

文章编号: 1004-4353(2017)01-0034-03

类锂 Cu^{26+} 离子 $1s^2np$ 态能量值与 量子数亏损规律的研究

王丽, 张大伟

(营口理工学院 机械与动力工程系, 辽宁 营口 115014)

摘要: 将全实加关联(FCPC)方法与单通道量子数亏损理论相结合, 计算了类锂 Cu^{26+} 离子 $1s^2np$ ($2 \leq n \leq 9$) 态的能量值和量子数亏损, 所得计算结果与文献[9]的实验数据高度符合. 将利用半经验方法计算所得的电离能与 FCPC 方法计算的结果进行比较, 两种方法计算结果非常接近, 说明半经验方法所确定的能量值也具有较高的精度.

关键词: 类锂 Cu^{26+} 离子; 半经验方法; 电离能; 量子数亏损

中图分类号: O562.1

文献标识码: A

Research on the energies of Li-like Cu^{26+} ion $1s^2np$ states and the regularity of the quantum defects

WANG Li, ZHANG Dawei

(Department of Mechanical and Power Engineering, Yingkou Institute of Technology, Yingkou 115014, China)

Abstract: The full-core plus correlation (FCPC) method is combined with single channel quantum defect theory to calculate the energies and the quantum defects of $1s^2np$ ($2 \leq n \leq 9$) states of Li-like Cu^{26+} ion, the calculated results are in good agreement with the experimental data of the literature [9]. The results obtained by semi-empirical method are compared with those high precision results by FCPC method. Two methods of calculation result are very close, which indicates that the energy value determined by the semi-empirical method also has higher precision.

Keywords: Li-like Cu^{26+} ion; semi-empirical method; ionization energy; quantum defect

高离化态原子是指当带电粒子(电子、离子)或强光与原子相互作用时, 可以将较重原子核外的电子大量剥离, 产生高次离化的原子. 实验室等离子体、惯性约束聚变过程、激光等离子体以及强激光同物质相互作用的过程中都会产生大量的高离化态原子. 近年来, 高离化态原子体系能级结构的理论和实验研究一直是许多科技工作者重点关注的课题之一^[1-4], 但迄今为止, 有关高离化态原子体系的实验数据仍不尽人意, 许多情况下还必

须依靠准确可靠的理论预言^[5-6]. 类锂离子体系是高离化态原子中除了类氢离子体系之外最简单的多电子体系, 由于其特殊的“原子实+价电子”结构, 且原子实与价电子的关联效应较强, 因此该体系成为许多科研工作者研究多电子体系内部结构及其特性的重要原子体系, 并将类锂离子体系性质的计算作为检验其理论方法的一个标准^[7]. 本文利用全实加关联(FCPC)方法^[8] 计算了类锂 Cu^{26+} 离子 $1s^2np$ ($2 \leq n \leq 9$) 态的能量值, 并将计

算所得的能量值作为输入,应用单通道量子数亏损理论计算了类锂离子体系量子数亏损,分析了量子数亏损随主量子数的变化规律.目前,关于高主量子数类锂离子的实验数据较少,所以希望本文研究的理论结果能为相关的研究工作提供有价值的参考.

1 理论方法

原子电离能一般定义为:从原子基态剥离一个电子,形成一个由处于基态的离子与一个自由电子组成的系统所需的能量.对于类锂离子里德堡序列任意激发态,体系的电离能等于体系的总能量与原子实能量之差:

$$E_{\text{IP}}(1s^2np) = E_{\text{tot}}(1s^21s) - E_{\text{tot}}(1s^2np), \quad (1)$$

类锂离子体系总能量的计算方法参见文献[8].

依据单通道量子数亏损理论,设原子序数为 Z ,电子数为 N ,价电子主量子数为 n ,则类锂 Cu^{26+} 离子体系的电离能与量子数亏损之间有如下关系式:

$$E_{\text{IP}}(1s^2nl) = \frac{z^2}{2n^{*2}} = \frac{(Z - N + 1)^2}{2(n - \mu_n)^2}, \quad (2)$$

其中 z 为有效核电荷数, $z = Z - N + 1$, n^* 为有效量子数, μ_n 为量子数亏损.将 FCPC 方法计算所得的电离能代入到式(2),可以求得类锂 Cu^{26+} 离子 $1s^2np$ ($2 \leq n \leq 9$) 态对应的量子数亏损.

对于类锂离子里德堡序列高激发态的情况,由于量子数亏损随着主量子数的增加变化越来越缓慢,当主量子数较大时,量子数亏损趋于一个常数,所以可以应用半经验方法,将能量的表达式以半经验参数的形式给出:

$$\mu_n = \mu_0 + h_1 E + h_2 E^2, \quad (3)$$

其中 μ_0, h_1, h_2 是由 FCPC 方法所得到的 Cu^{26+} 离子 $1s^2np$ ($2 \leq n \leq 9$) 序列最低 3 个组态的能级值确定的半经验参数.在利用半经验方法的计算过程中,首先将电离阈处的量子数亏损 μ_0 作为输入代入到式(2),计算出一个能量值 E ,然后把得到的 E 和已经确定的 μ_0, h_1, h_2 代入到公式(3),就可以得到一个新的量子数亏损 μ_n .如此反复迭代几次后就可以得到一个完全一致的能量值,即本文需要的利用半经验方法计算所得类锂离子任意激发

态的能量值.

2 结果与讨论

本文应用 FCPC 方法计算类锂 Cu^{26+} 离子 $1s^2np$ ($2 \leq n \leq 9$) 态的总能量;利用公式(1)计算体系对应的电离能;将电离能作为输入,通过公式(2)计算类锂 Cu^{26+} 离子 $1s^2np$ ($2 \leq n \leq 9$) 较高激发态的量子数亏损.计算结果及实验数据见表 1,本文的计算结果和文献[9]的实验结果均采用原子单位(a.u.),其中 E_{tot} (this work)表示本文利用 FCPC 方法计算所得的总能量, E_{tot} (exp)表示总能量的实验值, E_{IP} (this work)表示本文利用 FCPC 方法计算所得的电离能, E_{IP} (exp)表示电离能的实验值.由表 1 中的数据可以看出,本文的计算结果与文献[9]的实验数据符合得很好.以 $1s^24p$ 态的总能量和电离能为例,本文的计算结果与实验数据比较,相对误差在 0.01% 以内,说明 FCPC 方法对类锂 Cu^{26+} 离子 $1s^2np$ ($2 \leq n \leq 9$) 态能量的计算具有非常高的精度.表 1 中 μ 表示类锂 Cu^{26+} 离子 $1s^2np$ 态对应的量子数亏损,对于同一里德堡序列,随着主量子数 n 的增加,量子数亏损 μ 随着能量的变化越来越缓慢.从图 1 可以直观地看出量子数亏损随着主量子数变化的趋势,当 $n \rightarrow \infty$ 时, μ 趋于定值.表 2 给出了 Cu^{26+} 离子 $1s^2np$ 态关于公式(3)的展开系数.利用半经验方法计算出的 Cu^{26+} 离子 $1s^2np$ ($5 \leq n \leq 9$) 态的电离能见表 3.将利用半经验方法得到的结果与 FCPC 方法所得的高精度理论结果进行比较,从表 3 中可以看出两种方法得到的结果很接近,一般情况下能符合到 4 或 5 位有效数字.以 $1s^26p$ 态为例,用 FCPC 方法得到的高精度结果为 10.186 349,用半经验方法得到的结果是 10.189 145,二者符合到小数点后第 3 位. FCPC 方法是一种从头计算方法,它在计算核电荷数较大的类锂体系低激发态能级结构时具有很高的精度;在半经验方法的计算中,它的能量表达式以半经验参数的形式给出,而半经验参数精度的确定依赖于 FCPC 方法所确定的低激发态的准确度.以上说明,由半经验方法得到的类锂体系的高激发态能级结构同样具有较高的精度.

表 1 Cu²⁶⁺ 离子 1s²np 态的总能量、电离能及对应的量子数亏损(in a.u.)

激发态	E_{tot} (this work)	E_{tot} (exp) ^[9]	E_{IP} (this work)	E_{IP} (exp) ^[9]	μ
1s ² 2p	−924.191 801 05	−924.073 0	92.340 643 86	92.436 360 00	0.013 91
1s ² 3p	−872.776 267 36	−872.604 9	40.925 110 17	40.968 318 00	0.016 30
1s ² 4p	−854.824 263 82	−854.642 9	22.973 106 63	23.006 318 00	0.017 51
1s ² 5p	−846.534 265 12	−846.347 2	14.683 107 93	14.710 552 00	0.018 23
1s ² 6p	−842.037 506 07		10.186 348 88		0.018 71
1s ² 7p	−839.329 412 24		7.478 255 05		0.019 07
1s ² 8p	−837.573 362 05		5.722 204 86		0.019 34
1s ² 9p	−836.370 515 31		4.519 358 12		0.019 67

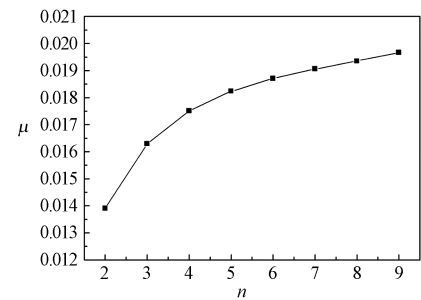


图 1 Cu²⁶⁺ 离子 1s²np 态量子数亏损
随主量子数 n 的变化规律

表 2 Cu²⁶⁺ 离子 1s²np 态量子数亏损的能量展开系数

激发态	μ_0	h_1	h_2
1s ² np	0.0193 419 5	−0.000 086 671	0.000 000 301 6

表 3 FCPC 方法与半经验方法计算所得的电离能(in a.u.)

计算方法	电离能				
	1s ² 5p	1s ² 6p	1s ² 7p	1s ² 8p	1s ² 9p
FCPC 方法	14.683 108	10.186 349	7.478 255 1	5.722 204 9	4.519 358 1
半经验方法	14.689 895	10.189 145	7.479 378 5	5.722 603 5	4.519 212 5

3 结论

本文利用 FCPC 方法计算了类锂 Cu²⁶⁺ 离子 1s²np(2≤n≤9)态的总能量和电离能,得到的计算结果与文献[9]的实验数据高度符合,说明应用 FCPC 方法计算所得的类锂离子能量值具有很高的精度.将 FCPC 方法与单通道量子数亏损理论相结合,计算了类锂 Cu²⁶⁺ 离子 1s²np(2≤n≤9)态的量子数亏损,结果表明,随着主量子数的增加,量子数亏损随能量的变化越来越缓慢.比较半经验方法与 FCPC 方法计算所得的电离能,两种方法所得结果非常接近,说明在计算能量时应用半经验方法同样具有较高的精度,从而可以可靠的预言该离子在第一电离阈以下任意激发态的能量.

参考文献:

[1] 桑萃萃. 锂离子和类锂离子里德堡序列价电子的量子数亏损[J]. 青海师范大学学报(自然科学版), 2009(4):56-57.

[2] 李耀宗,张知侠,梁昌慧,等. 基于相对论量子亏损理论的一类氢离子电离能规律[J]. 科学技术与工程, 2011,11(18):4320-4323.

[3] 陈冠军,黄时中. 类锂离子($Z=9-15$)2s 和 2p 态的能级和精细结构[J]. 安徽师范大学学报(自然科学版),2012,35(2):142-145.

[4] 王丽. Cu²⁶⁺ 离子 1s²nd (3≤n≤9)态的电离能、激发能和精细结构[J]. 西安文理学院学报(自然科学版),2014,17(4):36-39.

[5] 李秀峰,李溪,王永昌. 类锂等电子系列离子 2s 电子能量解析值与量子数亏损规律的研究[J]. 兰州大学学报(自然科学版),1996,32:62-67.

[6] 刘鑫,王治文. 类锂 Zn²⁷⁺ 离子的能量和量子数亏损[J]. 河北科技师范学院学报,2014,28(4):19-22.

[7] 刘尚宗,颜录有,丁晓彬,等. 相对论效应对类锂离子能级结构及辐射跃迁性质的影响[J]. 物理学报, 2012,21(9):93-106.

[8] Chung K T. Ionization potential of the Lithiumlike 1s²2s states from Lithium to Neon[J]. Phys Rev, 1991,A44:5421.

[9] Sugar J, Corliss C. Atomic energy levels of the iron period elements: potassium through nickel [J]. Phys Chem Ref Data, 1985,14(2):357-371.