第 53 卷 第 10 期 2004 年 10 月
1000-3290/2004/53(10)/3326-04

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.53,No.10,October,2004
©2004 Chin. Phys. Soc.

超重元素 Bh($Z=107$)的激发态结构和共振吸收率的理论预言*

丁晓彬[1)] 董晨钟[1)2)†]

[1)](西北师范大学物理与电子工程学院,兰州 730070)

[2)](兰州重离子加速器国家实验室原子核理论中心,兰州 730000)

(2003 年 11 月 27 日收到;2004 年 1 月 16 日收到修改稿)

在成功预言了 100 号元素 Fm 低激发态能级结构的基础上,通过系统考虑电子相关效应和相对论效应,使用 MCDF 方法进一步预言了 107 号元素 Bh 的几个较低的激发态能级以及由基态到这些激发态的共振吸收率.期望预言的结果会对进一步的实验工作提供一定的帮助.

关键词:超重元素,MCDF 方法,低激发态结构

PACC:3120,3120B,3120T

1. 引 言

超重原子(离子)结构和性质的研究一直是原子物理学的一项挑战.截至目前,人们对于这类元素的原子结构还知之甚少.这主要是因为三个方面的原因:1)在这些原子中,存在着很强的相对论效应和量子电动力学(QED)效应;2)对于具有开放 d 和 f 壳层的高 Z 原子的电子组态,邻近能级的简并尤为明显;3)高 Z 原子中包含大量电子,要较好地利用从头计算方法来预言这类原子的能级结构和性质,必须系统的考虑原子中大量电子之间的相互作用.这些原因成为超重原子结构精确计算的主要困难,甚至对铀原子以下的重原子也是如此.

在有关超重原子(离子)结构早期研究中,人们一般考虑了相对论效应.但是,对于电子相关效应的处理却不是很好.如 Tucker 等人对重原子轨道能的 Dirac-Fock-Slater[1,2] 计算和 Fricke 等人对超重原子轨道能的 Dirac-Fock(MCDF)[3,4] 计算,虽然为重原子($Z\geqslant100$)的电子轨道能以及占据方式提供了一个总的概括,甚至提出了直到 172 号元素可能的元素周期表结构,但没有给出能级的精细结构;Eliav 等人利用耦合团簇方法计算了超重元素($Z=104$,111)的基态能量[5,6],然而他们的计算仅仅局限在具有一两个电子或者空洞的电子组态.近来,Johnson 等人使用多组态 Dirac-Fock 方法预言了核电荷数为 107 和 108 的 Bh 和 Hs 的离化能和位置较低的几个激发态能级[7];但由于在他们的预言中仅仅考虑了为数不多的几个组态之间的相互作用,因此计算结果的误差也是比较大的.

最近,Ren 等人对超重元素核的基态性质进行了相对论平均场的研究[8],同时,$Z=100$ 的超重元素 Fm 能级的理论和实验研究也取得了重要进展[9,10].一些评论家认为这项工作"为研究放射性元素 Fm 投下了一缕曙光"[11].在该工作中,通过在 MCDF 方法中包括多达上万个相关组态而系统地考虑 Fm 的低激发态能级计算中的相关效应和相对论效应.基于预言结果,Sewtz 等人采用两步共振电离谱(RIS)技术测量了最低的两个共振能级的位置.实验中,先将一束可调谐染料激光脉冲照射到样品上,使原子共振吸收光子的能量而处在某一待测能级;与此同时,用另一束可调谐准分子激光脉冲同步照射样品.若第二束激光的能量适当,则可使先前原子中处在激发态的电子被剥去(电离)而使原子

* 国家自然科学基金项目(批准号:10274062,10376026),教育部优秀青年教师资助计划项目,兰州重离子加速器国家实验室原子核理论中心基金及西北师范大学科技创新工程项目(批准号:NWNU-KJCXGC-214)资助的课题.

† 通信联系人

变成离子. 实验观测和理论计算具有良好的一致性，这充分显示了 MCDF 方法与共振电离谱实验技术有机结合在研究超重元素的能级结构方面的有效性和能力，因而对于进一步开展镄原子及其他更重元素的电子结构的研究是十分有用的. 本工作将这种成功用于较轻元素结构研究[12,13]的理论方法推广应用到更重元素 Bh (Z = 107) 的能级结构和共振吸收率的预言中.

2. 理论方法

2.1. MCDF 理论

有关多组态 MCDF 理论已有详细的描述[14—19]，这里仅作扼要的介绍. 在多组态 MCDF 理论中，一个核电荷数为 Z、具有 N 个电子的原子或离子体系的 Dirac-Coulomb 哈密顿量为(原子单位)

$$\hat{H}_{\mathrm{DC}} = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_i + \sum_{i<j}^{N} |\hat{r}_i - \hat{r}_j|^{-1}, \qquad (1)$$

这里 $\hat{H}_i$ 是第 i 个电子的 Dirac 哈密顿量，可表示为

$$\hat{H}_i = c\hat{\alpha}\cdot\hat{p}_i + (\beta - 1)c^2 + V_{\mathrm{nuc}}(\hat{r}_i), \qquad (2)$$

其中 $V_{\mathrm{nuc}}(\hat{r}_i)$是核势场，$\hat{\alpha}$和 β 分别是 Dirac 矢量和标量矩阵，$\hat{p}_i$ 是第 i 个电子的动量算符，c 是真空中光速.

在中心力场近似下单电子的旋轨波函数可表示为

$$\psi_{nkm} = \frac{1}{r}\begin{bmatrix} P_{nk}(r)\chi_{km}(\theta,\phi) \\ \mathrm{i}Q_{nk}(r)\chi_{-km}(\theta,\phi) \end{bmatrix}, \qquad (3)$$

式中 k 为 Dirac 量子数，$P_{nk}(r)$和 $Q_{nk}(r)$分别为相对论径向波函数的大小分量，χ_{km}为自旋函数.

N 电子体系的组态波函数$|\Gamma_r(PJM)\rangle$是所有单电子旋-轨波函数组成的 N 阶 Slater 行列式波函数$|\Psi_p\rangle$的线性组合，即

$$|\Gamma_r(PJM)\rangle = \sum_p B_{rp}|\Psi_p\rangle. \qquad (4)$$

在 MCDF 方法中，任一原子态 α 的波函数$|\alpha(PJM)\rangle$由具有相同 P，J 和 M 量子数的组态波函数$|\Gamma_r(PJM)\rangle$线性组合而成，即

$$|\alpha(PJM)\rangle = \sum_{r=1}^{n_c} C_r(\alpha)|\Gamma_r(PJM)\rangle, \qquad (5)$$

式中 n_c 是组态波函数的个数，$C_r(\alpha)$为组态混合系数.

对角化由原子态波函数(5)式构造的哈密顿矩阵，则可得到相关原子态的能量和组态混合系数. 对于其他高阶的相对论效应，如 Breit 修正[11]和主要的量子电动力学 QED 效应[11—13]，可作为微扰处理.

2.2. 共振吸收率

根据含时微扰理论，单位时间量子体系从高能态 i 到低能态 k 的爱因斯坦自发辐射跃迁概率 A^r_{ik}为

$$A^r_{\mathrm{ik}} = \frac{4e^2\omega^3_{\mathrm{ik}}}{3\hbar c^3}|\langle\alpha_{\mathrm{k}}(PJM)|P^{(1)}|\alpha_{\mathrm{i}}(P'J'M')\rangle|^2, \qquad (6)$$

式中$\langle\alpha_{\mathrm{k}}(PJM)|$和$|\alpha_{\mathrm{i}}(PJM)\rangle$分别为高能态 i(相应的能量为 E_{i})和低能态 k(相应的能量为 E_{k})的原子态波函数，它们可以通过组态波函数(CSF)线性组合而成，$P^{(1)}$是辐射电磁场的偶极张量算符. 该过程中辐射的光子的频率为 $\nu_{\mathrm{ik}} = (E_{\mathrm{i}} - E_{\mathrm{k}})/h$.

反过来，如果量子体系在频率为 ν_{ik}的共振光(即从高能态 i 到低能态 k 共振跃迁辐射出的光子的频率) 的照射下，根据细致平衡原理，则体系通过共振光吸收可以从低能态 k 激发到到高能态 i. 共振吸收率用爱因斯坦吸收系数 B_{ik}来表示，它与自发辐射跃迁概率 A^r_{ik}有如下关系：

$$B_{\mathrm{ik}} = \frac{c^3}{4h\nu^3_{\mathrm{ik}}}A^r_{\mathrm{ik}}. \qquad (7)$$

3. 结果和讨论

Bh 原子中有 107 个电子，中性 Bh 的基态为 $6d^57s^2$，较低的激发组态为 $6d^57s7p$. 为了在计算中尽可能全面的考虑电子相关效应，我们应该选择尽可能多的 CSF 来展开原子态波函数 (ASFs). 为此，首先把所有计算中涉及到的能级按照总角动量和宇称分为不同的组：对于中性 Bh 原子的基组态 $6d^57s^2$，考虑了所有 J = 5/2 的能级；对于激发组态 $6d^57s7p$，考虑了 J = 3/2，5/2，7/2 的所有能级；对于一次电离 Bh Ⅱ 的 $6d^57s$ 组态，考虑了 J = 0 的所有能级. 其次，对于按照上边这样分组的每组能级，分别考虑了两种不同的相关近似模型：1) 由这些组态向 {6f，7s，7p，6d} 活动基分别激发一个、二个、三个和四个电子形成相关模型 7SDTQ；2) 在 7SDTQ 模型的基础上，进一步考虑了由这些组态向 {6f，7s，7p，6d，8s，8p} 活动基分别激发一个和两个电子形成相关模型 8SD. 表 1 列出了两种不同相关近似模型下各个能级组包含的 CSF 的个数 n_c. 显然，其数值大小代表了计算的复杂性和对电子相关效应考虑的全面性.

表 1 两种不同相关近似模型下，Bh 原子基态 $6d^5 7s^2$，激发态 $6d^5 7s7p$ 和一次电离态 $6d^5 7s$ 对应的 CSF 的数目

参考组态	J^P	n_c	
		7SDTQ	8SD
$6d^5 7s^2$	5/2 +	497	6632
$6d^5 7s7p$	3/2 −	432	16872
	5/2 −	490	20923
$6d^5 7s7p$	7/2 −	441	21320
$6d^5 7s^1$	0 +	105	1123

从表 1 中可以看出，在每一个能级组中，8SD 模型包含的组态波函数的个数远远高于 7SDTQ 近似，在后面的计算中将采用 8SD 这个对相关效应考虑的更为全面的近似模型. 表 2 列出了 20 个能量较低的从基态 $6d^5 7s^2$ 到低激发态 $6d^5 7s7p$ 的可能的共振吸收能量和吸收率. 从表中可以看出，在这些共振吸收中有 6 个很强的共振吸收，它们分别相应于 7，8，9，10，11 和 14 能级.

表 2 从基态 $6d^5 7s^2$ $J = 5/2$ 到低激发态 $6d^5 7s7p$ 的共振吸收能和吸收率

No.	J_f^P	共振吸收能/cm^{-1}	吸收率/$m^3 s^{-2} J^{-1}$ *	No.	J_f^P	共振吸收能/cm^{-1}	吸收率/$m^3 s^{-2} J^{-1}$ *
1	5/2 −	15711.5，15082.4[7]	3.320 (17)	11	7/2 −	29584.2	4.479 (19)
2	3/2 −	16655.2	2.813 (16)	12	3/2 −	30769.8	1.179 (19)
3	7/2 −	19091.0	3.780 (17)	13	5/2 −	31229.5	3.183 (17)
4	5/2 −	19332.9	1.153 (18)	14	5/2 −	32963.6	4.063 (19)
5	3/2 −	19357.1	4.141 (18)	15	3/2 −	33052.3	1.417 (18)
6	7/2 −	22204.3	1.786 (18)	16	3/2 −	33858.9	2.458 (18)
7	5/2 −	24930.4	5.029 (19)	17	7/2 −	33947.6	6.055 (18)
8	3/2 −	28551.8	2.273 (20)	18	5/2 −	34955.8	3.089 (19)
9	5/2 −	28003.3	4.603 (19)	19	7/2 −	35020.3	1.419 (19)
10	7/2 −	28503.4	6.907 (19)	20	5/2 −	35883.3	2.482 (17)

* $a(b)$表示 $a \times 10^b$.

在 RIS 技术中，被第一束激光激发而处于共振激发态的原子还要被第二束激光电离. 因此，电离能数据对于这类实验具有重要的指导意义. 理论上，原子的电离能等于一次离化离子的基态能量与中性原子的基态能量之差. 为了计算 Bh 的电离能，对于一次电离的 Bh 离子的能级我们也使用了和中性 Bh 原子相同的相关模型计算了它的能量. 结果表明，$6d^5 7s$ 组态的基态相应于总角动量 $J = 0$ 的最低能级. 表 3 列出了在 7SDTQ 和 8SD 近似下计算的 Bh 原子的电离能，同时还列出了以前 MCDF 计算结果和半经验外推结果[7].

从表3可以看出，如果对 Bh Ⅰ 和 Bh Ⅱ 的两个基态都使用 8SD 近似，计算得到的电离能（7.33 eV）非常接近于半经验外推值（7.7 eV）. 而在 7SDTQ 近似下计算结果比半经验外推值要小 0.77eV. 这些事实表明，当前计算的电离能的不确定度约小于 0.5eV.

表 3 Bh 原子的电离能(单位：eV)

基态		目前计算		以前计算[7]	半经验外推[7]
Bh Ⅰ	Bh Ⅱ	7SDTQ	8SD		
$6d^5 7s^2$ ($J = 5/2$)	$6d^5 7s$ ($J = 0$)	6.93	7.33	6.82	7.7

4. 结 论

本文在相对论多组态 Dirac-Fock 理论框架下，通过系统考虑电子间的关联效应，研究了重元素 Bh Ⅰ 的几个较低激发态的共振吸收能、共振吸收率以及 Bh Ⅰ 的电离能. 目前计算的电离能与已有的半经验外推结果的良好一致性间接证明本文有关低激发态能级预言的可靠性. 详细了解原子的激发态能级结构及由基态到这些激发态的共振吸收率，对于进一步进行共振电离谱(RIS)的实验研究具有重要的指导意义，我们期望我们的计算能够为进一步的实验研究提供帮助.

[1] Tucker T C, Roberts L D, Nestor C W, Carlson T A and Malik F B 1968 *Phys. Rev.* **174** 118
[2] Fricke B *et al* 1971 *Theor. Chim. Acta* **21** 235
[3] Fricke B, Desclaux J P and Waber J T 1972 *Phys. Rev. Lett.* **28** 714
[4] Nugent L J, Vander Sluis K L, Fricke B and Mann J B 1974 *Phys. Rev.* A **9** 2270
[5] Eliav E, Kaldor U, Schwerdtfeger P, Hess B A and Ishikawa Y 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 3203
[6] Eliav E, Kaldor U and Ishikawa Y 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 1079
[7] Johnson E *et al* 2002 *J. Chem. Phys.* **116** 1862
[8] Ren Z Z *et al* 2003 *Phys. Rev.* C **67** 064302
[9] Sewtz M *et al* 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 163002
[10] Sewtz M *et al* 2003 *Spec. Acta. Part.* B **58** 1077
[11] Peter Weiss 2003 *Science News* **163** 349
[12] Xie L Y *et al* 2002 *Acta. Phys. Sin.* **51** 1965(in Chinese) [颉录有等 2002 物理学报 **51** 1965]
[13] Dong C Z *et al* 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 66(in Chinese) [董晨钟等 2003 物理学报 **52** 66]
[14] Parpia F A, Fischer C F and Grant I P 1996 *Compt. Phys. Commun.* **94** 249
[15] Grant I P, Mckenzie B J and Norrington P H 1980 *Compt. Phys. Commun.* **21** 207
[16] Grant I P, Relativistic atomic structure 1996 *Atomic, Molecular and Optical Physics Reference Book* ed. G. W. F. Drake (New York: American Institute of Physics) p258
[17] Jonsson P, Parpia F A and Fischer C F 1996 *Comput. Phys. Commun.* **96** 301
[18] Mohr P J 1974 *Ann. Phys.* (NY) **88** 26
Mohr P J 1975 *Phys. Rev. Lett.* **34** 1050
Mohr P J 1982 *Phys. Rev.* A **58** 1885
[19] Grant I P 1974 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **7** 1458

Theoretical predictions on the low-lying excitation structure of super-heavy element bohrium (Z = 107)*

Ding Xiao-Bin[1)]　Dong Chen-Zhong[1)2)]

[1)] (*College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou* 730070, *China*)

[2)] (*Center of Theoretical Nuclear Physics, National Laboratory of Heavy Ion Accelerator of Lanzhou, Lanzhou* 730000, *China*)

(Received 27 November 2003; revised manuscript received 16 January 2004)

Abstract

The success of theoretical and experimental study of fermium (Z = 100) enlightened us to perform further investigation of heavy elements. We studied some low-lying absorption spectroscopy and the resonant absorption probability of bohrium (Z = 107) by using MCDF method which included the correlation effects and relativistic effects systematically. We hope our results will be useful for the further experiments.

Keywords: super-heavy element, MCDF, the structure of low-lying excitation states
PACC: 3120, 3120B, 3120T

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10274062, 10376026), Foundation for the Excellent Youth Scholars of the Ministry of Education of China, and by Foundation of Center of theoretical Nuclear Physics of National Laboratory of Heavy Ion Accelerrator of Lanzhou and the Foundation of Northwest Normal University (Grant No. NWNU-KJCXGC-214).