

用 GRASP 程序计算高电荷态离子的跃迁谱线

陈华中

(中国原子能科学研究院 核物理研究所, 北京 102413)

摘要:用相对论原子结构计算程序 GRASP(general-purpose relativistic atomic structure program) 计算了高电荷态离子 $S^{10+} \rightarrow S^{13+}$ 、 Br^{23+} 、 Br^{24+} 、 Ge^{20+} 、 Ge^{21+} 的跃迁波长和相对强度, 并与实验结果进行了比较。计算中考虑了 Breit 相互作用、真空极化和电子自能效应。

关键词:高电荷态离子; GRASP; 跃迁谱线

中图分类号: O571.53 文献标识码: A 文章编号: 1000-6931(2003)01-0004-05

Transition Lines Calculation of Highly Charged Ions by Means of GRASP Code

CHEN Hua-zhong

(China Institute of Atomic Energy, P. O. Box 275-80, Beijing 102413, China)

Abstract: Transition lines of highly stripped ions $S^{10+} \rightarrow S^{13+}$, Br^{23+} , Br^{24+} , Ge^{20+} , Ge^{21+} are calculated by means of GRASP code. Corrections to the energy levels, due to the retarded Coulomb interaction (Breit interaction), the polarization of the vacuum by the nuclear charge distribution and the electron self-energy, are included in a perturbation approximation. Comparisons with the experimental data are presented.

Key words: highly charged ion; GRASP; transition lines

近年来,光谱学的应用引起人们极大的兴趣:原子和离子结构的讯息主要来自光谱分析的结果;高电荷态离子在热核等离子体诊断、惯性约束聚变和磁约束聚变、天体物理、固体物理、生物医学、束箔光谱分析等方面都有着重要的应用;“水窗”波段(2.33~4.37 nm)的激光可用于全息照相,有相当一部分高电荷态离子辐射的光谱处于 X 射线波长区域内。

高电荷态离子的结构和谱线比中性原子或低电荷态离子的复杂得多,这些谱线的测量和

识别需要理论计算提供谱线的数据。

本文用相对论原子结构计算程序 GRASP (general-purpose relativistic atomic structure program) 计算高离化原子的跃迁谱线。

1 理论和程序

1.1 GRASP 程序简介

由 I. P. Grant 等^[1]提出的 GRASP 是大型的相对论原子结构计算程序,它在相对论框架下计算原子的能级、寿命、跃迁谱线等原子结构

收稿日期:2001-08-23;修回日期:2001-11-05

作者简介:陈华中(1944—),男,广东大埔人,副研究员,理论核物理专业

参数。它是在多组态计算程序(MCDF, multi-configurational Dirac-Fock)^[2]的基础上推广发展而来的。拓展后的 GRASP 程序包括横向 Breit 相互作用(电子间库仑作用最低一阶的修正项)、电子自能^[3]、核电荷分布引起的真空极化等对能级造成的修正。利用它,可以得到元素周期表中所有元素及其各种不同电离度的离子的原子结构参数,甚至可以外推计算 $Z=168$ 的超重元素。显然,预先提供理论计算的数据,有助于鉴定和分析实验中得到的各种数据。

1.2 理论基础

相对论原子结构理论的基础是量子电动力学。原子是一个由原子核和核外电子组成的多体系统,电子可以看作是在核电荷的中心力场中和处于其他电子的屏蔽中运动的粒子。

电子轨道波函数由径向部分和自旋-角动量部分两部分的乘积组成。中心力场 Dirac 轨道波函数 $|n m\rangle$ 可表达为:

$$\vec{r} |n m\rangle = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} P_n(r) m \begin{bmatrix} \vec{r} \\ r \end{bmatrix} \\ i Q_n(r) - m \begin{bmatrix} \vec{r} \\ r \end{bmatrix} \end{bmatrix} \quad (1)$$

式中: $P_n(r)$ 和 $Q_n(r)$ 分别为径向波函数的大、小分量;函数 $m \begin{bmatrix} \vec{r} \\ r \end{bmatrix}$ 为自旋球谐函数; \vec{r} 为径矢; n 为主量子数; m 为相对论角动量子数; m 为磁量子数。

N -电子系统的组态函数(CSF)由 N 个轨道波函数构成的 N 阶 Slater 行列式线性组合而成。整个原子体系的原子态函数(ASF)由组态函数(CSF)线性组合而成。

应用变分原理,对于子壳层,可以得到 Dirac 方程组:

$$\begin{cases} \left(\frac{d}{dr} + \frac{1}{r} \right) P_n(r) - \left(2c - \frac{1}{c} + \frac{Y(r)}{cr} \right) Q_n(r) = - \frac{{}^{(P)}(r)}{r} \\ \left(\frac{d}{dr} - \frac{1}{r} \right) Q_n(r) + \left(-\frac{1}{c} + \frac{Y(r)}{cr} \right) P_n(r) = - \frac{{}^{(Q)}(r)}{r} \end{cases} \quad (2)$$

式中: $Y(r)$ 为位势,本工作采用汤姆斯-费米(Thomas-Fermi)位势函数^[11]; ϵ 是电子的动能; c 是光速。

式(2)可用自洽的迭代方法(SCF)求解。

两个电子(分别标记为 i 和 j)之间库仑相互作用的最低一阶修正基于交换单个横向极化光子的 Breit 相互作用 $B(r_{ij})$,取如下形式^[11]:

$$B(r_{ij}) = - \frac{1}{r_{ij}} \left[\frac{\cos(r_{ij})}{r_{ij}} - \frac{(\vec{r}_i \cdot \vec{r}_j)(\vec{r}_i \cdot \vec{r}_j) \cos(r_{ij}) - 1}{2 r_{ij}^2} \right] \quad (3)$$

式中: $r_{ij} = |\vec{r}_i - \vec{r}_j|$; $\vec{\gamma}$ 是四阶 Dirac 矩阵; ϵ 是横向极化光子的波数。

GRASP 计算中选取扩展平均能级(EAL, extended average-level)模式^[11]。

2 计算结果

表 1~8 列出了高电荷态离子 $S^{10+} \rightarrow S^{13+}$ 、 Br^{23+} 、 Br^{24+} 、 Ge^{20+} 、 Ge^{21+} 谱线的波长与相对强度的计算结果。其中,实验数据是在中国原子能科学研究所的 HF-13 串列加速器上得到的^[4,5]。从表可以看出,理论计算和实验测量结果有些差别,这主要是一些修正效应未被考虑所造成的,如电四极的效应。

表 1 S (S^{10+})的跃迁波长

Table 1 Transition wavelength for sulphur (S^{10+})

跃迁	谱项	角动量 $J \rightarrow J'$	波长/nm(相对强度)	
			实验值 ^[4]	本工作
$2s^2 2p^2 - 2s 2p^3$	$^1D - ^1P$	$2 \rightarrow 1$	19.094(194)	18.823(250)
$2s^2 2p^2 - 2s 2p^3$	$^3D - ^3P$	$2 \rightarrow 1$	24.718(117)	24.641(194)
$2s^2 2p^2 - 2s 2p^3$	$^3P - ^3D$	$0 \rightarrow 1$	28.139(19)	27.976(33)
$2s^2 2p^2 - 2s 2p^3$	$^3P - ^3D$	$1 \rightarrow 1$	28.642(18)	28.391(21)
$2s^2 2p^2 - 2s 2p^3$	$^3P - ^3D$	$2 \rightarrow 3$	29.138(200)	29.011(168)

表 2 S (S^{11+})的跃迁波长Table 2 Transition wavelength for sulphur (S^{11+})

跃迁	谱项	角动量 $J \rightarrow J$	波长/ nm(相对强度)	
			实验值 ^[4]	本工作
$2s^2 2p^2 \rightarrow 2s 2p^2$	$2P \rightarrow 2P$	$3/2 \rightarrow 3/2$	21. 251 (78)	21. 196 (98)
$2s^2 2p^2 \rightarrow 2s 2p^2$	$2P \rightarrow 2S$	$1/2 \rightarrow 1/2$	22. 751 (60)	22. 485 (45)
$2s^2 2p^2 \rightarrow 2s 2p^2$	$2P \rightarrow 2S$	$3/2 \rightarrow 1/2$	23. 413 (64)	23. 168 (66)
$2s 2p^2 \rightarrow 2p^3$	$4P \rightarrow 4S$	$1/2 \rightarrow 3/2$	23. 995 (116)	23. 812 (168)
$2s 2p^2 \rightarrow 2p^3$	$4P \rightarrow 4S$	$3/2 \rightarrow 3/2$	24. 308 (72)	24. 086 (82)
$2s 2p^2 \rightarrow 2p^3$	$4P \rightarrow 4S$	$5/2 \rightarrow 3/2$	24. 718 (117)	24. 481 (135)

表 3 S (S^{12+})的跃迁波长Table 3 Transition wavelength for sulphur (S^{12+})

跃迁	谱项	角动量 $J \rightarrow J$	波长/ nm(相对强度)	
			实验值 ^[4]	本工作
$2s 2p \rightarrow 2p^2$	$3P \rightarrow 3P$	$1 \rightarrow 2$	29. 980 (46)	29. 818 (60)
$2s 2p \rightarrow 2p^2$	$3P \rightarrow 3P$	$0 \rightarrow 1$	30. 341 (22)	30. 164 (46)
$2s 2p \rightarrow 2p^2$	$3P \rightarrow 3P$	$1 \rightarrow 1$	30. 736 (12)	30. 560 (19)
$2s 2p \rightarrow 2p^2$	$3P \rightarrow 3P$	$2 \rightarrow 2$	30. 899 (61)	30. 703 (78)
$2s 2p \rightarrow 2p^2$	$3P \rightarrow 3P$	$1 \rightarrow 0$	31. 275 (16)	31. 080 (23)

表 4 S $XV(S^{13+})$ 的跃迁波长Table 4 Transition wavelength for sulphur $XV(S^{13+})$

跃迁	谱项	角动量 $J \rightarrow J$	波长/ nm(相对强度)	
			实验值 ^[4]	本工作
$1s^2 2s \rightarrow 2s^2 2p$	$3S \rightarrow 2P$	$1/2 \rightarrow 1/2$	44. 577 (300) ¹⁾	44. 336 (250)

注:1) 首次发表的数据

表 5 Br (Br^{23+})的跃迁波长Table 5 Transition wavelength for bromine (Br^{23+})

跃迁	谱项	角动量 $J \rightarrow J$	波长/ nm(相对强度)	
			实验值 ^[5]	本工作
$3s 3p \rightarrow 3p^2$	$3P \rightarrow 3P$	$0 \rightarrow 1$	17. 263 (120) ¹⁾	17. 128 (135)
$3s 3p \rightarrow 3p^2$	$3P \rightarrow 3P$	$1 \rightarrow 1$	17. 908 (125) ¹⁾	17. 784 (117)
$3s 3p \rightarrow 3p^2$	$1P \rightarrow 1S$	$1 \rightarrow 0$	18. 433 (95) ¹⁾	18. 387 (98)
$3s 3p \rightarrow 3p^2$	$3P \rightarrow 3P$	$1 \rightarrow 0$	20. 079 (100) ¹⁾	19. 800 (116)
$3s 3p \rightarrow 3p^2$	$3P \rightarrow 3P$	$2 \rightarrow 1$	20. 371 (90) ¹⁾	20. 177 (88)
$3s 3p \rightarrow 3s 3d$	$3P \rightarrow 3D$	$0 \rightarrow 1$	13. 351 (20) ¹⁾	13. 322 (35)
$3s 3p \rightarrow 3s 3d$	$3P \rightarrow 3D$	$1 \rightarrow 1$	13. 723 (115) ¹⁾	13. 716 (98)
$3s 3p \rightarrow 3s 3d$	$3P \rightarrow 3D$	$2 \rightarrow 3$	14. 769 (610)	14. 744 (389)
$3s 3p \rightarrow 3s 3d$	$3P \rightarrow 3D$	$2 \rightarrow 2$	14. 991 (60) ¹⁾	14. 974 (78)
$3s 3p \rightarrow 3s 3d$	$3P \rightarrow 3D$	$2 \rightarrow 1$	15. 135 (70) ¹⁾	15. 097 (82)
$3p^2 \rightarrow 3p 3d$	$3P \rightarrow 3P$	$1 \rightarrow 0$	13. 720 (88) ¹⁾	13. 779 (78)
$3p^2 \rightarrow 3p 3d$	$3P \rightarrow 3D$	$0 \rightarrow 1$	13. 842 (98) ¹⁾	13. 903 (116)
$3p^2 \rightarrow 3p 3d$	$3P \rightarrow 3D$	$1 \rightarrow 2$	14. 411 (116) ¹⁾	14. 475 (179)

续表 5

跃迁	谱项	角动量 $J \rightarrow J$	波长/ nm(相对强度)	
			实验值 ^[5]	本工作
3p ² —3p3d	³ P— ³ D	1—1	15.114(72) ¹⁾	15.182(66)
3p ² —3p3d	³ P— ¹ D	1—2	15.758(82) ¹⁾	15.880(46)
3s3d—3p3d	³ D— ³ P	2—2	17.903(117) ¹⁾	17.864(168)
3s3d—3p3d	³ D— ³ P	2—1	18.069(66) ¹⁾	18.020(70)
3s3d—3p3d	³ D— ³ D	2—3	18.285(19) ¹⁾	18.106(33)
3s3d—3p3d	³ D— ³ P	3—3	18.572(31) ¹⁾	18.455(45)
3p3d—3d ²	³ F— ³ D	3—2	15.114(23) ¹⁾	15.017(43)
3p3d—3d ²	³ F— ³ F	4—4	14.987(43) ¹⁾	14.920(64)
3p3d—3d ²	³ D— ³ F	1—2	15.207(117) ¹⁾	15.191(230)

注:1) 首次发表的数据

表 6 Br (Br^{24+}) 的跃迁波长

Table 6 Transition wavelength for bromine (Br^{24+})

跃迁	谱项	角动量 $J \rightarrow J$	波长/ nm(相对强度)	
			实验值 ^[5]	本工作
2p ⁶ 3s—2p ⁶ 3p	² S— ² P	1/2—3/2	18.957(33)	18.910(45)
2p ⁶ 3s—2p ⁶ 3p	² S— ² P	1/2—1/2	22.918(60)	22.834(70)

表 7 Ge (Ge^{20+}) 的跃迁波长

Table 7 Transition wavelength for germanium (Ge^{20+})

跃迁	谱项	角动量 $J \rightarrow J$	波长/ nm(相对强度)	
			实验值 ^[4,5]	本工作
3s ² —3s3p	¹ S— ¹ P	0—1	19.656(21)	19.434(33)
3s3p—3p ²	³ P— ³ P	0—1	20.532(23)	20.351(45)
3s3p—3p ²	³ P— ³ P	1—1	21.173(43)	20.996(64)
3s3p—3p ²	¹ P— ¹ S	1—0	22.014(60) ¹⁾	21.923(78)
3s3p—3p ²	³ P— ³ P	2—1	23.254(66)	23.021(135)
3s3p—3s3d	³ P— ³ D	1—1	16.015(32) ¹⁾	15.977(41)
3s3p—3s3d	³ P— ³ P	2—3	16.876(47)	16.850(57)
3s3p—3s3d	³ P— ³ D	2—2	17.057(30)	17.024(43)
3p ² —3p3d	³ D— ³ P	2—2	15.887(72)	15.836(82)
3p ² —3p3d	³ P— ³ P	1—2	16.015(23)	16.075(45)
3p ² —3p3d	³ P— ³ D	2—3	17.639(31)	17.559(64)
3p ² —3p3d	¹ D— ¹ D	2—2	18.076(33)	17.980(45)
3p ² —3p3d	³ P— ³ D	2—2	18.436(98)	18.369(116)
3p3d—3d ²	³ F— ³ P	3—2	14.938(64) ¹⁾	14.975(70)
3p3d—3d ²	³ F— ³ F	2—2	15.733(60) ¹⁾	15.645(88)
3p3d—3d ²	¹ F— ¹ G	3—4	20.388(19)	20.569(35)
3s3d—3p3d	³ D— ³ F	3—4	24.660(57)	24.732(66)
3s3d—3p3d	³ D— ³ F	2—3	26.668(43)	26.715(64)
3s3d—3p3d	³ D— ³ F	3—3	27.120(23) ¹⁾	27.156(33)
3s3d—3p3d	³ D— ³ F	1—2	28.556(31)	28.642(72)
3s3d—3p3d	³ D— ³ F	2—2	28.870(18)	28.925(31)

注:1) 首次发表的数据

表 8 Ge (Ge^{21+}) 的跃迁波长
Table 8 Transition wavelength for germanium (Ge^{21+})

跃迁	谱项	角动量 $J \rightarrow J$	波长/nm(相对强度)	
			实验值 ^[5]	本工作
$2p^6 3s \rightarrow 2p^6 3p$	$^2S \rightarrow ^2P$	$1/2 \rightarrow 1/2$	26.150(21) ¹⁾	26.053(31)
$2p^6 3s \rightarrow 2p^6 3p$	$^2S \rightarrow ^2P$	$1/2 \rightarrow 3/2$	22.651(46) ¹⁾	22.593(46)
$2p^6 3s \rightarrow 2p^6 3p$	$^2P \rightarrow ^2D$	$1/2 \rightarrow 3/2$	17.440(82) ¹⁾	17.423(72)
$2p^6 3s \rightarrow 2p^6 3p$	$^2P \rightarrow ^2D$	$3/2 \rightarrow 5/2$	19.059(194) ¹⁾	19.043(179)

注:1) 首次发表的数据

参考文献:

- [1] Dvall KG, Grant IP, Johnson CT, et al. GRASP: A General-purpose Relativistic Atomic Structure Program[J]. Comput Phys Commun, 1989, 55: 425 ~ 456.
- [2] Grant IP, Mckenzie BJ, Norrington PH, et al. An Atomic Multiconfigurational Dirac-Fock Package [J]. Comput Phys Commun, 1980, 21: 207 ~ 231.
- [3] Mohr PJ. Self-energy Radiative Corrections in Hydrogen-like System[J]. Ann Phys (NY), 1974, 88:26 ~ 51.
- [4] 曾宪堂,李景文,江历阳,等. 类 C 和类 B 的 S 离子跃迁谱线[J]. 原子与分子物理学报,1998,15: 61 ~ 62.
- [5] Zeng Xiantang, Du Shubin, Li Jingwen, et al. Spectrum and Energy Levels of Mg-like Br [J]. Phsi Scri, 2000, 61:461 ~ 467.

来自核应用的放射性废物的操作和处理

Handling and Processing of Radioactive Waste From Nuclear Applications

2001 年国际原子能机构出版。

为了帮助发展中成员国的废物管理人员与作业人员,国际原子能机构于 1998 年发表了一份题为《少量放射性废物的管理》的报告(IAEA-TECDO-1041)。这份报告介绍了作为整体废物管理的各项内容,并简要列举了基本的应用技术。

本书是 IAEA 技术报告丛书中的第 402 号报告。该报告详细说明了应用最广泛的放射性废物处理、操作和贮存技术,介绍的主要是发展中成员国中非燃料循环活动产生的废物,报告的重点是非核电生产国家能够采用的最简单和最可靠的技术。报告的目的是对核技术与放射性同位素在工业、医学及科研教育中的应用进行评论、分析和总结。

具体内容有:废物的分类、含水废物的处理、放射性有机液体的处理、固体废物的处理以及质量保证等。

摘自中国原子能科学研究院《科技信息》