

拟合参量计算跃迁概率*

申晓志¹⁾ 袁 萍¹⁾²⁾† 王 杰¹⁾ 郭逸潇¹⁾ 乔红贞¹⁾ 赵学燕¹⁾

1) 西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070)

2) 中国科学院寒区旱区环境与工程研究所, 兰州 730000)

(2007 年 9 月 30 日收到, 2007 年 11 月 5 日收到修改稿)

根据光谱线相对强度和跃迁特性参数值, 通过线性拟合一次函数, 得到两个拟合参量. 借助于这些参量, 计算得到特殊激发态或高激发态谱线的跃迁概率. 目前在对 N_{II} 光谱分析的基础上, 得到了一条对耦合激发组态谱线的跃迁概率. 为求取一些在理论计算中很难处理的特殊组态或高激发态谱线的跃迁概率, 提供了一种最新的、简单可行的半经典计算方法.

关键词: 拟合, 跃迁概率, 对耦合

PACC: 3120W, 3270F

1. 引 言

理论上准确计算跃迁概率的关键是在于计算波函数^[1-5]. 对于一些特殊的组态或高激发态的处理, 在理论计算时需要充分考虑许多效应的影响^[6,7], 因此, 有时可能会遇到一定的困难. 但是, 如果从光谱诊断的角度去间接处理, 就可以避开因准确计算能级须考虑各种效应而带来的麻烦^[6-10]. 光谱本身即包含谱线跃迁特性的一些信息, 因此, 这种间接的获取方式在处理跃迁概率时是可取的.

本工作提供了一种依托于实验和计算的半经典计算跃迁概率的最新方法, 为处理一些特殊组态或高激发组态的跃迁概率提供了一种新颖的、简单可行的途径.

2. 理论方法

等离子体在局部热力学平衡(LTE)条件近似下, 对处于不同电子态上的原子或离子的布局可用 Boltzmann 分布来描述^[11].

$$\frac{N_i}{N_0} = \frac{g_i}{g_0} \exp\left[-\frac{E_i}{kT}\right], \quad (1)$$

式中, N_i 是处于 i 激发态的粒子(中性原子或离子)

数, N_0 是处于基态的粒子数, g_i 与 g_0 分别是 i 态和基态的统计权重, E_i 为 i 态激发能, k 为 Boltzmann 常数, T 是绝对温度.

体系中总粒子数 N_{TOT} 等于基态离子数和各激发态离子数的总和, 即

$$N_{\text{TOT}} = \sum_{i=0}^i N_i. \quad (2)$$

考虑到 Boltzmann 分布(1)式, 由配分函数

$$U = \sum_{i=0}^i g_i \exp(-E_i/kT) \quad (3)$$

得到

$$\frac{N_{\text{TOT}}}{U} = \frac{N_0}{g_0}. \quad (4)$$

考虑到光源分析区中激发态原子或等离子体的 Boltzmann 分布、配分函数、跃迁概率和统计权重等因素, 光源中单位立体角内谱线辐射的能量强度可表示为^[11]

$$I = \frac{hv_{ij}}{4\pi} \cdot A_{ij} \cdot N_i. \quad (5)$$

由(1)(2)(4)(5)式, 对于离子谱线, 可得到

$$I_{\text{ion}} = \frac{hv_{ij}}{4\pi} \cdot \frac{N_{\text{TOT}}}{U} \cdot g_i A_{ij} \cdot \exp(-E_i/kT). \quad (6)$$

考虑到 $v = c/\lambda$, 由此, 属于相同原子的两条离子谱线的强度可进一步由下式表示^[12]:

$$\frac{I_1}{I_2} = \frac{A_1 g_1 \lambda_2 U_2 N_{\text{TOT1}}}{A_2 g_2 \lambda_1 U_1 N_{\text{TOT2}}} \exp\left[-\frac{E_1 - E_2}{kT}\right], \quad (7)$$

* 国家自然科学基金(批准号: 40475007)和西北师范大学科技创新工程项目(批准号: NWNKJ-CXGC-03-21)资助的课题.

† E-mail: yuanp@nwnu.edu.cn

式中 λ 为谱线波长,下标 1,2 是分别指第一与第二条离子谱线.

如果两条谱线属于同一个电离级,两个配分函数 U_1, U_2 就相等,而总的粒子数 N_{TOT1} 与 N_{TOT2} 也相等(7)式可表示为

$$\frac{I_1}{I_2} = \frac{A_1 g_1 \lambda_2}{A_2 g_2 \lambda_1} \exp\left[-\frac{E_1 - E_2}{kT}\right]. \quad (8)$$

在实际计算中,谱线 2 假定为未知的待求谱线,谱线 1 选择为已知跃迁参数的谱线.为了求取谱线 2 中的一些跃迁特性参量,选取 1 为指定基谱线.谱线 1 可以选择同种离子的多条谱线,这样就可对(8)式取对数得到 $\ln\left[\frac{I_1 \lambda_1}{g_1 A_1}\right]$ 关于 E_1 的一次函数, C_2 即为基截距,

$$\ln\left[\frac{I_1 \lambda_1}{g_1 A_1}\right] = C_1 E_1 + C_2. \quad (9)$$

关于 $n < 4$ 低激发态间的跃迁,由于大部分组态为 LS 耦合,理论处理比较方便,因此,此类跃迁参量即可作为可靠的参考数据,例如对于一价氮离子, $n < 4$ 低激发 LS 耦合态间的跃迁参量计算,已经相当完善^[1-5].所以,依据观测光谱的谱线相对强度 I 及相应谱线跃迁参数 λ, g, A, E ,以 E_1 为横坐标, $\ln\left[\frac{I_1 \lambda_1}{g_1 A_1}\right]$ 为纵坐标,线性拟合得到斜率参数 C_1 和基截距参数 C_2 ,即

$$C_1 = -\frac{1}{kT}, \quad C_2 = \frac{E_2}{kT} + \ln\left[\frac{I_2 \lambda_2}{g_2 A_2}\right]. \quad (10)$$

(10)式消去参量电子温度 T ,即可得跃迁概率

$$A_2 = \frac{I_2 \lambda_2 g_2^{-1}}{\exp\left[\frac{C_1 E_2 + C_2}{k}\right]}. \quad (11)$$

因此可以借助于 LS 激发组态间跃迁的特性参数,来研究特殊激发组态或高激发组态的跃迁概率.

3. 一个算例

氮是地球大气和星际含量最丰富的元素之一,有关其一价离子跃迁特性的研究,一直是天体等离子体、大气物理、大气化学以及实验室等离子体等相关领域所关心的课题.这一方面已有许多理论工作,并且取得了一定的进展^[1-5].目前为止,在用各种方法进行的理论工作中,关于 $n \geq 4$ 激发态跃迁概率的研究,尤其是涉及组态 $4f$ 的理论计算工作需要引起注意.尽管 $4f$ 谱线的光谱大都集中在可见范围,其辐射又比较强,而且也经常被观测到^[13-17],但是,

其理论工作,特别是有关跃迁特性方面的研究,却非常少.

$N II$ 的 $2p4f$ 组态是一种特殊的对耦合^[18].在这种特殊耦合下,每一成对能级之间的间隔非常小,有的甚至仅仅几 cm^{-1} ,例如 $4f^1 F_3$ 与 $4f^3 F_2$ 之间的能级间隔只有 3 cm^{-1} ^[19],所以各种效应对能级精细结构及跃迁概率值的影响就非常重要^[6-10].能级精细结构的这一特性加大了理论计算的难度,这也是以往关于这一跃迁特性的理论工作非常少的主要原因之一.

目前的半经典计算工作中,采用 $N II$ 光谱线.由于与 $N II$ 有关的激发态为 LS 耦合谱线的跃迁参量,例如跃迁概率,振子强度,辐射寿命等,已经被计算得相当好^[1-5],因此,可将这些参量当作可靠的光谱参数.在具体的计算中,将同一组谱线中 LS 耦合的谱线视为基谱线,而 $4f$ 谱线的参数则为待求量.

图 1 是利用 Nd:YAG 激光器发出的 $1.06 \mu\text{m}$, 10 ns 的脉冲激光,通过双透镜会聚击穿纯氮气得到的一次光谱.低气压在 500 Pa 左右,光栅采用 2400 g/mm ,实验详细装置和实验方法详见文献[20].

399.50 nm , 413.37 nm 和 414.58 nm 的理论跃迁概率在文献[4,5,21]已经给出.把这三条谱线作为谱线 1,通过直线拟合得到参量 C_1 和 C_2 .在目前的工作当中, C_1 和 C_2 的误差分别为 33% 和 8% .同时将待求谱线作为谱线 2,利用线性得到的两参量即可得到 $4f$ 的跃迁概率.表 1 给出了计算所得到 407.30 nm 的跃迁概率,与 Mar 的实验值^[22]误差为 17% ,与我们先前的理论结果误差为 3% ^[6].

由于目前的工作重点是提供这种半经典计算方法,所以仅仅选取了一次光谱.当光谱选得越多时,例如,随时间,激光能量,空间变化时,拟合的 C_1 和

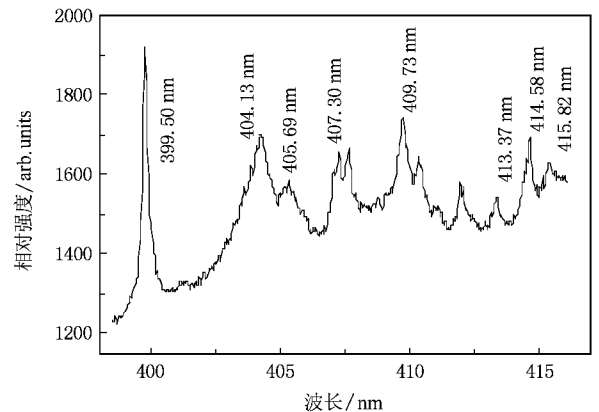


图 1 激光诱导低气压氮气等离子体光谱

C_2 的误差就逐渐变小, 计算所得跃迁概率与实验值的误差也越来越小.

表 1 一条对耦合激发态谱线的跃迁概率/ 10^8 s^{-1}

波长/nm	跃迁	本工作	实验值 ^[22]	理论值 ^[6]
407.30	$4f \text{ } ^1F(7/2)_3 - 3d \text{ } ^3F_2^o$	0.552	0.499	0.534

4. 结 论

在对 N^+ 光谱分析的基础上, 根据局部热力学平衡假设, 由光谱线相对强度和跃迁参数值, 线性拟

合得到两个拟和参量. 借助于二参量从而得到一条对耦合激发组态谱线的跃迁概率. 目前得到的跃迁概率, 与实验及理论值符合很好. 另外, 本工作提供了一种依托于实验和计算的半经典计算跃迁概率的最新方法. 为处理一些特殊组态或高激发态跃迁特性, 提供了一种新颖的、简单可行的求取跃迁概率的途径.

感谢苏茂根, 龚义芳在实验工作方面给予的支持和帮助. 最后, 申晓志将本次工作献给他的母亲.

- [1] Luo D, Pradhan A K 1989 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **22** 3377
- [2] Ellis D G 1993 *Phys. Rev. A* **47** 161
- [3] Bell K L, Ramsbottom C A, Hibbert A 1992 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **25** 1735
- [4] Bell K L, Hibbert A, Stafford R P 1995 *Phys. Scr.* **52** 240
- [5] Yuan P, Liu X S, Zhang Y J, Xie L Y, Dong C Z 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2495 (in Chinese) [袁萍, 刘欣生, 张义军, 颜录有, 董晨钟 2002 物理学报 **51** 2495]
- [6] Shen X Z, Yuan P, Li J G, Dong C Z, Xie L Y, Shi Y L 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5715 (in Chinese) [申晓志, 袁萍, 李冀光, 董晨钟, 颜录有, 师应龙 2007 物理学报 **56** 5715]
- [7] Lavin C, Olalla E, Martin I 2000 *Astrophys. J.* **543** 1051
- [8] Dong C Z, Fritzsche S, Fricke B, Fricke B, Sepp W D 2001 *Phys. Scr.* **T 92** 294
- [9] Dong C Z, Fritzsche S 2005 *Phys. Rev. A* **72** 012507
- [10] Dong C Z, Fritzsche S 2006 *Eur. Phys. J. D* **40** 317
- [11] Qiu D R 2001 *Atomic Spectral Analysis* (Shanghai: Fudan University Press) p32 (in Chinese) [邱得仁 2001 原子光谱分析(上海, 复旦大学出版社)第 32 页]
- [12] Lochte Holtgreven W 1968 *In Plasma Diagnostics* (North-Holland, Amsterdam). p135
- [13] Marquette A, Gisselbrecht M, Bente W, Meyer M 2000 *Phys. Rev. A* **62** 022513
- [14] Baldwin J A, Verner E M, Verner D A, Ferland G J, Martin P G, Korista K T, Rubin R H 2000 *Astrophys. J. Suppl. S.* **129** 229
- [15] Liu X W, Luo S G, Barlow M J, Danziger I J, Storey P J 2001 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **327** 141
- [16] Luo S G, Liu X W, Barlow M J 2001 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **326** 1049
- [17] Tsamis Y G, Barlow M J, Liu X W, Storey P J, Danziger I J 2004 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **353** 953
- [18] Cowan R D 1981 *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (London: University of California Press) p128
- [19] Moore C E 1971 *Atomic Energy Levels* Vol. I (Washington D C: Government Printing Office) p36
- [20] Zhang S D, Zhang W J 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 1512 [张树东, 张为俊 2001 物理学报 **50** 1512]
- [21] Wiese W L, Fuhr J R, Deters T M 1996 *J. Phys. Chem. Ref. Data, Monograph 7*. AIP New York
- [22] Mar S, Perez C, Gonzalez V R, Gigoso M A, del Vall J A, de la Rosa I, Aparicio J A 2000 *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* **144** 509

Fit parameter to calculate transition probability^{*}

Shen Xiao-Zhi¹⁾ Yuan Ping^{1)2)†} Wang Jie¹⁾ Guo Yi-Xiao¹⁾ Qiao Hong-Zhen¹⁾ Zhao Xue-Yan¹⁾

1) (College of Physics and Electronic Engineering , Northwest Normal University , Lanzhou 730070 , China)

2) (Cold and Arid Regions Environmental and Engineering Research Institute , Chinese Academy of Sciences , Lanzhou 730000 , China)

(Received 30 September 2007 ; revised manuscript received 5 November 2007)

Abstract

According to the relative intensities of lines and transition parameters , through linear fit of linear function , two fit parameter are obtained. And by adopting these parameters , transition probabilities of spectral lines for special configuration or highly excited states can be calculated. In the present work , on the basis of spectroscopic analysis for N^+ spectra , the transition probability whose upper states are pair coupling is obtained. The present work gives a simple and feasible new semi-classical method to calculate transition probabilities , especially for special configurations or highly excited states.

Keywords : fit , transition probability , pair coupling

PACC : 3120W , 3270F

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No.40475007) and the Foundation of Northwest Normal University (Grant No. NWNNU-KJCXGC-03-21).

[†] E-mail : yuamp@nwnu.edu.cn