

类钠铜离子的激发自电离^{*}

滕华国 徐至展

(中国科学院上海光学精密机械研究所, 上海 201800)

胡 畏 王炎森 方渡飞

(复旦大学物理二系, 上海 200433)

(1995 年 5 月 11 日收到; 1995 年 8 月 11 日收到修改稿)

在扭曲波库仑玻恩交换近似下计算了类钠铜离子 $2p^6 3s + e^- \rightarrow 2p^5 3s 3l + e^-$ ($l=0, 1, 2$) 的内壳层激发截面. 结合单组态近似和组态相互作用两种情况下计算的自电离分支比, 计算了上述组态的激发自电离截面. 结果表明, 在入射电子能量为 1090 eV 时, 组态相互作用使 $2p^5 3s 3d$ 总的激发自电离截面增大至单组态近似的近两倍; 而使 $2p^5 3s^2$ 组态的激发自电离截面减小为单组态近似的 36%; $2p^5 3s 3p$ 组态的激发自电离截面只是略有下降.

PACC: 3240; 3280D

1 引 言

在电子-原子碰撞电离过程中, 内壳层激发自电离是一个重要的间接电离过程, 它能有效地影响总的电子碰撞电离截面的数量. 类钠离子由于特殊的壳层结构, 其激发自电离过程在最近十多年来已吸引了众多学者广泛的研究^[1-9]. 这些研究结果指出: 1) 类钠离子的激发自电离过程对总的电子碰撞电离截面的贡献一般要超过直接电子碰撞电离截面; 2) 这些结果的不一致又表明激发自电离截面的准确计算依赖于激发截面和自电离分支比的准确计算.

本工作是我们以前工作^[10]的继续. 因为类钠铜离子是当前复合机制 X 射线激光实验的候选元素之一^[11-13], 其电离截面或速率系数是理论模拟必需的原子物理数据. 本文的主要工作是: 1) 在扭曲波库仑玻恩交换近似下计算了类钠铜离子 $2p^6 3s \rightarrow 2p^5 3s 3l$ ($l=0, 1, 2$) 内壳层激发的激发截面. 2) 结合以前的自电离分支比的计算结果, 详细计算和分析了组态相互作用对类钠铜离子激发自电离截面的影响.

2 原子模型

原子内壳层激发自电离截面的一般表达式为^[5]

$$\sigma_j^a(i) = \sigma_{\text{exc}}(i \rightarrow j) B_j^a, \quad (1)$$

^{*} 国家高技术研究发展计划资助的课题.

式中 $\sigma_j^e(i)$ 是自电离能级 j 的激发自电离截面, $\sigma_{\text{exc}}(i \rightarrow j)$ 是从初始态 i 到自电离态 j 的激发截面, B_j^e 是自电离态 j 的自电离分支比.

在扭曲波库仑玻恩交换近似下, 从初始态 J_i 到末态 J_f 的电子碰撞激发截面为^[14]

$$\sigma_{\text{exc}}(i \rightarrow j) = \frac{2\pi a_0^2}{E_i g_i} \sum_J (2J+1) \sum_{l_i l_f j_i j_f} |R(J_f l_f j_f J, J_i l_i j_i J)|^2, \quad (2)$$

式中 J_i 和 J_f 是初态和末态的总角动量, E_i 是入射电子能量(里德伯), l_i 和 l_f 分别是入射和散射电子轨道角动量, j_i 和 j_f 分别是入射和散射电子总角动量, J 是系统的总角动量, R 是库仑相互作用算符矩阵元. R 由下式给出^[14]:

$$R = 2 \sqrt{w} \sum_{\lambda} (D^{\lambda} r^d - E^{\lambda} r^e), \quad (3)$$

w 是受激发壳层电子数, D^{λ} 和 E^{λ} 分别是 Slater 径向积分的直接部分和交换部分, r^d 和 r^e 是对应的角度因子.

考虑靶态组态相互作用时, 从初始态 J_i 到末态 J_f 的电子碰撞激发截面为

$$\sigma_{\text{exc}}(i \rightarrow j) = \frac{2\pi a_0^2}{E_i g_i} \sum_J (2J+1) \sum_{l_i l_f j_i j_f} \left| \sum_{L_i S_i L_f S_f} C_i C_f R(\alpha_i L_i S_i; \alpha_f L_f S_f) \right|^2, \quad (4)$$

式中 C_i 和 C_f 分别是初态和末态靶态的组态混合系数.

在上述激发截面的计算中, 组态混合系数和束缚电子的轨道波函数由 Cowan 的 HFR 程序^[15]得到, 自由电子的扭曲波函数由考虑了交换效应的局部半经典近似方法^[16]得到. 我们编制了相应的计算程序来完成上述计算.

在单组态近似和组态相互作用两种情况下自电离分支比的计算在文献[10]中已有详细叙述, 本文不再赘述.

3 结果与讨论

按照第2节中所述方法, 计算了类钠铜离子从基态到 $2p^5 3s^3 l$ ($l=0, 1, 2$) 电子碰撞激发的激发自电离截面. 因为上述组态对总的电子碰撞电离截面有最大的贡献^[5], 而且组态相互作用的效应也最大.

表1列出入射电子能量在 1090 eV 时, 类钠铜离子的激发能量、总角动量、自电离分支比、激发自电离截面以及各组态总的激发自电离截面. 选择这个入射电子能量是因为它稍高于最高自电离态的激发能量, 因此我们所考虑的所有激发通道都是打开的.

为了便于比较, 表1同时列出单组态近似和组态相互作用两种情况下的计算结果. 正如 Griffin 等^[5]指出, 组态相互作用效应对总的激发截面的效应可忽略不计, 而对单个能级的激发截面有显著影响. 为了考察这种效应, 在计算激发截面时, 靶离子的态先后采用了单组态和多组态近似. 就本文考虑的情形, 初始靶态的组态相互作用很小, 接近于纯单组态, 主要考虑了末态靶离子的组态相互作用.

分三种情况计算了激发自电离截面: 1) 单组态近似下的激发截面和分支比; 2) 单组态近似下的激发截面和多组态近似下的分支比; 3) 多组态近似下的激发截面和分支比.

从表1看出, 组态相互作用效应使 $2p^5 3s^2$ 组态的激发自电离截面从单组态近似的 0.788

$\times 10^{-21} \text{ cm}^2$ 减小至 $0.498 \times 10^{-21} \text{ cm}^2$, 减小约 36%.

组态相互作用效应使 $2p^5 3s 3d$ 的激发自电离截面从单组态时的 $32.645 \times 10^{-21} \text{ cm}^2$ 增大至多组态时的 $60.999 \times 10^{-21} \text{ cm}^2$, 增大了近两倍, 这一结果确定了包括组态相互作用的重要性.

然而, 考虑了组态相互作用后, $2p^5 3s 3p$ 组态的激发自电离截面仅有轻微的减小, 从单组态时的 $40.99 \times 10^{-21} \text{ cm}^2$ 减小到多组态时的 $37.454 \times 10^{-21} \text{ cm}^2$, 仅减小了 6% (见表 1).

从以上结果看出, 激发自电离截面的电子相关增加主要起因于 $2p^5 3s 3d$ 组态, 对 $2p^5 3s^2$ 组态, 由于其激发自电离截面相对较小 (较另外两个组态小两个数量级), 它对总的激发自电离截面的影响较小.

比较后两种情况下的计算也可看出, 组态相互作用对单个能级的自电离截面有显著的影响, 尤其是对 $2p^5 3s 3d$ 组态的能级影响最为显著, 而对总的自电离截面影响较小. 本文后两种情况的计算结果对 $2p^5 3s 3d$ 组态相差较大, 为 20%, 主要原因是单组态近似和组态相互作用两种情况下激发能量差别较大. 这里可看到, 组态相互作用使激发截面在组态能级之间进行了重新分配. 这一结果也说明, 仅涉及总的激发自电离截面, 用单组态靶态计算激发截面也能得到较好的结果.

对 $2p^5 3s 3p$ 而言, 组态相互作用的影响可忽略. 这是因为组态相互作用对其自电离分支比影响较小. 同时也说明了 $2p^5 3s 3p$ 组态与其他组态的相关不是很强.

表 1 类钠铜离子自电离态的总角动量、激发能量(eV)、自电离分支比和激发自电离截面(单位: 10^{-21} cm^2)

J	E/eV	B_i^e	$\sigma_i^e/10^{-21} \text{ cm}^2$	E/eV	B_i^e	$\sigma_i^e(1)/10^{-21} \text{ cm}^2$	$\sigma_i^e(2)/10^{-21} \text{ cm}^2$
单组态				多组态			
$2p^5 3s 3d$				$2p^5 3s 3d + 2p^5 3s^2 + 2p^5 3p^2 + 2p^5 3d^2$			
0.5	1042.04	0.175	0.340	1042.51	0.970	1.883	1.807
1.5	1043.38	0.167	0.621	1043.73	0.978	3.638	2.499
4.5	1045.10	0.000	0.000	1045.59	0.000	0.000	0.000
2.5	1045.59	0.136	0.562	1046.06	0.038	0.157	0.157
3.5	1045.97	0.830	2.308	1046.47	0.638	1.774	1.783
2.5	1047.28	0.720	1.534	1047.74	0.486	1.036	1.035
1.5	1049.07	0.043	0.058	1049.47	0.784	1.058	0.935
0.5	1049.46	0.109	0.205	1052.03	0.035	0.066	0.097
3.5	1049.97	0.773	1.477	1050.42	0.571	1.091	1.095
2.5	1050.18	0.637	1.031	1050.68	0.352	0.570	0.538
1.5	1051.85	0.150	0.709	1054.49	0.021	0.100	0.172
3.5	1053.79	0.820	2.300	1060.70	0.925	2.595	1.955
2.5	1056.67	0.716	1.111	1063.20	0.734	1.138	0.871
0.5	1058.07	0.160	1.288	1058.04	0.942	7.581	4.328
1.5	1059.54	0.161	2.591	1062.50	0.863	13.890	8.268
1.5	1067.12	0.054	0.086	1067.49	0.937	1.489	1.346
2.5	1067.82	0.711	1.544	1068.29	0.430	0.934	0.937
2.5	1068.87	0.055	0.138	1069.36	0.001	0.003	0.002
3.5	1069.61	0.745	1.720	1070.05	0.475	1.097	1.096
1.5	1072.49	0.169	1.789	1075.18	0.643	6.805	17.380

续表							
J	E/eV	B_j^a	$\sigma_j^a/10^{-21}\text{ cm}^2$	E/eV	B_j^a	$\sigma_j^a(1)/10^{-21}\text{ cm}^2$	$\sigma_j^a(2)/10^{-21}\text{ cm}^2$
2.5	1075.75	0.773	1.434	1082.48	0.866	1.606	1.218
0.5	1078.58	0.165	3.950	1079.48	0.002	0.048	0.048
1.5	1080.99	0.159	5.850	1086.83	0.705	25.938	13.430
$\sum \sigma_j^a = 32.645 \times 10^{-21}\text{ cm}^2$				$\sum \sigma_j^a(1) = 74.497 \times 10^{-21}\text{ cm}^2$ $\sum \sigma_j^a(2) = 60.999 \times 10^{-21}\text{ cm}^2$			
单组态 $2p^33s^2$				多组态 $2p^33s^2 + 2p^33s3d + 2p^33p^2 + 2p^33d^2$			
1.5	953.49	0.862	0.531	951.04	0.580	0.357	0.349
0.5	974.35	0.854	0.257	971.88	0.506	0.152	0.149
$\sum \sigma_j^a = 0.788 \times 10^{-21}\text{ cm}^2$				$\sum \sigma_j^a(1) = 0.509 \times 10^{-21}\text{ cm}^2$ $\sum \sigma_j^a(2) = 0.498 \times 10^{-21}\text{ cm}^2$			
单组态 $2p^33s3p$				多组态 $2s^22p^53s3p + 2s^22p^53p3d + 2s2p^63s^2 + 2s2p^63s3d$			
1.5	980.38	0.024	0.047	980.39	0.000	0.000	0.000
2.5	984.09	0.351	0.595	984.03	0.141	0.239	0.240
1.5	984.99	0.242	0.322	984.91	0.168	0.224	0.223
3.5	985.88	0.000	0.000	985.82	0.000	0.000	0.000
0.5	987.11	0.013	0.009	986.94	0.173	0.115	0.141
1.5	989.55	0.168	0.185	989.56	0.134	0.147	0.146
2.5	989.74	0.283	0.430	989.76	0.197	0.299	0.296
0.5	993.83	0.533	3.914	992.36	0.183	1.343	0.444
0.5	1003.78	0.378	0.196	1003.00	0.986	0.512	1.446
0.5	1004.52	0.974	1.004	1003.78	0.122	0.126	0.063
2.5	1005.00	0.011	0.021	1002.52	0.538	1.031	0.994
1.5	1005.57	0.212	0.232	1004.29	0.057	0.062	0.050
1.5	1007.18	0.029	0.025	1005.82	0.116	0.102	0.122
1.5	1008.80	0.006	0.007	1008.73	0.000	0.000	0.000
2.5	1009.75	0.248	0.464	1009.61	0.170	0.318	0.317
0.5	1021.26	0.993	13.300	1019.22	0.979	13.113	10.062
1.5	1026.45	0.004	0.005	1023.87	0.320	0.374	0.365
0.5	1031.91	0.999	20.243	1029.87	0.996	20.182	22.594
$\sum \sigma_j^a = 40.999 \times 10^{-21}\text{ cm}^2$				$\sum \sigma_j^a(1) = 38.187 \times 10^{-21}\text{ cm}^2$ $\sum \sigma_j^a(2) = 37.454 \times 10^{-21}\text{ cm}^2$			

注: $\sum \sigma_j^a(1)$, 总的自电离截面. 在单组态近似下计算的激发截面, 多组态近似下的分支比. $\sum \sigma_j^a(2)$, 总的自电离截面. 在多组态近似下计算的激发截面和分支比.

[1] O. Bely, *Ann. Astrophys.*, **30**(1967), 953.
[2] O. Bely, *J. Phys.*, **B1**(1968), 23.
[3] R. D. Cowan and J. B. Mann, *Astrophys. J.*, **232**(1979), 940.
[4] D. C. Driffin, C. Botcher and M. S. Pindzola, *Phys. Rev.*, **A25**(1982), 154.
[5] D. C. Driffin, C. Botcher and M. S. Pindzola, *Phys. Rev.*, **A36**(1987), 3642.
[6] R. A. Falk *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **47**(1981), 494.

- [7] D. C. Gregory, L. J. Wang, K. Rinn and F. W. Meyer, *Phys. Rev.*, **A35**(1987), 3256.
- [8] K. J. Lattuta and Y. Hahn, *Phys. Rev.*, **A24**(1981), 2273.
- [9] K. J. Reed and M. H. Chen, *Phys. Rev.*, **A41**(1991), 550; **44**(1991), 4336.
- [10] 滕华国、沈百飞、张文琦、徐至展, *物理学报*, **43**(1994), 205.
- [11] J. Steingruber, E. E. Fill, X-Ray Lasers 1990(Proceeding of the 2nd International Colloquium, 17-21, Sept. 1991), ed. by P. Jaegle(York University, 1991), pp. 123—126.
- [12] J. Steingruber, E. E. Fill, *Appl. Phys.*, **B57**(1993), 319.
- [13] Z. Z. Xu *et al.*, *Appl. Phys.*, **B58**(1994), 29.
- [14] D. H. Sampson, *Phys. Rev.*, **A34**(1986), 986.
- [15] R. D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra*(University of California Press, Los Angeles and Berkeley, 1981).
- [16] M. E. Riley, D. G. Truhlar, *J. Chem. Phys.*, **63**(1975), 2182.

THE EXCITATION -AUTOIONIZATION OF Na-LIKE Cu ION

TENG HUA-GUO XU ZHI-ZHAN

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

HU WEI WANG YAN-SEN FANG DU-FEI

(Department of Physics II, Fudan University, Shanghai 200433)

(Received 11 May 1995; revised manuscript received 11 August 1995)

ABSTRACT

The excitation autoionization of Na-like Cu ion originating from inner-shell excitations of $1s^2 2s^2 2p^6 3s \rightarrow 1s^2 2s^2 2p^5 3s^3$ ($l = 0, 1, 2$) was investigated in some detail. The inner-shell excitation cross sections were calculated in the distorted Columob-Born exchange approximation and the target ionic states were obtained in a single configuraton approximation. The autoionizing branch ratios were calculated by using both single configuration and configuration interaction wavefunctions. The results showed that, at an incident electron energy of 1090 eV, the correlation enhancement of excitation autoionization cross sections was mainly due to $1s^2 2s^2 2p^5 3s^3 d$ configuration, in which the correlation effects increasd the excitation autoionization cross sections nearly to a factor of 2. The excitation autoionization cross sections for $1s^2 2s^2 2p^5 3s^2$ were reduced about 36% when compared with the results of single configuration approximation. However, The configuration interaction had only a slight effect on the autoionization cross sections for excitation to $1s^2 2s^2 2p^5 3s^3 p$ configuration.

PACC: 3240; 3280D