换函数为半宽度取 4, 变换宽度取 7 的高斯函数。寻峰方法为对称零面积变换法, 其对称零面积变换函数也选为高斯函数。对不同情况的谱, 选用不同半宽度、变换宽度的高斯寻峰函数。寻峰时, 先用“宽窗”的变换以抑制高基底和假峰, 再用“窄窗”变换以分辨重峰。

目前, 晶体谱仪的波长计算大多采用曲线拟合法, 即将部分已知波长的强线作特征线, 用最小二乘法将波长拟合成谱线位置的多项式函数。若特征线的波长和相对位置足够精确, 选取合适的特征线数量和多项式拟合阶数, 这种方法得到的结果精度将大大提高^[9]。

我们采用常规法^[9]与曲线拟合法相结合的方法计算波长, 即先用常规法对谱进行初步处理, 再用拟合法进行正式计算。在实际处理过程中, 用外标准波长进行常规法计算, 存在一个约 20m $\text{\AA}$ 的系统偏差, 因此复合靶进行的波长刻度, 只用来作为选取内标准波长的参考, 即尽量多地找出感兴趣元素的类镍离子强跃迁线作为内标准波长, 以这些自身特征线再分别对 Hf, Ta, W 和 Re 激光等离子体 X 射线谱进行处理。在测量范围内, 选取四种元素的内标准波长数目为 5 条, 拟合阶数为 $n = 3-4$, 如此得到的光谱波长最大绝对误差在 $\pm 0.003 \text{\AA}$ 之间, 最大相对误差为 0.06%。

数据的其他主要误差来源如下: 谱线相对位置测量误差, 其绝对误差小于 $\pm 0.5 \mu\text{m}$; 晶格常数 $2d$ 的误差约为 $\pm 0.001 \text{\AA}$; 另外还有晶体固有分辨率对谱线的影响等; 最后我们

估计整个测量范围内所给波长结果的绝对误差在 $\pm 0.005 \text{ \AA}$ 以内。

我们将主要按照以下几条依据来进行谱线的辨认和分类：

- 1. 与已发表的 Hf, Ta, W, Re 激光等离子体 X 射线谱的波长和相对强度的实验结果进行比较；
- 2. 根据 ab initio 原子结构理论计算结果；
- 3. 根据相邻元素的类镍离子谱线波长或能级，沿等电子序列按莫塞莱定律进行内插外推。

谱线相对强度仅进行了 Be 箔的衰减效应修正,此值仅供参考。

4 结果与讨论

测量的 Hf, Ta, W, Re 激光等离子体发射的 5—8 $\text{\AA}$ 范围的软 X 射线谱中，观测到相

表 1 Hf 的类镍离子线跃迁的分类(波长单位: $\text{\AA}$)

跃 迁	实 验 结 果				理 论 计 算			
	本工作		Zigler		MCDF		HFR	
	波长	相对强度	波长	相对强度	波长	gf	波长	gf
$3p^6 3d^{10} - 3p^6 3d_{3/2}^9 4p_{1/2}$	7.739	65	7.739	80	7.744	0.136	7.722	0.129
$3p^6 3d^{10} - 3p^6 3d_{3/2}^9 4p_{3/2}$	7.594	80	7.594	85	7.599	0.255	7.578	0.311
$3p^6 3d^{10} - 3p^6 3d_{5/2}^9 4p_{3/2}$	7.339	40	7.339	40	7.346	0.027	7.332	0.041
$3p^6 3d^{10} - 3p_{1/2}^4 3d^{10} 4s_{1/2}$	6.598	75	6.596	80	6.596	0.347	6.598	0.323
$3p^6 3d^{10} - 3p^6 3d_{3/2}^9 4f_{5/2}$	6.415	15 ^b	6.419	15 ^b	6.411	0.007	6.395	0.004
$3p^6 3d^{10} - 3p^6 3d_{3/2}^9 4f_{7/2}$	6.316	40	6.317	30	6.322	1.67	6.313	1.811
$3p^6 3d^{10} - 3p^6 3d_{5/2}^9 4f_{5/2}$	6.125	100	6.125	100	6.122	6.14	6.127	6.126
$3p^6 3d^{10} - 3p_{1/2}^4 3d^{10} 4s_{1/2}$	5.774	20	5.780	30	5.776	0.052	5.783	0.132
$3p^6 3d^{10} - 3p_{3/2}^4 3d^{10} 4d_{3/2}$	5.638	30	5.640	30	5.632	0.052	5.641	0.045
$3p^6 3d^{10} - 3p_{3/2}^4 3d^{10} 4d_{5/2}$	5.586	60	5.586	85	5.579	1.20	5.588	1.066

表 2 Ta 的类镍离子线跃迁的分类(波长单位: $\text{\AA}$)

跃 迁	实 验 结 果				理 论 计 算			
	本工作		Zigler		MCDF		HFR	
	波长	相对强度	波长	相对强度	波长	gf	波长	gf
$3p^6 3d^{10} - 3p^6 3d_{3/2}^9 4p_{1/2}$	7.446	90	7.447	65	7.450	0.139	7.430	0.130
$3p^6 3d^{10} - 3p^6 3d_{3/2}^9 4p_{3/2}$	7.303	100	7.301	55	7.304	0.253	7.284	0.309
$3p^6 3d^{10} - 3p^6 3d_{5/2}^9 4p_{3/2}$	7.050	45	7.051	20	7.054	0.0265	7.041	0.040
$3p^6 3d^{10} - 3p_{3/2}^4 3d^{10} 4s_{1/2}$	6.371	65	6.370	35	6.366	0.347	6.371	0.321
$3p^6 3d^{10} - 3p^6 3d_{3/2}^9 4f_{5/2}$	6.166	20 ^b	6.176	15 ^b	6.176	0.006	6.162	0.004
$3p^6 3d^{10} - 3p^6 3d_{3/2}^9 4f_{7/2}$	6.094	30	6.092	35	6.089	1.76	6.088	1.900
$3p^6 3d^{10} - 3p^6 3d_{5/2}^9 4f_{5/2}$	5.906	70	5.907	100	5.895	6.09	5.900	6.079
$3p^6 3d^{10} - 3p_{1/2}^4 3d^{10} 4s_{1/2}$	5.555	30			5.551	0.054	5.559	0.136
$3p^6 3d^{10} - 3p_{3/2}^4 3d^{10} 4d_{3/2}$	5.435	25			5.434	0.056	5.445	0.051
$3p^6 3d^{10} - 3p_{3/2}^4 3d^{10} 4d_{5/2}$	5.383	80			5.380	1.20	5.392	1.067

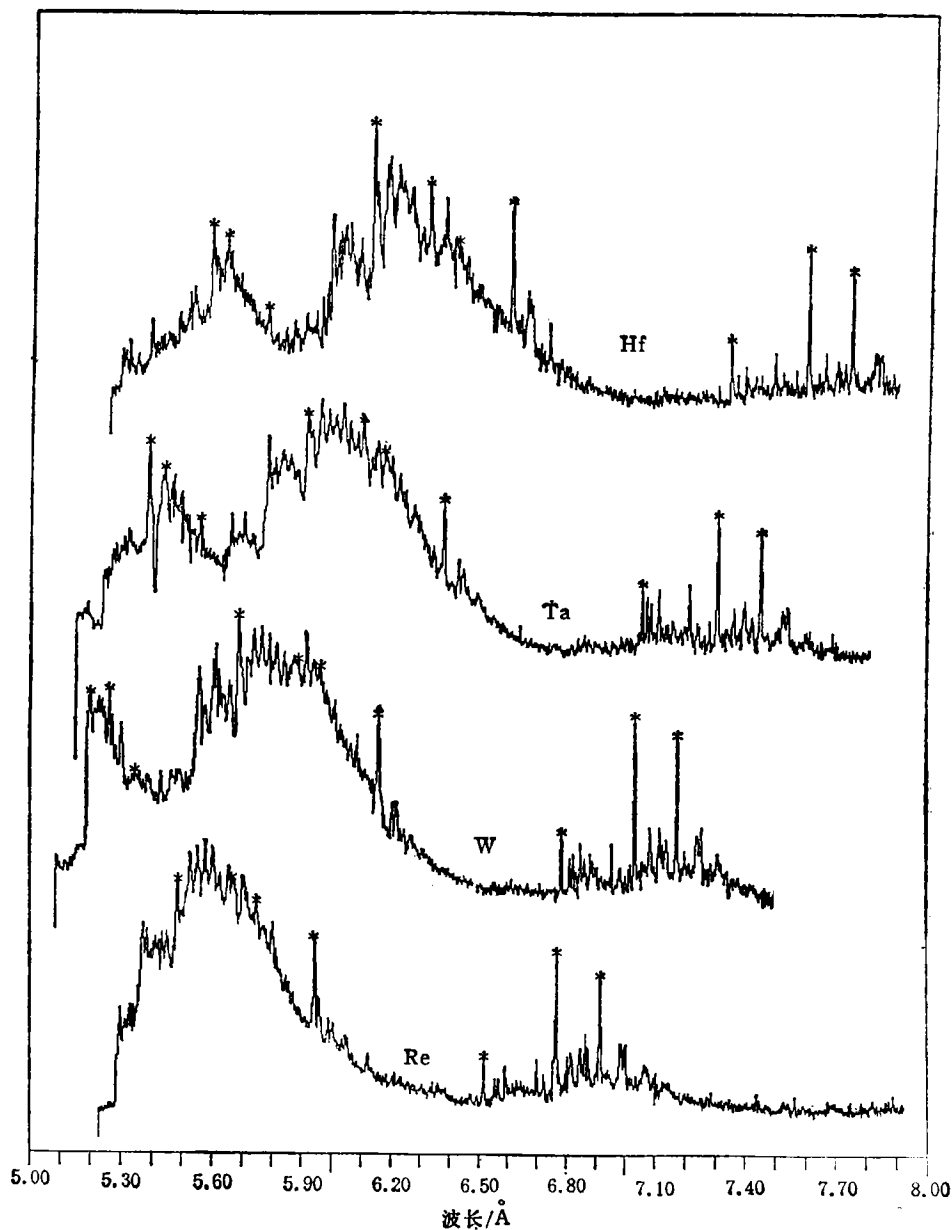


图1 Hf, Ta, W, Re 的X射线谱

当丰富的高剥离态离子跃迁线。图1示出由黑度计扫描的各元素激光等离子体的X射线谱。我们对感兴趣的类镍离子线作了重点辨认和归类,表1—表4的实验结果给出各元素谱线的分类、波长和相对强度,所有跃迁都是从 $J = 1$ 能级到 $J = 0$ 基态。表中除本文结果外,也列出 Zigler 等人发表的实验结果;理论计算一栏还列出了由 Zigler 等人用 *ab initio* MCDF 得到的理论波长值和 *gf* 值以及我们用 HFR 方法得到的理论值。这两种理论计算的结果有一定差异,特别是 *gf* 值相差较大,说明 HFR 方法对高 Z 元素已

表 3 W 的类镍离子线跃迁的分类(波长单位: Å)

跃 迁	实 验 结 果				理 论 计 算			
	本工作		Zigler		MCDF		HFR	
	波长	相对强度	波长	相对强度	波长	gf	波长	gf
$3p^63d^{10}-3p^63d_{5/2}^94p_{1/2}$	7.170	80	7.170	100	7.176	0.141	7.155	0.131
$3p^63d^{10}-3p^63d_{5/2}^94p_{3/2}$	7.028	100	7.024	90	7.029	0.252	7.008	0.309
$3p^63d^{10}-3p^63d_{5/2}^94p_{3/2}$	6.779	35	6.775	30	6.781	0.026	6.767	0.040
$3p^63d^{10}-3p_{3/2}^53d^{10}4s_{1/2}$	6.154	50	6.154	30	6.150	0.347	6.156	0.318
$3p^63d^{10}-3p^63d_{5/2}^94f_{5/2}$	5.959	10 ^b	5.956	10 ^b	5.955	0.005	5.941	0.003
$3p^63d^{10}-3p^63d_{5/2}^94f_{7/2}$	5.886	10 ^b	5.871	45	5.871	1.85	5.863	1.989
$3p^63d^{10}-3p^63d_{5/2}^94f_{5/2}$	5.686	70	5.689	90	5.682	6.04	5.685	6.031
$3p^63d^{10}-3p_{3/2}^53d^{10}4s_{1/2}$	5.342	10 ^b			5.340	0.055	5.347	0.139
$3p^63d^{10}-3p_{3/2}^53d^{10}4d_{3/2}$	5.259	40			5.247	0.062	5.259	0.058
$3p^63d^{10}-3p_{3/2}^53d^{10}4d_{5/2}$	5.197	25			5.194	1.21	5.206	1.066

表 4 Re 的类镍离子线跃迁的分类(波长单位: Å)

跃 迁	实 验 结 果				理 论 计 算			
	本工作		Zigler		MCDF		HFR	
	波长	相对强度	波长	相对强度	波长	gf	波长	gf
$3p^63d^{10}-3p^63d_{5/2}^94p_{1/2}$	6.914	75	6.914	100	6.916	0.144	6.896	0.132
$3p^63d^{10}-3p^63d_{5/2}^94p_{3/2}$	6.766	100	6.765	75	6.768	0.251	6.748	0.308
$3p^63d^{10}-3p^63d_{5/2}^94p_{3/2}$	6.518	35	6.518	40	6.523	0.025	6.509	0.039
$3p^63d^{10}-3p_{3/2}^53d^{10}4s_{1/2}$	5.943	55	5.943	35	5.945	0.348	5.952	0.316
$3p^63d^{10}-3p^63d_{5/2}^94f_{5/2}$	5.748	20	5.740	20 ^b	5.746	0.005	5.732	0.003
$3p^63d^{10}-3p^63d_{5/2}^94f_{7/2}$	5.665	15 ^b	5.663	50	5.664	1.93	5.657	2.078
$3p^63d^{10}-3p^63d_{5/2}^94f_{5/2}$	5.485	50	5.484	90	5.479	5.99	5.482	5.980

不够适合。我们主要依据 MCDF 方法的计算结果辨认谱线。强度值的上标 *b* 表示此线为混合展宽线。

图 1 和表 1—表 4 所示表明, 每种元素的类镍离子谱中除了可观测辨认为三条强的 $3d^{10}-3d^94p$ 共振跃迁线、三条 $3d^{10}-3d^94f$ 共振跃迁线, 还观测辨认为强度比某些共振跃迁线更强的内壳层跃迁线, 它们分别是两条 $3p^63d^{10}-3p^53d^{10}4s$ 跃迁线和两条 $3p^63d^{10}-3p^53d^{10}4d$ 跃迁线。ReXLVIII 的 $3p^63d^{10}-3p^53d^{10}4d$ 跃迁线和 $3p^63d^{10}-3p^5\left(\frac{1}{2}\right)3d^{10}4s$ 跃迁线超出了谱仪测量范围, 即测量和辨认了 Hf, Ta, W 三种元素各有 10 条类镍离子线。观测到 ReXLVIII 有 7 条跃迁线, 其中 TaXLVI 和 WXLVII 的 $3p^63d^{10}-3p^53d^{10}4d$ 两条跃迁线和 $3p^63d^{10}-3p^5\left(\frac{1}{2}\right)3d^{10}4s$ 内壳层跃迁线系第一次给出实验结果。

对高 *Z* 元素的类镍离子谱, 国内还未见发表任何实验数据, 国外也还没有形成较系统精确的结果, 因此某些谱线的归类存在着一定的分歧, 尤其是一些与相邻剥离态离子谱线相混合的、强度较小的跃迁线, 其辨认十分困难, 大多作为群线而不是单线来解释, 称之为 unresolved transition arrays^[6]。从本文结果来看, 每种元素的三条 $3d-4p$ 线, $3p^63d^{10}-$

$3p^5 \left(\frac{3}{2} \right) 3d^{10}4s$ 线, $3d^{10}-3d^9 \left(\frac{3}{2} \right) 4f \left(\frac{5}{2} \right)$ 线和三条 $3p^6 3d^{10}-3p^5 3d^{10}4d$ 线在谱中均十分明显;另外, HfXLV 和 TaXLVI 的 $3d^{10}-3d^9 \left(\frac{5}{2} \right) 4f \left(\frac{7}{2} \right)$ 共振跃迁线也十分清晰可辨。其它跃迁线即 $3d^{10}-3d^9 \left(\frac{5}{2} \right) 4f \left(\frac{5}{2} \right)$ 共振跃迁线、 $3p^6 3d^{10}-3p^5 \left(\frac{1}{2} \right) 3d^{10}4s$ 内壳层跃迁线等,由于其强度较小,又与其它电荷态的谱线相混合,如 $3d^{10}-3d^9 \left(\frac{5}{2} \right) 4f \left(\frac{5}{2} \right)$ 线,在极小范围内,它与其类锌离子的某些伴线互相混合。又如 $3p^6 3d^{10}-3p^5 \left(\frac{1}{2} \right) 3d^{10}4s$ 线,它与其类铜离子的某些伴线互相混合。它们的辨认就必须从多方面进行考虑,除依据其预期波长值、 gf 值,还需和其他研究者所测各种离子谱的结构进行比较,用沿等电子序列内插外推的方法进行验证,以期得到准确的辨认和高精度的波长、强度结果。

本文提供的辨认和波长实验值,其绝大部分与其预期结果符合相当好。对已辨认的这十种跃迁,四种离子的跃迁能量的平方根与 Z 之间有非常好的线性关系。其它研究者对其它元素的测量结果与这个线性关系也具有很好的相关性。

由本文结果看来, $3d-4p$, $3d^{10}-3d^9 \left(\frac{3}{2} \right) 4f \left(\frac{5}{2} \right)$ 共振跃迁线以及 $3p^6 3d^{10}-3p^5 \left(\frac{3}{2} \right) 3d^{10}4s$ 内壳层跃迁线,在一个相当宽的温度范围中,它们都能明显地被观测,即它们对等离子体状态不十分敏感。而另一些跃迁,如 $3p^6 3d^{10}-3p^6 3d^9 \left(\frac{5}{2} \right) 4f \left(\frac{7}{2} \right)$ 和 $3p^6 3d^{10}-3p^5 \left(\frac{1}{2} \right) 3d^{10}4s$ 内壳层跃迁线等,其等离子体状态对它们的强度有较大的影响。

为了正确地辨认和分类谱线,需要对高剥离度的几个相邻电荷态离子谱作系统研究,尤其对混合展宽线,此因素尤其重要。其次,谱的相对强度也是关键因素之一,要选择高质量的胶片并科学合理地进行处理,对其波长响应进行测算,还需考虑晶体反射系数、滤片透射和几何因子等因素,对强度进行修正。

鉴于以上因素,我们将在此基础上进一步深入研究类镍及其几个邻近电荷态,尤其是类钴、类铜、类锌等电荷态的离子谱线,并将对几条混合跃迁线做重点处理,这对谱线研究本身和应用研究十分必要。

本实验得到激光器运行组郑万国、张小民等全体工作人员,以及常富华、李文洪等同志的大力协助和指导,在此向他们表示衷心感谢。

- [1] S. Maxon, P. Hagelstein *et al.*, *Phys. Rev.*, **A37** (1988), 2227.
- [2] B. J. MacGowan, S. Maxon *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **59**(1987), 2157.
- [3] A. Zigler, H. Zmoram *et al.*, *J. Opt. Soc. Am.*, **70**(1980), 129.
- [4] J. F. Seely, C. M. Brown *et al.*, *J. Opt. Soc. Am.*, **B6**(1989), 3.
- [5] P. Quiner and E. Biemont, *Physica Scripta*, **43**(1991), 150.
- [6] M. Klapisch, P. Mandelbaum *et al.*, *Physica Scripta*, **34**(1986), 51.
- [7] N. Schweiger, M. Klapisch *et al.*, *J. Opt. Soc. Am.*, **71**(1981), 219.
- [8] 周裕清、张保汉等,原子与分子物理学报, **4**(1989), 1217.
- [9] 冯贤平、徐至展等,中国激光, **4**(1989), 151.
- [10] J. Bauch *et al.*, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, **24**(1991), 1.

A STUDY ON X-RAY SPECTRA OF NICKEL-LIKE IONS OF HIGH-Z ELEMENTS

ZHOU YU-QING ZHANG BAO-HAN YANG GUO-HONG LEI AN-LE

(*Southwest Institute of Nuclear Physics and Chemistry, Chengdu 610003*)

DONG CHEN-ZHONG

(*Department of Physics, Northwest Normal University, Lanzhou 730070*)

(Received 3 September 1993)

ABSTRACT

Soft X-ray spectra of laser-produced plasmas of highly ionized Hf, Ta, W and Re were obtained by using a PET crystal spectrometer in the wavelength region of 5—8 Å. Some of resonance and inner-shell transitions of the type $n = 3-4$ in the Ni-like isoelectronic sequence were identified. Wavelengths were measured with an uncertainty of ± 0.005 Å. Agreement with computational results of MCDF and HFR method is excellent.

PACC: 5225P; 3220R; 5250J