

# C II 离子 1s 内壳层激发态的结构和衰变特性的理论研究\*

师应龙<sup>1)</sup> 董晨钟<sup>1)2)</sup>†

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)

(2008 年 5 月 29 日收到, 2008 年 8 月 18 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、弛豫效应以及相对论高阶修正, 详细研究了 C II 离子 1s-2p 光激发形成的内壳层电子激发态( $1s2s^22p^2$  和  $1s2s2p^3$ ) 辐射和 Auger 末态的能级结构以及各种可能的衰变过程. 计算了 C II 离子 1s 内壳层光激发能量、辐射和 Auger 衰变率及其线宽, 进一步由不确定关系推出了这些激发态的能级寿命, 并与最新的实验结果和已有的理论结果进行了比较.

关键词: 内壳层激发态, 线宽, 寿命, 多组态 Dirac-Fock 方法

PACC: 3270F, 3280H, 3120B

## 1. 引 言

原子(离子)的内壳层激发态的产生一般都与各种重要的原子过程相联系, 如在高能量密度物质中高离化态离子的光激发、光电离、电子碰撞激发、电离以及离子碰撞激发和电离等过程都能产生离子的内壳层激发态, 从而对系统的动力学演变特性产生影响. 因此, 系统地研究这些过程不仅有助于更深入地理解复杂原子的结构和性质, 而且对于受控热核聚变、天体物理等研究中高温等离子体以及 X 射线辐射等问题的研究都有重要的意义<sup>[1,2]</sup>. 另外, 原子内壳层激发态在衰变过程中所释放出的信息(如光谱和 Auger 电子谱)不仅直接反映了原子内部电子之间及其与原子核之间的各种相互作用性质, 而且还可以揭示出原子内部的束缚电子和连续电子之间的相互作用性质, 从而为更好地验证已有的原子结构理论和发展新理论提供更为完整的依据. 原子的内壳层激发态通常都是不稳定的, 可以通过辐射或非辐射(Auger)过程向低能态衰变. 由于在衰变过程中涉及到许多不同的衰变通道, 导致了这些辐射和非辐射谱的复杂性, 从而使得实验测量和辨认都比

较困难<sup>[3]</sup>. 在过去的几十年里, 人们对一些少电子原子的内壳层激发态和双激发态及其相关的辐射和非辐射过程已进行了较为深入的研究, 积累了一些相关的经验, 但仍有许多现象和机理还不是很清楚, 特别是对于具有复杂结构的原子和高离化态离子, 实验和理论上的相关数据仍然较为缺乏<sup>[1-3]</sup>.

碳元素在自然中无处不在, 也是人类身体的重要组成成分之一. 同时, 由于其在天体物理中的重要性, 处于不同离化度的碳原子(离子)的结构和各种动力学性质一直都是理论和实验工作者很感兴趣的研究课题之一<sup>[4]</sup>. 近年来, 人们已经对不同离化度下的 C 原子(离子)的基态和低激发态进行了一些实验和理论方面的研究. 例如, 对于作为不透明度工程(Opacity Project)一部分的类硼 C II 离子, Fernley 等<sup>[5]</sup>利用  $R$  矩阵方法计算了其价壳层电子激发到主量子数  $n$  直到 10 的激发态所对应的能级、振子强度及其光电离截面. Yan 等<sup>[6]</sup>利用密耦合方法计算了 C II 离子的有效量子数  $v \leq 10$ , 且总轨道角动量  $L \leq 3$  的能级之间所有跃迁的振子强度. 然而, 对该离子的涉及内壳层跃迁的相关过程, 却缺乏较为系统的研究. 实验上对碳原子内壳层过程及其激发态能级寿命的研究只是在近些年才取得了一些进展.

\* 国家自然科学基金(批准号: 10434100, 10774122, 10876028), 高等学校博士学科点专项科研基金(批准号: 20070736001), 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: NWNKJ-CXGC-03-21)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: dongcz@nwnu.edu.cn

Jannitti 等<sup>[7]</sup>利用双激光产生等离子体技术测得了 C II 离子的 K 壳层吸收谱,得到了相应的跃迁能.近期, Schlachter 等<sup>[8]</sup>在 Berkeley Advanced Light Source (ALS) 实验装置上利用光子-离子合并束(photo-ion merged beam)技术,对 C II 离子 1s-2p 内壳层光激发过程进行了实验研究,测得了 C II 离子基态  $1s^2 2s^2 2p^2 P^0$  和亚稳态  $1s^2 2s 2p^2 \ ^4P$  的 1s-2p 内壳层光激发截面,同时也从实验上得到了自电离态  $1s 2s^2 2p^2 \ ^2P, \ ^2D, \ ^2S$  和  $1s 2s 2p^3 \ ^4P^0, \ ^4D^0, \ ^4S^0$  的激发能、能级线宽以及寿命.

据我们所知,虽然 C II 离子的相关数据在分析实验室和天体等离子体特性以及原子过程等方面都是非常重要的,但是目前有关 C II 离子内壳层激发态动力学过程的理论研究却很少.本文在相对论多组态 Dirac-Fock (MCDF) 理论<sup>[9]</sup>框架下,利用发展的能够处理原子(离子)的辐射跃迁过程和开壳层原子(离子)的 Auger 过程的程序 REOS99<sup>[10]</sup>和 AUGER<sup>[11]</sup>,以及我们已有的关于原子内壳层激发态的能级结构和衰变等方面的计算经验<sup>[12-17]</sup>,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弛豫效应,详细研究了处在基态和亚稳态 C II 离子经过 1s-2p 光激发所形成的内壳层电子激发态的能级结构以及各种可能的衰变过程,得到了天体物理中很有用的激发态能级线宽和寿命.

## 2. 理论方法

### 2.1. 波函数和能级的计算

有关 MCDF 理论已有详细的描述<sup>[9,12-17]</sup>,这里仅作扼要的介绍.在该理论中,任一原子态  $\alpha$  的波函数  $|\alpha(PJM)\rangle$  由具有相同宇称  $P$ 、总角动量  $J$  和总角动量分量  $M$  的组态波函数  $|\Gamma_i(PJM)\rangle$  线性组合而成,即

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

式中  $C_r(\alpha)$  为组态混合系数,  $n_c$  是组态波函数的个数.具体计算中,我们通过活动空间方法逐步扩大  $n_c$ ,可以对组态相互作用予以很好地考虑<sup>[12,15]</sup>.  $|\Gamma_i(PJM)\rangle$  为  $N$  个电子体系的组态波函数,它由所有单电子自旋轨道波函数  $\psi_{n\kappa m}$  构成的  $N$  阶 Slater 行列式波函数线性组合而成.在中心力场近似下单电子的旋轨波函数表示为

$$\psi_{n\kappa m} = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} P_{n\kappa}(r) \chi_{\kappa m}(\theta, \phi) \\ i Q_{n\kappa}(r) \chi_{-\kappa m}(\theta, \phi) \end{bmatrix}, \quad (2)$$

其中,  $n$  为主量子数,  $\kappa$  为相对论角量子数,相应于  $l = j \pm 1/2$ ,  $\kappa = \pm(j + 1/2)$ ,  $m$  为总角动量  $j$  的分量,  $P_{n\kappa}(r)$  和  $Q_{n\kappa}(r)$  分别为径向波函数的大小分量,  $\chi_{\kappa m}(\theta, \phi)$  为自旋球谐函数.

将原子态波函数(1)式作用于体系的 Dirac-Coulomb 哈密顿量,则可得到相关原子态的能量.另外,为了提高计算的精度,作为微扰,进一步考虑其他效应对这些哈密顿量的修正,如 Breit 修正、主要的量子电动力学(QED)效应(即自能和真空极化)等,我们可以对能量作进一步的修正.

### 2.2. 跃迁概率的计算

根据 Fermi 黄金定则可知,单位时间量子体系从激发态  $j$  到末态  $k$  的爱因斯坦自发辐射跃迁概率为<sup>[18]</sup>

$$A_{jk} = \frac{2\pi}{2J_j + 1} \sum_{M_j} \sum_{M_k} |M_{jk}^{(L)}|^2, \quad (3)$$

其中,  $J_j$  是激发态  $j$  的总角动量,  $M_{jk}$  是从激发态  $j$  到较低的末态  $k$  的跃迁矩阵元,可表示为

$$\begin{aligned} M_{jk}^{(L)} &= \Psi_k(P_k J_k M_k) |O^{(L)}| \Psi_j(P_j J_j M_j) \\ &= \sum_{r,s} C_r(f) C_s(i) \Gamma_r(P_k J_k M_k) \\ &\quad \times |O^{(L)}| \Gamma_s(P_j J_j M_j), \end{aligned} \quad (4)$$

式中  $O^{(L)}$  是辐射电磁场阶数为  $L$  的张量算符.辐射跃迁概率与振子强度之间的关系为<sup>[18]</sup>

$$f_{jk} = \frac{\hbar^2 mc^3}{2e^2(E_j - E_k)} A_{jk}^r, \quad (5)$$

其中,  $E_j$  和  $E_k$  分别为辐射初态和辐射末态的能量,  $(E_j - E_k)$  为辐射过程中放出的光子能量.

内壳层激发态  $j$  通过 Auger 衰变到末态  $i$  的衰变率  $A_{ji}^a$  可以用下式<sup>[10]</sup>进行计算:

$$\begin{aligned} A_{ji}^a &= \frac{2\pi}{\hbar} \left| \alpha_i(P' J' M') \right| \sum_{s < t} \frac{1}{r_{s,t}} + V_{\text{Breit}} \\ &\quad \times \left| \alpha_j(P J M) \right|^2, \end{aligned} \quad (6)$$

其中,  $\alpha_j(P J M)$  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,  $\alpha_i(P' J' M')$  由未离子态的波函数与 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初离子态势场中的径向方程而得到.  $1/r_{s,t}$  为  $s$  电子与  $t$  电子的库仑相互作用算符,  $V_{\text{Breit}}$  是 Breit 相互作用算符.

$$V_{\text{Breit}} = - \sum_{s < t} \left[ \frac{\alpha_s \cdot \alpha_t \cos(\omega_{st} r_{st})}{r_{st}} + (\alpha_s \cdot \nabla_i) \chi (\alpha_t \cdot \nabla_i) \frac{\cos(\omega_{st} r_{st}) - 1}{\omega_{st}^2 r_{st}} \right] \quad (7)$$

其中  $r_{st} = |r_s - r_t|$  为  $s$  电子与  $t$  电子间的距离,  $\omega_{st}$  为  $s$  电子与  $t$  电子间交换光子的能量,  $\alpha$  为 Dirac 矩阵.

### 3. 结果与讨论

#### 3.1. C II 离子的基组态及其内壳层激发态的能级结构

C II 离子基组态为  $1s^2 2s^2 2p$ , 可形成  $^2P_{1/2}$  和  $^2P_{3/2}$  等两个原子态, 其中  $^2P_{1/2}$  为基态. C II 离子亚稳组态为  $1s^2 2s 2p^2$ , 可形成  $^4P_{1/2, 3/2, 5/2}$ ,  $^2D_{3/2, 5/2}$ ,  $^2P_{1/2, 3/2}$  以及  $^2S_{1/2}$  等 8 个原子态, 其中  $^4P_{1/2}$  为其基态. C II 离子  $1s$  内壳层光激发所形成的激发组态  $1s 2s^2 2p^2$  和  $1s 2s 2p^3$  分别由 8 个和 19 个能级组成. 图 1 给出了 C II 离子基组态  $1s^2 2s^2 2p$ 、亚稳组态  $1s^2 2s 2p^2$  及  $1s$  内壳层激发组态的能级结构, 并标出了主要可能的 Auger 衰变通道. 内壳层激发组态  $1s 2s^2 2p^2$  和  $1s 2s 2p^3$  的主要辐射和 Auger 衰变通道分别为

$$\begin{aligned} & C^+ (1s 2s^2 2p^2 \ ^3P \ ^3D \ ^3S) \\ & \rightarrow C^+ (1s^2 2s^2 2p \ ^2P^o) + h\nu, \\ & \rightarrow C^{2+} (1s^2 2s^2, 1s^2 2p^2, 1s^2 2s 2p) + e^-, \quad (8) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & C^+ (1s 2s 2p^3 \ ^4P^o \ ^4D^o \ ^4S^o) \\ & \rightarrow C^+ (1s^2 2s 2p^2 \ ^4P) + h\nu, \\ & \rightarrow C^{2+} (1s^2 2s^2, 1s^2 2p^2, 1s^2 2s 2p) + e^-. \quad (9) \end{aligned}$$

为了更好地考虑电子关联效应, 我们在计算中包括了从  $2s, 2p$  子壳层向  $\{3s, 3p, 3d\}$  子壳层分别激发一个和两个电子形成的所有可能的组态波函数. 表 1 给出了 C II 离子基态和亚稳态的能级, 其中包括了对电子间库仑相互作用修正的 Breit 相互作用和主要的 QED 效应(即自能和真空极化), 这些辐射修正对能级的贡献很小, 约为 0.15 eV 左右. 从能级比较可以看出, 除  $1s^2 2s 2p^2 \ ^4P_{1/2}$  外, 本文计算的结果均与 NIST 实验结果<sup>[19]</sup>符合得很好. 根据表 1 给出的  $jj$  耦合下的原子态组分, 我们还可以看出 C II 离子  $1s^2 2s 2p^2$  组态中部分原子态在  $jj$  耦合下混合很严重, 例如  $^4P_{1/2}$  等原子态, 其主分量所占比例都在 50% 以下.

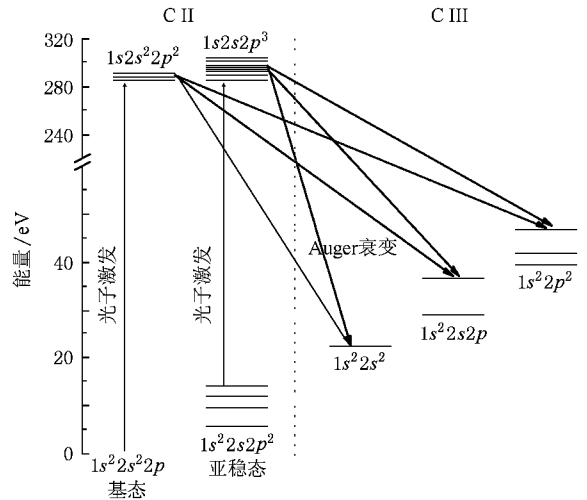


图 1 C II 离子  $1s$  内壳层激发态  $1s 2s^2 2p^2$  和  $1s 2s 2p^3$  的能级结构及其主要衰变通道

表 1 C II 离子基态  $1s^2 2s^2 2p$  和亚稳态  $1s^2 2s 2p^2$  的能级

组态	LS 指认	能级 (本文) eV	能级 文献 [19] eV	$jj$ 耦合下的组分
$1s^2 2s^2 2p$	$^2P_{1/2}$	0.000	0.000	100% [ $1s^2 2s^2 2p_{1/2} \ \uparrow_{1/2}$ ]
	$^2P_{3/2}$	0.008	0.008	100% [ $1s^2 2s^2 2p_{3/2} \ \downarrow_{3/2}$ ]
$1s^2 2s 2p^2$	$^4P_{1/2}$	4.785	5.332	45% [ $1s^2 2s \ \uparrow 2p_{1/2} \ \uparrow \ \downarrow_{1/2}$ ] + 33% [ $\{1s^2 2s 2p_{1/2} \ \downarrow 2p_{3/2} \ \uparrow_{1/2} + 22\% [\ 1s^2 2s \ \uparrow 2p_{3/2} \ \downarrow \ \uparrow^2]$
	$^4P_{3/2}$	4.788	5.334	56% [ $\{1s^2 2s 2p_{1/2} \ \downarrow 2p_{3/2} \ \downarrow_{1/2} + 33\% [\ \{1s^2 2s 2p_{1/2} \ \uparrow 2p_{3/2} \ \downarrow_{1/2}$
	$^4P_{5/2}$	4.791	5.338	67% [ $1s^2 2s \ \uparrow 2p_{3/2} \ \downarrow_{1/2}$ ] + 33% [ $\{1s^2 2s 2p_{1/2} \ \downarrow 2p_{3/2} \ \downarrow_{1/2}$
	$^2D_{5/2}$	8.965	9.290	67% [ $\{1s^2 2s 2p_{1/2} \ \downarrow 2p_{3/2} \ \downarrow_{1/2} + 33\% [\ 1s^2 2s \ \uparrow 2p_{3/2} \ \downarrow \ \uparrow^2]$
	$^2D_{3/2}$	8.966	9.290	42% [ $\{1s^2 2s 2p_{1/2} \ \downarrow 2p_{3/2} \ \downarrow_{1/2} + 33\% [\ 1s^2 2s \ \uparrow 2p_{3/2} \ \downarrow \ \uparrow_{1/2} + 25\% [\ \{1s^2 2s 2p_{1/2} \ \downarrow 2p_{3/2} \ \downarrow_{1/2}$
	$^2S_{1/2}$	11.737	11.964	67% [ $1s^2 2s \ \uparrow 2p_{3/2} \ \downarrow \ \uparrow_{1/2}$ ] + 33% [ $1s^2 2s \ \uparrow 2p_{1/2} \ \downarrow \ \uparrow_{1/2}$
	$^2P_{1/2}$	14.051	13.716	67% [ $\{1s^2 2s 2p_{1/2} \ \downarrow 2p_{3/2} \ \downarrow_{1/2} + 22\% [\ 1s^2 2s \ \uparrow 2p_{1/2} \ \downarrow \ \uparrow_{1/2}$
	$^2P_{3/2}$	14.055	13.721	56% [ $1s^2 2s \ \uparrow 2p_{3/2} \ \downarrow \ \uparrow_{1/2}$ ] + 42% [ $\{1s^2 2s 2p_{1/2} \ \downarrow 2p_{3/2} \ \downarrow_{1/2}$

### 3.2. C II 离子 1s 激发态的辐射和 Auger 衰变特性

利用较好地考虑了电子关联效应下得到的 C II 离子初、末态的波函数和能级, 我们进一步详细计算了从内壳层 1s 激发组态  $1s2s^22p^2$  和  $1s2s2p^3$  分别到末组态  $1s^22s^22p$  和  $1s^22s2p^2$  的辐射跃迁能量和振

子强度. 表 2 和表 3 中分别给出了本文的理论计算结果. 其中  $f_i$  表示 B 规范下的振子强度,  $f_v$  表示 C 规范下的振子强度, 它们在非相对论情况下分别对应于长度和速度规范. 作为比较, 我们也列出了 Schlachter 等<sup>[8]</sup>的最新实验结果和有关的理论值. 可以看出, 本文计算的 1s 激发态的辐射衰变能与

表 2 C II 离子  $1s2s^22p^2$  激发态的辐射衰变能和振子强度

辐射跃迁		辐射衰变能 / eV			振子强度	
初态 $j$ $1s2s^22p^2$	末态 $k$ $1s^22s^22p$	实验 <sup>[7, 8]</sup>	本文	R 矩阵 <sup>[8]</sup>	$f_i$	$f_v$
$^2D_{5/2}$	$^2P_{3/2}$		288.052		0.4983	0.4524
$^2D_{3/2}$	$^2P_{3/2}$	$287.93 \pm 0.03$	288.064	287.96	0.0403	0.0365
	$^2P_{1/2}$	$287.91 \pm 0.2$	288.071		0.2929	0.2656
$^2P_{1/2}$	$^2P_{3/2}$		288.306		0.1654	0.1499
	$^2P_{1/2}$	$288.40 \pm 0.03$	288.314		0.3333	0.3020
$^2P_{3/2}$	$^2P_{3/2}$	$288.59 \pm 0.2$	288.319	288.63	0.8464	0.7668
	$^2P_{1/2}$		288.327		0.1503	0.1360
$^2S_{1/2}$	$^2P_{3/2}$	$289.90 \pm 0.03$	290.237		0.1129	0.1000
	$^2P_{1/2}$	$290.53 \pm 0.2$	290.245	289.29	0.0552	0.0490

表 3 C II 离子  $1s2s2p^3$  激发态的辐射衰变能和振子强度

辐射跃迁		辐射衰变能 / eV			振子强度	
初态 $j$ $1s2s2p^3$	末态 $k$ $1s^22s2p^2$	实验 <sup>[8, 20]</sup>	本文	R 矩阵 <sup>[8]</sup>	$f_i$	$f_v$
$^4D_{7/2}$	$^4P_{5/2}$		287.432		0.6318	0.5983
$^4D_{5/2}$	$^4P_{5/2}$		287.440		0.1405	0.1328
	$^4P_{3/2}$		287.444		0.3335	0.3156
$^4D_{3/2}$	$^4P_{5/2}$	$287.25 \pm 0.03$	287.444		0.0154	0.0147
	$^4P_{3/2}$	$288.11 \pm 0.2$	287.444	287.29	0.1677	0.1586
	$^4P_{1/2}$		287.445		0.1327	0.1255
$^4D_{1/2}$	$^4P_{3/2}$		287.444		0.0261	0.0247
	$^4P_{1/2}$		287.446		0.1319	0.1247
$^4P_{5/2}$	$^4P_{5/2}$		289.584		0.3360	0.3133
	$^4P_{3/2}$		289.586		0.1415	0.1320
$^4P_{3/2}$	$^4P_{5/2}$		289.586		0.1446	0.1346
	$^4P_{3/2}$	$289.42 \pm 0.03$	289.587	289.46	0.0426	0.0397
	$^4P_{1/2}$	$289.80 \pm 0.2$	289.589		0.1311	0.1224
$^4P_{1/2}$	$^4P_{3/2}$		289.593		0.1329	0.1238
	$^4P_{1/2}$		289.593		0.0263	0.0245
$^4S_{3/2}$	$^4P_{5/2}$		286.874		0.0112	0.0106
	$^4P_{3/2}$	$287.13 \pm 0.2$	286.875	287.73	0.0074	0.0070
	$^4P_{1/2}$		286.877		0.0037	0.0035

Schlachter 等的实验结果<sup>[8]</sup>以及他们用 R 矩阵方法得到的理论结果都符合得很好,与实验值的误差在 0.5% 范围以内,且我们得到的激发态  $1s2s^22p^2P$  的结果明显比 R 矩阵计算的结果<sup>[8]</sup>更加接近实验值.另外,从目前计算的振子强度可以看出,两种不同规范下的计算结果一致性很好,这也说明我们目前关于原子态波函数的计算是准确的.

表 4 和表 5 分别给出了从  $1s$  激发态  $1s2s^22p^2$  和  $1s2s2p^3$  到所有可能末态的 Auger 衰变能量以及对应的自电离概率.作为比较,两个表中也给出了仅有的一些实验和理论结果.对于  $1s$  激发态  $1s2s^22p^2$  和  $1s2s2p^3$ ,它们可能的 Auger 末组态有  $1s^22s^2$ ,  $1s^22s2p$  和  $1s^22p^2$ ,共 10 个不同的原子态.在这个衰变过程中,对于两个不同激发态  $1s2s^22p^2$  和  $1s2s2p^3$ ,可能

表 4 C II 离子  $1s2s^22p^2$  激发态的 Auger 衰变能和自电离概率

Auger 跃迁		Auger 衰变能/eV			概率/ $10^{12} s^{-1}$
初态 $j$	末态 $i$	本文	实验 <sup>[20]</sup>	理论 <sup>[21]</sup>	$10^{12} s^{-1}$
$^2D_{5/2}$	$(1s^22s^2)S_0$	265.939			53.50
$^2D_{3/2}$	$(1s^22s^2)S_0$	265.949	264.90	265.65	53.36
$^2D_{3/2}$	$(1s^22s2p)P_0$	259.332			4.185
$^2D_{5/2}$	$(1s^22s2p)P_1$	259.320			2.518
$^2D_{3/2}$	$(1s^22s2p)P_1$	259.329			8.810
$^2D_{5/2}$	$(1s^22s2p)P_2$	259.313			13.04
$^2D_{3/2}$	$(1s^22s2p)P_2$	259.323			2.176
$^2D_{5/2}$	$(1s^22s2p)P_1$	251.782			31.87
$^2D_{3/2}$	$(1s^22s2p)P_1$	251.791	251.48	251.97	31.98
$^2D_{5/2}$	$(1s^22p^2)D_2$	246.525			47.79
$^2D_{3/2}$	$(1s^22p^2)D_2$	246.535	245.65	246.97	47.95
$^2D_{5/2}$	$(1s^22p^2)S_0$	241.472			5.040
$^2D_{3/2}$	$(1s^22p^2)S_0$	241.482	241.51	241.85	5.027
$^2P_{1/2}$	$(1s^22s2p)P_1$	254.99			16.55
$^2P_{3/2}$	$(1s^22s2p)P_1$	254.99			16.55
$^2P_{1/2}$	$(1s^22p^2)P_0$	247.85	247.30	248.30	15.86
$^2P_{1/2}$	$(1s^22p^2)P_1$	247.85			32.00
$^2P_{3/2}$	$(1s^22p^2)P_1$	247.85			7.853
$^2P_{3/2}$	$(1s^22p^2)P_2$	247.84			39.92
$^2S_{1/2}$	$(1s^22s^2)S_0$	269.25			43.51
$^2S_{1/2}$	$(1s^22s2p)P_0$	262.64			1.651
$^2S_{1/2}$	$(1s^22s2p)P_1$	262.63			4.998
$^2S_{1/2}$	$(1s^22s2p)P_2$	262.63			8.350
$^2S_{1/2}$	$(1s^22s2p)P_1$	255.09			32.01
$^2S_{1/2}$	$(1s^22p^2)S_0$	244.79	243.40	244.9	26.75

表 5 C II 离子  $1s2s2p^3$  激发态的 Auger 衰变能和自电离概率

Auger 跃迁		Auger 衰变能/eV			概率/ $10^{12} s^{-1}$
初态 $j$	末态 $i$	本文	实验 <sup>[20]</sup>	理论 <sup>[21]</sup>	本文
$^4D_{7/2}$	$(1s^22s^2)S_0$	269.785	269.40	269.21	56.6
$^4D_{5/2}$	$(1s^22s2p)P_0$	263.176			21.63
$^4D_{3/2}$	$(1s^22s2p)P_0$	263.179			13.71
$^4D_{7/2}$	$(1s^22s2p)P_1$	263.165			27.47
$^4D_{5/2}$	$(1s^22s2p)P_1$	263.174			11.55
$^4D_{1/2}$	$(1s^22s2p)P_1$	263.176			62.42
$^4D_{3/2}$	$(1s^22s2p)P_1$	263.176			34.70
$^4D_{7/2}$	$(1s^22s2p)P_2$	263.159			55.77
$^4D_{5/2}$	$(1s^22s2p)P_2$	263.167			49.64
$^4D_{1/2}$	$(1s^22s2p)P_2$	263.169			20.59
$^4D_{3/2}$	$(1s^22s2p)P_2$	263.169			34.21
$^4D_{1/2}$	$(1s^22p^2)P_0$	252.497	251.48	251.95	1.627
$^4D_{5/2}$	$(1s^22p^2)P_1$	252.491			1.730
$^4D_{1/2}$	$(1s^22p^2)P_1$	252.494			1.223
$^4D_{3/2}$	$(1s^22p^2)P_1$	252.494			1.674
$^4D_{7/2}$	$(1s^22p^2)P_2$	252.478			2.933
$^4D_{5/2}$	$(1s^22p^2)P_2$	252.486			1.177
$^4P_{3/2}$	$(1s^22s2p)P_0$	265.328			9.047
$^4P_{3/2}$	$(1s^22s2p)P_0$	265.330			1.468
$^4P_{1/2}$	$(1s^22s2p)P_0$	265.335			10.31
$^4P_{5/2}$	$(1s^22s2p)P_1$	265.325			20.49
$^4P_{3/2}$	$(1s^22s2p)P_1$	265.327			25.62
$^4P_{1/2}$	$(1s^22s2p)P_1$	265.332			8.929
$^4P_{5/2}$	$(1s^22s2p)P_2$	265.318			31.34
$^4P_{3/2}$	$(1s^22s2p)P_2$	265.320			33.91
$^4P_{1/2}$	$(1s^22s2p)P_2$	265.325			41.49
$^4P_{1/2}$	$(1s^22p^2)P_1$	254.650			2.254
$^4P_{5/2}$	$(1s^22p^2)P_2$	254.637			2.220
$^4P_{3/2}$	$(1s^22p^2)P_2$	254.639			1.368
$^4S_{3/2}$	$(1s^22p^2)P_0$	261.235			11.31
$^4S_{3/2}$	$(1s^22p^2)P_1$	261.232			33.73
$^4S_{3/2}$	$(1s^22p^2)P_2$	261.226			56.45

的 Auger 跃迁分别有 50 个和 80 个,表 4 和表 5 分别只列出了跃迁概率大于  $10^{12} s^{-1}$  的 25 个和 30 个跃迁结果.由于 Auger 衰变初态中具有相同谱项不同  $J$  值的能级之间差别非常小,它们 Auger 衰变到同一个末态能级的能量就非常接近.从表中可以看出,本

文计算的 Auger 衰变能与已有的部分实验和理论结果符合得较好. 对于激发态  $1s2s2p^3 4P$  和  $4S$ , 目前还没有相关的 Auger 衰变能的实验或理论报道, 而对于其他的激发态所能比较的结果也很有限, 期望我们的理论结果能对将来的有关实验工作提供一定的参考.

### 3.3. C II 离子 1s 内壳层激发态的能级线宽和寿命

一般而言, 内壳层激发态的能级寿命很短, 大约在阿秒到飞秒的量级, 很难从实验上直接测定. 常用的方法是利用海森伯不确定关系, 根据实验中所观测到谱线的线宽推出激发态的寿命. 我们知道, 每个内壳层激发态(跃迁上能级)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. 根据海森伯不确定关系, 这些能级也将有确定的线宽. 上能级的线宽又进一步使得每个跃迁线都有一定的线宽<sup>[9]</sup>. 在本文涉及的线宽(用  $\Gamma$  表示)计算中, Auger 跃迁概率要比辐射跃迁概率大 3—4 个数量级, 因此, 能级寿命主要取决于 Auger 过程. 激发态  $j$  的能级总线宽可以近似为辐射线宽和自电离线宽之和, 即

$$\Gamma_j = \Gamma_j^r + \Gamma_j^a = \hbar \left( \sum_k A_{jk}^r + \sum_i A_{ji}^a \right), \quad (10)$$

其中  $A_{jk}^r$  表示  $j$  到末态  $k$  的辐射衰变率,  $A_{ji}^a$  表示  $j$  到末态  $i$  的 Auger 衰变率, 求和表示考虑所有可能的辐射和 Auger 末态. 相应地, 激发态  $j$  的能级寿命为

$$\tau_j = \hbar / \Gamma_j = 1 / \left( \sum_k A_{jk}^r + \sum_i A_{ji}^a \right). \quad (11)$$

表 6 给出了本文计算的 C II 离子 1s 激发态  $1s2s^2 2p^2 2P$ ,  $2D$ ,  $2S$  和  $1s2s2p^3 4D^0$ ,  $4P^0$ ,  $4S^0$  的能级总线宽和寿命. 为了便于与已有的实验和理论结果进行比较, 表中的数值都按组态谱项给出. 结果表明, 在实验允许的误差范围内我们计算得到的激发态

$1s2s^2 2p^2 2D$  和  $1s2s2p^3 4P^0$  能级总线宽和寿命值都与实验值很好地符合, 激发态  $1s2s^2 2p^2 2P$ ,  $2S$  和  $1s2s2p^3 4D^0$  的结果则与实验值之间存在着一些差别, 这是由于这些共振态对电子关联效应非常敏感所致, 因此就需要在计算中包括更多的组态来对电子关联予以更充分的考虑. 而对于激发态  $1s2s2p^3 4S^0$ , 目前计算的能级寿命明显要比  $R$  矩阵<sup>[8]</sup>计算得到的结果小, 而已有的实验中<sup>[8]</sup>并没有观测到, 这有待于进一步的实验验证.

表 6 C II 离子 1s-2p 内壳层激发态的能级总线宽和寿命

激发态 $j$	线宽/meV			寿命/fs		
	本文	实验 <sup>[8]</sup>	$R$ 矩阵 <sup>[8]</sup>	本文	实验 <sup>[8]</sup>	$R$ 矩阵 <sup>[8]</sup>
$1s2s^2 2p^2 2D$	101	$105 \pm 15$	103	6.5	$6.3 \pm 0.9$	6.4
$1s2s^2 2p^2 2P$	43	$59 \pm 6$	62	15.2	$11.2 \pm 1.1$	10.6
$1s2s^2 2p^2 2S$	77	$112 \pm 25$	93	8.5	$5.9 \pm 1.3$	7.1
$1s2s2p^3 4D^0$	57	$110 \pm 40$	84	11.7	$6.0(+3.4, -1.6)$	7.8
$1s2s2p^3 4S^0$	67	—	25	9.9	—	26.3
$1s2s2p^3 4P^0$	42	$55 \pm 25$	52	15.7	$12.0(+10, -4)$	12.7

就目前情况而言, 相对于碳原子(离子)  $K$  壳层激发态的能级线宽和寿命数据上的缺乏, 相关含碳分子的实验和理论结果却有很多的报道<sup>[22-25]</sup>. 而 Schlachter 等<sup>[8]</sup>最新的关于自由碳原子(离子)的实验研究也是对此作了很好的补充. 表 7 给出了含碳分子以及碳原子的  $K$  壳层(即 1s)激发态的能级线宽  $\Gamma$  和寿命  $\tau$  的比较. 从表 7 可以看出, C II 离子  $1s2s^2 2p^2 2P$  激发态的寿命明显地要比所对应含碳分子的寿命大很多(大约两倍). 这是因为相对于含 C 分子而言, 在 C 离子中  $L$  壳层所能够退激发填补  $K$  壳层空穴的电子数少, 从而使得激发态向下衰变的概率较小, 相应地能级寿命就比较大.

表 7 含碳分子与碳离子  $K$  壳层激发态的能级线宽  $\Gamma$  和寿命  $\tau$  的比较

	含碳分子				C II: $1s2s^2 2p^2$					
	CO	CF <sub>4</sub>	CH <sub>4</sub>	CO <sub>2</sub>	$2D$		$2P$		$2S$	
					本文	实验 <sup>[8]</sup>	本文	实验 <sup>[8]</sup>	本文	实验 <sup>[8]</sup>
$\Gamma/\text{meV}$	$95 \pm 5^{23}$	$77 \pm 6^{23}$	$95 \pm 2^{24}$	$99 \pm 2^{25}$	101	$105 \pm 15$	43	$59 \pm 6$	77	$112 \pm 25$
$\tau/\text{fs}$	$6.9 \pm 0.4$	$8.5 \pm 0.6$	$6.9 \pm 0.1$	$6.6 \pm 0.1$	6.5	$6.3 \pm 0.9$	15.2	$11.2 \pm 1.1$	8.5	$5.9 \pm 1.3$

## 4. 结 论

在 MCDF 理论框架下, 详细研究了 C II 离子

$1s-2p$  光激发形成的内壳层电子激发组态( $1s2s^2 2p^2$  和  $1s2s2p^3$ ) 辐射和 Auger 末态的能级结构以及激发态各种可能的衰变过程. 计算得到了 C II 离子 1s 内壳层光激发能量、激发态辐射和 Auger 衰变率及其

线宽. 根据测不准关系由能级线宽得到了这些激发态的能级寿命, 并与已有的实验和理论结果进行了比较. 结果表明, C II 离子  $1s$  激发态的衰变通道中 Auger 过程是占绝对主导地位的, 且我们计算的激发

态能级线宽和寿命与近期 Schlachter 等<sup>[8]</sup>首次从实验上测得的结果很好地符合. 由于 C 原子或离子在天体中的重要性, 目前的理论结果可以为相关研究中谱线识别等方面提供一定的理论参考.

- [ 1 ] Gillaspay J D 2001 *J. Phys.* B **34** R93
- [ 2 ] Kanngieoer B, Jainz M, Brinken S, Bente W, Gerth Ch, Godehusen K, Tiedtke K, van Kampen P, Tutay A, Zimmermann P, Demekhin V F, Kochur A G 2000 *Phys. Rev. A* **62** 14702
- [ 3 ] McLaughlin B M 2001 *Spectroscopic Challenges of Photoionized Plasma* (San Francisco: Astronomical Society of the Pacific)
- [ 4 ] Beyer H F, Kluge H J, Shevelko V P 1997 *X-ray Radiation of Highly Charged Ions* (Berlin: Springer-Verlag)
- [ 5 ] Fernley J A, Burke P G, Butler K, Seaton M J 1999 *J. Phys.* B **32** 5507
- [ 6 ] Yan Y, Taylor K T, Seaton M J 1987 *J. Phys.* B **20** 6399
- [ 7 ] Jannitti E, Gaye M, Mazzoni M, Nicolosi P, Villoresi P 1993 *Phys. Rev. A* **47** 4033
- [ 8 ] Schlachter A S, Sant 'Anna M M, Covington A M, Aguilar A, Gharaibeh M F, Emmons E D, Scully S W J, Phaneuf R A, Hinojosa G, Alvarez I, Cisneros C, Müller A, McLaughlin B M 2004 *J. Phys.* B **37** L103
- [ 9 ] Parpia F A, Froese Fischer C, Grant I P 1996 *Compt. Phys. Commun.* **94** 249
- [ 10 ] Fritzsche S, Froese Fischer C, Dong C Z 2000 *Compt. Phys. Commun.* **124** 340
- [ 11 ] Fritzsche S, Aksela H, Dong C Z, Heinämäki S, Sienkiewicz J E 2003 *Nucl. Instrum. Meth. B* **205** 93
- [ 12 ] Ding X B, Dong C Z, Fritzsche S 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 2490 (in Chinese) [ 丁晓彬、董晨钟、Fritzsche S 2004 物理学报 **53** 2490 ]
- [ 13 ] Dong C Z, Zhang D H, Stöhlker Th, Fritzsche S, Fricke B 2006 *J. Phys.* B **39** 3121
- [ 14 ] Li J, Dong C Z, Xie L Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 655 (in Chinese) [ 李 杰、董晨钟、颢录有 2006 物理学报 **55** 655 ]
- [ 15 ] Zhang D H, Dong C Z, Koike F 2006 *Chin. Phys. Lett.* **23** 2059
- [ 16 ] Hu H W, Dong C Z, Shi Y L 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 3887 (in Chinese) [ 胡宏伟、董晨钟、师应龙 2007 物理学报 **56** 3887 ]
- [ 17 ] Ding X B, Dong C Z, Koike F, Kato T, Fritzsche S 2008 *Chin. Phys. B* **17** 592
- [ 18 ] Grant I P 1974 *J. Phys.* B **7** 1458
- [ 19 ] <http://physics.nist.gov/PhysRefData/contents.html>
- [ 20 ] Rdbro M, Bruch R, Bisgaard P 1979 *J. Phys.* B **12** 2413
- [ 21 ] Bruch R, Chung K T, Luken W L, Culberson J C 1995 *Phys. Rev. A* **31** 310
- [ 22 ] Coville M, Thomas T D 1991 *Phys. Rev. A* **43** 6053
- [ 23 ] Carroll T X, Borve K J, Saethre L J, Bozek J D, Kukk E, Hahne J A, Thomas T D 2002 *J. Chem. Phys.* **116** 10221
- [ 24 ] Carroll T X, Borve K J, Saethre L J, Bozek J D, Kukk E, Hahne J A, Thomas T D 1999 *Phys. Rev. A* **59** 3386
- [ 25 ] Carroll T X, Hahne J A, Thomas T D, Saethre L J, Berrah N, Bozek J D, Kukk E 2000 *Phys. Rev. A* **61** 042503

# Theoretical investigation on level structure of 1s inner-shell excited state and the related decay property of C II ion<sup>\*</sup>

Shi Ying-Long<sup>1)</sup> Dong Chen-Zhong<sup>1,2)†</sup>

<sup>1)</sup> College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China)

<sup>2)</sup> Center of Theoretical Nuclear Physics, National Laboratory of Heavy Ion Accelerator of Lanzhou, Lanzhou 730000, China)

( Received 29 May 2008 ; revised manuscript received 18 August 2008 )

## Abstract

Based on the multi-configuration Dirac-Fock method, the level structures and decay processes of the inner-shell excited states ( $1s2s^22p^2$  and  $1s2s2p^3$ ) created by 1s-2p photoexcitation of C II ion have been studied systematically, which the correlation and relaxation effects, relativistic radiative corrections have been considered in the calculations. Auger and radiative transition energy, decay rate and linewidth for each inner-shell excited states of C II ion has been calculated. Correspondingly, lifetimes of those autoionization states can be obtained via the Heisenberg uncertainty principle. A comparison of the present calculations with the latest experimental and available theoretical results is also presented.

**Keywords** : inner-shell excited state, linewidth, lifetime, multi-configuration Dirac-Fock method

**PACC** : 3270F, 3280H, 3120B

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant Nos. 10434100, 10774122, 10876028 ), the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China ( Grant No. 20070736001 ), the Foundation of Center of Theoretical Nuclear Physics of National Laboratory of Heavy Ion Accelerator of Lanzhou and the Foundation of Scientific and Technical Innovation of Northwest Normal University, China ( Grant No. NWNNU-KJCXGC-03-21 ).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail : dongcz@nwnu.edu.cn