

组态相互作用效应对类钠铜离子 自电离速率和分支比的影响

滕华国 沈百飞 张文琦 徐至展

中国科学院上海光学精密机械研究所, 上海 201800

(1993 年 2 月 27 日收到)

根据组态相互作用理论,研究了组态相互作用对类钠铜离子自电离组态 $2p^*3s3l(l=0,1,2)$ 自电离速率和分支比的影响. 结果表明,与单组态近似下的计算相比,组态相互作用显著地改变了上述组态各能级的自电离速率而且使 $2p^*3s^1$ 组态的自电离分支比减少;使 $2p^*3s3d$ 和 $2p^*3s3p$ 组态的自电离分支比增大;尤其是 $2p^*3s3d$ 组态的自电离分支比增加较为明显.

PACC: 3200; 3400

一、引 言

在电子-离子的碰撞过程中,当入射电子与靶离子相碰撞,激发一个内壳层电子,从而使靶离子态处于第一电离限之上,由于这种态是不稳定的自电离态,它可以通过无辐射跃迁失去一个电子而成为更高电离阶的态,这种情况称为激发自电离. 最近的实验和理论表明^[1,2],内壳层电子激发自电离过程对总的电子碰撞电离截面有非常大的贡献,如对中 Z 元素的类钠离子在接近激发阈值附近,内壳层电子激发自电离截面甚至是直接电子碰撞电离截面的 3—5 倍^[3].

内壳层电子激发自电离截面的一般表达式可写为

$$\sigma(i) = \sum_j \sigma_{\text{exc}}(i \rightarrow j) B_j^*, \quad (1)$$

其中 $\sigma_{\text{exc}}(i \rightarrow j)$ 是从初始组态 i 到某一特定自电离能级 j 的激发截面, B_j^* 是能级 j 的自电离分支比.

不同原子结构理论模型的选取会导致计算的自电离分支比有显著的差别,进而影响激发自电离截面的准确计算. 本文将从原子结构的观点出发,探讨组态相互作用对自电离速率及分支比的影响.

类钠离子由于其简单的原子壳层结构以及在实验室等离子体方面的应用,已有很多学者对其激发自电离过程作了研究. 如 Bely 等人^[4,5]研究了低 Z 元素类钠离子的电子碰撞电离截面,并估计了内壳层电子激发自电离截面对总的电子碰撞电离截面的贡献; Cowan^[6] 和 Griffin 等人^[2,7]研究了中、低 Z 元素类钠离子的内壳层电子激发自电离过程对总的电子碰撞电离截面的贡献; Griffin 等人^[2]还指出: 组态相互作用对自电离分支

比有不可忽略的影响;而 Chen 等人^[9]则用相对论性扭曲波方法研究了中 Z 元素类钠离子激发自电离截面随原子序数变化的规律性。尽管如此,对类钠铜离子尚无详细的激发自电离方面的计算,而类钠铜离子在发展复合机制软 X 射线激光方面是一个重要的元素。本文将首先讨论组态相互作用对类钠铜离子自电离速率及分支比的影响。有关激发自电离截面对总的电子碰撞电离截面的贡献,将另文讨论。

二、理论与计算方法

自电离能级 j 的自电离分支比为^[9]

$$B_j^i = \frac{\sum_m A_s(j \rightarrow m)}{\sum_m A_s(j \rightarrow m) + \sum_k A_r(j \rightarrow k)}, \quad (2)$$

其中 $A_s(j \rightarrow m)$ 是从自电离能级 j 到连续通道 m 的自电离速率, $A_r(j \rightarrow k)$ 是从自电离能级 j 到稳定的束缚态 k 的自发辐射速率。

在一级微扰近似下,自电离速率由下式计算^[10]:

$$A_s(j \rightarrow m) = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \phi_m | \sum_{mm'} 1/r_{mm'} | \phi_j \rangle|^2, \quad (3)$$

ϕ_m 和 ϕ_j 分别是末态和初态波函数。

$A_r(j \rightarrow k)$ 就是偶极跃迁的自发辐射速率,由下式给出^[9]:

$$A_r(j \rightarrow k) = \frac{2\pi}{3(2J_j + 1)} |\langle k || \mathbf{P}^{(1)} || j \rangle|^2, \quad (4)$$

其中 $\mathbf{P}^{(1)}$ 是一阶张量算符, k 和 j 分别是末态和初态的波函数。 J_j 是初态的总角动量子数。

根据组态相互作用理论^[9,10],在多组态计算中,具有角动量 J 的原子的波函数可用单组态近似下原子无微扰态波函数组成的行列式波函数来展开

$$\phi(J) = \sum_{i=1}^m C_i \phi_i(\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N), \quad (5)$$

其中 ϕ_i 是由无微扰态波函数组成的反对称波函数, φ_i 是原子的无微扰单电子自旋轨道函数, C_i 是组态混合系数。

实际计算中只能选取有限数目的组态。根据初步的计算分析,对类钠铜离子 $2p^6 3s \rightarrow 2p^5 3s^2$, $2p^5 3s 3d$, $2p^5 3s 3d$ 的内壳层电子激发跃迁,选取下列组态:

偶宇称: $2p^6 3s$, $2p^4 3s^2 3d$, $2p^4 3s 3p^2$, $2p^4 3s 3d^2$

奇宇称: $2p^5 3s^2$, $2p^5 3s 3d$, $2p^5 3p^2$, $2p^5 3d^2$

必须指出, $2p^5 3s 3d$ 的另一辐射衰落通道是 $2p^6 3d$, 也必须包含在计算中。

因为 $2p^5 3s 3p$ 唯一的偶极跃迁(衰落通道)是 $2p^6 3p$, 因此考虑如下组态进行计算:

偶宇称: $2s^2 2p^5 3s 3p$, $2s^2 2p^5 3p 3d$, $2s 2p^6 3s^2$, $2s 2p^6 3s 3d$

奇宇称: $2s^2 2p^6 3p$, $2s^2 2p^4 3s^2 3p$, $2s^2 2p^4 3s 3p 3d$.

在整个计算中,束缚轨道的计算由解 HFR 方程得出;连续轨道由解当主量子数 $n \rightarrow \infty$ 时的 HFR 方程得出。计算程序是 Cowan^[11] 的原子结构计算程序库。

三、计算结果与讨论

在单组态和多组态两种近似下,分别计算了类钠铜离子 $2p^53s3l(l = 0,1,2)$ 自电离组态的自电离速率和自电离分支比。

首先检查各自电离组态的组态相互作用情况。

$2p^53s^2$ 组态与其它几个组态之间的相互作用均很弱,只与 $2p^53p^2$ 组态有较大混合,最大混合系数 ($J = 1.5$) 为 0.160,其余混合系数均在 0.10 以下。

$2p^53s3d$ 组态与 $2p^53s^2$, $2p^53d^2$ 组态的相互作用也较弱(组态混合系数在 0.120 以下)。但与 $2p^53p^2$ 的相互作用较强。如对 $J = 0.5$ 的 $(^3p)^4D$ 态,它本身具有的系数为 0.561,而与 $2p^53p^2$ 组态的三个谱项 $(^3P)^2P$ 、 $(^3P)^4D$ 和 $(^3P)^2S$ 的混合系数分别为 0.538、

表 1 单组态近似和组态相互作用两种情况下类钠铜离子 $2p^53s^2, 2p^53s3d$ 组态的激发能量(E), 辐射跃迁速率 A_r , 自电离速率 A_s 和自电离分支比 B^* 。 J 是总角动量量子数

J	E/eV	$A_r/10^{11}\text{s}^{-1}$	$A_s/10^{11}\text{s}^{-1}$	B^*	J	E/eV	$A_r/10^{11}\text{s}^{-1}$	$A_s/10^{11}\text{s}^{-1}$	B^*
单组态 $2p^53s3d$					多组态 $2p^53s3d + 2p^53s^2 + 2p^53p^2 + 2p^53d^2$				
0.5	1042.04	0.691	0.147	0.175	0.5	1042.51	0.719	23.485	0.970
1.5	1043.38	2.109	0.424	0.167	1.5	1043.73	1.937	87.600	0.978
4.5	1045.10	0.000	0.000	0.000	4.5	1045.59	0.000	0.000	0.000
2.5	1045.59	0.780	0.123	0.136	2.5	1046.06	1.142	0.045	0.038
3.5	1045.97	1.680	8.207	0.830	3.5	1046.47	2.402	4.235	0.638
2.5	1047.28	5.603	14.377	0.720	2.5	1047.74	7.762	7.328	0.486
1.5	1049.07	7.715	0.344	0.043	1.5	1049.47	8.602	31.300	0.784
0.5	1049.46	17.350	2.118	0.109	0.5	1052.03	39.525	1.449	0.035
3.5	1049.97	4.742	16.150	0.773	3.5	1050.42	5.919	7.879	0.571
2.5	1050.18	10.112	17.733	0.637	2.5	1050.68	11.760	6.393	0.352
1.5	1051.85	26.950	4.775	0.150	1.5	1054.49	63.587	1.396	0.021
3.5	1053.79	5.324	24.287	0.820	3.5	1060.70	4.115	51.112	0.925
2.5	1056.67	4.617	11.655	0.716	2.5	1063.20	6.135	16.950	0.734
0.5	1058.07	116.900	22.270	0.160	0.5	1058.04	65.650	1069.500	0.942
1.5	1059.54	125.925	24.225	0.161	1.5	1062.50	70.483	443.500	0.863
1.5	1067.12	7.375	0.420	0.054	1.5	1067.49	7.386	109.800	0.937
2.5	1067.82	3.030	7.457	0.711	2.5	1068.29	3.550	2.677	0.430
2.5	1068.87	9.728	0.565	0.055	2.5	1069.36	16.075	0.012	0.001
3.5	1069.61	8.032	23.425	0.745	3.5	1070.05	10.180	9.205	0.475
1.5	1072.49	84.300	17.115	0.169	1.5	1075.18	228.822	412.500	0.643
2.5	1075.75	5.920	20.150	0.773	2.5	1082.48	6.887	44.383	0.866
0.5	1078.58	427.050	84.550	0.165	0.5	1079.48	425.100	0.730	0.002
1.5	1080.99	327.500	61.800	0.159	1.5	1086.83	174.098	416.500	0.705
单组态 $2p^53s^2$					多组态 $2p^53s^2 + 2p^53s3d + 2p^53p^2 + 2p^53p^1$				
1.5	953.49	9.760	60.800	0.862	1.5	951.04	12.772	17.657	0.580
0.5	974.35	10.415	60.800	0.854	0.5	971.88	14.545	14.920	0.506

表2 单组态近似和组态相互作用两种情况下,类钠铜离子 $2p^33s3p$ 组态的激发能量(E), 辐射跃迁速率 A_r , 自电离速率 A_s 和自电离分支比 B^* . J 是总角动量量子数.

J	E/eV	$A_r/10^{11}\text{s}^{-1}$	$A_s/10^{11}\text{s}^{-1}$	B^*	J	E/eV	$A_r/10^{11}\text{s}^{-1}$	$A_s/10^{11}\text{s}^{-1}$	B^*
单组态 $2p^33s3p$					多组态 $2s^22p^33s3p+2s^22p^33p3d+2s2p^63s^2+2s2p^63s3d$				
1.5	980.38	0.119	0.003	0.024	1.5	980.39	0.168	0.000	0.000
2.5	984.09	1.278	0.691	0.351	2.5	984.03	1.843	0.303	0.141
1.5	984.99	7.655	2.436	0.242	1.5	984.91	10.537	2.123	0.168
3.5	985.88	0.000	0.000	0.000	3.5	985.82	0.000	0.000	0.000
0.5	987.11	8.305	0.107	0.013	0.5	986.94	10.100	2.112	0.173
1.5	989.55	9.182	1.850	0.168	1.5	989.56	10.687	1.653	0.134
2.5	989.74	4.655	1.840	0.283	2.5	989.76	6.445	1.580	0.197
0.5	993.83	10.555	12.065	0.533	0.5	992.36	13.200	2.965	0.183
0.5	1003.78	3.872	2.356	0.378	0.5	1003.00	6.635	469.400	0.986
0.5	1004.52	6.860	259.600	0.974	0.5	1003.78	3.115	0.435	0.122
2.5	1005.00	4.552	0.049	0.011	2.5	1002.52	5.670	6.613	0.538
1.5	1005.57	3.930	1.058	0.212	1.5	1004.29	4.771	0.288	0.057
1.5	1007.18	4.950	0.149	0.029	1.5	1005.82	12.907	1.698	0.116
1.5	1008.80	7.842	0.050	0.006	1.5	1008.73	6.784	0.001	0.000
2.5	1009.75	9.052	2.992	0.248	2.5	1009.61	12.318	2.532	0.170
0.5	1021.26	7.110	1014.500	0.993	0.5	1019.22	17.605	804.500	0.979
1.5	1026.45	5.557	0.025	0.004	1.5	1023.87	8.088	3.797	0.320
0.5	1031.91	2.684	2475.500	0.999	0.5	1029.87	12.040	3412.000	0.996

0.318 和 -0.172, 混合是相当强的。而对 $J = 3.5$ 的 $(^3P)^2F$ 态, 它本身的系数为 0.749, 而与 $2p^33p^2$ 组态 $(^1D)^2F$ 谱项的混合系数为 0.481, 也是较大的。

组态 $2p^33s3p$ 的情形与 $2p^33s^2$ 的情形类似, 它只与 $2p^33p3d$ 组态有轻微的混合。其中最大混合系数为 0.122, 与其它组态的混合均很小(混合系数在 0.10 以下)。

另外, 各自电离组态通过偶极跃迁的下能级组态 $2p^63s$, $2p^63d$ 及 $2p^63p$ 与包含的其它组态的相互作用非常弱, 可近似看为纯单组态。

现在看组态相互作用对自电离速率和分支比的影响。表 1 是单组态和多组态近似下类钠铜离子 $2p^33s^2$, $2p^33s3d$ 组态对于 $2p^63s$ 组态的激发能量, 自发辐射速率, 自电离速率和自电离分支比。表 2 是上述两种近似下 $2p^33s3p$ 组态的激发能, 自发辐射速率、自电离速率及自电离分支比。从表 2 中看出, 一经包括组态相互作用, 上述自电离组态各能级的自电离速率均发生明显的改变。就 $2p^33s^2$ 组态而言, 其自电离分支比有所减少。组态平均的分支比从单组态时的 0.86 降至多组态时的 0.56。这是因为组态相互作用对自电离速率的干涉相消效应。虽然 $2p^33s^2$ 是能级的主要成份, 但 $2p^53p^2$ 组态在单组态近似下有比 $2p^33s^2$ 组态大一个数量级的自电离速率, 所以包含了组态相互作用后, $2p^33p^2$ 组态对 $2p^33s^2$ 占主要成份的能级的自电离速率仍产生显著效应。

组态相互作用是使 $2p^33s3d$ 组态的自电离分支比有所增大。组态平均的分支比从单组态时的 0.44 增至多组态时的 0.52。这是因为 $2p^33p^2$ 组态与 $2p^33s3d$ 混合较强, 而单组态近似下 $2p^33p^2$ 组态的自电离跃迁概率很大。包括组态相互作用后, 则在 $2p^33s3d$ 占有 $2p^33p^2$ 的成份, 组态相互作用的干涉相长使其自电离速率及分支比均增大。

表3 类钠镍离子 $2p^53s3d$ 组态在单组态和组态相互作用两种情况下与文献[2]中结果的比较
(表中各量的意义同表1,表2)

J	E/eV		$A_r/10^{11}s^{-1}$		$A_a/10^{11}s^{-1}$		B^a	
	a	b	a	b	a	b	a	b
单组态 $2p^53s3d$								
0.5	954.22	954.7	0.562	0.564	0.145	0.144	0.205	0.203
1.5	955.42	955.9	1.729	1.734	0.429	0.425	0.199	0.197
4.5	957.01	957.5	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000
2.5	957.44	957.9	0.675	0.678	0.065	0.064	0.087	0.086
3.5	957.88	958.4	1.395	1.403	7.180	7.144	0.837	0.836
2.5	959.11	959.6	4.455	4.475	12.530	12.458	0.738	0.736
1.5	960.79	961.3	6.120	6.140	0.326	0.322	0.051	0.050
0.5	961.30	961.8	14.835	14.885	2.031	2.014	0.120	0.119
3.5	961.59	962.1	3.961	3.979	14.775	14.650	0.789	0.786
2.5	961.85	962.3	8.533	8.560	16.658	16.508	0.661	0.659
多组态 $2p^53s3d + 2p^53s^2 + 2p^53p^2 + 2p^53d^2$								
0.5	954.59	955.1	0.962	1.129	222.250	276.550	0.996	0.996
0.5	963.35	963.8	28.175	28.400	34.065	35.885	0.547	0.558
1.5	955.95	956.4	1.965	1.998	20.737	17.850	0.913	0.899
1.5	961.14	961.6	6.728	6.690	9.035	8.390	0.573	0.556
2.5	957.90	958.4	0.985	0.984	0.015	0.015	0.015	0.015
2.5	959.56	960.1	6.218	6.212	6.485	6.463	0.511	0.510
2.5	962.40	962.9	11.630	11.590	9.768	9.617	0.456	0.454
3.5	958.36	958.9	1.952	1.951	3.591	3.574	0.648	0.647
3.5	962.04	962.5	4.949	4.940	6.999	6.949	0.586	0.585
4.5	957.48	958.0	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000	0.000

注: a 栏是本文的计算; b 栏取自参考文献[2].

组态 $2p^53s3p$ 的自电离分支比在其激发阈值附近只有轻微的增加(从单组态的 0.21 到多组态的 0.22)。这是因 $2p^53s3p$ 与主要的相互作用组态 $2p^53p3d$ 只有轻微混合, 且 $2p^53p3d$ 组态在单组态近似下的跃迁概率不是很大。因此在 $2p^53s3p$ 占主要成份的各自电离能级中干涉相长效应总的来讲不是很强。

从表 2 中还可以看出, 自发辐射速率也有所变化。如对 $2p^53s3d$ 组态, 包含组态相互作用后在单组态近似下不能偶极跃迁到 $2p^53d$ 组态的 $2p^53p^2$ $2p^53d^2$ 等组态可以通过组态混合而跃迁到 $2p^53d$ 组态。从而导致自发辐射速率的变化。其余组态 ($2p^53s^2$, $2p^53s3p$) 也有类似情况。

迄今为止, 尚无有关类钠铜离子自电离速率及分支比的计算。为检验本文计算的可靠性, 我们用同样的方法计算了类钠镍离子 $2p^53s3d$ 组态在单组态和多组态两种近似下的激发能, 自发辐射速率, 自电离速率和自电离分支比, 并与 Griffin 等人^[2]的结果作了比较, 见表 3。从表 3 中看出, 除个别外, 二种计算非常一致。

四、结 论

用上述方法计算了另外两个类钠离子镍和铁的自电离速率及自电离分支比。结果表明,对中 Z 元素类钠离子,为了获得准确的激发自电离截面,在自电离分支比的计算中包含组态相互作用是非常重要的,而采用单组态近似的计算一般是不适当的。

- [1] D. C. Gregory, L. J. Wang, K. Rinn and F. W. Meyer, *Phys. Rev.*, **A35**(1987), 3256.
- [2] D. C. Griffin, M. S. Pindzola and C. Bottcher, *Phys. Rev.*, **A36**(1987), 3642.
- [3] K. J. Lattuta, Y. Hahn, *Phys. Rev.*, **A24**(1981), 2273.
- [4] O. Bely, *Ann. Astrophys.*, **30**(1967), 953.
- [5] O. Bely *J. Phys. B*, **1**(1968), 23.
- [6] R. D. Cowan, J. B. Mann, *Astrophys. J.*, **232**(1979), 940.
- [7] D. C. Griffin, C. Bottcher and M. S. Pindzola, *Phys. Rev.*, **A25**(1982), 154.
- [8] K. J. Reed, M. H. Chen, *Phys. Rev.*, **A44**(1991), 4336.
- [9] R. D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (California Press, Berkeley, 1981).
- [10] 赵中新,李家明,物理学报,**34**(1985),1469.
- [11] R. D. Cowan, *The Atomic-Structure Calculation Package* (Unpublished report, 1986).

EFFECT OF CONFIGURATION INTERACTION ON THE AUTOIONIZATION RATES AND BRANCH RATIOS OF Na LIKE Cu ION

TENG HUA-GUO SHEN BAI-FEI ZHANG WEN-QI XU ZHI-ZHAN

Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Academia Sinica, Shanghai 201800

(Received 27 February 1993)

ABSTRACT

By using the theory of configuration-interaction, we made a analysis of the effect of configuration interaction on the autoionization rates and branch ratios of the configurations $2p^5 3s3l(l=0,1,2)$ for the Na-like Cu ion. It is shown that the autoionization rates in all the three configurations are changed substantially when the configuration-interaction are included in comparing with the calculations in single-configuration approximation, and the branch ratios increase both in the configuration $2p^5 3s3d$ and in $2p^5 3s3p$ but decrease in the configuration $2p^5 3s^2$.

PACC: 3200; 3400