

类 Ne La 离子的 3—2 跃迁及其 伴线结构的理论研究*

董晨钟 周效信

(西北师范大学物理系, 兰州 730070)

(1995年1月10日收到)

在对类 Ne La 离子及其近邻的类 Na、类 Mg 和类 Al 离子的 $n=3-n=2$ 跃迁的波长和跃迁几率详细计算的基础上, 考虑了等离子体中单个谱线的展宽和谱线之间的重叠. 在高温条件和局部热动平衡近似下, 得到了这些电离态离子同时存在时产生的具有带状分布特征的谱带的中心波长和半最大全宽度. 解释了已有的实验结果, 并预言了存在于更长波段上的谱带的结构.

PACC: 3130J; 3270

1 引 言

类 Ne 离子光谱结构的研究是人们极感兴趣的课题. 一方面, 由于类 Ne 离子的闭合壳层结构其状态相当稳定, 使得这种离子可能存在于温度范围很广的等离子体中. 目前人们已经在激光产生的等离子体、托卡马克等离子体以及真空火花等离子体等光源中观测到了大量的类 Ne 离子谱^[1-4], 并将这些谱线成功地应用于对等离子体状态的诊断中^[5]; 另一方面, 人们发现在高温等离子体中, 电子的碰撞激发能够导致类 Ne 离子 $2p^53p$ 和 $2p^53s$ 组态能级上粒子数的反转, 并已在许多离子上观测到了激光输出^[6-8]. 为了更好地理解这种激光机制的动力学特性, 并向波长更短的“水窗”波段推进, 人们研究了大量中 Z 和高 Z 元素的类 Ne 离子及其近邻电离态的光谱结构^[9-14].

有关类 Ne La 离子及其近邻电离态的 $n=3-n=2$ 跃迁, Aglitsky 等曾通过真空火花光谱研究了 0.2167—0.2455 nm 范围内的结构^[4], 发现在类 Ne 离子跃迁线的近旁, 分布着一些具有不同宽度的伴线峰. 他们认为这些伴线峰可能是由于近邻的类 Na 和类 Mg 离子态所产生. 但由于缺乏深入的理论分析, 当时既没有确定这些伴线峰的归属, 也没有对它们的增宽机制给予解释. 后来, Beiersdorfer 等在托卡马克等离子体中^[13], 更精确地测量了类 Ne 离子的各 $n=3-n=2$ 的跃迁线. 虽然在他们的工作中也提到, 在各个类 Ne 跃迁线的长波端存在着伴线, 但没有给出具体结果, 也没有进行分析. 本文在对类 Ne La 离子及其近邻的类 Na、类 Mg 和类 Al 离子的 $n=3-n=2$ 跃迁的波长和跃迁几率详细计算的基础上, 考虑了等离子体中谱线的展宽和重叠效应. 在高温条件和局部热动平衡近似

*国家自然科学基金及甘肃省自然科学基金资助的课题.

下,得到了这些电离态共同存在时产生的具有带状分布特征的谱带的中心波长和半最大全宽度.从理论上很好地解释了已有的实验结果,并预言了存在于更长波段上的谱带的结构.

2 谱线波长与跃迁几率的计算

对于高电离离子,相对论效应和电子相关效应都是很重要的.在谱线的波长和跃迁几率的计算中,我们采用了 Cowan 提出的准相对论组态相互作用理论^[15].其主要点如下:

2.1 在自洽场近似下,核电荷数为 Z ,具有 N 个电子的原子(或离子)的电子组态 $[(n_1 l_1)^{W_1} (n_2 l_2)^{W_2} \cdots (n_i l_i)^{W_i} \cdots (n_q l_q)^{W_q}] (N = W_1 + W_2 + \cdots + W_q)$ 中,任一电子的单电子径向薛定谔方程为

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} + V^i(r) - \frac{\alpha^2}{4}(\epsilon_i - V^i(r))^2 - \delta_{l_i,0} \frac{\alpha^2}{4} \left[1 + \frac{\alpha^2}{4}(\epsilon_i - V^i(r))^{-1} \left(\frac{dV^i(r)}{dr} \right) \left(\frac{dP_i/dr}{P_i} - \frac{1}{r} \right) \right] \right\} P_i(r) = \epsilon_i P_i(r), \quad (1)$$

其中 α 为精细结构常数.在 Hartree 加统计交换势近似下, $V^i(r)$ 的具体表达式为

$$V^i(r) = -\frac{ZZ}{r} + \sum_{j=1}^q (W_j - \delta_{ij}) \int_0^\infty \frac{2}{r_>} P_j^2(r_2) dr_2 - 0.65 \left[\frac{\rho'}{\rho' + 0.5/(n_i - l_i)} \right] \left(\frac{\rho'}{\rho} \right) \left(\frac{24\rho}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (2)$$

其中 $r_>$ 为 r 和 r_2 中较大者.

$$\rho'(r) = \rho(r) - [\min(2, W_i)] \rho_i(r), \quad (3)$$

其中 $\rho_i(r)$ 为第 i 个子壳层中电子的球面平均密度,而 $\rho(r)$ 则为原子中电子的总球面平均密度,具体为

$$\rho(r) = \sum_{i=1}^q W_i \rho_i(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \sum_{i=1}^q W_i P_i^2(r). \quad (4)$$

这种近似方法通过非相对论哈密顿量中增加相对论效应的主要项(即质量-速度项和 Darwin 项),把主要的相对论效应直接包括在单电子径向波函数中.近来, Kobus 等^[16]通过对这种准相对论方法(RHF)和完全的相对论方法(DHF)的比较研究指出,无论对轻原子还是重原子的内外壳层电子,两种方法的计算精度相当.

2.2 把系统的波函数表示成所有具有强组态相互作用的组态波函数的叠加,即

$$\Psi = \sum_B \sum_Y Y_{BY} \psi_{BY}, \quad (5)$$

其中 ψ_{BY} 为组态 B 的具有同一总角动量的第 Y 个谱项的波函数,由系统的所有单电子波函数构成的 Slater 行列式的线性组合确定; Y_{BY} 为展开系数(波函数分量);求和是对各种可能组态的具有同一总角动量的所有谱项进行的.

系统的哈密顿量选取如下形式(原子单位):

$$\hat{H} = - \sum_{i=1}^N (\nabla_i^2 + \frac{2Z}{r_i}) + \sum_{i \neq j} \frac{2}{r_{ij}} + \sum_i \rho_i l_i s_i, \quad (6)$$

其中包括了所有电子的动能、电子在核场中的势能、电子间的静电相互作用以及电子的自旋与轨道之间的相互作用能. 系统的能量为哈密顿算符在(5)式那样的波函数之间的矩阵元构成的能量矩阵的本征值.

2.3 在这一理论框架下, 由组态 B 的态 i 向组态 B' 的态 j 发生电偶极跃迁的几率(长度公式)为

$$g_i A_{ij} = 2.0261 \times 10^{-6} \lambda^{-3} \left| \sum_B \sum_{B'} \tilde{Y}_B D_{BB'} Y_{B'} \right|^2, \quad (7)$$

其中 g_i 为初能态的统计权重; λ 为跃迁波长; Y_B 为组态 B 的态 i 的本征函数分量构成的子矢, \tilde{Y}_B 为 Y_B 的转置; $Y_{B'}$ 为组态 B' 的态 j 的本征函数分量构成的子矢; $D_{BB'}$ 为在纯耦合表象中的偶极约化矩阵.

由于从闭合的 L 壳层激发两个电子需要的能量要比激发一个电子的大得多, 因此在多种电离态共存的高温等离子体中, 形成一个 L 电子激发态的几率远比形成两个 L 电子激发态的几率大. 这里我们考虑了由一个 L 壳层电子激发到 $3l$ ($l = s, p, d$) 形成的激发态向低激发态(或基态)的 $n = 3 \rightarrow n = 2$ 跃迁, 具体情况如表 1 所示. 计算中包括了各激发态间的强组态相互作用.

表 1 计算中包括的 $n = 3 \rightarrow n = 2$ 跃迁的组态

电离态	3p—2s 跃迁		3d—2p 跃迁		3s—2p 跃迁	
	上组态	下组态	上组态	下组态	上组态	下组态
类 Ne	2s2p ⁶ 3p	2p ⁶	2p ⁵ 3d	2p ⁶	2p ⁵ 3s	2p ⁶
类 Na	2s2p ⁶ 3s3p	2p ⁶ 3s	2p ⁵ 3s3d	2p ⁶ 3s	2p ⁵ 3s ²	2p ⁶ 3s
	2s2p ⁶ 3p ²	2p ⁶ 3p	2p ⁵ 3p3d	2p ⁶ 3p	2p ⁵ 3s3p	2p ⁶ 3p
	2s2p ⁶ 3p3d	2p ⁶ 3d	2p ⁵ 3d ²	2p ⁶ 3d	2p ⁵ 3s3d	2p ⁶ 3d
类 Mg	2s2p ⁶ 3s ² 3p	2p ⁶ 3s ²	2p ⁵ 3s ² 3d	2p ⁶ 3s ²	2p ⁵ 3s ² 3p	2p ⁶ 3s3p
	2s2p ⁶ 3s3p ²	2p ⁶ 3s3p	2p ⁵ 3s3p3d	2p ⁶ 3s3p	2p ⁵ 3s3p ²	2p ⁶ 3p ²
	2s2p ⁶ 3s3p3d	2p ⁶ 3s3p	2p ⁵ 3p ² 3d	2p ⁶ 3p ²	2p ⁵ 3s ² 3d	2p ⁶ 3s3d
类 Al	2s2p ⁶ 3s ² 3p ²	2p ⁶ 3s ² 3p	2p ⁵ 3s ² 3p3d	2p ⁶ 3s ² 3p	2p ⁵ 3s ² 3p3d	2p ⁶ 3s3p3d
	2s2p ⁶ 3s3p ³	2p ⁶ 3s3p ²	2p ⁵ 3s3p ² 3d	2p ⁶ 3s3p ²	2p ⁵ 3s ² 3p ²	2p ⁶ 3s3p ²
	2s2p ⁶ 3s ² 3p3d	2p ⁶ 3s ² 3d	2p ⁵ 3s ² 3d ²	2p ⁶ 3s ² 3d	2p ⁵ 3s3p ³	2p ⁶ 3p ³

计算结果表明: 1) 类 Ne 离子的各个跃迁都被分成了两个强的跃迁线. 尤其是对于 3d—2p 和 3s—2p 跃迁, 由于 2p 电子的强的自旋-轨道相互作用, 其相应的两个强跃迁线分得特别开. 这些跃迁的波长按 3p—2s, 3d—2p 以及 3s—2p 的顺序从小到大依次排列; 2) 在每一个类 Ne 离子跃迁线的长波端, 依次分布着大量的相对集中的类 Na、类 Mg 和类 Al 离子的跃迁线. 且不同电离态的不同跃迁线之间有严重重叠, 明显形成带状结构.

3 谱带结构的计算

考虑到实际观测光谱中各个谱线的增宽(如仪器增宽、多普勒增宽以及等离子体中的斯塔克增宽等)效应,假定每个谱线的分布的高斯线型,其半最大全宽度为 δ ,则在局部热动平衡近似下,由某一单一电离态 j 产生的重叠谱的强度分布 $I_j(\lambda)$ 可用下式计算:

$$I_j(\lambda) = \sum_i I_i(\lambda_i) e^{-\frac{\Delta E_i}{kT_e}} e^{-2.35^2 \left(\frac{\lambda - \lambda_i}{\delta}\right)^2}, \quad (8)$$

令其中 $I_i(\lambda_i)$ 为波长 λ_i 处的谱线的强度,本文简单地用理论计算的跃迁波长处的权重跃迁几率表示; ΔE_i 为相应跃迁能;求和是对同一组重叠谱线中的所有跃迁进行的; k 为玻耳兹曼常数; T_e 为等离子体中的电子温度.在高温近似下,可以忽略 $e^{-\frac{\Delta E_i}{kT_e}}$ 因子.

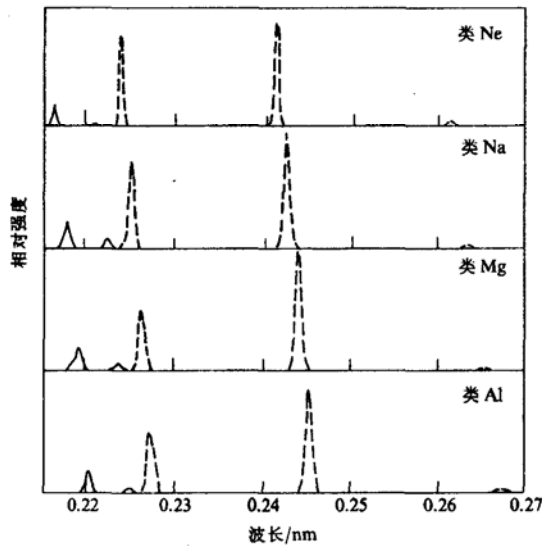


图1 各电离态离子的 $n=3-n=2$ 跃迁产生的光谱的结构
——: $3p-2s$; ---: $3d-2p$; ...: $3s-2p$

3d—2p 跃迁的 $3d_{3/2}-2p_{1/2}$ 和 $3d_{5/2}-2p_{3/2}$ 以及 3s—2p 跃迁的 $3s_{1/2}-2p_{1/2}$ 和 $3s_{1/2}-2p_{3/2}$. 其中 3d—2p 跃迁的两个特征峰最强,其次是 3p—2s 的特征峰,最弱的是 3s—2p 的特征峰.在每一个跃迁中,除 3p—2s 的短波峰比其长波峰强外,3d—2p 和 3s—2p 的长波峰均比其短波峰强.表 2 详细给出各个特征峰的中心波长和半最大全宽度.

为了进一步模拟这些电离态离子共同存在时产生的光谱的结构,我们详细分析了理论计算的各谱峰的相对强度以及 Aglitsky 等获得的实验光谱^[4]中的各个谱峰的相对强度.在选取 $W_{Ne}: W_{Na}: W_{Mg}: W_{Al} = 1:0.17:0.16:0.15$ 的情况下,获得了一个与实验相符甚好的理论模拟光谱,如图 2 所示.与图 1 比较可知:合成光谱中的一些谱带,如峰 1, 2, 3, 6, 7, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15 和 16, 仍保持了其在单一电离态下的特征,权重因子仅改变了它们的相对强度;另一些谱带,如峰 4, 5 和 8, 则由几个离得很近的较强谱带叠加而成,权重因子对这些谱带的中心波长、半最大全宽度以及其相对强度都有很大影响.表 3 详细

由于等离子体中可能同时存在多种离化态离子,且不同离化态产生的光谱也可能有重叠,因此,在模拟实际的光谱结构时,还应该将不同电离态产生的光谱进行加权叠加,即

$$I(\lambda) = \sum_j W_j I_j(\lambda), \quad (9)$$

其中的权重因子 W_j 包括了各电离态离子丰度的信息,在不同的等离子体条件下是不同的.只要确定了这些因子,就可以得到理论模拟的光谱结构.

图 1 给出在 $\delta = 0.0005$ nm 时,计算得到的各电离态离子的 $n=3-n=2$ 跃迁产生的光谱的结构.可见,各电离态都明显地形成了自己的 6 个特征谱峰,分别对应着

3p—2s 跃迁的 $3p_{3/2}-2s_{1/2}$ 和 $3p_{1/2}-2s_{1/2}$,

给出合成光谱中各个谱带的中心波长及其归属情况. 为了便于比较, 同时列出前人得到的有关实验结果. 可见, 除个别谱峰的位置与实验有较大差别(最大为 0.0009 nm)外, 均与实验符合得很好.

表 2 各个电离态的 $n=3-n=2$ 跃迁产生的谱带的中心波长和半最大全宽度

跃 迁	电离态	中心波长/nm	半最大全宽度/nm	跃 迁	电离态	中心波长/nm	半最大全宽度/nm
$3p_{1/2}-2s_{1/2}$	NeI	0.2167	0.0005	$3d_{5/2}-2p_{3/2}$	NeI	0.2417	0.0005
	NaI	0.2180	0.0009		NaI	0.2429	0.0007
	MgI	0.2193	0.0012		MgI	0.2442	0.0005
	AlI	0.2203	0.0008		AlI	0.2453	0.0008
$3p_{3/2}-2s_{1/2}$	NeI	0.2213	0.0005	$3s_{1/2}-2p_{1/2}$	NeI	0.2394	0.0005
	NaI	0.2225	0.0009		NaI	0.2414	0.0005
	MgI	0.2238	0.0012		MgI	0.2438	0.0005
	AlI	0.2249	0.0009		AlI	0.2440	0.0005
$3d_{3/2}-2p_{1/2}$	NeI	0.2242	0.0005	$3s_{1/2}-2p_{3/2}$	NeI	0.2614	0.0005
	NaI	0.2253	0.0007		NaI	0.2637	0.0007
	MgI	0.2263	0.0009		MgI	0.2654	0.0011
	AlI	0.2273	0.0010		AlI	0.2671	0.0013

表 3 合成光谱中各个谱带的中心波长及其归属

标号	中心波长/nm			归属情况	
	本文计算	Aglitsky ^[4]	Beiersdorfer ^[9]	主要电离态	跃迁组
1	0.2167	0.2167	0.2167	NeI	$3p_{3/2}-2s_{1/2}$
2	0.2181	0.2181		NaI	$3p_{3/2}-2s_{1/2}$
3	0.2194	0.2199		MgI	$3p_{3/2}-2s_{1/2}$
4	0.2202	0.2211		AlI	$3p_{3/2}-2s_{1/2}$
5	0.2225	0.2226		NaI	$3p_{1/2}-2s_{1/2}$
6	0.2242	0.2246		NeI	$3d_{3/2}-2p_{1/2}$
7	0.2253	0.2258		NaI	$3d_{3/2}-2p_{1/2}$
8	0.2271	0.2269		AlI	$3d_{3/2}-2p_{1/2}$
9	0.2417	0.2416	0.2414	NeI	$3d_{5/2}-2p_{3/2}$
10	0.2429	0.2430		NaI	$3d_{5/2}-2p_{3/2}$
11	0.2442	0.2444		MgI	$3d_{5/2}-2p_{3/2}$
12	0.2453	0.2455		AlI	$3d_{5/2}-2p_{3/2}$
13	0.2614		0.2610	NeI	$3s_{1/2}-2p_{3/2}$
14	0.2637			NaI	$3s_{1/2}-2p_{3/2}$
15	0.2654			MgI	$3s_{1/2}-2p_{3/2}$
16	0.2671			AlI	$3s_{1/2}-2p_{3/2}$

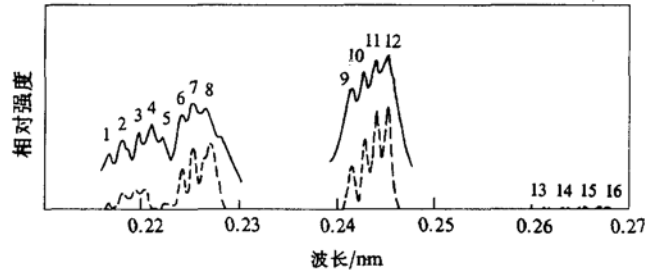


图 2 各电离态离子的 $n=3-n=2$ 跃迁产生的光谱的结构

—: Aglitsky 等的实验^[4]; ---: 本文的计算

4 结论与讨论

本文利用准相对论组态相互作用理论,详细计算了类 Ne La 离子及其近邻的类 Na、类 Mg 和类 Al 离子的 $n=3-n=2$ 跃迁的波长和跃迁几率.在此基础上,进一步考虑了等离子体中单个谱线的增宽以及谱线之间的重叠效应,在高温条件和局部热动平衡近似下,从理论上解释了前人有关高离化态 La 离子发射的 0.2167—0.2455 nm 波长范围内的实验光谱的结构,并预言了更长波段上的几个较弱谱带的中心波长和半最大全宽度.用本文提出的方法计算的大部分谱带的中心波长值与实验值符合得很好.对个别由于不同电离态的特征谱带的重叠而形成的新谱带,其理论计算值与实验值之间有较大差别,这主要是因为这些合成谱带强烈地依赖于含有不同离子态丰度信息的权重因子.本文在确定这些因子时,使用的是对实验光谱中各谱峰相对强度的估算值,而不是确切的测量结果,因此误差较大.

原则上,本文提出的方法可以进一步应用到其它离子(如类 Ni 离子)的具有这种半连续分布特征的光谱结构的分析和预言中.当然,对于一般情况下的等离子体,一方面局部热动平衡近似不一定满足,另一方面等离子体中其它的原子过程如碰撞激发、碰撞退激发以及双电子复合等,都可能对等离子体中的离子数分布产生影响,这时对等离子体光谱结构的模拟是一个很复杂的问题^[17],本文不再赘述.

- [1] P. G. Burkhalter, R. Schneider *et al.*, *Phys. Rev.*, **A18**(1978), 718.
- [2] H. Gordon, M. G. Hobby *et al.*, *J. Phys. B*, **12**(1979), 881.
- [3] E. V. Aglitsky, E. Y. Golts *et al.*, *J. Phys. B*, **14**(1981), 1549.
- [4] E. V. Aglitsky, P. S. Antsiferov *et al.*, *Can. J. Phys.*, **62**(1984), 1924.
- [5] J. Bailey, R. E. Stewart *et al.*, *J. Phys. B*, **19**(1986), 2639.
- [6] D. L. Mattbews, M. D. Rosen *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **54**(1985), 110
- [7] M. D. Rosen, P. Hagelstein *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **54**(1985), 106
- [8] B. J. MacGowan, M. D. Rosen *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **61**(1987), 5243.
- [9] P. Beiersdorfer, M. Bitter *et al.*, *Phys. Rev.*, **A34**(1986), 1297.
- [10] J. F. Seely, T. W. Phillips *et al.*, *Phys. Rev.*, **A34**(1986), 2942.

- [11] 张正泉、范品忠等, 原子与分子物理学报, 4(1987), 377.
- [12] 冯贤平、徐至展等, 原子与分子物理学报, 7(1990), 1472.
- [13] P. Beiersdorfer, S. V. Goeler *et al.*, *Phys. Rev.*, **A37**(1988), 4153.
- [14] A. Simionovici, D. D. Dicitrich *et al.*, *Phys. Rev.*, **A48**(1993), 3056.
- [15] R. D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (Berkeley, University of California Press, 1981).
- [16] J. Kobus and W. Jaskolski, *J. Phys. B*, **20**(1987), 4949.
- [17] D. R. Bates, A. E. Kingston *et al.*, *Proc. Roy. Soc.*, **A267**(1962), 297.

THEORETICAL STUDY OF SPECTRA OF 3—2 TRANSITION AND ITS SATELLITE LINES FOR Ne-LIKE ION OF La

DONG CHEN-ZHONG ZHOU XIAO-XIN

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

(Received 10 January 1995)

ABSTRACT

Based on the calculated wavelengths and transition probabilities of $n = 3$ to $n = 2$ transitions for Ne-like, Na-like, Mg-like and Al-like ions of La, in the case of high temperature condition and local thermodynamic equilibrium approximation, we simulated the spectral structure of all the charged states by considering the broadening of individual line and overlapping of a large number of lines in plasma, presented the mean wavelengths and half width of the satellite peaks, interpreted the previous experimental spectral structures, and predicted some new satellite peaks in a larger wavelength region.

PACC: 3130J; 3270