

Cd⁺ 离子 $5s^2S_{1/2} \rightarrow 5p^2P_{3/2}$ 电子碰撞激发截面和退激辐射光子极化度的理论研究

焦飞 蒋军 颀录有 张登红 董晨钟 陈展斌

Theoretical study on electron-impact excitation cross section and polarization for $5s^2S_{1/2} \rightarrow 5p^2P_{3/2}$ of Cd

Jiao Fei Jiang Jun Xie Lu-You Zhang Deng-Hong Dong Chen-Zhong Chen Zhan-Bin

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 233401 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.233401

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.233401>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I23>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

共面双对称条件下电子碰撞 Ar 原子单电离的一阶扭曲波 Born 近似

First-order distorted wave Born approximation for single ionization of Ar by electron impact in a coplanar doubly symmetric geometry

物理学报.2014, 63(15): 153401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.153401>

屏蔽效应对氦原子 (e2e) 反应中二重微分截面和单微分截面的影响

Influence of screening effect on double differential cross section and single differential cross section for (e 2e) process of helium

物理学报.2013, 62(18): 183402 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.183402>

共面不对称条件下低能电子碰撞电离 Ar(3p) 的三重微分截面

Triple differential cross section for the ionization of Ar(3p) by low-energy electron impact in the coplanar asymmetric geometry

物理学报.2013, 62(18): 183401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.183401>

CSR 上 C⁶⁺ 脉冲束激发 Au 靶的 X 射线辐射

X-ray emission of C⁶⁺ pulsed ion beams of CSR impacting on Au target

物理学报.2013, 62(17): 173401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.173401>

二重微分散射截面中非一阶效应的理论研究

A theoretical study on non-first-order effects of double differential cross sections

物理学报.2013, 62(16): 163401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.163401>

Cd⁺ 离子 5s²S_{1/2} → 5p²P_{3/2} 电子碰撞激发截面和退激辐射光子极化度的理论研究*

焦飞 蒋军[†] 颌录有 张登红 董晨钟[‡] 陈展斌

(甘肃省原子分子物理与功能材料重点实验室, 西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070)

(2015年7月15日收到; 2015年8月22日收到修改稿)

本文采用全相对论扭曲波方法计算了 Cd⁺ 离子 5s²S_{1/2} → 5p²P_{3/2} 电子碰撞激发总截面、磁能级的激发截面以及退激辐射光子极化度. 详细讨论了电子关联效应对激发截面以及退激辐射光子极化度的影响. 我们发现, 在低能碰撞部分 (<10 eV), Core-价关联对电子碰撞激发截面的贡献非常重要, 与不考虑 Core-价关联的结果相比, Core-价关联的计算结果使得激发截面降低了 1/2 到 2/3; 在高能碰撞部分 (>80 eV), Core-价关联的贡献不是非常明显, 但与不考虑 Core-价关联的结果相比, 其激发截面也降低了 15%. 然而, 对于退激辐射光子极化度, Core-价关联的贡献非常小, 其影响是可以忽略的.

关键词: 电子碰撞激发截面, 极化度, 相对论扭曲波方法, Core-价关联

PACS: 34.80.Dp

DOI: 10.7498/aps.64.233401

1 引言

电子与原子的碰撞激发过程是高温等离子体、实验室等离子体和天体等离子体中重要的物理过程. 碰撞激发截面以及退激光子极化度对天体元素丰度的分析、对天体辐射动力学过程的认识、对等离子体物理条件的判断等都具有重要的应用价值. 在各向异性的等离子体中, 电子碰撞激发到各个磁子能级的截面不相同, 这就导致退激辐射光子是极化的, 因此, 电子与原子(离子)碰撞激发截面以及退激光子极化度的研究已成为现代物理学研究的热门领域^[1].

碱金属原子以及类碱金属离子的基态为 ²S_{1/2}, 激发态有 ²P_{1/2,3/2} 等, 对于 ²P_{1/2} 态, 磁能级只有 $M = +1/2, -1/2$, 在各向异性的等离子体中, 其磁能级的布居仍然是相同的, 所以 ²P_{1/2} 退激辐射光子的极化度为 0. 而对于 ²P_{3/2} 态, 磁能级有 $M = +3/2, +1/2, -1/2$, 和 $-3/2$, 在各向异性的

等离子体中, 其磁能级的布居是不相同的, ²P_{3/2} 到基态的退激辐射光子的极化度不为 0, 因此人们对 ²P_{3/2} 的碰撞激发参数非常感兴趣. 最近, Bostock 等^[2] 使用全相对论密耦合 (RCCC) 方法^[3,4] 计算了 Cd⁺ 离子 5s²S_{1/2} → 5p²P_{3/2} 电子碰撞激发截面与退激光子极化度, 为了讨论 Core-价关联效应对激发截面与退激辐射光子极化度的影响, 他们采用了半经验的 Core 极化势的方法, 当没有考虑极化势时同时考虑辐射级联效应时, 他们计算的碰撞激发截面与 Gomonai 等^[5] 的实验结果在低能时符合较好, 在高能时有较大差异; 当考虑了极化势同时考虑辐射级联效应时, 他们的结果与实验结果^[5] 在高能时符合较好, 在低能时有较大差异, 同时 Bostock 等^[2] 还计算了 Cd⁺ 离子 5s²S_{1/2} → 5p²P_{3/2} 退激光子极化度, 他们发现现有的理论计算结果^[2,6] 是相互一致的, 但与 Goto 等^[7] 的实验测量结果有差异, 尤其是当入射电子能量大于 80 eV 时, 这种差异非常明显. Sharma 等^[6]

* 国家自然科学基金(批准号: 11274254, U1332206, U1331122, 11464042)资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: jiangjun@nwnu.edu.cn

[‡] 通信作者. E-mail: dongcz@nwnu.edu.cn

用相对论扭曲波(RDW)方法^[8-10]也计算了Cd⁺离子5s²S_{1/2} → 5p²P_{3/2}电子碰撞激发截面,他们发现相对论扭曲波的结果^[6]在整个入射电子能量范围内与其他理论结果^[2,11]、实验结果^[5]相比均有非常大的差异,在低能部分,他们的结果甚至是实验结果的数倍,但是对于5s²S_{1/2} → 5p²P_{3/2}退激光子极化度的计算,Sharma等^[6]的结果与Bostock等^[2]的结果基本一致,与实验结果^[5]在高能部分有明显差异.为了说明实验与理论之间的差别以及不同理论之间的差别,还需要理论与实验作进一步的研究.

我们基于多组态Dirac-Fock(MCDF)方法以及相关的Grasp92^[12]和Ratip程序包发展的RDW方法和计算程序REIE06^[13,14],计算了Cd⁺离子5s²S_{1/2} → 5p²P_{3/2}电子碰撞激发截面与退激辐射光子极化度,详细讨论了电子关联效应对电子碰撞激发截面与极化度影响,并与已有的实验以及理论结果做详细的比较.

2 理论方法

2.1 碰撞激发截面的计算

在相对论扭曲波方法中,具有一定能量ε(单位: Ry)的自由电子与靶离子碰撞,使其从初态磁子能级激发到末态磁子能级的电子碰撞激发截面可以用下式计算:

$$\begin{aligned} & \sigma_m(i \rightarrow f) \\ &= \frac{2\pi a_0^2}{\kappa_i^2} \sum_{\substack{l_i, l'_i, j_i, j'_i, \\ m_{s_i}, l'_f, m_f}} \sum_{J, J', M} (i)^{l_i - l'_i} \\ & \times [(2l_i + 1)(l'_i + 1)]^{1/2} \exp[i(\delta_{\kappa_i} - \delta'_{\kappa_i})] \\ & \times C\left(l_i \frac{1}{2} m_{l_i} m_{s_i}; j_i m_i\right) C\left(l'_i \frac{1}{2} m_{l'_i} m_{s_i}; j'_i m_i\right) \\ & \times C(J_i j_i M_i m_i; JM) C(J_i j_i M_i m_i; J' M) \\ & \times C(J_f j_f M_f m_f; JM) C(J_f j_f M_f m_f; J' M) \\ & \times R(\gamma_i, \gamma_f) R(\gamma'_i, \gamma'_f), \end{aligned} \quad (1)$$

其中*i, f*分别表示碰撞体系的初、末态, δκ 为连续电子的库仑相移, κ为其相对论量子数, *C*为Clebsch-Gordan, *J*为碰撞体系的总角动量, *M*为其*z*方向的分量, *R*为与*M*无关的散射矩阵元,可以表示为

$$R(\gamma_i, \gamma_f)$$

$$\begin{aligned} &= \left\langle \alpha_f P_f J_f M_f, \varepsilon_f k_f; J \left| \sum_{p, q, p < q}^{N+1} (V_{\text{coul}} \right. \right. \\ & \left. \left. + V_{\text{Breit}} \right) \alpha_i P_i J_i M_i, \varepsilon_i k_i; J \right\rangle, \end{aligned} \quad (2)$$

其中, $|\alpha_i P_i J_i M_i, \varepsilon_i k_i; J\rangle$ 与 $\langle \alpha_f P_f J_f M_f, \varepsilon_f k_f; J|$ 分别为碰撞体系反对称化的初、末态波函数,可通过基于全相对论理论框架下的多组态Dirac-Fock方法及相应的Grasp92程序计算得到.目前理论中,靶态波函数由具有相同宇称*P_i*、总角动量*J_i*和总角动量*z*分量*M_i*的组态波函数线性组合而成.根据上式计算所得靶离子初、末磁子能级的电子碰撞激发截面,对体系初态进行统计平均并求和,可得电子碰撞激发总截面

$$\sigma(i \rightarrow j) = \frac{1}{2J_j + 1} \sum_m \sigma_m(i \rightarrow j). \quad (3)$$

2.2 退激辐射光子极化度的计算

实验上辐射跃迁谱线的线性极化度^[15]定义为

$$P = \frac{I_{\parallel} - I_{\perp}}{I_{\parallel} + I_{\perp}}, \quad (4)$$

其中*I_∥*和*I_⊥*分别为光子电矢量平行和垂直于电子束方向的光强度.对于5s²S_{1/2} → 5p²P_{3/2}退激辐射光子极化度的计算,可以写为^[16,17]

$$P = \frac{3(\sigma_{1/2} - \sigma_{3/2})}{3\sigma_{3/2} + 5\sigma_{1/2}}, \quad (5)$$

其中σ_{1/2}和σ_{3/2}分别对应于从基态到末态磁量子能级*M_f* = 1/2和*M_f* = 3/2上的电子碰撞激发截面.

3 结果与讨论

3.1 能级和振子强度

Cd⁺离子的基组态为4d¹⁰5s¹ 2S_{1/2}.我们首先用单组态模型(Model A)计算了5s_{1/2}, 5p_{1/2}和5p_{3/2}的波函数和能级,在此基础上,为了讨论电子关联效应的影响,我们计算了三种电子关联模型:第一种是在单组态的基础上考虑了6s, 7s, 8s、对5s_{1/2}波函数的影响,考虑了6p, 7p, 8p对5p_{1/2}波函数的影响,该模型标记为8S;第二种为Core-价关联模型,考虑了从4s²4p⁶4d¹⁰5s¹和4s²4p⁶4d¹⁰5p¹的占据轨道(4s_{1/2}, 4p_{1/2}, 4p_{3/2}, 4d_{3/2}, 4d_{5/2}, 5s_{1/2}, 5p_{3/2})到非占据轨道4f_{5/2},

$4f_{7/2}$, $5p_{1/2}$, $5p_{3/2}$, $5d_{3/2}$, $5d_{5/2}$, $5f_{5/2}$, $5f_{7/2}$ 的所有单双激发态, 该计算模型我们标记为 5SD; 第三种在 5SD 的基础上进一步考虑到了非占据轨道 $6s_{1/2}$, $6p_{1/2}$, $6p_{3/2}$, $6d_{3/2}$, $6d_{5/2}$ 的所有单双激发态, 这种模型我们标记为 6SD. 表 1 给出了不同关联模型的电子组态 (csf) 数目. 为了更好地考虑电子关联效应, 在具体的计算过程中, 5SD 与 6SD 均独立优化了靶离子的初态与末态波函数, 并考虑了 Breit 相互作用.

表 1 8S, 5SD 与 6SD 的关联组态与关联组态数目
Table 1. The correlation orbits and the number of CSFs of 8S, 5SD and 6SD.

	关联轨道	关联组态数目	
		$5s_{1/2}$	$5p_{3/2}$
8S	6s, 6p, 7s, 7p, 8s, 8p	4	4
5SD	$4f_{5/2}$, $4f_{7/2}$, $5d_{3/2}$, $5d_{5/2}$, $5f_{5/2}$, $5f_{7/2}$	1748	7258
6SD	$4f_{5/2}$, $4f_{7/2}$, $5d_{3/2}$, $5d_{5/2}$, $5f_{5/2}$, $5f_{7/2}$, $6s_{1/2}$, $6p_{1/2}$, $6p_{3/2}$, $6d_{3/2}$, $6d_{5/2}$	4124	17281

表 2 Cd^+ 离子的 $5s_{1/2}$, $5p_{3/2}$ 的本征值、跃迁能以及振子强度

Table 2. The eigenvalues of $5s_{1/2}$ and $5p_{3/2}$, transition energy and oscillator strength of Cd^+ calculated by four models.

	$5s_{1/2}/eV$	$5p_{3/2}/eV$	$\Delta E/eV$	振子强度
Model A	-5589.588	-5589.396	5.240	0.72
8S	-5589.588	-5589.396	5.240	0.72
5SD	-5593.055	-5592.859	5.335	0.58
6SD	-5593.063	-5592.867	5.335	0.57
其他理论 [2]			5.790	0.76 ^{a)} 0.46 ^{b)}
NIST [18]			5.779	0.39
实验 [19]				0.55

注: a) 为未考虑极化势的结果, b) 为考虑极化势的结果.

表 2 给出了我们计算的 $5s_{1/2}$, $5p_{3/2}$ 的本征值、跃迁能以及振子强度并与 NIST、其他理论结果以及实验结果进行了比较. 从表 2 中可以看出本征值、跃迁能、振子强度有以下变化规律:

1) 对于 $5s_{1/2}$ 的本征值, Model A 的结果与 8S 的结果均为 $-5589.588 eV$, 5SD 的计算结果为 $-5593.055 eV$, 与 Model A 的结果相比减小了 $3.467 eV$, 6SD 的结果与 5SD 相比进一步减小, 但是只减小了 $0.008 eV$; 对于 $5p_{3/2}$ 的本征值, Model A 的结

果与 8S 的结果均为 $-5589.396 eV$, 然而 5SD 的计算结果为 $-5592.859 eV$, 与 Model A 的结果相比减小了 $3.463 eV$, 6SD 的结果与 5SD 相比进一步减小, 但是只减小了 $0.008 eV$. 由此我们可以得出, 8S 模型波函数与单组态 Model A 的波函数基本相同, Core-价关联使得本征值降低.

2) 对于跃迁能, 由于 Model A 与 8S 计算的 $5s_{1/2}$, $5p_{3/2}$ 的本征值没有差别, 所以这两种模型下的跃迁能也是相同的, 均为 $5.240 eV$, 虽然 5SD 计算的 $5s_{1/2}$, $5p_{3/2}$ 的本征值较 Model A 有明显减小, 但是对于 $5s_{1/2}$, $5p_{3/2}$ 各自的本征值, 减小幅度相同, 因此 5SD 计算的跃能较 Model A 仅增加了 $0.095 eV$, 6SD 计算的 $5s_{1/2}$, $5p_{3/2}$ 的本征值与 5SD 基本一致, 因此 6SD 计算的跃迁能与 5SD 相同, 均为 $5.335 eV$, 与 NIST 的结果相比还小 $0.444 eV$.

3) 对于振子强度, 由于 Model A 与 8S 的波函数以及能级相差不大, 因此 Model A 与 8S 的计算结果均为 0.72 , 与 Bostock 等没有考虑 Core 极化势的结果 0.76 基本一致, 但是这两种模型的计算结果都大于实验结果 [19] 和 NIST 结果 [18]; 多组态 5SD 的计算结果为 0.58 , 较 Model A 与 8S 的结果有明显减小, 6SD 的计算结果为 0.57 , 较 5SD 的结果只减小了 0.01 , 比 Bostock 等考虑 Core 极化势的结果和 NIST 结果大 $0.12, 0.19$. 但是与 Xu 等 [19] 最新的实验结果 0.55 符合的非常好, 综上所述, Core-价关联对振子强度的贡献比较大.

3.2 电子碰撞激发截面

图 1 给出了模型 Model A, 8S, 5SD, 6SD 计算的电子碰撞激发总截面随入射电子能量变化的关系, 并与已有的理论结果和实验结果作比较. 通过比较我们得到下列一些结论: 首先, Model A 的结果与 Sharma 等 RDW 方法的结果符合得比较好, 但是 Model A 的结果远远大于其他理论结果以及实验测量结果, 尤其在低能碰撞部分 ($<20 eV$), 差异更加明显, 例如, 当入射电子能量为 $7 eV$ 时, Model A 的结果是考虑 Core 极化势的 RCCC 方法的结果的 2.6 倍, 在 高能碰撞部分 ($>80 eV$), Model A 的结果趋于收敛, 但整体上仍至少比考虑 Core 极化势的 RCCC 方法的结果大 30% , 同时也比实验测量结果至少大 31% . 另外, 由于 8S 的靶态波函数与 Model A 的波函数基本相同, 8S 的计算结果与 Model A 的计算结果相比变化不大, 只是在低能碰

撞部分 (<20 eV), 8S 的结果要比 Model A 的结果小 1%—7%, 而在其他能量范围, 8S 的结果与 Model A 相比差距不超过 1%. 其次, 5SD 的结果与 Model A 相比有较大降低, 尤其在低能碰撞部分 (<20 eV). 最后, 6SD 的结果较 5SD 的结果有进一步的减小, 但减小不大, 例如, 当入射电子能量为 7 eV 时, 6SD 的结果是 Model A 的 1/3, 只比 5SD 的结果小 25%, 与考虑 Core 极化势的 RCCC 方法结果相比, 6SD 的结果无论是从变化趋势上还是截面大小上, 都更接近实验结果; 在入射电子能量 20—80 eV 的范围内, 5SD 结果比 Model A 至少降低 25%, 6SD 的结果比 5SD 的结果降低不到 5%, 在这个能量范围内, 6SD 的结果比实验结果大 10%, 比考虑 Core 极化势的 RCCC 方法的结果大, RCCC 方法的结果在这个能量范围要更接近实验测量结果; 在高能碰撞部分 (>80 eV), 5SD, 6SD 的结果均趋于收敛, 二者的差异不超过 3%, 比 Model A 的结果小 20%—25%, 与考虑 Core 极化势的 RCCC 方法的结果差异不超过 5%, 与实验结果的差异不超过 7%. 可见 Core-价关联对碰撞激发截面的影响非常大, 并且主要影响

的是低能碰撞部分.

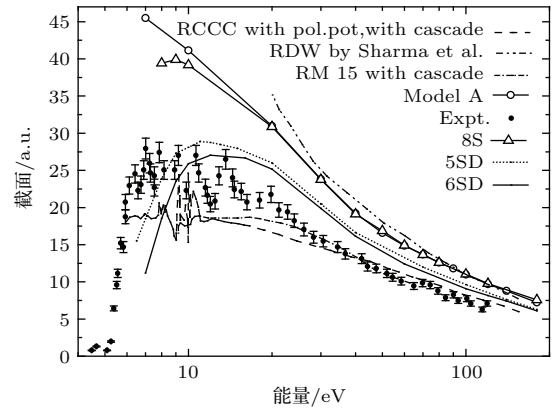


图1 Cd⁺ 离子 5s²S_{1/2} → 5p²P_{3/2} 电子碰撞激发截面随入射电子能量变化关系 (同时列举出的还有 Bostock 等 RCCC^[2] 方法的结果、Zatsarinny 等 R-matrix 方法的结果^[11], Sharma 等^[6]RDW 方法的结果以及 Gomonai 等^[5] 的实验结果)

Fig. 1. The total cross section for the 5s²S_{1/2} → 5p²P_{3/2} calculated by RDW. The results of RCCC^[4] and 15-state R-matrix (RM 15)^[10] are also shown for comparison. The experiment are measured by Gomonai et al^[5].

表3 Cd⁺ 离子 5s²S_{1/2}M_i = +1/2 → 5p²P_{3/2}M_f = -3/2, -1/2, +1/2, +3/2 电子碰撞激发磁子截面
Table 3. The EIE cross sections of magnetic sublevels of Cd⁺5s²S_{1/2}M_i = +1/2 → 5p²P_{3/2}M_f = -3/2, -1/2, +1/2, +3/2 calculated by Model A, 5SD, 6SD.

ε_i/eV		$M_f = -3/2/\text{a.u.}$	$M_f = -1/2/\text{a.u.}$	$M_f = +1/2/\text{a.u.}$	$M_f = +3/2/\text{a.u.}$
7	Model A	0.490	2.858	14.014	5.394
	5SD	0.173	1.188	6.138	1.745
	6SD	0.029	0.595	3.895	1.083
10	Model A	0.307	2.653	11.626	6.165
	5SD	0.168	1.664	8.845	3.664
	6SD	0.104	1.419	8.146	3.276
30	Model A	0.039	1.819	4.635	5.415
	5SD	0.037	1.542	4.069	4.582
	6SD	0.037	1.494	3.966	4.437
60	Model A	3.80[-3]	1.249	2.464	3.746
	5SD	3.98[-3]	1.080	2.131	3.24
	6SD	4.00[-3]	1.042	2.049	3.123
100	Model A	1.22[-3]	0.959	1.718	2.878
	5SD	1.29[-3]	0.832	1.495	2.495
	6SD	1.31[-3]	0.790	1.386	2.369
140	Model A	4.56[-4]	0.759	1.211	2.277
	5SD	4.89[-4]	0.675	1.118	2.026
	6SD	4.95[-4]	0.656	1.087	1.967

表 3 给出了 Model A, 5SD 和 6SD 三种模型的基态 $2S_{1/2}M_i = +1/2$ 到 $2P_{3/2}$ 磁能级 $M_f = +3/2, +1/2, -1/2$ 和 $-3/2$ 的电子碰撞激发截面, 从表中可以看出: 当入射电子能量较低时, $M_f = +1/2$ 的磁能级截面最大, $M_f = -1/2$ 的磁能级截面次之, $M_f = -3/2$ 的磁能级截面最小, 随着入射电子能量的增加, $M_f = -3/2, -1/2, +1/2$ 的磁能级截面呈减小的趋势, 而 $M_f = +3/2$ 的磁能级截面则是呈先增大后减小的趋势, 同时随着入射电子能量的增加, $M_f = +3/2$ 的磁能级截面逐渐大于 $M_f = +1/2$ 的磁能级截面, 成为对总截面贡献最大的一个磁能级截面. 我们还注意到, 在低能部分, Core-价关联效应对 $M_f = -3/2$ 的磁能级截面的影响比较大, 对 $M_f = -1/2, +1/2, +3/2$ 的磁能级截面的影响大致相同. 例如, 当入射电子能量为 7 eV 时, 对于 $M_f = -3/2$ 的磁能级截面 Model A 的结果是 6SD 的 16.90 倍, 对于 $M_f = -1/2$ 的磁能级截面, Model A 的结果是 6SD 的 4.80 倍, 对于 $M_f = +1/2$ 的磁能级截面, Model A 的结果是 6SD 的 3.60 倍, 对于 $M_f = +3/2$ 的磁能级截面, Model A 的结果是 6SD 的 4.98 倍; 随着入射电子能量的增加, Core-价关联效应对各个磁能级截面的影响大致相同. 当入射电子能量为 60 eV 时, 对于 $M_f = -3/2$ 的磁能级截面, Model A 的结果是 6SD 的 0.95 倍, 对于 $M_f = -1/2$ 的磁能级截面, Model A 的结果是 6SD 的 1.12 倍, 对于 $M_f = +1/2$ 的磁能级截面, Model A 的结果是 6SD 的 1.20 倍, 对于 $M_f = +3/2$ 的磁能级截面, Model A 的结果是 6SD 的 1.20 倍; 当入射电子能量为 140 eV 时, 对于 $M_f = -3/2$ 的磁能级截面, Model A 的结果是 6SD 的 0.92 倍, 对于 $M_f = -1/2$ 的磁能级截面, Model A 的结果是 6SD 的 1.16 倍, 对于 $M_f = +1/2$ 的磁能级截面, Model A 的结果是 6SD 的 1.11 倍, 对于 $M_f = +3/2$ 的磁能级截面, Model A 的结果是 6SD 的 1.13 倍.

3.3 Cd^+ 离子 $5s^2S_{1/2} \rightarrow 5p^2P_{3/2}$ 退激光子极化度

图 2 给出了 Cd^+ 离子 $5s^2S_{1/2} \rightarrow 5p^2P_{3/2}$ 退激辐射光子极化度随入射电子能量变化关系, 我们发现: 在入射电子能量小于 100 eV 的范围内, 5SD, 6SD 的计算结果与 Model A 的计算结果有差异, 但

相差非常小, 并且我们的计算结果与 Sharma 等 RDW 方法的结果、Bostock 等 RCCC 方法的结果相差很小, 同时实验结果结果的变化趋势与我们的计算结果、现有的理论结果符合得非常好, 数值上实验结果稍大于理论结果, 由于实验中没有给出相应的误差范围, 所以无法确定理论结果是否在误差范围内; 在入射电子能量大于 100 eV 的范围内, Model A 的计算结果与 5SD, 6SD 的结果有比较小的差异, 在这个入射电子能量范围内, 所有的理论计算结果与实验结果相差都非常大, 并且理论计算结果要明显小于实验测量结果. 可见, Core-价关联效应对 $5p^2P_{3/2} \rightarrow 5s^2S_{1/2}$ 退激辐射光子极化度的贡献可以忽略.

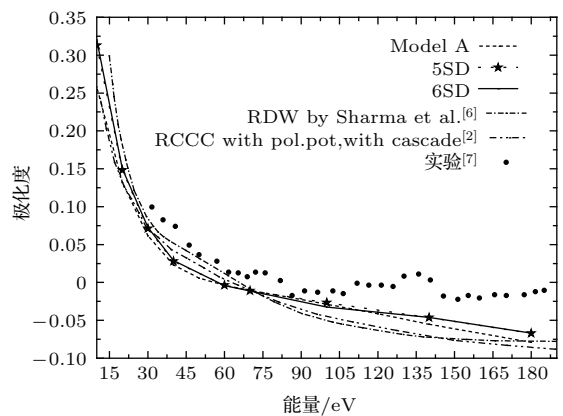


图 2 Cd^+ 离子 $5s^2S_{1/2} \rightarrow 5p^2P_{3/2}$ 退激辐射光子极化度随入射电子能量变化关系

Fig. 2. The polarization degree of $5p^2P_{3/2} \rightarrow 5s^2S_{1/2}$ transition emitted after excitation of Cd^+ .

4 结 论

本文采用全相对论扭曲波方法详细计算了入射电子能量在 7—180 eV 范围内 Cd^+ 离子 $5s^2S_{1/2} \rightarrow 5p^2P_{3/2}$ 电子碰撞激发截面与退激辐射光子极化度, 并且讨论了价-价关联与 Core-价关联对截面与极化度的影响. 价-价关联对 Cd^+ 离子 $5s^2S_{1/2} \rightarrow 5p^2P_{3/2}$ 电子碰撞激发截面的影响非常小, 尤其是当入射电子能量大于 20 eV 时; 而 Core-价关联对 Cd^+ 离子 $5s^2S_{1/2} \rightarrow 5p^2P_{3/2}$ 电子碰撞激发截面的影响非常显著. 对于退激辐射光子极化度, 价-价关联对 Cd^+ 离子 $5s^2S_{1/2} \rightarrow 5p^2P_{3/2}$ 电子碰撞激发退激辐射光子极化度的影响也是可以忽略的; Core-价关联对 Cd^+ 离子 $5s^2S_{1/2} \rightarrow 5p^2P_{3/2}$ 退激辐射光子极化度的影响同样非常小.

参考文献

- [1] Xu K Z 2006 *Atom and Molecule Physics* (2nd Ed.) (Beijing: Science Press) pp1-5 (in Chinese) [徐克尊 2006 高等原子分子物理学 (第2版) (北京: 科学出版社) 第1—5页]
- [2] Bostock C J, Fursa D V, Bray I 2014 *Phys. Rev. A* **90** 012
- [3] Bostock C J 2011 *J. Phys. B* **44** 083001
- [4] Fursa D V, Bray I 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 113201
- [5] Gomonai A 2003 *Optics and Spectroscopy* **94** 488
- [6] Sharma L, Surzhykov A, Srivastava R, Fritzsche S 2011 *Phys. Rev. A* **83** 062701
- [7] Goto T, Hane K, Okuda M, Hattori S 1983 *Phys. Rev. A* **27** 1844
- [8] Sharma L, Srivastava R, Stauffer A D 2008 *Phys. Rev. A* **78** 014701
- [9] Gangwar R K, Sharma L, Srivastava R, Stauffer A D 2010 *Phys. Rev. A* **81** 052707
- [10] Chauhan R K, Srivastava R, Stauffer A D 2005 *J. Phys. B* **38** 2385
- [11] Zatsarinny O I, Bandurina L A 2000 *Optics and Spectroscopy* **89** 488
- [12] Parpia F A, Froese F C, Grant I P 1996 *Compt. Phys. Commun.* **94** 249
- [13] Jiang J, Dong C Z, Xie L Y, Wang J G, Yan J, Fritzsche S 2007 *Chin. Phys. Lett.* **24** 691
- [14] Jiang J, Dong C Z, Xie L Y, Wang J G 2008 *Phys. Rev. A* **78** 022709
- [15] Percival I C, Seaton M J 1958 *Philos. Trans. R. Soc. London A* **251** 113
- [16] Reed K J, Chen M H 1993 *Phys. Rev. A* **48** 3644
- [17] Berezhko E G, Kabachnik N M 1977 *J. Phys. B* **10** 2467
- [18] Nist Version 3.1.0 http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/levels_form.html
- [19] Xu H L, Persson A, Svanberg S, Blagoev K, Malcheva G, Pentchev V, Bi'emont E, Campos J, Ortiz M, Mayo R 2004 *Phys. Rev. A* **70** 042508

Theoretical study on electron-impact excitation cross section and polarization for $5s^2S_{1/2} \rightarrow 5p^2P_{3/2}$ of Cd^*

Jiao Fei Jiang Jun[†] Xie Lu-You Zhang Deng-Hong Dong Chen-Zhong[‡] Chen Zhan-Bin

(Key Laboratory of Atomic and Molecular Physics & Functional Materials of Gansu Province, College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China)

(Received 15 July 2015; revised manuscript received 22 August 2015)

Abstract

The electron-impact excitation (EIE) cross-sections of $5s^2S_{1/2} \rightarrow 5p^2P_{3/2}$ of Cd^+ have been calculated by using the relativistic distorted-wave (RDW) method which we have developed recently. In order to discuss the electronic correlation effects, four different models are used to describe the target wave functions, namely Model A, 8S, 5SD and 6SD. Model A is a single configuration model, it includes $5s_{1/2}$, $5p_{1/2}$ and $5p_{3/2}$ only. The 8S is a valence-valence correlation model, it considers the impacts of 6s, 7s, 8s and 6p, 7p, 8p orbitals on wave function of $5s_{1/2}$, $5p_{3/2}$, respectively. The 5SD is a core-valence correlation model, it includes all the virtual single and double excitations from the 4s, 4p, 4d, 5s and 5p shells into the unoccupied 4f, 5p, 5d, and 5f shells. The 6SD is also a core-valence correlation model, it includes all the virtual single and double excitations from the 4s, 4p, 4d, 5s and 5p shells into the unoccupied 4f, 5p, 5d, 5f, 6s, 6p and 6d shells. The oscillator strength calculated by Model A is 0.72, which is in disagreement with the experiment 0.55 measured by Xu et al., while the results of 6SD 0.57 is in agreement with these of the experiment very well. For the EIE cross-sections, the core-valence correlation is very important. The results of Model A and 8S are larger than the experimental results obtained by Gomonai et al., while the results of 5SD and 6SD is obviously smaller than the results of Model A. In low energy range (<10 eV), the EIE cross-sections of 5SD and 6SD is at least 70% smaller than that of Model A and it is in good agreement with the experimental results. However, the contributions of correlation effects to the linear polarization of $5p^2P_{3/2} \rightarrow 5s^2S_{1/2}$ emission lines after excitation are very small, while the linear polarization of Model A, 5SD and 6SD are in consistent with each other and also in good agreement with other theories. But for high energies, the theoretical results have big difference from the experimental results obtained by Goto et al.

Keywords: electron-impact excitation cross sections, polarization, relativistic distorted-wave (RDW) method, core-valence correlation

PACS: 34.80.Dp

DOI: 10.7498/aps.64.233401

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11274254, U1332206, U1331122, 11464042).

[†] Corresponding author. E-mail: jiangjun@nwnu.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: dongcz@nwnu.edu.cn