

等离子体屏蔽效应对Ar<sup>16+</sup>基态和激发态能级的影响

马堃 陈展斌 黄时中

Influence of plasma shielding effect on ground state and excited state energies of Ar<sup>16+</sup>

Ma Kun Chen Zhan-Bin Huang Shi-Zhong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 68, 023102 (2019) DOI: 10.7498/aps.68.20181915

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.68.20181915>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

相对论强激光与近临界密度等离子体相互作用的质子成像

Proton imaging of relativistic laser-produced near-critical-density plasma

物理学报. 2019, 68(15): 155201 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190610>

相对论皮秒激光在低密度等离子体中直接加速的电子束的横向分布特征研究

Transverse distribution of electron beam produced by relativistic picosecond laser in underdense plasma

物理学报. 2019, 68(19): 195203 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20191106>

甚高频激发的容性耦合Ar+O<sub>2</sub>等离子体电负特性研究

Electronegativity of capacitively coupled Ar+O<sub>2</sub> plasma excited at very high frequency

物理学报. 2017, 66(18): 185202 <https://doi.org/10.7498/aps.66.185202>

化学复合率对激发赤道等离子体泡影响的数值模拟

Numerical simulation of recombination rate effect on development of equatorial plasma bubbles

物理学报. 2019, 68(19): 199401 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190173>

高温等离子体的状态方程及其热力学性质

Equations of state and thermodynamic properties of hot plasma

物理学报. 2017, 66(3): 030505 <https://doi.org/10.7498/aps.66.030505>

# 等离子体屏蔽效应对 $\text{Ar}^{16+}$ 基态和激发态能级的影响\*

马堃<sup>1)†</sup> 陈展斌<sup>2)</sup> 黄时中<sup>3)</sup>

1) (黄山学院信息工程学院, 黄山 245041)

2) (湖南工业大学理学院, 株洲 412007)

3) (安徽师范大学物理与电子信息学院, 芜湖 241000)

(2018 年 10 月 27 日收到; 2018 年 12 月 10 日收到修改稿)

基于 Rayleigh-Ritz 变分原理, 发展了一套处理弱耦合等离子体环境中多电子原子 (离子) 非相对论能量及其相对论修正的解析方法. 通过考虑电子间交换相互作用以及内外壳层电子的屏蔽效应, 计算了  $\text{Ar}^{16+}$  基态  $1s^2\ ^1S$ 、单激发态  $1sns\ ^1,^3S$  ( $n = 2-5$ ),  $1snp\ ^1,^3P$  ( $n = 2-5$ ) 和双激发态  $2snp\ ^1P$  ( $n = 2-5$ ) 非相对论能量及其相对论修正值 (包括质量修正、单体和双体达尔文修正以及自旋-自旋接触相互作用项), 讨论了等离子体屏蔽效应对能级的影响. 结果表明: 相对论质量修正和第一类达尔文修正占主导, 比其他相对论修正项高出三个数量级. 此外, 等离子体屏蔽效应应具有明显的态选择性, 屏蔽效应对外壳层电子的影响大于内壳层电子, 随着等离子体屏蔽参数的增加, 外壳层电子轨道向外延展, 激发态越高, 延展程度越大.

**关键词:** 等离子体, 能级, 相对论修正

**PACS:** 31.30.jc

**DOI:** 10.7498/aps.68.20181915

## 1 引言

等离子体是指由原子或原子团的部分电子被剥夺后产生的正负离子形成的离子化气体状物质, 其广泛存在于宇宙环境中. 在等离子体环境下, 核外电子所感受到的势发生变化, 导致能级、跃迁光谱和碰撞动力学等原子参数发生改变. 这些原子数据对解释和诊断聚变等离子体中的温度和密度等状态具有重要的参考价值. 近年来, 随着聚变等离子体实验的开展, 以及先导聚变实验项目 (如国际热核聚变实验堆 (ITER) 等) 的推进, 人们越来越关注等离子体环境中辐射光谱和动力学参数. 等离子体中粒子之间相互作用与等离子体的温度和密度等状态参数有关. 人们常使用一些参数来表征等

离子体的性质, 如等离子体耦合参数  $\Gamma = e^2/(ak_B T_e)$ , 其中  $a = (3/4\pi n_e)^{1/3}$ ,  $k_B$  为玻尔兹曼常数,  $T_e$  为等离子体电子温度,  $n_e$  为电子密度,  $e$  为电荷电量. 当  $\Gamma \ll 1$  时, 等离子体称为弱耦合等离子体, 其广泛存在于宇宙大气、太阳等恒星表面以及实验室中的气体放电和托克马克等离子体中. 当  $\Gamma \geq 1$  时, 等离子体称为强耦合等离子体. 由于物理模型的局限性, 人们构造了多种计算模型描述不同温度和密度条件下的等离子体. 例如, 对于高温低密弱耦合等离子体, Debye 和 Hückel<sup>[1]</sup> 提出了 Debye-Hückel 势代替传统的库仑势, 即将两个带电量分别为  $q$  和  $q'$  的点电荷之间相互作用库仑势改写成为  $V(r) = -\frac{qq'}{r} e^{-ur}$ , 其中  $u = 1/r_D$ ,  $r_D = \sqrt{k_B T_e / (4\pi e^2 n_e)}$

\* 国家自然科学基金 (批准号: 11804112, 11504421)、安徽省自然科学基金 (批准号: 1808085QA22)、安徽省高校优秀青年人才支持计划重点项目 (批准号: gxyqZD2016301) 和安徽省高校自然科学研究项目 (批准号: KJHS2015B01) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: makun@hsu.edu.cn

为等离子屏蔽长度. 对于高密度量子等离子体, 引入余弦指数函数对 Debye-Hückel 势进行了修正, 以描述较强耦合效应, 该模型广泛应用于凝聚态物理领域<sup>[2]</sup>. 此外, 人们还采用离子球 (IS) 模型描述强耦合等离子体中的屏蔽效应. IS 模型将离子包围在一个元包中, 元包所含电子的个数与离子的电荷态相等以保证整个元包呈电中性<sup>[3-9]</sup>. 这些工作的开展, 为人们获取等离子体内部信息提供了重要的帮助.

氩 (Ar) 作为宇宙丰度元素之一, 其各种离化度离子广泛存在于太阳耀斑、超行星和黑洞的吸积盘等天体等离子体环境中. 早期的光学不透明度工程, 对  $\text{Ar}^{16+}$  和  $\text{Ar}^{17+}$  光电离截面作了系统的计算研究, 给出了大量可供分析天体辐射光谱的参考数据<sup>[10-12]</sup>. 2000 年, 钱德拉空间观察站在塞弗特星系 NGC 3783 中观察到  $\text{Ar}^{16+}$  的辐射谱线, 这些谱线的分析需要理论数据作为依据<sup>[13]</sup>. 由此可见, 研究等离子环境中  $\text{Ar}^{16+}$  能级和辐射光谱的理论, 不仅对天体等离子体的状态诊断和光谱分析起着重要的作用, 而且由于其核外有两个电子, 是考察电子与原子核、电子与电子间相互作用和相对论效应的理想体系<sup>[14-22]</sup>. 目前对  $\text{Ar}^{16+}$  能级的研究主要集中在非屏蔽下能级结构和跃迁数据的计算. 如 Saha 等<sup>[14]</sup>在非相对论变分框架, 提出了一种新的试探性波函数, 在包含径向和角向关联效应下, 计算了  $\text{Ar}^{16+}$  基态能量, 获得了较高精度的结果; Costa 等<sup>[15]</sup>在 Dirac-Fock 近似下计算了  $\text{Ar}^{16+}$  高激发态到基态的跃迁能、辐射跃迁几率和非辐射跃迁几率; Goryaev 等<sup>[16]</sup>基于  $Z$  展开方法的 MZ 代码计算了  $\text{Ar}^{16+}$  共振态到基态和低激发态之间的跃迁能和跃迁几率, 为了提高计算精度, 文中的相对论效应包含了 Breit 作用. Saha 等<sup>[17]</sup>在非相对论框架下计算了弱耦合等离子体环境中  $2pnd$  ( $n = 3-6$ ) 以及  $2pnp$  ( $n = 3-6$ ) 双电子原子的能级结构, 他们发现随着等离子体耦合强度的增加, 原子趋于不稳定, 且束缚态电子的个数逐渐减少. Fang 等<sup>[18]</sup>研究了等离子环境对  $\text{He}_\alpha$  线移动的影响, 结果表明等离子体环境下的跃迁谱线存在红移现象, 同时指出红移与德拜长度之间的规律可以作为重要的诊断等离子体状态工具. Kar 和 Ho<sup>[19]</sup>采用了高度关联的 Hylleraas-type 基对氦原子双激共振态  $2s^2\ ^1S$  的共振能和共振宽度进行了计算. Xie 等<sup>[20]</sup>在多组态 Dirac-Fock 方法的基础上, 将 Debye-Hückel 势引入能量及跃迁哈密顿量中, 并对  $\text{C}^{4+}$   $1s^2$ ,  $1s2l$  ( $l = s, p$ ) 以及  $1s3l$  ( $l = s, p, d$ ) 组态间的电偶极、

磁偶极和磁四极跃迁几率、振子强度等原子参数进行了计算, 分析了电子与电子、电子与原子核相互作用对激发态和跃迁能的影响. 计算表明, 等离子体屏蔽导致原子激发能降低.

尽管目前已开展了大量研究工作, 但对等离子屏蔽下  $\text{Ar}^{16+}$  能级结构的研究结果匮乏, 有关相对论效应对等离子体中原子能级和跃迁性质影响的报道更少. Chaudhuri 等<sup>[23]</sup>分别利用标准的屏蔽库仑势和余弦屏蔽库仑势对等离子体环境效应下类氢离子基态和最低的两个激发态能级结构进行了计算, 讨论了相对论修正项中的质量修正项、达尔文修正项以及自旋-轨道相互作用项在等离子体环境下的行为. Hu 等<sup>[24]</sup>在库仑屏蔽势下对类氢离子的激发能和跃迁几率进行了计算, 分析了相对论效应对束缚态能级的影响, 结果表明, 库仑屏蔽势可以很好地描述弱耦合等离子体环境对原子结构和跃迁线的影响, 屏蔽势减小原子能级间的跃迁能, 同时指出相对论能量对低电荷类氢离子束缚态能级的影响可以忽略不计. 然而, 以上的解析方法对单电子体系是适用的, 很难推广到多电子体系.

本文基于变分理论, 发展了一套处理弱耦合等离子体环境中多电子原子 (离子) 基态和激发态非相对论能量及其相对论修正能量的解析计算方法. 为了包括内外壳层电子的不同屏蔽效应以及交换效应, 组态波函数采用了反对称性的 Hartree-Fock 波函数, 同时将内外层电子径向轨道的变分参数取为独立的值. 我们以类氦氩离子为例, 计算了等离子体环境下基态、单激发态和双激发态的非相对论能级, 给出了质量修正、单体和双体达尔文修正、自旋-自旋接触相互作用和轨道-轨道相互作用等相对论修正项的能量值, 并讨论离子体屏蔽效应对能级和波函数的影响.

## 2 理论方法

### 2.1 非相对论能量

对于孤立双电子原子, 非相对论哈密顿量可以表示为

$$H_{\text{NR}} = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}, \quad (1)$$

式中  $Z$  为核电荷数. 在弱耦合等离子体中, 原子的非相对论哈密顿可以改写为

$$H_{\text{NR}} = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2 - \frac{Z}{r_1}e^{-ur_1} - \frac{Z}{r_2}e^{-ur_2} + \frac{1}{r_{12}}e^{-ur_{12}}. \quad (2)$$

需要说明的是, 本文仅考虑电子与原子核之间势的修正, 没有包括电子与电子之间相互作用势的修正. 事实上, 文献[22]的研究表明, 对于高  $Z$  高电荷态离子电子-电子相互作用势的修正对结果影响不大, 可以忽略不计. 依据 Rayleigh-Ritz 变分法, 在 Racah 表象下的多电子原子非相对论本征能量可以由 (3) 式得到:

$$E_{\text{NR}} = \min \langle \gamma L S M_L M_S | H_{\text{NR}} | \gamma L S M_L M_S \rangle, \quad (3)$$

式中  $|\gamma L S M_L M_S\rangle$  表示多电子原子的 Racah 波函数;  $L$  和  $S$  分别为原子的总轨道和总自旋角动量;  $M_L$  和  $M_S$  分别为总轨道和总自旋角动量在量子轴方向的投影;  $\gamma$  为其他量子数.  $|\gamma L S M_L M_S\rangle$  由 Slater 行列式线性展开得到, 即

$$|\gamma L S M_L M_S\rangle = \sum_{\beta} C_{\beta} \Phi_{\beta}(\gamma M_L M_S), \quad (4)$$

其中  $C_{\beta}$  为组合系数;  $\Phi_{\beta}(\gamma M_L M_S)$  为将单电子波函数  $\psi_{n_i \ell_i m_{\ell_i} m_{s_i}}(\mathbf{x}_i)$  反对称化后得到的 Slater 行列式波函数,  $n, \ell, m_{\ell}, m_s$  分别为单电子主量子数、轨道

量子数、轨道量子数投影和自旋量子数投影.  $\psi_{n_i \ell_i m_{\ell_i} m_{s_i}}(\mathbf{x}_i)$  可以进一步写成单电子径向、角向和自旋波函数的乘积形式, 即

$$\psi_{n_i \ell_i m_{\ell_i} m_{s_i}}(\mathbf{x}_i) = R_{n_i \ell_i}(r_i) Y_{\ell_i m_{\ell_i}}(\theta_i \phi_i) \chi_{m_{s_i}}(s_i), \quad (5)$$

式中的单电子角向波函数  $Y_{\ell_i m_{\ell_i}}(\theta_i \phi_i)$  和自旋波函数  $\chi_{m_{s_i}}(s_i)$  是已知的, 本文的单电子径向波函数  $R_{n_i \ell_i}(r_i)$  选取 Slater 型径向波函数, 即

$$R_{n\ell}(r) = N_{n\ell} \exp\left(-\frac{\alpha_{n\ell} r}{n}\right) \times \sum_{\nu=0}^{n-1} \frac{n!}{\nu!(n-\nu-1)!(\nu+1)!} \left(-\frac{2\alpha_{n\ell} r}{n}\right)^{\nu}, \quad (6)$$

式中  $\alpha_{n_i \ell_i}$  为变分参数, 通过对非相对论能量变分得到.  $N_{n\ell}$  为归一化系数, 通过使径向波函数满足归一化条件得到, 即

$$\int_0^{\infty} R_{n\ell}^*(r) R_{n\ell}(r) r^2 dr = 1. \quad (7)$$

将 (4) 式代入 (3) 式, 完成角向和自旋部分积分后, 非相对论能量表达式只剩下径向部分的单电子直接积分和双电子积分, 即

$$I(n\ell) = \frac{1}{2} \int_0^{\infty} r R_{n\ell}(r) \left[ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - \frac{2Z}{r} \right] r R_{n\ell}(r) dr, \quad (8a)$$

$$R^{(k)}(n_i \ell_i n_j \ell_j, n_i' \ell_i' n_j' \ell_j') = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} R_{n_i \ell_i}(r_1) R_{n_i' \ell_i'}(r_1) R_{n_j \ell_j}(r_2) R_{n_j' \ell_j'}(r_2) \frac{r_1^k}{r_1^{k+1}} r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2. \quad (8b)$$

## 2.2 相对论修正

非相对论能量的相对论修正哈密顿量可以写成

$$H_{\text{RS}} = H_{\text{MC}} + H_{\text{D}} + H_{\text{SSC}} + H_{\text{OO}}, \quad (9)$$

式中  $H_{\text{MC}}$  为相对论质量修正项;  $H_{\text{D}} = H_{\text{D1}} + H_{\text{D2}}$  为达尔文修正项,  $H_{\text{D1}}$  为单体达尔文修正项,  $H_{\text{D2}}$  为双体达尔文修正项;  $H_{\text{SSC}}$  为自旋-自旋接触相互作用项;  $H_{\text{OO}}$  为轨道-轨道相互作用项. 表达式分别为

$$H_{\text{MC}} = -\frac{\alpha^2}{8} \sum_i \nabla_i^4, \quad (10)$$

$$H_{\text{D}} = H_{\text{D1}} + H_{\text{D2}} = \frac{Z\pi\alpha^2}{2} \sum_i \delta(\mathbf{r}_i) - \pi\alpha^2 \sum_{j>i} \delta(\mathbf{r}_{ij}), \quad (11)$$

$$H_{\text{SSC}} = -\frac{8}{3}\pi\alpha^2 \sum_{j>i} (s_i \cdot s_j) \delta(\mathbf{r}_{ij}), \quad (12)$$

$$H_{\text{OO}} = -\frac{\alpha^2}{2} \sum_{j>i} \left[ \frac{\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{p}_j}{r_{ij}} + \frac{\mathbf{r}_{ij} \cdot (\mathbf{r}_{ij} \cdot \mathbf{p}_i) \mathbf{p}_j}{r_{ij}^3} \right]. \quad (13)$$

在 Racah 表象下, 各相对论修正项的能量可以分别写为

$$\Delta E_{\text{MC}} = \langle \gamma L S M_L M_S | H_{\text{MC}} | \gamma L S M_L M_S \rangle, \quad (14a)$$

$$\Delta E_{\text{D1}} = \langle \gamma L S M_L M_S | H_{\text{D1}} | \gamma L S M_L M_S \rangle, \quad (14b)$$

$$\Delta E_{\text{D2}} = \langle \gamma L S M_L M_S | H_{\text{D2}} | \gamma L S M_L M_S \rangle, \quad (14c)$$

$$\Delta E_{\text{SSC}} = \langle \gamma L S M_L M_S | H_{\text{SSC}} | \gamma L S M_L M_S \rangle. \quad (14d)$$

最后得到总相对论修正能量为

$$\begin{aligned} \Delta E_{\text{RS}}(\gamma L S) = & \Delta E_{\text{MC}}(\gamma L S) + \Delta E_{\text{D1}}(\gamma L S) \\ & + \Delta E_{\text{D2}}(\gamma L S) + \Delta E_{\text{OO}}(\gamma L S) \\ & + \Delta E_{\text{SSC}}(\gamma L S). \end{aligned} \quad (15)$$

表 1 相对论修正对  $C^{4+}$  基态  $1s^2\ ^1S$  能级的影响 (单位: a.u.)Table 1. Effects of relativistic correction on ground state  $1s^2\ ^1S$  energies level in  $C^{4+}$  (unit: a.u.).

| $u$ | $\alpha_{1s}$ | $E_{NR}$ | $E_{MC}$   | $E_{D1}$  | $\Delta E_{RS}$ | $E_T$     | Ref.[20] | Ref.[25,26] |
|-----|---------------|----------|------------|-----------|-----------------|-----------|----------|-------------|
| 0   | 5.6875        | -32.3477 | -0.0696508 | 0.0587822 | -0.01087        | -32.35857 | -32.4176 | -32.3612    |
| 0.1 | 5.68614       | -31.1633 | -0.0695843 | 0.0587401 | -0.01084        | -31.17414 | -31.2324 | -31.177     |
| 0.2 | 5.68218       | -30.0095 | -0.0693905 | 0.0586174 | -0.01077        | -30.02027 | -30.079  | -30.0237    |
| 0.3 | 5.67577       | -28.8854 | -0.0690781 | 0.0584193 | -0.01066        | -28.89606 | -28.9557 | —           |
| 0.4 | 5.66706       | -27.7899 | -0.0686549 | 0.0581507 | -0.01050        | -27.80040 | -27.8614 | —           |
| 0.5 | 5.65616       | -26.7223 | -0.0681282 | 0.0578158 | -0.01031        | -26.73261 | -26.7963 | -26.7395    |
| 0.6 | 5.64318       | -25.6817 | -0.067505  | 0.0574187 | -0.01009        | -25.69179 | -25.7576 | —           |
| 0.7 | 5.62821       | -24.6674 | -0.0667916 | 0.0569630 | -0.00983        | -24.67723 | -24.7457 | —           |
| 0.8 | 5.61134       | -23.6788 | -0.0659942 | 0.0564522 | -0.00954        | -23.68834 | -23.7006 | -23.7594    |
| 0.9 | 5.59263       | -22.7151 | -0.0651186 | 0.0558895 | -0.00923        | -22.72433 | -22.7986 | —           |
| 1.0 | 5.57215       | -21.7758 | -0.0641701 | 0.0552778 | -0.00889        | -21.78469 | -21.8629 | —           |

### 3 计算与讨论

基于上述解析推导, 我们编写了处理等离子体环境中原子非相对论能量和相对论修正能量的计算程序. 为了验证计算方法和代码的可靠性, 首先对  $C^{4+}$  基态的非相对论能量及其相对论修正能量进行了计算, 并将计算结果与文献进行了比较, 结果如表 1 中所列, 其中,  $u$  为德拜半径的倒数,  $\alpha_{1s}$  为轨道变分参数,  $E_{NR}$  为非相对论能量,  $E_{MC}$  和  $E_{D1}$  分别为质量修正和单体达尔文修正,  $\Delta E_{RS}$  为总相对论修正能量,  $E_T$  为总能量. 可以看到, 考虑相对论效应之后, 我们的计算结果与文献[20, 25, 26] 符合得非常好, 误差小于 0.4%. 需要说明的是, 由于基态的两个电子均处于  $s$  轨道, 双体达尔文修正项、自旋-自旋接触作用项和轨道-轨道相互作用项为零.

#### 3.1 $Ar^{16+}$ 非相对论能量

为了研究相对论修正对原子能级结构的影响, 我们对弱耦合等离子环境下类氦  $Ar^{16+}$  基态  $1s^2\ ^1S$ 、单激发态  $1sns$  ( $n = 2-5$ )  $^1,^3S$ ,  $1snp$  ( $n = 2-5$ )  $^1,^3P$  和双激发态  $2snp$  ( $n = 2-5$ )  $^1,^3P$  的非相对论能量及其相对论修正能量值进行了系统的计算.

对于双电子体系单重态, 其原子态的 Racah 波函数可以展开为

$$|(n\ell n'\ell')^1L, 0, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(\Phi_\alpha - \Phi_\beta), \quad (16)$$

式中

$$\Phi_\alpha = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \psi_{n\ell 0+}(\mathbf{x}_1) & \psi_{n\ell 0+}(\mathbf{x}_2) \\ \psi_{n'\ell' 0-}(\mathbf{x}_1) & \psi_{n'\ell' 0-}(\mathbf{x}_2) \end{vmatrix}, \quad (17a)$$

$$\Phi_\beta = \frac{1}{\sqrt{2!}} \begin{vmatrix} \psi_{n\ell 0-}(\mathbf{x}_1) & \psi_{n\ell 0-}(\mathbf{x}_2) \\ \psi_{n'\ell' 0+}(\mathbf{x}_1) & \psi_{n'\ell' 0+}(\mathbf{x}_2) \end{vmatrix}. \quad (17b)$$

将 (16) 式的 Racah 波函数代入 (3) 式, 完成角向和自旋部分积分, 可得径向积分部分的非相对论能量表达式, 以  $1s2s$  组态为例, 其表达式为

$$E_{NR}(1s2s, ^1S) = I(1s) + I(2s) + R^{(0)}(1s2s, 1s2s) + R^{(0)}(1s2s, 2s1s). \quad (18)$$

将径向波函数代入 (18) 式, 完成径向积分, 可得关于变分参数的非相对论能量解析表达式, 即

$$E_{NR}(1s2s, ^1S) = \frac{\alpha_{1s}^2}{2} + \frac{\alpha_{2s}^2}{8} + \frac{320\alpha_{1s}^5\alpha_{2s}^3 - 480\alpha_{1s}^4\alpha_{2s}^4 + 208\alpha_{1s}^3\alpha_{2s}^5}{(2\alpha_{1s} + \alpha_{2s})^7} + \frac{8\alpha_{1s}^5\alpha_{2s} + 20\alpha_{1s}^4\alpha_{2s}^2 + 12\alpha_{1s}^3\alpha_{2s}^3 + 10\alpha_{1s}^2\alpha_{2s}^4 + \alpha_{1s}\alpha_{2s}^5}{(2\alpha_{1s} + \alpha_{2s})^5} - \frac{4\alpha_{1s}^3Z}{(2\alpha_{1s} + \mu)^2} - \frac{\alpha_{2s}^3Z(\alpha_{2s}^2 + 2\mu^2)}{4(\alpha_{2s} + \mu)^4}. \quad (19)$$

对 (19) 式取极值, 可以得到各轨道的变分参数, 具体数据在表 2 中给出. 可以看到, 电荷亏损 ( $\delta = |Z - \alpha_{n\ell}|$ ) 随着电子轨道的增高逐渐减小, 这是由于电子轨道越高, 电子贯穿和屏蔽效应越来越弱.

#### 3.2 等离子环境中 $Ar^{16+}$ 基态和激发态相对论能级

在球张量的形式下, 将 (10)–(13) 式代入各相对论修正项 (14) 式, 利用不可约张量理论完成径

向、角向和自旋部分的积分, 最终可以得到各原子态解析的相对论能量参数表达式. 以基态  $1s^2$  ( $^1S$ ) 态和激发态  $1s2s$  ( $^1S$ ) 态为例, 基态  $1s^2$  ( $^1S$ ) 各相对论修正项的解析参数表达式为

$$E_{MC}(1s^2, ^1S) = -\frac{5}{4}\alpha_{1s}^4\alpha^2, \quad (20a)$$

$$E_{D1}(1s^2, ^1S) = \alpha_{1s}^3 Z\alpha^2, \quad (20b)$$

$$E_{D2}(1s^2, ^1S) = E_{SSC}(1s^2, ^1S) = E_{OO}(1s^2, ^1S) = 0. \quad (20c)$$

激发态  $1s2s$  ( $^1S$ ) 各项相对论修正项的解析参数表达式为

$$E_{MC}(1s2s, ^1S) = -\frac{1}{8}\left(5\alpha_{1s}^4 + \frac{13\alpha_{2s}^4}{16}\right)\alpha^2, \quad (21a)$$

$$E_{D1}(1s2s, ^1S) = \frac{1}{8}\left(4\alpha_{1s}^3 + \frac{\alpha_{2s}^3}{2}\right)Z\alpha^2, \quad (21b)$$

$$E_{SSC}(1s2s, ^1S) = -2E_{D2}(1s2s, ^1S) = \frac{-2\alpha_{1s}^3\alpha_{2s}^3(4\alpha_{1s}^2 - \alpha_{1s}\alpha_{2s} + \alpha_{2s}^2)}{(2\alpha_{1s} + \alpha_{2s})^5}\alpha^2, \quad (21c)$$

$$E_{OO}(1s2s, ^1S) = 0. \quad (21d)$$

将非相对论能量计算时得到的变分参数代入以上的解析式中, 即可得到各相对论修正项的能量值. 表 3—表 8 分别给出了基态  $1s^2$  ( $^1S$ ) 和激发态  $1sns$  ( $^1S$ ,  $n = 2-5$ ),  $1snp$  ( $^1P$ ,  $n = 2-5$ ),  $2snp$  ( $^1P$ ,  $n = 2-5$ ) 的相对论性能量. 需要说明的是, 因为双电子原子单重态的两个电子自旋方向相反, 所以双体达尔文修正和自旋-自旋接触相互作用修正项对应的相对论能量为零;  $1sns$  组态两电子轨道量子数相同, 轨道-轨道相互作用项的贡献为零.

从表 3—表 8 可以看出, 电荷亏损  $\delta = |Z - \alpha_{n\ell}|$  随着等离子体参数  $u$  增大而增大, 这表明等离子体对电子轨道的屏蔽作用越来越明显, 这将导致非相

表 2  $Ar^{16+}$   $1sns$ ,  $1snp$  和  $2snp$  组态变分参数  
Table 2. Variation parameters of  $1sns$ ,  $1snp$  and  $2snp$  configurations in  $Ar^{16+}$ .

| 2S+1 | n | $1sns$ $^{2S+1}S$ |               |          | $1snp$ $^{2S+1}P$ |               |          | $2snp$ $^{2S+1}P$ |               |          |
|------|---|-------------------|---------------|----------|-------------------|---------------|----------|-------------------|---------------|----------|
|      |   | $\alpha_{1s}$     | $\alpha_{ns}$ | $E_{NR}$ | $\alpha_{1s}$     | $\alpha_{np}$ | $E_{NR}$ | $\alpha_{2s}$     | $\alpha_{np}$ | $E_{NR}$ |
| 1    | 1 | 17.6875           | —             | -312.848 | —                 | —             | —        | —                 | —             | —        |
|      | 2 | 17.9324           | 17.3433       | -198.384 | 18.0107           | 16.9176       | -197.969 | 17.4113           | 17.8229       | -77.601  |
|      | 3 | 17.9815           | 17.2194       | -178.14  | 18.0008           | 16.9725       | -178.018 | 17.9428           | 17.2934       | -56.8575 |
|      | 4 | 17.9924           | 17.1623       | -171.068 | 18.0001           | 16.9852       | -171.017 | 17.9766           | 17.2143       | -49.655  |
|      | 5 | 17.9961           | 17.129        | -167.799 | 18                | 16.9901       | -167.773 | 17.9882           | 17.1692       | -46.3425 |
| 3    | 2 | 18.0137           | 17.1931       | -199.196 | 17.9577           | 17.266        | -198.504 | —                 | —             | —        |
|      | 3 | 18.0031           | 17.1286       | -178.355 | 17.99             | 17.1509       | -178.162 | —                 | —             | —        |
|      | 4 | 18.0012           | 17.0962       | -171.155 | 17.9961           | 17.1079       | -171.076 | —                 | —             | —        |
|      | 5 | 18.0006           | 17.0768       | -167.843 | 17.9981           | 17.0845       | -167.803 | —                 | —             | —        |

表 3  $Ar^{16+}$  基态  $1s^2$   $^1S$  相对论性能量 (单位: a.u.)  
Table 3. Relativistic correction on ground state  $1s^2$   $^1S$  energies level in  $Ar^{16+}$  (unit: a.u.).

| $u$ | $\alpha_{1s}$ | $E_{NR}$ | $E_{MC}$ | $E_{D1}$ | $\Delta E_{RS}$ | $E_T$      |
|-----|---------------|----------|----------|----------|-----------------|------------|
| 0   | 17.6875       | -312.848 | -6.51488 | 5.30399  | -1.21089        | -314.05889 |
| 0.1 | 17.6871       | -309.263 | -6.51425 | 5.30360  | -1.21065        | -310.47365 |
| 0.2 | 17.6858       | -305.708 | -6.51238 | 5.30246  | -1.20992        | -306.91792 |
| 0.3 | 17.6837       | -302.184 | -6.50929 | 5.30057  | -1.20872        | -303.39272 |
| 0.4 | 17.6808       | -298.688 | -6.50501 | 5.29796  | -1.20705        | -299.89505 |
| 0.5 | 17.6771       | -295.222 | -6.49957 | 5.29463  | -1.20494        | -296.42694 |
| 0.6 | 17.6726       | -291.785 | -6.49299 | 5.29061  | -1.20238        | -292.98738 |
| 0.7 | 17.6674       | -288.377 | -6.48530 | 5.28591  | -1.19939        | -289.57639 |
| 0.8 | 17.6614       | -284.997 | -6.47652 | 5.28055  | -1.19597        | -286.19297 |
| 0.9 | 17.6547       | -281.645 | -6.46668 | 5.27453  | -1.19215        | -282.83715 |
| 1.0 | 17.6473       | -278.32  | -6.45580 | 5.26787  | -1.18793        | -279.50793 |

表 4 Ar<sup>16+</sup>激发态 1s2s <sup>1</sup>S 相对论性能量 (单位: a.u.)Table 4. Relativistic correction on excited state 1s2s <sup>1</sup>S energies level in Ar<sup>16+</sup> (unit: a.u.).

| $u$ | $\alpha_{1s}$ | $\alpha_{2s}$ | $E_{NR}$ | $E_{MC}$ | $E_{D1}$ | $E_{D2}$                   | $E_{SSC}$                 | $\Delta E_{RS}$ | $E_T$      |
|-----|---------------|---------------|----------|----------|----------|----------------------------|---------------------------|-----------------|------------|
| 0   | 17.9324       | 17.3433       | -198.384 | -3.93094 | 3.07620  | $-7.249983 \times 10^{-3}$ | $1.450003 \times 10^{-2}$ | -0.84749        | -199.23149 |
| 0.1 | 17.9319       | 17.3364       | -194.822 | -3.92982 | 3.07562  | $-7.245793 \times 10^{-3}$ | $1.44916 \times 10^{-2}$  | -0.84695        | -195.66895 |
| 0.2 | 17.9306       | 17.3164       | -191.335 | -3.92657 | 3.07394  | $-7.233613 \times 10^{-3}$ | $1.44672 \times 10^{-2}$  | -0.84540        | -192.18040 |
| 0.3 | 17.9285       | 17.284        | -187.921 | -3.92130 | 3.07121  | $-7.213953 \times 10^{-3}$ | $1.44279 \times 10^{-2}$  | -0.84288        | -188.76388 |
| 0.4 | 17.9256       | 17.2401       | -184.577 | -3.91415 | 3.06749  | $-7.187233 \times 10^{-3}$ | $1.43745 \times 10^{-2}$  | -0.83947        | -185.41647 |
| 0.5 | 17.9218       | 17.1852       | -181.301 | -3.90522 | 3.06284  | $-7.153833 \times 10^{-3}$ | $1.43077 \times 10^{-2}$  | -0.83523        | -182.13623 |
| 0.6 | 17.9173       | 17.1198       | -178.092 | -3.89462 | 3.05729  | $-7.114063 \times 10^{-3}$ | $1.42281 \times 10^{-2}$  | -0.83022        | -178.92222 |
| 0.7 | 17.912        | 17.0445       | -174.947 | -3.88245 | 3.05090  | $-7.068203 \times 10^{-3}$ | $1.41364 \times 10^{-2}$  | -0.82448        | -175.77148 |
| 0.8 | 17.906        | 16.9594       | -171.866 | -3.86880 | 3.04371  | $-7.016463 \times 10^{-3}$ | $1.40329 \times 10^{-2}$  | -0.81807        | -172.68407 |
| 0.9 | 17.8992       | 16.865        | -168.847 | -3.85377 | 3.03575  | $-6.959053 \times 10^{-3}$ | $1.39181 \times 10^{-2}$  | -0.81106        | -169.65806 |
| 1.0 | 17.8918       | 16.7615       | -165.889 | -3.83745 | 3.02706  | $-6.896133 \times 10^{-3}$ | $1.37923 \times 10^{-2}$  | -0.80349        | -166.69249 |

表 5 Ar<sup>16+</sup>激发态 1s2s <sup>3</sup>S 相对论性能量 (单位: a.u.)Table 5. Relativistic correction on excited state 1s2s <sup>3</sup>S energies level in Ar<sup>16+</sup> (unit: a.u.).

| $u$ | $\alpha_{1s}$ | $\alpha_{2s}$ | $E_{NR}$ | $E_{MC}$ | $E_{D1}$ | $\Delta E_{RS}$ | $E_T$      |
|-----|---------------|---------------|----------|----------|----------|-----------------|------------|
| 0   | 18.0137       | 17.1931       | -199.196 | -3.97703 | 3.10590  | -0.87113        | -200.06713 |
| 0.1 | 18.0133       | 17.1858       | -195.635 | -3.97594 | 3.10534  | -0.87060        | -196.50560 |
| 0.2 | 18.0122       | 17.1646       | -192.149 | -3.97276 | 3.10370  | -0.86906        | -193.01806 |
| 0.3 | 18.0104       | 17.1305       | -188.735 | -3.96761 | 3.10104  | -0.86657        | -189.60157 |
| 0.4 | 18.0078       | 17.0841       | -185.392 | -3.96062 | 3.09742  | -0.86320        | -186.25520 |
| 0.5 | 18.0046       | 17.0263       | -182.119 | -3.95189 | 3.09289  | -0.85900        | -182.97800 |
| 0.6 | 18.0006       | 16.9574       | -178.912 | -3.94152 | 3.08748  | -0.85404        | -179.76604 |
| 0.7 | 17.996        | 16.878        | -175.77  | -3.92962 | 3.08124  | -0.84838        | -176.61838 |
| 0.8 | 17.9907       | 16.7885       | -172.692 | -3.91627 | 3.07421  | -0.84206        | -173.53406 |
| 0.9 | 17.9847       | 16.6891       | -169.676 | -3.90156 | 3.06643  | -0.83513        | -170.51113 |
| 1.0 | 17.9781       | 16.5803       | -166.721 | -3.88557 | 3.05792  | -0.82765        | -167.54865 |

表 6 Ar<sup>16+</sup>激发态 1s2p <sup>1</sup>P 相对论性能量 (单位: a.u.)Table 6. Relativistic correction on excited state 1s2p <sup>1</sup>P energies level in Ar<sup>16+</sup> (unit: a.u.).

| $u$ | $\alpha_{1s}$ | $\alpha_{2p}$ | $E_{NR}$ | $E_{MC}$ | $E_{D1}$ | $E_{D2}$                   | $E_{SSC}$                 | $E_{OO}$                   | $\Delta E_{RS}$ | $E_T$      |
|-----|---------------|---------------|----------|----------|----------|----------------------------|---------------------------|----------------------------|-----------------|------------|
| 0   | 18.0107       | 16.9176       | -197.969 | -3.58167 | 2.80005  | $-2.073823 \times 10^{-3}$ | $4.147643 \times 10^{-3}$ | -0.0064010                 | -0.78595        | -198.75495 |
| 0.1 | 18.0103       | 16.9115       | -194.403 | -3.58123 | 2.79986  | $-2.071283 \times 10^{-3}$ | $4.142563 \times 10^{-3}$ | $-6.394563 \times 10^{-3}$ | -0.78569        | -195.18869 |
| 0.2 | 18.0091       | 16.8936       | -190.903 | -3.57994 | 2.79929  | $-2.063883 \times 10^{-3}$ | $4.127763 \times 10^{-3}$ | $-6.375753 \times 10^{-3}$ | -0.78496        | -191.68796 |
| 0.3 | 18.007        | 16.8646       | -187.467 | -3.57782 | 2.79834  | $-2.051933 \times 10^{-3}$ | $4.103873 \times 10^{-3}$ | $-6.345353 \times 10^{-3}$ | -0.78377        | -188.25077 |
| 0.4 | 18.0042       | 16.8251       | -184.094 | -3.57490 | 2.79703  | $-2.035733 \times 10^{-3}$ | $4.071453 \times 10^{-3}$ | $-6.304033 \times 10^{-3}$ | -0.78214        | -184.87614 |
| 0.5 | 18.0007       | 16.7755       | -180.783 | -3.57121 | 2.79536  | $-2.015513 \times 10^{-3}$ | $4.031023 \times 10^{-3}$ | $-6.252373 \times 10^{-3}$ | -0.78009        | -181.56309 |
| 0.6 | 17.9963       | 16.7162       | -177.532 | -3.56677 | 2.79335  | $-1.991533 \times 10^{-3}$ | $3.983063 \times 10^{-3}$ | $-6.190923 \times 10^{-3}$ | -0.77762        | -178.30962 |
| 0.7 | 17.9913       | 16.6477       | -174.339 | -3.56161 | 2.79099  | $-1.963993 \times 10^{-3}$ | $3.927983 \times 10^{-3}$ | $-6.120133 \times 10^{-3}$ | -0.77478        | -175.11378 |
| 0.8 | 17.9855       | 16.57         | -171.203 | -3.55574 | 2.78830  | $-1.933093 \times 10^{-3}$ | $3.866193 \times 10^{-3}$ | $-6.040453 \times 10^{-3}$ | -0.77155        | -171.97455 |
| 0.9 | 17.979        | 16.4835       | -168.124 | -3.54919 | 2.78527  | $-1.899033 \times 10^{-3}$ | $3.798063 \times 10^{-3}$ | $-5.952253 \times 10^{-3}$ | -0.76797        | -168.89197 |
| 1.0 | 17.9718       | 16.3883       | -165.101 | -3.54198 | 2.78193  | $-1.861983 \times 10^{-3}$ | $3.723953 \times 10^{-3}$ | $-5.855883 \times 10^{-3}$ | -0.76404        | -165.86504 |

表 7 Ar<sup>16+</sup>基态 1s2p <sup>3</sup>P 相对论性能量 (单位: a.u.)Table 7. Relativistic correction on excited state 1s2p <sup>3</sup>P energies level in Ar<sup>16+</sup> (unit: a.u.).

| $u$ | $\alpha_{1s}$ | $\alpha_{2p}$ | $E_{NR}$ | $E_{MC}$  | $E_{D1}$ | $E_{OO}$                  | $\Delta E_{RS}$ | $E_T$      |
|-----|---------------|---------------|----------|-----------|----------|---------------------------|-----------------|------------|
| 0   | 17.9577       | 17.266        | -198.504 | -3.54736  | 2.77539  | $6.7643 \times 10^{-3}$   | -0.76521        | -199.26921 |
| 0.1 | 17.9573       | 17.26         | -194.937 | -3.54694  | 2.77522  | $6.75783 \times 10^{-3}$  | -0.76496        | -195.70196 |
| 0.2 | 17.9562       | 17.2424       | -191.436 | -3.54571  | 2.77469  | $6.738923 \times 10^{-3}$ | -0.76428        | -192.20028 |
| 0.3 | 17.9543       | 17.2138       | -187.998 | -3.54369  | 2.77381  | $6.70833 \times 10^{-3}$  | -0.76317        | -188.76117 |
| 0.4 | 17.9517       | 17.1749       | -184.622 | -3.54091  | 2.77260  | $6.66673 \times 10^{-3}$  | -0.76164        | -185.38364 |
| 0.5 | 17.9483       | 17.1261       | -181.306 | -3.53739  | 2.77106  | $6.61473 \times 10^{-3}$  | -0.75972        | -182.06572 |
| 0.6 | 17.9443       | 17.0678       | -178.05  | -3.53315  | 2.76919  | $6.55273 \times 10^{-3}$  | -0.75741        | -178.80741 |
| 0.7 | 17.9396       | 17.0002       | -174.852 | -3.52822  | 2.76700  | $6.48123 \times 10^{-3}$  | -0.75474        | -175.60674 |
| 0.8 | 17.9342       | 16.9237       | -171.71  | -3.52262  | 2.76450  | $6.40083 \times 10^{-3}$  | -0.75172        | -172.46172 |
| 0.9 | 17.9281       | 16.8384       | -168.624 | -3.516370 | 2.76170  | $6.31163 \times 10^{-3}$  | -0.74836        | -169.37236 |
| 1.0 | 17.9214       | 16.7445       | -165.593 | -3.509490 | 2.75859  | $6.21423 \times 10^{-3}$  | -0.74469        | -166.33769 |

表 8 Ar<sup>16+</sup>基态 2s2p <sup>1</sup>P 相对论性能量 (单位: a.u.)Table 8. Relativistic correction on excited state 2s2p <sup>1</sup>P energies level in Ar<sup>16+</sup> (unit: a.u.).

| $u$ | $\alpha_{2s}$ | $\alpha_{2p}$ | $E_{NR}$ | $E_{MC}$ | $E_{D1}$ | $E_{D2}$                  | $E_{SSC}$                | $E_{OO}$                  | $\Delta E_{RS}$ | $E_T$     |
|-----|---------------|---------------|----------|----------|----------|---------------------------|--------------------------|---------------------------|-----------------|-----------|
| 0   | 17.4113       | 17.8229       | -77.6010 | -0.59499 | 0.31621  | $-8.39310 \times 10^{-4}$ | $1.67862 \times 10^{-3}$ | -0.0006009                | -0.27854        | -77.87954 |
| 0.1 | 17.4043       | 17.8174       | -74.0566 | -0.59406 | 0.31583  | $-8.38360 \times 10^{-4}$ | $1.67672 \times 10^{-3}$ | $-6.00393 \times 10^{-4}$ | -0.27800        | -74.33460 |
| 0.2 | 17.3839       | 17.8014       | -70.6207 | -0.59139 | 0.31472  | $-8.35602 \times 10^{-4}$ | $1.67120 \times 10^{-3}$ | $-5.98927 \times 10^{-4}$ | -0.27644        | -70.89714 |
| 0.3 | 17.351        | 17.7755       | -67.2898 | -0.58711 | 0.31294  | $-8.31163 \times 10^{-4}$ | $1.66233 \times 10^{-3}$ | $-5.96551 \times 10^{-4}$ | -0.27393        | -67.56373 |
| 0.4 | 17.3064       | 17.7402       | -64.0605 | -0.58132 | 0.31053  | $-8.25157 \times 10^{-4}$ | $1.65031 \times 10^{-3}$ | $-5.93313 \times 10^{-4}$ | -0.27055        | -64.33105 |
| 0.5 | 17.2508       | 17.6959       | -60.9298 | -0.57415 | 0.30754  | $-8.17686 \times 10^{-4}$ | $1.63537 \times 10^{-3}$ | $-5.89259 \times 10^{-4}$ | -0.26637        | -61.19617 |
| 0.6 | 17.1845       | 17.6429       | -57.8948 | -0.56569 | 0.30401  | $-8.08845 \times 10^{-4}$ | $1.61769 \times 10^{-3}$ | $-5.84432 \times 10^{-4}$ | -0.26146        | -58.15626 |
| 0.7 | 17.1081       | 17.5816       | -54.9531 | -0.55606 | 0.29998  | $-7.98720 \times 10^{-4}$ | $1.59744 \times 10^{-3}$ | $-5.78871 \times 10^{-4}$ | -0.25586        | -55.20896 |
| 0.8 | 17.0219       | 17.5122       | -52.1022 | -0.54534 | 0.29546  | $-7.87391 \times 10^{-4}$ | $1.57478 \times 10^{-3}$ | $-5.72611 \times 10^{-4}$ | -0.24966        | -52.35186 |
| 0.9 | 16.9262       | 17.4349       | -49.3398 | -0.53361 | 0.29051  | $-7.74933 \times 10^{-4}$ | $1.54987 \times 10^{-3}$ | $-5.65688 \times 10^{-4}$ | -0.24289        | -49.58269 |
| 1.0 | 16.8213       | 17.3499       | -46.6639 | -0.52098 | 0.28514  | $-7.61414 \times 10^{-4}$ | $1.52283 \times 10^{-3}$ | $-5.58134 \times 10^{-4}$ | -0.23563        | -46.89953 |

对论能级向高能端移动. 图 1 给出了不同电子组态的相对论修正项能量与等离子体屏蔽参数的关系. 从图中可以看出, 各相对论修正项的能量值对电子组态具有较强的依赖性, 而对等离子体屏蔽参数的依赖性较弱. 如基态 1s<sup>2</sup> 的质量修正能量值在  $u = 0$  时为 -6.51488 a.u.; 当  $u = 1$  时, 其值为 -6.45580 a.u., 相差仅为 0.9%. 而激发态 2s2p 的质量修正能量值在  $u = 0$  时为 -0.59499 a.u.; 当  $u = 1$  时, 其值为 -0.52098, 相差约为 14%. 此外, 我们发现, 在各相对论修正项中质量修正值和第一类达尔文修正值占主导, 其数值比双体达尔文修正项、自旋-自旋接触相互作用修正项和轨道-轨道相互作用修正项高 3 个量级.

等离子体效应导致的原子能级移动是反映等离子体内部性质的重要参量. 通过计算, 我们发现

等离子体环境导致电荷亏损减小, 即核外电子感受到的原子核的影响减弱, 能级位置发生偏移. 此外我们发现, 由等离子体效应导致的非相对论能量偏移量大于相对论修正部分的偏移量. 图 2 以单激发态 1sns 和双激发态 2s2p 的单重态为例, 分别给出了等离子体效应产生的总能量 (非相对论能量+相对论修正能量) 偏移与等离子体屏蔽参数之间的关系, 其中纵坐标  $\delta E = E(u) - E(u = 0)$ . 可以看出, 等离子体屏蔽效应导致能级向高能移动, 且随着屏蔽参数的增加, 能移值越大. 这主要由于参数  $u$  越大, 等离子体对原子核的屏蔽越明显, 核外电子感受到原子核的吸引势减弱, 从而导致能级向高能移动. 此外, 随着激发态的增高, 核外电子的距离原子核越远, 等离子体屏蔽效应对其影响也越小, 三重态也具有类似规律, 图中没有给出.

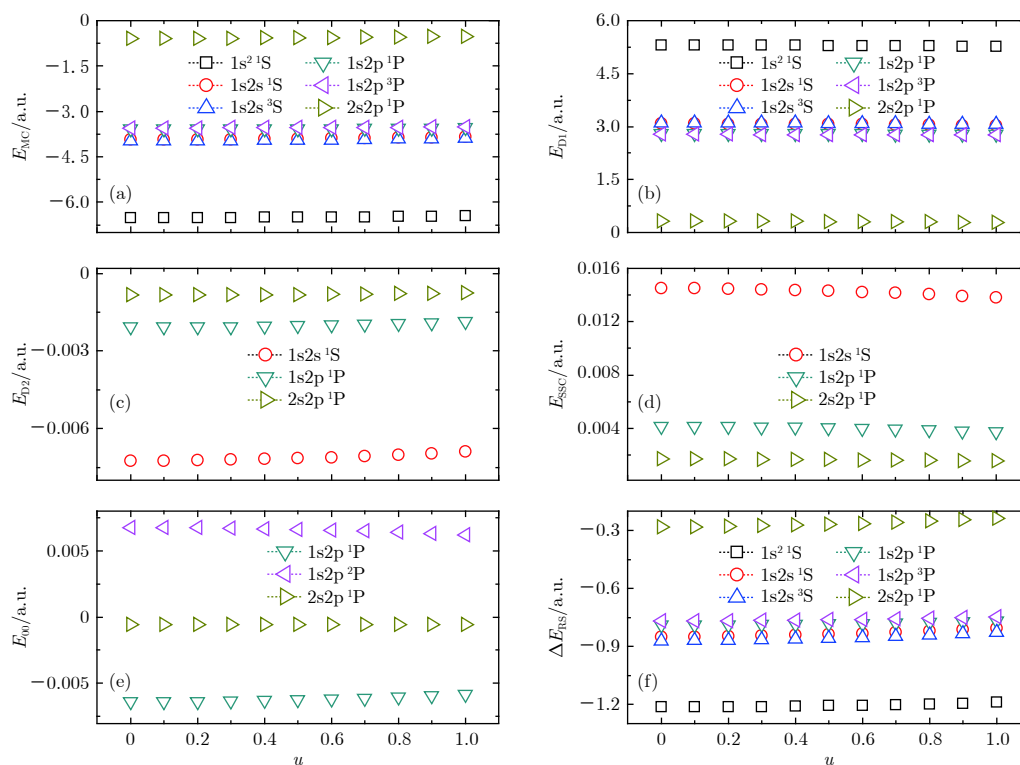


Fig. 1. Relativistic corrections against parameter  $u$  for  $1s^2\ ^1S$ ,  $1s2s\ ^1^3S$ ,  $1s2p\ ^1^3P$  and  $2s2p\ ^1P$  of  $\text{Ar}^{16+}$ .

Fig. 1. Relativistic corrections against parameter  $u$  for  $1s^2\ ^1S$ ,  $1s2s\ ^1^3S$ ,  $1s2p\ ^1^3P$  and  $2s2p\ ^1P$  of  $\text{Ar}^{16+}$ .

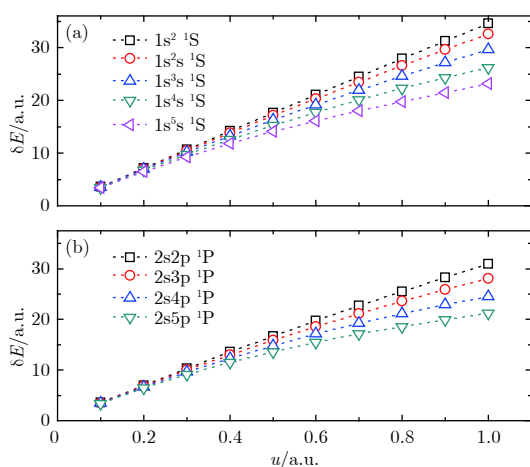


Fig. 2. Plasma energy shifts against parameter  $u$ .

### 3.3 等离子效应对波函数的影响

由于等离子屏蔽效应改变核外电子感受到原子核的势场, 从而导致核外电子的波函数形状发生改变, 并进一步导致原子能级位置、跃迁谱线以及碰撞动力学参数的改变. 下面我们将借助 (6) 式和变分参数的数值展示等离子体屏蔽对不同原子态电子轨道波函数的影响. 图 3 分别给出了屏蔽参数  $u = 0, 0.5$  和  $1$  时,  $1sns$  单重态  $s$  轨道径向波函数模方. 图 3(a) 和 图 3(b) 分别给出了基态  $1s^2$  和

激发态  $1s4s$  单重态内壳层  $1s$  轨道径向波函数模方  $|R_{1s}|^2$ . 可以看到, 基态  $1s^2$  和高激发态  $1s4s$  内壳层  $1s$  电子轨道的波函数几乎一样, 且等离子体屏蔽效应对其影响可以忽略不计; 图 3(c) 和图 3(d) 分别给出了  $1s2s$   $^1S$ ,  $1s4s$   $^1S$  单重态外壳层  $2s$  和  $4s$  轨道径向波函数模方  $|R_{2s}|^2$  和  $|R_{4s}|^2$ . 可以看到, 屏蔽参数越大, 电子轨道越往外侧延展, 且  $4s$  轨道比  $2s$  轨道延展的明显. 这表明等离子体屏蔽效应使得原子外壳层电子远离原子核, 且激发态越高, 电子轨道感受到等离子体屏蔽效应越明显.

## 4 结 论

基于 Rayleigh-Ritz 变分法, 我们发展了一套计算等离子体环境中原子或离子非相对论能量及其相对论能量的计算程序, 该方法可以逐项解析的给出质量修正、第一类和第二类达尔文修正、自旋-自旋接触相互作用以及轨道-轨道相互作用等相对论修正项, 且便于推广到任意多电子原子体系. 为充分考虑了内外壳层电子所感受到不同的屏蔽效应以及电子之间的交换效应, 本文在实际计算时内外壳层电子采用了不同的屏蔽参数, 且原子态波函数采取了 Hartree-Fock 反对称化性质. 通过对

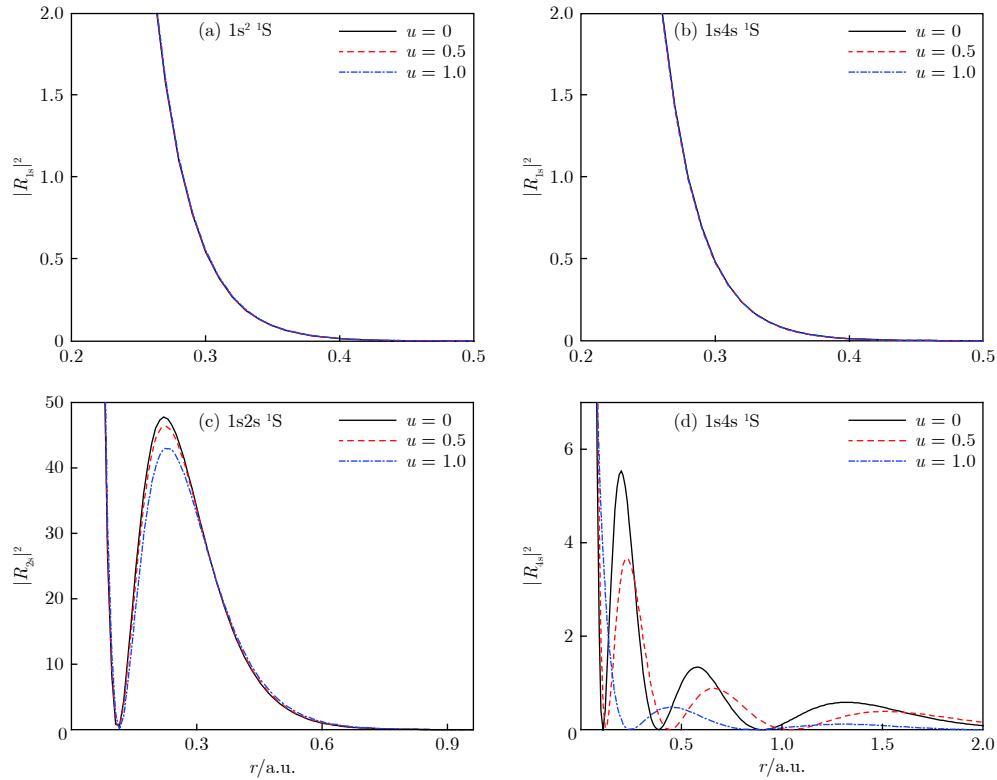


图3 内外壳层电子径向波函数模方

Fig. 3. Module of radial wave functions for inner and outer shell electron.

等离子体环境中的  $C^{4+}$  基态非相对论能量及其相对论修正能量进行的计算, 验证了程序和计算方法的正确性. 利用该程序进一步系统计算了弱耦合等离子体环境下  $Ar^{16+}$  基态  $1s^2$  和激发态  $1sns$ ,  $1snp$ ,  $2snp$  的非相对论能量及其相对论修正能量, 计算结果表明等离子体屏蔽改变核外电子的势场, 导致外壳层电子轨道向外延展, 且电子轨道越高, 感受到等离子体屏蔽效应越明显. 此外, 计算表明等离子体屏蔽效应对非相对论能量影响较大, 对相对论修正部分的能量影响较小.

## 参考文献

- [1] Debye P, Hückel E 1923 *Z. Phys.* **24** 185
- [2] Shukla P K, Eliasson B 2008 *Phys. Lett. A* **372** 2897
- [3] Chen Z B, Hu H W, Ma K, Liu X B, Guo X L, Li S, Zhu B H, Huang L, Wang K 2018 *Phys. Plasmas* **25** 032108
- [4] Ray D 2000 *Phys. Rev. E* **62** 4126
- [5] Wu Z Q, Han G X, Yan J, Pang J Q 2002 *J. Phys. B* **35** 2305
- [6] Das M 2014 *Phys. Plasmas* **21** 012709
- [7] Li Y Q, Wu J H, Hou Y, Yuan J M 2008 *J. Phys. B* **41** 145002
- [8] Saha B, Fritzsche S 2007 *J. Phys. B* **40** 259
- [9] Belkhir M, Fontes C J, Poirier M 2015 *Phys. Rev. A* **92** 032501
- [10] Fernley J A, Taylor K T, Seaton M J 1987 *J. Phys. B* **20** 6457
- [11] Peach G, Saraph H E, Seaton M J 1988 *J. Phys. B* **21** 3669
- [12] Fernley J A, Taylor K T, Seaton M J 1987 *J. Phys. B* **20** 6457
- [13] Kaspi S, Brandt W N, Netzer H, Sambruna R, Chartas G, Garmire G P, Nousek J A 2000 *Astrophys. J. Lett.* **535** L17
- [14] Saha B, Bhattacharyya S, Mukherjee T K, Mukherjee P K 2003 *Int. J. Quantum Chem.* **92** 413
- [15] Costa A M, Martins M C, Parente F, Santos J P, Indelicato P 2001 *Atom. Data Nucl. Dat.* **79** 223
- [16] Goryaev F F, Vainshtein L A, Urnov A M 2017 *Atom. Data Nucl. Dat.* **113** 117
- [17] Saha J K, Bhattacharyya S, Mukherjee T K, Mukherjee P K 2010 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **111** 675
- [18] Fang T K, Wu C S, Gao X, Chang T N 2017 *Phys. Rev. A* **96** 052502
- [19] Kar S, Ho Y K 2005 *Chem. Phys. Lett.* **402** 544
- [20] Xie L Y, Wang J G, Janev R K, Qu Y Z, Dong C Z 2012 *Eur. Phys. J. D* **66** 125
- [21] Chen Z B 2017 *Phys. Plasmas* **24** 122119
- [22] Chen Z B, Ma K, Hu H W, Wang K 2018 *Phys. Plasmas* **25** 072120
- [23] Chaudhuri S K, Mukherjee P K, Fricke B 2017 *Eur. Phys. J. D* **71** 71
- [24] Hu H W, Chen Z B, Chen W C 2016 *Radiat. Eff. Defect. S.* **171** 890
- [25] Ray D, Mukherjee P K 1998 *J. Phys. B* **31** 3479
- [26] Ray D, Mukherjee P K 1998 *Eur. Phys. J. D* **2** 89

# Influence of plasma shielding effect on ground state and excited state energies of $\text{Ar}^{16+}$ \*

Ma Kun<sup>1)†</sup>    Chen Zhan-Bin<sup>2)</sup>    Huang Shi-Zhong<sup>3)</sup>

1) (*School of Information Engineering, Huangshan University, Huangshan 245041, China*)

2) (*School of Science, Hunan University of Technology, Zhuzhou 412007, China*)

3) (*College of Physics and Electrical Information, Anhui Normal University, Wuhu 241000, China*)

( Received 27 October 2018; revised manuscript received 10 December 2018 )

## Abstract

A systematical knowledge of the atomic properties in plasma is of great interest for various research areas, such as the explanation of the X-ray radiation from universe, plasma diagnostics, extreme ultraviolet (EUV) and X-ray sources and so on. Among these researches, the detailed information about how the plasma influences the atomic energy level and transition spectrum are crucial for understanding the X-ray emission mechanism and the state of plasma. An analytic calculation method of treating the non-relativistic energy and its relativistic corrections for the multi-electron atoms embedded in weakly coupled plasma is developed based on the Rayleigh-Ritz variation method. The systematical investigations are performed for the ground state  $1s^2\ ^1S$ , single excited states  $1sns\ ^1,^2S$  ( $n = 2-5$ ),  $1snp\ ^1,^3P$  ( $n = 2-5$ ) and double excited state  $2s2p\ ^1P$  of  $\text{Ar}^{16+}$  ion in weak coupled plasma. The analytic formulas for calculating the non-relativistic energy and its relativistic correction energy are derived, which include mass correction, one and two-body Darwin correction, spin-spin contact interaction and orbit-orbit interaction. All the angular integration spin sums involved in the problem are worked out explicitly by using the irreducible theory. The influence of plasma on non-relativistic energy and relativistic correction energy are discussed. The results show that the mass correction and the one-body Darwin correction are the main ones among the terms of relativistic correction, and are three orders of magnitude greater than the other relativistic terms. The plasma shielding effect mainly affects the non-relativistic energy, and has little effect on the relativistic correction. At the same time, it has a more significant selectivity for the electronic configuration. Further research shows that the influence of plasma on the energy of the outer shell electron is greater than that of the inner shell electron. With the increase of the plasma shielding parameters, the outer shell electron extends outward, and the higher the excited state, the greater the degree of extension is. This work should be useful for astrophysical applications where such a plasma environment exists.

**Keywords:** plasma, energy level, relativistic correction

**PACS:** 31.30.jc

**DOI:** 10.7498/aps.68.20181915

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11804112, 11504421), the Natural Science Foundation of Anhui Province, China (Grant No. 1808085QA22), the Key Project for Young Talents in College of Anhui Province, China (Grant No. gxyqZD2016301), and the Natural Science Foundation of the Higher Education Institutions of Anhui Province, China (Grant No. KJHS2015B01).

† Corresponding author. E-mail: [makun@hsu.edu.cn](mailto:makun@hsu.edu.cn)