

《高温等离子体诊断》

高温等离子体光谱诊断（第一部分）

张 凌（zhangling@ipp.ac.cn）

等离子体物理研究所

2025年12月15日



光谱波段划分

Spectral Region	Wavelength Region	Energy Region
Near Infrared (IR)	7600-10000Å	1.6-1.2eV
Visible (VIS)	4000-7600Å	3.1-1.6eV
Ultraviolet (UV)	2000-4000Å	6.2-3.1eV
Vacuum Ultraviolet (VUV)	500-2000Å	24.8-6.2eV
Extreme Ultraviolet (EUV)	10-500Å	1240-24.8eV
Soft X-Ray (SX)	1-10Å	12400-1240eV

$$1\text{\AA}=0.1\text{nm}=10^{-10}\text{m}$$

波 长
(单位: 米)
波长大小

波 的 名 称

波 源

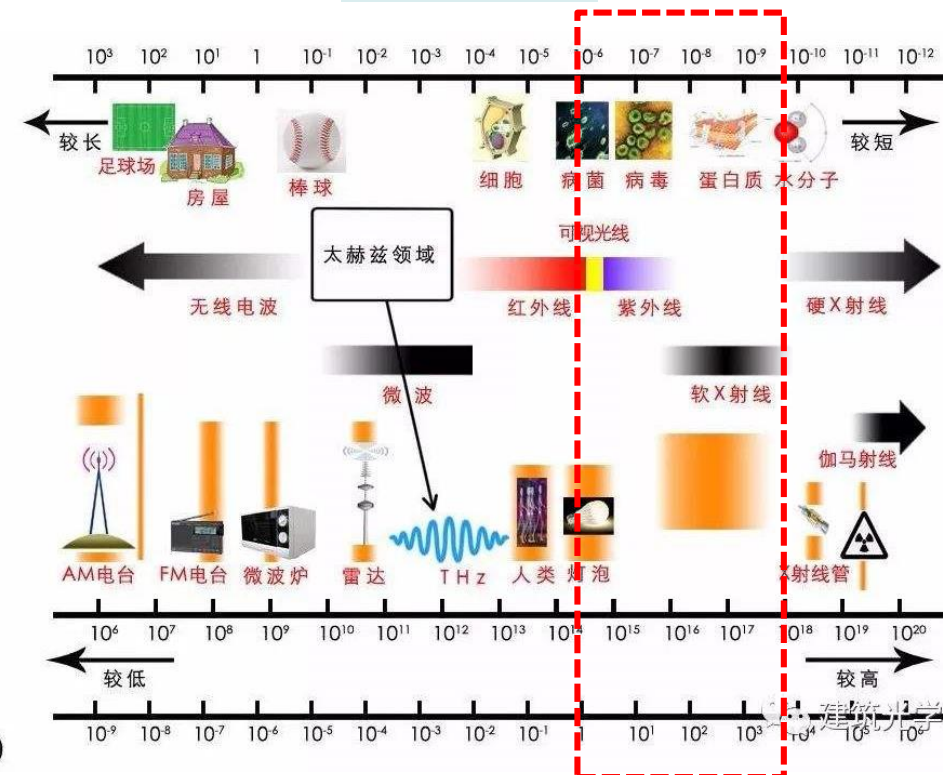
频 率

(单位: 赫兹)

光 子 能 量

(单位: 电子伏特)

电磁波谱

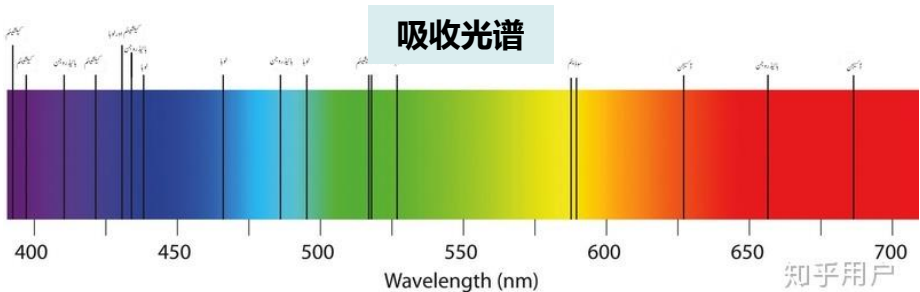


光谱分析（诊断）的定义和分类

光谱分析：根据光谱来识别物质种类及确定它的化学组成和相对含量的方法

光谱诊断：利用等离子体的发射光谱诊断等离子体基本参数

依据	分类	特点
分析原理	发射光谱	发射的电磁辐射形成的光谱
	吸收光谱	电磁辐射穿过物质而产生的光谱，在光谱上显示暗线
被测成分的形态	原子光谱	中性原子和离子特征线辐射
	分子光谱	分子绕轴的转动、分子中原子在平衡位置的振动和分子内电子的跃迁
是否借助于主动手段 (中性束、激光、充气等)	被动光谱	沿观测弦的积分测量
	主动光谱	诊断结果具有局域性



- 1. 等离子体光谱诊断中的原子物理**
- 2. 磁约束聚变等离子体中的光谱诊断**

1. 等离子体光谱诊断中的原子物理

- 氢原子的结构、能级、光谱
- 类氢原子的能级、光谱
- 外场对原子结构、光谱的影响
- 等离子体简化模型
- 原子光谱在等离子体诊断中的应用
- 允许跃迁与禁戒跃迁

2. 磁约束聚变等离子体中的光谱诊断

玻尔氢原子理论

1. **定态假设**：电子绕核作圆周运动时，只在某些特定的轨道上运动，有加速度，但不向外辐射能量，每一个轨道对应一个定态，与一定的能量对应；

2. **角动量量子化假设**：电子处于上述定态时，角动量 $L = mvr$ 是量子化的。即：

$$2\pi r \cdot mv = 2\pi \cdot mvr = nh \quad n=1, 2, 3, \dots$$

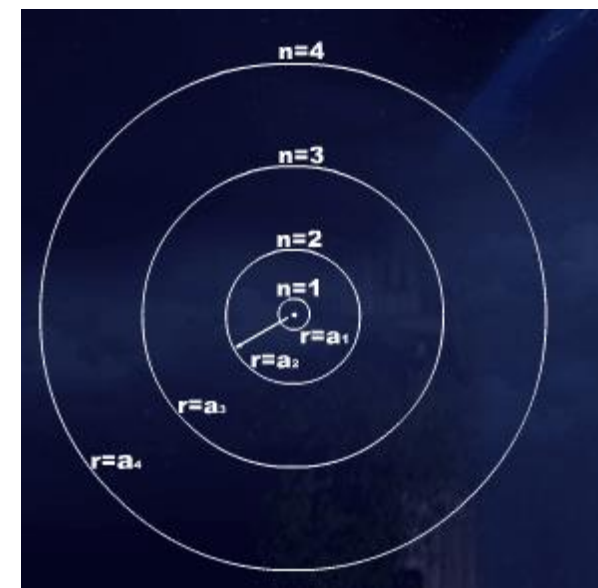
电子轨道运动的“角动量 \times 圆周周长 / 半径”，电子在一个轨道周期内的角动量累积量

n 是主量子数（取正整数 1、2、3...）， h 是普朗克常量（ $h \approx 6.626 \times 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$ ）

3. **频率条件**：电子并不永远处于一个轨道上，当它吸收或放出能量时，会在不同轨道间发生跃迁，跃迁前后的能量差满足频率法则：

$$h\nu = E_2 - E_1$$

根据上述三条基本假设，玻尔建立了原子结构模型，并成功地解释了氢光谱的实验事实。



量子化轨道半径

假设电子在特定轨道上绕核作圆周运动，设核的电量为 Ze （氢原子： $Z=1$ ）。若核固定不动，电子绕核作匀速圆周运动，由牛顿第二定律，电子所受库仑力提供作圆周运动向心力，即：

$$\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} = m \frac{v^2}{r} \quad r = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{mv^2}$$

代入量子化条件 $L = mvr = n\hbar$ 其中 $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ 叫约化普朗克常量

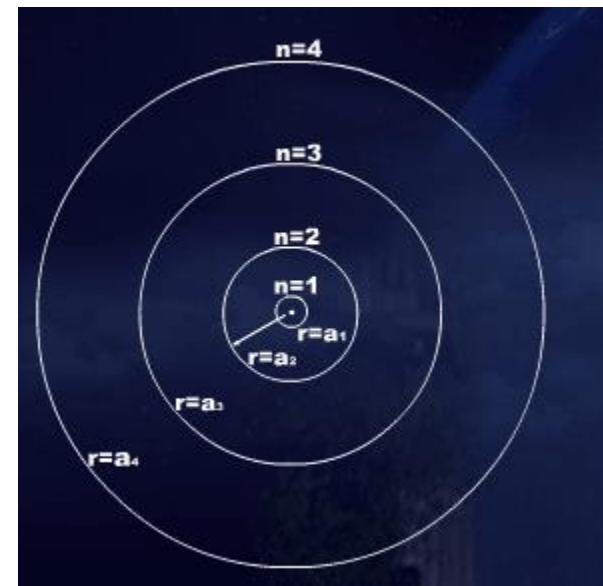
解得 $v_n = \frac{nh}{2\pi mr}$

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{4\pi^2 m Z e^2}$$

令 $a_1 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{4\pi^2 m e^2}$ 代入常数得 $a_1 = 0.529177 \text{ \AA}$

$$r = a_1 \frac{n^2}{Z} \quad \text{轨道是量子化的}$$

对于H, $Z=1$, 可能的轨道半径 $r = a_1, 4a_1, 9a_1, \dots$



量子化能量

电势能为负值（电子被原子核束缚）

量子化的能量: $E = \frac{1}{2}mv^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{2r} \leftarrow \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r^2} = m \frac{v^2}{r}$

$$E = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{ze^2}{2r} = -\frac{2\pi^2 me^4 z^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 n^2 h^2}, n = 1, 2, 3, 4, \dots$$

氢原子的总能量为负值（对应束缚态），
能量大小与轨道半径成反比——轨道半径越小，能量越低（更稳定）

当 $n=1$ ， $Z=1$ 时，就是基态氢原子能量

$$E_1 = -13.6\text{eV}$$

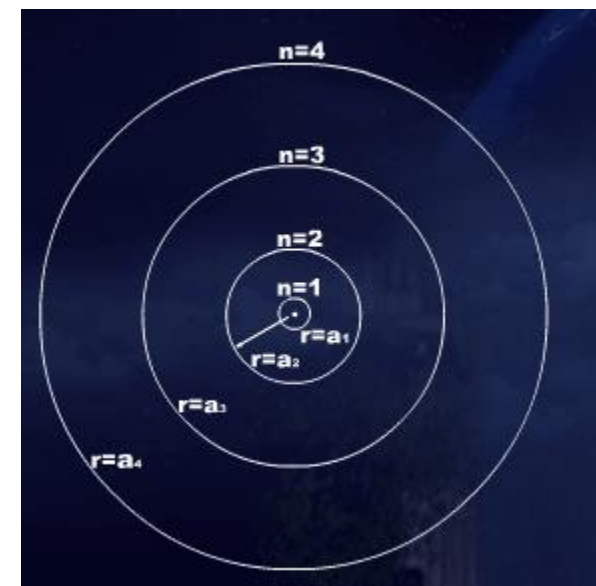
氢原子电离能 13.6eV

加入相对论效应的修正项，包括质量修正：

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$$

速度修正：

$$T = m_0 c^2 \left[\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} - 1 \right]$$



氢原子的能级、光谱

1. $E_2 \rightarrow E_1$ 跃迁，发出光子：

$$h\nu = E_2 - E_1 = \frac{2\pi^2 me^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 h^2} Z^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) = h \frac{c}{\lambda} = hc \tilde{\nu}$$

$$\tilde{\nu} = \frac{2\pi^2 me^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 h^3 c} Z^2 \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right) \quad \text{令: } R = \frac{2\pi^2 me^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 h^3 c}$$

里德伯公式

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

R 为里德堡常数 (Rydberg constant)

当原子核质量远大于电子质量 (可视为静止) 时， R_∞ 的理论值为： $R_\infty = \frac{me^4}{8\epsilon_0^2 h^3 c} \approx 1.0973731568508 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$

由于原子核实际有质量 M ，需考虑原子核的运动 (电子与原子核绕质心运动) ，
对 R_∞ 修正 $R_M = R_\infty \cdot \frac{M}{M+m}$

$$R_H \approx 1.0967758 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$$

2. 光谱项

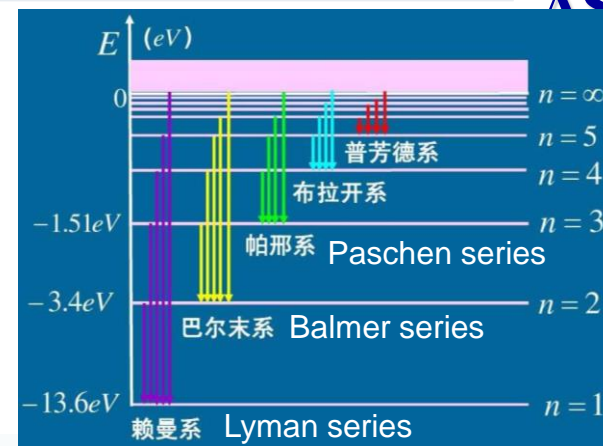
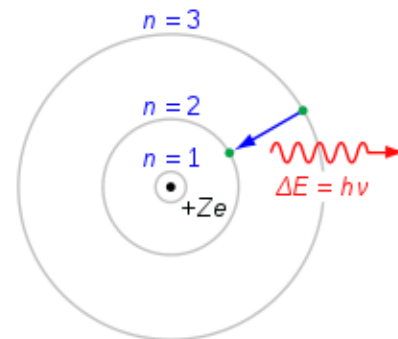
$$T = \frac{R}{n^2} \quad E = -hcT = -\frac{hcR}{n^2}$$

氢原子的能级、光谱

3. 氢原子的轨道和能级

轨道半径 $r_n = a_1 n^2$ 轨道能级 $E_n = E_1 \cdot \frac{Z^2}{n^2}$

即轨道半径是量子化的，能量是量子化的



H_α line (6563 Å) is the first line (3→2) of the Balmer series for hydrogen (Z=1), which result from an electron jump between the second energy level closest to the nucleus and those levels more distant (n→2).

Transition of n	3→2	4→2	5→2	6→2	7→2	8→2	9→2	∞→2
Name	H-α / Ba-α	H-β / Ba-β	H-γ / Ba-γ	H-δ / Ba-δ	H-ε / Ba-ε	H-ζ / Ba-ζ	H-η / Ba-η	Balmer break
Wavelength (nm)	656.45377 ^[2]	486.13615 ^[3]	434.0462 ^[3]	410.174 ^[4]	397.0072 ^[4]	388.9049 ^[4]	383.5384 ^[4]	364.6
Energy difference (eV)	1.89	2.55	2.86	3.03	3.13	3.19	3.23	3.40
Color	Red	Aqua	Blue	Violet	(Ultraviolet)	(Ultraviolet)	(Ultraviolet)	(Ultraviolet)

氢同位素（氕、氘）原子的里德堡常数稍有不同，原子光谱波长有差别

$$\frac{R_M}{R_H} = \frac{\frac{M}{M+m}}{\frac{m_p}{m_n+m}} = \frac{M(m_p+m)}{m_p(M+m)}$$

光谱符号	D _α	D _β	D _γ	D _δ
λ (nm)	656.1063	486.0000	433.9377	410.0621

$$\frac{R_D}{R_H} \approx 1 + \frac{m}{2m_p} \approx 1.000272$$

$$\frac{R_T}{R_H} = \frac{3m_p(m_p+m)}{m_p(3m_p+m)} = \frac{3(m_p+m)}{3m_p+m} \approx 1 + \frac{m}{3m_p} \approx 1.000182$$

$$\frac{1}{\lambda} = R \left(\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right)$$

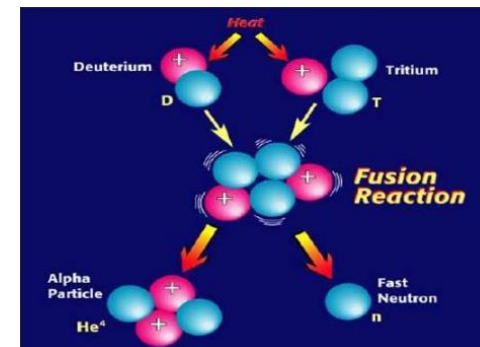
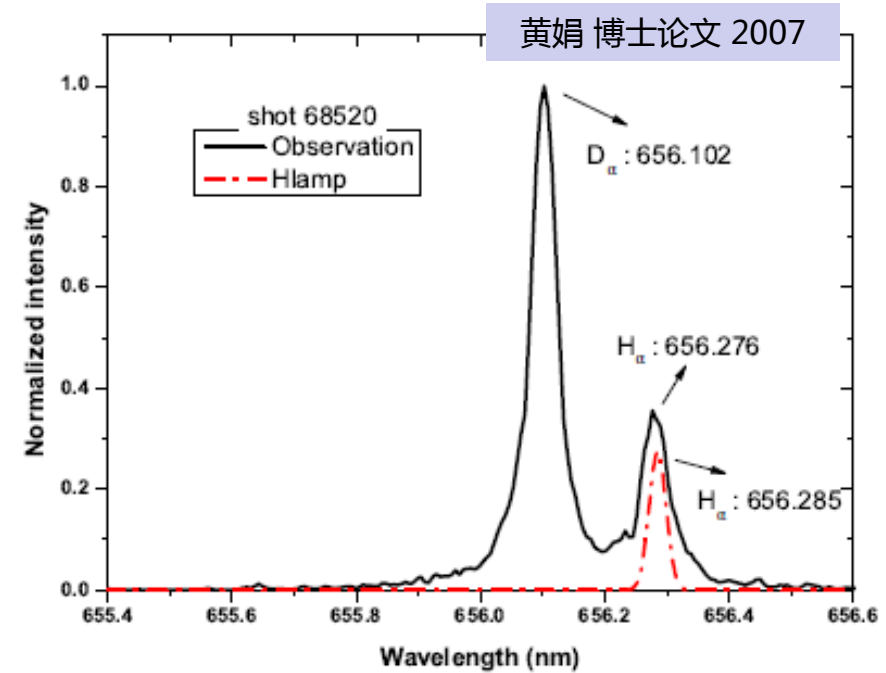
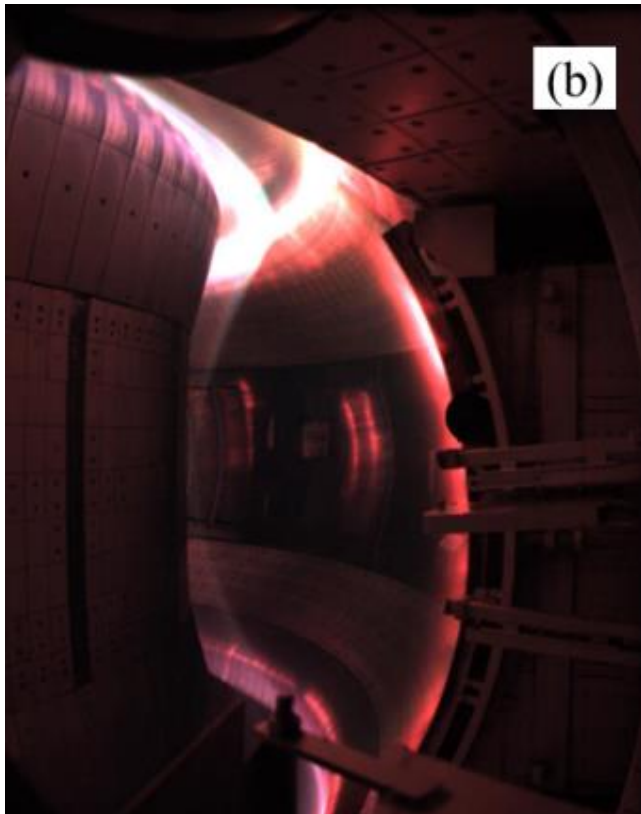
✓ 氕的巴尔末系波长 T_α, T_β, T_γ, T_δ ??

✓ 氢、氘原子的赖曼系波长 ??

类氢原子的里德堡常数 $R_{M,Z} = R_\infty \cdot \frac{Z^2 M}{M+m}$

氘（氢）原子光谱

光谱符号	D _α	D _β	D _γ	D _δ
λ (nm)	656.1063	486.0000	433.9377	410.0621

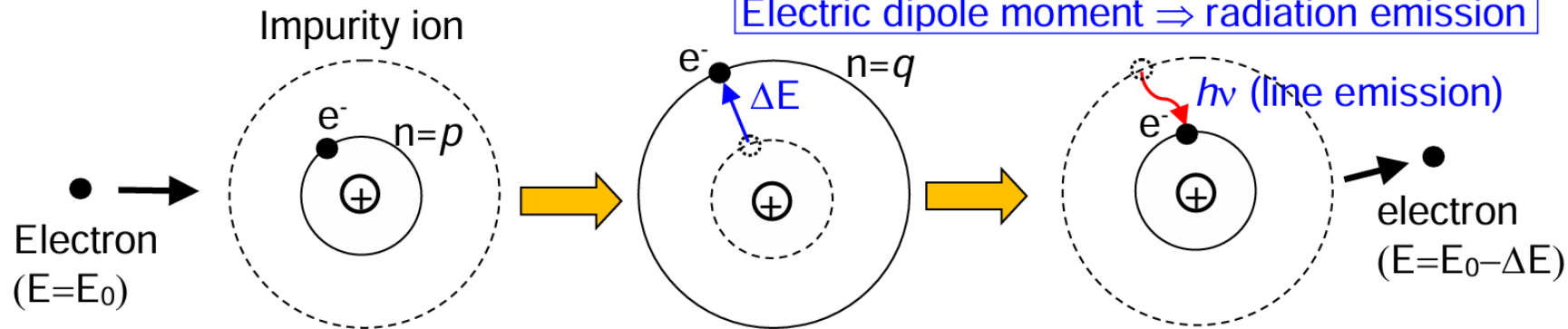


What is spectral line?

- Spectrum emitted after electron impact excitation (n: principal quantum number, e^- : orbital electron)

Key issue:
Line radiation emitted by $\tilde{\mathbf{E}} \times \tilde{\mathbf{B}}$ force

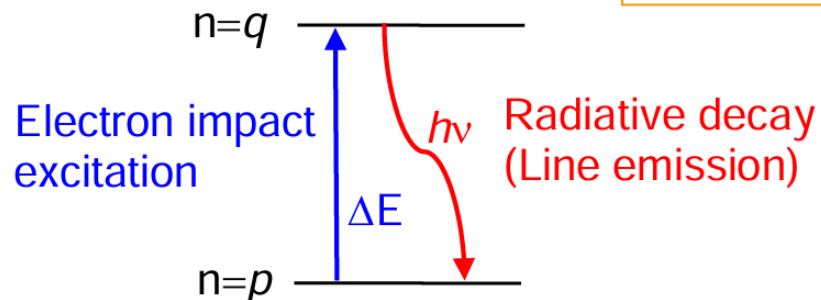
Electric dipole moment \Rightarrow radiation emission



Electron collides with impurity ion.

Orbital electron of impurity ion is excited from lower level ($n=p$) to upper level ($n=q$).

After life time (inverse of spontaneous transition probability $A[s^{-1}]$, e.g. $10^{-8} \sim 10^{-6}s$) orbital electron at $n=q$ decays to $n=p$ with emitting a spectral line.



$$\Delta E = h\nu = hc/\lambda$$

$$\lambda [\text{\AA}] = 1.24 \times 10^3 / \Delta E [\text{eV}]$$

Specific words needed for spectroscopy

- Spectroscopic symbols

Hydrogen atom

- H α : Balmer series n=3-2 transition at 6562.8Å
- H β : Balmer series n=4-2 transition at 4861.3Å
- Ly α : Lyman series n=2-1 transition at 1216Å
- Ly β : Lyman series n=3-1 transition at 1025Å

Wavelength (H-like atom/ion)

$$1/\lambda = R(1/n_1^2 - 1/n_2^2)$$

R: Rydberg constant= $1.097 \times 10^7 \text{ m}^{-1}$

n_1 : upper level, n_2 : lower level

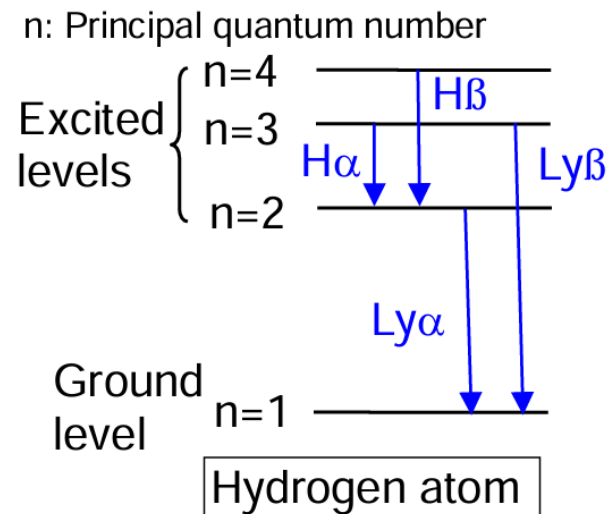
Symbol of impurity line (not charge state)

- CI: spectral line emitted from neutral carbon atom
- CVI: spectral line emitted from C $^{5+}$ ion
- CVII: **not existing!** (C $^{6+}$ ion has no line emission)
- WXLVI: spectral line emitted from W $^{45+}$ ion (line from W $^{45+}$)

Isoelectric sequence: ions with same orbital electron number

H-like ion: C $^{5+}$, W $^{73+}$, He-like ion: C $^{4+}$, W $^{72+}$,

Li-like ion: C $^{3+}$, W $^{71+}$ (W $^{64+}$: Ne-like ion, W $^{45+}$: Cu-like ion)



Key issue:

n_H : H density [cm^{-3}]

$n_H(n)$: H population at n level [cm^{-3}]

$$n_H = \sum_n n_H(n)$$

$$n_H(n=1) \gg n_H(n \geq 2)$$

$$n_H \cong n_H(n=1)$$

量子数

钨（Tungsten, W, Z=74）

$W^{0+} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^6$

$W^{6+} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6$

量子数名称	符号	取值规则	物理意义	对应原子结构层面
主量子数	n	正整数, $n=1, 2, 3, 4, \dots$ (已知元素最大 $n=7$)	1. 决定电子所处的 电子层（能层） 2. 主导电子的能量高低（多电子原子中与 l 共同决定） 3. 决定电子层最大容纳电子数 $2n^2$	电子层（K、L、M、N...）
轨道角量子数	l	取决于 n , $l=0, 1, 2, \dots, (n-1)$, 共 n 个取值	1. 决定电子所处的 电子亚层（能级） 2. 影响多电子原子中电子的能量 3. 决定电子云的 形状 （如 $l=0$ 为球形 s 轨道, $l=1$ 为哑铃形 p 轨道）	电子亚层（ s 、 p 、 d 、 f ...） $E_{3s} < E_{3p} < E_{3d}$ $E_{2p} < E_{3p} < E_{4p}$
磁量子数	m	取决于 l , $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$, 共 $2l+1$ 个取值	1. 决定电子云在空间中的 伸展方向 2. 同一亚层中, 不同 m 对应能量相同的等价轨道（如 p 亚层有 $m=0, \pm 1$ 三个等价轨道）	轨道的空间方向
自旋量子数	s	仅取两个值： $+2/1$ 或 $-2/1$	描述电子自身的 自旋运动状态 , 自旋方向分为顺时针和逆时针 泡利不相容原理：同一原子中, 四个量子数完全相同的电子不存在	电子的自旋方向

- 四个量子数结合起来, 可唯一确定原子中一个电子的运动状态。
- 对于氢原子这类单电子体系, 电子能量仅由主量子数 n 决定; 多电子原子中, 电子能量由 n 和 l 共同决定。

氢原子电子的能量 $E_n = -\frac{13.6}{n^2} \text{ eV}$

主量子数

主量子数 n	1	2	3	4	5	6	7
电子层符号	K	L	M	N	O	P	Q

$W^{0+} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^6$

$W^{6+} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6$

每个电子层能容纳的最大电子数遵循公式： $2n^2$ 。

例如：

- $n = 1$ (K层)：最多容纳 $2 \times 1^2 = 2$ 个电子
- $n = 2$ (L层)：最多容纳 $2 \times 2^2 = 8$ 个电子
- $n = 3$ (M层)：最多容纳 $2 \times 3^2 = 18$ 个电子

主量子数 n 决定了角量子数 l 的取值范围：

角量子数 l 描述电子亚层（能级），其取值为 $0, 1, 2, \dots, (n - 1)$ ，共 n 个取值。

- 当 $n = 1$ 时， l 只能取 0 → 对应 **1s** 亚层
- 当 $n = 2$ 时， l 可取 0、1 → 对应 **2s、2p** 亚层
- 当 $n = 3$ 时， l 可取 0、1、2 → 对应 **3s、3p、3d** 亚层

轨道角量子数

$$l = 0, 1, 2, \dots, (n - 1)$$

每一个 l 值对应一个电子亚层，并用特定的字母标记，

角量子数 l	0	1	2	3	4
电子亚层符号	s	p	d	f	g

每个电子亚层能容纳的最大电子数，由角量子数 l 对应的轨道数决定：

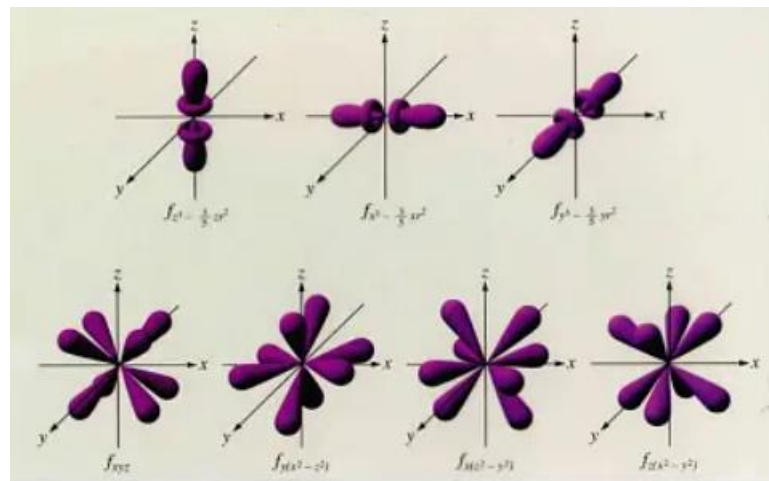
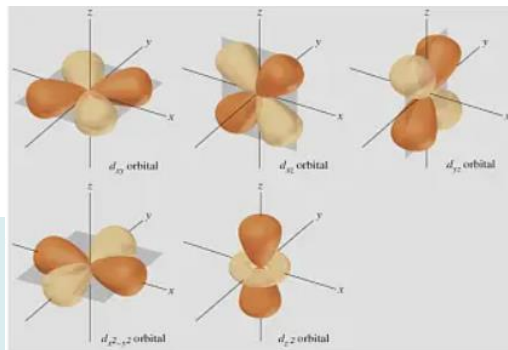
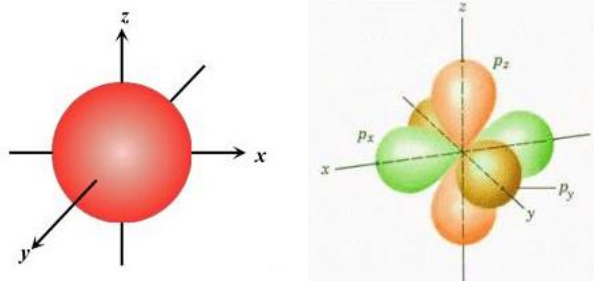
- 每个亚层的轨道数 = $2l + 1$
- 每个轨道最多容纳 2 个自旋相反的电子
- 因此，单个亚层最大电子数 = $2(2l + 1)$

举例： $l = 1$ (p 亚层) \rightarrow 轨道数 = $2 \times 1 + 1 = 3 \rightarrow$ 最大电子数 = $3 \times 2 = 6$

1. 决定电子云的空间形状

不同 l 值对应的电子云具有截然不同的几何形状，这是角量子数最直观的意义

- $l = 0$ (s 亚层)：电子云呈球形对称，原子核位于球心
- $l = 1$ (p 亚层)：电子云呈哑铃形，有 3 个相互垂直的伸展方向
- $l = 2$ (d 亚层)：电子云呈花瓣形，有 5 个伸展方向
- $l = 3$ (f 亚层)：电子云形状更复杂，有 7 个伸展方向



$W^{0+} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^6$

$W^{6+} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6$

磁量子数的物理意义最初是在外磁场作用下被发现的——外磁场会使简并轨道发生能级分裂（塞曼效应），不同 m 对应的轨道会表现出微小的能量差异，这也是其名称的由来

磁量子数的取值完全由角量子数 l 决定，取值范围为：

$$m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$$

磁量子数的取值个数为 $2l + 1$ 个，每一个取值对应电子亚层中一个轨道的空间方向。

- 当 $l = 0$ (s 亚层) : m_l 只能取 0 → 仅 1 个轨道，电子云呈球形对称，无方向差异
- 当 $l = 1$ (p 亚层) : m_l 可取 0, +1, -1 → 共 3 个轨道，对应沿 x 、 y 、 z 轴的 3 个伸展方向 (标记为 p_x 、 p_y 、 p_z)
- 当 $l = 2$ (d 亚层) : m_l 可取 0, ± 1 , ± 2 → 共 5 个轨道，对应 5 种不同的花瓣形空间伸展方向
- 当 $l = 3$ (f 亚层) : m_l 可取 0, ± 1 , ± 2 , ± 3 → 共 7 个轨道，空间形状更复杂

$W^{0+} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6 5d^6$

$W^{6+} : 1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 4s^2 4p^6 4d^{10} 4f^{14} 5s^2 5p^6$

电子的自旋是一种内禀属性（类似粒子的固有角动量），并非电子真的在绕自身轴旋转。两种自旋状态的电子会产生方向相反的自旋磁矩，这也是磁场能影响电子运动的原因之一。

泡利不相容原理指出：**同一原子中，不可能存在四个量子数完全相同的两个电子。**

这意味着：

- 同一轨道 (n 、 l 、 m_l 均相同) 中，最多只能容纳 **2 个电子**
- 这 2 个电子的自旋量子数必须相反 (一个 $m_s = +1/2$ ，一个 $m_s = -1/2$)

例如，1s 轨道最多容纳 2 个电子，自旋状态为 $1\uparrow$ 。

自旋量子数的取值**不受主量子数 n 、角量子数 l 、磁量子数 m_l 的限制**，仅存在两个固定取值：

$$m_s = +\frac{1}{2} \text{ 或 } -\frac{1}{2}$$

这两个取值分别对应电子的两种自旋方向，通常形象化描述为 **顺时针自旋** 和 **逆时针自旋**，也可标记为 “ \uparrow ” 和 “ \downarrow ”。

L-S 耦合与 $j - j$ 耦合

- 两个电子组态构成不同原子态时有六种相互作用：
 - 电子之间的自旋 - 自旋相互作用 $G1 (s1, s2)$
 - 电子之间的轨道 - 轨道相互作用 $G2 (l1, l2)$
 - 自身的轨道 - 自旋相互作用 $G3 (l1, s1), G4 (l2, s2)$
 - 电子之间的轨道 - 自旋相互作用 $G5 (l1, s2), G6 (l2, s1)$
- 一般来说, $G5 (l1, s2), G6 (l2, s1)$ 比较弱, 可以忽略。

$$J = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2$$

$$G_1 (s_1, s_2), G_2 (l_1, l_2) \gg G_3 (l_1, s_1), G_4 (l_2, s_2) \quad \text{耦合方式称为 L-S 耦合} \quad \vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2, \quad \vec{L} = \vec{L}_1 + \vec{L}_2, \quad \vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \quad 2S+1 L_J$$

$$G_1 (s_1, s_2), G_2 (l_1, l_2) \ll G_3 (l_1, s_1), G_4 (l_2, s_2) \quad \text{耦合方式称为 } j - j \text{ 耦合} \quad \vec{J}_1 = \vec{L}_1 + \vec{S}_1, \quad \vec{J}_2 = \vec{L}_2 + \vec{S}_2, \quad \vec{J} = \vec{J}_1 + \vec{J}_2 \quad (\vec{J}_1, \vec{J}_2)_J$$

$$j_i \text{ 的取值为 } j_i = l_i + \frac{1}{2} \text{ 或 } j_i = |l_i - \frac{1}{2}| \quad \vec{J} = \vec{j}_1 + \vec{j}_2 + \dots + \vec{j}_n \quad J = |j_1 - j_2|, |j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2$$

- 原子光谱项的类型实质上是原子内部几种相互作用强弱不同的表现
- $L-S$ 耦合和 $j - j$ 耦合是两个极端情况
- 有些能级类型介于二者之间, 只有程度的差别
- $j - j$ 耦合一般出现在高激发态和较重的原子中

一、LS 耦合 (Russell-Saunders Coupling)

1. 适用条件

适用于 **轻原子** (原子序数 $Z \leq 30$, 如氢、氧、镁等), 这类原子中:

- 电子间的**轨道 - 轨道相互作用**和**自旋 - 自旋相互作用**较强;
- 单个电子的**轨道 - 自旋相互作用**较弱。

2. 耦合规则

耦合过程遵循“先合轨道, 再合自旋, 最后轨道总角动量与自旋总角动量耦合”的顺序:

二、JJ 耦合 (jj Coupling)

1. 适用条件

适用于 **重原子** (原子序数 $Z \geq 50$, 如汞、铅、铀等), 这类原子中:

- 单个电子的**轨道 - 自旋相互作用** (自旋 - 轨道耦合) 较强;
- 电子间的**轨道 - 轨道、自旋 - 自旋相互作用**较弱。

2. 耦合规则

耦合过程遵循“先单个电子内轨道 - 自旋耦合, 再不同电子总角动量耦合”的顺序:

多电子LS耦合的原子光谱项符号

每个电子的**主量子数** n ，不同 n 值确定电子的不同壳层

主量子数 n	1	2	3	4	5	6	7
电子层符号	K	L	M	N	O	P	Q

总轨道角动量量子数 L ，各个电子的轨道角动量矢量和。内层（满壳层）电子的总轨道角动量矢量和为0，因此主要是最外壳层（非满层）电子的贡献，大于等于0的整数。

用字母表示不同 L 值的量子态。

$$L = l_1 + l_2 + \cdots + l_n$$

总自旋角动量量子数 S ，各个电子的自旋角动量（ S ）矢量和。 s 值固定为 $1/2$ ， S 值等于 n_s/s ， n_s 是包括零在内的正整数，但必须小于最外层（非满层）的电子数。由于电子有正负自旋配对的倾向， n_s 常是小的数目。 S 值决定了光谱项的多重态的数目（ $S=0$ 单重态， $S=1$ 对应三重态）。 $m=2S+1$

$$S = s_1 + s_2 + \cdots + s_n$$

总角动量量子数 J ，在LS耦合下，是 L 、 S 的矢量和，取值范围为 $L+S \leq J \leq |L-S|$ 。

J 值决定光谱项的统计权重 $g=2J+1$

$$J = L + S$$

- $L \geq S$ ， J 值可能的个数是 $2S+1$
- $L \leq S$ ， J 值可能的数目是 $2L+1$

原子的总磁矩由总角动量决定，而总磁矩是原子在磁场中产生能级分裂（塞曼效应）的根源， J 值不同，塞曼分裂的谱线数量和间距也不同

宇称：表示光谱项的特征，表示各个电子轨道角动量 l 的标记的奇偶性

LS 耦合的原子光谱项表示为： $^{2S+1}L_J$

$$2p^3 \quad 4S^0_{3/2}$$

- 2 代表外层电子的主量子数，这里 $n=2$ ，是L层电子
- p^3 说明有三个外层电子，他们的轨道角动量量子数均是 $l=1$
- 4 表示光谱项的多重相，这里 $m=4$ ，所以 $S=3/2$
- S 说明总轨道角动量 $L=0$
- $3/2$ 代表 $J=3/2$ ，因此统计权重 $g=2J+1=4$
- 0 说明该光谱项是奇宇称；当偶宇称时，略去上标

碳原子的基态电子组态为 $1s^2 2s^2 2p^2$

光谱项为 ???

L-S 耦合与 $j - j$ 耦合

LS 耦合		JJ 耦合
适用原子	轻原子 ($Z \leq 30$)	重原子 ($Z \geq 50$)
主导相互作用	电子间轨道 - 轨道、自旋 - 自旋作用	单电子内轨道 - 自旋作用
耦合顺序	先合轨道总角动量 L 、自旋总角动量 S , 再合 J	先合单电子总角动量 j_i , 再合总 J
光谱项形式	$2S+1L_J$	$(j_1 j_2 \dots)_J$
能级分裂特征	同一电子组态分裂为不同多重度的谱项 , 精细结构由 J 决定	同一电子组态分裂为不同 j_i 组合的谱项 , 能级间距由自旋 - 轨道耦合强度决定

对于 **中等原子序数** ($30 < Z < 50$, 如铁、铜等) 的原子 , 两种相互作用强度相当 , 既不满足纯 LS 耦合 , 也不满足纯 JJ 耦合 , 需要用混合耦合模型分析

多电子LS耦合的选择定则及波函数描述



每个电子的主量子数 n

总的轨道角动量量子数 L

总的自旋角动量量子数 S

总角动量量子数 J

多电子 L-S 耦合的选择定则

	电偶极(E1)	磁偶极(M1)	电四极 (E2)
1	$\Delta J = 0, \pm 1$ ($0 \leftarrow \rightarrow 0$)	$\Delta J = 0, \pm 1$ ($0 \leftarrow \rightarrow 0$)	$\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2$ ($0 \leftarrow \rightarrow 0; 0 \leftarrow \rightarrow 1;$ $1/2 \leftarrow \rightarrow 1/2$)
2	$\Delta M = 0, \pm 1$	$\Delta M = 0, \pm 1$	$\Delta M = 0, \pm 1, \pm 2$
3	宇称改变	宇称不变	宇称不变
4	$\Delta l = \pm 1$	$\Delta l = 0, \Delta n = 0$	$\Delta l = 0, \pm 2$
5	$\Delta S = 0$	$\Delta S = 0$	$\Delta S = 0$
6	$\Delta L = 0, \pm 1$ ($0 \leftarrow \rightarrow 0$)	$\Delta L = 0$	$\Delta L = 0, \pm 1, \pm 2$ ($0 \leftarrow \rightarrow 0; 0 \leftarrow \rightarrow 1$)

多电子原子的结构比较复杂，一般不能求得其精确的解析解，只能通过数值计算求解其近似解。

原子的波函数： $H\Psi_k = E_k\Psi_k$

原子体系的哈密顿量： $H = \sum_i h_D(i) + \sum_{i<j}^N \frac{1}{r_{ij}}$

中心力场近似下，根据微扰理论：

$$H = H_0 + H' \quad H_0 = \sum_i [h'_D + V^{ee}(r_i)] \quad H' = -\sum_i V^{ee}(r_i) + \sum_{i<j} \frac{1}{r_{ij}}$$

中心力场下，单电子满足狄拉克方程： $h'_D\varphi_{n\kappa m} = \varepsilon_{n\kappa}\varphi_{n\kappa m}$

单电子波函数可表示为： $\varphi_{n\kappa m} = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{n\kappa}\chi_{\kappa m}(\theta, \phi, \sigma) \\ iQ_{n\kappa}\chi_{-\kappa m}(\theta, \phi, \sigma) \end{pmatrix}$

自旋球谐波函数： $\chi_{\kappa m}(\theta, \phi, \sigma) = \sum_{m_\ell, m_s} C\left(\ell \frac{1}{2} m_\ell m_s; jm\right) Y_{\ell m_\ell}(\theta, \phi) \chi_s^m(\sigma)$

通过组态波函数的线性组合得到原子态波函数： $\Psi_k = \sum_i b_{ki}\Phi_i$

混合系数满足归一化条件： $\sum_i b_{ki}^2 = 1$

对角化： $H\Psi_k = E_k\Psi_k$

哈密顿矩阵元： $H_{ij} = \langle \Psi_i(\gamma JM) | H | \Psi_j(\gamma JM) \rangle$

跃迁矩阵元的定义： $\langle \psi_b | \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \hat{\mathbf{E}} \cdot \nabla | \psi_a \rangle$

允许跃迁与禁戒跃迁

多电子 L-S 耦合的选择定则

	电偶极(E1)	磁偶极(M1)	电四极 (E2)
1	$\Delta J = 0, \pm 1$ ($0 \leftarrow \rightarrow 0$)	$\Delta J = 0, \pm 1$ ($0 \leftarrow \rightarrow 0$)	$\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2$ ($0 \leftarrow \rightarrow 0; 0 \leftarrow \rightarrow 1;$ $1/2 \leftarrow \rightarrow 1/2$)
2	$\Delta M = 0, \pm 1$	$\Delta M = 0, \pm 1$	$\Delta M = 0, \pm 1, \pm 2$
3	宇称改变	宇称不变	宇称不变
4	$\Delta l = \pm 1$	$\Delta l = 0, \Delta n = 0$	$\Delta l = 0, \pm 2$
5	$\Delta S = 0$	$\Delta S = 0$	$\Delta S = 0$
6	$\Delta L = 0, \pm 1$ ($0 \leftarrow \rightarrow 0$)	$\Delta L = 0$	$\Delta L = 0, \pm 1, \pm 2$ ($0 \leftarrow \rightarrow 0; 0 \leftarrow \rightarrow 1$)

含时薛定谔方程

$$i\hbar \frac{\partial \Psi_k}{\partial t} = H_0 \Psi_k \quad (1)$$

$$\Psi_k = \psi_k(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{iE_k t}{\hbar}\right) \quad (2)$$

跃迁矩阵元定义为

$$\langle \psi_b | \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \hat{\mathcal{E}} \cdot \nabla | \psi_a \rangle \quad (3)$$

$$\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = 1 + (i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) + \frac{1}{2!} (i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})^2 + \dots \quad (4)$$

$$E = h\nu = \hbar\omega$$

$$\mathbf{p} = \frac{h}{\lambda} \mathbf{n} = \hbar \mathbf{k}$$

禁戒跃迁

$$e_{k\rho} \cdot \mathbf{p} \quad ie_{k\rho} \cdot \mathbf{p} \mathbf{k} \cdot \mathbf{r} = \frac{1}{2} ie_{k\rho} \cdot (\mathbf{p}\mathbf{r} - \mathbf{r}\mathbf{p}) \cdot \mathbf{k} + \frac{1}{2} ie_{k\rho} \cdot (\mathbf{p}\mathbf{r} + \mathbf{r}\mathbf{p}) \cdot \mathbf{k}$$

电偶极 (E1)

磁偶极 (M1)

电四极 (E2)

允许跃迁 $\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} \ll 1$

禁戒跃迁

Specifics of M1 lines

◆ Allowed transition

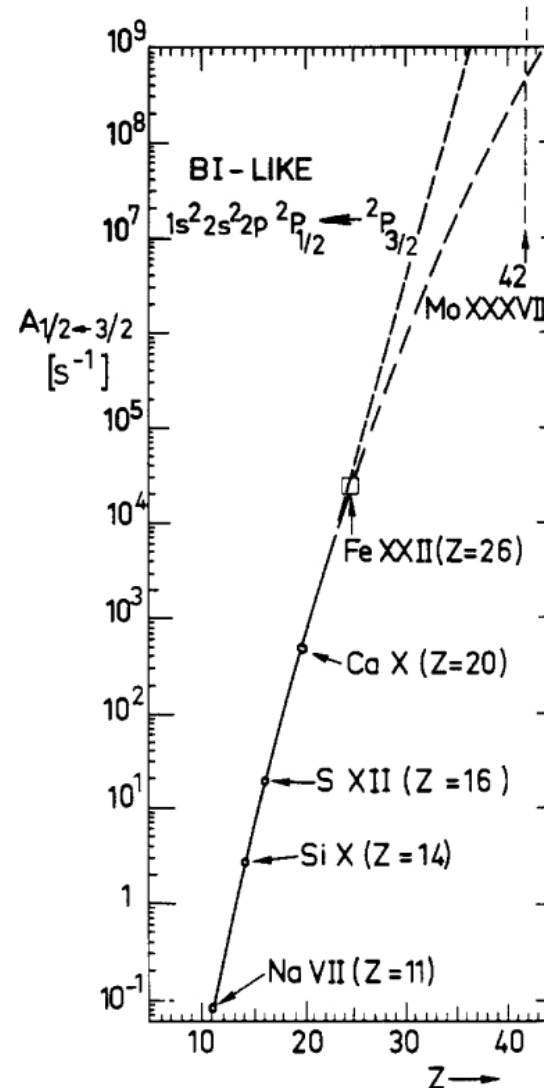
- Electrical dipole (E1: $\Delta l = \pm 1$)

◆ Forbidden transition

- Magnetic dipole (M1: $\Delta n = 0$ and $\Delta l = 0$)
- Electric quadrupole (E2: $\Delta l = 0, \pm 2$)

Specific character of M1 lines

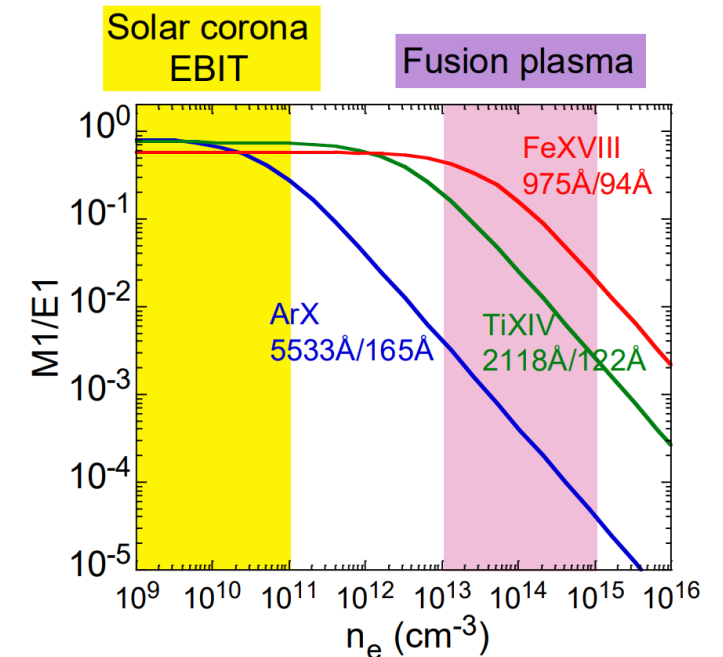
- The wavelength of M1 transition is much longer than E1 transition
 - λ becomes constant in **visible range** for the Ti-like M1 transition for $Z > 50$
 - Easy to observe: Doppler shift \rightarrow ion temp.
- Important for high Z impurities
 - Transition probability, A , quickly increase with Z , e. g. $A \propto Z^{10}$
 - Intensity largely increases for high-Z ions
 - Intensity depend on electron density.



Transition rate of B-like M1 line
($1s^2 2s^2 2p^2 P_{3/2} \rightarrow 2p^2 P_{1/2}$)

Z	Ion	A [s^{-1}]
11	NaVII	8×10^{-2}
16	SXII	2×10^1
20	CaX	5×10^2
26	FeXXII	2×10^4
42	MoXXXVIII	$10^9 \sim 10^{10}$

Comparable to E1



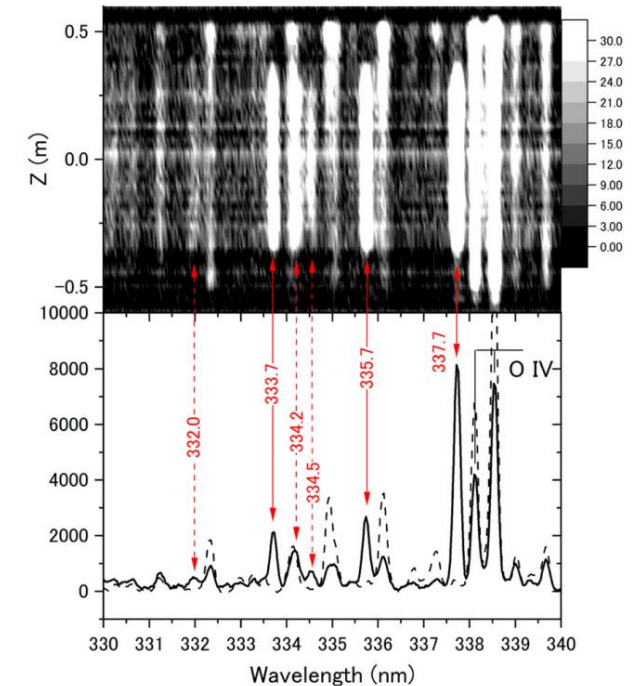
Observation of M1 lines

Visible M1 lines from W^{7+} - W^{28+} ions observed in EBIT and LHD

TABLE I. Visible wavelength of tungsten forbidden transition, in nm.

Ions	CoBIT	E_C (eV)	SH-HtscEBIT	E_S (eV)	MCF device
28	365.25, 393.06 [1]	940	220.97, 365.36, 393.20 [10]		344.48 [11]
27			377.743 [10]		337.73 [11]
26	389.41, 464.68, 501.99, 389.41, 464.68, 501.99 [1]	825	263.26, 291.89, 333.75, 335.76, 389.43, [10]	1200	389.39, 333.70, 335.73 [11]
25	383.99, 400.88, 406.92, 421.28, 451.15, 467.59, 469.21, 493.62 [1]	775	493.84, 587.63, 226.97 [10]		
24	364.58, 374.34, 375.70, 379.64, 386.23, 389.89, 392.62, 406.49, 408.58, 409.97, 419.35, 425.17, 447.36, 467.80, 468.22, 471.18 [1]	725			
23	366.48, 375.18, 388.27, 409.44, 432.32, 432.66, 437.90, 438.30, 441.52, 449.46, 459.25 [1]	675			
22	384.32, 446.95 [1]	630			
21	382.21, 415.83, 424.17, 442.69, 444.58, 450.70, 451.17, 459.99, 463.50, 468.39 [1]	585			
20	388.25, 402.91, 406.62, 422.05, 425.27, 433.14, 435.82, 438.02, 448.47, 462.40 [1]	535			
19	402.52, 433.89, 441.06, 456.43, 474.49 [1]	495			
18	375.90, 376.85, 396.83, 401.22, 419.68, 434.01 [1]	455			
17	373.69, 391.93 [1]	415			
16	472.39 [1]	380			
15	374.39, 378.14, 384.15, 384.76, 412.17, 414.29, 420.52, 424.45, 426.47, 428.43, 436.92, 450.23 [1]	340			
14	527.27, 388.19, 399.81, 496.55, 535.9, 549.33, 540.53, 451.68, 483.26, 480.09	320	549.3, 540.5, 451.65, 483.26, 480.08 [2]		
13	457.26, 459.08, 472.68, 457.26, 459.08, 472.68 [1]	280	462.64, 549.95, 432.24, 409.52, 546.23, 527.74, 486.63, 717.77 [9]	300	
12	401.38, 451.68 [1]	250	527.74, 388.16, 399.78, 496.52, 535.87, 660.3,	232	
11	388.19, 399.81, 446.04, 452.77, 454.64, 466.48 [1]	225	527.61 [5]	220	
10			419.75, 446.83, 452.40, 468.22, 527.44 [6]	170.5	
9	409.66, 438.68, 481.55, 533.20, 608.41	150	431.73, 447.13, 477.25, 470.56, 611.13, 645.48		
8	387.15, 405.73, 431.78, 447.14, 477.29, 570.52, 611.17 [1,8]	130	431.73, 447.13, 477.25, 470.56, 611.13, 645.48 [7]	127.1	
7	574.47 [3]	115	574.49 [4]	90	

Intensity profiles M1 line in LHD



- [1] Komatsu et al. Physica Scripta, T156, 2012.
- [2] Kobayashi et al. Physical Review A, 92, 2015.
- [3] Mita et al. *Atoms*, 5, 2017.
- [4] Lu, Q et al. Physical Review A, 99, 2019.
- [5] Lu, Q i et al. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 279, 2022.
- [6] Lu, Q i et al. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, 262, 2021.
- [7] Lu, Q et al. Physical Review A, 103, 2021.
- [8] Priti et al. Physical Review A, 102, 2020.
- [9] Zhao, Z. Z. et al. Journal of Physics B, 48, 2015.
- [10] Qiu, M. L. et al. Journal of Physics B, 48, 2015.
- [11] Kato, D. et al. Physica Scripta, T156, 2013.

禁线可以被观测到的条件：

1. 原子或离子处于某激发态的平均寿命等于其相应跃迁几率的倒数
2. 辐射密度和等离子体密度都足够小

禁线的特点：

1. 强度和轮廓不受不透明度效应的影响
2. 禁线(与允许线)的相对强度对电子密度非常敏感
3. 禁线的波长较长，可以使用普通的光谱技术获得其精确的线轮廓
4. 禁线的波长更长，更容易观察
5. 禁线几乎没有UTA谱，容易分辨

禁戒跃迁的研究意义：

1. 利用禁线(与允许线)的强度比测量**等离子体的电子温度 T_e**
 2. 利用其多普勒效应来测定高温**等离子体离子温度 T_i**
 3. 高电离态杂质的禁戒跃迁谱线辐射只能在电子温度与离子电离能相当的区域内产生，如果等离子体电子温度分布不均匀则可以通过测量不同杂质离子禁线的多普勒展宽来确定**等离子体离子温度的空间分布**
 4. 禁线的塞曼效应可以**提供托卡马克装置中磁场的重要信息**
 5. 检验原子结构理论，即对相对论以及基本相互作用进行检验
 6. 禁戒跃迁被提出作为高精度光钟的基础
 7. 研究精细结构常数随时间的变化
 8. 禁线也被提议用于多体理论中量子电动力学效应的精确测试
-

外磁场对原子结构、能级的影响：塞曼效应

原子的磁矩和磁场的相互作用。总角动量量子数为 J ，在外磁场中分裂为 $2J+1$ 个状态。

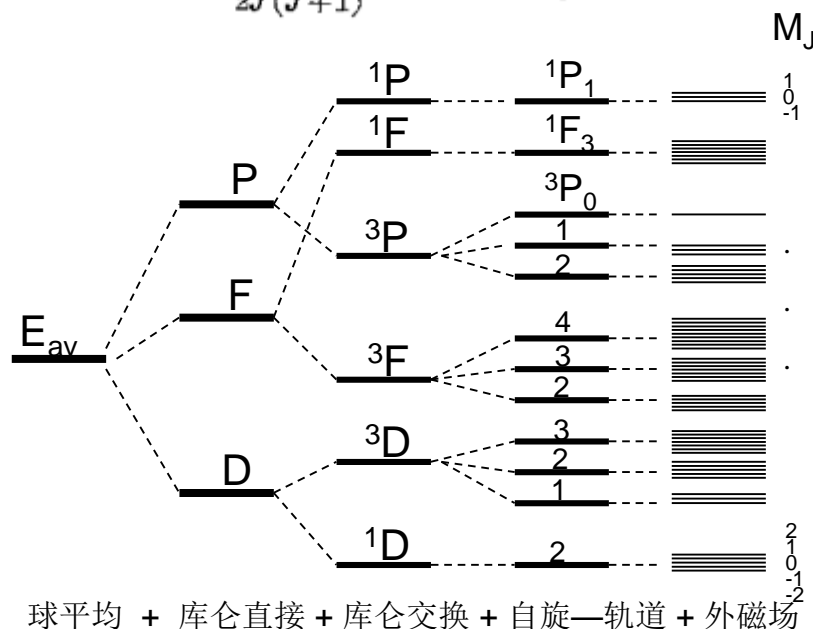
外磁场的附加能量： $\Delta E = \vec{\mu}_J \cdot \vec{B} = \mu_J B \cos \theta = g \cdot \frac{\mu_B}{\hbar} \cdot B \cdot P_J \cos \theta$ $g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$

其中 $P_J \cos \theta$ 是 \vec{P}_J 在 z 轴的投影，满足量子化条件 $P_J \cos \theta = M_J \hbar$ M_J 取 $-J, -J+1, \dots, J-1, J$

ΔE 分裂成 $2J+1$ 层，由于外磁场作用产生的原子能级能量变化为： $\Delta E = g M_J \mu_B B$

式中 μ_B 为玻尔磁子 ($\mu_B = 0.927 \times 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{T}^{-1}$)， g 为朗德因子，

$$g = \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)} + 1$$



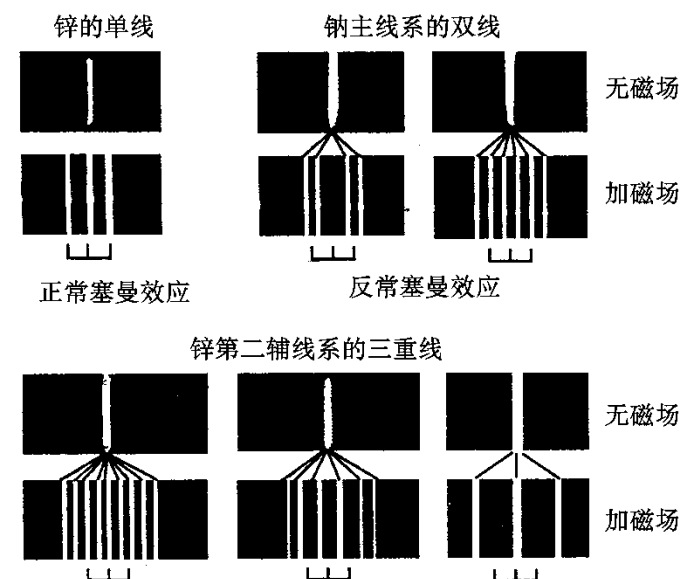
由于外磁场作用产生的波长位移为：

$$\Delta \lambda_z = 4.668 \times 10^{-9} (M_2 g_2 - M_1 g_1) \lambda^2 B \quad (\text{\AA}),$$

式中 λ 的单位为 \AA ， B 的单位为 T。 M_2, M_1 之间跃迁应当符合选择定则：
 $\Delta M = 0, \pm 1$ (当 $\Delta J = 0$ 时， $\Delta M = 0$ 的跃迁是被禁戒的)。

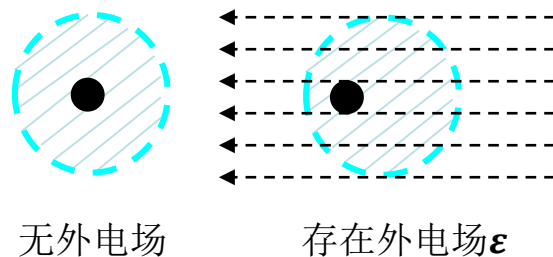
$\Delta M = 0$ 谱线的 π 分支

$\Delta M = \pm 1$ 谱线的 σ 分支



外电场对原子结构的影响：斯塔克效应

斯塔克效应



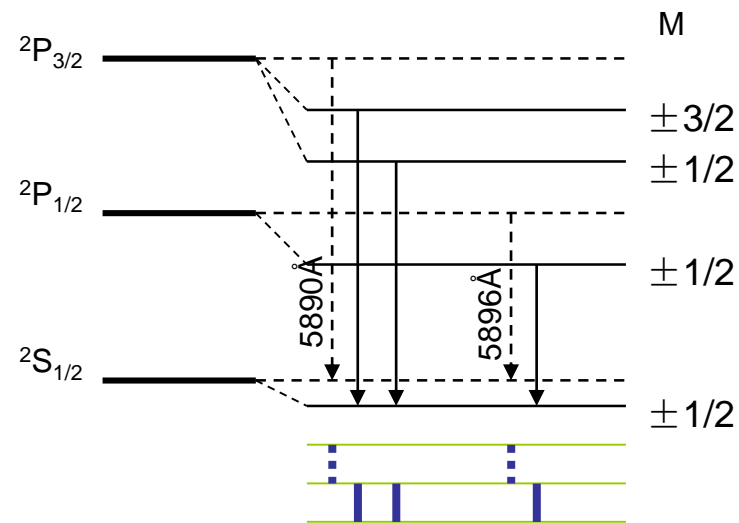
在外电场 ϵ 中，电场使原子正负电荷中心分开，原子产生诱导偶极矩

$$d = \alpha \epsilon$$

$$E_e = -d \cdot \epsilon$$

该诱导偶极矩与电场的相互作用使原子能级 J 发生劈裂和移动

$$E_s = -\frac{1}{2} \left(\alpha_0 + \alpha_2 \frac{3m_J^2 - J(J+1)}{J(2J-1)} \right) \epsilon^2$$



钠D线的斯塔克效应

光谱的线型函数:

谱线总强度: $I = \int_0^\infty I_\nu d\nu$ 其中 I_ν 为频率在 ν 处的谱线强度

线型函数 S_ν 为光谱强度随波长(频率)变化的函数:

$$S_\nu = \frac{I_\nu}{\int_0^\infty I_\nu d\nu} = \frac{I_\nu}{I}$$

更一般的可以写为:

$$\int F(x) dx = 1$$

其中 σ 可以是频率 ν 、角频率 ω 、波长 λ 、或者波数 λ

$$F(\omega) d\omega = F(\lambda) d\lambda \Rightarrow F(\lambda) = \frac{2\pi c}{\lambda^2} F(\omega)$$

高斯线型函数 $G(\lambda, \Delta\lambda_{1/2}^G) = \sqrt{\frac{4\ln 2}{\pi}} \frac{1}{\Delta\lambda_{1/2}^G} \exp\left[-4\ln 2 \left(\frac{\lambda - \lambda_0}{\Delta\lambda_{1/2}^G}\right)^2\right]$

洛伦兹线型函数 $L(\lambda, \Delta\lambda_{1/2}^L) = \frac{1}{\pi} \frac{\Delta\lambda_{1/2}^L/2}{(\lambda - \lambda_0)^2 + (\Delta\lambda_{1/2}^L/2)^2}$

Voigt线型函数

Voigt 线型是高斯线型与洛伦兹线型的卷积, 数学表达式为

$$V(\omega) = G(\omega) * L(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(\omega') L(\omega - \omega') d\omega'$$

光谱的展宽机制:

1. 自然展宽 海森堡测不准原理

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar/2\pi \quad \Delta E_{pq} = \Delta E_p + \Delta E_q$$

$$\Delta\lambda_{1/2} = \frac{\lambda_{pq}^2}{2\pi c} [A_p + A_q]$$

2. 多普勒展宽 高斯线型 高温低密度, 取决于离子温度

$$\Delta\lambda^D_{1/2} = \lambda \sqrt{\frac{8kT_i \ln 2}{Mc^2}} = 7.68 \times 10^{-5} \lambda \sqrt{\frac{kT_i}{A}}$$

3. 碰撞展宽 洛伦兹线型

共振展宽 $\Delta\lambda_R = 4.484 \lambda_0^3 fC$

4. 塞曼效应 (外磁场)

$$\Delta\lambda_Z = 4.668 \times 10^{-9} (M_2 g_2 - M_1 g_1) \lambda^2 B$$

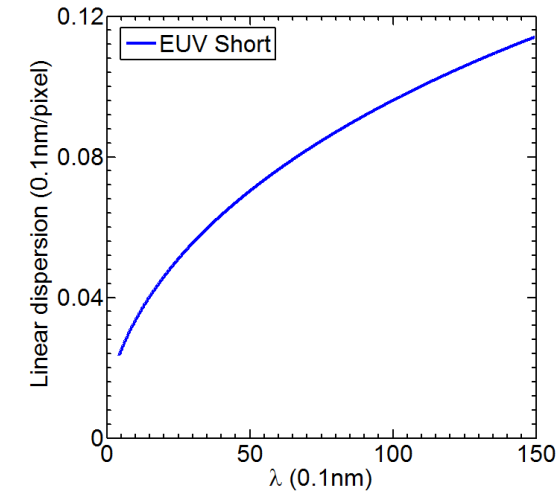
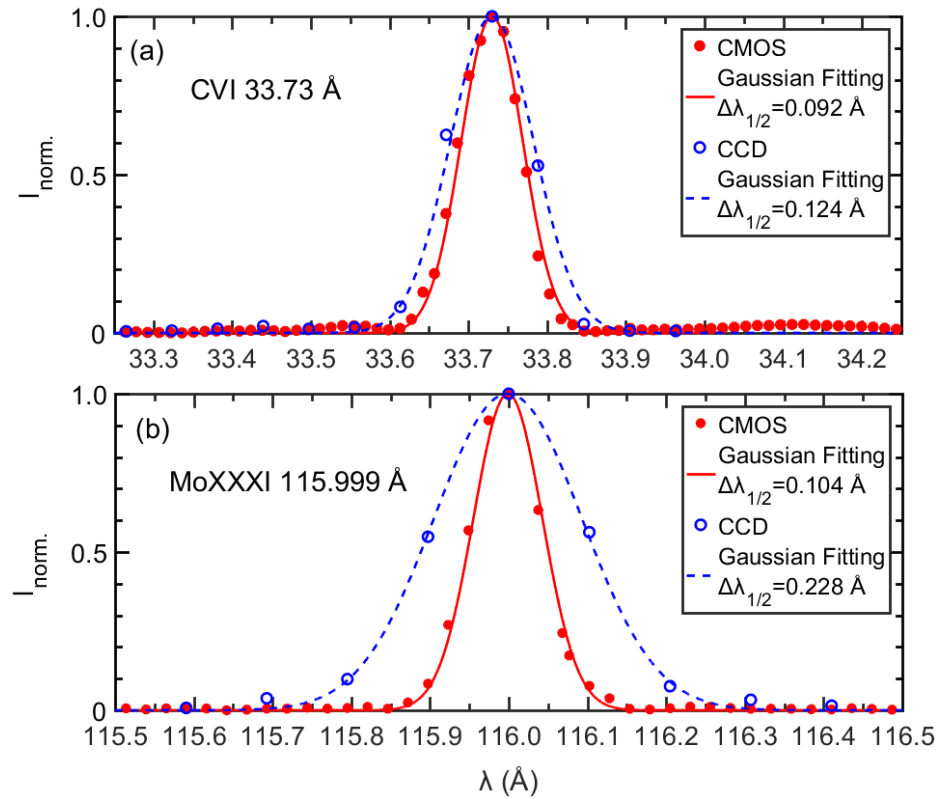
5. Stark 展宽 (外电场)

低温高密度

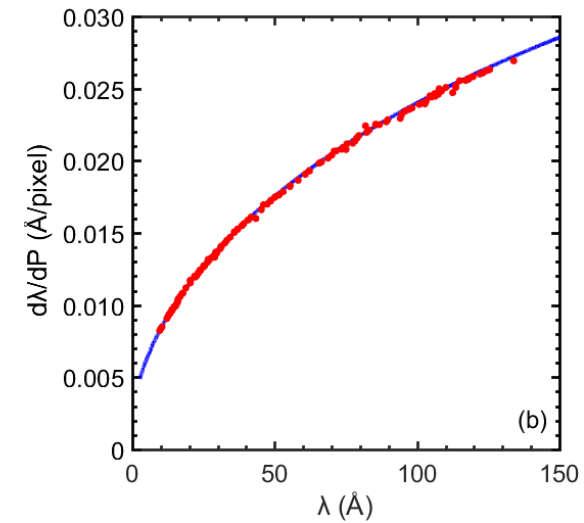
光谱的线型和展宽

CCD detector
(26 $\mu\text{m}/\text{pixel}$)

CMOS detector
(6.5 $\mu\text{m}/\text{pixel}$)



CCD detector
(26 $\mu\text{m}/\text{pixel}$)



CMOS detector
(6.5 $\mu\text{m}/\text{pixel}$)

等离子体模型：局部热平衡模型 (LTE)

适用条件：碰撞退激发的速率是自发辐射速率的10倍

局部热平衡^[38~41] 对于某些等离子体,虽然它的光学厚度很薄,辐射场密度很低,辐射与吸收根本达不到平衡,以致光电离、光致激发等过程可以忽略;但是粒子的密度仍足够大,碰撞频繁,粒子间可以达到所谓局部热平衡。这时粒子的状态分布仍可以用麦克斯韦分布、玻耳兹曼分布和萨哈分布公式描述。这种局部热平衡的条件大致可以这样确定:对于所有的能级 p 和 q , 碰撞去激发速率至少必须是自发辐射速率的 10 倍,即

等离子体辐射服从普朗克黑体辐射分布: $E(\nu, T)d\nu = \frac{8\pi h \nu^3}{c^3} \frac{d\nu}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1}$

电子速度分布满足麦克斯韦分布: $f(\nu, V)d\nu = 4\pi\nu^2 \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m\nu^2}{2kT}\right) d\nu$

写成能量形式为: $f(E, T)d\nu = \frac{2}{\sqrt{\pi}kT} \left(\frac{E}{kT}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) dE$

同种离子不同能级的布居满足玻耳兹曼分布: $\frac{n_i}{n_0} = \frac{g_i}{g_0} \exp\left(-\frac{E_i - E_0}{kT}\right)$

不同电离态离子的丰度满足萨哈分布: $\frac{n^{q+1}}{n^q} = \frac{2}{n_e} \left(\frac{m_e kT}{2\pi\hbar^2}\right) \frac{G_{q+1}}{G_q} \exp\left(-\frac{I_q}{kT}\right)$

配分函数: $G_q = \sum_i g_i^{(q)} \exp\left(-\frac{E_i - E_0}{kT}\right)$

萨哈方程: $\frac{n^{q+1}}{n^q} = \frac{2}{n_e} \left(\frac{m_e kT}{2\pi\hbar^2}\right) \frac{G_{q+1}}{G_q} \exp\left(-\frac{I_q - \Delta I_q}{kT}\right)$ 其中, 电离能下降: $\Delta I_q = \frac{z_q e^2}{4\pi\epsilon_0} \sqrt{\frac{e^2 N_e}{\epsilon_0 kT}}$

离子数守恒: $N = \sum_{i=0}^Z N_i$ 电荷数守恒: $N_e = \sum_{i=0}^Z iN_i$ 联立求解方程组可得跃迁上能级布居!

等离子体模型：日冕模型

适用条件：碰撞跃迁速率小于自发辐射速率

日冕模型^[42~46] 如果等离子体特别稀薄，以致可以只考虑自发的辐射跃迁和碰撞激发相平衡、复合辐射和碰撞电离相平衡，其它过程均可忽略。这就称为日冕模型，因为它首先用于说明日冕的光谱。不少磁约束高温等离子体可以应用日冕模型。我们仍用 S 代表碰撞

电子速度分布满足麦克斯韦分布： $f(v, V)dv = 4\pi v^2 \left(\frac{m}{2\pi kT} \right)^{3/2} \exp\left(-\frac{mv^2}{2kT}\right) dv$

写成能量形式为： $f(E, T)dv = \frac{2}{\sqrt{\pi kT}} \left(\frac{E}{kT} \right)^{1/2} \exp\left(-\frac{E}{kT}\right) dE$

离子丰度： $\frac{n^{q+1}}{n^q} = \frac{\langle \sigma_i v \rangle}{k_{rr} + k_{dr}}$ 速率方程： $\frac{dn_i}{dt} = n_0 C_{0,i} + \sum_{j>i} n_j A_{ji} - \sum_{j<i} n_j A_{ij} = 0$ 其中 $C_{0,i} = n_e \langle \sigma_{0i} v \rangle$

通过能级逐条跃迁方式处理级联跃迁，对激发态能级进行排序，按照能量从高到低依次计算各能级的布居。假定基态能级为 0, 最高激发态为 m

m 能级的布居可以表示为： $n_m = \frac{n_0 C_{0,m}}{\sum_{i<m} A_{m,i}}$

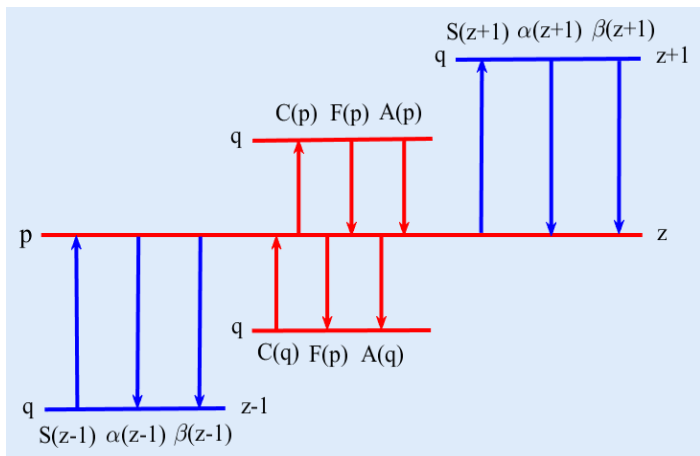
则下一个能级 $m-1$ 的布居为： $n_{m-1} = \frac{n_0 C_{0,m-1} + n_m A_{m,m-1}}{\sum_{i<m-1} A_{m-1,i}}$

以此类推，能级 i 的居可以表示为： $n_k = \frac{n_0 C_{0,k} + \sum_{j>k} n_j A_{j,k}}{\sum_{i<k} A_{k,i}}$

等离子体模型：碰撞辐射模型

实验中观测到的光谱强度： $I_{p,q} \propto n(p)A(p,q)\phi(\lambda)$

等离子体中的原子物理过程:



C(p) 碰撞激发速率系数
F(p) 碰撞退激发速率系数
A(p) 自发辐射速率

S(z+1) 碰撞电离速率系数
 $\alpha(z+1)$ 辐射复合速率系数
 $\beta(z+1)$ 双电子复合速率系数

电离态平衡：

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} n(z) = & \sum S(z-1)n_e n(z-1) - \sum S(z+1)n_e n(z+1) \\ & + \sum \alpha(z+1)n_e n(z+1) - \sum \alpha(z-1)n_e n(z-1) \\ & + \sum \beta(z+1)n_e n(z+1) - \sum \beta(z-1)n_e n(z-1) \\ = & 0 \end{aligned}$$

碰撞辐射模型的速率方程：

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} n(z, p) = & \sum S_{pq}(z-1, p)n_e n(z-1, q) - \sum S_{qp}(z+1, q)n_e n(z+1, p) \\ & + \sum \alpha_{pq}(z+1, p)n_e n(z+1, q) - \sum \alpha_{qp}(z-1, q)n_e n(z-1, p) \\ & + \sum \beta_{pq}(z+1, p)n_e n(z+1, q) - \sum \beta_{qp}(z-1, q)n_e n(z-1, p) \\ & + \sum C(z, p)n_e n(z, q) - \sum C(z, q)n_e n(z, p) \\ & + \sum F(z, p)n_e n(z, q) - \sum F(z, q)n_e n(z, p) \\ & + \sum A(z, p)n_e n(z, q) - \sum A(z, q)n_e n(z, p) \end{aligned}$$

准稳态近似： $dn(z, p) / dt = 0$

单电离态能级布居平衡：

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} n(p) = & \sum C(p)n_e n(q) - \sum C(q)n_e n(p) \\ & + \sum F(p)n_e n(q) - \sum F(q)n_e n(p) \\ & + \sum A(p)n_e n(q) - \sum A(q)n_e n(p) \\ = & 0 \end{aligned}$$

类氢原子光谱

类似于氢原子，这类原子的最外层只有一个价电子，结构简单、光谱也相对简单。在计算中其结构的处理类似于氢原子。

原子中的电子和原子核绕二者的质心运动：

$$r_1 + r_2 = r \quad Mr_1 = mr_2 \quad r_1 = \frac{m}{m+M}r \quad r_2 = \frac{M}{m+M}r$$

$$\text{此时二粒子所受向心力: } M\omega^2 r_1 = m\omega^2 r_2 = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

$$\text{令: } \mu = \frac{Mm}{m+M} \quad \text{有: } \mu r \omega^2 = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}$$

$$\text{由玻尔理论: } Mvr_1 + mvr_2 = n \frac{h}{2\pi}$$

$$\text{可得: } \mu r^2 \omega = n \frac{h}{2\pi} \quad \text{可得: } r = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 h^2}{4\pi^2 \mu e^2 Z}$$

$$\begin{aligned} \text{原子体系的能量: } E &= \frac{1}{2}MV^2 + \frac{1}{2}mv^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} \\ &= \frac{1}{2}\mu r^2 \omega^2 - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{2r} \end{aligned}$$

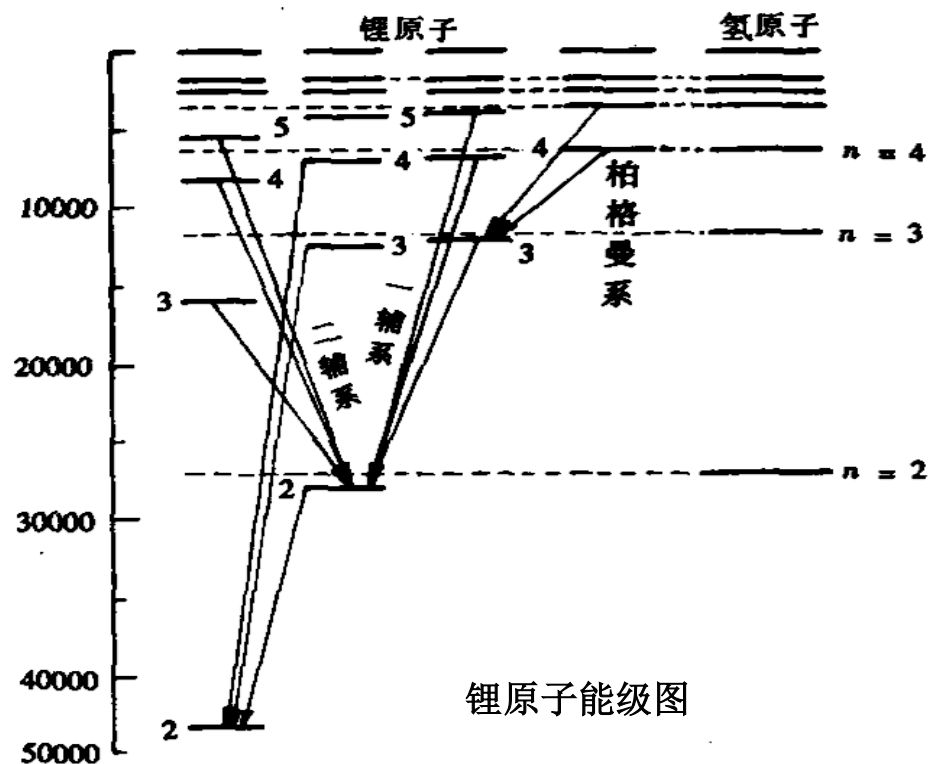
$$\text{代入} r \text{ 值有: } E = -\frac{2\pi^2 \mu e^4 Z^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 n^2 h^2}$$

$$\text{可得到光谱系的公式: } \tilde{\nu} = \frac{2\pi^2 \mu e^4 Z^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 h^3 c} \left[\frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right]$$

$$\text{与H原子波数比较: } R_A = \frac{2\pi^2 \mu e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2 h^3 c} = \frac{2\pi^2 e^4 Z^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 h^3 c} \frac{1}{1 + \frac{m}{M}}$$

$$\text{当 } M \rightarrow \infty \text{ 时有 } R_\infty = \frac{2\pi^2 e^4 Z^2}{(4\pi\epsilon_0)^2 h^3 c} \quad R_A = R_\infty \frac{1}{1 + \frac{m}{M}}$$

原子的里德伯常数随着原子核的质量 M 而改变



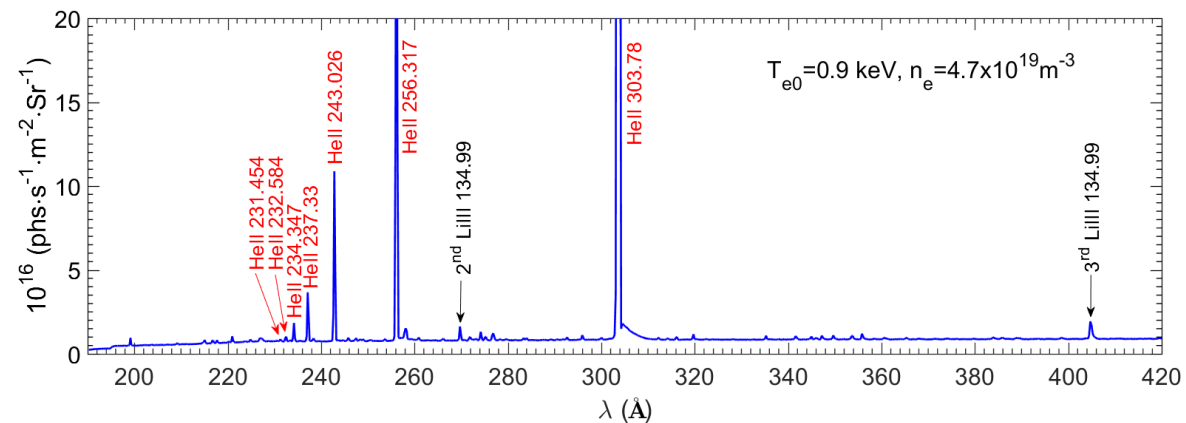
类氢原子光谱

He^+ , Li^{2+} , B^{4+} , C^{5+} , N^{6+} , O^{7+} , Ne^{9+}

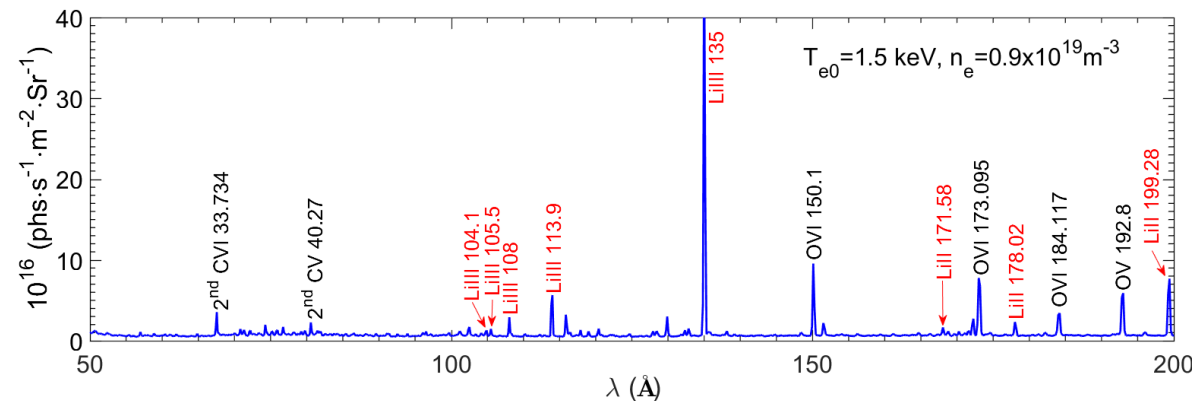
Lines	Ions	E_i (eV)	λ (Å)		Transitions
			This work	Database ^a	
He II	He^+	54.42	231.43 ± 0.04	231.454	$8p \ ^2\text{P}_{3/2}^o \rightarrow 1s \ ^2\text{S}_{1/2}$
			232.54 ± 0.05	232.584	$7p \ ^2\text{P}_{3/2}^o \rightarrow 1s \ ^2\text{S}_{1/2}$
			234.35 ± 0.05	234.347	$6p \ ^2\text{P}_{3/2}^o \rightarrow 1s \ ^2\text{S}_{1/2}$
			237.28 ± 0.05	237.33	$5p \ ^2\text{P}_{3/2}^o \rightarrow 1s \ ^2\text{S}_{1/2}$
			242.98 ± 0.06	243.026	$4p \ ^2\text{P}_{3/2}^o \rightarrow 1s \ ^2\text{S}_{1/2}$
			256.28 ± 0.07	256.317	$3p \ ^2\text{P}_{3/2}^o \rightarrow 1s \ ^2\text{S}_{1/2}$
			303.75 ± 0.03	303.78	$2p \ ^2\text{P}_{3/2}^o \rightarrow 1s \ ^2\text{S}_{1/2}$

Lines	Ions	E_i (eV)	λ (Å)		Transitions
			This work	NIST	
Li II	Li^+	75.64	171.57 ± 0.03	171.58	$1s4p \ ^1\text{P}_1^o \rightarrow 1s^2 \ ^1\text{S}_0$
			178.04 ± 0.03	178.02	$1s3p \ ^1\text{P}_1^o \rightarrow 1s^2 \ ^1\text{S}_0$
Li III	Li^{2+}	122.45	199.28 ± 0.02	199.28	$1s2p \ ^1\text{P}_1^o \rightarrow 1s^2 \ ^1\text{S}_0$
			104.10 ± 0.01	104.10	$6p \ ^2\text{P}_{3/2}^o \rightarrow 1s \ ^2\text{S}_{1/2}$
					$6p \ ^2\text{P}_{1/2}^o \rightarrow 1s \ ^2\text{S}_{1/2}$
			105.48 ± 0.01	105.50	$5p \ ^2\text{P}_{3/2}^o \rightarrow 1s \ ^2\text{S}_{1/2}$
					$5p \ ^2\text{P}_{1/2}^o \rightarrow 1s \ ^2\text{S}_{1/2}$
			108.00 ± 0.01	108.0	$4p \ ^2\text{P}_{3/2}^o \rightarrow 1s \ ^2\text{S}_{1/2}$
					$4p \ ^2\text{P}_{1/2}^o \rightarrow 1s \ ^2\text{S}_{1/2}$
			113.87 ± 0.02	113.90	$3p \ ^2\text{P}_{3/2}^o \rightarrow 1s \ ^2\text{S}_{1/2}$
					$3p \ ^2\text{P}_{1/2}^o \rightarrow 1s \ ^2\text{S}_{1/2}$
			135.02 ± 0.03	135.0	$2p \ ^2\text{P}_{3/2}^o \rightarrow 1s \ ^2\text{S}_{1/2}$
					$2p \ ^2\text{P}_{1/2}^o \rightarrow 1s \ ^2\text{S}_{1/2}$

He^+ (He II)

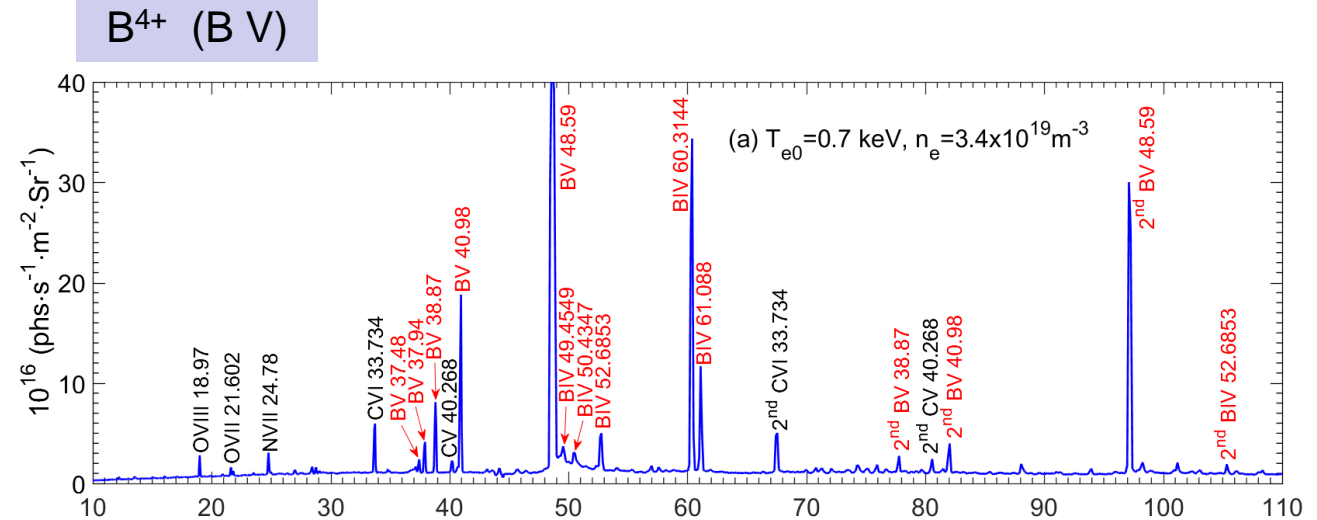


Li^{2+} (Li III)

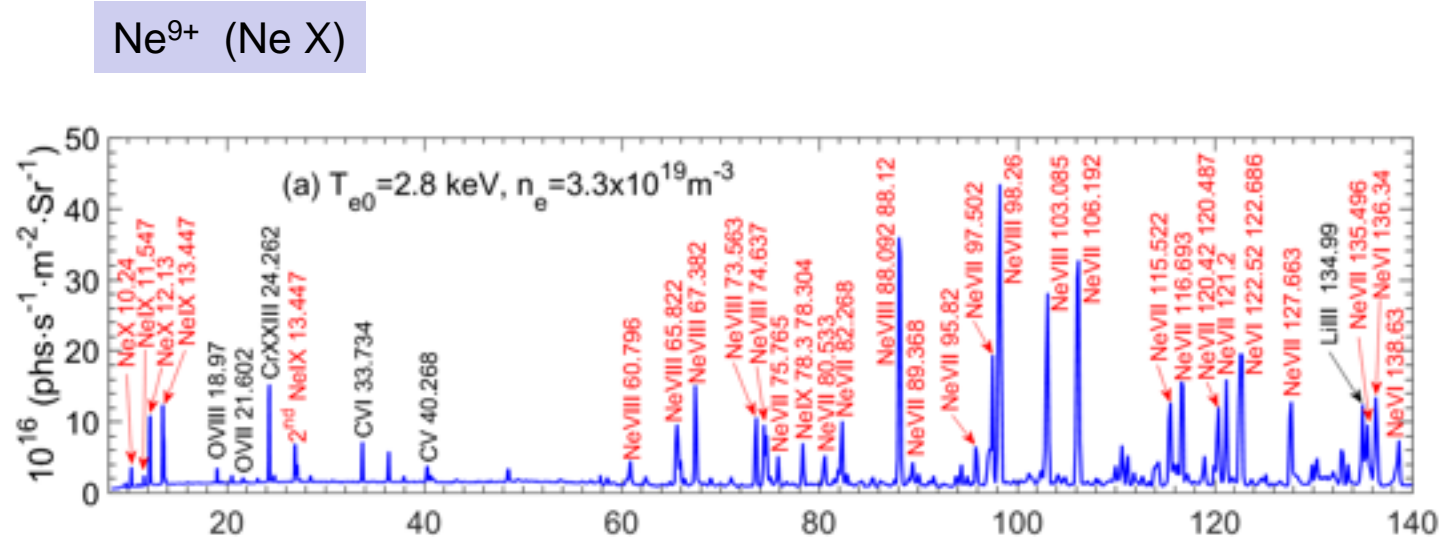


类氢原子光谱

Lines	Ions	E_i (eV)	λ (Å)		Transitions
			This work	NIST	
B IV	B^{3+}	259.37	49.44 ± 0.02	49.4549	$1s5p \ ^1P^o_1 \rightarrow 1s^2 \ ^1S_0$
			50.46 ± 0.02	50.4347	$1s4d \ ^1P^o_1 \rightarrow 1s^2 \ ^1S_0$
			52.67 ± 0.02	52.6853	$1s3p \ ^1P^o_1 \rightarrow 1s^2 \ ^1S_0$
			60.35 ± 0.04	60.3144	$1s2p \ ^1P^o_1 \rightarrow 1s^2 \ ^1S_0$
			61.06 ± 0.04	61.088	$1s2p \ ^3P^o_1 \rightarrow 1s^2 \ ^1S_0$
B V	B^{4+}	340.226	37.47 ± 0.01	37.48	$6p \ ^2P^o_{3/2} \rightarrow 1s \ ^2S_{1/2}$
					$6p \ ^2P^o_{1/2} \rightarrow 1s \ ^2S_{1/2}$
			37.95 ± 0.01	37.94	$5p \ ^2P^o_{3/2} \rightarrow 1s \ ^2S_{1/2}$
					$5p \ ^2P^o_{1/2} \rightarrow 1s \ ^2S_{1/2}$
			38.89 ± 0.02	38.87	$4p \ ^2P^o_{3/2} \rightarrow 1s \ ^2S_{1/2}$
					$4p \ ^2P^o_{1/2} \rightarrow 1s \ ^2S_{1/2}$
			40.98 ± 0.02	40.98	$3p \ ^2P^o_{3/2} \rightarrow 1s \ ^2S_{1/2}$
					$3p \ ^2P^o_{1/2} \rightarrow 1s \ ^2S_{1/2}$
			48.58 ± 0.02	48.59	$2p \ ^2P^o_{3/2} \rightarrow 1s \ ^2S_{1/2}$
					$2p \ ^2P^o_{1/2} \rightarrow 1s \ ^2S_{1/2}$



Lines	Ions	E_i (eV)	λ (Å)		Transitions
			This work	Database ^a	
Ne IX	Ne^{8+}	1195.81	74.61 ± 0.04	74.637	$4s \ ^2S_{1/2} \rightarrow 2p \ ^2P^o_{3/2}$
			88.05 ± 0.04	88.092	$3p \ ^2P^o_{3/2} \rightarrow 2s \ ^2S_{1/2}$
			88.16 ± 0.04	88.12	$3p \ ^2P^o_{1/2} \rightarrow 2s \ ^2S_{1/2}$
			98.25 ± 0.02	98.26	$3d \ ^2D_{5/2} \rightarrow 2p \ ^2P^o_{3/2}$
					$3d \ ^2D_{3/2} \rightarrow 2p \ ^2P^o_{3/2}$
			103.10 ± 0.01	103.085	$3s \ ^2S_{1/2} \rightarrow 2p \ ^2P^o_{3/2}$
			199.17 ± 0.02	199.17	$5s \ ^2S_{1/2} \rightarrow 3p \ ^2P^o_{3/2}$
			292.48 ± 0.02	292.47	$4f \ ^2F^o_{7/2} \rightarrow 3d \ ^2D_{5/2}$
			401.07 ± 0.07	402.0	$6d \ ^2D_{3/2} \rightarrow 4p \ ^2P^o_{1/2}$
					$6d \ ^2D_{5/2} \rightarrow 4p \ ^2P^o_{3/2}$
Ne X	Ne^{9+}	1362.20	11.52 ± 0.02	11.547	$1s3p \ ^1P^o_1 \rightarrow 1s^2 \ ^1S_0$
			13.44 ± 0.02	13.447	$1s2p \ ^1P^o_1 \rightarrow 1s^2 \ ^1S_0$
			78.27 ± 0.04	78.30	$3d \ ^3D_3 \rightarrow 2p \ ^3P^o_2$
				78.304	$3d \ ^3D_2 \rightarrow 2p \ ^3P^o_2$
			234.21 ± 0.05	234.17	$4p \ ^3P^o_2 \rightarrow 3d \ ^3D_3$
				234.19	$4p \ ^3P^o_0 \rightarrow 3d \ ^3D_1$
				234.24	$4p \ ^3P^o_1 \rightarrow 3d \ ^3D_2$
Ne X	Ne^{9+}	1362.20	10.24 ± 0.01	10.24	$3p \ ^2P^o_{1/2} \rightarrow 1s \ ^2S_{1/2}$
			12.14 ± 0.02	12.13	$2p \ ^2P^o_{3/2} \rightarrow 1s \ ^2S_{1/2}$



分析光谱

元素的特征波长——物质组成（定性）

光谱强度

光谱强度——谱线强度诊断杂质流： $\Gamma = 4\pi \frac{I_{imp}}{h\nu} \frac{S}{XB}$

相对强度——电子温度： $\frac{B_{nm}}{B_{qp}} = \frac{f_{mn}g_m\lambda_{qp}^3}{f_{pq}g_p\lambda_{nm}^3} \exp\left[-\frac{\chi_{nq}}{kT_e}\right]$, $\chi_{nq} = \chi_{1n} - \chi_{1q}$

光谱强度分布——杂质密度剖面： $I^{W^{q+}}(Z) = \int n^{W^{q+}}(Z,r) PEC^{W^{q+}}(Z,r) n_e(Z,r) dr$

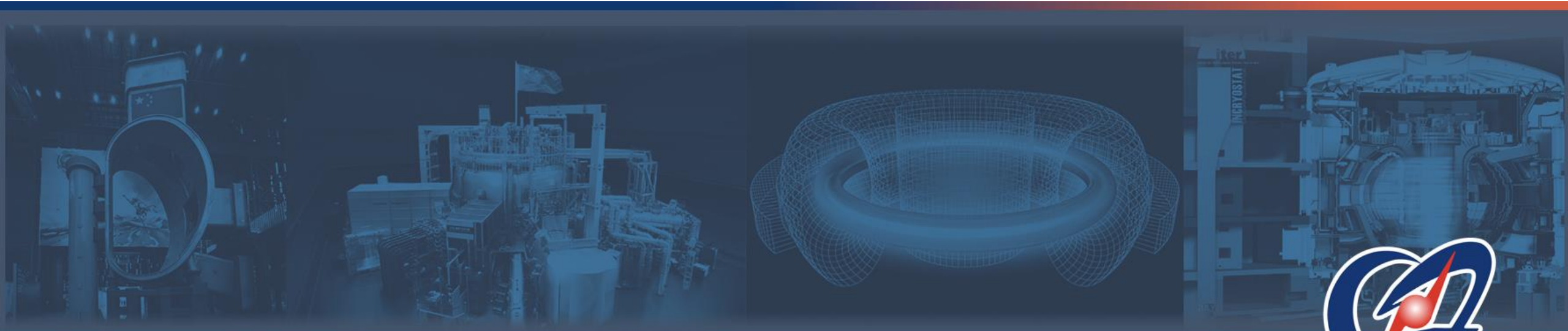
谱线轮廓

多普勒展宽——离子温度： $kT_i = 1.7 \times 10^8 A \left(\frac{\Delta\lambda_{1/2}^D}{\lambda} \right)^2$

Stark展宽——电子温度： $\Delta\lambda_{1/2}^S = 2.50 \times 10^{-13} \alpha_{1/2} N_e^{2/3}$ $\alpha_{1/2}$ 为归一化轮廓 $S(\alpha)$ 的半高全宽

谱线的分裂——磁场强度

- 1. 等离子体光谱诊断中的原子物理**
- 2. 磁约束聚变等离子体中的光谱诊断**
 - 研究背景 & 观测对象
 - 诊断物理量
 - 硬件系统构成 & 绝对标定
 - EAST装置钨杂质诊断
 - EAST装置钨光谱研究



Thanks for your attention!

ASIPP

