

高离化类 Ne 钷离子的双电子伴线结构的理论研究*

董晨钟 符彦飙 颀录有 李鹏程 丁晓彬

(西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070)

(2002 年 3 月 31 日收到 2002 年 6 月 3 日收到修改稿)

在对高离化态类 Ne 钷离子及其临近的类 Na、类 Mg 离子的 $n = 3 \rightarrow 2$ 跃迁的波长和强度详细计算的基础上, 考虑了等离子体中单个谱线的展宽和谱线之间的重叠, 得到了类 Ne 钷离子 $n = 3 \rightarrow 2$ 的共振线及其类 Na 和类 Mg 离子双电子伴线的结构, 并系统地分析了这些伴线对共振线波长和强度的影响.

关键词: 双电子伴线, 跃迁波长, 伴线强度

PACC: 3120B, 3270, 3280H

1. 引言

在高温等离子体中, 常常同时存在着同一元素的各种离化态的离子. 在这些离子的发射光谱中, 相对于某一离化态离子的共振跃迁线而言, 由于有额外旁观电子的存在, 在共振线附近通常伴随着大量的波长和强度不一的伴线. 伴线的存在一定程度地导致了共振线线型的加宽和谱线强度的增大. 因而在共振线用于等离子体状态诊断时, 伴线的这种效应必须予以系统考虑. 同时, 伴线光谱的数据不仅已被广泛应用于太阳、托克马克等离子体的状态诊断以及 x 射线激光和惯性约束聚变(ICF)的研究中^[1], 而且也为高温等离子体中不同离化态离子丰度的测量提供了一种方法^[2]. 目前, 有关两个或三个电子离子的双激发态产生的伴线是伴线诊断等离子体方法中最简单, 最常用的工具, 对于此类伴线的研究已经有了大量的实验和理论工作. 例如, 1995 年 Beiersdorfer 等人^[3]测量并标识了托克马克装置中 Ar^{16+} 离子的光谱, 2000 年 Smith 等人^[4]在电子束离子阱(EBIT)中测量了 Ar^{16+} 离子共振线的强度并分析了 $\Delta n \geq 1$ 伴线跃迁的贡献. 1999 年 Wang 等人^[5]计算了高 n 伴线对类氦离子 $K\alpha$ 共振线的贡献, 2001 年我们从理论上进一步研究了组态相互作用对类氦离子 $K\beta$ 共振线伴线的影响^[6]. 近年来, 对复杂离子(例如类 Ne 钷离子)伴线结构研究的进一步深入, 不

仅推动了共振线诊断技术的进一步发展, 而且也为伴线诊断等离子体的状态提供了方法和理论依据^[7,8]. 尽管, 目前已有大量的有关类 Ne 离子伴线的研究^[7-10], 但其仍远远不能满足实际的需要. 类 Ne 钷离子是 x 射线激光以及高温等离子体研究中不可缺少的元素, 由于钷的类 Na 和类 Mg 的伴线非常复杂, 而且包含有许多不同离化态离子的不同跃迁过程产生的谱线的重叠, 且其相关的研究也非常匮乏. 因此, 有必要对其进行详细的计算和分析, 以满足复杂等离子体诊断技术对高离化态离子原子结构和光谱数据的需要.

类 Ne 钷离子 $n = 3 \rightarrow 2$ 的共振跃迁主要有三组, 分别对应着 $2s^2 2p^5 3s - 2s^2 2p^6(3s - 2p)$, $2s 2p^6 3p - 2s^2 2p^6(3p - 2s)$ 和 $2s^2 2p^5 3d - 2s^2 2p^6(3d - 2p)$ 跃迁. 本文利用 Cowan 的准相对论组态相互作用理论方法和程序^[11], 系统地计算了类 Ne 钷离子的这些 $n = 3 \rightarrow 2$ 跃迁及其主要的类 Na 和类 Mg 伴线跃迁的波长和强度, 分析了类 Na 和类 Mg 离子的高 n 伴线对类 Ne 共振线的影响. 在考虑了等离子体中单个谱线的展宽和谱线之间的重叠效应等因素的情况下, 得到了表征不同电离态跃迁的整体特性的谱带的中心波长和谱线的强度, 并与一些仅有的实验做了比较, 理论与实验结果符合得比较好.

2. 理论方法

类 Ne 钷离子 $n = 3 \rightarrow 2$ 跃迁的类 Na 伴线跃迁

*教育部优秀青年教师资助计划项目, 教育部高等学校骨干教师资助计划(批准号:GG-140107361002), 国家自然科学基金(批准号:10274062), 兰州重离子加速器国家实验室原子核理论中心基金及西北师范大学科技创新工程项目(批准号:NWNU-KJCXCG-214)资助的课题.

可以表示为

$$\text{Eu}^{52+}(2l^7 3l^1 n l') \rightarrow \text{Eu}^{52+}(2l^8 n l') + h\nu. \quad (1)$$

相似地, 其类 Mg 伴线跃迁为

$$\text{Eu}^{51+}(2l^7 3s 3l^1 n l') \rightarrow \text{Eu}^{51+}(2l^8 3s n l') + h\nu'. \quad (2)$$

(1)(2)式的左边分别表示类 Na 和类 Mg 的铕离子的任意一个双激发态, 右边则表示这个双激发态中的一个 $3l^1$ 电子辐射衰变到 $2l$ 上, 分别形成了类 Na 和类 Mg 离子的低激发态, 同时放出了伴线光子 $h\nu$ 和 $h\nu'$. 产生双激发态的方式通常有两种: 其一, 自由电子与离子碰撞过程中被俘获到激发态, 而同时使另外一个束缚电子被激发(即双电子复合); 其二, 电子碰撞导致内壳层电子激发.

若用 I_{jk} 表示从一个双激发态 j 跃迁到一个单激发态 k 的谱线强度, 则类 Na 铕离子的伴线强度可用下面两项的求和来表示(对于类 Mg 铕离子可以通过对下式做简单的修改而直接得到)

$$I_{jk} = E_{jk} N_e \left(N_g^{\text{Ne-like}} R_{gj} \frac{A_{jk}^r}{\sum_{i'} A_{ji'}^a + \sum_{k'} A_{jk'}^r} + \sum_{i'} N_i^{\text{Na-like}} Q_{ij} \frac{A_{jk}^r}{\sum_{i'} A_{ji'}^a + \sum_{k'} A_{jk'}^r} \right), \quad (3)$$

其中, E_{jk} 是辐射光子的能量, N_e 是电子密度, R_{gj} 和 Q_{ij} 分别为双电子俘获率和能级 j 的内壳层电子碰撞激发率. $N_g^{\text{Ne-like}}$ 和 $N_i^{\text{Na-like}}$ 是类 Ne 基态和类 Na 单激发态的态密度. (3)式中第一项代表双电子复合的贡献, 第二项代表内壳层碰撞激发的贡献^[7]. 在高温等离子体环境中, 只有双电子复合的贡献是重要的. 本文只研究双电子复合的贡献. 这时, 根据细致平衡原理, 双电子复合的贡献可以方便地表示为

$$I_{jk}^{\text{DS}} = E_{jk} N_e N_g^{\text{Ne-like}} \frac{1}{2g_g} \left(\frac{2\pi\hbar^2}{mkT_e} \right)^{3/2} e^{-(E_j/kT_e)} F_{2jk}(j \rightarrow k), \quad (4)$$

$$F_{2jk}(j \rightarrow k) = g_g \frac{A_{ji}^a A_{jk}^r}{\sum_{i'} A_{ji'}^a + \sum_{k'} A_{jk'}^r}, \quad (5)$$

F_{2jk} 是双激发态 j 辐射衰变到单激发态 k 的伴线强度因子. A_{ji}^a 表示 $(j \rightarrow i)$ 的 Auger 衰变率, A_{jk}^r 表示 $(j \rightarrow k)$ 的辐射衰变率. 根据 Fermi 黄金定则, A_{ji}^a 和 A_{jk}^r 可分别表示为

$$A_{ji}^a = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \Psi_j \left| \sum_{s < l} \frac{1}{r_{s,l}} \right| \Psi_{i\epsilon_i} \right|^2, \quad (6)$$

$$A_{jk}^r = \frac{4e^2\omega}{3\hbar c^3 g_j} \left| \Psi_j \left| T^{(1)} \right| \Psi_k \right|^2, \quad (7)$$

其中 Ψ_j 和 Ψ_k 分别为体系共振双激发态辐射衰变

初、末态的反对称化波函数. $\Psi_{i\epsilon_i}$ 为自电离衰变末态 i 和能量为 ϵ_i 的自电离电子的波函数. ω 为辐射光子的能量, $T^{(1)}$ 为电偶极算符^[12].

所有以上与辐射和 Auger 跃迁有关的初末态的波函数、能量及跃迁概率可以利用 Cowan 的准相对论组态相互作用理论方法和程序直接得到^[11].

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 Stark 增宽等)效应, 假定每个谱线的分布为高斯线型, 其半最大宽度为 $\Delta\lambda$. 则在局部热动平衡近似下, 由某一单一电离态 i 产生的重叠谱的强度分布 $I_i^{\text{DS}}(\lambda)$ 可用下式计算:

$$I_i^{\text{DS}}(\lambda) = \sum_j \frac{I_{ijk}^{\text{DS}}}{\sqrt{2\pi}\Delta\lambda} \exp\left[-\frac{(\lambda - \lambda_{jk})^2}{2\Delta\lambda^2}\right] \times \exp\left[-\frac{\Delta E_j}{kT_e}\right], \quad (8)$$

式中 λ_{jk} 为共振双激发态辐射跃迁的波长, ΔE_j 为相应的跃迁能; k 为玻尔兹曼常数, T_e 是等离子体中电子的温度. 求和是对同一组重叠谱线中的所有跃迁进行的. 在高温等离子体中, 可以假设

$$\exp\left[-\frac{\Delta E_j}{kT_e}\right] \approx 1.$$

3. 结果与讨论

表 1 给出了计算的类 Ne 铕离子的 $3l^1-2l$ 的共振跃迁以及类 Na 离子的 $3l^1 3l^1-2l 3l^1$ 和类 Mg 离子的 $3s 3l^1 3l^1-2l 3s 3l^1$ 的伴线跃迁产生的光谱的结构(即 $3l^1$ 伴线). 其中, 每个单一谱线的半最大全宽度假设为 0.0003nm . 由表 1 可以看出, 类 Ne 离子的各个跃迁都被分成了两个强的跃迁线. 尤其对于 $3d-2p$ 和 $3s-2p$ 跃迁, 由于 $2p$ 电子的强自旋-轨道相互作用, 其相应的两个强跃迁线分得特别开. 这些跃迁的波长分别按 $3p-2s$, $3d-2p$ 以及 $3s-2p$ 的顺序从小到大依次排列. 对于相应的类 Na、类 Mg 离子的 $n=3 \rightarrow 2$ 跃迁伴线, 它们依次相对集中地分布在每一个类 Ne 离子共振跃迁线的长波端. 而且, 类 Na 和类 Mg 离子的 $n=3 \rightarrow 2$ 跃迁的伴线明显地形成了自己的 6 个特征峰, 分别对应着 $3s-2p$ 跃迁的 $3s_{1/2}-2p_{1/2}$ 和 $3s_{1/2}-2p_{3/2}$, $3p-2p$ 跃迁的 $3p_{3/2}-2s_{1/2}$ 和 $3p_{1/2}-2s_{1/2}$ 以及 $3d-2s$ 跃迁的 $3d_{3/2}-2p_{1/2}$ 和 $3d_{5/2}-2p_{3/2}$. 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; 另外,

在每一个跃迁中,除 $3p-2s$ 的短波峰比其长波峰强外, $3s-2p$ 和 $3d-2p$ 的长波峰均比短波峰强。

除了表 1 给出的 $3l'$ 伴线跃迁外,还存在着大量的高 n 伴线.就像我们在以前关于类 He 氦离子的研究中指出的那样^[5],这些高 n 伴线离共振线更近,且分布的更密.尽管每一个跃迁的贡献没有 $3l'$ 伴线的大,但它们叠加在一起的贡献却非常重要.为了进一步表示这些高 n 伴线的贡献,表 2 和表 3 分别给出了由类 Na 和类 Mg 离子的一些高双激发态

(即 $n = 4, 5, \dots, 10$)产生的 $n = 3 \rightarrow 2$ 跃迁伴线谱的中心波长和谱峰强度.作为比较,所有相应于 $3l'$ 的伴线跃迁的结果也被列出了.可以看出,无论是类 Na 还是类 Mg 离子的高 n 伴线的贡献都很重要,并且分布于 $3l'$ 线的短波方向,其中心波长和 $3l'$ 线挨得很近.另外,我们还发现,在 $\Delta\lambda$ 不够小时, $3l'$ 和高 n 的贡献将难以区分,这时高 n 伴线对各峰的中心波长和半最大宽度的影响都很大.

表 1 类 Ne 类 Na 类 Mg 钬离子 $n = 3 \rightarrow 2$ 跃迁产生的中心波长

跃迁	电离态	中心波长/nm	跃迁	电离态	中心波长/nm
$3p_{1/2}-2s_{1/2}$	Ne-like	0.1711	$3d_{5/2}-2p_{3/2}$	Ne-like	0.1940
$3p_{1/2}-2s_{1/2}$	Na-like	0.1717	$3d_{5/2}-2p_{3/2}$	Na-like	0.1948
$3p_{1/2}-2s_{1/2}$	Mg-like	0.1721	$3d_{5/2}-2p_{3/2}$	Mg-like	0.1956
$3p_{3/2}-2s_{1/2}$	Ne-like	0.1756	$3s_{1/2}-2p_{1/2}$	Ne-like	0.1884
$3p_{3/2}-2s_{1/2}$	Na-like	0.1763	$3s_{1/2}-2p_{1/2}$	Na-like	0.1892
$3p_{3/2}-2s_{1/2}$	Mg-like	0.1770	$3s_{1/2}-2p_{1/2}$	Mg-like	0.1898
$3d_{3/2}-2p_{1/2}$	Ne-like	0.1764	$3s_{1/2}-2p_{3/2}$	Ne-like	0.2105
$3d_{3/2}-2p_{1/2}$	Na-like	0.1770	$3s_{1/2}-2p_{3/2}$	Na-like	0.2115
$3d_{3/2}-2p_{1/2}$	Mg-like	0.1777	$3s_{1/2}-2p_{3/2}$	Mg-like	0.2123

表 2 类 Na 钬离子 $n = 3$ 和 $n > 3$ 伴线跃迁($3l'nl''-2l_1nl''$)的中心波长、相对强度比较

跃迁	中心波长/nm	相对强度	跃迁	中心波长/nm	相对强度
$3s_{1/2}3l''-2p_{1/2}3l''$	0.1892	16	$3p_{3/2}3l''-2s_{1/2}3l''$	0.1763	1
$3s_{1/2}nl''-2p_{1/2}nl''$	0.1883	84	$3p_{3/2}nl''-2s_{1/2}nl''$	0.1756	99
$3s_{1/2}3l''-2p_{1/2}3l''$	0.2115	23	$3d_{3/2}3l''-2p_{1/2}3l''$	0.1770	9
$3s_{1/2}nl''-2p_{3/2}nl''$	0.2104	77	$3d_{3/2}nl''-2p_{1/2}nl''$	0.1762	91
$3p_{1/2}3l''-2s_{1/2}3l''$	0.1717	35	$3d_{5/2}3l''-2p_{3/2}3l''$	0.1948	8
$3p_{1/2}nl''-2s_{1/2}nl''$	0.1709	65	$3d_{5/2}nl''-2p_{3/2}nl''$	0.1938	92

表 3 类 Mg 钬离子 $n = 3$ 和 $n > 3$ 伴线跃迁($3s3l'nl''-3s2l_1nl''$)的中心波长、相对强度比较

跃迁	中心波长/nm	相对强度	跃迁	中心波长/nm	相对强度
$3s_{1/2}3l''-2p_{1/2}3l''$	0.1898	31	$3p_{3/2}3l''-2s_{1/2}3l''$	0.1770	9
$3s_{1/2}nl''-2p_{1/2}nl''$	0.1893	69	$3p_{3/2}nl''-2s_{1/2}nl''$	0.1764	91
$3s_{1/2}3l''-2p_{3/2}3l''$	0.2123	46	$3d_{3/2}3l''-2p_{1/2}3l''$	0.1777	36
$3s_{1/2}nl''-2p_{3/2}nl''$	0.2122	54	$3d_{3/2}nl''-2p_{1/2}nl''$	0.1770	64
$3p_{1/2}3l''-2s_{1/2}3l''$	0.1721	15	$3d_{5/2}3l''-2p_{3/2}3l''$	0.1956	4
$3p_{1/2}nl''-2s_{1/2}nl''$	0.1719	85	$3d_{5/2}3l''-2p_{3/2}nl''$	0.1947	96

4. 总 结

本文详细计算了类 Ne 钬离子及其临近的类 Na

和类 Mg 离子的 $n = 3 \rightarrow 2$ 跃迁的波长和谱线强度.通过进一步考虑等离子体中单个谱线的展宽和谱线之间的重叠,得到了类 Ne 钬离子 $n = 3 \rightarrow 2$ 的共振线及其类 Na 和类 Mg 离子的伴线结构.结果表明,

高 n 伴线非常强,对整个谱形影响很大.这对伴线用于等离子体诊断和用束箔方法测量能级寿命都非常重要.另外,与 Beiersdorfer 等人在 1987 年曾做过的关于类 Ne 钨离子的 $3s-2p$ 跃迁波长的实验^[13]和 Li 等人用相对论 MCDF 方法计算所得的结果^[14]相

比,目前的计算仅仅大了 0.0003nm ,符合得相当好.这从一个侧面反映了目前计算结果的精度.我们希望本文提出的结果有助于将来实验光谱学家对类 Ne 钨离子的光谱及其相关的类 Na 和类 Mg 伴线光谱的结构进行更深入的研究.

- [1] Martinson I 1989 *Rep. Prog. Phys.* **52** 187
- [2] Bely-dubau F, Dubau J *et al* 1982 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **198** 239
- [3] Beiersdorfer P, Osterheld A L *et al* 1995 *Phys. Rev. E* **52** 1980
- [4] Smith A J, Beiersdorfer P *et al* 2000 *Phys. Rev. A* **62** 052717
- [5] Wang J G, Chang T Q *et al* 1999 *Eur. Phys. J. D* **5** 167
- [6] Dong C Z, Peng Z T *et al* 2001 *Physica Scripta*. T **92** 297
- [7] Osterheld A L and Nilsen J 1996 *Physica Scripta*. **54** 240
- [8] Dong C Z 1996 *Acta Phys. Sin.* **45** 556 [in Chinese] 董晨钟 1996 物理学报 **45** 556]
- [9] Dong C Z and Ning Y L 1996 *China. J. At. Mol. Phys.* **13** 471 [in Chinese] 董晨钟、宁雅丽 1996 原子与分子物理学报 **13** 471]
- [10] Peng Z T, Zhou Y Q, Bartnik A, Dong C Z *et al* 2001 *Chin. J. At. Mol. Phys.* **18** 54 [in Chinese] 彭志涛、周裕清、A. Bartnik、董晨钟等 2001 原子与分子物理学报 **18** 54]
- [11] Cowan R D 1981 *The theory of atomic structure and spectra*. (University of California Press, Berkeley, Los Angeles, London)
- [12] Wang J G *et al* 1999 *Phys. Rev. A* **60** 2104
- [13] Beiersdorfer P 1988 *Phys. Rev. A* **37** 4153
- [14] Li X D *et al* 2000 *Chin. Phys.* **9** 100

Theoretical study on dielectronic satellites to the highly charged Ne-like Eu resonance lines^{*}

Dong Chen-Zhong Fu Yan-Biao Xie Lu-You Li Peng-Cheng Ding Xiao-Bin
(College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China)

(Received 31 March 2002 ; revised manuscript received 3 June 2002)

Abstract

On the basis of the calculated wavelengths and intensities of $n = 3 \rightarrow 2$ transition in Ne-like, Na-like and Mg-like ions of Eu, and by considering the broadening of individual lines and overlapping of a large number of lines in plasma, we have simulated the spectral structure of $n = 3 \rightarrow 2$ resonance transition in Ne-like ions and all of the dielectronic satellites transitions of Na-like and Mg-like ions of Eu. Also the contributions from high- n dielectronic satellites to the resonance line is considered and calculated. Compared with a few existing experimental results, the dielectronic satellite wavelength of $3s-2p$ transition shows a good agreement with experimental result.

Keywords : dielectronic satellite, transition wavelength, satellite intensity

PACC : 3120B, 3270, 3280H

* Project supported by the Foundation for the Excellent Youth Scholars of the Ministry of Education of China, the Foundation for key teachers of the Ministry of Education of China (Grant No. GG-140107361002), the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10274062) and by Foundation of Center of Theoretical Nuclear Physics of National Laboratory of Heavy Ion Accelerator of Lanzhou and the Foundation of Northwest Normal University (Grant No. NWNKJCGC-214).