

类铍 B II 离子激发态的相对论能量和精细结构^{*}

韩利红 秉聪 王 菲

(北京理工大学应用物理系, 北京 100081)

(2001 年 3 月 16 日收到, 2001 年 4 月 17 日收到修改稿)

利用多组态相互作用方法及 Rayleigh-Ritz 变分法, 计算了类铍 B II $1s^2 2s^2 {}^1S$, $1s^2 2s 2p {}^1P^o$, $1s^2 2s 2p {}^3P^o$ 和 $1s^2 2p^2 {}^3P$ 激发态的能量. 运用截断变分方法得到能量的改进量, 计算了相对论修正、质量极化效应, 从而获得了高精度的能量计算值. 同时还计算了精细结构、辐射跃迁波长、振子强度、和辐射跃迁率. 计算结果与实验符合得很好.

关键词: 类铍离子, 精细结构, 振子强度, 辐射跃迁

PACC: 3150, 3130J

1 引 言

类铍离子激发态的研究是目前国际前沿课题. 类铍离子是四电子的复杂原子系统, 电子关联效应复杂. 这种系统的研究对发展多电子原子激发态理论和阐明电子关联效应等具有重要学术意义, 并对等离子体理论、天体物理、核聚变等领域均有重要应用价值. 近年来, 国际上此研究领域十分活跃, 不断有新的进展^[1-6]. Bunge^[7]在束箔实验中, 标识出波长 $\lambda = 348.97 \pm 0.02$ nm 为类铍离子 Li^+ 的 $1s 2s 2p^2 {}^5P$ 态到 $1s 2p^3 {}^5S^o$ 态的跃迁, 与实验 $\lambda = 348.95 \pm 0.11$ nm 符合得很好. 之后, 理论和实验工作者对此系统进行了一系列研究工作. Cheng^[8]用 MCDF (Multiconfiguration Dirac-Fock) 方法计算了类铍离子激发态的能量. Liu 和 Kelley^[9]在 MCDF 的方法基础上, 用 MB-PT (many-body Perturbation Theory) 方法给出了 Be 基态的能量. Tachiev^[10]和 Weiss^[11]分别报道了类铍离子的一些激发态的能量. 他们分别采用 MCHF (Multiconfiguration Hartree-Fock) 方法和 SOC (superposition-of-configurations) 方法进行计算. 最近, Litzen 等人^[12]精确测量了 B II 离子一些激发态之间的波长和振子强度. 但是, 国内此课题的研究甚少, 有待进一步开展此项工作.

本文采用多组态相互作用方法及 Rayleigh-Ritz 变分法, 计算了类铍 B II 基态 $1s^2 2s^2 {}^1S$ 和激发态

$1s^2 2s 2p {}^1P^o$, $1s^2 2s 2p {}^3P^o$, $1s^2 2p^2 {}^3P$ 的非相对论能量, 运用截断变分方法进一步饱和函数空间得到能量的改进量, 并考虑了相对论修正、质量极化效应等获得了高精度的能量计算值. 同时还计算了精细结构、辐射跃迁波长、振子强度、辐射跃迁率等. 本文的理论计算结果与实验符合得很好.

2 理论和方法

在 LS 耦合表象中, 类铍离子的非相对论 Hamiltonian 为

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^4 \left[-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right] + \sum_{i,j=1}^4 \sum_{i<j} \frac{1}{r_{ij}}, \quad (1)$$

四电子离子系统的基态波函数为

$$\Psi_b(1 \ 2 \ 3 \ 4) = A \sum_i C_i \Phi_{\kappa(i), \kappa(i)}(1 \ 2 \ 3 \ 4), \quad (2)$$

式中 A 为反对称化算符, $\Phi_{\kappa(i), \kappa(i)}(1 \ 2 \ 3 \ 4)$ 为

$$\Phi_{\kappa(i), \kappa(i)}(1 \ 2 \ 3 \ 4) = \phi_{\kappa(i), \kappa(i)}(R) Y_{\kappa(i)}^{LM}(\Omega) \chi_{ss_2}, \quad (3)$$

其中

$$\Phi_{\kappa(i), \kappa(i)}(R) = \prod_{j=1}^4 r_j^{n_j} \exp(-\alpha_j r_j). \quad (4)$$

对于每个 $\kappa(i)$, 均有一组不同的非线性参数集 α_j , 轨道角动量部分为

$$Y_{\kappa(i)}^{LM}(\Omega) = \sum_{m_j} l_1 l_2 m_1 m_2 | l_{12} m_{12}$$

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 10074006)资助的课题.

$$\times l_{12} l_3 m_{12} m_3 | l_{123} m_{123} \\ \times l_{123} l_4 m_{123} m_4 | LM \prod_{j=1}^4 Y_{l_j m_j}(\Omega_j). \quad (5)$$

为简便计,将角动量波函数表示为

$$\chi(i) = [(l_1, l_2) l_{12}, l_3] l_{123}, l_4. \quad (6)$$

同样,四电子系统的自旋波函数也可表示为

$$\chi_{ss_2} = [(s_1, s_2) s_{12}, s_3] s_{123}, s_4. \quad (7)$$

非相对论能量 E_b 由 Rayleigh-Ritz 变分法,对非线性参数 α_j 以及线性参数 C 变分优化能量极小而得

$$\delta H_0 = \delta \frac{\psi_b | \hat{H}_0 | \psi_b}{\psi_b | \psi_b} = 0. \quad (8)$$

为了获得高精度波函数,我们进一步饱和束缚函数空间,采用截断变分方法得到能量改进量 ΔE_{res} ,总波函数为

$$\psi_e(1\ 2\ 3\ 4) = D_0 \psi_b(1\ 2\ 3\ 4) + \psi_e(1\ 2\ 3\ 4), \quad (9)$$

式中

$$\psi_e(1\ 2\ 3\ 4) = A \sum_{i=1}^I D_i \psi_{\chi(i), \chi(i)}(1\ 2\ 3\ 4). \quad (10)$$

波函数 $\psi_e(1\ 2\ 3\ 4)$ 是进一步饱和函数空间的部分,它取 $\psi_b(1\ 2\ 3\ 4)$ 相同的形式,但是其非线性参数 α_j 是极不相同的. ψ_e 中的每组非线性参数利用截断变分方法进行优化能量极小得到,总的非相对论能量为 $E_{\text{nonrel}} = E_b + \Delta E_{\text{res}}$.

为进一步获得高精度的能量计算值,还必须考虑相对论修正和质量极化.在 Pauli-Breit 近似下,类铍离子相对论能量微扰算符包括^[13,14]

$$\hat{H}_k = -\frac{1}{8C^2} \sum_{i=1}^4 P_i^4 \quad (\text{动能修正项}), \quad (11)$$

$$\hat{H}_D = \frac{Z\pi}{2C^2} \sum_{i=1}^4 \delta(r_i) \quad (\text{Darwin 项}), \quad (12)$$

$$\hat{H}_{ee} = -\frac{\pi}{C^2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^4 \left(1 + \frac{\delta}{3} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j \right) \delta(\hat{r}_{ij}) \\ (\text{电子与电子相互作用项}), \quad (13)$$

$$\hat{H}_{oo} = -\frac{1}{2C^2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^4 \frac{1}{r_{ij}} \left[\hat{P}_i \cdot \hat{P}_j + \frac{r_{ij}(\hat{r}_{ij} \cdot \hat{P}_i) \cdot \hat{P}_j}{r_{ij}^2} \right] \\ (\text{轨道与轨道相互作用项}). \quad (14)$$

质量极化算符为

$$\hat{H}_{\text{mp}} = -\frac{1}{M} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^4 \nabla_i \cdot \nabla_j, \quad (15)$$

其中 M 是核质量,常数 $C = 137.0360$,除质量极化

计算到无穷级外,其他的相对论微扰项计算到一级.于是相对论和质量极化修正能量为

$$\Delta E_{\text{rel}} = \Psi_b | \hat{H}_k + \hat{H}_D + \hat{H}_{ee} + \hat{H}_{oo} + \hat{H}_{\text{mp}} | \Psi_b, \quad (16)$$

则总能量可描述为

$$E_{\text{total}} = E_b + \Delta E_{\text{res}} + \Delta E_{\text{rel}}. \quad (17)$$

在 Pauli-Breit 相对论近似下,与精细结构相关的电子自旋与轨道、自旋与自旋、自旋与其他轨道相互作用的能量微扰算符分别为^[13]

$$\hat{H}_{so} = \frac{5}{2C^2} \sum_{i=1}^4 \frac{\hat{l}_i \cdot \hat{s}_i}{r_i^3} \quad (\text{自旋与轨道相互作用}), \quad (18)$$

$$\hat{H}_{soo} = -\frac{1}{2C^2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i \neq j}}^4 \left[\frac{1}{r_{ij}^3} (\hat{r}_i - \hat{r}_j) \times \hat{P}_i \right] \cdot [\hat{S}_i + 2\hat{S}_j] \\ (\text{自旋与其他轨道相互作用}), \quad (19)$$

$$\hat{H}_{ss} = \frac{1}{C^2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^4 \frac{1}{r_{ij}^2} \left[\hat{S}_i \cdot \hat{S}_j - \frac{3(\hat{S}_i \cdot \hat{r}_{ij})(\hat{S}_j \cdot \hat{r}_{ij})}{r_{ij}^2} \right] \\ (\text{自旋与自旋相互作用}), \quad (20)$$

于是精细结构的能量微扰算符为

$$\hat{H}_{FS} = \hat{H}_{so} + \hat{H}_{ss} + \hat{H}_{soo}, \quad (21)$$

式中 l_i, s_i 分别为第 i 个电子的轨道和自旋角动量.在 LSJ 表象中,用于计算这些微扰的波函数表示为

$$\Psi_{LSJJ_Z} = \sum_{M, S_Z} L S M S_Z | J J_Z \rangle \Phi_{LSMS_Z}, \quad (22)$$

式中

$$\Phi_{LSMS_Z} = A \sum_i C_i \phi_{\chi(i), \chi(i)}(R) Y_{\chi(i)}^{LM}(\Omega) \chi_{ss_Z}, \quad (23)$$

于是,精细结构能级为

$$(\Delta E_{FS})_J = \Phi_{LSJJ_Z} | \hat{H}_{FS} | \Phi_{LSJJ_Z}. \quad (24)$$

3 结果和讨论

本工作采用多组态相互作用方法及 Rayleigh-Ritz 变分法给出了类铍 B II 四电子系统 $1s^2 2s^2 {}^1S$, $1s^2 2s 2p {}^1P^o$, $1s^2 2s 2p {}^3P^o$ 和 $1s^2 2p^2 {}^3P$ 态非相对论能量值.由于四电子系统是复杂原子系统,电子关联效应大,计算量大.变分波函数含有线性参数数目从 914 到 933,角度自旋分波数从 43 到 51,对应每一个角度自旋成分有一组不同的非线性参数集,这些参数由变分能量极小得到,从变分波函数 Ψ_b 得到能量 E_b .进一步通过截断变分方法饱和函数空间,可得到能量改进量 ΔE_{res} ,改进范围从 $-52.8 \mu\text{a.u.}$ 到

- 161.5 μ a.u. .

为进一步改进能量值 ,我们还计算了相对论修正及质量极化效应 .相对论微扰算符包括 P^4 项 , Darwin 项 ,电子与电子相互作用项和轨道与轨道相互作用项 .除质量极化计算到无穷级外 ,其他各项均采用一级微扰方法计算 ,该系统的相对论能量计算值列于表 1 中 .从表中可以看出 ,我们的能级计算结果均比其他文献更低更好 ,例如 ,对于 $1s^2 2s^2 \ ^1S$ 态的计算结果为 - 24354537 μ a.u. ,而 Jonsson 等人^[5]用 MCHF 方法的计算值为 - 24347561 μ a.u. ,Weiss^[11]用 SOC 方法的计算值为 - 24348370 μ a.u. ,分别改进了 6976 μ a.u. 和 6167 μ a.u. .

表 1 类铍离子 B II 基态和激发态的非相对论能量 及相对论能量(μ a.u.)				
共振态	$1s^2 2s^2 \ ^1S$	$1s^2 2s2p \ ^1P^o$	$1s^2 2s2p \ ^3P^o$	$1s^2 2p^2 \ ^3P$
N_l	43	51	48	45
N	914	921	931	933
E_b	- 24348149.3	- 24012020.2	- 24177584.8	- 23896350.8
ΔE_{res}	- 52.8	- 78.6	- 161.5	- 112.4
E_{nonrel}	- 24348202.1	- 24012098.8	- 24177746.3	- 23896463.2
H_{rel}	- 6364.1	- 6021.6	- 6121.1	- 5817.9
H_{mp}	29.7	12.4	4.0	- 16.1
E_{total}	- 24354537	- 24018108	- 24183863	- 23902297
文献 5] ^a	- 24347561	- 24011947	- 24177627	- 23897204
文献 11] ^b	- 24348370	- 24013970	- 24178440	- 23898070

a 为 MCHF 方法 ,b 为 SOC 方法 . N_l 是波函数角度分波个数 , N 是线性参数个数 , H_{rel} 是相对论修正 ,包括 P^4 和 Darwin 项 ,电子-电子相互作用项和轨道-轨道相互作用项 , H_{mp} 是质量极化效应 .

表 3 B II 离子 $1S \rightarrow ^1P^o$ 与 $^3P^o \rightarrow ^3P$ 之间的振子强度(f_l , f_v , f_a) 跃迁率($10^{10} s^{-1}$) 跃迁波长 λ (nm)的计算								
跃迁	f_l	f_v	f_a	A_l	A_v	A_a	λ	
							本工作	其他文献
$1s^2 2s^2 \ ^1S \rightarrow 1s^2 2s2p \ ^1P^o$	0.334	0.331	0.350	0.121	0.120	0.127	135.44	135.77 ^a ,136.25 ^b ,136.16 ^c
$1s^2 2s2p \ ^3P^o \rightarrow 1s^2 2p^2 \ ^3P$	0.345	0.337	0.391	0.088	0.086	0.099	161.83	162.49 ^a ,162.40 ^b ,162.05 ^c

a 为引自文献 12 理论值 ,b 为引自文献 12 实验值 ,c 为引自文献 6 理论值 .

我们还计算了精细结构能量 ,包括自旋与轨道 ,自旋与其他轨道 ,自旋与自旋的相互作用能量微扰修正 .各态对不同 J 的重心能量位移 ΔE_J 的精细结构能量值也被计算 ,并与其他理论及实验值作比较 ,结果列于表 2 中 .从表中可以看出 ,我们的计算结果与 Kingston 和 Hibbert^[6]用 Breit-Pauli 方法及 Safronova 等人^[15]用 MBPT 方法计算值很吻合 .

共振态	E_J		ΔE_J	
	本工作	文献 6]	文献 15]	本工作 文献 8]
$1s^2 2s2p \ ^3P^o_0$	37450.68	37385	37334	
$1s^2 2s2p \ ^3P^o_1$	37456.75	37392	37340	6.07 6.11
$1s^2 2s2p \ ^3P^o_2$	37472.76	37408	37356	16.01 16.15
$1s^2 2p^2 \ ^3P_0$	99241.82	99678	98910	
$1s^2 2p^2 \ ^3P_1$	99250.26	99686	98919	8.44 8.49
$1s^2 2p^2 \ ^3P_2$	99263.48	99699	98933	13.22 13.39

表 3 给出了 $1s^2 2s^2 \ ^1S \rightarrow 1s^2 2s2p \ ^1P^o$ 和 $1s^2 2s2p \ ^3P^o \rightarrow 1s^2 2p^2 \ ^3P$ 之间的辐射跃迁波长、振子强度和辐射跃迁率 .本工作中所计算 $1s^2 2s^2 \ ^1S \rightarrow 1s^2 2s2p \ ^1P^o$ 波长为 135.44nm ,而文献 12]用 MCHF 方法及实验结果分别为 135.77nm 和 136.25nm ,吻合得比较好 .为了检验波函数的准确性 ,我们还计算了三种规范的振子强度值 ,对复杂的四电子原子体系 ,这些计算显示了合理的一致性 .

[1] S Mannervik , H. Cederquist , I. Martinson , T. Brage , C. F. Fischer , *Phys. Rev.* , **A35**(1987) , 3136.

[2] J. E. Hardis , H. G. Berry , L. J. Curtes , A. E. Livingston , *Phys. Scr.* , **30**(1984) , 189.

[3] M. H. Chen , *Phys. Rev.* , **A31**(1985) , 1449.

[4] D. R. Beck , C. A. Nicolaides , *Phys. Lett.* , **61A**(1997) , 227.

[5] P. Jonsson , C. F. Fischer , M. R. Godefroid , *J. Phys.* , **B32**(1999) , 1233.

[6] A. E. Kingston , A. Hibbert , *J. Phys.* , **B33**(2000) , 693.

[7] C. F. Bunge , *Phys. Rev. Lett.* , **44**(1980) , 1450 ; C. F. , Bunge , *Phys. Rev.* , **A22**(1980) , 1.

[8] K. T. Cheng , Y. K. Kim , J. P. Desclaux , *At. Data Nucl. Data Tables* , **24**(1979) , 111.

[9] Z. W. Liu , H. P. Kelley , *Phys. Rev.* , **A43**(1991) , 3305.

[10] G. Tachiev , C. F. Fischer , *J. Phys.* , **B32**(1999) , 5805.

[11] A. W. Weiss , *Phys. Rev.* , **A51**(1995) , 1067.

[12] U. Litzen , T. Zethson , P. Jonsson , J. Kasten , R. Kling , F. Launay , *Phys. Rev.* , **A57**(1998) , 2477.

[13] H. Y. Yang , K. T. Chung , *Phys Rev.* , **A51**(1995) , 3621.

[14] Li-hong Han , Bing-cong Gou , Fei Wang , *Acta Physica Sinica* , **49**(2000) , 2139 [in Chinese] 韩利红、秉聪、王菲 , *物理学报* , **49**(2000) , 2139] .

[15] M. S. Safronova , W. R. Johnson , U. I. Safronova , *Phys. Rev.* , **A53** (1996) , 4036.

RELATIVISTIC ENERGIES AND FINE STRUCTURES OF
THE EXCITED STATES FOR BERYLLIUM-LIKE B II *

HAN LI-HONG GOU BING-CONG WANG FEI
(Department of Applied Physics , Beijing Institute of Technology , Beijing 100081 , China)
(Received 16 March 2001 ; revised manuscript received 17 April 2001)

ABSTRACT

The Rayleigh-Ritz variational method is used with a multiconfiguration-interaction function and restricted variation method to obtain the energies of $1s^22s^21S$, $1s^22s2p^1P^o$, $1s^22s2p^3P^o$ and $1s^22p^23P$ in beryllium-like boron , including the mass polarization and relativistic corrections. Fine structure , oscillator strengths , transition rates and wavelengths are also calculated. The results are compared with other theoretical and experiment data in the literature.

Keywords : berylliumlike ion , fine structure , oscillator strength , radiative transition
PACC : 3150 , 3130J

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10074006).