

洞态 Ar 原子 K_α 和 K_β 伴线和超伴线的理论计算

马堃 焦铮 蒋峰建 叶剑锋 吕海江 陈展斌

Theoretical calculation of K_α and K_β X-ray satellite and hypersatellite structures for hollow argon atoms

Ma Kun Jiao Zheng Jiang Feng-Jian Ye Jian-Feng Lv Hai-Jiang Chen Zhan-Bin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 67, 173201 (2018) DOI: 10.7498/aps.67.20180553

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.67.20180553>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2018/V67/I17>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

不同电荷态的 $^{129}\text{Xe}^{q+}$ 激发 Au 的 X 射线发射研究

Study of X-ray spectrum emitted due to the impact of $^{129}\text{Xe}^{q+}$ on different ion's charge on Au

物理学报.2015, 64(5): 053201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.053201>

Eu^{20+} 入射 Au 靶发射 Eu L-X 射线产额与动能的相关性

Correlation of Eu L X-ray yield with kinetic energy based on the impact of Eu^{20+} on solid Au target

物理学报.2014, 63(16): 163202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.163202>

不同动能的 $^{129}\text{Xe}^{26+}$ 与 Au 表面作用产生的 X 射线谱

X-ray spectrum emitted by the impact of $^{129}\text{Xe}^{26+}$ of the different kinetic energies on Au surface

物理学报.2014, 63(16): 163201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.163201>

H^+ 和 Ar^{11+} 激发 Si 的 K 壳层 X 射线发射研究

Study of Si K-shell X-ray emission induced by H^+ and Ar^{11+} ions

物理学报.2013, 62(8): 083201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.083201>

近 Bohr 速度的 $^{152}\text{Eu}^{20+}$ 入射 Au 表面产生的 X 射线谱

X-ray spectrum emitted by the impact of $^{152}\text{Eu}^{20+}$ of near Bohn velocity on Au surface

物理学报.2013, 62(6): 063202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.063202>

洞态 Ar 原子 K_α 和 K_β 伴线和超伴线的理论计算*马堃^{1)†} 焦铮¹⁾ 蒋峰建¹⁾ 叶剑锋¹⁾ 吕海江¹⁾ 陈展斌²⁾³⁾

1) (黄山学院信息工程学院, 黄山 245041)

2) (湖南工业大学理学院, 株洲 412007)

3) (国防科学技术大学理学院, 长沙 410073)

(2018年3月28日收到; 2018年5月28日收到修改稿)

基于全相对论多组态 Dirac-Fock 方法, 对 L 壳层旁观空穴下 Ar 原子退激衰变辐射 K-X 射线 $K_{\alpha 1,2}$ ($K \rightarrow L_{3,2}$) 和 $K_{\beta 1,3}$ ($K \rightarrow M_{3,2}$) 的 6908 条伴线和超伴线跃迁能、跃迁概率进行了系统计算, 计算结果与文献已有数据比较具有很好的一致性. 通过对 $(K^{-1}L^{-l}, l = 0-8)$ 伴线和 $(K^{-2}L^{-l}, l = 0-8)$ 超伴线跃迁谱线卷积得了其合成谱, 给出了 L 壳层不同空穴数下 K-X 射线伴线和超伴线的平均能量和平均跃迁强度. 结果表明, 退激辐射 X 射线能量以及能移与 L 壳层空穴个数呈现明显的线性关系. 基于结论, 进一步给出了跃迁能移与 L 壳层空穴个数之间的关系表达式. 研究结果可以为解释离子、原子碰撞过程中产生的 X 射线谱提供重要的理论支持.

关键词: 洞原子, 伴线, 超伴线, X 射线

PACS: 32.30.Rj

DOI: 10.7498/aps.67.20180553

1 引言

洞态原子是指内壳层电子被激发或电离后形成的激发态中性原子或近中性离子. 它广泛存在于实验室和天体等离子体中, 尤其是在高能炮弹离子或者同步辐射光源与原子碰撞的反应产物中. 洞态原子也是等离子体物理学、天体物理学和固体表面物理学的研究对象之一. 由于旁观空穴的存在, 导致洞态原子核外电子对原子核的屏蔽效应减弱, 从而使得辐射跃迁线的能量略高于主线能量, 即伴线. 当内壳层有两个空穴存在时, 屏蔽效应进一步减弱, 外壳层电子向该壳层跃迁时辐射跃迁线的能量更高, 即超伴线^[1]. 通过对空心原子退激辐射产生的 X 射线伴线和超伴线结构的研究, 不仅可以揭示洞态原子的形成机制, 而且为等离子体状态诊断、新的极紫外和 X 射线光源的发展

提供重要的理论支持. 对于 K-X 射线, 由于 K 壳层电子被紧密地束缚在原子核周围做高速运动, 电子间的 Breit 效应、量子电动力学 (QED) 等高阶相对论效应十分显著. 因此, 有必要在全相对论理论框架下对 K 壳层辐射 X 射线进行理论计算. Koziol 等^[2]利用多组态 Dirac-Fock 理论 (MCDF) 方法计算了 Al 和 Si 原子 $K_{\alpha 1,2}$ X 射线结构和宽度, 讨论了电子关联效应和伴线结构对辐射 X 射线谱结构的影响; 2015 年, Wang 等^[3]在相对论框架下计算了洞态原子 ($Z = 13-90$) 退激辐射 $K_{\alpha,\beta,\gamma}$ X 射线伴线结构, 并分析了旁观空穴对其谱线结构的影响, 结果表明相对论计算结果与实验测量谱具有很好的一致性.

在早期的实验室中, 人们主要利用光子或电子与靶原子碰撞产生洞态原子, 洞态原子通过退激辐射产生伴线和超伴线. 超伴线的产生条件比伴线苛刻, 要求洞态原子在辐射跃迁时有两个空穴位于初态的同一壳层上. 一般而言, 需要两步过程才

* 安徽省自然科学基金 (批准号: 1808085QA22)、安徽省高校优秀青年人才支持计划重点项目 (批准号: gxyqZD2016301)、安徽省高校自然科学基金项目 (批准号: KJHS2015B01) 和黄山学院自然科学基金项目 (批准号: 2016xskq003) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: makun@hsu.edu.cn

能实现这样的洞态原子, 如第一步先电离掉一个电子, 第二步再通过伴随振离或者 Coster-Kronig (CK) 跃迁产生第二个洞态. 然而这些过程的跃迁强度都非常弱, 实验上也不易探测. 在重离子碰撞过程中, 由于其提供的强库仑场, 碰撞时可以同时将多个电子电离, 并产生丰富的退激 X 射线主线、伴线和超伴线. 近年来, 随着重离子储存环和加速器等实验技术的进步, 人们越来越关注高能离子与原子碰撞产生洞态原子过程, 尤其对洞态原子退激产生的 X 射线伴线和超伴线谱的研究更加感兴趣^[4,5]. 2013 年, Czarnota 等^[6]利用高分辨率的晶体谱仪对 280 MeV 能量下 O⁶⁺ 离子与 Zr, Mo 和 Pd 原子的碰撞过程进行了研究, 通过对退激 L_{α12}(L₃ → M_{4,5}) 和 L_{β1}(L₂ → M₄) X 射线伴线和超伴线光谱的计算模拟, 得到了重离子碰撞过程中靶原子空穴产生概率. 最近, 中国科学院兰州近代物理研究所基于 HIRFL 大科学装置^[7], 开展了一系列高能离子碰撞的实验研究, 特别是在高能裸核 Xe 炮弹离子与 Kr 和 Xe 靶原子碰撞过程的实验研究中, 观察到了明显的伴线和超伴线结构^[8]. 为了对这些复杂的 X 射线谱进行指认, 并进一步分析高能碰撞过程中各种洞态产生的物理机制, 董晨钟等^[9-11]基于 MCDF 方法, 对高能裸核 Xe 离子与 Kr 原子和 Xe 原子碰撞的辐射复合过程以及退激辐射产生的 K-X 射线伴线和超伴线结构进行了理论计算, 指出了辐射复合是洞态产生的主要机制. 本文利用 MCDF 理论方法, 对 L 壳层旁观空穴下, Ar 原子退激辐射 X 射线的能量和强度进行了系统的理论计算; 分析了 L 壳层旁观空穴对退激辐射 X 射线能量的影响, 给出了 L 壳层旁观空穴个数与伴线和超伴线能移之间的关系. 相关计算结果可以为重离子碰撞实验研究提供理论支持.

2 理论方法

有关 MCDF 理论方法及 GRASP2K 程序包, 文献^[12, 13]已做了详细的描述, 这里仅做扼要的介绍. 在 MCDF 理论方法中, N 电子体系的 Dirac-Coulomb 哈密顿量可以表示为

$$H^{\text{DC}} = \sum_{i=1}^N h_{\text{D}}(r_i) + \sum_{i \neq j}^N \frac{1}{r_{ij}}, \quad (1)$$

其中 $h_{\text{D}}(r_i)$ 是单电子 Dirac 哈密顿量, 包括单电子动能项和电子与原子核之间相互作用能项, 具体可

以写成

$$h_{\text{D}}(r_i) = c\alpha_i \cdot p_i + (\beta - 1)m_e c^2 + V_{\text{nuc}}(r_i), \quad (2)$$

(2) 式中, c 表示真空中的光速, α 和 β 表示 Dirac 矩阵, p_i 是电子动量. (1) 式中的第二项表示电子与电子之间的相互作用势.

在 MCDF 计算中, 原子态波函数 $|\alpha(PJM)\rangle$ 可以采用具有相同总角动量 J 和宇称 P 的组态波函数 $|\gamma_r P J M\rangle$ 线性组合得到, 即

$$|\alpha(PJM)\rangle = \sum_{r=1}^{n_c} c_r |\gamma_r P J M\rangle, \quad (3)$$

其中 n_r 表示原子态波函数展开时采用的组态波函数基矢个数, c_r 为组态混合系数, γ_r 表示确定组态信息的其他量子数. 组态波函数 $|\gamma_r P J M\rangle$ 由一组正交轨道反对称化乘积得到, 相应的系数通过对 Dirac-Coulomb 哈密顿优化得到.

对于中 Z 和高 Z 元素, 尤其是对空心原子, 除了 Dirac-Coulomb 哈密顿外, 由磁效应和弛豫效应引起的 Breit 相互作用以及 QED 效应较为显著. Breit 相互作用算符可以表示为

$$H_{ij}^{\text{B}} = -\alpha_i \cdot \alpha_j \frac{\cos(\tilde{\omega}_{ij} r_{ij})}{r_{ij}} + (\alpha_i \cdot \nabla_i)(\alpha_j \cdot \nabla_j) \frac{\cos(\tilde{\omega}_{ij} r_{ij}) - 1}{\tilde{\omega}_{ij}^2 r_{ij}}, \quad (4)$$

式中 $\tilde{\omega}_{ij}$ 表示相互作用过程中虚光子交换频率. 本文在具体计算时, 还包括了自能、真空极化等 QED 效应中的主要修正项^[12].

按照 Fermi 黄金定则, 单位时间内从辐射初态到辐射末态的跃迁概率可以表示为

$$A_{\text{if}}^{\text{r}} = \frac{4e^2 \omega_{\text{if}}^3}{3\hbar c^3} |\langle \alpha_{\text{f}}(PJM) | P^{(L)} | \alpha_{\text{i}}(PJM) \rangle|, \quad (5)$$

其中 $|\alpha_{\text{i}}(PJM)\rangle$ 和 $|\alpha_{\text{f}}(PJM)\rangle$ 分别表示初态和末态原子态波函数, $P^{(L)}$ 是辐射电磁场的 L 阶张量算符, 本文仅考虑电偶极辐射跃迁, 即 $L = 1$, ω_{ij} 是初态和末态跃迁频率.

需要指出的是, 在具体计算时, 跃迁概率有 Coulomb 和 Babushkin 两种规范, 分别对应非相对论极限下的速度规范和长度规范. 这两种规范下计算结果的一致性可以作为计算准确性的评判条件之一. 本文分别计算了 Coulomb 规范和 Babushkin 规范两种规范下的结果, 发现卷积之后的辐射谱形状以及能量位置没有明显差别. 因此, 文中只给出 Coulomb 规范下的结果.

3 结果与讨论

洞态原子退激辐射 X 射线谱结构不仅与内壳层空穴的产生机制有关, 而且与其退激发辐射动力学过程有关. 由于本文研究辐射跃迁涉及到 K 壳层, 因此在 MCDF 理论框架下进行计算更加合适, 计算中包括了 Breit 作用和 QED 修正等. 表 1 给出了不同初始组态下的跃迁谱线条数. 其中组态 $K^{-k}L^{-l}$ 表示 K 壳层有 k 个洞, L 壳层有 l 个洞, 其他外壳层电子满壳层排布. 具体地, 如 $K^{-1}L^{-2}$ 表示 K 壳层有 1 个空穴, L 壳层有 2 个空穴, 其他外壳层电子满壳层排布. 相应的跃迁线可以用 $1s^{-1}L^{-2} \rightarrow np^{-1}L^{-2}$ 表示, 其中 $n = 2$ 和 3 分别表示 L 壳层有两个旁观空穴下的 $K_{\alpha}(1s \rightarrow 2p)$ 和 $K_{\beta}(1s \rightarrow 3p)$ X 射线伴线. 该组态在 MCDF 计算中, 共产生 317 条跃迁线. 需要指出的是, 本文仅考虑初态为 $K^{-k}L^{-l}$ ($k = 1, 2; l = 0-8$) 的情况, 没有涉及 M 壳层空穴情况. 事实上, M 壳层每增加一个空穴, 跃迁线条数将增加很多. 以 Ar 原子为例, 初态为 $K^{-1}L^{-2}M^0$ 组态跃迁线有 317 条, 若 M 壳增加一个空穴, 即 $K^{-1}L^{-2}M^{-1}$ 组态, 其跃迁线达到 16539 条. 从文献 [9] 计算结果可以看出, M 壳层对跃迁的影响很小, 可以忽略. 因此, 本文没有对 M 壳层空穴情况进行研究.

利用 MCDF 方法, 计算了表 1 中列出的所有跃迁线的跃迁能量和跃迁概率. 具体地, 靶态的初、末态波函数和能级的计算采用 GRASP2K 程序包, 计算中包括了 Breit 作用和真空极化、自能等 QED 修正, 采用了扩展优化能级方案 (EOL). 跃迁概率采用 RATIP 程序包中 REOS 模块 [14] 计算, 该计算方案分别导入 GRASP2K 程序计算的初态和末态波函数, 可以充分考虑跃迁前后电子轨道的弛豫效应. 表 2 列出了 $K_{\alpha 1,2}(1s \rightarrow 2p_{3/2}, 2p_{1/2})$ 和 $K_{\beta 1,3}(1s \rightarrow 3p_{3/2}, 3p_{1/2})$ 主线的跃迁能量和跃

迁概率. 作为比较, 表中同时列出了文献 [15] 中的跃迁能和跃迁强度数值, 其中跃迁强度归一到 $K_{\alpha 1}$ 谱线. 表中“NR”列的数据表示非相对论计算的跃迁能, “R”列数据表示包括了 Breit 和 QED 效应之后的跃迁能. 从表中可以看出, 本文计算的跃迁能量和跃迁概率与文献 [15] 结果符合得很好, 如能级的最大误差仅为 0.02%. $K_{\alpha 1}, K_{\alpha 2}$ 之间的能量差和 $K_{\beta 1}, K_{\beta 3}$ 之间的能量差分别为 2.16 eV 和 0.18 eV. $K_{\alpha 1}/K_{\alpha 2}$ 和 $K_{\beta 1}/K_{\beta 3}$ 跃迁概率之比分别为 1.9777 和 1.9785, 这与 $1s \rightarrow 2p_{3/2}$ 和 $1s \rightarrow 2p_{1/2}$ 跃迁初态统计权重 $(2J + 1)$ 之比一致.

表 1 在 MCDF 计算模型下主线、伴线和超伴线 X 射线跃迁数目

Table 1. Number of transitions calculated within the MCDF model for various diagram, satellites and hypersatellites X-ray lines.

	初始组态	跃迁线	跃迁数目
	$K^{-1}L^0$	$1s^{-1} \rightarrow np^{-1}$	4
	$K^{-1}L^{-1}$	$1s^{-1}L^{-1} \rightarrow np^{-1}L^{-1}$	56
	$K^{-1}L^{-2}$	$1s^{-1}L^{-2} \rightarrow np^{-1}L^{-2}$	317
	$K^{-1}L^{-3}$	$1s^{-1}L^{-3} \rightarrow np^{-1}L^{-3}$	858
伴线	$K^{-1}L^{-4}$	$1s^{-1}L^{-4} \rightarrow np^{-1}L^{-4}$	1154
	$K^{-1}L^{-5}$	$1s^{-1}L^{-5} \rightarrow np^{-1}L^{-5}$	772
	$K^{-1}L^{-6}$	$1s^{-1}L^{-6} \rightarrow np^{-1}L^{-6}$	253
	$K^{-1}L^{-7}$	$1s^{-1}L^{-7} \rightarrow np^{-1}L^{-7}$	38
	$K^{-1}L^{-8}$	$1s^{-1}L^{-8} \rightarrow np^{-1}L^{-8}$	2
	$K^{-2}L^0$	$1s^{-2} \rightarrow 1s^{-1}np^{-1}$	4
	$K^{-2}L^{-1}$	$1s^{-2}L^{-1} \rightarrow 1s^{-1}np^{-1}L^{-1}$	56
	$K^{-2}L^{-2}$	$1s^{-2}L^{-2} \rightarrow 1s^{-1}np^{-1}L^{-2}$	317
	$K^{-2}L^{-3}$	$1s^{-2}L^{-3} \rightarrow 1s^{-1}np^{-1}L^{-3}$	858
超伴线	$K^{-2}L^{-4}$	$1s^{-2}L^{-4} \rightarrow 1s^{-1}np^{-1}L^{-4}$	1154
	$K^{-2}L^{-5}$	$1s^{-2}L^{-5} \rightarrow 1s^{-1}np^{-1}L^{-5}$	772
	$K^{-2}L^{-6}$	$1s^{-2}L^{-6} \rightarrow 1s^{-1}np^{-1}L^{-6}$	253
	$K^{-2}L^{-7}$	$1s^{-2}L^{-7} \rightarrow 1s^{-1}np^{-1}L^{-7}$	38
	$K^{-2}L^{-8}$	$1s^{-2}L^{-8} \rightarrow 1s^{-1}np^{-1}L^{-8}$	2

表 2 Ar 原子主线的跃迁能量、跃迁概率和相对强度

Table 2. The transition energies, rates and relative intensity of diagram lines for argon atom.

标识	跃迁能/eV			跃迁概率 / 10^{12} s^{-1}	相对强度	
	NR	R	文献 [15]		本文	文献 [15]
$K_{\alpha 1}$	2960.91	2957.72	2957.77	71.81	100	100
$K_{\alpha 2}$	2958.67	2955.56	2955.563	36.31	50.56	—
$K_{\beta 1}$	3194.47	3191.19	3190.5	7.36	10.25	11.3
$K_{\beta 3}$	3194.29	3191.01	—	3.72	5.18	—

表3 Ar原子K X射线伴线和超伴线平均跃迁能量和相对强度
Table 3. Average energy (eV) and relative intensity of K X-ray satellite and hypersatellite lines for Ar.

组态	K α 伴线		K β 伴线		组态	K α 超伴线		K β 超伴线	
	能量/eV	强度	能量/eV	强度		能量/eV	强度	能量/eV	强度
K $^{-1}L^0$	2956.99	4.97	3191.14	2.25	K $^{-2}L^0$	3131.62	10.13	3416.32	4.80
K $^{-1}L^{-1}$	2973.43	25.34	3234.97	9.95	K $^{-2}L^{-1}$	3149.44	26.33	3462.01	13.62
K $^{-1}L^{-2}$	2991.94	61.80	3278.05	37.26	K $^{-2}L^{-2}$	3168.22	73.76	3510.01	49.51
K $^{-1}L^{-3}$	3011.05	100.00	3322.99	79.02	K $^{-2}L^{-3}$	3188.35	93.27	3557.95	79.99
K $^{-1}L^{-4}$	3031.72	98.02	3366.97	100.00	K $^{-2}L^{-4}$	3209.95	100.00	3609.19	100.00
K $^{-1}L^{-5}$	3053.41	66.37	3416.65	91.19	K $^{-2}L^{-5}$	3232.21	58.31	3659.68	77.92
K $^{-1}L^{-6}$	3075.82	26.11	3468.76	56.53	K $^{-2}L^{-6}$	3255.52	26.63	3710.83	59.48
K $^{-1}L^{-7}$	3099.79	4.63	3523.15	24.48	K $^{-2}L^{-7}$	3279.61	4.52	3768.94	23.26
K $^{-1}L^{-8}$	—	—	3581.65	6.55	K $^{-2}L^{-8}$	—	—	3828.97	12.19

在原子跃迁过程中, 由于各种谱线加宽机制导致每条跃迁谱线都不是严格的分立谱, 而是具有一定的宽度. 考虑到实验装置测量的分辨率, 我们采用 20 eV 的半高全宽 (FWHM), 将表 1 中所列出的 18 个初始组态 (K $^{-k}L^{-l}$) 对应的所有跃迁线的跃迁能量和跃迁概率按照高斯线型展宽, 从而得到 L 壳层旁观空穴下洞态 Ar 原子退激发辐射 X 射线谱的分布情况, 结果在图 1 中给出. 展宽时, 近似地对每个初始组态所涉及的多条跃迁谱线按照等权重方案进行叠加. 其中, 图 1(a) 给出了 L 壳层不同空穴数下的辐射谱线, 从展宽得到的谱线轮廓中可以确定各谱线峰值的位置和高度, 即对应该组态的平均跃迁能量和强度, 结果列于表 3. 在表 3 中将每一列跃迁强度归一到其最强谱线, 如 K α 伴线跃迁强度归一到 K $^{-1}L^{-3}$ 组态跃迁强度, K α 超伴线跃迁强度归一到 K $^{-1}L^{-4}$ 组态跃迁强度, K β 伴线和超伴线跃迁强度均归一到 K $^{-2}L^{-4}$ 组态的跃迁强度. 从图 1(a) 可以看出, 超伴线位于伴线右侧, 即超伴线跃迁能量大于伴线的跃迁能量. 这是由于超伴线比伴线多一个 K 壳层旁观空穴导致的. 另外可以看到, L 壳层的旁观空穴也会改变 K α 和 K β 伴线和超伴线的跃迁能和跃迁强度. 随着 L 壳层旁观空穴数的增加, K α 和 K β 伴线的强度先增加后减少. L 壳有 3 个旁观空穴时 K α 伴线最强, L 壳有 4 个洞时 K α 超伴线、K β 伴线和超伴线最强. 这是由于跃迁线的条数随着 L 壳层空穴数的增加先增加再减小导致的. 随着 L 壳层空穴数的增加, 辐射线的能量

逐渐向高能端偏移, 导致 K α 的超伴线与 K β 伴线. 图 1(b) 是将图 1(a) 中 18 个初组态 (K $^{-k}L^{-l}$, $k = 0, 1; l = 0-8$) 退激辐射跃迁谱线按照等权重叠加后得到的合成光谱. 从图 1(b) 中可以看出, K α 的伴线和超伴线可以较好地分辨, 但 K β 的伴线和超伴线重叠在一起, 同时 K α 的超伴线与 K β 的伴线也有部分重叠. 本文选取 20 eV 的展宽主要考虑到实验测量装置的分辨率. 如果实验测量的分辨率更高, 则可以分辨出更多谱线对应的位置.

为了更加清晰地揭示 L 壳层旁观空穴对辐射 X 射线能量的影响, 图 2 给出了跃迁辐射 K α 和 K β 的伴线和超伴线能量与 L 壳层空穴个数之间的关系, 其中 K α_{sp}^s 和 K $\alpha_{\text{sp}}^{\text{hs}}$ 分别表示伴线和超伴线.

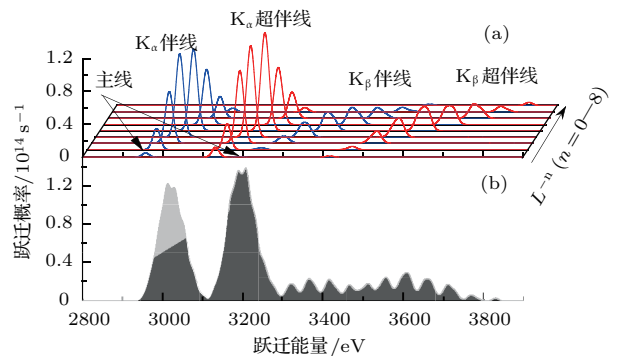


图1 Ar原子K α 和K β 主线、伴线和超伴线理论计算谱 (FWHM = 20 eV)
Fig. 1. The calculated spectra corresponding to K α and K β diagrams, satellites and hypersatellites of Ar atom (FWHM = 20 eV).

从图2中可以看出,随着L壳层空穴个数的增加,跃迁能也随之增加,并呈现线性关系.同时我们发现, K_α 的伴线和超伴线斜率相近, K_β 的伴线和超伴线斜率相近,即L壳层旁观空穴对 $K_\alpha(K_\beta)$ 伴线和超伴线产生的能量移动近似相等.

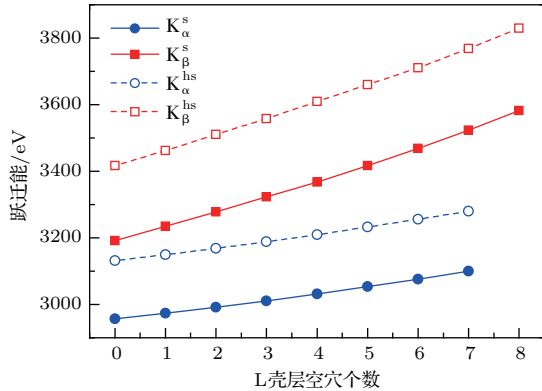


图2 Ar原子 K_α 和 K_β 伴线和超伴线跃迁能与L壳层空穴个数之间的关系

Fig. 2. Transition energy of the K_α and K_β satellite and hypersatellite versus the number of the spector vacancies in the L shell for Ar atom.

图3给出了辐射X射线能移 $\Delta E(K, L^n) = E(K, L^n) - E(K, L^0)$ 与L壳层空穴个数的关系.可以看出K-X射线能移大小随着L壳空穴个数的增加而增加,并具有明显的线性关系. L壳层相同空穴数下,超伴线的能移略大于伴线的能移.这种差别主要是由于超伴线比伴线在K壳层多一个旁

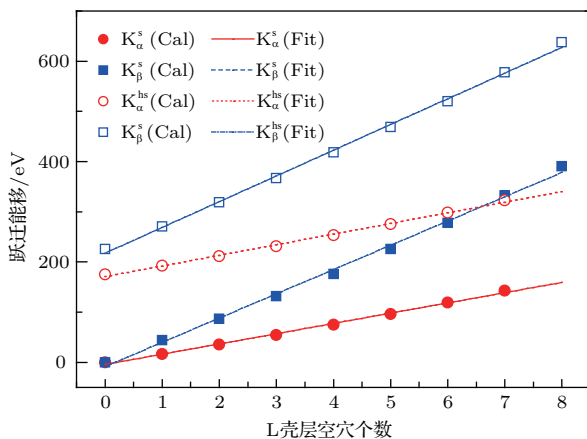


图3 Ar原子 K_α 和 K_β 伴线和超伴线能移与L壳层空穴个数的关系 (Cal表示利用MCDF方法计算的结果; Fit表示拟合公式(6)得到的结果)

Fig. 3. Energy shifts of the K_α and K_β satellite and hypersatellite versus the number of the spector vacancies in the L shell for Ar atom (Cal denotes the data calculated by MCDF method, Fit denotes the data from Eq. (6)).

观空穴,电子的屏蔽效应减弱,参与跃迁的电子感受到原子核的效应更强导致的.基于计算得到的能移与L壳层空穴个数的数据关系,利用最小二乘法给出了能移大小与L壳层空穴个数的拟合关系式,具体表示如下:

$$\Delta E(K_\alpha^s, L^n) = 20.4361 \times n - 4.2475, \quad (6a)$$

$$\Delta E(K_\alpha^{hs}, L^n) = 21.1893 \times n + 170.7125, \quad (6b)$$

$$\Delta E(K_\beta^s, L^n) = 48.3610 \times n - 8.5473, \quad (6c)$$

$$\Delta E(K_\beta^{hs}, L^n) = 51.2460 \times n + 217.6427, \quad (6d)$$

式中 n 为L壳层旁观空穴个数.图3给出了利用这些拟合公式得到的跃迁能移与L壳层空穴个数之间的关系曲线,可以看出,拟合公式得到的结果与MCDF计算的结果符合得很好.

4 结论

本文利用MCDF理论方法计算了Ar原子 $K^{-k}L^{-l} \rightarrow K^{-k+1}L^{-l-1}$ ($k = 1, 2; l = 0-8$) K_α 和 K_β 主线、伴线和超伴线的跃迁能和跃迁概率,计算中包括了Breit相互作用和QED修正.计算结果与文献中已有的数据符合得很好.以跃迁能为例,本文计算的结果与文献中的数据误差均小于0.02%.采用20 eV半高全宽对每个组态下所有可能的辐射跃迁线进行了高斯展宽,得到其高斯线型,进而确定出不同组态分别对应的平均跃迁能量和跃迁强度.分析表明,L壳层旁观空穴会导致辐射跃迁线向高能端偏移,其能移的大小与L壳层空穴个数呈线性关系.利用最小二乘法拟合出了能移与L壳空穴数之间的线性表达式.本文的研究结论为定量地解释原子碰撞过程中产生X射线谱提供了必要的理论支持.需要说明的是,对于洞态Ar原子,除了辐射X射线退激途径外,还存在Auger过程,本文并没有对非辐射的Auger退激途径进行研究,相关工作将在后续进一步报道.

感谢中国科学院近代物理研究所邵曹杰博士对本文研究给予的帮助.

参考文献

[1] Briand J P, Chevallier P, Tavernier M, Rozet J P 1971 *Phys. Rev. Lett.* **27** 777

- [2] Koziol K 2014 *J. Quant. Spectrosc. Ra.* **149** 138
- [3] Wang X L, Dong C D, Su M G 2012 *Nucl. Instr. Meth. B* **280** 93
- [4] Yerokhin V A, Surzhykov A, Fritzsche S 2014 *Phys. Rev. A* **90** 022509
- [5] Steinbrügge R, Bernitt S, Epp S W, Rudolph J K, Beilmann C, Bekker H, Eberle S, Müller A, Versolato O O, Wille H C, Yava H, Ullrich J, Crespo López-Urrutia J R 2015 *Phys. Rev. A* **91** 032502
- [6] Czarnota M, Bana D, Berset M, Chmielewska D, Dousse J C, Hoszowska J, Maillard Y P, Mauron O, Pajek M, Polasik M, Raboud P A, Rzakiewicz J, Słabkowska K, Sujkowski Z 2013 *Phys. Rev. A* **88** 052505
- [7] Yuan Y J, Yang J C, Xia J W, et al. 2013 *Nucl. Instrum. Methods Phys. Res. Sect. B* **317** 214
- [8] Shao C J, Yu D Y, Cai X H, Chen X, Ma K, Evslin J, Xue Y L, Wang W, Kozhedub Y S, Lu R C, Song Z Y, Zhang M W, Liu J L, Yang B, Guo Y P, Zhang J M, Ruan F F, Wu Y H, Zhang Y Z, Dong C Z, Chen X M, Yang Z H 2017 *Phys. Rev. A* **96** 012708
- [9] Chen X, Ma K, Dong C Z, Zhang D H, Shao C J, Yu D Y, Cai X H 2015 *Nucl. Instr. Meth. B* **362** 14
- [10] Liang T, Ma K, Chen X, Xie L Y, Dong C Z, Shao C J, Yu D Y, Cai X H 2015 *Acta Phys. Sin.* **64** 153401 (in Chinese) [梁腾, 马堃, 陈曦, 颀录有, 董晨钟, 邵曹杰, 于得洋, 蔡晓红 2015 物理学报 **64** 153401]
- [11] Liang T, Ma K, Wu Z W, Zhang D H, Dong C Z, Shi Y L 2016 *Acta Phys. Sin.* **65** 143401 (in Chinese) [梁腾, 马堃, 武中文, 张登红, 董晨钟, 师应龙 2016 物理学报 **65** 143401]
- [12] Grant I P 1970 *Adv. Phys.* **19** 747
- [13] Jönsson P, He X, Fischer C F, Grant I P 2007 *Comput. Phys. Commun.* **177** 597
- [14] Fritzsche S 2012 *Comput. Phys. Commun.* **183** 1525
- [15] Periodic Table website <http://www.periodictableexplorer.com> [2018-3-1]

Theoretical calculation of K_{α} and K_{β} X-ray satellite and hypersatellite structures for hollow argon atoms*

Ma Kun^{1)†} Jiao Zheng¹⁾ Jiang Feng-Jian¹⁾ Ye Jian-Feng¹⁾
Lv Hai-Jiang¹⁾ Chen Zhan-Bin²⁾³⁾

1) (School of Information Engineering, Huangshan University, Huangshan 245041, China)

2) (School of Science, Hunan University of Technology, Zhuzhou 412007, China)

3) (College of Science, National University of Defense Technology, Changsha 410073, China)

(Received 28 March 2018; revised manuscript received 28 May 2018)

Abstract

A systematical knowledge of the satellite and hypersatellite structures of X-ray transitions is of great interest for various research areas, such as the explanation of the X-ray radiation from universe, plasma diagnostics, extreme ultraviolet (EUV) and X-ray sources and so on. Among these researches, the detailed explanation of the complex structures of X-ray satellites and hypersatellites are crucial for understanding the X-ray emission mechanism and the hollow atom formation mechanism. In this paper, the K_{α} and K_{β} X-ray satellite and hypersatellite structure are theoretically studied for hollow argon atoms with the relativistic multiconfiguration Dirac-Fock (MCDF) method, which includes the Breit and quantum electro-dynamics (QED) corrections. To check the applicability of the method, the transition energies and rates of the diagram lines for Ar are calculated, and the results are in agreement with previously published data. Then the MCDF calculations of the transition energies and probabilities of $K_{\alpha 1,2}$ ($K \rightarrow L_{3,2}$) and $K_{\beta 1,3}$ ($K \rightarrow M_{3,2}$) X-ray satellites and hypersatellites, which originate from the argon atoms with additional vacancies in the L shell, are carried out. To obtain the overall profile of the K X-ray spectrum, the diagram lines are integrated with the satellites and hypersatellites on the assumption that the intensity is proportional to the corresponding transition probability and each discrete line has a Gaussian distribution profile with a full width at half maximum (FWHM) value of 20 eV. From the convoluted profile, we can obtain the dependence of the average transition energy and relative transition intensity of the satellites and hypersatellites on the initial hollow configuration. It is found that the transition energy shift increases linearly with the number of spectator vacancies in the L shell increasing. For instance, the energy shift of the K_{α} satellite caused by L-shell hole is about 20 eV, and that of the K_{β} satellite is 48 eV. While for hypersatellite, the energy shift increases greatly due to the double ionization in the K shell. The energy shift increment of K_{α} and K_{β} hypersatellites corresponding to L vacancy are 21 and 52 eV, respectively. Finally, four simple empirical formulae for estimating the energy shifts of the K_{α} , K_{β} X-ray satellites and hypersatellite for Ar atom with any number of L-shells vacancies are deduced by using the least square method. These results are useful in explaining various K X-ray spectra and better understanding the collision process.

Keywords: hollow atom, satellite, hypersatellite, X-ray

PACS: 32.30.Rj

DOI: 10.7498/aps.67.20180553

* Project supported by the Natural Science Foundation of Anhui Province, China (Grant No. 1808085QA22), the Key Project for Young Talents in College of Anhui Province, China (Grant No. gxyqZD2016301), the Natural Science Foundation of the Higher Education Institutions of Anhui Province, China (Grant No. KJHS2015B01), and the Natural Science Research Project of Huangshan University, China (Grant No. 2016xskq003).

† Corresponding author. E-mail: makun@hsu.edu.cn