第 46 卷 第 2 期 天 文 学 报 Vol.46 No.2
2005 年 4 月 ACTA ASTRONOMICA SINICA Apr., 2005

类铍氧离子 X 射线及 EUV 光谱理论模拟*

梁雅琼 [1] 仲佳勇 [2]

(1 中国科学院物理研究所 北京 100080)
(2 中国科学院国家天文台 北京 100012)

摘要 根据非局域热动平衡状态下谱线形成理论，利用相对论多组态原子程序软件包 FAC 模拟了类铍氧离子的 X 射线及 EUV 光谱. 分析了间接过程对类铍氧离子 X 射线及 EUV 光谱形成的影响. 在典型天体等离子体密度 (n_e=10^{10}/ 立方厘米) 情况下，采用了 3 种模型，在不同温度下模拟 X 射线及 EUV 光谱形成过程，分析比较了间接过程对谱线形成的贡献，并给出了它们的速率系数，得出了在谱线形成过程中，间接过程具有非常重要的作用.

关键词 原子数据，原子过程，谱线：形成
中图分类号： P 157; **文献标识码**： A

1 引言

随着 Chandra 和 XMM-Newton 等 X 射线天文观测设备的运行，准确记录了大量丰富的 X 射线谱线，为我们分析天体等离子体环境提供可靠的证据 [1]. 在激光与物质相互作用实验中，随着激光强度的增加以及高分辨率晶体谱仪的应用，可精细准确记录丰富的 K 和 L 壳层谱线，这些谱线对于等离子状态的诊断同样具有非常重要的作用. 无论是天体等离子体还是实验室等离子体，其状态主要由等离子体参数来决定，这些参数包括离化状态，电子密度和电子温度等 [2]. 在合适条件下，谱线强度与等离子参数存在一定的物理关系，这样用谱线强度就可以确定等离子体参数. 在天体等离子非局域热动平衡物理条件下，分析谱线强度最常用的理论方法是碰撞辐射模型. 碰撞辐射模型考虑了各种原子过程，求解速率方程，获得粒子数布局，最终得到谱线强度. 模型通过改变等离子体参数得到各种谱线强度，与观测谱强度进行比较来确定等离子体状态. 通常，碰撞辐射模型中的各种原子过程应当全部考虑，但对于不同等离子体条件，可以根据原子过程主导性来选择简化的模型. 例如通常对于冕区 (如太阳) 等离子体采用的速率方程主要考虑碰撞激发 (CE) 和自发衰变过程. Laming 等 [3] 利用 CE 理论成功地解释了实验和观测得到类氖铁 3s-2p (17 埃) 和 3d-2p (15 埃) 两条线的强度比. Saba 等 [4] 和 Brown 等 [5] 指出 CE 理论与观测依旧存在差别. Gu[6] 指出对于 CE 模型无论是否存在误差，考

2004-07-14 收到
*NKBRSF (G1999075206, G1999075406), 国家自然科学基金 (10176034, 10433010 , 10374114), 国家惯性约束聚变技术主题资助

虑间接过程同样会对谱线的形成产生一定的影响. 他系统地分析了铁离子的 L 壳层谱线的形成, 得出间接过程对谱线形成存在重要影响的结论.

在天体环境中氧是较为丰富的一种元素, 因而其谱线也显得尤为丰富. 最近在中国科学院物理研究所光物理实验室, 利用高功率激光与水、酒精液滴相互作用, 观察到了丰富的不同氧离化态的 X 射线及 EUV 光谱 [7]. 因此, 对于氧的等离子光谱进行理论模拟就显得尤为重要. 本文对类铍氧离子的 X 射线谱 (18 埃 —350 埃) 进行了理论模拟. 主要考虑间接过程对靶态离子影响, 速率方程采用包含多离子原子组态的统计平衡方程. 采用 3 种模型进行谱线模拟, 这 3 种模型分别为单离子模型, 即只考虑碰撞激发过程 (CE) 和辐射衰变过程; 双离子模型包括下一离化态对靶态离子的双电子辐射 (DR) 和辐射复合过程 (RR); 3 离子模型指在双离子模型的基础上包括上一离化态对靶态离子的共振激发 (RE) 和碰撞电离过程 (CI). 最后得出间接过程对谱线形成具有重要的影响.

2 理论模型

我们采用碰撞辐射模型, 广义来讲碰撞辐射模型应当包括所有的电子原子过程. 具体来讲, 就是对于一个特定的能级, 它具有的粒子数应当是所有到达该能级的粒子数减去离开该能级的粒子数, 即净粒子数. 对于低密天体等离子体, 一般采用晕模型, 此时仅考虑碰撞激发和退激发过程, 还有辐射衰变过程. 对于高密等离子体, 复合过程具有主导作用, 这时如果只考虑碰撞激发过程, 那么模拟与实验相差很远. 尽管用简化的碰撞辐射模型可以较好的解释实验结果, 但是如果真正细致的模拟光谱, 尤其 X 射线波段的谱线, 应该采用广义的碰撞辐射模型. 下面我们对模型进行简要描述, 具体可参考文 [8]. 对于广义的碰撞辐射模型, 我们需要求解的方程为:

$$\sum_{qj} C_{pi}^{qj} n_{qj} = 0\,, \tag{1}$$

n_{qj} 表示离子 q 的 j 能级, 如果 pq 或者 ij 不相同, C 系数表示所有的从 pi 态到达 qj 态的速率, 如果都相同 C 系数表示从 qj 态出去的速率.

代替求解原始的速率方程, 采用组合能级近似, 这样减少了计算量. 在组合能级里仅仅包含一个真正的态. 例如对于相同 $nln'l'$ 的双激发态可以归为一组合能级. 组合能级的定义为:

$$n_{pJ} = \sum_{j} n_{pj}\,, \tag{2}$$

相应地, 在速率方程中系数为:

$$C_{pI}^{qJ} n_{qJ} = \sum_{ij} C_{pi}^{qj} n_{qj}\,. \tag{3}$$

在这样的定义下, 原始的速率方程和组合能级组成的速率方程等价. 对于方程 (1) 的求解, Lucy[9] 介绍如下方法:

(a) 由 n_{qj} 计算得到组合能级辐射系数 C_{pI}^{qJ}
(b) 求解标准的线性速率方程得到组合能级的粒子数布局
(c) 归一化组合能级的粒子数，以满足前面计算结果
(d) 最后所有能级粒子数通过下面方程得到

$$n_{pi} = \frac{\sum_{qj \neq pi} C_{pi}^{qj} n_{qj}}{D_{pi}} . \tag{4}$$

这里并不是将所有的能级都分开形成组合能级，只是将高态能级归类，对于低态能级仍然独立处理，这是由于大部分的 L 壳层重要谱线由低态能级跃迁构成．这里考虑了 3 种模型，单离子、双离子、三离子模型．在单离子模型中只考虑靶态离子的碰撞激发和辐射衰变过程也就是最常见的晕离子模型，双离子模型包含了下一离化态对靶态离子的双电子复合和辐射复合过程，三离子模型考虑了上一离化态对靶态离子的共振激发和碰撞电离．对于电离平衡采用 Arnaud 等 [10] 的电离和复合速率计算得到，另外为了减少变量计算，我们保持电子密度为 $10^{10}\,\mathrm{cm}^{-3}$．得到粒子数布局 n_{pi}, 谱线的强度可以确定．

$$I_{ij}^{p} = A N_H n_{pi} A_{pj}^{pi} , \tag{5}$$

这里， A 是元素相对于氢元素丰度， N_H 是氢的密度， A_{pj}^{pi} 是从 pi 态到 pj 态的辐射衰变速率系数．

3　计算结果

表 1 给出了类铍氧 45 个计算能级，同时列举了实验能级．从表中可见，理论值与实验值在 2 eV 的误差下符合得很好．另外给出了组态定义、宇称 (- 代表奇宇称， + 代表偶宇称), 同时列出了 NIST 上给出的 LS 耦合项．对于属于组态 $2p3p$ 的能级 30 和 31, 我们的计算显示这两个能级发生了错位．这是由于能级之间发生了强烈的混合现象．同样属于组态 $2p3d$ 的能级也发生了混合，表中我们将混合的能级以星号标记．

表 1　类铍氧离子计算能级与实验能级的比较

Table 1　Level indices and Level Energies for Be-like O ions in units of eV

能级 level	组态 configuration	谱项 term	角量子数 J	宇称 parity	FAC(电子伏) FAC (eV)	NIST (电子伏) NIST (eV)
1	2s2	^{1}S	0	+	0.000	0.000
2	2s(^{2}S)2p	^{3}P	0	−	10.311	10.160
3	2s(^{2}S)2p	^{3}P	1	−	10.326	10.176
4	2s(^{2}S)2p	^{3}P	2	−	10.360	10.214
5	2s(^{2}S)2p	^{1}P	1	−	20.797	19.688
6	2p2	^{3}P	0	+	26.759	26.466
7	2p2	^{3}P	1	+	26.795	26.485
8	2p2	^{3}P	2	+	26.819	26.519
9	2p2	^{1}D	2	+	29.749	29.730
10	2p2	^{1}S	0	+	37.238	35.696

表 1 (续)

Table 1 (continude)

能级 level	组态 configuration	谱项 term	角量子数 J	宇称 parity	FAC(电子伏) FAC (eV)	NIST (电子伏) NIST (eV)
11	$2s(^2S)3s$	^3S	1	+	67.548	67.816
12	$2s(^2S)3s$	^1S	0	+	69.543	69.589
13	$2s(^2S)3p$	^1P	1	−	72.043	72.013
14	$2s(^2S)3p$	^3P	0	−	72.179	72.259
15	$2s(^2S)3p$	^3P	1	−	72.183	72.263
16	$2s(^2S)3p$	^3P	2	−	72.190	72.273
17	$2s(^2S)3d$	^3D	1	+	74.547	74.483
18	$2s(^2S)3d$	^3D	2	+	74.548	74.485
19	$2s(^2S)3d$	^3D	3	+	74.550	74.487
20	$2s(^2S)3d$	^1D	2	+	76.387	75.955
21	$2p(^2P_{1/2})3s$	^3P	0	−	81.155	80.952
22	$2p(^2P_{1/2})3s$	^3P	1	−	81.173	80.972
23	$2p(^2P_{3/2})3s$	^3P	2	−	81.211	81.014
24	$2p(^2P_{3/2})3s$	^1P	1	−	83.413	82.386
25	$2p(^2P_{1/2})3p$	^1P	1	+	83.597	83.403
26	$2p(^2P_{1/2})3p$	^3D	1	+	84.237	83.956
27	$2p(^2P_{1/2})3p$	^3D	2	+	84.246	83.981
28	$2p(^2P_{3/2})3p$	^3D	3	+	84.290	84.020
29	$2p(^2P_{3/2})3p$	^3S	1	+	85.209	84.798
30*	$2p(^2P_{1/2})3p$	^3P	0	+	86.124	85.475
31*	$2p(^2P_{3/2})3p$	^3P	1	+	86.127	85.489
32	$2p(^2P_{3/2})3p$	^3P	2	+	86.149	85.513
33	$2p(^2P_{1/2})3d$	^3F	2	−	86.455	85.875
34*	$2p(^2P_{1/2})3d$	^3F	3	−	86.553	85.897
35	$2p(^2P_{3/2})3d$	^3F	4	−	86.593	85.927
36	$2p(^2P_{1/2})3d$	^1D	2	−	86.604	86.125
37*	$2p(^2P_{3/2})3p$	^1D	2	+	87.645	86.438
38	$2p(^2P_{1/2})3d$	^3D	1	−	87.662	87.307
39*	$2p(^2P_{1/2})3d$	^3D	2	−	87.695	87.315
40*	$2p(^2P_{1/2})3d$	^3D	3	−	87.706	87.328
41*	$2p(^2P_{3/2})3p$	^1S	0	+	88.310	87.736
42*	$2p(^2P_{3/2})3d$	^3P	2	−	88.322	87.779
43*	$2p(^2P_{3/2})3d$	^3P	1	−	88.350	87.796
44*	$2p(^2P_{3/2})3d$	^3P	0	−	89.868	87.806
45*	$2p(^2P_{3/2})3d$	^1F	3	−	90.233	88.396
46*	$2p(^2P_{3/2})3d$	^1P	1	−	90.694	89.179

表 2 给出了全部复合和电离系数，同时给出了 Arnaud 等 [10] 的结果. Num 为电子数目，DR 、RR 和 CI 分别为双电子复合、辐射复合和碰撞电离. 温度为 10 的对数，单位凯尔文 (K). 速率系数都是以 $10^{-10}\,\mathrm{cm}^3\,\mathrm{s}^{-1}$ 为单位. 由于我们只计算了 3 个离化态的原子数据，因而，对于电子数为 3 的离子其碰撞电离系数都为零，而文 [10] 给出的结果包括了整个离化体系，这里我们将他的结果列在表中. 同样，对于电子数为 5 的离子，

其复合系数为零，包括双电子复合和辐射复合.

表 2　类铍氧离子总电离及复合系数

Table 2　Total Ionization and Recombination Rate Coefficients Be-like O ions

电子数 Num.	温度 Tem.	双电子复合 DR	双电子复合 DR[10]	辐射复合 RR	辐射复合 RR[10]	碰撞电离 CI	碰撞电离 CI[10]
3	5	2.80E-01	4.12E-01	3.10E-02	3.23E-02	0.00E+00	4.58E-07
3	5.15	2.38E-01	3.33E-01	2.41E-02	2.47E-02	0.00E+00	5.71E-05
3	5.3	1.95E-01	2.62E-01	1.87E-02	1.88E-02	0.00E+00	1.80E-03
3	5.45	1.43E-01	1.98E-01	1.44E-02	1.43E-02	0.00E+00	2.13E-02
3	5.6	1.12E-01	1.43E-01	1.11E-02	1.07E-02	0.00E+00	1.26E-01
3	5.75	8.26E-02	9.88E-02	8.43E-03	8.03E-03	0.00E+00	4.52E-01
3	5.9	5.63E-02	6.64E-02	6.38E-03	5.97E-03	0.00E+00	1.14E+00
3	6.05	3.83E-02	4.39E-02	4.78E-03	4.41E-03	0.00E+00	2.21E+00
3	6.2	2.66E-02	2.90E-02	3.54E-03	3.23E-03	0.00E+00	3.55E+00
3	6.35	1.96E-02	1.91E-02	2.59E-03	2.35E-03	0.00E+00	5.00E+00
3	6.5	1.49E-02	1.25E-02	1.88E-03	1.70E-03	0.00E+00	6.37E+00
3	6.65	1.14E-02	8.10E-03	1.34E-03	1.22E-03	0.00E+00	7.55E+00
3	6.8	8.34E-03	5.16E-03	9.46E-04	8.66E-04	0.00E+00	8.48E+00
4	5	-1.00E-01	3.36E-01	2.08E-02	2.17E-02	2.63E-05	1.90E-05
4	5.15	-7.00E-02	4.01E-01	1.63E-02	1.71E-02	1.36E-03	1.05E-03
4	5.3	-1.00E-02	3.91E-01	1.27E-02	1.35E-02	2.31E-02	1.87E-02
4	5.45	4.00E-02	3.30E-01	9.84E-03	1.07E-02	1.78E-01	1.48E-01
4	5.6	6.00E-02	2.51E-01	7.60E-03	8.37E-03	7.85E-01	6.59E-01
4	5.75	5.00E-02	1.78E-01	5.82E-03	6.56E-03	2.31E+00	1.94E+00
4	5.9	4.70E-02	1.20E-01	4.41E-03	5.13E-03	5.07E+00	4.24E+00
4	6.05	3.50E-02	7.80E-02	3.31E-03	3.99E-03	8.97E+00	7.44E+00
4	6.2	2.50E-02	4.94E-02	2.45E-03	3.10E-03	1.35E+01	1.11E+01
4	6.35	1.80E-02	3.08E-02	1.79E-03	2.40E-03	1.81E+01	1.48E+01
4	6.5	1.20E-02	1.89E-02	1.29E-03	1.84E-03	2.22E+01	1.80E+01
4	6.65	8.10E-03	1.15E-02	9.12E-04	1.41E-03	2.54E+01	2.05E+01
4	6.8	5.30E-03	6.96E-03	6.38E-04	1.07E-03	2.75E+01	2.24E+01
5	5	0.00E+00	3.09E-01	0.00E+00	1.34E-02	2.34E-03	2.94E-03
5	5.15	0.00E+00	3.60E-01	0.00E+00	1.07E-02	4.07E-02	4.99E-02
5	5.3	0.00E+00	3.60E-01	0.00E+00	8.54E-03	3.28E-01	3.88E-01
5	5.45	0.00E+00	3.18E-01	0.00E+00	6.80E-03	1.51E+00	1.71E+00
5	5.6	0.00E+00	2.54E-01	0.00E+00	5.40E-03	4.62E+00	5.05E+00
5	5.75	0.00E+00	1.88E-01	0.00E+00	4.27E-03	1.05E+01	1.11E+01
5	5.9	0.00E+00	1.31E-01	0.00E+00	3.37E-03	1.92E+01	1.96E+01
5	6.05	0.00E+00	8.74E-02	0.00E+00	2.64E-03	2.97E+01	2.95E+01
5	6.2	0.00E+00	5.65E-02	0.00E+00	2.07E-03	4.05E+01	3.94E+01
5	6.35	0.00E+00	3.57E-02	0.00E+00	1.60E-03	5.02E+01	4.81E+01
5	6.5	0.00E+00	2.22E-02	0.00E+00	1.24E-03	5.78E+01	5.47E+01
5	6.65	0.00E+00	1.36E-02	0.00E+00	9.50E-04	6.28E+01	5.97E+01
5	6.8	0.00E+00	8.27E-03	0.00E+00	7.22E-04	6.53E+01	6.20E+01

图 1 和图 2 对不同波长范围的谱线进行细致分析. 图 1 给出 X 射线谱线区域在相同电子温度电子密度下不同模型的结果. 从谱线布局我们明显可见，在 X 射线波段，三离

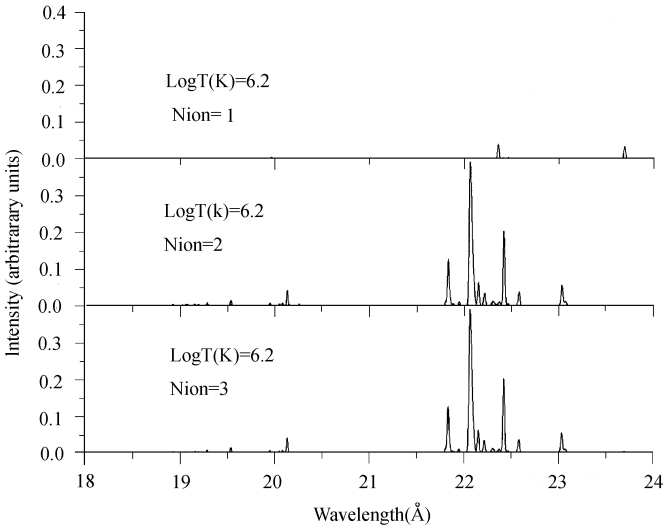

图 1 类铍氧拟合谱 (18—24 埃), 在电子温度为 193 eV 下不同模型得到的谱线, Nion=1,2 和 3 分别代表单、双和三离子模型

Fig. 1 Synthetic spectra of Be-like O ion (18—24 Å) at the electron temperature of 193 eV, Nion=1, 2, and 3 corresponds to one-, two- and three-ion models, respectively

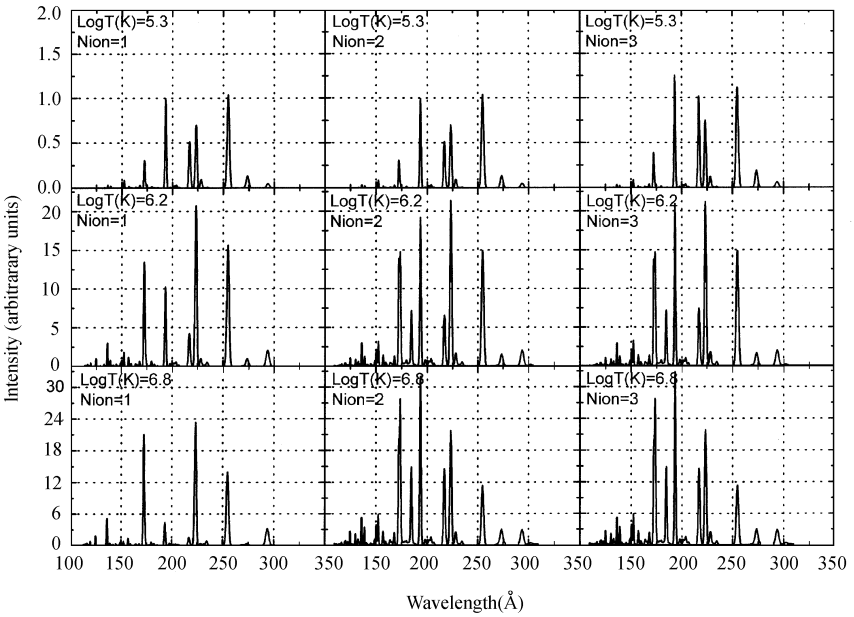

图 2 类类铍氧 EUV 拟合谱 (100—350 埃), 同一行图表示相同温度下不同模型得到的谱线, Nion=1, 2 和 3 分别代表单、双和三离子模型

Fig. 2 Synthetic spectra of Be-like O ions(100-350 Å). Figures in the same row are for the temperature, indicated by the Log T(K). Nion=1, 2, and 3 corresponds to one-, two- and three-ion models, respectively

子和双离子模型得到的谱线要明显多于单离子模型，这样对于等离子体诊断，显然单离子模型不适宜. 图 2 给出了 EUV 区域的结果，我们在确定等离子体密度的情况下，给出了不同电子温度下谱线拟合结果. 从图中我们可以看到， 3 种模型都给出了较为丰富的谱线. 在高温区域，双离子模型和三离子模型给出的谱线较为丰富，而单离子模型得到的谱线不仅在强度上，而且在数量上都要小于和少于前两种模型. 通常我们利用谱线强度比来确定等离子体参数，这样采用不同的模型就会得到不同的结果. 这一点从侧面证明了间接过程对于谱线模拟的重要性.

4 结论

本文对类铍氧离子的 X 射线和 EUV 谱 (18 埃—350 埃) 进行了理论模拟，主要考虑间接过程对靶态离子影响. 速率方程采用包含多离子原子组态的统计平衡方程. 采用 3 种模型进行谱线模拟，分析比较了间接过程对谱线形成的贡献，给出它们的速率系数，结果发现间接过程对谱线的模拟具有重要影响.

参 考 文 献

1 Bailey J, et al. ApJ, 2001a, 548: 966
2 Griem H R, Principles of Plasma Spectroscopy (University of Cambridge Press, London) 1997
3 Laming J M, et al. ApJ, 2000, 545: L161
4 Saba J L, et al. ApJ, 1999, 298: 898
5 Brown G V, et al. ApJ, 2001, 557: L75
6 Gu M F, et al. ApJ, 1999, 559: 1135
7 Peng X Y, et al. PRE, 2004, 69: 026414
8 Gu M F, ApJ, 2003, 582: 1241
9 Lucy L B, MNRAS. 2001, 326: 95
10 Arnaud M, Raymond J. ApJ, 1992, 398: 394

The Simulation of X-ray and EUV Spectra of Be-like O Ions

LIANG Ya-qiong[1] ZHONG Jia-yong[2]

(1 *Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing* 100080)

(2 *National Astronomical Observatories, Chinese Academy of Sciences, Beijing* 100012)

Abstract Taking into account of the none local thermal dynamical equilibrium processes, the X-ray and EUV spectra of Be-like O ions are calculated using the relativistic multi-configuration atomic package FAC. The effects of indirect processes of on the X-ray and EUV spectra of the Be-like O ions are studied. Three models are used to simulate the X-ray and EUV spectra. We find that these indirect processes are important to calculate the X-ray spectra of the Be-like O ions.

Key words atomic data, atomic processes, line: formation