

# 类镍金离子 0.3~ 0.6 nm 范围内线谱与 带谱的理论计算\*

程新路 杨向东 刘小红\* \*

王红斌 郑志坚 李三伟

(四川大学原子与分子物理研究所 成都 610065)(中国工程物理研究院核物理与化学研究所 成都 610003)

**提要** 用相对论多组态 Dirac-Fock 方法以及不可分辨跃迁阵模型计算了类镍金离子在 0.3~ 0.6 nm 范围内的线状谱和带状谱,理论计算和实验测量较之于单纯用不可分辨跃迁阵(UTA)模型计算所得结果吻合得更好,表明当跃迁阵中含有的谱线太少,基于线谱的计算对 UTA 模型进行修正 是合理的和必须的。

**关键词** 类镍金离子,UTA 模型,MCDF

## 1 引 言

由于 Au 元素在惯性约束聚变研究中的重要性,对其等离子体的研究引起了人们的广泛关注。金等离子体产生的 X 光光谱包含着等离子体状态参量和等离子体中发生过程的大量信息。在实验感兴趣的范围内(0.3~ 0.6 nm),Au 等离子体 X 光光谱主要是由 Au 的类镍、类铜、类锌等离子体中的与 M 壳层有关的跃迁产生的复杂光谱。这些跃迁中谱线数目众多且又十分密集,加之固有加宽,碰撞加宽, Doppler 加宽和 Stark 加宽等效应使得光谱含有一些线状谱,更多的则呈带状称其为 M 带。金等离子体 M 壳层 X 光发射中所含的较硬 X 射线(2.0~ 3.6 keV)成分被认为是预热靶丸的重要因素,且与优化内爆靶丸的设计有关。

Au<sup>51+</sup> 谱线最初是由 P. G. Burkhalter 等利用爆炸丝技术得到的<sup>[1]</sup>。我们曾用不可分辨跃迁阵(UTA)模型计算了此范围内的带状光谱<sup>[2]</sup>,得到了在总体上与实验较为符合的谱图。但在细致结构方面仍有一些差别,这除了未考虑非对称的 Gauss 分布和旋轨耦合导致的组态与跃迁阵的分裂等因素外,还与 UTA 模型是基于统计的思想有关。对于谱线数目众多而又密集的跃迁运用统计方法是合适的,但对于谱线数目较少而又稀疏的跃迁,其结果则要差一些。为此如不单纯用 UTA 模型处理这类跃迁,可望得到更好结果。

本文针对 P. G. Burkhalter 等<sup>[1]</sup>用爆炸丝方法得到的类镍金实验谱(谱图示于图 1 的下半部分),采用完全相对论从头算法计算谱线数目较少的跃迁(仅有几根谱线),仍用 UTA 模型计算谱线数目极多的跃迁(每个跃迁含数百条谱线),然后将线状谱和带状谱叠加到一个谱

\* 中国工程物理研究院院外基金(960208)和国防科技重点实验室基金联合资助。

\* \* 现为浙江大学光电系博士研究生。

收稿日期: 1998-09-28; 收到修改稿日期: 1999-01-25

图,与实验谱图进行了比较。

## 2 UTA 模型和计算公式

UTA 是组态  $C$  和  $C'$  的能级之间的所有跃迁,由于谱线的加宽效应,跃迁谱线可能不可分辨而成为一个带,称为不可分辨跃迁阵(Unresolved Transition Array)。两种最典型的 UTA 是  $l1^{N1+1} - l1^{N1}l2$  和  $l1^{N1}l2 - l1^{N1}l3$ , 其中“-”号左边代表 UTA 的初组态,右边代表末组态,  $l_i, N_i$  代表轨道角动量和壳层占据电子数。UTA 的通用表达式为  $l1^{N1+1}l2^{N2}l3^{N3}l4^{N4} - l1^{N1}l2^{N2+1}l3^{N3}l4^{N4}$ 。它有特征参数:平均波长  $\lambda$ , 半高全宽 FWHM, 跃迁强度  $W$  和谱线数  $L$ , 它们的计算方法如下(以 UTA 的通用表达式为例,并将其简记为  $C - C'$ ):

1) 不可分辨跃迁阵  $C - C'$  的平均波长  $\lambda$

$$\lambda(C - C') = 1/T_{av}(C - C') \quad (1)$$

而

$$T_{av}(C - C') = \mu_1 + \delta E = E_{av}(C') - E_{av}(C) + \delta E \quad (2)$$

(2) 式中  $E_{av}(C')$ ,  $E_{av}(C)$  为初、末组态的平均能量,  $\mu_1$  为波数统计分布的一阶矩,  $\delta E$  为起因于权重因子  $|\langle a | Z | b \rangle|^2$  的相移,它对于  $l1^{N1+1} - l1^{N1}l2$  跃迁阵不为零,且可表示为

$$\delta E(l1^{N1+1} - l1^{N1}l2) = N \frac{(2l+1)(2l'+1)}{4l+1} [ \sum_{k \neq 0} x_k f_k F^k(l, l') + \sum_{k \neq 0} x_k g_k G^k(l, l') ] \quad (3)$$

(3) 式中  $F, G$  为 Slater 积分,  $f_k, g_k$  的值参见文献[3]。

2) 不可分辨跃迁阵  $C - C'$  在 Gauss 分布下的半高宽 FWHM 为

$$\text{FWHM}(C - C') = 2(2\ln 2 \sigma^2)^{1/2} \quad (4)$$

(4) 式中  $\sigma^2$  为波数分布的方差,利用二次量子化方法可得

$$\sigma^2 = \sum_i N_i [ \sum_{k, k'} x_i(k, k', l, l', \dots) \times X_i^{kk'}(nl, n'l', \dots) ] \quad (5)$$

(5) 式中  $N_i$  和等效电子数有关,  $x_i$  为一些  $3j, 6j, 9j$  符号乘积,  $X_i$  为  $k, k'$  阶 Slater 积分乘积。

3) 不可分辨跃迁阵  $C - C'$  的跃迁强度  $W$  (阵内所有谱线强度 Line Strength 之和) 为

$$W(C - C') = 2l_{>} \begin{bmatrix} 4l1+1 \\ N1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4l2+1 \\ N2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4l3+2 \\ N3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4l4+2 \\ N4 \end{bmatrix} (P_{l1l2})^2 \quad (6)$$

其中  $l_{>}$  为  $l1$  和  $l2$  的较大值,且  $P_{l1l2} = \int_0^\infty R_{n1l1}(r) r R_{n1l2}(r) dr$ ,  $R$  为径向波函数。

4) 不可分辨跃迁阵  $C - C'$  的谱线数  $L$  为

$$L(C - C') = \frac{3N_S(C)N_S(C')}{8\nu \sqrt{\pi\nu}} \left[ \left| 1 - \frac{1}{2\nu} \right| + (\alpha_4 - 3) \left| \frac{5}{16} - \frac{35}{96\nu} \right| \right] \quad (7)$$

(7) 式中各量参见文献[4]。

## 3 计算方法

在感兴趣的波长范围内(0.3~0.6 nm)类镍金光谱主要由以下两种类型跃迁组成:  $3p^6 3d^{10} - 3p^6 3d^9 4f$ ,  $3p^5 3d^{10} 4d$ ,  $3p^6 3d^9 5p$ ,  $3p^6 3d^9 5f$  和  $3p^6 3d^9 4s - 3p^6 3d^8 4s 4f$ ,  $3p^5 3d^9 4s 4d$ ,  $3p^6 3d^8 4s 5p$ ,  $3p^6 3d^8 4s 5f$ 。对于第一类跃迁,它产生的谱线数较少,宜用相对论从头算程序对每个跃迁线进行精确计算;对于第二类跃迁,其谱线数较多,实验上不可分辨或呈带状,宜用 UTA 模型进行计算。计算中仅考虑以上跃迁的原因参见文献[2]。

采用 Grant 的 MCDF<sup>[5,6]</sup> 程序, 在广义平均模式(EAL)下, 对类镍 Au 的  $3p^6 3d^{10} - 3p^6 3d^9 4f$ ,  $3p^5 3d^{10} 4d$ ,  $3p^6 3d^9 5p$ ,  $3p^6 3d^9 5f$  的跃迁波长和振子强度进行了计算。计算中既考虑了包含相对论效应和重要的组态相互作用, 也考虑了相对论性二体 Breit 修正和由真空极化、自能引起的量子电动力学(QED)修正。在处理组态相互作用时, 根据组态相互作用的一般原理, 奇偶宇称的组态分别选为:  $3p^6 3d^9 4p$ ,  $3p^6 3d^9 4f$ ,  $3p^5 3d^{10} 4s$ ,  $3p^5 3d^{10} 4d$  和  $3p^6 3d^{10}$ ,  $3p^6 3d^9 4s$ ,  $3p^6 3d^9 4d$ ,  $3p^5 3d^{10} 4p$ ,  $3p^5 3d^{10} 4f$ 。将跃迁初末两态一并送入 MCDF<sup>[5,6]</sup> 程序包, 通过一次性自洽场迭代算出跃迁几率可统一地考虑轨道弛豫和正交归一性。详细的计算结果示于表 1, 表中第一列是跃迁谱线波长, 第二列是表征相对强度的  $gf$  因子, 第三列是高能级的组成。在叠加成谱图时, 以实验中谱仪能分辨的单根谱线的宽度作为跃迁线宽。

表 1 类镍金谱中强线的理论波长

Table 1 Theoretical wavelength of strong line in the Ni-like spectrum

$\lambda / \text{nm}$	$gf$	Upper level composition	$\lambda / \text{nm}$	$gf$	Upper level composition
0.4986	0.00003	$3d_{5/2} 4f_{5/2}$	0.3775	0.003	$3d_{3/2}, 5p_{3/2}$
0.4916	2.1842	$3d_{5/2} 4f_{7/2}$	0.3855	0.027	$3d_{5/2}, 5p_{1/2}$
0.4748	5.3052	$3d_{3/2} 4f_{5/2}$	0.3883	0.028	$3d_{5/2}, 5p_{3/2}$
0.3579	0.941	$3d_{3/2}, 5f_{5/2}$	0.3834	0.446	$3p_{1/2}, 4d_{3/2}$
0.3670	0.850	$3d_{3/2}, 5f_{7/2}$	0.4373	1.284	$3p_{3/2}, 4d_{5/2}$
0.3689	0.00004	$3d_{5/2}, 5f_{5/2}$	0.4425	0.0068	$3p_{3/2}, 4d_{3/2}$

对于跃迁阵  $3p^6 3d^9 4s - 3p^6 3d^8 4s 4f$ ,  $3p^5 3d^9 4s 4d$ ,  $3p^6 3d^8 4s 5p$ ,  $3p^6 3d^8 4s 5f$  等, 每种跃迁含有数百条跃迁线, 采用 UTA 模型中的 (1), (5), (6), (7) 式分别计算各个跃迁阵的特征参数: 平均波长  $\lambda$ , 半高全宽 FWHM, 跃迁强度  $W$  和谱线数  $L$ 。计算中所涉及到的组态平均能量, Slater 积分和径向积分  $R$ , 皆通过 Hartree-Fock 方法, 用 MCHF<sup>[7]</sup> 程序计算。详细的计算结果示于表 2, 表中第一列是 UTA, 第二列是平均波长, 第三列是轴波长, 第四列是半高全宽, 第五列是谱线条数。其中第二列的轴波长是作图时采用的平均波长, 是将计算的平均波长结合实验测量值<sup>[8]</sup>进行了修正之后的结果, 修正的方法主要是根据所采用的计算方法与实验结果的公认误差(如 MCDF 的误差

约为 0.005 nm) 对波长进行适当平移。为便于与实验比较和叠加成谱图, 仍选用高斯分布线型函数, 对于由 (6) 式计算的各个 UTA 中的跃迁强度  $W$  的值(相对强度)和单根谱线的强度, 结合实验谱形进行了适当的提高或降低, 其依据是诸如双电子复合、组态相消等一些复杂过程导致了一些谱线增强或减弱<sup>[9]</sup>。最后得出的理论计算谱图示于图 1 的上半部分。

由图 1 可见, 考虑了线谱修正后的理论计算谱图与实验谱图符合得更好, 这表明如果跃迁阵中含有的谱线数太少, UTA 模型确实不太适合, 而用基于线谱的相对论从头计算方法予以修正是合理的, 必须的。此外, 考虑跃迁阵间的相消后, 理论计算结果可望得到更进一步的改善。

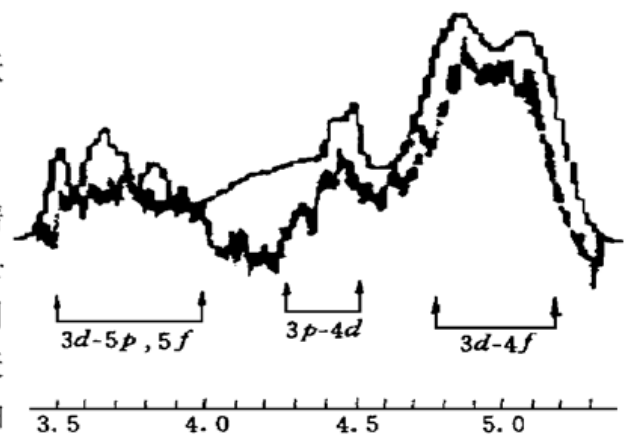
图 1 类镍金( $\text{Au}^{51+}$ )理论谱(上面)与实验谱<sup>[1]</sup>(下面)的比较Fig. 1 Comparison between experimental<sup>[1]</sup>(below) and theoretical (above) spectrum of  $\text{Au}^{51+}$

表 2 类镍金 UTA 的特征参数计算结果

Table 2 Results of the calculations of the characteristic parameters of UTA for Ni-like Au

Parameters UTA	Mean wavelength $\lambda / \text{nm}$	Axis wavelength $/ \text{nm}$	FWHM $/ \text{nm}$	Number of line
$3p^6 3d^9 4s-3p^6 3d^8 4s 4f$	0.476	0.473	0.0171	310
$3p^6 3d^9 4s-3p^5 3d^9 4s 4d$	0.447	0.434	0.0562	455
$3p^6 3d^9 4s-3p^6 3d^8 4s 5p$	0.377	0.372	0.0097	310
$3p^6 3d^9 4s-3p^6 3d^8 4s 5f$	0.359	0.359	0.0059	223

## 参 考 文 献

- 1 P. G. Burkhalter, C. M. Dozier, D. J. Nagel *et al.*. X-ray spectra from exploded-wire plasmas. *Phys. Rev. A*, 1977, **15**(2): 700~ 717
- 2 Yang Xiangdong, Liu Xiaohong, Cheng Xinlu *et al.*. Theroretical calculation of spectrum of M- band for Au using UTA model. *High Power Laser and Particle Beams* (强激光与粒子束), 1998, **10**(3): 437~ 440 (in Chinese)
- 3 C. Bauche-Arnoult, J. Bauche, M. Lkapish. Variance of the distributions of energy levels and of the transition arrays in atomic spectra. *J. Opt. Soc. Am.*, 1979, **20**(6): 2424~ 2439
- 4 J. Bauche, C. Bauche-Arnout. Level and line statistics in atomic spectra. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, 1987, **20**(8): 1659~ 1677
- 5 I. P. Grant, B. J. McKenzie, P. H. Norrington. An atomic multiconfiguration Dirac-Fock package. *Comput. Phys. Commun.*, 1980, **21**: 207~ 232
- 6 I. P. Grant. Relativistic Atomic Structure Calculation. *Methods in Comput. Chem.*, New York: Plenum Press, 1987. V2, 1~ 71
- 7 C. Froese-Fischer. A general multi-configuration Hartree-Fock program. *Comput. Phys. Commun.*, 1978, **14**: 145~ 154
- 8 M. Busquet, D. Pain, J. Bauche *et al.*. Study of X-ray spectrum of laser-produced gold plasmas. *Physica Scripta*, 1985, **31**(2): 137~ 148
- 9 C. Bauche-Arnoult, J. Bauche, E. Luc-Koenig *et al.*. Dielectronic recombination process in laser-produced tantalum plasmas. *Phys. Rev. A*, 1989, **39**(3): 1053~ 1065

## Theoretical Calculation of the Line and Band Spectrum for Ni-like Ion of Au in the 0.3~ 0.6 nm Range

Cheng Xinlu Yang Xiangdong Liu Xiaohong

(Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610065)

Wang Hongbin Zheng Zhijian Li Sanwei

(Laboratory for Laser Fusion, Institute of Nuclear Physics and Chemistry, Chengdu 610003)

**Abstract** Unresolved transition array model and MCDF method are applied to calculate in detail the line and band spectrum for Ni-like ion of Au in the 0.3~ 0.6 nm range. The better agreement between theoretical calculation and experimental measurement compared with the results of the calculation only using the UTA model indicates that it is reasonable and necessary to correct the UTA model using MCDF method when the transition array contains very few number of lines.

**Key words** Ni-like ion for Au, UTA model, MCDF