

文章编号: 0253-2239(2006)11-1755-6

等离子体效应对碳的类氢离子能级的影响*

张 丽^{1,2} 李向东¹

(¹ 中国科学院上海光学精密机械研究所, 强场激光物理国家重点实验室, 上海 201800)
(² 中国科学院研究生院, 北京 100049)

摘要: 通过在狄拉克方程中考虑德拜-休克尔(Debye-Hückel)屏蔽势,研究了类氢离子 C^{5+} 低能级能量 $1s(^2S_{1/2})$, $2s(^2S_{1/2})$, $2p(^2P_{1/2}$ 和 $^2P_{3/2})$ 随等离子体电子温度及电子密度的变化规律,计算得到类氢离子 C^{5+} 能级能量及能级电离势随等离子体环境的变化关系。同时,拟合得到了基于德拜-休克尔屏蔽势下相当好的束缚态能级能量随等离子体环境变化的解析公式,利用该公式得到了类氢离子 C^{5+} 相应各能级发生压致电离的临界电子密度,其结果与其它文献比有很好的可比性。结果表明:束缚态能级能量随等离子体电子温度的升高而减小,随等离子体电子密度的增大而增大。能级能量百分漂移量的对数值与等离子体电子密度的对数值以及等离子体电子温度的对数值之间均呈现出近似线性关系。对计算等离子体电离态分布及光谱模拟具有一定的意义。

关键词: 等离子体光谱; 原子结构; 德拜-休克尔势; 类氢离子

中图分类号: O563.3 文献标识码: A

Influence of Plasma Effect on Energy Level of H-Like Ion C^{5+}

Zhang Li^{1,2} Li Xiangdong¹

(¹ State Key Laboratory of High Field Laser Physics, Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, the Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800)
(² Graduate School of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049)

Abstract: Considering the Debye-Hückel screening potential into Dirac equation, the plasma electron temperature and density effects on the energies of bound state $1s(^2S_{1/2})$, $2s(^2S_{1/2})$, $2p(^2P_{1/2}$ and $^2P_{3/2})$ for H-like ion C^{5+} are studied. A fitted formula, which estimates the bound state energies and ionization potential of H-like ion C^{5+} under different plasma conditions, is obtained. With this formula, the critical electron density of pressure ionization for bound levels is calculated, and agrees well with the data in previous literature. The results show that the energies of bound states increase with the increase of plasma electron densities or decrease of plasma electron temperatures. The relation between the logarithm of percentage shift of energy and the logarithm of plasma electron density or temperature is approximately linear. The results are useful in calculating the plasma ionization state distributions and plasma spectral simulations.

Key words: plasma spectra; atomic structure; Debye-Hückel potential; H-like ion

1 引 言

等离子体温度及密度效应对原子结构的影响一直是等离子体光谱模拟及光谱诊断的重要研究课题之一^[1]。随着近几年光谱诊断方法在惯性约束及磁约束核聚变研究中的重要应用,对原子结构随等离子体环境变化的研究正受到广泛重视^[2~5]。

处于等离子体中的原子或离子由于受到来自等离子体环境的扰动,使得束缚电子所受的库仑(Coulomb)势与其处于真空条件下不同,从而影响其束缚态原子结构(如能级能量、跃迁概率以及存在的束缚态最大主量子数等)。这些变化将使得等离子体辐射携带大量等离子体环境特征信息,从而使

* 国家自然科学基金(10274089)资助课题。

作者简介: 张 丽(1981~),安徽人,中国科学院上海光学精密机械研究所硕士研究生,主要从事原子光谱的研究。

E-mail: zhangli@mail.siom.ac.cn

收稿日期: 2005-09-16; 收到修改稿日期: 2006-03-01

得等离子体辐射光谱成为等离子体诊断的重要方法之一^[6~9]。

研究等离子体环境对原子结构的影响,其关键在于能够找到适当的方法描述处于等离子体环境中辐射离子周围的屏蔽势,目前对此屏蔽势的计算主要基于两种等离子体模型。其一是众所周知的线性化德拜-休克尔(Debye-Hückel)模型^[10],其二是离子球模型^[11,12]。线性化的德拜-休克尔模型是基于弱耦合等离子体假设而导出的,因此一般而言该模型适用于弱耦合等离子体。尽管如此,由于德拜(Debye)模型可直接提供一个解析的屏蔽势函数而使得计算过程变得比较简单,因此,对于近似和定性研究原子结构随等离子体环境的变化规律,德拜模型在较宽的等离子体范围内可提供相当实用的结果。离子球模型是目前研究中、强耦合等离子体中原子结构的较好方法,由于该模型可以提供等离子体中各带电粒子间的自洽分布,因此,理论上讲离子球模型更接近于物理真实情况,而且近来关于光谱红移的实验^[13]也表明基于离子球模型的计算结果具有一定的可靠性,但由于离子球模型考虑各种离子间的自洽耦合因而其计算过程变得十分复杂。因此,基于德拜模型和离子球模型各自的特点,目前这两种方法都有着一定的应用。

束缚态离子能级能量随等离子体环境的变化在等离子体光谱模拟中是一项重要的工作。等离子体中,束缚态能级向连续谱方向偏移将影响各能级的激发和电离势,这种变化影响离子在等离子体中的电离态分布,从而导致其能级结构及辐射光谱与真空中不同。本文利用德拜-休克尔屏蔽势,通过自洽求解狄拉克方程,得到类氢离子 C^{5+} 能级随等离子体电子温度及电子密度的变化规律,并拟合得到了基于德拜-休克尔屏蔽势下相当好的束缚态能级随等离子体环境变化的解析公式,利用该公式的外推得到了类氢离子 C^{5+} 各能级发生压致电离的临界电子密度,与已有的结果比较,具有较好的可用性。本

文对等离子体环境参量选取范围为:电子密度 $10^{20} \sim 10^{24} \text{ cm}^{-3}$,电子温度 $1000 \sim 3500 \text{ eV}$ 。选择较高电子温度,是为了保证等离子体耦合强度不是很高,从而德拜等离子体条件可近似成立,同时,具有此温度范围的等离子体目前在实验室很容易实现,该温度范围也是目前惯性约束聚变研究所关心的。

2 理 论

线性化的德拜-休克尔理论所提供的屏蔽势的解析表达式为

$$\phi_D(r) = \frac{ze}{r} \exp(-|\kappa_D|r) = \frac{ze}{r} \xi_D(r), \quad (1)$$

其中

$$|\kappa_D^2| = 4\pi e^2 \beta_e N_e, \quad (2)$$

上式使用了忽略离子项的近似方法,其具体模型可参考文献[1,3]。 $|\kappa_D|$ 为德拜-休克尔屏蔽波矢,表示为

$$\lambda_D = |\kappa_D^{-1}|, \quad (3)$$

其中 N_e 为等离子体平均电子密度; $\beta_e = 1/(k_B T_e)$, k_B 为玻尔兹曼(Boltzmann)常量, T_e 为电子温度。

将德拜-休克尔屏蔽势代入狄拉克方程,自洽的求解狄拉克方程可得到各能级波函数,从而得到不同原子参量的值。对于壳层 i , N 电子体系的狄拉克方程可表示为

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N |\hat{r}_i - \hat{r}_j|^{-1}, \quad (4)$$

其中

$$\hat{H}_i = c \sum_{i=1}^3 \alpha_i \hat{p}_i + (\beta - 1)c^2 + U_i(r), \quad (5)$$

为单电子的能量贡献。在真空条件下, $U_i(r)$ 为原子核吸引势能,在等离子体条件下 $U_i(r)$ 为屏蔽势能,本文使用德拜-休克尔屏蔽势进行等离子体效应对原子结构影响的研究,因此 $U_i(r)$ 将使用德拜-休克尔屏蔽势代入。对于每个单电子波函数,狄拉克方程可表达为如下两式:

$$\begin{cases} \left(\frac{d}{dr} + \frac{\kappa_i}{r} \right) P_{n_i, \kappa_i}(r) - \left[2c - \frac{\epsilon_i}{c} + \frac{Y_i(r)}{cr} \right] Q_{n_i, \kappa_i}(r) = -\frac{\chi_i^{(P)}(r)}{r}, \\ \left(\frac{d}{dr} - \frac{\kappa_i}{r} \right) Q_{n_i, \kappa_i}(r) + \left[-\frac{\epsilon_i}{c} + \frac{Y_i(r)}{cr} \right] P_{n_i, \kappa_i}(r) = \frac{\chi_i^{(Q)}(r)}{r}, \end{cases} \quad (6)$$

其中 $Y_i(r)$ 为势能函数; n_i 和 κ_i 分别为主量子数和角量子数; P_{n_i, κ_i} 和 Q_{n_i, κ_i} 分别为束缚态能级波函数的主要部分和次要部分,其边界条件满足

$$P_{n_i, \kappa_i}(r \rightarrow 0) \rightarrow 0, \quad P_{n_i, \kappa_i}(r \rightarrow \infty) = 0, \quad Q_{n_i, \kappa_i}(r \rightarrow 0) \rightarrow 0, \quad Q_{n_i, \kappa_i}(r \rightarrow \infty) = 0, \quad (7)$$

(6)式中 $\chi_i^{(P)}(r)$ 和 $\chi_i^{(Q)}(r)$ 为交换势能,可表示为

$$\chi_i^{[Q]}(r) = \frac{r}{cq_{av}(i)} \sum_{j \neq i} \delta_{\kappa_i \kappa_j} \epsilon_{ij} \left[\frac{Q_{n_j \kappa_j}}{P_{n_j \kappa_j}} \right] (r), \quad (8)$$

其中 $q_{av}(i)$ 为轨道平均占有数, ϵ_{ij} 为拉格朗日乘子。

方程(6)在 $\chi_i^P(r) = \chi_i^Q(r) = 0$ 时波函数有解析解,以此解析解为试探解,通过(6)式和(8)式的自洽迭代,可最终获得自洽收敛的单电子波函数。对于多电子体系,通过对波函数的反对称化(费米相关),考虑组态相互作用,可得到能级波函数及各种原子结构参量。同时,本文的计算还考虑了自能和真空极

化修正(QED效应),由于本文仅考虑单电子类氢体系,因此布雷特修正为零。

3 结果与分析

本文所考虑的等离子体参量范围为电子密度 $10^{20} \sim 10^{24} \text{ cm}^{-3}$, 电子温度 $1000 \sim 3500 \text{ eV}$ 。采用德拜-休克尔屏蔽势求解狄拉克方程,得到类氢离子 C^{5+} 各能级能量随等离子体电子密度及电子温度的变化关系,如图 1 所示。

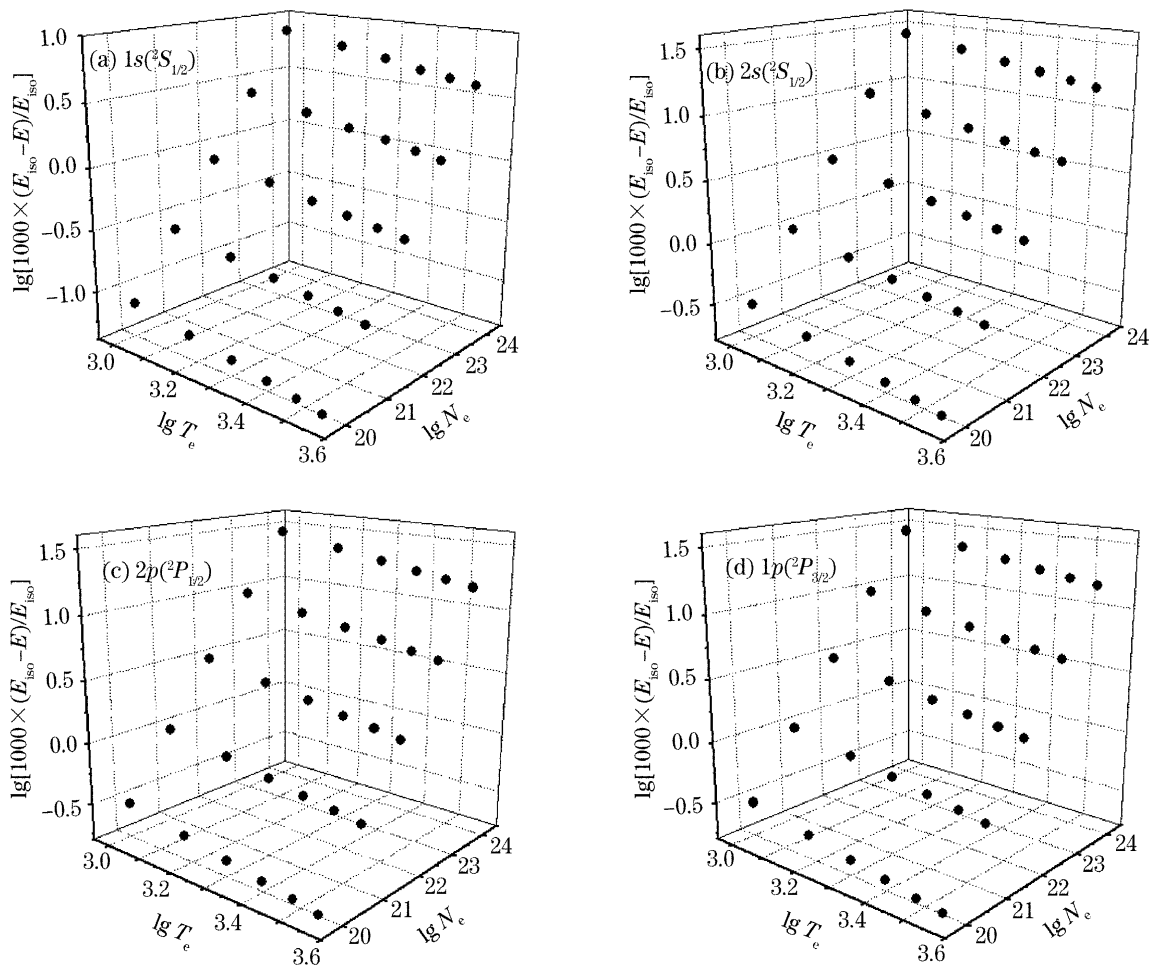


图 1 能量百分偏移量的对数值与等离子体电子密度的对数值及等离子体电子温度的对数值之间的关系

Fig. 1 Logarithm of percentage shift of energy against lograithm of plasma electron density and temperature

图 1 给出了各能级能量百分偏移量对数值与等离子体电子密度及电子温度对数值的关系。

其中符号 E_{iso} 表示孤立(或真空)条件下的对应能级能量;符号 E 表示处于等离子体中时类氢各束缚态能级的能量。

由图 1 可知,能量百分偏移量的对数值与等离子体电子密度的对数值及电子温度的对数值都呈现出很好的近似线性关系,也就是说在德拜-休克尔屏

蔽势的假设下,由图 1 坐标轴所示的物理量其关系近似落在一个平面上。对于给定的电子密度,能量百分偏移量的对数值与等离子体电子温度的对数值呈简单的近似线性关系,对其进行线性拟合,其关系式可表示为如下形式:

$$Z = A' + B' \cdot X, \quad (9)$$

或由图 1 坐标轴所示物理量,可写为

$$E = E_{iso} (1 - 10^{A'-2} \cdot T_e^{B'}) \text{ (eV)}, \quad (10)$$

其中 A' 和 B' 为拟合参量,与给定的等离子体电子密度及能级类型有关。表 1 给出了参量 A' 和 B' 的不同取值,其中, A' 和 B' 的最大拟合误差分别为

0.00599 和 0.0018。这种误差所导致的拟合公式所得能量与自洽的方法所得能量的最大偏移量为 0.066 eV。

表 1 不同等离子体电子密度和不同能级下,参量 A' 和 B' 的取值

Table 1 Values of the parameters A' and B' with different plasma density and energy levels

N_e/cm^{-3}	A'				B'			
	$1s(^2S_{1/2})$	$2s(^2S_{1/2})$	$2p(^2P_{1/2})$	$2p(^2P_{3/2})$	$1s(^2S_{1/2})$	$2s(^2S_{1/2})$	$2p(^2P_{1/2})$	$2p(^2P_{3/2})$
10^{20}	0.37465	0.97535	0.97562	0.97583	-0.4999	-0.49958	-0.49965	-0.49965
10^{21}	0.87371	1.47162	1.47251	1.47272	-0.49967	-0.49868	-0.4989	-0.4989
10^{22}	1.37076	1.95986	1.96271	1.96291	-0.49896	-0.49585	-0.49654	-0.49654
10^{23}	1.86147	2.42308	2.43201	2.43219	-0.49672	-0.48701	-0.48916	-0.48915
10^{24}	2.33245	2.80974	2.83686	2.83698	-0.48975	-0.45982	-0.46631	-0.46629

类似地,对于给定的电子温度,能量百分偏移量的对数值与等离子体电子密度的对数值也呈简单的线性关系。其拟合关系式可表示为如下形式:

$$A = A'' + B'' \cdot Y, \quad (11)$$

或由图 1 坐标轴物理量,可写为

$$E = E_{\text{iso}}(1 - 10^{A''-2} \cdot N_e^{B''}), \quad (\text{eV}) \quad (12)$$

这里 A'' 和 B'' 为依赖于等离子体电子温度和能级类型的拟合参量。表 2 给出了参量 A'' 和 B'' 的不同取值,其中 A'' 和 B'' 的最大拟合误差分别为 0.0792 和 0.00359。这种误差导致的拟合公式所得能量与自洽的方法所得能量的最大偏移量为 0.9304 eV。

表 2 不同等离子体电子温度和不同能级下,参量 A'' 和 B'' 的取值

Table 2 Values of the parameters A'' and B'' with different plasma temperature and energy levels

T_e/eV	A''				B''			
	$1s(^2S_{1/2})$	$2s(^2S_{1/2})$	$2p(^2P_{1/2})$	$2p(^2P_{3/2})$	$1s(^2S_{1/2})$	$2s(^2S_{1/2})$	$2p(^2P_{1/2})$	$2p(^2P_{3/2})$
1000	-11.06819	-10.29905	-10.33572	-10.33539	0.49726	0.48919	0.49096	0.49095
1500	-11.16657	-10.42754	-10.45771	-10.4574	0.49776	0.49114	0.49260	0.49259
2000	-11.23521	-10.51424	-10.54048	-10.54019	0.49806	0.49231	0.49358	0.49357
2500	-11.28789	-10.57927	-10.60282	-10.60253	0.49826	0.49311	0.49425	0.49425
3000	-11.33060	-10.63113	-10.65268	-10.6524	0.49841	0.49371	0.49475	0.49474
3500	-11.36650	-10.67416	-10.69414	-10.69387	0.49853	0.49417	0.49513	0.49513

显然(10)式和(12)式分别给出了等离子体中类氢离子 C^{5+} 能级能量与等离子体电子温度及电子密度的关系,虽然两式形式相同,但其系数却显然不同。对于参量 B' 和 B'' 其符号相反,这就是说束缚态能级能量随等离子体电子温度及电子密度的变化趋势是相反的,即,束缚态能级能量随等离子体电子温度的升高而减小,而随等离子体电子密度的增大而增大。(10)式在温度趋于无穷大时,能级能量与孤立条件下的能量相等,这显然是由于德拜-休克尔屏蔽势在温度趋于无穷大时接近原子核势所造成的。对于温度趋于无穷小时(10)式的行为显然是不正确的,这是因为温度很低时弱耦合或近似弱耦合等离子体条件不能成立,同时德拜-休克尔理论所使用的玻尔兹曼分布也不成立。对于本文所考虑的等离子体电子温度及电子密度参量范围内,在平均电离度为 5 时(即碳的平均电离态为类氢),最大等离子体耦合系数为

0.33。因此对于本文所考虑的等离子体电子温度及电子密度参量范围,在很大的平均电离度范围内都能满足弱耦合或近似弱耦合等离子体条件。(12)式中,电子密度趋于零将使得 $E = E_{\text{iso}}$,即在电子密度为零时能级能量和孤立条件下的能量相同,这显然在物理上是正确的。值得提出的是,当电子密度增大时,束缚态能级能量 E 将在一个有限的电子密度下变为零,这就意味着该束缚态能级将过渡为连续态能级,该现象即称之为压致电离,而此时对应的等离子体电子密度即为压致电离临界密度,压致电离现象将决定等离子体中离子束缚态的最大主量子数,因此对于离子的能级结构及辐射十分重要。由(12)式,压致电离临界电子密度可表示为

$$N'_e = 10^{(-A''+2)/B''}, \quad (\text{cm}^{-3}) \quad (13)$$

在一定的电子温度下,对于给定能级,其压致电离临界电子密度值由(13)式求出,表 3 给出了不同能级

和不同电子温度下的压致电离临界电子密度值。

表 3 不同电子温度和不同能级下的压致电离临界电子密度值

Table 3 Values of the critical electron density of pressure ionization with different plasma temperature and energy levels ($n=1,2$)

T_e/eV	N'_e/cm^{-3}			
	$1s(2S_{1/2})$ /10 ²⁶	$2s(2S_{1/2})$ /10 ²⁵	$2p(2P_{1/2})$ /10 ²⁵	$2p(2P_{3/2})$ /10 ²⁵
1000	1.907	1.386	1.336	1.335
1500	2.829	2.011	1.949	1.948
2000	3.746	2.627	2.554	2.553
2500	4.662	3.236	3.154	3.150
3000	5.575	3.838	3.749	3.748
3500	6.484	4.440	4.345	4.340

由于压致电离特性对于等离子体辐射相当重要,因此也有一些工作基于不同的等离子体屏蔽模型或使用不同的带电粒子统计分布规律,研究了压致电离下离子最大主量子数的近似估算方法,其中,文献[1]给出的求解最大主量子数 N_{\max} 的解析表达式,形式如下:

$$N_{\max} = \sqrt{\frac{z}{2|\mathbf{k}_{\text{DD}}|}}, \quad (14)$$

这里 \mathbf{k}_{DD} 为考虑简并后的德拜-休克尔屏蔽波矢,其模的平方为

$$|\mathbf{k}|_{\text{DD}}^2 = \frac{4\pi N_e e^2}{\sqrt{T_e^2 + T_F^2}}, \quad (15)$$

其中 T_F 为费米温度,其表达式为

$$|\mathbf{k}|_{\text{b}} T_F = (3\pi^2 a_0^3 N_e)^{2/3} R_y, \quad (16)$$

由(14)式、(15)式、(16)式可得到类氢离子 C^{5+} 能级 ($n=1,2$ 时)的压致电离势随电子温度的变化,如表 4 所示,显然方程(14)没有考虑束缚态精细结构,而本文所得到的拟合公式则考虑了束缚态精细结构。

表 4 不同电子温度下,能级 ($n=1,2$ 时)的压致电离临界电子密度值

Table 4 Values of the critical electron density of pressure ionization with different plasma temperature and energy level ($n=1,2$)

T_e/eV	$n=1$	$n=2$
	$N'_e/10^{26} \text{ cm}^{-3}$	$N'_e/10^{25} \text{ cm}^{-3}$
1000	1.776	1.110
1500	2.664	1.665
2000	3.552	2.220
2500	4.440	2.775
3000	5.328	3.330
3500	6.216	3.885

对比表 3 和表 4,结果表明两者具有很好的可

比性。因此本文提供了可用于估算能级能量和压致电离临界密度的可用方法,本文所得公式对于中弱耦合等离子体光谱研究具有一定的适用性。

4 结 论

本文采用德拜-休克尔模型,将等离子体对原子结构的影响用解析形式的屏蔽势来描述,通过自洽的求解狄拉克方程,研究了类氢离子 C^{5+} 能级 ($n=1,2$ 时)随等离子体电子温度及电子密度的变化规律。结果表明,处于等离子体中束缚态能级的能量较处于孤立状态时的能级能量增加了;对于同一电子温度,能级能量随电子密度的增大而增大;对于同一电子密度,能级能量随电子温度的升高而减小。在电子密度和电子温度与能级能量的变化关系上,束缚态能级的能量对电子密度有更强的敏感性,这三者之间的关系经拟合可表示成很好的解析公式。最后利用该公式的外推得到了类氢离子 C^{5+} 束缚态能级压致电离临界电子密度值,并与其它文献所得结果进行比较,具有很好的可比性。利用本文所得公式不仅可以得到能级压致电离的临界电子密度,还可以得到处于某一等离子体环境下的能级能量。因此,本文对于等离子体光谱模拟及诊断具有一定的价值。

参 考 文 献

- 1 Michael S. Murillo, Jon C. Weisheit. Dense plasmas, screened interactions, and atomic ionization [J]. *Phys. Rep.*, 1998, **302**(1): 1~65
- 2 Jin-qiao Pang, Guo-xing Han, Ze-qing Wu *et al.*. Analytic formulae of atomic energy levels in high-temperature low-density plasmas[J]. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 2002, **35**(9): 2117~2123
- 3 B. Saha, P. K. Mukherjee, D. Bielińska-Waż *et al.*. Time-dependent perturbation calculations for transition properties of two-electron atoms under Debye plasma [J]. *JQSRT*, 2003, **78**(1): 131~137
- 4 F. H. Ruano, J. G. Rubiano. A method to obtain approximate solutions to the Schrödinger equation[J]. *JQSRT*, 2004, **3~4** (83): 641~654
- 5 G. Massacrier, J. Dubau. A theoretical approach to N-electron ionic structure under dense plasma conditions: I. Blue and red shift[J]. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 1990, **23**(13): 2459S~2469S
- 6 M. Nantel, G. Ma, S. Gu *et al.*. Pressure ionization and line merging in strongly coupled plasmas produced by 100-fs laser pulses[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1998, **80**(20): 4442~4445
- 7 Xu Wei, Wang Baonian. Spectroscopic method for measurement of plasma ion temperature and rotation velocity[J]. *Acta Optica Sinica*, 2003, **23**(9): 1115~1118 (in Chinese)
徐 伟,万宝年. 光谱法测量等离子体离子温度和旋转速度 [J]. *光学学报*, 2003, **23**(9): 1115~1119
- 8 Cheng Ke, Zhu Zhiyan, Zhu Zhenghe *et al.*. Ionic structure and

- spectrum analysis of Au^{47+} and Au^{53+} in Au laser plasma[J]. *Acta Optica Sinica*, 2005, **25**(12): 1586~1589 (in Chinese)
程 科, 朱志艳, 朱正和 等. 激光金等离子体中 Au^{47+} 、 Au^{53+} 的离子结构和光谱分析[J]. 光学学报, 2005, **25**(12): 1586~1589
- 9 Yang Tianli, Tan Mingliang, Jiang Gang *et al.*. Studies on M1 transitions for Be-like ions related to X-ray[J]. *Chin. J. Lasers*, 2002, **29**(1): 156~160 (in Chinese)
杨天丽, 谭明亮. 类铍离子 ($Z=21\sim 92$) 的 M_1 跃迁的 X 射线激光光谱的理论研究[J]. 中国激光, 2002, **29**(1): 156~160
- 10 Hans R. Griem. *Principles of Plasma Spectroscopy* [M]. Cambridge: Cambridge University Press, 1997. 1~362
- 11 M. Koenig, P. Malnault, H. Nguyen. Atomic structure and line broadening of He-like ions in hot and dense plasmas[J]. *Phys. Rev. A*, 1988, **38**(4): 2089~2098
- 12 Hoe Nguyen, Michel Koenig, Djamel Benredjem *et al.*. Atomic structure and polarization line shift in dense and hot plasmas[J]. *Phys. Rev. A*, 1986, **33**(2): 1279~1290
- 13 A. Saemann, K. Eidmann, I. E. Golovkin *et al.*. Isochoric heating of solid aluminum by ultrashort laser pulses focused on a tamped target[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1999, **82**(24): 4843~4846