

doi: 10.3969/j.issn.0490-6756.2018.06.018

稠密等离子体中类锂铝的原子结构研究

李向富^{1,2}, 蒋刚^{2,3}

(1. 陇东学院电气工程学院, 庆阳 745000; 2. 四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065;
3. 四川大学高能量密度物理及技术教育部重点实验室, 成都 610065)

摘要: 等离子体中原子结构的研究对于等离子体诊断和天文学观测有着非常重要的参考价值. 本文采用 MCDF 方法结合离子球模型研究了稠密等离子体对类锂铝离子的能级和跃迁参量(跃迁能、跃迁几率和振子强度)的影响情况. 随着等离子体屏蔽强度的不断增强, 上述原子结构参量变化如下: $1s^2 2p (^2P_{1/2,3/2})$ 的能级不断升高, 但 $1s^2 3s (^2S_{1/2})$ 、 $1s^2 3p (^2P_{1/2,3/2})$ 和 $1s^2 3d (^2D_{3/2,5/2})$ 的能级却不断降低; 不同主量子数间的跃迁对应的跃迁参量均不断减小; 除了 $1s^2 3s (^2S_{1/2}) - 1s^2 3p (^2P_{1/2,3/2})$ 间的跃迁外, 同一主量子数间的跃迁对应的跃迁参量均不断增大; $1s^2 3s (^2S_{1/2}) - 1s^2 3p (^2P_{1/2,3/2})$ 的跃迁参量均先增大后减小; 在跃迁的精细结构中, $\Delta J = 1$ 对应的跃迁几率和振子强度较大, 而 $\Delta J = 0$ 的则相对较小.

关键词: 类锂铝离子; 稠密等离子体; 离子球模型; 跃迁参量

中图分类号: O562.1 **文献标识码:** A **文章编号:** 0490-6756(2018)06-1243-08

Study of atomic structures of Li-like Al in dense plasmas

LI Xiang-Fu^{1,2}, JIANG Gang^{2,3}

(1. College of Electrical Engineering, Longdong University, Qingyang 745000, China;
2. Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610065, China;
3. Key Laboratory of High Energy Density Physics and Technology of Ministry of Education, Sichuan University, Chengdu 610065, China)

Abstract: The study of atomic structures in dense plasmas has a very important reference value for plasma diagnosis and astronomical observation. The MCDF method combined with ion sphere model are used in this work to investigate the influence of dense plasmas on the energy levels and transition parameters (transition energies, transition probabilities and oscillator strengths) of the Li-like Al ion in dense plasmas. With the increase of plasma screening intensity, the changes of the atomic structural parameters mentioned above are listed below: The energy levels of $1s^2 2p (^2P_{1/2,3/2})$ increase, but those of $1s^2 3s (^2S_{1/2})$, $1s^2 3p (^2P_{1/2,3/2})$ and $1s^2 3d (^2D_{3/2,5/2})$ decrease. The transition parameters of transitions between different principle quantum number n decrease. The transition parameters of transitions between the same principle quantum number n increase, except that of $1s^2 3s (^2S_{1/2}) - 1s^2 3p (^2P_{1/2,3/2})$. The transition parameters of transitions between $1s^2 3s (^2S_{1/2}) - 1s^2 3p (^2P_{1/2,3/2})$ increase first and then decrease with the rise of free electron densities. In the fine structures of one transition, the transition probabilities and oscillator strengths for $\Delta J = 1$ are greater, but those for $\Delta J = 0$ are relatively smaller.

Keywords: Li-like Al ion; Dense plasma; Ion sphere model; Transition parameter

收稿日期: 2018-05-31

基金项目: 国家自然科学基金(11474208); 陇东学院博士科研启动基金(XYBY1704)

作者简介: 李向富(1982—), 男, 甘肃环县人, 博士生, 副教授, 研究方向为稠密等离子体中的原子结构. E-mail: lixf808@163.com

1 引言

所有恒星、白矮星和一些巨行星中的物质均呈稠密等离子体状态^[1,2]. 实验室中可以用 X 射线自由电子激光光源产生稠密等离子体, 如美国的国家点火装置^[3]和直线加速器相干光源(LCLS)^[4]、日本的 SACLA^[5]以及位于德国的欧洲 X 射线自由电子激光器(European-XFEL)^[6]. 在稠密等离子体中, 离子处在自由电子和其它离子所产生的势场中, 不能再当做孤立自由离子处理. 稠密等离子体环境使得离子的许多性质发生了显著变化, 如谱线移动、谱线展宽、谱线合并、能级交叉和电离势衰落(IPD)等^[7]. 通过对这些独特性质的测量或者计算可以确定等离子体的状态, 为等离子体物理、天体物理、高能量密度物理以及核聚变能源等方面提供科学指导和技术服务^[8,9].

近年来, 随着 X 射线自由电子激光器的不断发展, 使得等离子体实验取得了长足的发展. 例如, 实验^[10-17]用 X 射线自由电子激光能产生高于固体铝密度一个数量级的稠密等离子体, 观测了 IPD 效应对光谱的影响随等离子体密度的变化情况. Ciricosta 等^[10-11]在实验上观测到的高离化态铝的 IPD 值与广泛使用的 SP (Stewart and Pyatt) 模型^[18]的预测值误差较大, 而与 EK (Ecker and Kroll) 模型^[19]符合较好. 但是, Preston 等^[20]随后分别用 SP 模型和 EK 模型模拟了高离化态 Al 的 IPD 值, 结论是用 SP 模型计算出的 IPD 值更合理. 2013 年, Hoarty 等^[15]在 Orion 激光装置上产生铝等离子体, 测得 IPD 的实验结果与 SP 模型预测的值符合得较好, 但与 EK 模型误差较大. 然而 2016 年 Kraus 的实验结果^[17]既不能用 SP 模型描述, 也不能用 EK 模型描述. 鉴于这种情况, 迫切需要更多的等离子体实验来确认现有的等离子体实验结果的可靠性.

用耦合强度 Γ 描述等离子体中离子间相互作用的强弱, 其定义为离子间平均库伦势能与动能的比值. $\Gamma < 1$ 表示弱耦合等离子体, 适用于德拜模型^[21]描述. $\Gamma \geq 1$ 表示强耦合等离子体, 需用离子球模型^[22]描述. Bhattacharyya 等^[23-26]用离子球模型研究了稠密等离子体中类氢铝离子的跃迁能、跃迁几率和振子强度(不同主量子数间的跃迁)随自由电子密度的变化情况, 结果表明上述参量均随自由电子密度的增加而逐渐减小. Belkhiri 等^[23,27-29]用离子球模型研究了稠密等离子体对类氢铝离子

的跃迁能、跃迁几率和振子强度(不同主量子数间的跃迁)的影响情况, 这些参量也随自由电子密度的增加而减小. 就我们所知, 目前关于稠密等离子体中类锂铝离子的能级和跃迁参量还未见报道. 本文采用 MCDF 方法结合离子球模型研究了稠密等离子体中类锂铝离子主量子数 $n \leq 3$ 的所有原子态的能级, 跃迁能、跃迁几率和振子强度随自由电子密度的变化情况. 发现 $1s^2 3s ({}^2S_{1/2}) - 1s^2 3p ({}^2P_{1/2, 3/2})$ 间的跃迁很有趣, 其跃迁参量并不是随着自由电子密度的增加而一直增大, 而是先增大后减小. 本文第 2 部分简要介绍了 MCDF 方法和离子球模型; 第 3 部分对计算结果进行了详细的分析; 第 4 部分为结论.

2 理论方法

在多电子原子或者离子中, 束缚电子间的关联效应是非常重要的. 本文用 Multiconfiguration-Dirac-Fock(MCDF)方法考虑束缚电子间的关联效应和相对论效应. 在 MCDF 方法中, 原子波函数(ASF)由具有相同宇称的组态波函数(CSF)的线性组合近似得到:

$$|\Gamma P J M\rangle = \sum_{i=1}^M c_i |\gamma P J M\rangle \quad (1)$$

其中, M 表示 CSF 的总个数, c_i 表示 CSF 的系数. 一旦得到了 ASF, 能级、跃迁能、跃迁几率和振子强度等物理量就可以计算出来. CSF 由各个单电子波函数组合成的 Slater 行列式得到. 下面重点介绍如何求解等离子体环境中的单电子波函数.

本文用离子球模型描述稠密等离子体对离子的屏蔽效应. 离子球模型基于以下假定: 一个带正电荷为 Z 的原子核处在球形空腔的中心, 该球形空腔内包含足够多的电子使得整个球体呈电中性状态, 此球体称为离子球. 离子球外面的等离子体视为电中性背景. 离子球半径 R_0 由公式 $4\pi R_0^3 n_f / 3 = Z - N$ 确定, n_f 是自由电子数密度, N 是束缚电子个数. 对于包含 N 个束缚电子的原子或者离子, 其 Dirac-Coulomb Hamiltonian 可以表示为:

$$H = \sum_{i=1}^N H_i + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (2)$$

上式中第一项表示单个束缚电子的能量之和, 第二项是束缚电子间的相互作用能. 单电子的 Hamiltonian H_i 定义为:

$$H_i = \vec{\alpha} \cdot \vec{p}_i + (\beta - 1)c^2 + V_{\text{IS}}(r_i) \quad (3)$$

上式中的第一项和第二项是束缚电子的相对论动能项,最后一项 $V_{IS}(r_i)$ 是束缚电子感受到的离子球势,其表达式为:

$$V_{IS}(r_i) = -\frac{Z}{r_i} + \frac{Z-N}{2R_0} \left[3 - \left(\frac{r_i}{R_0} \right)^2 \right] \quad (4)$$

束缚电子的波函数通过求解下式的 Dirac 方程组^[30]得到:

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{k}{r} \right) P_{nk}(r) - \frac{1}{c} [2c^2 - \epsilon_{nk} + V_{IS}(r)] Q_{nk}(r) = -X^P(r) \quad (5)$$

$$\left(\frac{d}{dr} - \frac{k}{r} \right) Q_{nk}(r) + \frac{1}{c} [-\epsilon_{nk} + V_{IS}(r)] P_{nk}(r) = -X^Q(r) \quad (6)$$

上式中 $P_{nk}(r)$ 和 $Q_{nk}(r)$ 分别是径向波函数的大小分量, ϵ_{nk} 是轨道能量本征值, n 是主量子数; k 是自旋-轨道量子数, $k = -l - 1$ 对应于 $j = l + 1/2$, $k = l$ 对应于 $j = l - 1/2$. $X^P(r)$ 和 $X^Q(r)$ 是用于保证具有相同宇称的轨道间正交性的“交换势”. 基于离子球模型电中性条件的假设, 径向波函数的大小分量 $P_{nk}(r)$ 和 $Q_{nk}(r)$ 须满足以下边界条件和归一化条件:

$$X(0) = 0, X(r) = 0 (X = P_{nk} \text{ 或者 } Q_{nk}, r > R_0) \quad (7)$$

$$\int_0^{R_0} [P_{nk}^2(r) + Q_{nk}^2(r)] dr = 1 \quad (8)$$

在总 *Hamiltonian* 中考虑了所有粒子, 即原子核、束缚电子和自由电子的贡献之后, 单个束缚电子的波函数可以通过自洽场方法求解. 本文所有的计算工作均在我们改进后的全相对论原子结构计算程序 GRASP2K^[31,32] 上完成.

3 结果与讨论

3.1 自由类锂铝离子的跃迁能和跃迁几率

在用 MCDF 方法计算自由态原子结构时, 可以按照主量子数逐层扩展组态, 直至所计算的原子结构数据收敛为止. 但在用离子球模型描述的稠密等离子体环境中, 尤其是当等离子体的密度较高时, 离子球半径较小, 束缚电子的活动空间受到显著的限制. 同时等离子体环境中的组态序列应该与真空环境中的组态序列完全相同, 否则所计算的等离子体环境中的原子结构数据, 如能级移动、电离势衰落等是无意义的. 故我们适当地选取了相对论轨道和组态序列, 即分别将所计算的原子态 $1s^2 2s, 1s^2 2p, 1s^2 3s, 1s^2 3p$ 和 $1s^2 3d$ 作为参考组态, 将其中的束缚电子双激发至当前参考组态的最高占据轨道以产生组态序列. 也就是说, 将组态 $1s^2$

$2s, 1s^2 2p, 1s^2 3s, 1s^2 3p$ 和 $1s^2 3d$ 中的束缚电子分别双激发至 $1s, 2s; 1s, 2s, 2p^-, 2p^+; 1s, 2s, 2p^-, 2p^+, 3s; 1s, 2s, 2p^-, 2p^+, 3s, 3p^-, 3p^+; 1s, 2s, 2p^-, 2p^+, 3s, 3p^-, 3p^+, 3d^-, 3d^+$ 轨道以产生各个原子态所对应的组态序列. 分别计算各个原子态的能级, 不同原子态间电偶极跃迁的跃迁能、跃迁几率和振子强度, 并与 NIST 推荐值^[33] 进行比较, 以确保所选取的组态序列较为合理. 另外, 本文所列出的跃迁能、跃迁几率和振子强度均为长度规范下的值.

表 1 所示的是自由类锂铝离子不同原子态间电偶极跃迁的跃迁能和跃迁几率. 从表中数据可以看出: 本文所计算的跃迁能和跃迁几率与 NIST 的推荐值^[33] 符合得较好, 说明我们所选取的组态能够较好地描述束缚电子间的关联效应. 但是 $1s^2 3p-1s^2 3d$ 间的跃迁能和跃迁几率与 NIST 推荐值^[33] 的相对误差较大, 这是由于组态序列中所包含的组态数目较少, 未能充分考虑束缚电子间的关联效应所致.

3.2 稠密等离子体中类锂铝离子的能级

表 2 所示的是稠密等离子体中类锂铝离子 $1s^2 2p(^2P_{1/2,3/2}), 1s^2 3s(^2S_{1/2}), 1s^2 3p(^2P_{1/2,3/2})$ 和 $1s^2 3d(^2D_{3/2,5/2})$ 原子态在不同自由电子密度下的能级值. 图 1 和图 2 分别所示的是 $1s^2 2p(^2P_{1/2,3/2})$ 和 $1s^2 3s(^2S_{1/2}), 1s^2 3p(^2P_{1/2,3/2}), 1s^2 3d(^2D_{3/2,5/2})$ 原子态的能级随自由电子密度的变化曲线. 从图 1 可以看出: 原子态 $1s^2 2p(^2P_{1/2,3/2})$ 的两个精细结构能级均随自由电子密度的升高而几乎呈线性升高; $1s^2 2p(^2P_{3/2})$ 的能级始终高于 $1s^2 2p(^2P_{1/2})$ 的能级, 这与真空环境中的能级顺序相同(从表 2 第一行 $1s^2 2p(^2P_{1/2,3/2})$ 的能级值可判断); $1s^2 2p(^2P_{1/2})$ 与 $1s^2 2p(^2P_{3/2})$ 的能级间隔随着自由电子密度的升高而逐渐减小. 从图 2 中可以看出: 三组精细结构能级均随自由电子密度的升高而几乎呈线性降低; 每一组中的精细结构能级始终呈合并状态; $1s^2 3d(^2D_{3/2,5/2})$ 的能级与 $1s^2 3s(^2S_{1/2})$ 和 $1s^2 3p(^2P_{1/2,3/2})$ 的相比, 随着自由电子密度的升高而下降较为缓慢.

3.3 同一主量子数 n 间的跃迁

针对我们所计算的能级, $1s^2 2s(^2S_{1/2})-1s^2 2p(^2P_{1/2,3/2}), 1s^2 3s(^2S_{1/2})-1s^2 3p(^2P_{1/2,3/2})$ 和 $1s^2 3p(^2P_{1/2,3/2})-1s^2 3d(^2D_{3/2,5/2})$ 间的跃迁属于同一主量子数 n 间的跃迁. $1s^2 2s(^2S_{1/2})-1s^2 2p(^2P_{1/2,3/2})$ 间的跃迁能与 $1s^2 2p(^2P_{1/2,3/2})$ 的能级相等, 其随自由电子密度的变化趋势如图 1 所示; 跃迁几率和权重振

表 1 自由类锂铝离子的跃迁能 E_t (单位: cm^{-1}) 和跃迁几率 A (单位: s^{-1}), $x(y)$ 表示 $x \times 10^y$

Tab. 1 The transition energies E_t (in cm^{-1}) and transition probabilities A (in s^{-1}) of free Li-like Al ion, and $x(y)$ indicates $x \times 10^y$

Transition	E_t	$E_t^{[33]}$	Dif1	A	$A^{[33]}$	Dif2
$1s^2 2s (^2S_{1/2}) - 1s^2 2p (^2P_{1/2})$	176 686	176 019	0.38	7.83(8)	7.68(8)	1.96
$1s^2 2s (^2S_{1/2}) - 1s^2 2p (^2P_{3/2})$	182 911	181 808	0.61	8.71(8)	8.51(8)	2.43
$1s^2 2s (^2S_{1/2}) - 1s^2 3p (^2P_{1/2})$	2 068 348	2 068 770	0.02	3.16(11)	3.18(11)	0.61
$1s^2 2s (^2S_{1/2}) - 1s^2 3p (^2P_{3/2})$	2 070 184	2 070 520	0.02	3.13(11)	3.16(11)	0.83
$1s^2 2p (^2P_{1/2}) - 1s^2 3s (^2S_{1/2})$	1 843 351	1 844 431	0.06	4.82(10)	4.80(10)	0.43
$1s^2 2p (^2P_{3/2}) - 1s^2 3s (^2S_{1/2})$	1 837 126	1 838 642	0.08	9.75(10)	9.63(10)	1.22
$1s^2 2p (^2P_{1/2}) - 1s^2 3d (^2D_{3/2})$	1 910 772	1 912 081	0.07	8.15(11)	8.15(11)	0.06
$1s^2 2p (^2P_{3/2}) - 1s^2 3d (^2D_{3/2})$	1 904 547	1 906 292	0.09	1.62(11)	1.61(11)	0.85
$1s^2 2p (^2P_{3/2}) - 1s^2 3d (^2D_{5/2})$	1 905 079	1 906 722	0.09	9.74(11)	9.74(11)	0.03
$1s^2 3s (^2S_{1/2}) - 1s^2 3p (^2P_{1/2})$	48 309	48 320	0.02	9.80(7)	9.82(7)	0.20
$1s^2 3s (^2S_{1/2}) - 1s^2 3p (^2P_{3/2})$	50 145	50 070	0.15	1.10(8)	1.09(8)	0.75
$1s^2 3p (^2P_{1/2}) - 1s^2 3d (^2D_{3/2})$	19 111	19 330	1.13	3.97(6)	4.11(6)	3.45
$1s^2 3p (^2P_{3/2}) - 1s^2 3d (^2D_{3/2})$	17 275	17 580	1.73	5.86(5)	6.18(5)	5.22
$1s^2 3p (^2P_{3/2}) - 1s^2 3d (^2D_{5/2})$	17 807	18 010	1.13	3.85(6)	3.99(6)	3.43

注: dif1 和 dif2 分别表示本文所计算的跃迁能和跃迁几率与 NIST 推荐值^[33]的相对误差.

表 2 稠密等离子体中类锂铝离子的能级 E (单位: cm^{-1})

Tab. 2 The energy levels E (in cm^{-1}) of the Li-like Al ion in dense plasmas

$n_f (\text{cm}^{-3})$	$1s^2 2p (^2P_{1/2})$	$1s^2 2p (^2P_{3/2})$	$1s^2 3s (^2S_{1/2})$	$1s^2 3p (^2P_{1/2})$	$1s^2 3p (^2P_{3/2})$	$1s^2 3d (^2D_{3/2})$	$1s^2 3d (^2D_{5/2})$
0	176 686	182 911	2 020 038	2 068 348	2 070 184	2 087 459	2 087 991
1.0(22)	176 732	182 957	2 019 179	2 067 570	2 069 404	2 086 958	2 087 490
5.0(22)	176 915	183 137	2 015 728	2 064 448	2 066 271	2 084 947	2 085 475
8.0(22)	177 053	183 272	2 013 127	2 062 092	2 063 907	2 083 429	2 083 955
1.0(23)	177 144	183 362	2 011 386	2 060 515	2 062 325	2 082 413	2 082 937
3.0(23)	178 061	184 265	1 993 658	2 044 419	2 046 173	2 072 026	2 072 538
5.0(23)	178 979	185 168	1 975 059	2 027 445	2 029 132	2 061 106	2 061 597
7.0(23)	179 898	186 072	1 954 780	2 008 808	2 010 396	2 049 277	2 049 738
9.0(23)	180 818	186 978	1 931 946	1 987 648	1 989 082	2 036 038	2 037 210
1.0(24)	181 279	187 431	1 919 390	1 975 925	1 977 257	2 029 882	2 030 242
1.1(24)	181 740	187 884	1 909 859	1 963 379	1 964 592	2 022 517	2 022 846
1.2(24)	182 201	188 338	1 896 861	1 949 975	1 951 054	2 014 646	2 014 873
1.3(24)	182 662	188 791	1 883 218	1 935 735	1 936 667	2 006 227	2 006 364
1.4(24)	183 124	189 246	1 868 873	1 920 602	1 921 378	1 997 159	1 993 566
1.5(24)	183 586	189 700	1 853 915	1 904 620	1 905 234	1 982 891	1 982 787
3.0(24)	190 560	196 554					
5.0(24)	199 530	205 324					
7.0(24)	208 522	214 030					
9.0(24)	216 964	222 069					
1.0(25)	221 251	226 104					
1.1(25)	225 510	230 081					
1.2(25)	229 687	233 942					
1.3(25)	233 623	237 533					
1.4(25)	237 331	240 868					
1.5(25)	240 647	243 786					
1.6(25)	243 935	246 653					

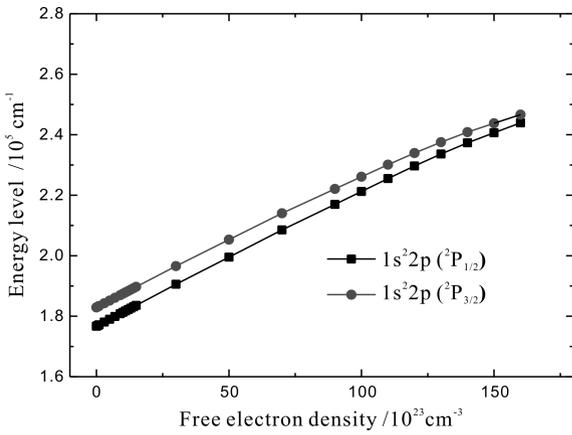


图 1 稠密等离子体中类锂铝离子 $1s^2 2p(^2P_{1/2,3/2})$ 原子态的能级随自由电子密度的变化

Fig. 1 The variation of energy levels of $1s^2 2p(^2P_{1/2,3/2})$ atomic states with free electron densities for the Li-like Al ion immersed in dense plasmas

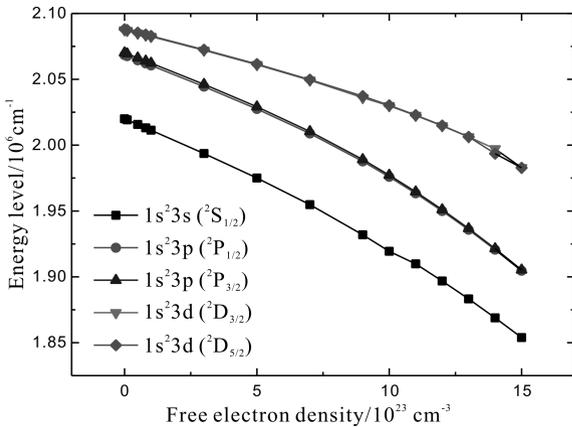


图 2 稠密等离子体中类锂铝离子 $1s^2 3s(^2S_{1/2})$ 、 $1s^2 3p(^2P_{1/2,3/2})$ 和 $1s^2 3d(^2D_{3/2,5/2})$ 原子态的能级随自由电子密度的变化

Fig. 2 The variation of energy levels of $1s^2 3s(^2S_{1/2})$ 、 $1s^2 3p(^2P_{1/2,3/2})$ and $1s^2 3d(^2D_{3/2,5/2})$ atomic states with free electron densities for the Li-like Al ion immersed in dense plasmas

子强度随自由电子密度的变化趋势与跃迁能的完全相似,故不再赘述. 由图 3 可以看出: $1s^2 3s(^2S_{1/2})-1s^2 3p(^2P_{1/2,3/2})$ 的跃迁能随自由电子密度的升高先增大后减小,即当自由电子密度小于或者等于 $1.0 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ 时,跃迁能随自由电子密度的增加而增加,但当自由电子密度大于 $1.0 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ 时,跃迁能随自由电子密度的增加而减小. 一般情况下同一主量子数间的跃迁对应的光谱随着自由电子密度的增加总是发生蓝移^[7,34],而 $1s^2 3s(^2S_{1/2})-1s^2 3p(^2P_{1/2,3/2})$ 的跃迁对应的光谱随着自由电子密度的增加先蓝移后红移,这一有趣的现象

还需进一步的理论研究和实验观测来证实. 从图 3 中还可以看出 $1s^2 3p(^2P_{1/2,3/2})-1s^2 3d(^2D_{3/2,5/2})$ 的跃迁能随自由电子密度的增加而逐渐增大.

从图 4 可以看出: $1s^2 3s(^2S_{1/2})-1s^2 3p(^2P_{1/2,3/2})$ 的跃迁几率随自由电子密度的变化趋势与其跃迁能的完全相似;总角量子数变化为 $1(\Delta J = 1)$ 时对应的跃迁几率总是大于总角量子数变化为 $0(\Delta J = 0)$ 时对应的跃迁几率,即 $1s^2 3s(^2S_{1/2})-1s^2 3p(^2P_{3/2})$ 的跃迁几率总是大于 $1s^2 3s(^2S_{1/2})-1s^2 3p(^2P_{1/2})$ 的跃迁几率. $1s^2 3p(^2P_{1/2,3/2})-1s^2 3d(^2D_{3/2,5/2})$ 的跃迁几率随着自由电子密度的增加而逐渐增加;初末态间的总角量子数变化为 $1(\Delta J = 1)$ 时,对应的跃迁几率随着自由电子密度的增加而增加较快;但是初末态间的总角量子数变化为 $0(\Delta J = 0)$ 时,对应的跃迁几率随着自由电子密度的增加而增加较为缓慢. 即 $1s^2 3p(^2P_{1/2})-1s^2 3d(^2D_{3/2})$ 和 $1s^2 3p(^2P_{3/2})-1s^2 3d(^2D_{5/2})$ 的跃迁几率随着自由电子密度的增加而增加较快;但 $1s^2 3p(^2P_{3/2})-1s^2 3d(^2D_{3/2})$ 的跃迁几率随自由电子密度的增加而增加较为缓慢.

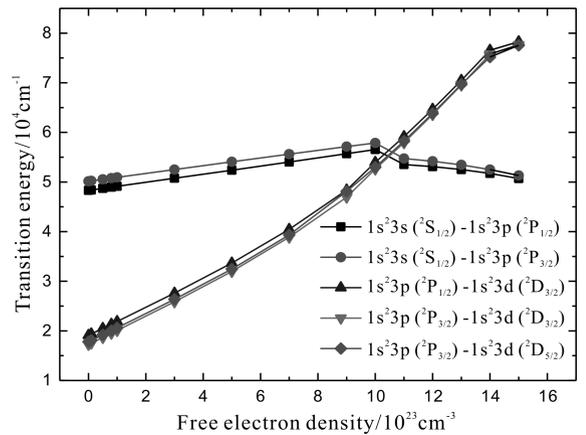


图 3 稠密等离子体中类锂铝离子同一主量子数间的跃迁对应的跃迁能

Fig. 3 The transition energies of transitions which occur between the same principal quantum number for Li-like Al ions in dense plasmas

3.4 不同主量子数 n 间的跃迁

$1s^2 2s(^2S_{1/2})-1s^2 3p(^2P_{1/2,3/2})$ 、 $1s^2 2p(^2P_{1/2,3/2})-1s^2 3s(^2S_{1/2})$ 、 $1s^2 2p(^2P_{1/2,3/2})-1s^2 3d(^2D_{3/2,5/2})$ 间的跃迁属于不同主量子数 n 间的跃迁. 由图 5 可以看出:不同主量子数间的跃迁能随自由电子密度的增加而几乎呈线性减小; $1s^2 2p(^2P_{1/2,3/2})-1s^2 3s(^2S_{1/2})$ 的跃迁能最小, $1s^2 2s(^2S_{1/2})-1s^2 3p(^2P_{1/2,3/2})$ 的跃迁能最大. 由图 6 可以看出:不同主量子数间的跃迁几率随自由电子密度的增加也几

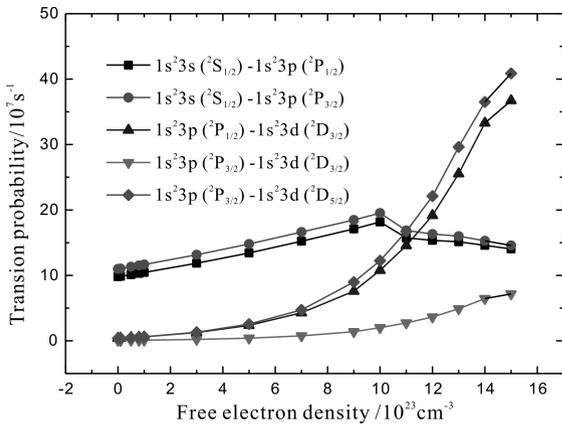


图 4 稠密等离子体中类锂铝离子同一主量子数间的跃迁对应的跃迁几率

Fig. 4 The transition probabilities of transitions which occur between the same principal quantum number for Li-like Al ions in dense plasmas

乎呈线性缓慢减小;在同一组跃迁的精细结构中,与同一主量子数间跃迁相类似,初末态间的总角量子数变化为 $1(\Delta J=1)$ 时对应的跃迁几率总是大于初末态间的总角量子数变化为 $0(\Delta J=0)$ 时对应的跃迁几率. 稠密等离子体环境中类锂铝离子的权重振子强度随自由电子密度的变化趋势与相应的跃迁几率的相似,故本文不再赘述.

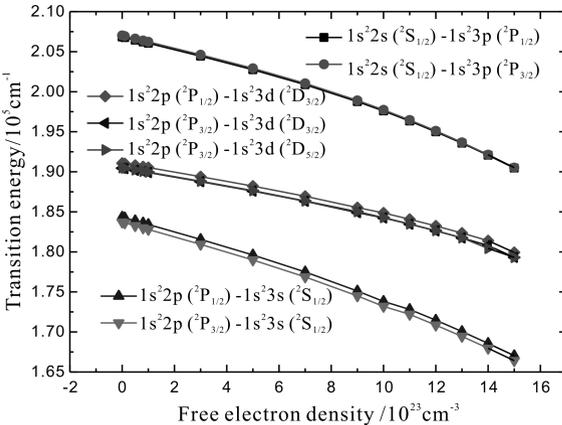


图 5 稠密等离子体中类锂铝离子不同主量子数间的跃迁对应的跃迁能

Fig. 5 The transition energies of transitions which occur between different principal quantum number for Li-like Al ions in dense plasmas

4 结 论

本文采用多组态 Dirac-Fock (MCDF) 方法结合离子球模型研究了稠密等离子体中类锂铝离子主量子数 $n \leq 3$ 的所有原子态的能级、跃迁能、跃迁几率和振子强度等随自由电子密度的变化情况. $1s^2 2p (2P_{1/2,3/2})$ 的能级随着自由电子密度的增加

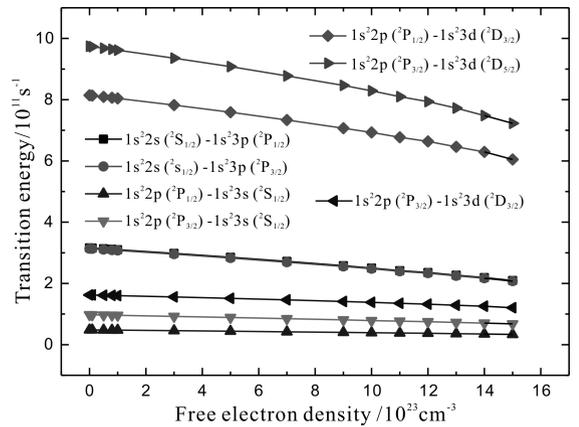


图 6 稠密等离子体中类锂铝离子不同主量子数间的跃迁对应的跃迁几率

Fig. 6 The transition probabilities of transitions which occur between different principal quantum number for Li-like Al ions in dense plasmas

而不断升高,但 $1s^2 3s (2S_{1/2})$ 、 $1s^2 3p (2P_{1/2,3/2})$ 和 $1s^2 3d (2D_{3/2,5/2})$ 的能级却不断降低. 不同主量子数间的跃迁对应的跃迁能、跃迁几率和振子强度等跃迁参量随着自由电子密度的升高均不断减小. 除 $1s^2 3s (2S_{1/2}) - 1s^2 3p (2P_{1/2,3/2})$ 的跃迁外,同一主量子数间的跃迁对应的跃迁能、跃迁几率和振子强度等跃迁参量随着自由电子密度的升高均不断增大. 当自由电子密度小于或者等于 $1.0 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ 时, $1s^2 3s (2S_{1/2}) - 1s^2 3p (2P_{1/2,3/2})$ 的跃迁参量随着自由电子密度的增加而增加,但当自由电子密度大于 $1.0 \times 10^{24} \text{ cm}^{-3}$ 时,其跃迁参量随着自由电子密度的增加而减小. $1s^2 3s (2S_{1/2}) - 1s^2 3p (2P_{1/2,3/2})$ 间的跃迁对应的光谱先蓝移而后红移,这一有趣的结果还需进一步的理论研究和实验观测来证实. 在同一组跃迁精细结构中,当初末态间的角量子数变化为 $1(\Delta J=1)$ 时对应的跃迁几率和振子强度较大,而当初末态间的角量子数变化为 $0(\Delta J=0)$ 时的则相对较小.

参考文献:

- [1] Chabrier G. Plasma physics and planetary astrophysics [J]. Plasma Phys Contr F, 2009, 51: 124014.
- [2] Helled R, Anderson J D, Podolak M, et al. Interior models of uranus and neptune [J]. Astrophys J, 2011, 726: 15.
- [3] Moses E I, Boyd R N, Remington B A, et al. The national ignition facility: ushering in a new age for high energy density science [J]. Phys Plasmas,

- 2009, 16: 041006.
- [4] Emma P, Akre R, Arthur J, *et al.* First lasing and operation of an angstrom-wavelength free-electron laser [J]. *Nat Photonics*, 2010, 4: 641.
- [5] Ishikawa K L, Ueda K. Competition of resonant and nonresonant paths in resonance-enhanced two-photon single ionization of He by an ultrashort extreme-ultraviolet pulse [J]. *Phys Rev Lett*, 2012, 108: 033003.
- [6] Zhang J, Andra M, Barten R, *et al.* Towards Gottard-II: development of a silicon microstrip detector for the european X-ray free-electron laser [J]. *J Instrum*, 2018, 13: P01025.
- [7] Das M, Sahoo B K, Pal S. Plasma screening effects on the electronic structure of multiply charged Al ions using Debye and ion-sphere models [J]. *Phys Rev A*, 2016, 93: 052513.
- [8] Hu S X. Continuum lowering and fermi-surface rising in strongly coupled and degenerate plasmas [J]. *Phys Rev Lett*, 2017, 119: 065001.
- [9] 李永强, 吴建华, 袁建民. 等离子体屏蔽效应对原子能级和振子强度的影响[J]. *物理学报*, 2008, 57: 4042.
- [10] Ciricosta O, Vinko S M, Chung H K, *et al.* Direct measurements of the ionization potential depression in a dense plasma [J]. *Phys Rev Lett*, 2012, 109: 065002.
- [11] Ciricosta O, Vinko S M, Barbrel B, *et al.* Measurements of continuum lowering in solid-density plasmas created from elements and compounds [J]. *Nat Commun*, 2016, 7: 11713.
- [12] Vinko S M, Ciricosta O, Cho B I, *et al.* Creation and diagnosis of a solid-density plasma with an X-ray free-electron laser [J]. *Nature*, 2012, 482: 59.
- [13] Cho B I, Engelhorn K, Vinko S M, *et al.* Resonant K-alpha spectroscopy of solid-density aluminum plasmas [J]. *Phys Rev Lett*, 2012, 109: 245003.
- [14] Vinko S M, Ciricosta O, Preston T R, *et al.* Investigation of femtosecond collisional ionization rates in a solid-density aluminium plasma [J]. *Nature Commun*, 2015, 6: 6397.
- [15] Hoarty D J, Allan P, James S F, *et al.* Observations of the effect of ionization-potential depression in hot dense plasma [J]. *Phys Rev Lett*, 2013, 110: 265003.
- [16] Fletcher L B, Kritcher A L, Pak A, *et al.* Observations of continuum depression in warm dense matter with X-ray thomson scattering [J]. *Phys Rev Lett*, 2014, 112: 145004.
- [17] Kraus D, Chapman D A, Kritcher A L, *et al.* X-ray scattering measurements on imploding CH spheres at the National Ignition Facility [J]. *Phys Rev E*, 2016, 94: 011202(R).
- [18] Stewart J C, Pyatt Jr K D. Lowering of ionization potentials in plasmas [J]. *Astrophys J*, 1965, 144: 1203.
- [19] Ecker G, Kroll W. Limits of collective description and their consequences for landau damping [J]. *Phys Fluids*, 1963, 6: 62.
- [20] Preston T R, Vinko S M, Ciricosta O, *et al.* The effects of ionization potential depression on the spectra emitted by hot dense aluminium plasmas [J]. *High Energy Dens Phys*, 2013, 9: 258.
- [21] Murillo M S, Weisheit J C. Dense plasmas, screened interactions and atomic ionization [J]. *Phys Rep*, 1998, 302: 1.
- [22] Ichimaru S. Strongly coupled plasmas: high-density classical plasmas and degenerate electron liquids [J]. *Rev Mod Phys*, 1982, 54: 1017.
- [23] Bhattacharyya S, Saha J K, Mukherjee T K. Non-relativistic structure calculations of two-electron ions in a strongly coupled plasma environment [J]. *Phys Rev A*, 2015, 91: 042515.
- [24] Bhattacharyya S, Sil A N, Fritzsche S, *et al.* Effect of strongly coupled plasma on the spectra of hydrogenlike carbon, aluminium and argon [J]. *Eur Phys J D*, 2008, 46: 1.
- [25] Das M. Transition energies and polarizabilities of hydrogen like ions in plasma [J]. *Phys Plasmas*, 2012, 19: 092707.
- [26] Li X F, Jiang G, Wang H B, *et al.* Atomic structure and transition properties of H-like Al in hot and dense plasmas [J]. *Chin Phys B*, 2017, 26: 013101.
- [27] Belkhir M, Fontes C J, Poirier M. Influence of the plasma environment on atomic structure using an ion-sphere model [J]. *Phys Rev A*, 2015, 92: 032501.
- [28] Sil A N, Anton J, Fritzsche S, *et al.* Spectra of heliumlike carbon, aluminium and argon under strongly coupled plasma [J]. *Eur Phys J D*, 2009, 55: 645.
- [29] Li X F, Jiang G, Wang H B, *et al.* Transition energies, transition probabilities and weighted oscillator strengths of He-like Al in hot and dense plasmas [J]. *Phys Scr*, 2017, 92: 075401.

- [30] Grant I P. Relativistic calculation of atomic properties [J]. *Comput Phys Commun*, 1994, 84: 59.
- [31] Jonsson P, Gaigalas G, Bieron J, *et al.* New version: Grasp2K relativistic atomic structure package [J]. *Comput Phys Commun*, 2013, 184: 2197.
- [32] Jonsson P, He X, Fischer C F, *et al.* The Grasp2K relativistic atomic structure package [J]. *Comput Phys Commun*, 2007, 177: 597.
- [33] Kramida A, Ralchenko Y, Reader J, *et al.* Atomic spectra database [DB/OL]. [2018-05-13]. <https://www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database>.
- [34] Saha B, Fritzsche S. Influence of dense plasma on the low-lying transitions in Be-like ions; relativistic multiconfiguration Dirac – Fock calculation [J]. *J Phys B*, 2007, 40: 259.

引用本文格式:

中文: 李向富, 蒋刚. 稠密等离子体中类锂铝的原子结构研究[J]. *四川大学学报: 自然科学版*, 2018, 55: 1243.

英文: Li X F, Jiang G. Study of atomic structures of Li-like Al in dense plasmas [J]. *J Sichuan Univ: Nat Sci Ed*, 2018, 55: 1243.