

Excitation Energies and Fine Structure Splittings for $1s^2nd$ ($n \leq 9$) States of Ni^{25+} Ion*

Ning Xu¹, Xuefei Han², Yingying Gu², Shuai Wang², Muhong Hu²

¹The Fourth Senior High School of Changtu, Tieling

²School of Physics and Electronic Technology, Liaoning Normal University, Dalian

Email: humuhong@163.com

Received: Apr. 13th, 2013; revised: May 1st, 2013; accepted: May 9th, 2013

Copyright © 2013 Ning Xu et al. This is an open access article distributed under the Creative Commons Attribution License, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

Abstract: The excitation energies and fine structure splittings of $1s^2nd$ ($n \leq 9$) states for Ni^{25+} ion are calculated in this paper. Non-relativistic energies are obtained with the eigenvalue of non-relativistic Hamiltonian operators; the relativistic and mass-polarization effects on the energies are included as the first-order perturbation. The fine structure splittings are determined from the expectation value of spin-orbit and spin-other orbit interaction operators. In order to make the results more precise, quantum-electrodynamics (QED) contribution and higher-order relativistic contribution are considered for highly charged Ni^{25+} ion. The results of fine structure splittings agree with the experimental data excellently, and the error is no more than several cm^{-1} . Compared the excitation energy calculated with experimental data, the relative error is only 0.2‰ - 0.6‰. It indicates the results obtained in this paper are both reliable and accurate.

Keywords: Ni^{25+} Ion; Excitation Energy; Fine Structure Splittings

Ni^{25+} 离子 $1s^2nd$ ($n \leq 9$) 的激发能和精细结构*

徐 宁¹, 韩雪飞², 顾莹莹², 王 帅², 胡木宏²

¹辽宁省昌图县第四高级中学, 铁岭

²辽宁师范大学物理与电子技术学院, 大连

Email: humuhong@163.com

收稿日期: 2013年4月13日; 修回日期: 2013年5月1日; 录用日期: 2013年5月9日

摘 要: 本文主要计算 $1s^2nd$ ($n \leq 9$) 态的激发能和精细结构劈裂。非相对论能量通过求解 Hamiltonian 算符本征值的极值获得, 然后将相对论效应和质量极化效应的贡献作为一级微扰来处理。精细结构劈裂数值由自旋 - 轨道相互作用算符和自旋 - 其他轨道相互作用算符的期待值得到。为了获得高精度的计算结果, 在类氢近似下估算高阶相对论修正和量子电动力学(QED)修正对能级结构的贡献。本文得到的精细结构的计算结果与实验相差只有几个 cm^{-1} , 激发能的计算结果与实验相比, 相对误差只有 0.2‰~0.6‰, 由此表明本文获得的理论数据精度较高, 采用的理论方法是合理可靠的。

关键词: Ni^{25+} 离子; 激发能; 精细结构

1. 引言

近年来, 在诸多高新技术领域需求和相关实验技

资助信息: 国家自然科学基金(编号: 11074102), 国家自然科学基金(编号: 11204118)。

术发展的推动下, 尤其是以光电离和电子碰撞电离为主要机制的产生高荷电离子(HCI)实验装置的问世, 使得对高离化原子的结构和性质的研究成为当代国际原子物理中一个十分活跃领域。但是, 目前关于这方

面的实验数据还很少,而且现有的数据的精度也不是很高,在很多情况下还有赖于准确的理论预言^[1,2],因此对高荷电离子能级结构高精度的理论计算具有重要的研究意义。

本文计算 Ni²⁵⁺离子 1s²nd 态的非相对论能量,将相对论和质量极化效应作为微扰,以此为基础,通过引入价电子感受的有效核电荷概念,在类氢近似下估算相对论效应对体系能量的高阶相对论修正和 QED 修正,完成该离子 1s²nd 的激发能、精细结构的理论计算。

2. 理论方法

本文采用理论方法的详细描述可参见文献[3],这里不再赘述。对于 1s²nd 组态的三电子体系,采用变分波函数^[3]:

$$\Psi(1,2,3) = A \left[\Phi_{1s}(1,2) \sum_i d_i r_3^i e^{-\beta r} 3Y_{l(i)}(3) \chi(3) + \sum_i C_i \Phi_{n(i),l(i)}(1,2,3) \right] \quad (1)$$

其中 A 是反对称化算符,式中的线性参数通过求解体系的久期方程确定,非线性参数则在寻求体系能量极值的过程中加以优化。在此过程中得到体系非相对论能量 E₀,同时体系的波函数得以确定。随着核电荷数的增加,相对论效应更加显著,因此必须考虑相对论效应对体系能级结构的影响。本文中,相对论效应和质量极化效应用一级微扰论计算:

$$\Delta E = \langle \Psi | H_1 + H_2 | \Psi \rangle + \langle \Psi | H_3 + H_4 + H_5 | \Psi \rangle = \Delta E_1 + \Delta E_2 \quad (2)$$

其中 ΔE₁ 是来自单粒子微扰算符(电子动能修正和 Darwin 项)的一阶能量修正,ΔE₂是来自双粒子算符(电子接触项、轨道-轨道相互作用以及质量极化效应)的贡献,这些算符的具体表达式可参见文献[3],而高阶相对论效应和量子电动力学效应(QED)的详细考虑过程见文献[4]。至此,体系能量计算完毕,表示为:

$$E_{\text{total}} = E_{\text{nonrel}} + \Delta E_{1\text{-ord.rel}} + \Delta E_{\text{higher-ord.rel}} + \Delta E_{\text{QED}}^g \quad (3)$$

非相对论效应中的自旋效应可导致能级的精细结构劈裂,其中包括电子的自旋算符与其自身的轨道算符相互作用、电子的自旋算符与其他电子的轨道算

符相互作用。具体的精细结构劈裂数值可由自旋-轨道相互作用算符(H_{SO})和自旋-其他轨道相互作用算符(H_{SOO}),计算其在 LSJ 耦合表象下的期待值而得到,所以非相对论修正引起的精细结构劈裂 ΔE_{fs}^S 为:

$$\Delta E_{fs}^S = \langle LSJM_J | H_{SO} + H_{SOO} | LSJM_J \rangle \quad (4)$$

为了使结果更为准确,还要计及高阶相对论效应和 QED 效应,精细结构总劈裂值为:

$$\Delta E_{fs} = \Delta E_{fs}^H + \Delta E_{\text{QED}}^J + \Delta E_{fs}^{\text{QED}} \quad (5)$$

3. 结果与讨论

Ni²⁵⁺离子 1s²nd (n ≤ 9)的精细结构的计算结果列于表 1 中。从该表中可以看到,本文考虑各种物理效应后得到的计算结果与已有实验数据的偏差仅有几个 cm⁻¹,二者非常接近,远远小于实验误差。由此可见,本文得到的理论结果具有一定的精度,是准确可靠的。从该表还可以看出,随着主量子数的增加,1s²nd 态 Rydberg 序列的精细结构劈裂值不断减小,这与导致精细结构的主要机制自旋-轨道相互作用随着主量子数的增大而减弱的变化规律完全一致。

表 2 中给出 Ni²⁵⁺离子 1s²nd 态的激发能的计算结果,在考虑相对论修正和 QED 修正后得到的结果与现有实验数据符合的很好,相对误差大约在 0.2‰~0.6‰。目前,跃迁能的理论计算和实验数据还存在一些空白,希望本文的计算结果能够对后续的理论研究和实验工作提供一些有益的参考。

图 1 直观的给出了 1s²3d~1s²nf (4 ≤ n ≤ 9)态之间的跃迁的格罗出图。1s²nf 之间的能级间隔和波长,从图中可以看到对于 1s²nf (4 ≤ n ≤ 9)态,随着主量子数

Table 1. Fine structure splittings of 1s²nd (n ≤ 9) states for Ni²⁵⁺ ion (in cm⁻¹)
表 1. Ni²⁵⁺ 离子的 1s²nd (n ≤ 9)的精细结构

State	Relativistic	QED corr.	Higher rel.	Total	Exp. ^[5]
1s ² 3d	16464.5456	38.3093	103.2870	16606.1419	16,600
1s ² 4d	6942.3338	16.1613	48.8460	7007.3412	7010
1s ² 5d	3553.6118	8.2741	25.3419	3587.2278	3590
1s ² 6d	2056.1844	4.7880	14.4833	2075.4557	
1s ² 7d	1294.7517	3.0150	8.9429	1306.7096	
1s ² 8d	867.3019	2.0198	5.8665	875.1883	
1s ² 9d	607.9640	1.4186	4.0379	613.4206	

Table 2. The excitation energy for 1s²nd (3 ≤ n ≤ 9) states
表 2. Ni²⁵⁺离子 1s²nd (3 ≤ n ≤ 9)态的激发能

State	激发能	Exp. ^[5]
1s ² 3d	50.505865	50.538736
1s ² 4d	66.984681	67.000894
1s ² 5d	74.577301	74.623996
1s ² 6d	78.716783	
1s ² 7d	81.212616	
1s ² 8d	82.832338	
1s ² 9d	83.942582	

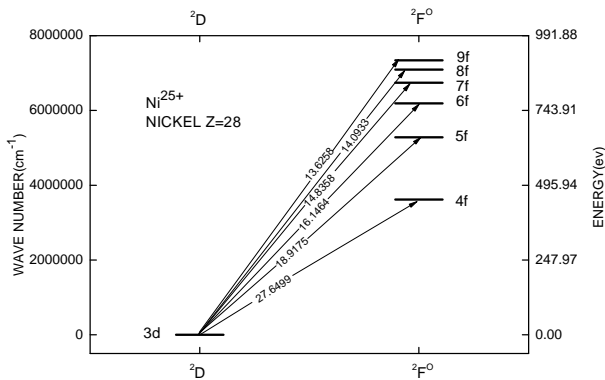


Figure 1. Grotrian diagram showing transitions and wavelength of 1s²3d - 1s²nf (4 ≤ n ≤ 9) for Ni²⁵⁺ ion

图 1. Ni²⁵⁺离子 1s²3d~1s²nf (4 ≤ n ≤ 9)的跃迁能和波长的格罗春图

n 的增大, 能级越来越高, 能级间距越来越小, 并以一定的速率趋近电离。

4. 结语

本文计算了类锂 Ni²⁵⁺离子 1s²nd 的精细结构、激发能和 1s²3d~1s²nf 的跃迁能与波长。在能量的计算中还估算了一阶相对论效应、高阶相对论效应和 QED 效应的贡献, 得到的结果与已有的实验数据符合得很好, 由此证明本文采取的理论方法适合计算较高核电荷的类锂体系物理性质。相信沿用此方法, 能计算类锂体系所有元素的能量、振子强度、精细结构、量子数亏损等, 为高离化态原子体系的能级结构和光谱特性的研究提供一些理论依据, 丰富原始数据, 建立完善的数据体系。

参考文献 (References)

- [1] J. D. Gillaspay. Highly charged ions. Journal of Physics B, 2001, 34: R93.
- [2] Z. W. Wang, Q. J. Han, M. H. Hu, D. Yang and J. Y. Li. Energy and oscillator strength of V²⁰⁺ ion. Frontiers of Physics in China, 2006, 1(1): 102-107.
- [3] K. T. Chung. Ionization potential of the lithium like 1s²2s states from lithium to neon. Physical Review A, 1991, 44: 5421.
- [4] 张楠, 胡木宏, 王治文. Sc¹⁸⁺离子 1s²3d~1s²nf 的跃迁能和偶极振子强度[J]. 原子与分子物理学报, 2005, 22: 597.
- [5] <http://www.nist.gov.com>