

Mg IX原子在等离子体参数下的跃迁理论研究

徐雨彤, 樊秋波

徐州工程学院物理与新能源学院, 江苏 徐州

收稿日期: 2026年4月14日; 录用日期: 2026年5月7日; 发布日期: 2026年5月13日

摘要

本文采用基于全相对论多组态狄拉克Dirac-Fock波函数的GRASP92程序包, 对Mg IX的原子参数展开了全面、详细的光谱研究与分析。文中给出Mg IX的能级、跃迁辐射数据以及量子动力学的影响, 所得结果与其他理论结果符合较好。本文还阐释了高温稠密等离子体的表征方法, 给出了其温度、电子密度、趋肤深度、等离子体频率等关键参数。研究认为, 所得数据可为后续的光谱线对比与识别、等离子体建模以及聚变和天体物理等离子体研究提供重要参考。

关键词

能级, 波长, 跃迁几率, 等离子体参数

Theoretical Study of Transitions of Mg IX with Plasma Parameters

Yutong Xu, Qiubo Fan

School of Physics and New Energy, Xuzhou University of Technology, Xuzhou Jiangsu

Received: April 14, 2026; accepted: May 7, 2026; published: May 13, 2026

Abstract

In this work, a comprehensive and detailed spectroscopic investigation and analysis of the atomic parameters of Mg IX were carried out using the GRASP92 package based on fully relativistic multi-configurational Dirac-Fock wave functions. The energy levels, radiative transition data of Mg IX and the effects of quantum electrodynamics are presented herein, and the obtained results are in good agreement with other theoretical results. In addition, the characterization method of hot dense plasma is illustrated, with its key parameters including temperature, electron density, skin depth and plasma frequency provided. It is believed that the obtained data can serve as an important reference for the subsequent comparison and identification of spectral lines, plasma modeling, as well

as research on fusion and astrophysical plasma.

Keywords

Energy Level, Wavelength, Transition Probability, Plasma Parameters

Copyright © 2026 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

深紫外乃至极紫外光源已成为下一代光伏光刻技术的重要发展方向, 而光源的波长稳定性、功率输出以及可调性等关键指标, 直接决定了光刻精度与生产效率[1]。原子光谱作为产生特定波长辐射的重要物理机制, 是光刻光源设计的理论基础之一[2]。通过精确计算与分析高离化态离子的能级结构和跃迁特性, 可以为光刻光源的选材、激发机制及波长调控提供关键数据支持[3]。镁离子在高温等离子体、天体物理和实验室光谱中具有重要的研究价值, 尤其是类 Be 等电子序列离子(如 Mg IX), 其能级结构和跃迁特性对理解电子关联效应、精细结构劈裂以及辐射过程具有重要意义[4]。

实验方面, 主要由 Träbert 和合作伙伴用各种实验手段研究了 Mg IX 的相关特性[5]。理论方面, 不同的研究团队采用不同的方法对 Mg IX 进行了详细的研究, 主要有 Wang 等人采用多组态 Dirac-Hartree-Fock (MCDHF)方法[6], Li 等人采用多组态瑞利 - 里兹变分法[7], 王凯等人采用的多体微扰方法[4]等。上述研究有的侧重于等电子序列研究, 有的侧重于跃迁研究, 并不能完全描述 Mg IX 的相关特性, 尤其是量子电动力学(Quantum Electrodynamics, QED)的影响。

同时高温稠密等离子体参数的描述与研究是理论和实验分析的重要方向, 而本文研究的镁是重要性约束聚变常用元素, 常被用来反推聚变中高温等离子体的相关信息。高温高密度等离子体或高温稠密等离子体的特征为: 物质温度处于 keV 量级, 密度为固态密度[8]。该参数范围内的物质在材料科学、行星物理、天体物理等多个物理领域均具有研究价值[9]。因此, 本文还对高温稠密等离子体的等离子体频率、趋肤深度和耦合参数表征进行了探讨。

2. 理论与方法

本研究采用基于相对论效应的多组态 Dirac-Fock (MCDF)方法以及基于该方法的程序包 GRASP92, 在很多文献都有详细的介绍, 这里仅给出方法的核心内容[10]。MCDF 方法从 Dirac-Coulomb Hamiltonian 出发, 将原子态波函数展开为有限个组态波函数的线性组合:

$$\Psi(\Gamma JM_J) = \sum_{i=1}^M c_i \Phi(\gamma_i JM_J) \quad (1)$$

其中 $\Phi(\gamma_i JM_J)$ 是组态波函数, 由单电子 Dirac 轨道自治生成, c_i 为组态混合系数, 通过对角化哈密顿矩阵得到。

哈密顿量包括 Dirac-Coulomb 项和 Breit 相互作用:

$$H = H_{DC} + H_{Breit} \quad (2)$$

$$\hat{H}_i = c\hat{\alpha} \cdot \hat{p}_i + (\beta - 1)c^2 + V_{mc}(\hat{r}_i) \quad (3)$$

$$H_{Breit} = -\sum_{i<j} \frac{1}{2r_{ij}} \left[\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \boldsymbol{\alpha}_j + \frac{(\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\boldsymbol{\alpha}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2} \right] \quad (4)$$

Breit 项包含了磁相互作用和延迟效应, 对于高离化态离子的精细结构计算至关重要。

QED 修正主要包括自能(Self-Energy, SE)和真空极化(Vacuum Polarization, VP)两项, 采用模型算符方法估算:

$$E_{QED} = E_{SE} + E_{VP} \quad (5)$$

这些修正对于高 Z 离子的高精度能级计算不可或缺。

在获得原子态波函数和能级后, 电偶极跃迁的振子强度 f 和跃迁概率 A 可由下式计算:

$$f_{ik} = \frac{2}{3} \frac{\Delta E}{g_i} \left| \langle \Psi_i \| \mathbf{D} \| \Psi_k \rangle \right|^2 \quad (6)$$

$$A_{ki} = \frac{4}{3} \frac{(\Delta E)^3}{g_k c^3} \left| \langle \Psi_k \| \mathbf{D} \| \Psi_i \rangle \right|^2 \quad (7)$$

其中 ΔE 为跃迁能量, g_i 、 g_k 分别为初、末态的统计权重, \mathbf{D} 为电偶极算符。跃迁波长由 $\lambda = hc/\Delta E$ 给出。

本研究所有计算均采用长度规范, 并考虑了组态相互作用对跃迁矩阵元的影响, 确保了理论结果的可靠性。

3. 结果与讨论

3.1. 能级与跃迁

表 1 给出了 $1s^22s2p$ 、 $1s^22p^2$ 、 $1s2s2p^2$ 的能级值, 包含 Breit 相互作用的结果, 以及自能(Self-Energy, SE)和真空极化两项。从表一可以看出, 对于全部计算结果而言, Breit 相互作用平均影响只有 0.003%, 真空极化占 0.003%, 自能占 0.057%, 其中量子动力学效应(含真空极化与自能)占 0.060%。Breit 作用在不同谱项差距较大, 例如 $1s^22s2p$ 中的 3P_0 , Breit 相互作用占比达到了 0.245%, 如果不考虑该影响, 对计算结果的精确度影响较大。

Table 1. Breit, VP, SE and total energy of Mg IX (eV)

表 1. Mg IX 的 Breit、VP、SE 以及总能量(eV)

组态	谱项	Breit	总能量	VP	SE
$1s^22s2p$	3P_0	4.348E(-2)	1.771E(1)	1.412E(-3)	-2.511E(-2)
	3P_1	1.922E(-2)	1.785E(1)	1.413E(-3)	-2.475E(-2)
	3P_2	-1.113E(-2)	1.816E(1)	1.414E(-3)	-2.399E(-2)
	1P_1	7.302E(-3)	3.566E(1)	1.415E(-3)	-2.438E(-2)
$1s^22p^2$	3P_0	5.995E(-2)	4.646E(1)	3.014E(-3)	-5.277E(-2)
	3P_1	4.671E(-2)	4.662E(1)	3.015E(-3)	-5.236E(-2)
	3P_2	-1.415E(-3)	4.689E(1)	3.016E(-3)	-5.166E(-2)
	1D_2	1.419E(-2)	5.255E(1)	3.016E(-3)	-5.195E(-2)
	1S_0	5.2663E(-2)	6.513E(1)	2.826E(-3)	-4.867E(-2)

续表

1s2s2p ²	³ P ₀	-4.725E(-1)	1.313E(3)	1.670E(-2)	-2.725E(-1)
	³ P ₁	-5.754E(-1)	1.313E(3)	1.670E(-2)	-2.722E(-1)
	³ P ₂	-6.164E(-1)	1.313E(3)	1.670E(-2)	-2.715E(-1)
	¹ P ₁	-6.375E(-1)	1.321E(3)	1.670E(-2)	-2.718E(-1)
	⁵ S ₂	-5.417E(-1)	1.346E(3)	1.972E(-2)	-3.240E(-1)
	³ D ₃	-6.577E(-1)	1.358E(3)	1.973E(-2)	-3.239E(-1)
	³ D ₂	-5.115E(-1)	1.358E(3)	1.972E(-2)	-3.240E(-1)
	³ D ₁	-5.012E(-1)	1.358E(3)	1.972E(-2)	-3.240E(-1)
	³ S ₁	-6.530E(-1)	1.361E(3)	1.972E(-2)	-3.240E(-1)
	¹ D ₂	-6.260E(-1)	1.366E(3)	1.971E(-2)	-3.240E(-1)
	³ P ₂	-6.397E(-1)	1.367E(3)	1.954E(-2)	-3.208E(-1)
	³ P ₀	-4.628E(-1)	1.367E(3)	1.955E(-2)	-3.206E(-1)
	³ P ₁	-4.709E(-1)	1.367E(3)	1.954E(-2)	-3.209E(-1)
	¹ P ₁	-6.075E(-1)	1.375E(3)	1.954E(-2)	-3.207E(-1)

Table 2. Experimental and theoretical results of Mg IX (eV)**表 2.** Mg IX 的实验值和理论值(eV)

组态	谱项	本文	NIST	Bhatia	Hu
1s ² 2s2p	³ P ₀	17.71	17.42	17.53	17.34
	³ P ₁	17.85	17.56	17.67	17.57
	³ P ₂	18.16	17.87	18.00	17.87
	¹ P ₁	35.66	33.68	34.63	33.64
1s ² 2p ²	³ P ₀	46.46	45.36	45.89	45.34
	³ P ₁	46.62	45.52	46.06	45.50
	³ P ₂	46.89	45.79	46.34	45.76
	¹ D ₂	52.55	50.23	51.35	50.29
	¹ S ₀	65.13	61.95	63.74	63.09

表 2 给出了 1s²2s2p 和 1s²2p² 的实验值和理论值。实验值采用 National Institute of Standards and Technology (NIST) 给出的数值[11]。其他理论值 Bhatia 等人采用扭曲波方法[12]以及 Hu 等人采用多组态 Dirac-Hartree-Fock 方法[13]给出的结果。当前计算值与实验值的偏差在 1.59%~5.55%，高于 Bhatia 等人的 0.62%~2.81%和 Hu 等人的 0%~1.81%，产生的原因有三，一是当前只是计算了固定的几个组态，没有 Bhatia 等人和 Hu 等人所讨论的组态数目多；二是没有考虑高阶轨道对当前计算的影响；三是 Hu 等人的计算结果根据实验值进行了修正。需要注意的是对于 1s²2p² ¹S₀，当前三种理论值与实验值偏差较大，偏差在 1.81%~4.88%，说明该能级的实验值还需要进一步确认。

为了更好验证当前计算的精确性，在图 1 对比了当前计算值与实验值和理论值的差异。采用来自 Boiko 等人的实验值[14]作为基准，图中的其他理论值则来自 Hu 等人的工作[13]，需要注意的是，Hu 等人给出了原始计算值和修正值。当前计算值与实验值的平均差异只有 0.028%，而 Hu 等人的原始计算值和修正值差异分别是 0.056%和 0.151%。需要注意的是，实验值的不少波长值是没有办法进行区分的，因此还需要其他实验和理论来验证当前这些值。

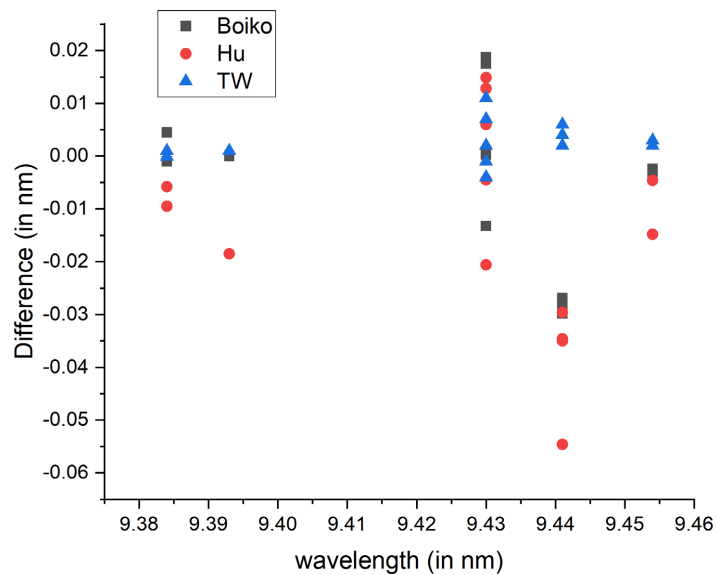


Figure 1. Comparison of current partial transition wavelengths with experimental values and other theoretical values. Hu-FIT, the calculated corrected value, Hu, the calculated original value, TW, this work

图 1. 当前部分跃迁波长与实验值和其他理论值的比较。Hu-FIT 为计算修正值，Hu 为计算原始值，TW 为当前工作

3.2. 等离子体参数

辐射参数(跃迁波长、跃迁概率等)的变化会导致等离子体参数的改变。将等离子体视为局域热动平衡下的光学薄等离子体，能简化高温稠密等离子体的表征与分析过程。高温稠密等离子体中任意两条谱线的强度比与等离子体温度、辐射数据的关系可参阅相关文献[8]。

根据文献[8]给出的公式，即

$$R = \frac{I_1}{I_2} = \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \frac{A_1}{A_2} \frac{g_1}{g_2} \exp\left(-\frac{E_1 - E_2}{kT}\right) \quad (8)$$

R 为线强度比， λ 为波长， A 为跃迁几率， k 为玻尔兹曼常数， E 为上下能级的能量， g 为 g 因子。类铍离子高温稠密等离子体电子密度最小值由下式给出：

$$n_e \geq 1.6 \times 10^{12} T^{\frac{1}{2}} (\Delta E)^3 \quad (9)$$

其中， n_e 为电子密度， T 为等离子体温度(单位：开尔文，K)， ΔE 上下两个能级的能级差(单位：电子伏特，eV)。

$$n_e = 0.124 \times 10^{-9} \omega_e^2 \quad (10)$$

$$n_e = 28.1961 \times 10^{10} \delta^{-2} \quad (11)$$

$$\Gamma = 0.225593 \times 10^{-2} \times n_e^{\frac{1}{3}} T^{-1} \quad (12)$$

上述公式中， ω_e 、 δ 、和 Γ 分别为等离子体频率、趋肤深度和耦合参数。

本文选取 $1s^2 2s^2 1S_0 - 1s^2 2s 2p^3 P_1$ 和 $1s^2 2s^2 1S_0 - 1s^2 2s 2p^1 P_1$ 两条谱线， λ 分别为 7.0606 nm 和 3.6807 nm，表 3 给出不同等离子体温度和电子密度下的线强度比及其他等离子体参数。

Table 3. Plasma temperature (T in K), Line intensity ratio (R), electron density (n_e in cm^{-3}), Plasma frequency (ω) in Hz and skin depth (δ) in cm for optically thin plasma for spectral lines of Mg IX

表 3. 光学薄等离子体中 Mg IX 谱线对应的等离子体温度(T , 单位: K)、谱线强度比(R)、电子数密度(n_e , 单位: cm^{-3})、等离子体频率(ω , 单位: Hz)及趋肤深度(δ , 单位: cm)

T (K)	R	n_e (cm^{-3})	ω_e (Hz)	δ (cm)
2×10^6	8.333E-06	9.486E+18	2.766E+14	1.724E-04
4×10^6	8.732E-06	1.341E+19	3.289E+14	1.450E-04
6×10^6	8.869E-06	1.643E+19	3.640E+14	1.310E-04
8×10^6	8.939E-06	1.897E+19	3.911E+14	1.219E-04
10×10^6	8.981E-06	2.121E+19	4.136E+14	1.153E-04
2×10^7	9.133E-06	6.708E+19	7.355E+14	6.483E-05
2×10^8	9.148E-06	2.121E+20	1.307E+15	3.646E-05
2×10^9	9.150E-06	6.708E+20	2.325E+15	2.050E-05

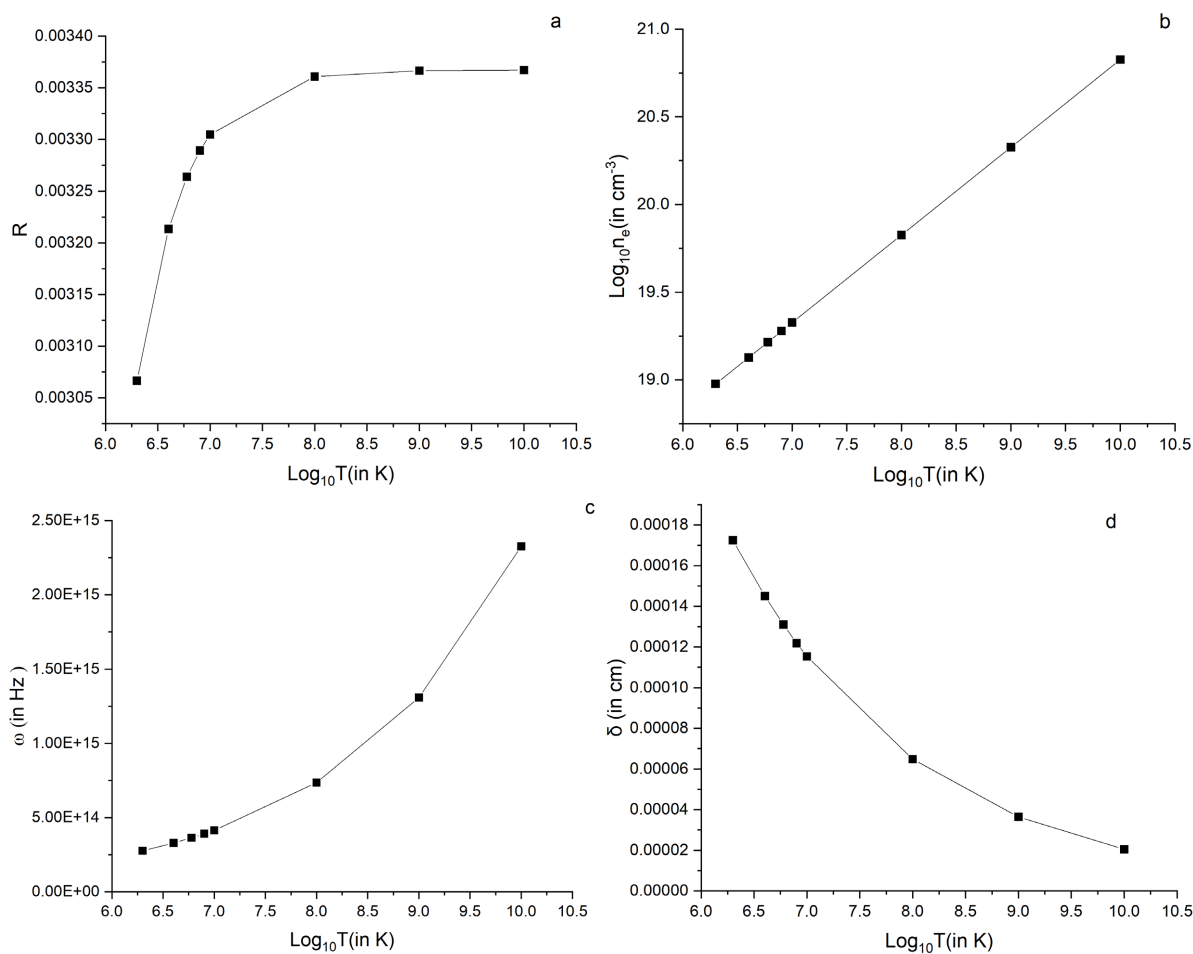


Figure 2. (a) Line intensity ratio; (b) Electron density; (c) Plasma frequency; (d) Skin depth as a function of plasma temperature for hot dense plasma of Mg IX for spectral lines

图 2. Mg IX 等离子体中, 各谱线的(a) 谱线强度比; (b) 电子数密度; (c) 等离子体频率; (d) 趋肤深度随等离子体温度的变化关系

图 2(a)绘制了线强度比随等离子体温度的变化规律, 分析发现: 对于温度高达 10^8 K (10 keV) 的高温稠密等离子体, 线强度比随温度呈指数变化; 而对于温度达 MeV 量级的高温稠密等离子体, 线强度比几乎无变化。为更清晰地展示重离子高温稠密等离子体的电子密度随温度的变化规律, 图 2(b)采用对数坐标绘制, 结果显示两者呈单调递增的正相关。这反映了高温条件下等离子体电离度提高的物理过程: 温度越高, 重离子发生更高阶电离的概率越大, 从而释放出更多自由电子, 导致电子密度增加。图 2(c)和图 2(d)分别绘制了等离子体频率和趋肤深度随等离子体温度的变化规律, 二者变化趋势完全相反。这一反比关系具有明确的物理意义: 等离子体频率 $\omega_p = \sqrt{n_e e^2 / (\epsilon_0 m_e)}$ 随电子密度增大而升高, 而趋肤深度 $\delta = c / \omega_p$ 则反映了电磁波在等离子体中的穿透能力。随着温度升高, 电子密度增大, 等离子体频率升高, 导致电磁波的穿透深度变浅, 即等离子体对电磁波的反射性增强。

根据上述图像, 可以得到类铍镁离子高温稠密等离子体的其他关键特征: ① 趋肤深度处于纳米量级, 等离子体频率处于 PHz 量级, 均位于紫外波段; ② 高温稠密等离子体具有高导电性, 其导电性可通过电子密度 n_e 和温度 T 调控; ③ 对于所有电子密度和温度下的 MgIX 离子高温稠密等离子体, 满足公式(12)的等离子体耦合常数均小于 1, 符合高温稠密弱耦合等离子体的判定条件。

4. 结论

本文采用 MCDF 方法, 通过相对论组态相互作用计算纳入 Breit 和量子电动力学修正的贡献, 对类铍镁离子的光谱特性进行了详细研究。本文给出了 Mg IX 的精细结构能级, 以及跃迁的辐射率、振子强度、线强度、跃迁波长等辐射数据。GRASP2 程序包计算的精细结构能级与其他结果的偏差较小, 证实了本文计算结果的真实性和可靠性。

综上, 本文对类铍镁离子的原子参数进行了可靠、全面的研究与分析, 所得数据可为高温稠密等离子体的建模与表征提供参考, 还可用于聚变和天体物理等离子体源的新数据挖掘, 以及极紫外和 X 射线谱线的标定与分析。此外, 本文还利用原子参数, 以图形方式阐释了温度和电子密度对高温稠密等离子体其他参数的影响规律, 发现除趋肤深度外, 线强度比和高温稠密等离子体的所有参数均随温度升高呈增长趋势, 同时通过耦合常数验证了高温稠密等离子体的弱耦合特性。

致 谢

感谢徐州工程学院物理与新能源学院提供计算服务器资源。

基金项目

本文为徐州工程学院 2024 年度大学生创新训练计划项目“光伏制造下光刻光源原子光谱的研究”(xcx2024133)。

参考文献

- [1] 王翔, 何建君, 魏佳亮, 等. 极紫外光刻的随机性问题及其研究进展[J]. 中国激光, 2024, 51(7): 93-112.
- [2] 李笑然, 唐何涛, 赵娇玲, 等. 6. X nm 下一代极紫外多层膜技术研究进展[J]. 中国激光, 2024, 51(7): 159-171.
- [3] Zhou, X.P., Liu, X., Wen, W.Q., et al. (2025) High-Precision EUV Spectroscopy of the $2s2p\ ^1P_1-2s^2\ ^1S_0$ Transition in Be-Like S^{12+} and Cl^{13+} : Test of QED Effects. *Physical Review A*, **112**, Article 062815.
- [4] Wang, K., Guo, X.L., Liu, H.T., et al. (2015) Systematic Calculations of Energy Levels and Transitions Rates of Be-Like Ions with $Z = 10 - 30$ Using a Combined Configuration Interaction and Many-Body Perturbation Theory Approach. *The Astrophysical Journal Supplement*, **218**, Article 16.
- [5] Träbert, E. (2014) E1-Forbidden Transition Rates in Ions of Astrophysical Interest. *Physica Scripta*, **89**, Article 114003. <https://doi.org/10.1088/0031-8949/89/11/114003>

-
- [6] Wang, Y.P., Deng, B.L., Jiang, S.Y., *et al.* (2024) Relativistic Configuration-Interaction Calculations on K_{α} X-Ray Satellites of Medium-Charge Be-Like Ions. *Physica Scripta*, **99**, Article 065401. <https://doi.org/10.1088/1402-4896/aceabb>
- [7] Li, K.K. and Gou, B.C. (2019) Radiative Transition Wavelengths and Lifetimes for the Quintet States in Be-Like Ions. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **229**, 4-10. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2019.03.003>
- [8] Singh, N., Goyal, A. and Mohan, M. (2018) Theoretical Study of Extreme Ultraviolet and Soft X-Ray Transitions of in XLVI and Sn XLVII with Plasma Parameters. *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, **227**, 23-30. <https://doi.org/10.1016/j.elspec.2018.06.003>
- [9] Masoudnia, L. and Bleiner, D. (2015) Optimum Pump Pulse Duration for X-Ray Ar-Plasma Lasing. *Photonics*, **2**, 164-183. <https://doi.org/10.3390/photonics2010164>
- [10] Parpia, F.A., Fischer, C.F. and Grant, I.P. (1996) GRASP92: A Package for Large-Scale Relativistic Atomic Structure Calculations. *Computer Physics Communications*, **94**, 249-271. [https://doi.org/10.1016/0010-4655\(95\)00136-0](https://doi.org/10.1016/0010-4655(95)00136-0)
- [11] Kramida, A. (2025) NIST Atomic Spectra Database. <http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD>
- [12] Boiko, V.A., Chugunov, A.Y., Ivanova, T.G., Faenov, A.Y., Holin, I.V., Pikuz, S.A., *et al.* (1978) He-Like Ion Resonance-Line Satellites Radiated from Be-Like Ions. *Monthly Notices of the Royal Astronomical Society*, **185**, 305-324. <https://doi.org/10.1093/mnras/185.2.305>
- [13] Hu, F., Zhang, S.F., Sun, Y., *et al.* (2017) Transition Properties of the Be-Like K-Alpha X-Ray from Mg IX. *Pramana*, **89**, Article No. 86. <https://doi.org/10.1007/s12043-017-1489-6>
- [14] Bhatia, A.K. and Landi, E. (2007) Atomic Data and Spectral Line Intensities for Mg IX. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **93**, 742-778. <https://doi.org/10.1016/j.adt.2007.06.001>