

约束环境下 O^{6+} 能级和跃迁能的理论计算

鲍洋洋, 马 堃*

黄山学院信息工程学院, 安徽 黄山

收稿日期: 2023年6月3日; 录用日期: 2023年7月3日; 发布日期: 2023年7月13日

摘 要

基于变分原理, 给出了一套处理德拜和量子等离子体环境中原子(离子)非相对论能量及其相对论修正的解析计算方法。该方法不仅可以处理单电子原子, 还可以方便地推广到多电子原子体系。具体计算了 O^{6+} 离子基态 $1s^2(1S)$ 以及激发态 $1s2p(1P)$ 和 $1s2p(3P)$ 的能级以及跃迁能, 分析了等离子屏蔽参数对能级和跃迁能的影响。

关键词

等离子体, 能级, 跃迁能, O^{6+} 离子

Theoretical Calculation for the Energy and Transition Energy of O^{6+} Ion in Confined Environment

Yangyang Bao, Kun Ma*

School of Information Engineering, Huangshan University, Huangshan Anhui

Received: Jun. 3rd, 2023; accepted: Jul. 3rd, 2023; published: Jul. 13th, 2023

Abstract

Based on the variational principle, an analytical method is presented to deal with the nonrelativistic energies of atoms (ions) and relativistic corrections in Debye and quantum plasma environments. This method can not only deal with single-electron atoms, but also be easily extended to multi-electron atomic systems. The energy level and transition energy of O^{6+} ion in ground state $1s^2(1S)$ and excited state $1s2p(1P)$ and $1s2p(3P)$ are calculated, and the influence of plasma shield-

作者简介: 鲍洋洋(2003-), 男, 六安人, 黄山学院信息工程学院 2020 级光电信息科学与工程专业本科生。
*通讯作者。

ding parameters on the energy level and transition energy is analyzed.

Keywords

Plasma, Energy, Transition Energy, O^{6+} Ion

Copyright © 2023 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY 4.0).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

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、跃迁光谱以及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、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 ITER 等)的推进,人们越来越关注等离子体环境中辐射光谱以及动力学参数。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 提出了用单体库仑屏蔽势代替传统的库仑势模型,即 Debye-Hückel 势[1]。对于高密度量子等离子体,引入余弦指数函数对 Debye-Hückel 势中进行了修正,以描述较强耦合效应,该模型广泛地应用于凝聚态物理领域[2]。此外,人们还采用离子球模型(IS)描述强耦合等离子体中的屏蔽效应[3]。

类氢离子是最简单的多电子体系,它广泛地存在于太阳耀斑,超行星,黑洞的吸积盘等天体等离子体环境中。通过对类氢双电子离子体系在等离子体环境中辐射光谱理论研究,不仅对等离子体状态诊断有重要的作用,而且由于其结构简单,是考察电子与原子核以及电子与电子间相互作用以及相对论效应的理想体系。因此,类氢离子一直是人们关注的研究对象之一[4]-[9]。然而,这些工作大多采用数值的方法进行计算,解析的计算报道较少。Chaudhuri 等人[10]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 等人[11]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,弱耦合等离子体环境对原子结构和跃迁线的影响可以被库仑屏蔽势很好的描述出来,屏蔽势可以降低原子能级间的跃迁能,还发现了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,但很难推广到多电子体系。

本文基于变分理论发展了一套解析计算方法可以用来处理德拜和量子等离子体环境中原子(离子)基态及激发态非相对论能量及其相对论修正能量。组态波函数用反对称性的 Hartree-Fock 波函数概括内外壳层电子的不同屏蔽效应以及交换效应,同时将内外层电子径向轨道的变分参数取为独立的值。我们以类氢氧离子为例,对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进行计算,而且还提供了质量修正、单体和双体达尔文修正、自旋-自旋接触相互作用以及轨道-轨道相互作用等相对论修正项的能量值,用来讨论离子体屏蔽效应对能级和波函数的影响。

2. 理论模型

2.1. 哈密顿量

双电子原子的非相对论哈密顿量可以表示为

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

式中 Z 代表了核电荷数。第一、二项代表了电子动能，第三、四项代表单体势能，表示电子和原子核之间的相互作用，第五项是双体势能，代表电子与电子之间的相互作用势。

在高温低密弱耦合等离子体中，采用德拜屏蔽势对单体势进行修正，即

$$V(r) = \frac{Z}{r} e^{-\mu r} \quad (2)$$

其中 μ 是与等离子体密度和温度有关的参数，其倒数 $r_D = 1/\mu$ 称为德拜半径。高密度量子等离子体，引入余弦指数函数对 Debye-Hückel 势中进行了修正，即

$$V(r) = \frac{Z}{r} e^{-\mu r} \cos(\mu r) \quad (3)$$

事实上，文献[10]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。

2.2. 变分法

在 Racah 表象下，多电子原子非相对论本征能量可以由下式得到

$$E = \langle \gamma LSM_L M_S | H_{NR} | \gamma LSM_L M_S \rangle, \quad (4)$$

其中 $|\gamma LSM_L M_S\rangle$ 是多电子原子的 Racah 波函数，类氦体系基态 $1s^2(^1S)$ 态的表达式为

$$|^1S, 0, 0\rangle = \|\psi_{1s0+}(\bar{x}_1)\psi_{1s0-}(\bar{x}_2)\| \quad (5)$$

激发态 $1s2p(^1P)$ 态波函数可以表示为

$$|^1P, 1, 0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\|\psi_{1s0+}(\bar{x}_1)\psi_{2p1-}(\bar{x}_2)\| - \|\psi_{1s0-}(\bar{x}_1)\psi_{2p1+}(\bar{x}_2)\| \right] \quad (6)$$

激发态 $1s2p(^3P)$ 态波函数可以表示为

$$|^3P, 1, 1\rangle = \|\psi_{1s0+}(\bar{x}_1)\psi_{2p1+}(\bar{x}_2)\| \quad (7)$$

式中 $\psi_{n_i \ell_i m_i m_{s_i}}(\bar{x}_i)$ 可以变化成单电子径向、角向和自旋波函数的乘积形式，即

$$\psi_{n_i \ell_i m_i m_{s_i}}(\bar{x}_i) = R_{n_i \ell_i}(r_i) Y_{\ell_i m_i}(\theta_i \phi_i) \chi_{m_{s_i}}(s_i), \quad (8)$$

式中的单电子角向和自旋波函数，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

$$R_{n\ell}(r) = N_{n\ell} \exp\left(-\frac{\alpha_{n\ell} r}{n}\right) \sum_{\nu=0}^{n-1} \frac{n!}{\nu!(n-\nu-1)!(\nu+1)!} \left(-\frac{2\alpha_{n\ell} r}{n}\right)^\nu, \quad (9)$$

式中 $\alpha_{n_i \ell_i}$ 表示变分参数，由非相对论能量变分得到。 $N_{n\ell}$ 代表归一化系数，由径向波函数满足归一化条件得到，即

$$\int_0^\infty R_{n\ell}^*(r) R_{n\ell}(r) r^2 dr = 1. \quad (10)$$

将拉卡波函数代入(4)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

$$I(n\ell) = \frac{1}{2} \int_0^\infty r R_{n\ell}(r) \left[-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{\ell(\ell+1)}{r^2} - 2V(r) \right] r R_{n\ell}(r) dr, \quad (11)$$

$$R^{(k)}(n_i \ell_i n_j \ell_j, n_i \ell_i n_j \ell_j) = \int_0^\infty \int_0^\infty R_{n_i \ell_i}(r_1) R_{n_i \ell_i}(r_1) R_{n_i \ell_i}(r_2) R_{n_j \ell_j}(r_2) \frac{r_1^k}{r_2^{k+1}} r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2. \quad (12)$$

在完成(4)式角向和径向积分之后,可以得到仅含有变分参数能量表达式,再进一步根据 Rayleigh-Ritz 变分法,对含参数的能量表达进行变分,确定参数值。即可得到相应的波函数和能量的本征值。

2.3. 能级表达式

将波函数代入到(4)式,完成角向和自旋部分的积分计算,可分别得到德拜等离子体(SCP)和量子等离子体(ESCP)中类氢离子关于径向积分的能级表达式,即

$$E_{\text{SCP/ESCP}}(1s^2 1S) = 2I(1s) + R^0(1s1s, 1s1s) \quad (13)$$

$$E_{\text{SCP/ESCP}}(1s2p^1P) = I(1s) + I(2p) + R^0(1s2p, 1s2p) - \frac{1}{6}R^1(1s2p, 2p1s) \quad (14)$$

$$E_{\text{SCP/ESCP}}(1s2p^3P) = I(1s) + I(2p) + R^0(1s2p, 1s2p) - \frac{1}{3}R^1(1s2p, 2p1s) \quad (15)$$

完成径向积分可以得到类氢离子分别在 SCP 和 ESCP 等离子体环境下的非相对论能级的参数表达式,即

$$E_{\text{SCP}}(1s^2 1S) = \frac{5a}{8} + a^2 - \frac{8a^3 z}{(2a+u)^2} \quad (16)$$

$$E_{\text{SCP}}(1s2p^1P) = \frac{a^2}{2} + \frac{c^2}{8} - \frac{56a^3 c^5}{3(2a+c)^7} + \frac{8a^5 c}{(2a+c)^5} + \frac{20a^4 c^2}{(2a+c)^5} + \frac{20a^3 c^3}{(2a+c)^5} + \frac{10a^2 c^4}{(2a+c)^5} + \frac{ac^5}{(2a+c)^5} - \frac{4a^3 z}{(2a+c)^2} - \frac{c^5 z}{4(c+u)^4} \quad (17)$$

$$E_{\text{SCP}}(1s2p^3P) = \frac{a^2}{2} + \frac{c^2}{8} - \frac{112a^3 c^5}{3(2a+c)^7} + \frac{8a^5}{(2a+c)^5} + \frac{20a^4 c^2}{(2a+c)^5} + \frac{20a^3 c^3}{(2a+c)^5} + \frac{10a^2 c^4}{(2a+c)^5} + \frac{ac^5}{(2a+c)^5} - \frac{4a^3 z}{(2a+u)^2} - \frac{c^5 z}{4(c+u)^4} \quad (18)$$

$$E_{\text{ESCP}}(1s^2 1S) = \frac{5a}{8} + a^2 - \frac{8a^5 z}{(2a^2 + 2au + u^2)^2} - \frac{8a^4 uz}{(2a^2 + 2au + u^2)^2} \quad (19)$$

$$E_{\text{ESCP}}(1s2p^1P) = \frac{a^2}{2} + \frac{c^2}{8} - \frac{56a^3 c^5}{3(2a+c)^7} + \frac{8a^5 c}{(2a+c)^5} + \frac{20a^4 c^2}{(2a+c)^5} + \frac{20a^3 c^3}{(2a+c)^5} + \frac{10a^2 c^4}{(2a+c)^5} + \frac{ac^5}{(2a+c)^5} - \frac{4a^5 z}{(2a^2 + 2au + u^2)^2} - \frac{4a^4 uz}{(2a^2 + 2au + u^2)^2} - \frac{c^9 z}{[u^2 + (c+u)^2]^4} - \frac{c^8 uz}{[u^2 + (c+u)^2]^4} + \frac{2c^6 u^3 z}{[u^2 + (c+u)^2]^4} + \frac{c^5 u^4 z}{[u^2 + (c+u)^2]^4} \quad (19)$$

$$E_{\text{ESCP}}(1s2p^3P) = \frac{a^2}{2} + \frac{c^2}{8} - \frac{112a^3 c^5}{3(2a+c)^7} + \frac{8a^5 c}{(2a+c)^5} + \frac{20a^4 c^2}{(2a+c)^5} + \frac{20a^3 c^3}{(2a+c)^5} + \frac{10a^2 c^4}{(2a+c)^5} + \frac{ac^5}{(2a+c)^5} - \frac{4a^5 z}{(2a^2 + 2au + u^2)^2} - \frac{4a^4 uz}{(2a^2 + 2au + u^2)^2} - \frac{c^9 z}{[u^2 + (c+u)^2]^4} - \frac{c^8 uz}{[u^2 + (c+u)^2]^4} + \frac{2c^6 u^3 z}{[u^2 + (c+u)^2]^4} + \frac{c^5 u^4 z}{[u^2 + (c+u)^2]^4} \quad (20)$$

3. 结果和讨论

3.1. 变分参数和非相对论能级的计算

根据变分原理, 对含有参数的能量表达式进行变分计算, 可以进一步得到变分参数和非相对论能量值。表 1~3 是 O^{6+} 离子在不同屏蔽参数下 $1s^{21}S$, $1s2p^1P$, $1s2p^3P$ 能级的非相对论能量和电子屏蔽参数。从表 1~3 可以看出, 随着参数 u 的增加, SCP 和 ESCP 的值逐渐增大, 这是由于屏蔽参数越大, 说明等离子体效应越明显, 核外电子感受到原子核势被屏蔽的越厉害。即随屏蔽效应的增加, 束缚能越来越小, 能级越来越接近电离限。

Table 1. Energy level of the ground state $1s^{21}S$ of O^{6+} ion in plasma environment (Unit: a.u.)

表 1. 等离子环境中 O^{6+} 基态 $1s^{21}S$ 能量的计算结果(单位: a.u.)

U	a	SCP	a	ESCP
0	7.6875	-59.09765625	7.6875	-59.09765625
0.1	7.686501871	-57.51313272	7.687465632	-57.49792262
0.2	7.683572488	-55.95904507	7.687231686	-55.89975289
0.3	7.678801988	-54.43465168	7.686616225	-54.30461872
0.4	7.672271666	-52.93925294	7.685455238	-52.71389583
0.5	7.664055046	-51.47218745	7.6836011	-51.1288694
0.6	7.654218783	-50.0328287	7.680920978	-49.55073977
0.7	7.642823427	-48.62058219	7.67729526	-47.98062803
0.8	7.629924079	-47.23488278	7.672616032	-46.41958163
0.9	7.615570952	-45.87519249	7.66678563	-44.86857982
1	7.59980985	-44.54099836	7.659715286	-43.32853881
1.1	7.582682589	-43.23181067	7.651323866	-41.8003168
1.2	7.564227355	-41.94716129	7.641536705	-40.28471864

Table 2. Energy level of the $1s2p^1P$ state O^{6+} ion in plasma environment (Unit: a.u.)

表 2. 等离子环境中 O^{6+} 基态 $1s2p^1P$ 能量的计算结果(单位: a.u.)

u	a	c	SCP	a	c	ESCP
0	7.975691986	7.158505416	-38.2113563	7.975691986	7.158505416	-38.2113563
0.1	7.974895825	7.143085721	-36.64602249	7.975676188	7.156816896	-36.61296698
0.2	7.97254171	7.099424125	-35.14717416	7.975563006	7.145915105	-35.02367267
0.3	7.96868394	7.030273264	-33.71116546	7.975250924	7.118684722	-33.4511637
0.4	7.963378176	6.937223657	-32.33501546	7.974640032	7.069404718	-31.90193839
0.5	7.956679868	6.820955505	-31.01626537	7.973638173	6.99278528	-30.38167128
0.6	7.948643634	6.68132598	-29.7528902	7.972166633	6.882973254	-28.89556212
0.7	7.939323258	6.517322663	-28.54324859	7.97016686	6.732245995	-27.44869513
0.8	7.928772238	6.326860581	-27.38606473	7.967611867	6.52867446	-26.04648775
0.9	7.917045044	6.106327561	-26.28044505	7.964533214	6.250491423	-24.69542986

Continued

1	7.904199756	5.849619585	-25.22594481	7.961112853	5.846662294	-23.40479777
1.1	7.89030403	5.545920954	-24.22272759	7.958401706	5.08147572	-22.19380015
1.2	7.875451634	5.173576011	-23.27194756	7.95333028	4.624532921	-21.09642866

Table 3. Energy level of the $1s2p^3P$ state O^{6+} ion in plasma environment (Unit: a.u.)

表 3. 等离子环境中 O^{6+} 基态 $1s2p^3P$ 能量的计算结果(单位: a.u.)

u	a	c	SCP	a	c	ESCP
0	7.9628865	7.243796629	-38.2628544	7.9628865	7.243796629	-38.2628544
0.1	7.962136289	7.228508618	-36.69722024	7.962875913	7.24214071	-36.6644315
0.2	7.959912419	7.185194032	-35.1975266	7.962796432	7.231439937	-35.07492063
0.3	7.956261756	7.11655774	-33.76019307	7.962568713	7.204689991	-33.50187269
0.4	7.951236532	7.024164094	-32.38228637	7.962110954	7.156252376	-31.95167887
0.5	7.944891807	6.908681932	-31.06138264	7.961348108	7.080925716	-30.42992343
0.6	7.937284394	6.769970056	-29.79548213	7.960220679	6.972988897	-28.94171849
0.7	7.928472771	6.607032926	-28.58296051	7.958695249	6.824957603	-27.49204734
0.8	7.918517884	6.417825623	-27.42255124	7.956782032	6.625397366	-26.08618905
0.9	7.907485159	6.198818566	-26.31336127	7.954574961	6.353775991	-24.73040443
1	7.895448725	5.944081276	-25.25493415	7.952381206	5.963409589	-23.43347793
1.1	7.882500938	5.643201086	-24.24740046	7.951584806	5.264202922	-22.21261823
1.2	7.868778016	5.27566111	-23.29183295	7.949195915	4.668783841	-21.106492

3.2. 跃迁能计算结果

为了进一步研究等离子体屏蔽对跃迁谱线能量的影响, 我们利用前面计算得到各能级的本征能量, 可以得到 SCP 和 ESCP 两种模型下 O^{6+} 离子的跃迁能。具体在图 1 给出。从图可以看出, 随着参数 u 的增大, 类氦离子的跃迁谱线的能量降低, 即跃迁谱线出现红移现象。这是由于在等离子体环境下, 核外电子感受到的原子核势减小, 导致原子能级间距减小。图中 SCP ($1s2p^3P \sim 1s^21S$) 和 SCP ($1s2p^1P \sim 1s^21S$) 的谱线变化趋势相同。 $1s2p^3P \sim 1s^21S$ 谱线的跃迁能与 $1s2p^1P \sim 1s^21S$ 谱线跃迁能相差不大。

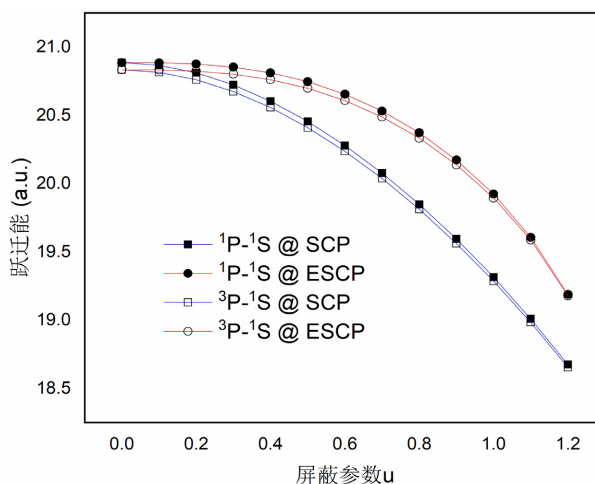


Figure 1. Transition energies as function of shield parameters

图 1. 跃迁能与屏蔽参数的关系

4. 总结

本文对等离子体环境中氦原子能级和跃迁谱线的理论计算开展了相关研究。基于理论基础首先对类氦离子完成角向和自旋部分的积分计算, 分别得到德拜等离子体(SCP)和量子等离子体(ESCP)中类氦离子关于径向积分的能级表达式, 利用软件 *Mathematica* 计算得到类氦离子的非相对能量值和波函数的变分参数。对所得的离子非相对论量利用 *Origina* 画图软件做出类氦离子跃迁谱线随屏蔽参数变化图, 分析随着屏蔽参数的变化导致类氦离子的跃迁能谱线的变化。该方法既可以处理单电子体系, 也可以处理多电子体系。在微扰论下, 可以拓展到大多数等离子体环境, 是约束环境下原子结构和光谱研究的重要理论补充。

基金项目

大学生创新创业项目(202210375080), 黄山学院教学研究重点项目(2022JXYJ02), 黄山学院教学团队项目(2022JXTD01)资助课题。

参考文献

- [1] Debye, P. and Hückel, E. (1923) Debye-Hückel-Type Relaxation Processes in Solid Ionic Conductors: The Model. *Physikalische Zeitschrift*, **24**, 185-190.
- [2] Shukla, P.K. and Eliasson, B. (2008) Screening and Wake Potentials of a Test Charge in Quantum Plasmas. *Physics Letters A*, **372**, 2897-2899. <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2007.12.067>
- [3] Ray, D. (2000) Influence of a Dense Plasma on the Fine-Structure Levels of a Hydrogenic Ion. *Physical Review E*, **62**, 4126-4130. <https://doi.org/10.1103/PhysRevE.62.4126>
- [4] Saha, J.K., Bhattacharyya, S., Mukherjee, T.K. and Mukherjee, P.K. (2010) 1^3D^o and 1^3P^e States of Two Electron Atoms under Debye Plasma Screening. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, **111**, 675-688. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2009.11.026>
- [5] Fang, T.K., Wu, C.S., Gao, X. and Chang, T.N. (2017) Redshift of the He_n Emission Line of He-Like Ions under a Plasma Environment. *Sical Review A*, **96**, Article ID: 052502. <https://doi.org/10.1103/PhysRevA.96.069906>
- [6] Kar, S. and Ho, Y.K. (2005) Doubly-Excited $2s^21S^e$ Resonance State of Helium Embedded in Debye Plasmas. *Chemical Physics Letters*, **402**, 544-548. <https://doi.org/10.1016/j.cplett.2004.12.099>
- [7] Xie, L.Y., Wang, J.G., Janev, R.K., Qu, Y.Z. and Dong, C.Z. (2012) Energy Levels and Multipole Transition Properties of C^{4+} Ion in Debye Plasmas. *The European Physical Journal D*, **66**, Article No. 125. <https://doi.org/10.1140/epjd/e2012-20594-6>
- [8] Chen, Z.B. (2017) Circular Polarization of X-Ray Radiation Emitted by Longitudinally Polarized Electron Impact Excitation: Under a Screened Coulomb Interaction. *Physics of Plasmas*, **24**, Article ID: 122119. <https://doi.org/10.1063/1.5005550>
- [9] Chen, Z.B., Ma, K., Hu, H.W. and Wang, K. (2018) Relativistic Effects on the Energy Levels and Radiative properties of He-Like Ions Immersed in Debye Plasmas. *Physics of Plasmas*, **25**, Article ID: 072120. <https://doi.org/10.1063/1.5040806>
- [10] Chaudhuri, S.K., Mukherjee, P.K. and Fricke, B. (2017) Atomic Structure under External Confinement: Effect of Plasma on the Spin Orbit Splitting, Relativistic Mass Correction and Darwin Term for Hydrogen-Like Ions. *The European Physical Journal D*, **71**, Article No. 71. <https://doi.org/10.1140/epjd/e2017-70511-6>
- [11] Hu, H.W., Chen, Z.B. and Chen, W.C. (2016) Radiative Transition of Hydrogen-Like Ions in Quantum Plasma. *Radiation Effects and Defects in Solids*, **171**, 890-903. <https://doi.org/10.1080/10420150.2016.1257618>