

# 高离化类铜离子 $4s - 4p$ 跃迁的理论计算 与量子电动力学效应\*

谭明亮 朱正和

(四川联合大学(西区)原子与分子物理研究所, 成都 610065)

**摘 要** 采用相对论多组态从头计算方法, 系统计算了高离化类铜离子等电子序列  $\text{In}^{20+} - \text{U}^{63+}$  ( $Z = 49 \sim 92$ )  $4s - 4p$  跃迁波长和能级间隔, 计算结果与文献的实验值和计算值作了比较。结果表明, 在高离化类铜离子体系中存在更显著的量子电动力学效应。

**关键词** 高离化态, 类铜离子, 量子电动力学效应。

## 1 引 言

由于在软 X 射线激光与惯性约束聚变等领域的重要作用, 高  $Z$  元素的高剥离态在实验和理论方面都越来越引起人们的研究兴趣。Seely 等<sup>[1, 2]</sup>曾先后用激光产生等离子体的方法得到了许多重元素的高离化类铜离子光谱。Seely 和 Cheng 等<sup>[1-3]</sup>采用多组态狄拉克-福克(MCDF)方法对类铜离子光谱进行过理论计算, 计算结果与实验多数符合较好, 但对  $4s - 4p$  的跃迁, 计算与实验存在很大差别, 这种差别远远超过了实验的不确定度  $150 \times 10^{-4} \text{ nm}$ 。

本文根据相对论多组态理论, 系统计算了类铜离子等电子系列( $\text{In}^{20+} - \text{U}^{63+}$ )  $4s - 4p$  跃迁的波长和能级间隔。由于进一步考虑了高离化体系中的量子电动力学(QED)效应, 计算结果与实验符合得很好。

## 2 理论方法

在相对论理论中, 单电子波函数在坐标表象中表示为

$$\kappa | nkm \rangle = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} P_{nk}(r) & X_{km}(\mathbf{r}/r) \\ iQ_{nk}(r) & X_{-km}(\mathbf{r}/r) \end{bmatrix} \quad (1)$$

$N$  电子体系的组态函数  $| \gamma P J M \rangle$  由单电子波函数  $\kappa | nkm \rangle$  组成的  $N$  阶 Slater 行列式的线性组合而成。由于组态间的相互作用, 原子态函数  $| \Gamma P J M \rangle$  由具有相同  $P$ 、 $J$ 、 $M$  值的组态函数  $| \gamma P J M \rangle$  的线性组合得到。

径向波函数的大分量  $P_{nk}(r)$  和小分量  $Q_{nk}(r)$  可用自洽场方法解径向狄拉克(Dirac)方程

\* 国家自然科学基金和国家教育委员会博士点科研基金资助项目。

收稿日期: 1997-04-04; 收到修改稿日期: 1997-08-04

得到

$$\left(\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r}\right)P_{n\kappa}(r) - \left(2c - \frac{\epsilon}{c} + \frac{Y(r)}{cr}\right)Q_{n\kappa}(r) = -\frac{X^{(p)}(r)}{r} \quad (2)$$

$$\left(\frac{d}{dr} - \frac{\kappa}{r}\right)Q_{n\kappa}(r) + \left(-\frac{\epsilon}{c} + \frac{Y(r)}{cr}\right)P_{n\kappa}(r) = \frac{X^{(q)}(r)}{r} \quad (3)$$

原子态  $|\Gamma PJM\rangle$  的能量  $E_\Gamma$  为

$$E_\Gamma = \langle \Gamma PJM | H | \Gamma PJM \rangle \quad (4)$$

以 Briet 修正和量子电动力学修正作为微扰, 可得到能量和波函数的高阶修正。由于量子电动力学效应中的自能项主要源于核和其他电子所产生的量子化电磁场的微扰作用, 其微扰势为<sup>[9]</sup>

$$\delta V_n(r) = \langle V_n(r) \delta r + \Delta V_n(r) (\delta r)^2 \rangle_{vacuum} \quad (5)$$

如对  $s$  轨道, 屏蔽后的自能为<sup>[9]</sup>

$$\delta E_{SE} = \sum [\langle \kappa m | \Delta U_n(r) | n \kappa m \rangle_{DF} / \langle \kappa m | \Delta U_n(r) | n \kappa m \rangle_{Hyd}] \delta(E_{se Hyd})_{n\kappa m} \quad (6)$$

其中  $U_n$  为电子所处的势场,  $E_{se Hyd}$  为类氢离子的自能。

### 3 跃迁计算与量子电动力学效应

根据上述理论, 使用新版相对论原子结构计算程序 GRASP2 (general-purpose relativistic atomic structure program 2)\*, 并选取费米 (Fermi) 有限核电荷分布和平均能级 (AL) 近似进行计算。计算中除根据宇称, 能量和角动量等判据, 考虑重要的组态相互作用之外, 还以 Breit 修正, 自能修正和真空极化修正为微扰, 得到了波函数和能级的高阶近似。

限于篇幅, 表 1 仅列出了本文对类铜离子  $\text{In}^{20+} - \text{U}^{63+}$  ( $Z = 49 \sim 92$ ) 的  $4s_{1/2} - 4p_{1/2}$  跃迁的波长计算结果。表中文献计算值为 Seely 等<sup>[2]</sup>用多组态狄拉克-福克方法的计算结果, 实验波长值取自文献<sup>[1, 2, 4-8]</sup>, 波长计算值右侧圆括号内的数值表示该计算值与实验值之差, 单位为  $10^{-4}$  nm。从表 1 可以看出, Seely 等的理论计算值与实验值间存在很大差别, 这种差别远远超过了实验的不确定度  $150 \times 10^{-4}$  nm。Seely 等指出, 理论计算结果与实验的差别是由于计算不准确所引起的, 这种计算结果的不准确可能主要是计算中量子电动力学效应和电子相关效应考虑得不够充分所致<sup>[1, 3]</sup>。实际上, Seely 等所采用的多组态狄拉克-福克方法在计算量子电动力学效应中的自能项时, 仍使用的单电子体系的自能计算公式

Table 1. The calculated and observed wavelenths (in nm) for the  $4s_{1/2} - 4p_{1/2}$  transitions for highly stripped Cu-like ions

ion	Z	calc*		expt
		this work	Ref. [2]	
$\text{In}^{20+}$	49	28.9038 (95)	28.8530 (-413)	28.8943 <sup>[4]</sup>
$\text{Sn}^{21+}$	50	27.6172 (61)	27.5681 (-429)	27.611 <sup>[2]</sup>
$\text{Sb}^{22+}$	51	26.4340	26.3861	
$\text{Te}^{23+}$	52	25.3414	25.2949	
$\text{I}^{24+}$	53	24.3294 (-6)	24.2839 (-461)	24.33 <sup>[5]</sup>
$\text{Xe}^{25+}$	54	23.3891 (-68)	23.3448 (-510)	23.3959 <sup>[6]</sup>

\* I. P. Grant, C. F. Fischer, GRASP2, 私人通讯, 1992

ion	$Z$	calc <sup>*</sup>		expt
		this work	Ref. [2]	
Cs <sup>26+</sup>	55	22.5132	22.4697	
Ba <sup>27+</sup>	56	21.6952 (52)	21.6524 (-376)	21.690 <sup>[7]</sup>
La <sup>28+</sup>	57	20.9302 (-98)	20.8870 (-530)	20.940 <sup>[2]</sup>
Ce <sup>29+</sup>	58	20.2104	20.1686	
Pr <sup>30+</sup>	59	19.5336	19.4928	
Nd <sup>31+</sup>	60	18.8968 (-71)	18.8562 (-478)	18.904 <sup>[2]</sup>
Pm <sup>32+</sup>	61	18.2948	18.2549	
Sm <sup>33+</sup>	62	17.7256 (-12)	17.6865 (-403)	17.7268 <sup>[2]</sup>
Eu <sup>34+</sup>	63	17.1888 (-92)	17.1478 (-502)	17.198 <sup>[2]</sup>
Gd <sup>35+</sup>	64	16.6782 (-98)	16.6369 (-511)	16.688 <sup>[2]</sup>
Tb <sup>36+</sup>	65	16.1892	16.1511	
Dy <sup>37+</sup>	66	15.7270	15.6889	
Ho <sup>38+</sup>	67	15.2855	15.2485	
Er <sup>39+</sup>	68	14.8836 (-89)	14.8282 (-643)	14.8925 <sup>[7]</sup>
Tm <sup>40+</sup>	69	14.4627	14.4267	
Yb <sup>41+</sup>	70	14.0785	14.0429	
Lu <sup>42+</sup>	71	13.7104	13.6753	
Hf <sup>43+</sup>	72	13.3578	13.3231	
Ta <sup>44+</sup>	73	13.0189	12.9851	
W <sup>45+</sup>	74	12.6948 (-42)	12.6606 (-348)	12.699 <sup>[8]</sup>
Re <sup>46+</sup>	75	12.3830	12.3487	
Os <sup>47+</sup>	76	12.0828	12.0489	
Ir <sup>48+</sup>	77	11.7938	11.7600	
At <sup>49+</sup>	78	11.5153	11.4818	
Au <sup>50+</sup>	79	11.2485 (0)	11.2135 (-350)	11.2485 <sup>[1]</sup>
Hg <sup>51+</sup>	80	10.9880	10.9548	
Ti <sup>52+</sup>	81	10.7383	10.7052	
Pb <sup>53+</sup>	82	10.4973 (33)	10.4640 (-300)	10.494 <sup>[1]</sup>
Bi <sup>54+</sup>	83	10.2635 (85)	10.2306 (-244)	10.255 <sup>[1]</sup>
Po <sup>55+</sup>	84	10.0381	10.0047	
At <sup>56+</sup>	85	9.8192	9.7861	
Ra <sup>57+</sup>	86	9.6095	9.5770	
Fr <sup>58+</sup>	87	9.4053	9.3723	
Rn <sup>59+</sup>	88	9.2064	9.1745	
Ac <sup>60+</sup>	89	9.0133	8.9824	
Th <sup>61+</sup>	90	8.8274	8.7973	
Pa <sup>62+</sup>	91	8.6455	8.6163	
U <sup>63+</sup>	92	8.4728	8.4431	

\* The difference  $\Delta\lambda = \lambda_{\text{calc}} - \lambda_{\text{obs}}$  (in  $10^{-4}$  nm) are indicated between parentheses.

$$E_{SE} = [\alpha c^2 (Z\alpha)^4 / (\pi n^3)] F(Z\alpha) \quad (7)$$

其中  $F(Z\alpha)$  的值由类氢体系外推得到<sup>[2, 10]</sup>。本文采用 Indelicato 等提出的计算自能的方法<sup>[9]</sup>, 更全面地考虑了体系中的自能修正, 使得波长计算值更接近实验值, 比 Seely 等的计算结果

有了很大改善。

为便于比较,表 2 列出了部分类铜离子  $4s_{1/2} - 4p_{1/2}$  能级间隔的本文计算结果与文献计算结果<sup>[2, 3]</sup>和实验值<sup>[1-3, 4-7]</sup>。计算结果中,总能量为 Coulomb 项, Breit 修正,真空极化修正 (VP) 和自能修正(SE)之和。从总能量看,本文计算结果比文献计算结果更接近实验值。从能量的各项组成来看,本文结果与文献计算结果中 Coulomb, Breit 和 VP 各项符合较好,而本文的自能修正项的数值较文献值大,因此量子电动力学效应(真空极化 VP 与自能 SE 之和)更强。

Table 2. Energy intervals of  $4s_{1/2} - 4p_{1/2}$  (eV)

ion	coulomb		Breit corrections		VP corrections		SE corrections		total energy		expt
	this work	previous	this work	previous	this work	previous	this work	previous	this work	previous	
In <sup>20+</sup>	42.963	-	-0.154	-	0.027	-	-0.249	-	42.896	-	42.908 <sup>c</sup>
Sn <sup>21+</sup>	44.966	44.96 <sup>a</sup>	0.173	0.17 <sup>a</sup>	0.031	0.03 <sup>a</sup>	-0.275	-0.19 <sup>a</sup>	44.894	44.97 <sup>a</sup>	44.91 <sup>e</sup>
I <sup>24+</sup>	51.047	-	0.235	-	0.043	-	-0.364	-	50.961	-	50.958 <sup>e</sup>
Xe <sup>25+</sup>	53.100	53.121 <sup>b</sup>	0.258	0.250 <sup>b</sup>	0.048	0.049 <sup>b</sup>	-0.396	-0.288 <sup>b</sup>	53.009	53.110 <sup>b</sup>	52.993 <sup>f</sup>
Ba <sup>27+</sup>	57.251	57.25 <sup>a</sup>	0.309	0.30 <sup>a</sup>	0.059	0.06 <sup>a</sup>	-0.470	-0.35 <sup>a</sup>	57.148	57.26 <sup>a</sup>	57.16 <sup>d</sup>
La <sup>28+</sup>	59.346	-	0.337	-	0.065	-	-0.511	-	59.237	-	59.208 <sup>b</sup>
Nd <sup>31+</sup>	65.742	-	0.431	-	0.086	-	-0.648	-	65.611	-	65.585 <sup>b</sup>
Sm <sup>33+</sup>	70.091	70.09 <sup>a</sup>	0.502	0.49 <sup>a</sup>	0.104	0.11 <sup>a</sup>	-0.751	-0.58 <sup>a</sup>	69.947	70.10 <sup>a</sup>	69.94 <sup>d</sup>
Eu <sup>34+</sup>	72.284	-	0.541	-	0.113	-	-0.809	-	72.129	-	72.090 <sup>b</sup>
Gd <sup>35+</sup>	74.509	74.600 <sup>b</sup>	0.571	0.560 <sup>b</sup>	0.124	0.127 <sup>b</sup>	-0.867	-0.677 <sup>b</sup>	74.337	74.524 <sup>b</sup>	74.293 <sup>b</sup>
Er <sup>39+</sup>	83.531	83.61 <sup>a</sup>	0.734	0.73 <sup>a</sup>	0.174	0.18 <sup>a</sup>	-1.140	-0.91 <sup>a</sup>	83.300	83.61 <sup>a</sup>	83.25 <sup>d</sup>
W <sup>45+</sup>	97.937	97.94 <sup>a</sup>	1.108	1.07 <sup>a</sup>	0.280	0.29 <sup>a</sup>	-1.660	-1.36 <sup>c</sup>	97.666	97.93 <sup>a</sup>	97.59 <sup>d</sup>
Au <sup>50+</sup>	110.590	110.594 <sup>b</sup>	1.469	1.416 <sup>b</sup>	0.407	0.416 <sup>b</sup>	-2.243	-1.859 <sup>b</sup>	110.223	110.568 <sup>b</sup>	110.22 <sup>g</sup>
Pb <sup>53+</sup>	118.528	118.53 <sup>a</sup>	1.726	1.66 <sup>a</sup>	0.505	0.52 <sup>a</sup>	-2.649	-2.22 <sup>a</sup>	118.110	118.49 <sup>a</sup>	118.15 <sup>g</sup>
Bi <sup>54+</sup>	121.236	121.23 <sup>a</sup>	1.818	1.75 <sup>a</sup>	0.543	0.56 <sup>a</sup>	-2.796	-2.35 <sup>a</sup>	120.801	121.19 <sup>a</sup>	120.90 <sup>g</sup>
Th <sup>61+</sup>	141.035	141.02 <sup>a</sup>	2.576	2.49 <sup>a</sup>	0.88	0.90 <sup>a</sup>	-4.036	-3.48 <sup>a</sup>	140.454	140.94 <sup>a</sup>	-
U <sup>63+</sup>	146.967	146.95 <sup>a</sup>	2.833	2.73 <sup>a</sup>	1.007	1.03 <sup>a</sup>	-4.474	-3.87 <sup>a</sup>	146.332	146.85 <sup>a</sup>	-

a from Ref. [3], b from Ref. [2], c from Ref. [4], d from Ref. [7], e from Ref. [5], f from Ref. [6], g from Ref. [1].

图 1 给出了计算能级与实验能级之差,图中“○”表示文献计算结果<sup>[2, 3]</sup>，“●”表示本文计算结果。由图 1 可知,如果完全忽略量子电动力学效应,计算结果与实验相差极大,而且这种偏差随着原子序数的增加迅速加大。文献[2, 3]虽考虑了一定的量子电动力学效应,使计算结果有了一定的改善,但仍与实验存在明显的差别,随着原子序数  $Z$  的增加,这种差别也有所增大。本文在进一步考虑了量子电动力学效应后,计算与实验结果符合较好。

**结 论** 本文对类铜离子等电子序列的  $4s - 4p$  跃迁进行了全相对论从头计算。计算中由于进一步考虑了高离化体系中的量子电动力学效应,使理论值与实验值的偏

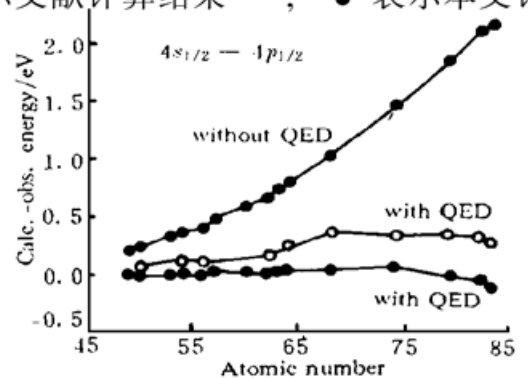


Fig. 1 Comparison of the observed energies of  $4s_{1/2} - 4p_{1/2}$  transitions with calculated energies of present work (●) and ref. [2, 3] (○)

差由文献的 0.5% 缩小到本文的 0.09%。因此, 在高离化体系中, 除了考虑强的相对论效应和组态相互作用外, 由于电子处在强的核电场中, 应该更充分地考虑电子与量子化电磁场的相互作用所引起的量子电动力学辐射修正。

### 参 考 文 献

- [1] J. F. Seely, J. O. Ekberg, C. M. Borwn *et al.*, Laser-produced spectra and QED effects for  $Fe^-$ ,  $Co^-$ ,  $Cu^-$ , and Zn-like ions of Au, Pb, Bi, Th, and U. *Phys. Rev. Lett.*, 1986, **57**(23) : 2924~ 2926
- [2] J. F. Seely, U. Feldman, A. W. Wouters *et al.*, Discrepancies between calculated and observed energies for  $4s - 4p$  transitions in highly charged Cu-like ions. *Phys. Rev. (A)*, 1989, **40**(9) : 5020~ 5025
- [3] K. T. Cheng, R. A. Wagner, Quantum electrodynamics effects in the  $4s - 4p$  transitions in Cu-like and Zn-like ions. *Phys. Rev. (A)*, 1987, **36**(11) : 5435~ 5438
- [4] J. Reader, N. Acquista, D. Cooper, Spectra and energy levels of ions in the copper isoelectronic sequence from  $Ru^{15+}$  to  $Sn^{21+}$ . *J. Opt. Soc. Am. (B)*, 1983, **73**(12) : 1765~ 1770
- [5] B. M. Johnson, K. W. Jones, D. C. Gregory *et al.*, Lifetimes and oscillator strengths for the resonances transitions in Cu-like iodine. *Phys. Scr.*, 1985, **32**(3) : 210~ 214
- [6] V. Kaufman, J. Sugar, W. L. Roman, Spectra of copperlike and zinlike xenon: Xe XXV and XXVI. *J. Opt. Soc. Am. (B)*, 1988, **5**(6) : 1273~ 1274
- [7] J. Reader, G. Luther, The copper isoelectronic sequence:  $Ba^{27+} - W^{45+}$ . *Phys. Scr.*, 1981, **24**(4) : 732~ 737
- [8] J. F. Seely, C. M. Brown, W. E. Behring, Transitions in  $Fe^-$ ,  $Co^-$ ,  $Cu^-$ , and Zn-like ions of W and Re. *J. Opt. Soc. Am. (B)*, 1989, **6**(1) : 3~ 6
- [9] P. Indelicato, O. Gorveix, J. P. Desclaux, Multiconfiguration Dirac-Fock studies of two-electron ions: II. radiative corrections and comparison with experiment. *J. Phys. (B): At. Mol. Phys.*, 1987, **21**(3) : 651~ 663
- [10] B. J. Mckenze, I. P. Grant, P. H. Norrington *et al.*, A program to calculated transverse Breit and QED corrections to energy levels in a multiconfiguration Dirac-Fock environment. *Comput. Phys. Commun.*, 1980, **21**(1) : 233~ 246

## Fine-Structure Energy Levels and Quantum Electrodynamics Effects in the $4s - 4p$ Transitions for Highly Stripped Cu-Like Ions

Tan Mingliang      Zhu Zhenghe

(Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan Union University, Chengdu 610065)

(Received 4 April 1997; revised 4 August 1997)

**Abstract** The  $4s - 4p$  transitions for the Cu-like isoelectronic sequence from In ( $z = 49$ ) to U ( $z = 92$ ) have been calculated by using the relativistic multiconfiguration Dirac-Fock method. The results obtained are in good agreement with the experimental data available. This is verified the importance of quantum electrodynamics (QED) corrections in these highly stripped ions.

**Key words** highly stripped ions, Cu-like ions, QED effects.