

# 电四极跃迁对电子束离子阱等离子体中 离子能级布居的影响\*

孟举<sup>1)</sup> 何贞岑<sup>2)</sup> 颜君<sup>1)</sup> 吴泽清<sup>1)</sup> 姚科<sup>2)†</sup>  
李冀光<sup>1)‡</sup> 吴勇<sup>1)3)</sup> 王建国<sup>1)</sup>

1) (北京应用物理与计算数学研究所 计算物理重点实验室, 北京 100088)

2) (复旦大学核物理与离子束应用教育部重点实验室, 上海 200433)

3) (北京大学应用物理与技术研究中心, 北京 100871)

(2022年3月18日收到; 2022年5月24日收到修改稿)

在稳态近似下, 通过构建三能级体系碰撞辐射模型, 解析研究了电四极 (E2) 跃迁对等离子体中离子能级布居的影响. 研究发现, 随着原子序数增加, E2 跃迁速率逐渐增强, E2 跃迁在低电子密度条件下对离子能级布居的影响愈发显著. 进一步地, 以电子束离子阱中类铁钼 ( $Z = 42$ ) 和铀 ( $Z = 92$ ) 等离子体为例, 数值求解了包含不同退激通道的离子能级布居. 在此基础上, 分析了考虑 E2 退激通道导致的能级布居变化对基组态磁偶极 (M1) 跃迁线强比的影响, 并指出在利用高离化态离子 M1 跃迁线强比进行等离子体电子密度诊断时 E2 退激发通道的重要性.

**关键词:** 碰撞辐射模型, 等离子体诊断, 原子结构和光谱

**PACS:** 52.70.-m, 32.30.Jc, 31.15.A-

**DOI:** 10.7498/aps.71.20220489

## 1 引言

等离子体电子密度是表征等离子体状态的一个基本物理量, 对该物理量的准确确定比较困难<sup>[1,2]</sup>. 另一方面, 等离子体电子密度直接影响等离子体内多种原子动力学过程反应速率, 各种原子动力学过程相互竞争会导致特定跃迁谱线强度对等离子体电子密度十分敏感, 因此利用等离子体光谱对其诊断是常用的方法之一. 黄文忠等<sup>[3]</sup>根据类铜银离子的  $4d\ ^2D_{5/2}-4f\ ^2F_{7/2}$  和  $4p\ ^2P_{3/2}-4d\ ^2D_{5/2}$  两条谱线的线强比诊断得到了激光加热银靶产生等离子体的电子密度. Feldman 等<sup>[4]</sup>研究了类钛离子 ( $Xe^{32+}$ ,  $Gd^{42+}$ ,  $W^{52+}$ ,  $Bi^{61+}$ ,  $U^{70+}$ ) 基组态中处于可

见光和近紫外 (UV) 波段的磁偶极 (M1) 跃迁线随等离子体电子密度的变化规律, 并指出来自于  $J = 2 \rightarrow J = 3$  的 M1 跃迁可以作为高温托卡马克装置的密度诊断工具. 作为该工作的延续, Doron 等<sup>[5]</sup>于同年报道了钨、铅、铀等若干个高离化度离子的 N 壳层 ( $4p^k$  和  $4d^k$ ) 基组态中处于 UV 波段的 M1 跃迁线, 预言了若干条能够在电子束离子阱 (EBIT) 和托卡马克装置中观测到且较亮的跃迁线, 以及部分对电子密度敏感的谱线强度比. Ralchenko 等<sup>[6]</sup>对类镍钨 ( $W^{46+}$ ) 的基组态  $3d^{10}$  和第一激发组态  $3d^9 4s$  之间的电四极 (E2) 与磁八极 (M3) 跃迁之间的线强比进行了细致研究, 发现该线强比呈现出较强的电子密度依赖性, 可以用于托卡马克等离子体的密度诊断. 之后, 他们又对  $W^{48+}$

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11874090, 11874008, 11734013, 11934004, 11404180, 11604052, 11774037) 和国家重点研发计划 (批准号: 2017YFA0403200, 2017YFA0402300) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: keyao@fudan.edu.cn

‡ 通信作者. E-mail: li\_jiguang@iapcm.ac.cn

-  $W^{53+}$ 的基组态能级间的 M1 跃迁线强比进行了研究, 报道了若干组对电子密度敏感的线强比<sup>[7]</sup>. 近来, 丁晓彬等<sup>[8]</sup>报道了类镉钨基组态间的可用于等离子体电子密度诊断的跃迁线及线强比. Silwal 等<sup>[1]</sup>对高离化态钇 (Y) 离子的光谱进行了细致的实验和理论研究, 并分析了  $Y^{26+}$ - $Y^{33+}$  离子之间的 M1 跃迁与电偶极跃迁 (E1) 线强比对等离子体电子密度的依赖关系, 报道了若干组在聚变等离子体密度诊断方面具有潜在应用价值的线强比. 最近, 复旦大学现代物理研究所利用新建的低能 EBIT 装置 (CUBIT) 对类铁和类镉钨离子 ( $Mo^{16+}$ ,  $Mo^{17+}$ ) 的基组态 M1 跃迁进行了观测, 首次测量得到 10 条 M1 跃迁线的波长和强度, 并预言了若干组对电子密度敏感的线强比, 建议这些谱线可以作为潜在的等离子体电子密度诊断工具<sup>[9]</sup>.

EBIT 装置被广泛用于实验室产生等离子体, 是获取高精度原子参数、研究等离子体中各种原子过程的有力实验平台. 在 EBIT 装置中, 对等离子体的约束时间 (电子作用时间) 维持在秒量级, 而在电子作用下, 一般过程的特征时间在毫秒量级或者更短, 所以在约束时间内 EBIT 等离子体很容易达到稳态. 因此, 为了研究 EBIT 等离子体中谱线强度与等离子体电子密度的依赖关系, 理论上需要构建碰撞辐射模型 (CRM) 并求解稳态速率方程得到离子能级布居. 基于 EBIT 等离子体的特点, 通常只需要考虑同价离子不同能级间的辐射退激发及电子碰撞激发和退激发过程<sup>[5,10-13]</sup>. 对于辐射退激发, 理想的情况是包含所有类型的辐射跃迁, 但是这会大大增加计算规模, 因此需要根据具体的研究对象选取主要的辐射退激通道. 一般地, 由于 E2 或者更高阶的禁戒跃迁速率较小, 它对退激过程的贡献可以忽略, 因此辐射退激过程只需考虑 E1 和 M1 跃迁. 但是 E2 跃迁与原子序数  $Z$  和有效电荷  $Q$  的标度关系可以达到  $A_{E2} \propto Z^5 Q^{11}$ <sup>[14]</sup>, 而 M1 和 E1 跃迁率对于原子序数的标度关系分别为  $A_{M1} \propto Z^3 Q^9$  和  $A_{E1} \propto Z^3 Q^7$ , 对于  $Z$  较高的离子, E2 跃迁速率可以与 M1、甚至 E1 的跃迁速率相比, 这些通道可能引起能级布居变化, 此时在 CRM 中是否考虑 E2 跃迁是一个值得细致研究的问题.

本文将围绕 E2 跃迁通道对等离子体中离子能级布居和谱线强度的重要性开展研究. 首先通过三能级原子模型解析分析了 E2 跃迁通道在不同电子密度下对能级布居的影响; 进一步以 EBIT 中原子

序数较小的  $Mo(Z=42)$  和原子序数较大的  $U(Z=92)$  等离子体为例, 研究不同电子密度条件下 E2 跃迁通道对类铁  $Mo^{16+}$  和  $U^{66+}$  离子布居、谱线强度和线强比的影响, 并讨论其对基组态 M1 跃迁强度比进行等离子体密度诊断产生的影响.

## 2 理论方法和三能级原子模型

等离子体中处于特定离化态的离子能级布居可以用碰撞辐射速率方程表示为

$$\frac{dN_i}{dt} = \sum_{j>i} (A_{ji} N_j) + \sum_{j<i} (c_{ji} N_j n_e) + \sum_{j>i} (d_{ji} N_j n_e) - \left( \sum_{j<i} A_{ij} + \sum_{j>i} c_{ij} n_e + \sum_{j<i} d_{ij} n_e \right) N_i, \quad (1)$$

其中  $N_i$  表示第  $i$  能级的离子布居,  $A_{ji}$  表示第  $j$  能级到第  $i$  能级的辐射跃迁速率,  $n_e$  表示电子数密度,  $c_{ji}$  表示第  $j$  能级到第  $i$  能级的碰撞激发速率系数,  $d_{ji}$  表示对应的碰撞退激发速率系数. 碰撞速率系数可以通过对电子速度分布函数和碰撞截面的卷积得到. 由于 EBIT 中电子能量的准单能性, 电子速度分布采用高斯分布, 电子的能量在相应电离阈附近取值. 根据稳态近似  $\sum_i \frac{dN_i}{dt} = 0$  和归一化条件, 通过求解速率方程可以得到 EBIT 等离子体的离子能级布居.

为了能够得到较为普遍的规律, 首先以三能级原子系统为研究对象, 构建并解析求解速率方程. 在速率方程中, 将离子态用  $\varphi$  表示, 并假定按激发能升序分别记为  $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ ; 同时  $\varphi_3$  到  $\varphi_1$  和  $\varphi_2$  的退激发为 M1 跃迁,  $\varphi_2$  到  $\varphi_1$  退激发为 E2 跃迁, 相应的速率系数标记与方程 (1) 一致; 与每个态相关的速率和布居分别用下标 1, 2, 3 表示, 比如 3 个态的布居分别为  $N_1, N_2, N_3$ . 构建两个碰撞辐射模型, 模型 I 不包含 E2 跃迁, 此时的辐射退激通道只包括  $\varphi_3 \rightarrow \varphi_2, \varphi_3 \rightarrow \varphi_1$ , 即在不考虑 E2 跃迁的情况下  $\varphi_2$  为亚稳态, 只能通过碰撞过程退激发; 模型 II 包含 E2 跃迁, 此时需要考虑  $\varphi_2 \rightarrow \varphi_1, \varphi_3 \rightarrow \varphi_2, \varphi_3 \rightarrow \varphi_1$  辐射退激, 即 3 个态之间的跃迁均可发生, 如图 1 所示. 除此之外, 两个模型包含的碰撞激发和退激发通道是相同的, 即 3 个态之间均可通过碰撞过程相互到达. 分别求解模型 I 和模型 II 的速率方程, 可以得到两个模型的解析解, 分别如下:

$$N_1 = \begin{cases} [(A_{31}c_{23} + A_{31}d_{21} + A_{32}d_{21})n_e + (d_{21}d_{32} + d_{21}d_{31} + c_{23}d_{31})n_e^2]/U, & \text{模型I,} \\ [A_{21}A_{31} + A_{21}A_{32} + (A_{31}c_{23} + A_{31}d_{21} + A_{21}d_{31} + A_{21}d_{32} + A_{32}d_{21})n_e \\ + (d_{21}d_{32} + d_{21}d_{31} + c_{23}d_{31})n_e^2]/U', & \text{模型II,} \end{cases} \quad (2)$$

$$N_2 = \begin{cases} [(A_{31}c_{12} + A_{32}c_{12} + A_{32}c_{13})n_e + (c_{12}d_{32} + c_{12}d_{31} + c_{13}d_{32})n_e^2]/U, & \text{模型I,} \\ [(A_{31}c_{12} + A_{32}c_{12} + A_{32}c_{13})n_e + (c_{12}d_{32} + c_{12}d_{31} + c_{13}d_{32})n_e^2]/U', & \text{模型II,} \end{cases} \quad (3)$$

$$N_3 = \begin{cases} [(c_{13}c_{23} + c_{23}c_{12} + c_{13}d_{21})n_e^2]/U, & \text{模型I,} \\ [A_{21}c_{13}n_e + (c_{13}c_{23} + c_{23}c_{12} + c_{13}d_{21})n_e^2]/U', & \text{模型II,} \end{cases} \quad (4)$$

式中,  $U$  和  $U'$  分别是模型 I 和模型 II 中 3 个态布居表达式中的所有分子项之和, 其表达式分别为

$$U = (A_{31}c_{23} + A_{31}d_{21} + A_{32}d_{21} + A_{31}c_{12} + A_{32}c_{12} + A_{32}c_{13})n_e \\ + (d_{21}d_{32} + d_{21}d_{31} + c_{23}d_{31} + c_{12}d_{32} + c_{12}d_{31} + c_{13}d_{32} + c_{13}c_{23} + c_{23}c_{12} + c_{13}d_{21})n_e^2, \quad (5)$$

$$U' = (A_{31}c_{23} + A_{31}d_{21} + A_{21}d_{31} + A_{21}d_{32} + A_{32}d_{21} + A_{31}c_{12} + A_{32}c_{12} + A_{32}c_{13} + A_{21}c_{13})n_e + (d_{21}d_{32} \\ + d_{21}d_{31} + c_{23}d_{31} + c_{12}d_{32} + c_{12}d_{31} + c_{13}d_{32} + c_{13}c_{23} + c_{23}c_{12} + c_{13}d_{21})n_e^2 + A_{21}A_{31} + A_{21}A_{32}. \quad (6)$$

从 (2)—(4) 式可以看出, 离子态布居表达式中的分子和分母项均可以写成关于电子数密度的二次项表达式, 其系数是关于跃迁速率或者碰撞速率系数之间乘积的和, 并且能量越高的激发态, 其分子项的个数越少.

下面我们分析解析解在低电子密度和高电子密度极限情况下的表达形式. 当电子数密度趋于 0 时, 模型 I 和模型 II 的布居结果为

$$N_1 = \begin{cases} \frac{A_{31}(c_{23} + d_{21}) + A_{32}d_{21}}{A_{31}(c_{12} + d_{21} + c_{23}) + A_{32}(c_{12} + d_{21} + c_{13})}, & \text{模型I,} \\ 1, & \text{模型II,} \end{cases} \quad (7)$$

$$N_2 = \begin{cases} \frac{A_{31}c_{12} + A_{32}(c_{12} + c_{13})}{A_{31}(c_{12} + d_{21} + c_{23}) + A_{32}(c_{12} + d_{21} + c_{13})}, & \text{模型I,} \\ 0, & \text{模型II,} \end{cases} \quad (8)$$

$$N_3 = \begin{cases} 0, & \text{模型I,} \\ 0, & \text{模型II.} \end{cases} \quad (9)$$

通过 (7)—(9) 式可以看出, 在模型 I 中,  $\varphi_2$  能级会分布有一定的布居数, 该布居数值与电子数密度无关, 只与各个跃迁通道和碰撞的速率系数有关; 而对于模型 II, 所有能级布居都会集中在基态, 激发态的布居为 0. 由此表明, E2 跃迁在低电子密度条件下对离子布居会产生较大影响. 在等离子体中, 离子的能级布居主要是辐射和碰撞过程的竞争所决定. 在低电子密度条件下, 当等离子体中电子碰撞速率小于辐射跃迁速率时, 辐射退激发过程占主导作用, 此时新的辐射跃迁通道对于离子布居就会产生较大的影响, 特别是对于只能通过新打开的跃迁通道退激发的能级.

当电子密度趋向于无穷大时, 模型 I 和模型 II 的结果可以写成下面的形式:

$$N_1 = \begin{cases} \frac{d_{21}d_{32} + d_{21}d_{31} + c_{23}d_{31}}{d_{21}d_{32} + d_{21}d_{31} + c_{23}d_{31} + c_{12}d_{32} + c_{12}d_{31} + c_{13}d_{32} + c_{13}c_{23} + c_{23}c_{12} + c_{13}d_{21}}, & \text{模型I,} \\ \frac{d_{21}d_{32} + d_{21}d_{31} + c_{23}d_{31}}{d_{21}d_{32} + d_{21}d_{31} + c_{23}d_{31} + c_{12}d_{32} + c_{12}d_{31} + c_{13}d_{32} + c_{13}c_{23} + c_{23}c_{12} + c_{13}d_{21}}, & \text{模型II,} \end{cases} \quad (10)$$

$$N_2 = \begin{cases} \frac{c_{12}d_{32} + c_{12}d_{31} + c_{13}d_{32}}{d_{21}d_{32} + d_{21}d_{31} + c_{23}d_{31} + c_{12}d_{32} + c_{12}d_{31} + c_{13}d_{32} + c_{13}c_{23} + c_{23}c_{12} + c_{13}d_{21}}, & \text{模型I,} \\ \frac{c_{12}d_{32} + c_{12}d_{31} + c_{13}d_{32}}{d_{21}d_{32} + d_{21}d_{31} + c_{23}d_{31} + c_{12}d_{32} + c_{12}d_{31} + c_{13}d_{32} + c_{13}c_{23} + c_{23}c_{12} + c_{13}d_{21}}, & \text{模型II,} \end{cases} \quad (11)$$

$$N_3 = \begin{cases} \frac{c_{13}c_{23} + c_{23}c_{12} + c_{13}d_{21}}{d_{21}d_{32} + d_{21}d_{31} + c_{23}d_{31} + c_{12}d_{32} + c_{12}d_{31} + c_{13}d_{32} + c_{13}c_{23} + c_{23}c_{12} + c_{13}d_{21}}, & \text{模型I,} \\ \frac{c_{13}c_{23} + c_{23}c_{12} + c_{13}d_{21}}{d_{21}d_{32} + d_{21}d_{31} + c_{23}d_{31} + c_{12}d_{32} + c_{12}d_{31} + c_{13}d_{32} + c_{13}c_{23} + c_{23}c_{12} + c_{13}d_{21}}, & \text{模型II.} \end{cases} \quad (12)$$

从 (10)—(12) 式可以看出, 模型 I 和模型 II 计算得到的离子布居数相等, 即当电子密度很大时, 是否包括 E2 跃迁通道对最终的离子布居没有影响, 只与碰撞速率系数相关. 这是因为在高电子密度条件下, 等离子体内部碰撞速率远大于辐射跃迁速率, 此时等离子体的离子能级布居主要由碰撞过程决定, 辐射过程对于布居的影响可以忽略, 因此打开新的辐射跃迁通道对布居几乎没有影响.

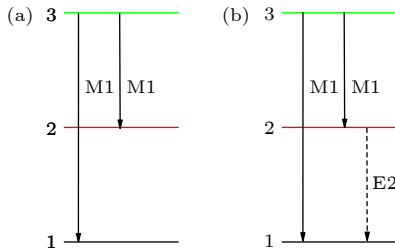


图 1 三能级原子体系能级图 (a) 模型 I 不包含 E2 跃迁; (b) 模型 II 包含 E2 跃迁示意图

Fig. 1. Energy levels of the three-level atomic system: (a) Model I without the E2 transition; (b) Model II with inclusion of the E2 transition.

### 3 应用与讨论

#### 3.1 E2 跃迁对类铁钼和铀等离子体能级布居的影响

第 2 节中以三能级原子体系为对象, 针对电子密度极低和极高的情况, 解析研究了 E2 退激发通道对等离子体中离子能级布居的影响. 实际上, 原子能级远多于 3 个, 等离子体中离子能级布居需要对速率方程进行数值求解得到. 另外, 等离子体中的电子密度往往不处于极限情况, 各种原子动力学过程之间的竞争也随密度改变, 对能级布居的影响也会不同. 为了分析 E2 退激发通道对实际等离子体中离子能级布居的影响, 以 EBIT 中类铁钼和铀等离子体为例进行研究. 图 2 分别给出了类铁钼离子和铀离子  $3d^8$  基组态能级和跃迁示意图, 图中实线表示 M1 跃迁, 虚线表示 E2 跃迁. 需要注意的是, 由于高  $Z$  体系中相对强的相对论效应导致类铁钼离子基组态中较大的精细结构分裂, 甚至部分能

级顺序不同于等电子系列中的低  $Z$  体系, 因此对于两个体系序号相同的能级并不一一对应. 从图 2 可以看出, 根据跃迁选择定则类铁钼离子的 4 号能级  $((3d_{3/2}^4)_0(3d_{5/2}^4)_0)_0$ , 类铁铀离子的 1 号能级  $((3d_{3/2}^4)_0(3d_{5/2}^4)_2)_2$  和 2 号能级  $((3d_{3/2}^4)_0(3d_{5/2}^4)_0)_0$  均不能通过 M1 跃迁通道到达基态, 只有当考虑 E2 跃迁之后, 这些激发态才能通过辐射退激发到达基态.

利用 FAC 程序 [15] 的 CRM 模型 [16–19], 数值求解了两种等离子体的离子能级布居. 精确的能级布居依赖于 CRM 模型中包括的原子态是否完备及相关原子参数的精度. 在目前的 CRM 模型中, 包含的能级涉及  $3d^8$ ,  $3d^74l$  ( $l \leq 3$ ),  $3d^75l$  ( $l \leq 4$ ),  $3p^53d^9$ ,  $3p^53d^84l$  ( $l \leq 3$ ),  $3s^13d^9$ ,  $3d^64s^2$ ,  $3p^43d^{10}$  组态. 相关的原子参数采用相对论多体微扰方法 (RMBPT) 计算得到. 该方法的主要思想是将组态空间分成 M 和 N 两个子空间, M 空间包含与当前研究相关的重要组态, N 空间是由 M 空间的组态经过单双激发产生的组态构成. 通过引入投影算符, 可以将体系的哈密顿量本征值问题转化成有效哈密顿量的本征值问题, 最后对角化有效哈密顿量可以得到本征态能量及波函数 [20,21]. 在当前计算中, 将 CRM 中的组态全部包含在 M 空间中, 对于 N 空间, 将单电子激发和双电子激发中的第一个电子可以激发的最大主量子数 ( $n_1$ ) 设置为 170, 将双激发中的第二个电子能够激发的最大主量子数 ( $n_2$ ) 设置为 65. 表 1 列出了计算得到的  $\text{Mo}^{16+}$  和  $\text{U}^{66+}$  基组态能级的激发能和  $\text{Mo}^{16+}$  离子的 NIST 结果 [22,23]. 从表 1 可以看出, RMBPT 结果和 NIST 的结果符合得很好, 两组数据的最大误差和平均误差分别为 0.35% 和 0.09%, 由此可以得出当前的理论计算结果是可靠的. 对于 CRM 的完备性验证, 构建了新的 CR 模型, 新模型在原有模型的基础上增加了新的组态, 比如  $3d^76l$  ( $l \leq 5$ ),  $3p^53d^85l$  ( $l \leq 4$ ),  $3s^13d^84l$  ( $l \leq 3$ ). 为了保证计算可行, 新增加的组态采用相对论组态相互作用方法并且忽略与其他组态间的相互作用得到. 计算结果表明新增加的组态对离子布居影响很小, 可以认为 CRM 中包含的原子态是完备的.

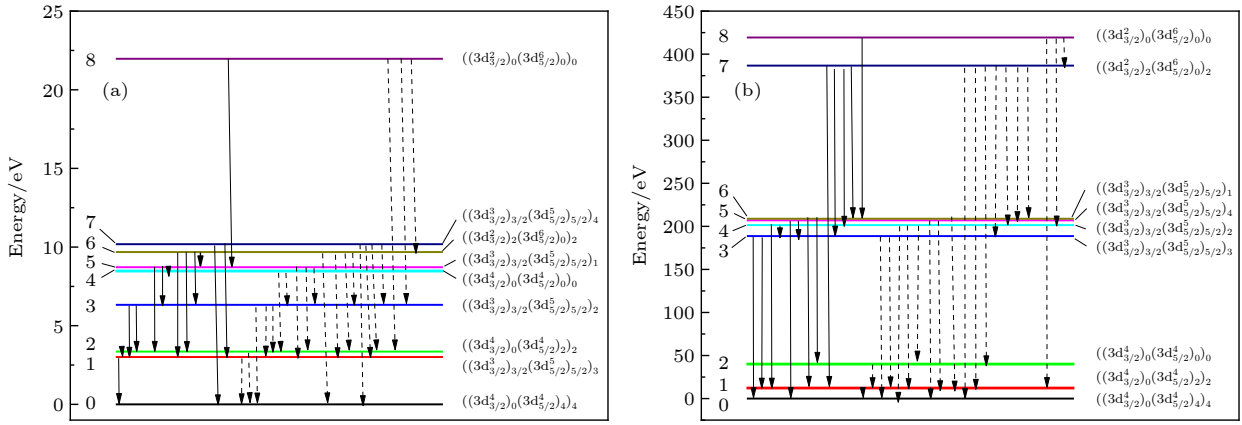


图 2 类铁钼 ( $\text{Mo}^{16+}$ ) 离子 (a) 和铀 ( $\text{U}^{66+}$ ) 离子 (b) 基组态内的禁戒跃迁, 其中实线为 M1 跃迁, 虚线为 E2 跃迁, 图中的数字 (0, 1, 2, ...) 表示能级序号

Fig. 2. Energy-level diagram of the ground state configuration of Fe-like  $\text{Mo}^{16+}$  (a) and Fe-like  $\text{U}^{66+}$  (b) ions. Solid lines represent the M1 transitions and dashed lines represent the E2 transitions. The numbers (0, 1, 2, ...) correspond to the energy levels labels.

另外, 实际计算中电子速度分布采用高斯型分布, 对于钼离子和铀离子, 其电子的能量分别为 640 eV 和 8145 eV, 半高宽基于 EBIT 实验参数采用电子能量的 5%. 与分析三能级体系类似, 构建两个模型分别记为模型 I 和模型 II, 模型 I 只考虑 E1 和 M1 辐射退激通道, 模型 II 在模型 I 的基础上增加

了 E2 跃迁通道. 除此之外, 两个模型采用的其他原子参数均相同.

图 3 分别给出了类铁钼离子和铀离子的  $3d^8$  基组态精细能级布居随电子密度的变化关系, 图中实线是模型 I 的计算结果, 用 E1M1 表示, 虚线是模型 II 的计算结果, 用 E1M1E2 表示. 图 3(a) 展示了类铁钼离子的计算结果, 从图 3 可以看出, 当电子密度较大时 (大于  $10^{15} \text{ cm}^{-3}$ ), 模型 I 和模型 II 计算得到的各能级布居差异很小, 这说明 E2 跃迁通道在电子密度较高时对钼离子布居几乎没有影响, 该结论也与三能级原子模型一致. 而在电子密度小于  $10^6 \text{ cm}^{-3}$  的区间, 由于 E2 跃迁的影响, 两个模型计算的部分能级布居存在一定差异, 特别是对于 4 号能级  $((3d_{3/2}^4)_0(3d_{5/2}^4)_0)_0$ , 模型 I 和模型 II 计算的布居明显不同. 模型 I 的计算表明该能级仍会存在一定数量的布居, 占比 0.2%, 但是根据模型 II 的计算, 该激发态能级的布居已经趋近于 0. 这是因为模型 I 中没有包含 E2 跃迁通道, 4 号能级只能通过碰撞退激过程退激发, 在低电子密度环境下其碰撞速率很小, 因此它们具有一定的布居; 而模型 II 包含了 E2 跃迁, 使得该能级可以借助于 E2 通道到达基态, 故其布居在低电子密度时趋近于 0. 同时可以看出, 对于类铁钼离子, 由于 E2 跃迁速率较小 (最大速率仅  $47 \text{ s}^{-1}$ ), 只在较低电子密度下 E2 跃迁速率才会超过碰撞退激发速率发挥作用, 因此在很宽的电子密度区间 E2 跃迁对能级布居的影响都很小.

图 3(b) 展示了类铁铀离子的计算结果. 从图 3(b)

表 1 类铁钼离子和铀离子的基组态精细能级激发能

Table 1. Excitation energies of the lowest excited levels of Fe-like  $\text{Mo}^{16+}$ ,  $\text{U}^{66+}$  ions.

Z	Config-uration	Key	Level	$E_{\text{RMBPT}}/\text{eV}$	$E_{\text{NIST}}/\text{eV}$ [22, 23]
42	$3d^8$	0	$(3d_+^4)_4$	0.000	0
42	$3d^8$	1	$((3d_-^3)_{3/2}(3d_+^5)_{5/2})_3$	3.012	3.007
42	$3d^8$	2	$(3d_+^4)_2$	3.358	3.351
42	$3d^8$	3	$((3d_-^3)_{3/2}(3d_+^5)_{5/2})_2$	6.331	6.323
42	$3d^8$	4	$(3d_+^4)_0$	8.478	8.474
42	$3d^8$	5	$((3d_-^3)_{3/2}(3d_+^5)_{5/2})_1$	8.721	8.717
42	$3d^8$	6	$(3d_-^2)_2$	9.680	9.666
42	$3d^8$	7	$((3d_-^3)_{3/2}(3d_+^5)_{5/2})_4$	10.183	10.219
42	$3d^8$	8	$(3d_-^2)_0$	21.972	21.906
92	$3d^8$	0	$(3d_+^4)_4$	0.000	
92	$3d^8$	1	$(3d_+^4)_2$	12.183	
92	$3d^8$	2	$(3d_+^4)_0$	40.048	
92	$3d^8$	3	$((3d_-^3)_{3/2}(3d_+^5)_{5/2})_3$	188.701	
92	$3d^8$	4	$((3d_-^3)_{3/2}(3d_+^5)_{5/2})_2$	201.451	
92	$3d^8$	5	$((3d_-^3)_{3/2}(3d_+^5)_{5/2})_4$	207.021	
92	$3d^8$	6	$((3d_-^3)_{3/2}(3d_+^5)_{5/2})_1$	208.894	
92	$3d^8$	7	$(3d_-^2)_2$	386.738	
92	$3d^8$	8	$(3d_-^2)_0$	419.338	

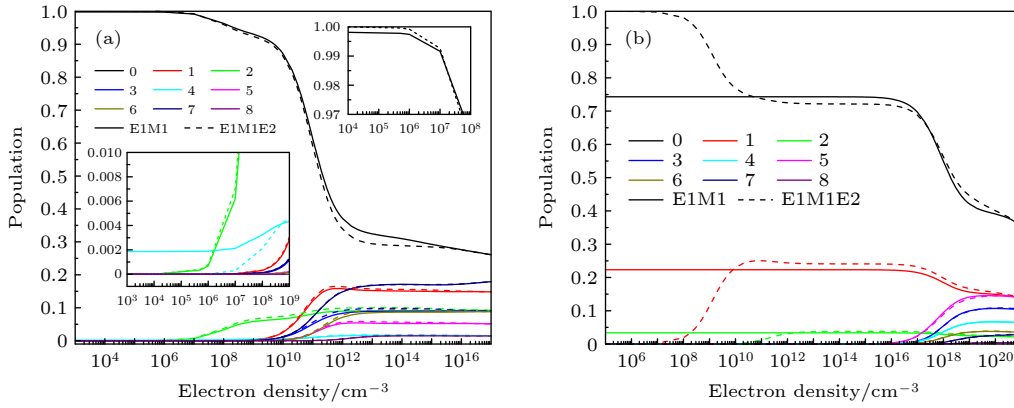


图 3 类铁钼离子 (a) 和铀离子 (b) 处于基组态  $3d^8$  能级的离子布居对密度的依赖关系, 图中的数字 (0, 1, 2, ...) 对应于图 1 中类铁钼离子和铀离子的能级序号

Fig. 3. The electron-density dependence of the population distribution of energy levels belonging to  $3d^8$  configuration of Fe-like  $Mo^{16+}$  (a) and  $U^{66+}$  (b) ions. The numbers (0, 1, 2, ...) correspond to the energy levels of  $Mo^{16+}$  and  $U^{66+}$  of Fig.1.

可以看出, 在电子密度大于  $10^{19} \text{ cm}^{-3}$  时, 两个模型计算得到的基组态能级布居差别很小. 随着电子密度的降低, 除了 1 号能级  $((3d_{3/2}^4)_0(3d_{5/2}^4)_2)_2$  和 2 号能级  $((3d_{3/2}^4)_0(3d_{5/2}^4)_0)_0$  外, 模型 I 和模型 II 计算得到激发态能级布居均很快趋近于 0. 根据模型 I 的计算, 当电子密度小于  $10^7 \text{ cm}^{-3}$  时, 激发态  $((3d_{3/2}^4)_0(3d_{5/2}^4)_2)_2$  和  $((3d_{3/2}^4)_0(3d_{5/2}^4)_0)_0$  仍会占据一定数量的布居, 分别占比 22% 和 4%, 但是模型 II 的计算结果表明其布居在该电子密度区间趋近于 0. 如前所述, 此二能级  $((3d_{3/2}^4)_0(3d_{5/2}^4)_2)_2$  和  $((3d_{3/2}^4)_0(3d_{5/2}^4)_0)_0$  不能通过 M1 辐射退激到基态, 所以当 CRM 中不包含 E2 跃迁通道时, 它们只能通过碰撞过程退激发, 在低电子密度环境下其碰撞退激发速率很小, 因此在模型 I 中它们具有一定的布居, 这也与三能级模型得到的结论一致. 值得注意的是, 类铁铀离子的 E2 跃迁率达到  $10^5 \text{ s}^{-1}$ , 比类铁钼离子大了几个量级, 因此对能级布居产生影响时的电子密度也较高.

通过图 3 两种离子能级布居结果的比较可以看出, 随着电子密度的降低, E2 跃迁对类铁钼离子布居的影响要大于其对类铁钼离子的影响, 而这主要是由于 E2 跃迁速率增大造成的. 对于 Mo 离子, 原子序数相对较小, 最大的 E2 跃迁速率仅为最大的 M1 跃迁速率的 1%, 因此在电子密度从高到低的变化过程中, E2 跃迁对能级布居的影响并不显著; 而对于高 Z 的铀离子, E2 跃迁速率增大了近 4 个量级, 对能级布居产生的影响也相对更大. 此外, 由于铀离子中各种辐射退激发速率比钼离子的大, 与碰撞速率达到可比拟时所需要的电子密度相

应增大, 因此铀离子的布居对电子密度敏感的位置相较于钼离子整体向高密度区间移动.

### 3.2 E2 跃迁对类铁钼和铀离子谱线强度的影响

对等离子体中电子密度敏感的跃迁线是因为等离子体内部辐射、碰撞等原子动力学过程对产生谱线的上能级布居的贡献相当, 且相互竞争的结果. 这样如果其中一个物理量发生变化就会导致布居出现明显变化, 从而使谱线强度产生改变. 因此, E2 跃迁对布居的影响会直接影响谱线强度, 同时谱线强度对电子密度的依赖关系也会发生改变. 基于此原因, 在本节中就 E2 跃迁对 M1 谱线强度的影响作进一步详细的研究.

表 2 列出了所研究的类铁钼和铀离子的 M1 跃迁, 其中包括跃迁涉及的上下能级、跃迁能和波长, 跃迁速率和振子强度. 图 4 呈现了这些 M1 跃迁的相对谱线强度随电子密度的变化关系. 实线是速率方程求解离子布居中只考虑 E1 和 M1 跃迁的计算结果, 虚线是包含了 E2 跃迁的结果. 对于图中的谱线强度进行归一化处理. 从图 4 中可以看出, E2 跃迁在高电子密度情况下对钼离子和铀离子的谱线强度影响很小; 但随着密度降低这种影响在类铁铀离子中愈发显著, 某些谱线强度随密度的改变有数倍的变化. 由于谱线强度与对应跃迁上能级布居和跃迁速率有关, 所以 E2 跃迁对谱线强度的影响来源于其对布居的影响. 也就是说, 对于等离子体中原子序数较高的离子, E2 等高阶禁戒跃迁对布居和谱线强度的影响是不能被忽略的.

表 2 类铁钼离子和铀离子的基组态 M1 跃迁的跃迁能  $\Delta E$ 、波长  $\lambda$ 、跃迁速率  $A$  和振子强度  $gf$   
 Table 2. Transition energies  $\Delta E$ , wavelengths  $\lambda$ , transition rates  $A$  and oscillator strength  $gf$  for the M1 transitions in the ground configuration of Fe-like  $\text{Mo}^{16+}$  and  $\text{U}^{66+}$ .

$Z$	Line	Upper	Lower	$\Delta E/\text{eV}$	$\lambda/\text{nm}$		$gf$	$A/\text{s}^{-1}$
					RMBPT	NIST <sup>[20,21]</sup>		
42	1	8	5	13.3	93.56	94.01	$5.80 \times 10^{-7}$	$4.42 \times 10^3$
42	2	7	0	10.2	121.76	121.33	$6.65 \times 10^{-7}$	$3.33 \times 10^2$
42	3	7	1	7.17	172.89	171.91	$2.86 \times 10^{-7}$	70.9
42	4	6	1	6.67	185.93	186.19	$1.62 \times 10^{-6}$	$6.26 \times 10^2$
42	5	6	2	6.32	196.10	196.33	$5.21 \times 10^{-9}$	1
42	6	5	2	5.36	231.18	231.05	$4.08 \times 10^{-7}$	$1.70 \times 10^2$
42	7	6	3	3.35	370.16	370.92	$2.60 \times 10^{-6}$	$2.53 \times 10^2$
42	8	3	1	3.32	373.56	373.83	$2.40 \times 10^{-6}$	$2.30 \times 10^2$
42	9	1	0	3.01	411.66	412.37	$6.28 \times 10^{-6}$	$3.53 \times 10^2$
42	10	3	2	2.97	417.04	417.19	$1.87 \times 10^{-6}$	$1.43 \times 10^2$
42	11	5	3	2.39	518.72	517.87	$1.03 \times 10^{-6}$	84.9
42	12	6	5	0.959	1292.39	1306.47	$2.70 \times 10^{-7}$	1
42	13	2	1	0.346	3583.17	3604.19	$3.93 \times 10^{-7}$	0.408
42	14	5	4	0.243	5107.12	5102.22	$1.42 \times 10^{-7}$	0.121
92	1	7	1	$3.75 \times 10^2$	3.31		$3.93 \times 10^{-8}$	$4.79 \times 10^4$
92	2	8	6	$2.10 \times 10^2$	5.89		$7.32 \times 10^{-5}$	$1.41 \times 10^8$
92	3	5	0	$2.07 \times 10^2$	5.99		$1.01 \times 10^{-4}$	$2.09 \times 10^7$
92	4	7	3	$1.98 \times 10^2$	6.26		$2.68 \times 10^{-4}$	$9.12 \times 10^7$
92	5	6	1	$1.97 \times 10^2$	6.30		$6.79 \times 10^{-5}$	$3.80 \times 10^7$
92	6	4	1	$1.89 \times 10^2$	6.55		$1.47 \times 10^{-4}$	$4.56 \times 10^7$
92	7	3	0	$1.89 \times 10^2$	6.57		$3.39 \times 10^{-4}$	$7.48 \times 10^7$
92	8	7	4	$1.85 \times 10^2$	6.69		$9.07 \times 10^{-5}$	$2.70 \times 10^7$
92	9	7	6	$1.78 \times 10^2$	6.97		$8.10 \times 10^{-6}$	$2.22 \times 10^6$
92	10	3	1	$1.77 \times 10^2$	7.02		$3.01 \times 10^{-5}$	$5.81 \times 10^6$
92	11	6	2	$1.69 \times 10^2$	7.34		$4.86 \times 10^{-5}$	$2.00 \times 10^7$
92	12	5	3	18.3	67.68		$6.64 \times 10^{-6}$	$1.07 \times 10^4$
92	13	4	3	12.7	97.24		$7.80 \times 10^{-6}$	$1.10 \times 10^4$

### 3.3 E2 跃迁对类铁钼和铀离子线强比的影响

如前所述, 高离化度离子的 M1 跃迁谱线在天体和实验室等离子体诊断方面有着重要作用<sup>[6,7,24–26]</sup>. 在之前的工作中, 针对低  $Z$  的 16 价和 17 价钼离子基组态中 M1 跃迁谱线开展了实验和理论研究, 并发现了若干组对等离子体电子密度敏感的 M1 线强比<sup>[9]</sup>. 本工作进一步研究了 E2 跃迁对 M1 线强比与等离子体电子密度依赖关系的影响. 图 5 展示了 E2 跃迁对类铁钼离子和类铁铀离子线强比的密度依赖性的影响, 图中的实线和虚线分别是不包含和包含 E2 跃迁的计算结果. 图中选择了较为敏感的线强比进行说明, 对于钼离子选择的线

强比分别为 9/1, 9/4, 9/7, 2/1, 2/4, 对于铀离子选择的线强比为 7/2, 7/4, 7/8, 3/2, 3/4, 这里的罗马数字对应于表 1 中的跃迁序号. 从图 5 可以看出, 类铁钼离子的线强比在  $10^9$ — $10^{13}$   $\text{cm}^{-3}$  电子密度区间最为敏感, 该密度区间与 EBIT 装置的典型密度区间重合, 可用于 EBIT 等离子体的密度诊断, 铀离子的密度敏感区间位于  $10^{16}$ — $10^{19}$   $\text{cm}^{-3}$  范围, 该敏感区间趋向于更高的电子密度, 其原因是铀离子中更大的辐射退激发速率, 碰撞过程和辐射过程达到可比拟时需要的电子密度更大. 此外, 从图 5 中可以看出, 在高电子密度区间, E2 跃迁对钼离子和铀离子的线强比影响都很小; 随着电子密度降低, E2 跃迁对谱线线强比的影响增强, 并且

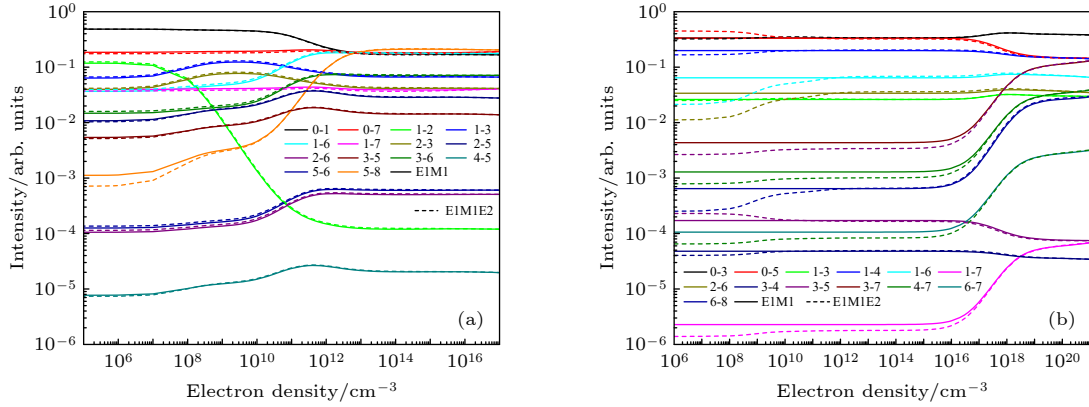


图 4 类铁钼离子 (a) 和铀离子 (b) 基组态内 M1 跃迁谱线强度对密度的依赖关系, 图中的 (0 -1, ...) 是相应跃迁, 数字表示该跃迁的下能级和上能级序号

Fig. 4. The electron-density dependence of the intensity ratios for the M1 transitions from the ground configuration of Mo<sup>16+</sup>(a) and U<sup>66+</sup>(b). The numbers (0 -1, ...) correspond to the lower and upper energy levels of the lines, respectively.

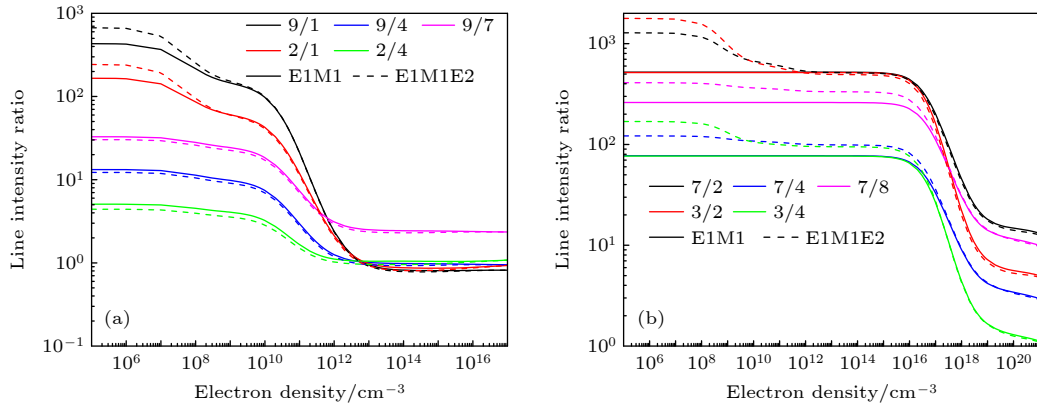


图 5 类铁钼离子 (a) 和铀离子 (b) 的密度敏感线, 图中的数字 (9/7, ...) 对应于跃迁标号, 与表 1 一致

Fig. 5. Density-sensitive line ratios for Mo<sup>16+</sup>(a) and U<sup>66+</sup>(b). The numbers (9/7, ...) correspond to the transitions in Table 1.

E2 跃迁对类铁铀离子的影响大于类铁钼离子的影响. 因此, E2 跃迁对能级布居的影响可能会直接导致电子密度诊断的偏差, 所以对于原子序数较大的原子体系, E2 跃迁通道必须予以考虑.

## 4 结 论

本文从解析模型和大规模数值模拟两方面研究了电子束离子阱等离子体中 E2 跃迁对离子能级布居的影响. 首先, 通过求解三能级原子体系稳态近似下的速率方程得到了离子布居的解析表达式, 并对其在高、低电子密度极限的表达形式进行分析, 得到如下结论: E2 退激通道在高电子密度条件下对离子布居影响很小, 在低电子密度条件下对离子布居影响较大. 进一步, 本文选择类铁钼和铀等离子体, 构建并数值求解稳态近似下的碰撞辐射模型, 讨论了 E2 跃迁对类铁钼和铀离子基组态能级

布居和相应 M1 谱线强度对电子密度依赖关系的影响. 研究表明 E2 跃迁通道在高电子密度情况下对两个离子能级布居和谱线强度的影响都较小, 随着电子密度降低, 对铀离子的影响强于钼离子. 此外本文还分析了 E2 跃迁对类铁钼离子和铀离子中若干对电子密度敏感的谱线强度比的影响, 并指出对于高 Z 原子体系, E2 跃迁对于 M1 谱线强比有着不可忽略的贡献.

## 参考文献

- [1] Silwal R, Takacs E, Dreiling J M, Gillaspay J D, Ralchenko Y 2017 *Atoms* **5** 30
- [2] Nakamura N, Numadate N, Kono Y, Murakami I, Kato D, Sakaue H A, Hara H 2021 *Astrophys. J.* **921** 115
- [3] Huang W Z, Zhang Q X, He S T, Gu Y Q, You Y L, Jiang W M 1995 *Acta Phys. Sin.* **44** 1783 (in Chinese) [黄文忠, 张覃鑫, 何绍堂, 谷渝秋, 尤永录, 江文勉 1995 *物理学报* **44** 1783]
- [4] Feldman U, Doron R, Klapisch M, Bar-Shalom A 2001 *Phys. Scr.* **63** 284

- [5] Doron R, Feldman U 2001 *Phys. Scr.* **64** 319
- [6] Ralchenko Y 2007 *J. Phys. B:At., Mol. Opt. Phys.* **40** F175
- [7] Ralchenko Y, Draganic I N, Osin D, Gillaspay J D, Reader J 2011 *Phys. Rev. A* **83** 032517
- [8] Ding X B, Liu J X, Koike F, Murakami I, Kato D, Sakaue H A, Nakamura N, Dong C Z 2016 *Phys. Lett. A* **380** 874
- [9] He Z C, Meng J, Li Y J, Jia F S, Khan N, Niu B, Huang L Y, Hu Z M, Li J G, Wang J G, Zou Y M, Wei B R, Yao K 2022 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **288** 108276
- [10] Jonauskas V, Masys S, Kyniene A, Gaigalas G 2013 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **127** 64
- [11] Lu Q, Yan C L, Meng J, Xu G Q, Yang Y, Chen C Y, Xiao J, Li J G, Wang J G, Zou Y 2021 *Phys. Rev. A* **103** 022808
- [12] Lu Q, He J, Tian H, Li M, Yang Y, Yao K, Chen C, Xiao J, Li J G, Tu B, Zou Y 2019 *Phys. Rev. A* **99** 042510
- [13] Li W, Shi Z, Yang Y, Xiao J, Brage T, Hutton R, Zou Y 2015 *Phys. Rev. A* **91** 062501
- [14] Han X Y, Gao X, Zeng D L, Jin R, Yan J, Li J M 2014 *Phys. Rev. A* **89** 042514
- [15] Gu M F 2008 *Can. J. Phys.* **86** 675
- [16] Ding X B, Yang J X, Zhu L F, Koike F, Murakami I, Kato D, Sakaue H A, Nakamura N, Dong C Z 2018 *Phys. Lett. A* **382** 2321
- [17] Ding X, Zhang F, Yang Y, Zhang L, Koike F, Murakami I, Kato D, Sakaue H A, Nakamura N, Dong C 2020 *Phys. Rev. A* **101** 042509
- [18] Lu Q, Yan C L, Fu N, Yang Y, Chen C Y, Xiao J, Wang K, Zou Y 2021 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **262** 107533
- [19] Qiu M L, Zhao R F, Guo X L, Zhao Z Z, Li W X, Du S Y, Xiao J, Yao K, Chen C Y, Hutton R, Zou Y 2014 *J. Phys. B:At., Mol. Opt. Phys.* **47** 175002
- [20] Gu M F, Holczer T, Behar E and Kahn S M 2006 *Astrophys. J.* **641** 1227
- [21] Lindgren I 1974 *J. Phys. B:At., Mol. Opt. Phys.* **7** 2441
- [22] Kramida A, Ralchenko Y, Reader J, and NIST ASD Team 2021 NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.9) [Online]. Available: <https://physics.nist.gov/asd> [2022, May 19]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD
- [23] Sugar J and Musgrove A 1988 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **17** 155
- [24] Ralchenko Y, Gillaspay J D, Reader J, Osin D, Curry J J, Podpaly Y A 2013 *Phys. Scr.* **T156**
- [25] Guo X L, Si R, Li S, Huang M, Hutton R, Wang Y S, Chen C Y, Zou Y M, Wang K, Yan J, Li C Y, Brage T 2016 *Phys. Rev. A* **93** 012513
- [26] Ralchenko Y 2013 *Plasma Fusion Res.* **8** 2503024

# Effects of electric quadrupole transitions on ion energy-level populations of in electron beam ion trap plasma<sup>\*</sup>

Meng Ju<sup>1)</sup> He Zhen-Cen<sup>2)</sup> Yan Jun<sup>1)</sup> Wu Ze-Qing<sup>1)</sup> Yao Ke<sup>2)†</sup>  
Li Ji-Guang<sup>1)‡</sup> Wu Yong<sup>1)3)</sup> Wang Jian-Guo<sup>1)</sup>

1) (*National Key Laboratory of Computational Physics, Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China*)

2) (*Key Laboratory of Nuclear Physics and Ion-beam Application (MOE), Fudan University, Shanghai 200433, China*)

3) (*HEDPS, Center for Applied Physics and Technology, and College of Engineering, Peking University, Beijing 100871, China*)

( Received 18 March 2022; revised manuscript received 24 May 2022 )

## Abstract

The effects of electric-quadrupole (E2) transitions on ion energy-level populations in plasma are studied by constructing the collisional radiative model of a three-level atomic system in the steady-state approximation. It is found that the influence is non-negligible at the low electron density, and becomes larger when the E2 transition rate grows with atomic number increasing. Furthermore, we investigate the E2-transition effects on the populations of levels in the ground configuration for Fe-like Mo<sup>16+</sup> and U<sup>66+</sup> ions in an electron-beam ion-trap plasma. The level populations are obtained by solving the large-scale rate equation numerically. On this basis, we discuss the influence of the E2 transition on the line intensity ratio of the magnetic dipole (M1) lines. In addition, we point out the significance of the E2 transitions on the intensity ratio of the M1 lines that can be used to diagnose the electron density of plasma.

**Keywords:** CR model, plasma diagnostics, atomic data and spectra

**PACS:** 52.70.-m, 32.30.Jc, 31.15.A-

**DOI:** 10.7498/aps.71.20220489

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11874090, 11874008, 11734013, 11934004, 11404180, 11604052 and 11774037) and the National Key Research and Development Program of China (Grant Nos. 2017YFA0403200, 2017YFA0402300).

† Corresponding author. E-mail: [keyao@fudan.edu.cn](mailto:keyao@fudan.edu.cn)

‡ Corresponding author. E-mail: [li\\_jiguang@iapcm.ac.cn](mailto:li_jiguang@iapcm.ac.cn)

电四极跃迁对电子束离子阱等离子体中离子能级布居的影响

孟举 何贞岑 颜君 吴泽清 姚科 李冀光 吴勇 王建国

Effects of electric quadrupole transitions on ion energy-level populations of in electron beam ion trap plasma

Meng Ju He Zhen-Cen Yan Jun Wu Ze-Qing Yao Ke Li Ji-Guang Wu Yong Wang Jian-Guo

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 195201 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20220489

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220489>

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

## 您可能感兴趣的其他文章

### Articles you may be interested in

用于等离子体相干模式自动识别的谱聚类算法实现

Implementation of spectral clustering algorithm for automatic identification of plasma coherence patterns

物理学报. 2022, 71(15): 155202 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220367>

基于前馈神经网络的等离子体光谱诊断方法

Plasma optical emission spectroscopy based on feedforward neural network

物理学报. 2021, 70(9): 095211 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202248>

一种计算非平衡等离子体中粒子能级布居的简化方法

A simplified method of calculating electronic energy level populations in nonequilibrium plasmas

物理学报. 2021, 70(14): 145202 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202119>

一个快速模拟热稠密非平衡等离子体的碰撞辐射模型

A general model for rapid simulation of hot dense plasmas under non-local thermal equilibrium conditions

物理学报. 2021, 70(11): 115202 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201946>

电子束离子阱光谱标定和Ar<sup>13+</sup>离子M1跃迁波长精密测量

Spectral calibration for electron beam ion trap and precision measurement of M1 transition wavelength in Ar<sup>13+</sup>

物理学报. 2022, 71(3): 033201 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211663>

激光诱导铝等离子体中原子和离子组分膨胀特性

Expansion characteristics of atom and ion component in laser-induced aluminum plasma

物理学报. 2018, 67(18): 185201 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180595>