

# 电离度效应对重类氢离子跃迁概率的影响\*

张国营, 韩 奎, 殷春浩, 吴玉喜

(中国矿业大学物理系, 江苏 徐州 221008)

**摘 要:** 在高电离态类氢离子的新势函数模型下, 电子近核区域运动的相对论效应、有限核效应、量子电动力学(QED)等效应已被电离度效应所取代. 利用包含电离度效应的类氢离子波函数, 系统研究了电离度效应对重类氢离子电偶极跃迁概率的影响. 发现电离度效应使类氢  $\text{He}^{+9}$  至  $\text{Pm}^{+60}$  离子的跃迁概率相对增加 3.55%—10.38%. 这有利于实验研究者估价自己测量到的原子或离子状态的正确性.

**关键词:** 电离度效应; 重类氢离子; 跃迁概率; 影响因子

**中图分类号:** O571.5      **文献标识码:** A

## 1 引言

由于在热核聚变技术、同位素分离、天文和空间探索以及等离子体物理等方面, 特别是在软 X 射线激光的基础研究领域的需要, 有必要准确了解高电离态离子的结构和状态信息, 作为这种信息的一种有效反映途径, 离子不同态的跃迁概率计算一直是人们关注的课题<sup>[1]</sup>.

高电离态的重类氢离子, 由于电子近核区域运动的概率较大, 相对论效应、有限核效应、量子电动力学(QED)效应等都相对较强, 在进行与跃迁概率有关的计算时, 这些效应的影响使计算过于复杂. 文献[2]曾用电离度效应取代上述几种效应, 得到了电离度效应对类 H 离子能级影响的定量关系. 依此建立的类 H 氢离子新势函数模<sup>[3]</sup>得到了包含电离度效应的类 H 离子波函数. 本文用此波函数导出了跃迁概率的表达式, 并计算了电离度效应对重类 H 离子跃迁概率的定量影响, 实验工作者可用此结果作为估价自己测量结果优劣的参考.

## 2 基本理论

在高电离态类 H 离子新势函数模型下, 势函数 (ato. unit) 可表示为<sup>[3]</sup>

$$U(r) = -\frac{\sqrt{Z^2 + f(\Delta Z)}}{r}, \quad (1)$$

式中  $Z$  是原子序数,  $\Delta Z$  是离子电离度,  $f(\Delta Z)$  是电离度修正函数, 其形式为

$$f(\Delta Z) = 1.4020 \times 10^{-5} \Delta Z^4 + 1.5367 \times 10^{-5} \Delta Z^3 + 8.4937 \times 10^{-4} \Delta Z^2 + 4.9894 \times 10^{-4} \Delta Z, \quad (2)$$

(2) 式包含了相对论效应、有限核效应、QED 效应等因素对离子能级的影响<sup>[2]</sup>. 解 Schrödinger 方程, 得到类 H 离子的径向波函数  $R_{n,l}(r)$  和能级  $E_{n,l}$  为:

$$R_{n,l}(r) = \left| \frac{2\sqrt{Z^2 + f(\Delta Z)}}{n} \right|^{3/2} \cdot \left| \frac{2n\Gamma(n+l+1)}{(n-l-1)!} \right|^{1/2} r' \cdot \exp\left[-\frac{\sqrt{Z^2 + f(\Delta Z)}}{n} r\right] \cdot L_{n+l-1}^{2l+1} \left| \frac{2\sqrt{Z^2 + f(\Delta Z)}}{n} r \right|, \quad (3)$$

$$E_{n,l} = -\frac{Z^2 + f(\Delta Z)}{2n^2}, \quad (4)$$

式中  $n, l$  分别是主量子数和角量子数,  $L_{n+l-1}^{2l+1} \left| \frac{2\sqrt{Z^2 + f(\Delta Z)}}{n} r \right|$  是连属拉盖尔 (Laguerre) 多项式,  $\Gamma(n+l+1)$  是伽玛函数. 依此可求得价电子从  $(n_f, l_f)$  到  $(n_i, l_i)$  态的跃迁几率  $A_{fi}$  为:

\* 收稿日期: 2002 - 02 - 28; 修改日期: 2002 - 06 - 11

作者简介: 张国营(1957-), 男(汉族), 河南温县人, 教授, 从事原子结构与光谱研究.

$$A_{fi} = \frac{1}{3} a^3 (E_f - E_i)^3 \cdot | \langle n_f l_f | r | n_i l_i \rangle |^2 \frac{l_{>}}{2l_f + 1}, \quad (5)$$

其中  $a$  是精细结构常数,  $l_{>} = \max(l_f, l_i)$  电子的能量值可由(4)式计算. 矩阵元的计算可通过连属拉盖尔多项式的展开公式, 对矩阵元积分得到:

$$\langle n_f l_f | r | n_i l_i \rangle = \left| \frac{(n_f - l_f - 1)! (n_i - l_i - 1)! \Gamma(n_f + l_f + 1) \Gamma(n_i + l_i + 1)}{4 n_f n_i} \right|^{1/2} \cdot \sum_{m_1=0}^{n_f - l_f} \sum_{m_2=0}^{l_i - l_f - 1} (-1)^{m_1 + m_2} \left| \frac{\sqrt{Z^2 + f(\Delta Z)}}{n_f} + \frac{\sqrt{Z^2 + f(\Delta Z)}}{n_i} \right|^{-l_f - l_i - m_1 - m_2 - 4} \left| \frac{2 \sqrt{Z^2 + f(\Delta Z)}}{n_f} \right|^{l_f + m_1 + 3/2} \cdot \left| \frac{2 \sqrt{Z^2 + f(\Delta Z)}}{n_i} \right|^{l_i + m_2 + 3/2} \Gamma(4 + l_f + l_i + m_1 + m_2) [(n_f - l_f - 1 - m_1)! (n_i - l_i - 1 - m_2)! m_1! m_2! \Gamma(2l_f + 2 + m_1) \Gamma(2l_i + 2 + m_2)]^{-1}. \quad (6)$$

### 3 电离度效应的影响

在(4)–(6)式中, 若令电离度修正函数  $f(\Delta Z) = 0$ , 则过渡到不考虑电离度影响时氢或类氢离子的  $E_{n,l}$ ,  $A_{fi}$  的计算. 由于类 H 氪离子最有可能实现软 X 射线激光<sup>[4]</sup>, 因此我们把  $Kr^{+35}$  离子在考虑电离度效应和不考虑电离度效应的跃迁概率计算值列于表 1.

表 1 类 H 氪离子赖曼系的部分跃迁概率  $A_{fi}$

跃迁能级		$A_{fi} / (10^{14} s^{-1})$	
$n_f$	$n_i$	不考虑电离度效应	考虑电离度效应
2	1	10.528	10.902
3	1	2.811	2.911
4	1	1.146	1.187
5	1	0.577 7	0.598 2
6	1	0.331 5	0.343 3
7	1	0.207 7	0.215 1
8	1	0.138 7	0.143 7

由表 1 可见, 电离度效应使类氢  $Kr^{+35}$  离子的跃迁概率  $A_{fi}$  相对增加了 3.55%. 进一步的计算表明, 电离度效应造成  $Nd^{+59}$  离子的跃迁概率相对增大 10.03%, 这对实验测量结果优劣的判别有重要影响. 表 2 给出了电离度效应使类氢  $Ne^{+9}$  至  $Pm^{+60}$

离子跃迁概率相对增加的百分比, 我们称其为电离度影响因子  $\eta$ . 实验工作者可根据不考虑电离度效应时类 H 离子跃迁概率  $A_{fi}$  的计算值, 再乘上电离度影响因子  $\eta$ , 即可估算自己测量结果的优劣.

表 2  $Ne^{+9}$ — $Pm^{+60}$  离子的电离度影响因子

离子符号	$\eta$ (%)	离子符号	$\eta$ (%)	离子符号	$\eta$ (%)
$Ne^{+9}$	35.36	$Ni^{+27}$	215.4	$Pd^{+45}$	582.2
$Na^{+10}$	40.66	$Cu^{+28}$	230.8	$Ag^{+46}$	608.2
$Mg^{+11}$	46.49	$Zn^{+29}$	246.7	$Cd^{+47}$	634.9
$Al^{+12}$	52.85	$Ga^{+30}$	263.3	$In^{+48}$	662.2
$Si^{+13}$	59.77	$Ge^{+31}$	280.4	$Sn^{+49}$	690.1
$P^{+14}$	67.23	$As^{+32}$	298.1	$Sb^{+50}$	718.6
$S^{+15}$	75.25	$Se^{+33}$	316.4	$Te^{+51}$	747.7
$Cl^{+16}$	83.82	$Br^{+34}$	335.3	$I^{+52}$	777.5
$Ar^{+17}$	92.95	$Kr^{+35}$	354.8	$Xe^{+53}$	807.9
$K^{+18}$	102.6	$Rb^{+36}$	374.8	$Cs^{+54}$	838.9
$Ca^{+19}$	112.9	$Sr^{+37}$	395.5	$Ba^{+55}$	870.5
$Sc^{+20}$	123.7	$Y^{+38}$	416.7	$La^{+56}$	902.8
$Ti^{+21}$	135.1	$Zr^{+39}$	438.6	$Ce^{+57}$	935.7
$V^{+22}$	147.0	$Nb^{+40}$	461.0	$Pr^{+58}$	969.2
$Cr^{+23}$	159.6	$Mo^{+41}$	484.0	$Nd^{+59}$	1 003.4
$Mn^{+24}$	72.7	$Te^{+42}$	507.7	$Pm^{+60}$	1 038.2
$Fe^{+25}$	186.3	$Ru^{+43}$	531.9		
$Co^{+26}$	200.6	$Rb^{+44}$	556.7		

### 参 考 文 献:

[1] Wiese W L. Atomic Transition Probabilities and lifetimes. in Progress in Atomic Spectroscopy, Parrt B[M]. In: Hamle W, Kleinpoppen H

ed. New York: Plenum, 1979.

[2] Zhang G Y. A Study of the Relation of Ionization Energies with Ionicity

- for Hydrogenlike Ions[J]. Journal of Atomic and Molecular Physics (in Chinese), 1999, **16**(1): 116.
- [3] Zhang G Y, Zhang X L. A New Model of Potential Function of Hydrogenlike Ions[J]. Journal of Atomic and Molecular Physics (in Chinese), 1999, **16**(2): 287.
- [4] Chapline G, Wood L. X-ray Laser[J]. Physics Today, 1975, **28**(6): 40.

## The Influence of the Ionicity Effect on the Transition Probabilities of Heavy Hydrogenlike Ions

ZHANG Guoying, HAN Kui, YIN Churhao, WU Yuxi

(Department of Physics, China University of Mining and Technology, Xuzhou 221008, China)

**Abstract:** In this paper, by means of using the wavefunction taking the ionicity effect into account of hydrogenlike ions, the influence of the ionicity effect on the transition probabilities of heavy hydrogenlike ions is systematically studied under a new model of potential function of hydrogenlike ions. It is found that the relative increase of the transition probabilities is from 3.55 to 10.38 percent for the ions from  $\text{Ne}^{+9}$  to  $\text{Pm}^{+60}$  because of the ionicity effect.

**Key words:** ionicity effect; heavy hydrogenlike ions; transition probability; effect factor