

Cs IV 离子 4d 内壳层激发态衰变过程的 相对论理论研究*

丁晓彬¹⁾ 董晨钟^{1)†} Stephan Fritzsche³⁾

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研究中心, 兰州 730000)

³⁾ Department of Physics, University of Kassel, D-34132 Kassel, Germany)

(2003 年 6 月 30 日收到, 2003 年 12 月 24 日收到修改稿)

在相对论多组态 Dirac-Fock 理论方法基础上, 通过系统考虑电子关联效应和由于内壳层电子激发而导致的电子自旋-轨道波函数的弛豫效应, 详细研究了 Cs IV 离子的 4d 内壳层电子激发组态 $4d^9 5s^2 5p^5$ 、辐射末态 $4d^{10} 5s^2 5p^4$ 及 Auger 末态 $4d^{10} 5s^2 5p^3$ 和 $4d^{10} 5s^1 5p^4$ 的能级结构及各种可能的辐射和 Auger 衰变过程. 获得了与已有的实验结果和相关的半经验准相对论组态相互作用计算结果相符的辐射跃迁能、振子强度以及线宽, 预言了 $4d^9 5s^2 5p^5$ 态的以 Auger 衰变为主的 Auger 电子谱的特性.

关键词: 内壳层激发态, 辐射衰变, Auger 衰变

PACC: 3120B, 3270, 3280H

1. 引 言

当原子(离子)的内壳层有一个空洞时就形成内壳层激发态. 内壳层激发态能量高、不稳定, 必须向下衰变. 一般而言, 内壳层激发态有两种衰变通道. 一是辐射衰变通道, 以偶极跃迁为主. 在这种过程中, 原子(离子)通过放出光子衰变到基态或者另一个较低的激发态. 另一种是非辐射衰变通道, 以 Auger 过程为主. 在这种过程中, 伴随着 Auger 电子的放出, 内壳层激发态原子(离子)衰变到一个高一阶离化度的离子的基态或者激发态上. 在实验方面, 内壳层激发态可以通过光激发(电离)和电子碰撞等方法获得^[1]. 随着同步辐射技术、双激光等离子体(DLP)吸收光谱技术以及离子储存环技术和电子束离子阱技术等技术的发展, 使得人们对内壳层激发态的研究更为广泛、深入^[1-3]. 然而, 由于内壳层激发态的衰变涉及许多过程, 并且伴随着大量的级联现象, 可能产生多种离化态离子, 一定程度上使得实验测量和分辨变得更为困难. 在理论方面, 对

内壳层激发态的研究往往涉及到连续态, 而目前对于连续态的研究, 特别是对连续态与分立态的相互作用的处理还没有很好的方法. 同时, 对于较重元素, 相对论效应也起着很重要的作用. 因此, 有关重原子(离子)系统的理论研究必须在相对论框架下进行.

Cs 是一种较重的碱金属元素. 近年来许多物理工作者已经对不同离化度下的 Cs 原子(离子)的基态和低激发态以及内壳层激发态进行了一些实验和理论方面的研究^[4-9]. 例如, Tauheed 等观测了 Cs IV, Cs V 及 Cs VI 离子的基态和较低的激发态及其相关的辐射跃迁过程, 并借助于半经验准相对论组态相互作用理论的计算结果对实验中得到的光谱进行了辨认^[4-6]; Aksela 等利用单色同步辐射技术研究了 Cs I 的 4d, 5s 和 5p 的光电子谱^[7,8]; Cummings 等利用 DLP 吸收光谱技术获得了从中性 Cs 原子直到 Cs V 离子的远紫外吸收谱, 并进行了半经验准相对论组态相互作用理论计算, 确认了 Cs III, Cs IV 和 Cs V 离子的部分 4d 吸收谱的结构^[9]. 但是, 在这些研究中作者所关注的仅仅是各离化度离子的辐射过

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

† 通讯联系人.

程和中性原子的 Auger 衰变过程,且所用的理论方法也是非相对论性的或准相对论性的,因此还有许多问题有待深入研究.

近年来,在相对论多组态 Dirac-Fock (MCDF) 理论框架下,我们已经发展了处理原子(离子)的辐射跃迁过程和开壳层原子(离子)的 Auger 过程的方法和程序^[10,11],并在对具有开的 p, d 和 f 壳层的原子(离子)的辐射跃迁过程及低 Z 和中 Z 离子的内壳层激发态的 Auger 过程的研究方面取得了很大的成功^[12-15]. 本文将进一步应用这些方法,系统研究 Cs IV 离子的 4d 内壳层激发态的衰变动力学过程.

2. 理论方法

2.1. MCDF 理论

有关 MCDF 理论方法已有详细的描述^[16-21],这里仅作扼要的介绍. 在 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)

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

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

$$\hat{H}_i = c\hat{\alpha} \cdot \hat{p}_i + (\beta - 1)c^2 + V_{\text{muc}}(\hat{r}_i), \quad (2)$$

式中 $V_{\text{muc}}(\hat{r}_i)$ 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

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

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

$$|\Gamma_r(PJM)\rangle = \sum_p B_p |\Psi_p\rangle. \quad (4)$$

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

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

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^[16]和主要的量子电动力学效应^[16-18],可作为微扰处理.

2.2. Auger 衰变率与 Auger 电子能量

内壳层激发态 i 通过 Auger 衰变到末态 f 的衰变率 A_{if}^a 可以用下式^[22]来进行计算:

$$A_{if}^a = \frac{2\pi}{\hbar} |\alpha_i(PJM)| \sum_{s<t} \frac{1}{r_{s,t}} |\alpha_f(P'J'M')|^2, \quad (6)$$

其中, $\alpha_i(PJM)|$ 为初态的原子态波函数,可以通过组态波函数的线性组合得到, $|\alpha_f(P'J'M')\rangle$ 由末离子态的波函数与 Auger 电子的旋-轨波函数构成. 这个自由电子的旋-轨波函数可通过求解末离子态势场中的径向方程而得到. $\frac{1}{r_{s,t}}$ 为 s 电子与 t 电子的库仑相互作用算符.

根据能量守恒定律, Auger 过程中放出的电子能量 E_A 等于初态的能量 E_i 与末离子态的能量 E_f 之差,即

$$E_A = E_i - E_f. \quad (7)$$

2.3. 辐射跃迁率和振子强度

单位时间量子体系从初态 i 到末态 k 的爱因斯坦自发辐射跃迁概率为^[22]

$$A_{ik}^r = \frac{4e^2\omega_{ik}^3}{3\hbar c^3} |\alpha_i(PJM)| P^{(1)} |\alpha_k(P'J'M')|^2, \quad (8)$$

式中 $\alpha_i(PJM)|$ 和 $|\alpha_k(PJM)\rangle$ 分别为初态 i 和末态 k 的原子态波函数,它们可以通过组态波函数线性组合而成, $P^{(1)}$ 是辐射电磁场的偶极张量算符.

辐射跃迁概率与振子强度之间有如下关系^[23]:

$$f_{ik} = \frac{\hbar^2 mc^3}{2e^2(E_i - E_k)^2} A_{ik}^r, \quad (9)$$

其中, E_i 和 E_k 分别为辐射初态和辐射末态的能量, $E_i - E_k$ 为辐射过程中发出的光子能量.

3. 结果与讨论

根据已有研究, Cs IV 的 4d 内壳层激发组态

$4d^9 5s^2 5p^5$ 的衰变包括到 $4d^{10} 5s^2 5p^3 + \epsilon l (l = s, d)$ 和 $4d^{10} 5s^1 5p^4 + \epsilon l (l = p, f)$ 的 Auger 衰变以及到 $4d^{10} 5s^2 5p^4$ 的辐射衰变. 为了建立适用于这些组态能级和波函数计算的电子相关模型, 我们首先对已有实验观测结果的 $4d^{10} 5s^2 5p^3$ 和 $4d^{10} 5s^1 5p^4$ 的能级进行了计算. 在此基础上, 进一步计算了 $4d^9 5s^2 5p^5$ 的能级及其相关的辐射跃迁过程和 Auger 跃迁过程的参数. 为了便于和已有的半经验准相对论理论结果及实验结果比较, 所有能级指认均使用了 LS 指认, 同时我们也列出了相应能级在 jj 耦合下的主要组分.

3.1. Auger 末态的能级

$4d^9 5s^2 5p^5$ 组态的可能 Auger 末态包括 $4d^{10} 5s^2 5p^3$ 和 $4d^{10} 5s^1 5p^4$ 组态. $4d^{10} 5s^2 5p^3$ 可形成 $^4S_{3/2}, ^2D_{3/2, 5/2}$ 以及

$^2P_{1/2, 3/2}$ 等 5 个原子态, 其中 $^4S_{3/2}$ 为基态. $4d^{10} 5s^1 5p^4$ 组态可形成 8 个原子态. 在我们的相关模型中, 考虑了从 $5s, 5p$ 子壳层向 $\{4f, 5s, 5p, 5d\}$ 和 $\{4f, 5s, 5p, 5d, 6s, 6p\}$ 子壳层分别激发一个和两个电子形成的所有可能的共 2361 个组态波函数. 表 1 给出了我们的计算结果和相关的实验数据. 可以看出, 对于 $4d^{10} 5s^2 5p^3$ 组态, 目前的计算结果与 Tauheed 等利用火花光源技术得到的实验结果^[5]符合相当好; 对于 $4d^{10} 5s^1 5p^4$ 组态, 目前没有相关的实验数据可供对比. 根据表中给出的 jj 耦合下各原子态的组分, 可以看出 $4d^{10} 5s^1 5p^4$ 组态中部分原子态在 jj 耦合下混合相当严重, 例如 $^4P_{3/2}, ^4P_{1/2}, ^3P_{3/2}, ^2D_{3/2}, ^3P_{1/2}$ 等原子态, 其主分量都在 50% 以下.

表 1 Cs V 离子 $4d^{10} 5s^2 5p^3$ 和 $4d^{10} 5s^1 5p^4$ 组态的能级

组态	LS 指认	本文结果	实验结果 ^[5]	jj 耦合下的组分
$4d^{10} 5s^2 5p^3$	$^4S_{3/2}$	0.0	0.0	$61\%[(5p_{3/2}) \uparrow]_{3/2} + 28\%[(5p_{1/2}) \uparrow]_{3/2}$
	$^2D_{3/2}$	15911.9	15077.4	$66\%[(5p_{1/2}) \uparrow]_{3/2} + 29\%[(5p_{3/2}) \uparrow]_{3/2}$
	$^2D_{5/2}$	20647.5	20373.5	$96\%[(5p_{1/2}) \uparrow]_{3/2}$
	$^2P_{1/2}$	33946.1	31951.1	$96\%[(5p_{1/2}) \uparrow]_{1/2}$
	$^2P_{3/2}$	42975.3	42273.7	$88\%[(5p_{3/2}) \uparrow]_{3/2} + 6\%[(5p_{3/2}) \uparrow]_{1/2}$
$4d^{10} 5s^1 5p^4$	$^4P_{5/2}$	111258.3		$75\%[(5s_{1/2}) \uparrow]_{3/2} + 13\%[(5s_{1/2}) \uparrow]_{1/2} + 12\%[(5p_{3/2}) \uparrow]_{3/2}$
	$^4P_{3/2}$	120597.0		$36\%[(5s_{1/2}) \uparrow]_{3/2} + 29\%[(5s_{1/2}) \uparrow]_{1/2} + 35\%[(5p_{3/2}) \uparrow]_{3/2}$
	$^4P_{1/2}$	123748.6		$37\%[(5s_{1/2}) \uparrow]_{1/2} + 28\%[(5s_{1/2}) \uparrow]_{3/2} + 22\%[(5s_{1/2}) \uparrow]_{1/2}$
	$^3P_{3/2}$	141815.7		$40\%[(5s_{1/2}) \uparrow]_{3/2} + 31\%[(5s_{1/2}) \uparrow]_{1/2}$
	$^2D_{5/2}$	145639.0		$68\%[(5s_{1/2}) \uparrow]_{3/2} + 10\%[(5s_{1/2}) \uparrow]_{1/2}$
	$^2D_{3/2}$	161443.3		$31\%[(5d_{3/2}) \uparrow]_{3/2} + 26\%[(5s_{1/2}) \uparrow]_{3/2} + 43\%[(5p_{3/2}) \uparrow]_{3/2}$
	$^3P_{1/2}$	163703.9		$27\%[(5s_{1/2}) \uparrow]_{1/2} + 27\%[(5p_{1/2}) \uparrow]_{3/2} + 46\%[(5d_{3/2}) \uparrow]_{1/2} + 22\%[(5s_{1/2}) \uparrow]_{3/2}$
	$^2S_{1/2}$	174497.7		$51\%[(5p_{1/2}) \uparrow]_{1/2} + 16\%[(5s_{1/2}) \uparrow]_{1/2} + 13\%[(5s_{1/2}) \uparrow]_{3/2}$

注: 1 能级单位为 cm^{-1} .

2 $I(nl_j)^w J_j$ 表示 nl_j 轨道(子壳层)有 w 个电子, 该相对论子壳层形成的总角动量为 J_j .

3.2. 辐射末态的能级

辐射末组态 $4d^{10} 5s^2 5p^4$ 的基态为 3P_2 , 其他几个较低的激发态为 $^3P_{1,0}, ^1D_2$ 和 1S_0 . 在计算过程中, 我们使用了与 Auger 末态相同的相关模型, 共包括了 1233 个组态波函数. 表 2 列出了我们的计算结果和 Reader 等使用低压放电光源测量的实验结果^[24]. 可以看出, 二者符合程度很好. 另外, 这个组态的各个原子态在 jj 耦合下的主分量普遍较大, jj 耦合纯度较高.

表 2 Cs IV 离子 $4d^{10} 5s^2 5p^4$ 组态的能级

LS 指认	本文结果	实验结果 ^[24]	jj 耦合下的组分
3P_2	0.0	0.0	$89\%[(5p_{3/2}) \uparrow]_{3/2} + 6\%[(5p_{1/2}) \uparrow]_{3/2}$
3P_0	10023.4	9749.0	$75\%[(5p_{3/2}) \uparrow]_{3/2} + 20\%[(5p_{3/2}) \uparrow]_{1/2}$
3P_1	12578.1	12901.7	$95\%[(5p_{1/2}) \uparrow]_{3/2}$
1D_2	21335.1	20753.7	$88\%[(5p_{1/2}) \uparrow]_{3/2} + 6\%[(5p_{3/2}) \uparrow]_{3/2}$
1S_0	44031.0	43279.2	$75\%[(5p_{3/2}) \uparrow]_{1/2} + 19\%[(5p_{3/2}) \uparrow]_{3/2}$

注: 同表 1 中的表注.

3.3. 内壳层激发态(初态)的能级

根据前面对于 Auger 末态和辐射末态的计算结果及其与现有实验结果的比较可知,我们关于辐射末态和 Auger 末态的相关模型在一定程度上较好地考虑了电子相关效应.因此,在对初态 $4d^9 5s^2 5p^5$ 的计算中,原则上我们可以继续采用上述的相关模型,但由于这时 4d 壳层被打开,将使计算变得很难进行.因此,计算中我们仅考虑了从 4d, 5s 和 5p 壳层向 {4d, 4f, 5s, 5p, 5d} 壳层分别激发一个和两个电子形成的组态中有较强组态相互作用的共 1437 个组态波函数.表 3 列出了相应的计算能级及 jj 耦合下的主要组分.对于这些能级,尽管目前还没有相应的实验结果可供比较,但根据我们计算的辐射跃迁能与 Cummings 等的实验结果^[9]的符合程度判断,目前的能级计算精度大约在 2000 cm^{-1} 左右.

表 3 Cs IV 离子 $4d^9 5s^2 5p^5$ 态的能级

LS 指认	本文结果	jj 耦合下的组分
$^3 F_2$	540245.6	$89\%[(4d_{5/2})(5p_{3/2})\downarrow] + 6\%[(4d_{3/2})(5p_{1/2})\downarrow]$
$^3 D_3$	541272.7	$92\%[(4d_{5/2})(5p_{3/2})\downarrow] + 3\%[(4d_{5/2})(5p_{1/2})\downarrow]$
$^3 F_4$	542648.8	$96\%[(4d_{5/2})(5p_{3/2})\downarrow] + 4\%[(4d_{5/2})(5p_{1/2})\downarrow]$
$^3 D_1$	551059.1	$91\%[(4d_{5/2})(5p_{3/2})\downarrow] + 4\%[(4d_{3/2})(5p_{1/2})\downarrow]$
$^3 D_2$	557478.7	$68\%[(4d_{3/2})(5p_{3/2})\downarrow] + 28\%[(4d_{5/2})(5p_{1/2})\downarrow]$
$^3 F_3$	559754.7	$66\%[(4d_{5/2})(5p_{1/2})\downarrow] + 30\%[(4d_{3/2})(5p_{3/2})\downarrow]$
$^3 P_2$	562531.0	$63\%[(4d_{5/2})(5p_{1/2})\downarrow] + 27\%[(4d_{3/2})(5p_{3/2})\downarrow]$
$^3 P_1$	562934.9	$87\%[(4d_{3/2})(5p_{3/2})\downarrow] + 5\%[(4d_{3/2})(5p_{1/2})\downarrow]$
$^3 P_0$	567524.1	$97\%[(4d_{3/2})(5p_{3/2})\downarrow]$
$^1 F_3$	567638.2	$65\%[(4d_{3/2})(5p_{3/2})\downarrow] + 27\%[(4d_{5/2})(5p_{1/2})\downarrow]$
$^1 D_2$	576505.0	$96\%[(4d_{3/2})(5p_{1/2})\downarrow]$
$^1 P_1$	584199.8	$88\%[(4d_{3/2})(5p_{1/2})\downarrow] + 6\%[(4d_{3/2})(5p_{3/2})\downarrow]$

注:“本文结果”一栏中是指相对于辐射末态 $4d^{10} 5s^2 5p^4$ 的基态 $^3 P_2$. 其余同表 1 中的表注.

3.4. Auger 电子的能量和 Auger 衰变率

利用在较好地考虑了电子相关效应下得到的 Auger 初态和末态的波函数和能级结果,我们进一步详细计算了从初态 $4d^9 5s^2 5p^5$ 到 $4d^{10} 5s^2 5p^3 + \epsilon l (l = s, d)$ 和 $4d^{10} 5s^1 5p^4 + \epsilon l (l = p, f)$ 的 Auger 电子的能量和跃迁率.在这个衰变过程中,可能的 Auger 跃迁共有 156 个,表 4 只列出了跃迁概率大于 $3 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ 的 30 个跃迁结果.从表 4 可以看出, Auger 跃迁大致可以分为两部分.其中,能量较低的部分(Auger 能量

小于 10 eV)来源于 $4d^9 5s^2 5p^5$ 到 $4d^{10} 5s^1 5p^4 + \epsilon l (l = p, f)$ 的跃迁,这部分跃迁的跃迁概率普遍较小,对 Auger 谱的贡献不是主要的;而能量较高的部分(Auger 能量大于 10 eV)来源于 $4d^9 5s^2 5p^5$ 到 $4d^{10} 5s^2 5p^3 + \epsilon l (l = s, d)$ 的跃迁,概率较大的跃迁大多集中在这一能谱范围.由此可以推断出实验观测到较强的 Auger 峰将可能出现在 $21.4, 22.3, 23.5, 24.4$ 和 25.1 eV 位置附近.尽管目前还没有看到关于该 Auger 过程的实验报道,但期望我们的理论结果能对将来的实验工作提供一定的参考.

表 4 Cs IV 离子 $4d^9 5s^2 5p^5$ 的 Auger 衰变能和概率

跃迁 初态 i 末态 f	Auger 衰变能 /eV	概率 / 10^{12} s^{-1}
$^3 F_2 \rightarrow (5s^1 5p^4) \downarrow D_{5/2}$	6.257	3.605
$^3 D_1 \rightarrow (5s^1 5p^4) \downarrow D_{5/2}$	7.597	3.954
$^3 P_0 \rightarrow (5s^1 5p^4) \downarrow D_{5/2}$	9.639	3.234
$^3 F_2 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow P_{3/2}$	18.985	3.347
$^3 D_3 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow P_{3/2}$	19.113	4.707
$^3 D_2 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow P_{3/2}$	21.122	17.52
$^3 D_1 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow P_{1/2}$	21.446	13.16
$^3 P_1 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow P_{3/2}$	21.799	18.15
$^3 D_3 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow D_{5/2}$	21.878	3.439
$^3 D_2 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow P_{1/2}$	22.241	5.798
$^3 P_0 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow P_{3/2}$	22.367	10.48
$^1 F_3 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow P_{3/2}$	22.382	17.17
$^3 D_3 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow D_{3/2}$	22.468	8.496
$^3 P_1 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow P_{1/2}$	22.918	4.452
$^3 D_1 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow D_{5/2}$	23.091	4.998
$^1 D_2 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow P_{3/2}$	23.481	12.85
$^1 F_3 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow P_{1/2}$	23.501	8.713
$^3 D_2 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow D_{5/2}$	23.887	8.997
$^3 F_3 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow D_{5/2}$	24.169	4.335
$^1 P_1 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow P_{3/2}$	24.435	13.19
$^3 D_3 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow S_{3/2}$	24.441	9.004
$^3 D_2 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow D_{3/2}$	24.477	12.02
$^3 P_2 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow D_{5/2}$	24.513	6.894
$^3 P_1 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow D_{5/2}$	24.563	10.58
$^3 P_0 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow D_{5/2}$	25.132	4.439
$^1 D_3 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow D_{5/2}$	25.147	16.03
$^3 P_0 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow D_{3/2}$	25.723	3.457
$^1 F_3 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow D_{3/2}$	25.737	8.697
$^1 D_2 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow D_{5/2}$	26.246	3.729
$^1 P_1 \rightarrow (5s^2 5p^3) \downarrow D_{5/2}$	27.200	3.395

3.5. 辐射跃迁能、振子强度和谱线宽度

表 5 给出了我们计算的 $4d^9 5s^2 5p^5 \rightarrow 4d^{10} 5s^2 5p^4$

的辐射跃迁能量、振子强度和谱线宽度. 作为比较, 我们也列出了 Cummings 等^[9]的计算结果和有关的实验测量结果. 表 5 只列出了属于 $4d^9 5s^2 5p^5 \rightarrow 4d^{10} 5s^2 5p^4$ 共 34 个可能跃迁线中的 15 个振子强度大于 0.05 的较强线的结果. 可以看出, 同一多重性能级之间的跃迁普遍给出的是强线, 但个别自旋禁戒的跃迁, 如 $^3P_2 \rightarrow ^1D_2$, 也有较大的振子强度. 这主要是由于其跃迁初态 3P_2 中强烈地混入了 1D_2 态的缘故.

当我们进一步与 Cummings 等^[9]利用半经验准相对论组态相互作用方法计算的跃迁能及他们使用 DLP 技术测量的结果相比时, 我们发现目前的纯理论计算结果要稍小一些, 最大差别存在于 $^3D_3 \rightarrow ^3P_2$ 跃迁上, 约为 0.5 eV, 但两种方法计算的振子强度的一致性却普遍很好.

我们知道, 每个跃迁上能级(初态能级)都有一定的寿命, 其长短取决于从该能级向下衰变的各种过程(包括辐射和 Auger)概率的大小. 根据海森伯不确定原理, 这些能级也将有确定的宽度. 上能级的宽度又进一步使得每个跃迁线都有一定的线宽. 在本文涉及的线宽(用 Γ 表示)的计算中, 考虑到 Auger 跃迁率比辐射跃迁率大 3—4 个数量级, 能级寿命主要取决于 Auger 过程. 从表 5 可以看出, 我们计算得到的线宽比 Cummings 等给出的理论结果要大些, 相对而言与实验结果较为接近. 但是我们的计算与实验相比还是有些偏小. 这主要是因为, 在实验观测中还会有碰撞加宽、共振加宽以及来自于仪器的加宽效应. 如果我们假定仪器加宽与等离子体碰撞加宽为 70 meV 左右, 那么本文的计算结果将好于以往的结果.

表 5 Cs IV 离子 $4d^9 5s^2 5p^5$ 辐射衰变能、振子强度及线宽

跃 迁 初态 $i \rightarrow$ 末态 k	本文计算结果			Cummings 的计算结果 ^[9]			观测结果 ^[9]	
	E/eV	gf	Γ/meV	E/eV	gf	Γ/meV	E/eV	Γ/meV
$^3F_2 \rightarrow ^1D_2$	64.34	0.0644	19.081					
$^3D_2 \rightarrow ^1D_2$	66.47	0.0539	43.283					
$^1P_1 \rightarrow ^1S_0$	66.97	0.3023	19.733					
$^3F_2 \rightarrow ^3P_2$	66.98	0.2225	19.085					
$^3D_1 \rightarrow ^3P_0$	67.09	0.2778	25.225					
$^3P_2 \rightarrow ^1D_2$	67.10	0.1106	13.716					
$^3D_3 \rightarrow ^3P_2$	67.11	1.0019	38.677	67.634	1.059	25.95	67.54	
$^1F_3 \rightarrow ^1D_2$	67.73	1.2849	44.893	67.740	1.2460	27.03		110
$^3D_2 \rightarrow ^3P_1$	67.57	0.5580	43.296	67.970	0.5880	24.00	67.69	250
$^3P_2 \rightarrow ^3P_1$	68.20	0.0798	13.715	68.309	0.0654	11.08	68.39	
$^3P_1 \rightarrow ^3P_1$	68.25	0.2413	38.600					
$^3P_0 \rightarrow ^3P_1$	68.55	0.0887	51.746	68.749	0.0836	10.78	68.80	
$^3D_2 \rightarrow ^3P_2$	69.12	0.0658	43.283	69.572	0.0610	23.93	69.56	
$^3P_2 \rightarrow ^3P_2$	69.75	0.1507	13.717	69.909	0.1419	11.09	69.85	
$^3P_1 \rightarrow ^3P_2$	69.80	0.0769	38.593	70.020	0.0790	18.61	70.10	

4. 结 论

本文在相对论 MCDF 理论方法基础上, 通过系统考虑电子关联效应及由于内壳层电子激发而导致的电子旋-轨波函数的弛豫效应, 深入研究了 Cs IV 离子的 4d 内壳层激发态 $4d^9 5s^2 5p^5$ 的 Auger 和辐射衰变过程, 得到了与已有的实验结果和相关的半经

验准相对论组态相互作用计算结果符合得较好的辐射跃迁的能量、振子强度以及线宽, 预言了 $4d^9 5s^2 5p^5$ 态产生的 Auger 电子谱的特性.

通过本项研究我们还可以得出以下结论:(1) 在涉及 4d 开壳层组态的能级和波函数的计算中, 我们提出的从 4d 5s 和 5p 壳层向 {4d 4f 5s 5p 5d} 壳层分别激发一个和两个电子构成的电子相关模型能够保证得到较为满意的结果. 因此, 这一电子相关

模型有望今后在相似体系的研究中推广。(2)与中性 Cs 原子的情况相似^[7],在 Cs IV 离子上 Auger 衰变仍然是 4d 内壳层激发态的占绝对优势的衰变通道。作为结果, $4d^9 5s^2 5p^5$ 的能级宽度主要由 Auger 衰变

率决定。(3)对于 Auger 衰变过程,目前得到的有关数据还没有相应的实验结果进行比较,这些数据的可靠性将有待于进一步的电子能谱实验的验证。

- [1] Gillaspay J D 2001 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **34** R93
- [2] Kanngießer B ,Jainz M ,Brünken S *et al* 2000 *Phys. Rev.* **62** 14702
- [3] Brünken S ,Gerth C ,Kanngießer B *et al* 2002 *Phys. Rev.* **65** 42708
- [4] Tauheed A ,Joshi Y N 1993 *Physica Scripta* **47** 550
- [5] Tauheed A ,Joshi Y N 1991 *Physica Scripta* **44** 579
- [6] Tauheed A ,Joshi Y N 1994 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **27** 405
- [7] Aksela H ,Aksela S *et al* 1993 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **26** 1435
- [8] Mäntykenttä A ,Aksela H ,Aksela S *et al* 1992 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **25** 5315
- [9] Cummings A ,O'Sullivan G 2001 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **34** 199
- [10] Fritzsche S ,Fischer C F ,Dong C Z 2000 *Compt. Phys. Commun.* **124** 340
- [11] Fritzsche S ,Aksela H ,Dong C Z *et al* 2003 *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **205** 93
- [12] Xie L Y ,Dong C Z ,Ma X W *et al* 2002 *Acta Phys. Sin* **51** 1965 [in Chinese] 颜录有、董晨钟、马新文等 2002 *物理学报* **51** 1965]
- [13] Dong C Z ,Fritzsche S ,Fricke B 2003 *Euro. Phys. J. D* **23** 5
- [14] Dong C Z ,Fritzsche S ,Fricke B 2001 *J. Electr. Spec. Rel. Phenon.* **114—116** 157
- [15] Kitajima M ,Okamoto M ,Shimizu Y *et al* 2001 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **34** 3829
- [16] Parpia F A ,Fischer C F ,Grant I P 1996 *Compt. Phys. Commun.* **94** 249
- [17] Grant I P ,Mckenzie B J ,Norrington P H 1980 *Compt. Phys. Commun.* **21** 207
- [18] Grant I P 1996 *Atomic ,Molecular and Optical Physics Reference Book* Drake G W F ed (New York : American Institute of Physics) p258
- [19] Jonsson P ,Parpia F A ,Fischer C F 1996 *Comput. Phys. Commun.* **96** 301
- [20] 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
- [21] Grant I P 1974 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **7** 1458
- [22] Dong C Z ,Wang J G ,Qu Y Z 1998 *Chin. Phys. Lett.* **15** 263
- [23] Cowan R D 1981 *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (London : University of California Press) p404
- [24] Reader J 1983 *J. Opt. Soc. Am.* **73** 349

The theoretical study on the decay processes of the 4d core excited states of Cs IV^{*}

Ding Xiao-Bin¹⁾ Dong Chen-Zhong^{1,2)} Stephan Fritzsche³⁾

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)

³⁾ Department of Physics, University of Kassel, D-34132 Kassel, Germany)

(Received 30 June 2003 ; revised manuscript received 24 December 2003)

Abstract

By including the electron correlation and the relaxation effects, the energy level structures of the 4d core excited configuration $4d^9 5s^2 5p^5$, final radiative configuration $4d^{10} 5s^2 5p^4$ and final Auger configurations $4d^{10} 5s^2 5p^3$ and $4d^{10} 5s^1 5p^4$ of the Cs IV ion and all possible decay dynamic processes related to these configurations are systematically studied using multi-configuration Dirac-Fock method. The present study not only provides satisfactory results for the radiative transition energies, oscillator strengths and line widths in comparison with the existing semi-empirical calculations and related experiments, but also predicts some dominant features of the Auger electron spectrum emitted by the Auger decay process of the $4d^9 5s^2 5p^5$ core excited states.

Keywords : core excited state, radiative decay, Auger decay

PACC : 3120B, 3270, 3280H

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