

高剥离态离子谱学研究*

周裕清 张保汉 杨国洪 雷安乐

(核物理与化学研究所 成都 610003)

摘要 利用“星光”I激光装置,聚焦激光束于真空室内平面箔靶,产生高离化态等离子体,分别用四个不同晶格间距的平晶摄谱仪和1m掠入射光栅谱仪测量了 ^{22}Ti 、 ^{26}Fe 、 ^{28}Ni 、 ^{29}Cu 、 ^{30}Zn 、 ^{32}Ge 等中Z元素及 ^{72}Hf 、 ^{73}Ta 、 ^{74}W 、 ^{75}Re 等高Z元素的高离化态离子发射谱,其波长为3.6~300Å分别用组态相互作用的Hartree-Fock-Relativistic(HFR)方法和多组态的Dirac-Fock方法分析辨认发射谱中的线跃迁,用自旋轨道劈裂的未分辨跃迁组理论分析发射谱中的带结构,归类了六个中Z元素类钠直至类氦离子的数百条跃迁线,以及四个高Z元素的类钴、类镍、类铜直至类镅离子的线跃迁和跃迁带。

关键词 中高Z元素, 高离化态, 离子谱学, 平晶谱仪, 光栅谱仪。

1 引言

高剥离态离子谱学是研究原子结构、高温等离子体中的原子物理过程及等离子体诊断技术的基础,是当前原子分子物理学研究的前沿,在天体物理、X光激光、惯性约束与磁约束聚变等多种研究领域有重要的应用价值。近二十年来,随着各种先进的多电荷离子源、高功率激光器、托卡马克装置以及同步辐射装置等的发展,高剥离态离子谱学研究工作进展很快,B. C. Fawcett^[1]、B. Edlen^[2]和I. Martinson^[3]曾做过综合的评述。R. L. Kelly^[4]编辑了从氢到氦的2000Å以下的离子光谱波长表,是目前最系统的离子谱数据。俄罗斯V. A. Boiko等人^[5]也曾对低中Z元素的离子谱进行过较系统的研究,但只公开发表了少部分数据。至今,只有低Z元素的各种电离级的离子谱数据比较完整,中Z元素不够完全,高Z元素的离子谱数据还非常缺乏。所以,目前研究的重点是高Z元素的高剥离态离子谱。

2 实验技术

实验是在我所“星光”I激光装置上进行。聚焦激光束于真空室内平面固体箔靶,产生待测元素的高离化态等离子体。适当选择激

光参数,使得对中Z元素类氦离子丰度最大,对高Z元素类镍离子丰度最大。实验中,用针孔相机测量焦斑直径,用条纹相机监测激光脉冲宽度,能量卡计监测每发的激光能量。对六个铁周期元素,实测激光参数为:能量1~10J,脉冲宽度400~800ps,焦斑直径60~80μm,靶面的激光功率密度为 $2 \times 10^{12} \sim 5 \times 10^{13} \text{W/cm}^2$,激光波长1.06μm。对四个高Z元素,用二倍频激光,波长0.53μm,实测激光参数为:能量18~24J,脉冲宽度600~900ps,焦斑直径100~120μm,靶面功率密度 $0.8 \sim 2 \times 10^{14} \text{W/cm}^2$ 。靶材料除镅以外均为厚度10~25μm的金属箔,镅靶厚度为2000Å的薄膜,被蒸发在1500Å的C₈H₈衬底上。各种材料的纯度都在99.99%以上。为了进行谱线的波长标定,还用了各待测元素和镁、铝、硅等轻元素的复合靶。

激光等离子体所发射的3.5~40Å范围软X射线谱可用四个不同晶格间距的平晶摄谱仪分段测量。使用的四种晶体是:PET(2d=8.742Å)、ADP(2d=10.64Å)、TAP(2d=25.78Å和OHM(2d=63.54Å)。记录胶片用Kodak AA5.40~300Å范围的离子发射谱用一1m掠入射(2°)凹面光栅谱仪记录。金复制光栅刻线为12001/mm,闪耀角2°15',狭缝宽

* 国家自然科学基金委资助课题

度 $25\mu\text{m}$, 记录胶片为 kodak SRW.

记录的谱片经微密度计扫描后形成黑度位置的数据文件, 然后转到微机上进行数据处理. 编制了一个 Fortran 程序包, 其中包括谱的平滑、剥谱、寻峰、分别对应晶体谱仪和光栅谱仪的谱线波长的解析计算和多项式拟合、峰的平均波长计算、峰面积(谱线强度)计算等数据处理子程序. 为进行波长标定, 首先在复合靶的扫描谱中, 用镁、铝或硅的类氢、类氦线为参考, 初步定出各待测元素离子谱中若干强线的位置和波长, 然后在纯净元素的扫描谱中, 以这些强线的已知精确波长数据为参考进行全谱的波长计算, 为提高波长计算的精度, 采用解析法和多项式拟合相合的方法. 在四个晶体谱仪测量范围内, 波长的实验误差为 $\pm 0.002 \sim 0.01 \text{ \AA}$, 在光栅谱仪测量范围, 实验误差为 $\pm 0.05 \text{ \AA}$.

为了对胶片的光响应进行校正, 在 K-400 加速器上, 用质子激发荧光的单能 X 射线对胶片的灵敏度进行了绝对标定. 其 X 射线能量分别为: 183eV (B-K 线)、 282eV (C-K 线)、 452eV (Ti-L 线)、 574eV (Cr-L 线)、 704eV (Fe-L 线)、 923eV (Cu-L 线)、 1487eV (Al-L 线)、 2040eV (Zr-L 线) 和 2980eV (Ag-L 线). 由此得出底片黑密度的标定曲线, 用以对扫描谱的相对强度进行校正. 此外, 还对谱仪 Be 窗的吸收进行了校正.

3 理论模型

众所周知, 元素越重, 离子发射谱越复杂, 特别是对于激光等离子体, 由于多种电荷态离子并存, 谱线就更加复杂, 谱的分析相当困难. 如前所述, 对于重元素的高剥离态离子谱, 目前已知的数据非常有限, 所以对于实验谱的分析辨认在很大程度上必须依靠理论计算, 因而, 选择适当的理论计算模型是非常重要的. 对于铁周期元素, 相对论效应的响应已不可忽略, 我们主要选用 Cowan 的 HFR 方法进行计算. 随着元素原子序数的增加, 相对

论效应和量子电动力学修正以及组态相互作用的影响越来越明显. 对铪、钽、钨、铼等高 Z 元素的分析, 应用多组态的 Dirac-Fock 方法更有效.

由于在高 Z 元素激光等离子体中, 各种离化态并存, 众多跃迁组相互交替和重叠, 再加上等离子体各种加宽效应和仪器有限分辨的影响, 使一组组密集的线群重叠在一起形成半连续的带结构, 实验上已不可能将它们逐一分开, 辨认出单独的线跃迁. 此时, 线谱的计算方法已不适合, C. Bauche-Arnoult 提出的未分辨跃迁组的理论模型更有效地解决了此问题. 这实际是一种统计的方法, 即把一个不可分辨的跃迁带用跃迁能的权重强度分布来描述, 第 n 个分量的通式为

$$\mu_n = \sum_{a,b} [\langle b|H|b\rangle - \langle a|H|a\rangle]^n W_{ab}/W \quad (1)$$

其中, $a \in A, b \in B$ 分别是跃迁组始态和终态, 求和是对所有的本征态求和.

$$W_{ab} = |\langle a|Z|b\rangle|^2 \quad (2)$$

$$\text{总权重} \quad W = \sum_{a,b} W_{ab} \quad (3)$$

两处主要的特征量是分布的平均波数 T_{av} 和方差 σ^2 , 按高斯分布跃迁带的半最大全宽度(简称半宽度) $\text{FWHM} = 2.355\sigma$

$$T_{av} = \mu_1 = [E_{av}(B) - E_{av}(A)] - \delta E(B \rightarrow A) \quad (4)$$

$$\sigma^2 = \mu_2 - (\mu_1)^2 \quad (5)$$

其中, $E_{av}(A)$ 和 $E_{av}(B)$ 分别是组态 A, B 的平均波数. σ^2 和 $\delta(E)$ 的数值计算公式可以用 Racah 代数和二次量子化方法推导出, 它们可表示为直接库仑积分 F^k 、交换积分 G^k 和自旋轨道积分 ξ 的线性组合. Bauche-Arnoult^[5] 详细给出了不同类型跃迁组的 σ^2 和 $\delta(E)$ 的分析表达式.

由于 F^k 和 G^k 随 $(Z-S)$ 线性变化 (S 为屏蔽因子), 而 ξ 近似地随 $(Z-S)^4$ 变化, 所以对高 Z 元素, 自旋轨道积分起决定作用, 因而一个 nl 相同的跃迁组又裂成若干个纯 jj 耦合的子跃迁组, 形成彼此分开的孤立峰.

对四个高 Z 元素的类铜、类锌、类镓和类锗离子谱,我们用 Bauche-Arnoult (1985)^[5] 的 Spin-Orbit-Split Arrays (SOSA)理论计算公式计算了 $3d-nf(n=5,6)$ 类型的 jj' 跃迁带的平均波长和半宽度,用以分析解释了出现在各元素 $3.6\sim 5\text{ \AA}$ 范围离子谱中的一系列孤立峰.在计算中考虑 $4l(l=s,p,d,f)$ 电子为旁观电子,对类铜到类锗离子,分别有一到四个旁观电子,所以每个 jj' 跃迁带实际分别是 7、28、82 和 196 个线跃迁的叠加.所涉及的组态

平均能和 F^k, G^k 用 HFR 方法计算.

4 实验结果和分析

对于中 Z 元素,观测了 ^{22}Ti 、 ^{26}Fe 、 ^{28}Ni 、 ^{29}Cu 、 ^{30}Zn 和 ^{32}Ge 高离化态离子发射谱,波长 $8\sim 300\text{ \AA}$. 辨认归类了从类钠直至类氦离子的数百条跃迁线.其中,钛、铁、镍的高离化态离子谱数据发表在参考[7]中,铁、镍、铜、锌、锗的类氦离子谱数据发表在参考[8]中.

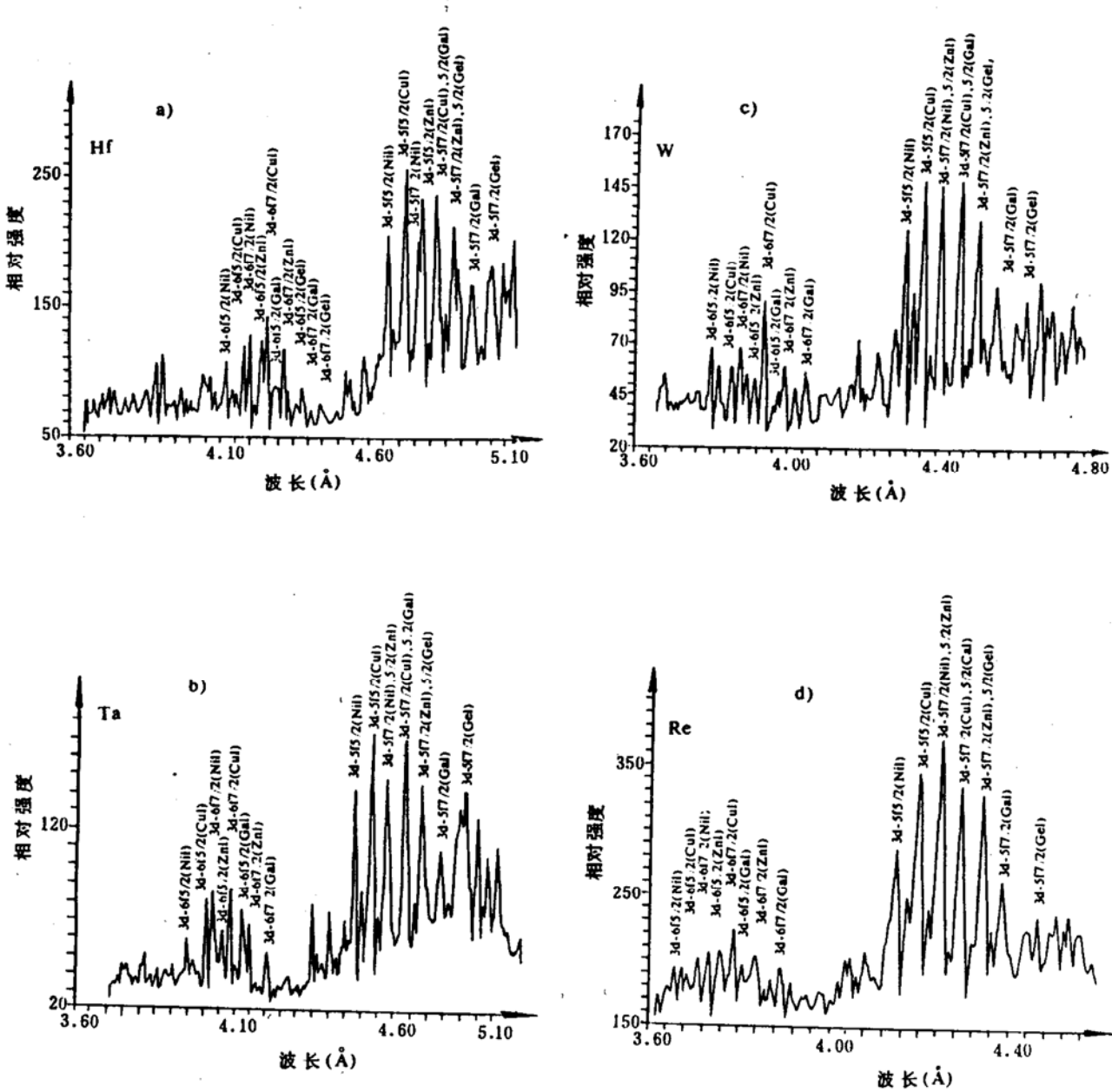


图1 3.6~5Å的离子发射谱

对四个高Z元素(${}_{72}\text{Hf}$ 、 ${}_{73}\text{Ta}$ 、 ${}_{74}\text{W}$ 和 ${}_{75}\text{Re}$) 5~8 Å范围的离子谱分析辨认出了各元素类钴、类镍和类铜离子的 $n=3\sim 4$ 跃迁线. 其中, 类镍离子谱的数据见参考[9]. 图1给出了各元素3.6~5 Å范围的离子发射谱, 它们都呈现出一系列孤立的峰, 每一个峰实际是由一个或几个半连续跃迁带组成. 根据与SOSA理论模型计算结果的比较, 确认出它们分别属于类镍、类铜、类锌、类镓和类锗离子的 $3d^i 4l^m - 3d^j n f_j; 4l^m$ ($m=0, 1, 2, 3, 4; n=5, 6; l=s, p, d, f$)类型跃迁组. 实验发现, 随着元素原子序数的增加, 跃迁带逐渐变窄, 并逐渐移向短波方向. 对每个元素, 相邻两个电离级间跃迁带平均波长间距近似相等(约0.05~0.06 Å), 而对同一电离级的两个 jj' 跃迁带的平均波长间距也近似相等(约0.095~0.110 Å之间).

本工作曾获得国家高技术863-410-3专

题. 此外, 还得到制靶组常富华同志、激光器运行组全体同志和西北师大董晨钟同志的大力支持和协助, 在此向他们表示衷心的感谢!

参 考 文 献

- 1 Fawcett B C. *Advance in Atomic and Molecular Physics*, 1974, 10:223
- 2 Edlen E. *Progress in Atomic Spectroscopy*, 1987, 271
- 3 Martinson I. *Rep. Prog. Phys.*, 1989, 52:157
- 4 Kelly R L. *NRL Report*, 1973, 7599; ORNL-5922, 1982
- 5 Bauche-Arnoult C, et al. *Phys. Rev.*, 1979, A20(6):2424; *Phys. Rev.*, 1982, A25:2641; *Phys. Rev.*, 1985, A31:2248
- 6 Boiko V A, et al. *Spectrosc. Radiat. Transfer*, 1978, 19:11
- 7 周裕清等. *原子与分子物理学报*, 1989, 6(4):1217
- 8 Zhou Yuqing, et al. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, 1994, 51:425
- 9 周裕清等. *物理学报*, 1994, 43(10):1623

Study of Highly Stripped Ionic Spectroscopy

Zhou Yuqing Zhang Baohan Yang Guohong Lei Anle

(*Institute of Nuclear Physics and Chemistry, Chengdu 610003*)

Abstract The soft X-ray emission spectra from very highly stripped ions of the medium-Z elements of ${}_{22}\text{T}$, ${}_{26}\text{Fe}$, ${}_{28}\text{Ni}$, ${}_{29}\text{Cu}$, ${}_{30}\text{Zn}$ and ${}_{32}\text{Ge}$, and the high-Z elements of ${}_{72}\text{Hf}$, ${}_{73}\text{Ta}$, ${}_{74}\text{W}$ and ${}_{75}\text{Re}$ have been observed in laser-produced plasmas generated by focusing a Nd-glass laser beam onto the surface of the plane solid targets at the "Xing Guang" laser facility. The spectra in the range of 3.6~300 Å were recorded by using four flat crystal spectrographs with different 2d spacing and a 1-m grazing incidence grating spectrometer, respectively. Several hundred lines from Na-like through H-like ions of six medium-Z elements and from Co-like and Ni-like ions of four high-Z elements were identified and classified on the basis of a comparison between the measured wavelengths and intensities with the predicted values which were calculated by Hartree-Fock-Relativistic method with configuration interaction and the multiconfiguration Dirac-Fock method. The quasicontinuum bands in Cu-like through Ge-like ions of Hf, Ta, W and Re were analyzed by unresolved spin-orbit-split array model.

Key Words medium- and high-Z elements, highly stripped state, ionic spectroscopy, flat crystal spectrograph, grating spectrometer.