

ThLXXXI、ULXXXIII 离子 $2p^53l$ 组态能级及 $2p^53l-3l'$ 跃迁波长和振子强度计算

张同发 潘守甫

(吉林职业师范学院) (吉林大学原子分子物理研究所)

Relativistic calculation of $2p^53l$ energy levels, transition wavelengths and oscillator strengths between $2p^53l-3l'$ ThLXXXI and ULXXXIII ions

Zhang Tongfa

(Jilin Vocational Teachers' College, Changchun)

Pan Shoufu

(Institute of Atomic and Molecular Physics, Jilin University, Changchun)

提要: 我们使用相对论多组态 Dirac-Fock 程序计算了 ThLXXXI 和 ULXXXIII 离子的 $2p^53l$ 组态精细结构能级, 以及 $2p^53l-3l'$ 态跃迁波长和振子强度。计算结果表明, ThLXXXI、ULXXXIII 离子在激光等离子体中能够产生波长 $\lambda < 0.3\text{nm}$ 软 X 射线相干辐射。这是天然最重的稳定元素类氙离子 $2p^53l$ 组态能级跃迁所能产生的最短相干辐射波长值。

关键词: 类氙离子, 多组态, Dirac-Fock 程序

一、引言

预言了在 BeI-NeI 的高荷电离化等电子序列离子中的 $2p^k-13p-2p^k-13s$ 态之间的跃迁可形成真空紫外和软 X 射线相干辐射^[1]。Vinogradov^[2] 发现并指出了类氙离子可作为超真空紫外和软 X 射线激光器工作物质。之后, 类氙离子的实验研究和理论工作受到人们普遍关注和得到迅猛发展。

本文试图从理论计算上判断天然存在的最重稳定元素 Th 和 U 类氙离子在激光等离子体中所产生的相干辐射的最短波长数。该

波长也是这种图像^[2]的激光可能给出的最短波长。同时, 本文的研究工作还将为类氙等离子体短波激光器的理论研究提供原子物理参数数据。此外, 近来的研究表明, 识别和认定谱线归属, 振子强度的理论值是十分有用的, 为此, 本文计算了 ThLXXXI 和 ULXXXIII 离子的振子强度数据。

二、计算方法

本文分别使用 Grant^[3] 的相对论多重组态 Dirac-Fock (MCDF) 计算程序的最佳化

收稿日期: 1988 年 2 月 29 日。

能级(OL)模型和广义平均能级(EAL)模型计算了ThLXXXI和ULXXXIII离子的 $2p^53s$ 、 $2p^53p$ 、 $2p^53d$ 、 $2p^6$ 组态的能级。

最佳能级计算由公式

$$\begin{aligned} E_{opt} = E_{\alpha} &= \int \psi_{\alpha}^{\dagger}(JM) H \psi_{\alpha}(JM) d\tau \\ &= \sum_{r,s} C_r^*(\alpha) H_{rs} C_s(\alpha) \quad (1) \\ &= C_{\alpha}^{\dagger} H C_{\alpha} \end{aligned}$$

给出。式中, $\psi_{\alpha}(JM)$ 是原子态波函数(ASF), 可由总角动量为 JM 的态 α 的组态波函数(CSF) $\phi(\gamma_r JM)$ 线性组合构成, 即

$$\psi_{\alpha}(JM) = \sum_{r=1}^{n_c} C_r(\alpha) \phi(\gamma_r JM) \quad (2)$$

组态波函数可由反对称 $j-j$ 耦合中心场旋量形成。Hamiltonia 矩阵元由

$$H_{rs} = \int \phi^{\dagger}(\gamma_r JM) H \phi(\gamma_s JM) d\tau \quad (3)$$

给定。以上各式的符号规定如下, “+”表示 Hermitian 共轭; “*”表示复数共轭; H 为含有相对论项的 N 电子体系的标准 Hamiltonia; J 表示总角动量; M 表示总磁量子数; ν_r 和 ν_s 分别表示不同矩阵元组态波函数的剩余量子数。 $C_r(\alpha)$ 表示态 α 的混合系数, 其中, $r=1, 2, \dots, n_c$, 为组态波函数的个数, $C_r(\alpha)$ 由程序给定, 并按变分原理被最佳化。

广义平均能级由公式

$$E_{opt} = \frac{\sum_r W_r H_{rr}}{\sum_s W_s} \quad (4)$$

给出。式中, H_{rr} 表示总角动量 J_r 态的对角 Hamiltonia 矩阵元, W_r 是该态的对角矩阵元 H_{rr} 的系数。因其广义平均能级计算是 H_{rr} 矩阵元的权重求和并被最佳化, 因此权重因子通常为 $W_s = 2J + 1$, 且与 $|J_s M_s\rangle$ 的状态数相符。

在最佳化能级计算中, 核电荷分布除了 $3p(^1p_1, ^1s_0, ^3p_1, ^3p_2)$ 和 $3d(^1D_2, ^1p_1, ^3D_2, ^3D_3)$ 能级计算时使用了 Fermi 两参数核电荷分布之外, 其余的能级计算均选用了点电荷分

布。广义平均能级计算中使用了平均核电荷分布。

本文计算中, 引用了 Mckenzie^[4] 的横向 Breit 修正和包括真空极化(V.P)和自能(S.E)修正的量子电动力学(Q.E.D)修正程序。有关 MCDF 算法和 Mckenzie 修正程序的理论和程序问题参阅文献[3~5]。

考虑到原子态波函数的混合系数 $C_r(\alpha)$ 与组态波函数选择有关, 且在满足宇称奇偶性选择条件下, 只有总角动量相同的态才具有明显的混合作用。因此, 最佳化能级计算中, 仅考虑了相对论多重态的混合方式。在广义平均能级计算中, 由于是对角化的 Hamiltonia 矩阵元的权重和的最佳化, 所以, 混合的组态数计算中作了相应的增加。具体如下, 计算 $2p^53s$ 组态能级时, 混入了 $2p^33d$ 和 $2s2p^63p$ 组态。计算 $2p^53p$ 组态能级时, 混入 $2p^6$ 、 $2s2p^63d$ 和 $2s2p^63s$ 组态。计算 $2p^53d$ 组态能级时, 混入 $2p^53s$ 和 $2s2p^63p$ 组态。计算基态 $2p^6$ 能级时, 混入 $2p^53p$ 、 $2s2p^63s$ 和 $2s2p^63d$ 组态。这种组态混合方式使计算结果有明显的改善, 尤其是扰动作用强的 $2s2p^63l$ 组态混合, 对能级贡献的数量级通常在 10^{-2} 以上。

本文还计算了偶极跃迁波长和振子强度。根据最新发表的物理常数, 波长计算公式由下式

$$\lambda = \frac{9999921.722}{\varepsilon_p - \varepsilon_q} \text{nm} \quad (5)$$

给出。 $\varepsilon_p, \varepsilon_q$ 分别为跃迁的初末态能级值, 单位是 cm^{-1} 。振子强度 f 用公式

$$f = (303.8/\lambda g) \cdot S \quad (6)$$

计算。式中, g 为跃迁能级中较低能级的退化度, S 为跃迁的线强度。在非相对论极限条件下, 对于 $2p^5J_1 3l j J - 2p^5J_1 3l' j' J'$ 的跃迁线强度为^[6]

$$S = s [eR_{\nu}^e]^2 \quad (7)$$

式中, $[eR_{\nu}^e]^2$ 是电偶极跃迁截面,

$$s = (2J+1)(2J'+1) \begin{Bmatrix} j & J & J_1 \\ J' & j' & 1 \end{Bmatrix} \\ \times (2j+1)(2j'+1) \begin{Bmatrix} l & j & 1/2 \\ j' & l' & 1 \end{Bmatrix} l_{\max} \quad (8)$$

式中, l_{\max} 选用 l 和 l' 中的较大值。

三、计算结果与讨论

表 1 列出了 ThLXXXI 和 ULXXXIII 离子相对论多组态 Dirac-Fock 最佳化能级和广义平均能级的 $2p^53l$ 组态相对于基态的能级计算值, 单位是 cm^{-1} 。能级符号表示方法除了按惯例的光谱项表示之外, 还标注了 $j-j$ 耦合关系以示区别。表中给出最佳化模型和广义平均模型计算的两组能级值, 前者, 在考虑相对论组态混合情况下, 是由波函数和混合系数的最佳值计算得出的能级值。后者, 是所有参加计算的组态权重求和的广均能级值。因此, 用最佳化模型计算得到的能

级值要比广义平均模型计算的结果更可靠。计算结果表明, 前者与基态能级差小于后者, 可知, 最佳化模型计算结果优于广义平均模型的计算结果。

表 2 中列出了跃迁波长和振子强度的计算值。产生激光相干辐射的 $3P_13P^{-1}P_13s$ 跃迁波长, ThLXXXI 离子的波长为 $\sim 0.8 \text{ nm}$, ULXXXIII 离子的波长为 $\sim 0.7 \text{ nm}$ 。文献 [7] 指出, 能级 1S_03p 至 1P_13s 或 3P_13s 跃迁有较高的增益, 且 z 较低时, 跃迁为 1P_13s , 而 z 较高时为 3P_13s 。由于组态混合, 能级名称改变, 即由 1P_1 至 $3P_1$, 与 z 值增加有关, 为此, 我们计算了 $^1S_03p-^3P_13s$ 能级跃迁波长, ThLXXXI 离子的波长为 0.3010 nm , ULXXXIII 离子波长为 0.2688 nm , 均位于软 X 射线波长区域。由此可知, 当用天然存在的最重稳定元素的类氙离子作为等离子体激光器工作物质时, 最短的相干辐射波长为 $\sim 0.3 \text{ nm}$ 。显然, 这是天然元素类氙离子相干辐射的最短波长。表 2 中的波长和振子强度数据是由最佳化能级数据算出的。

表 1 ThLXXXI、ULXXXIII 离子的相对基态 $2p^5S_0$ 的能级 (in cm^{-1})

LS	名称	J	ThLXXXI		ULXXXIII	
			OL*	EAL**	OL	EAL
3P_2	3s(3/2, 1/2)	2	96335165	99380243	99916086	103702109
3P_1	3s(3/2, 1/2)	1	96428599	99472702	100012908	103797161
3P_0	3s(1/2, 1/2)	0	124630536	127633822	131449749	135184843
1D_1	3s(1/2, 1/2)	1	124653129	127660581	131471590	135210965
3S_1	3p(3/2, 1/2)	1	98056309	101049319	101714908	105435470
3D_2	3p(3/2, 1/2)	2	98059762	101053608	101716751	105438078
3D_3	3p(3/2, 3/2)	3	105941135	108925536	110519363	114238513
3D_1	3p(3/2, 3/2)	1	105952739	108934645	110531774	114228530
1D_2	3p(3/2, 3/2)	2	106083608	109068629	110667151	114376921
3P_0	3p(3/2, 3/2)	0	106676513	109703556	111280536	115033272
1P_1	3p(1/2, 1/2)	1	129090641	129227750	136622755	136835179
1S_0	3p(1/2, 1/2)	0	129655595	129803258	137217262	137438188
3P_1	3p(1/2, 3/2)	1	137062773	137222940	145553449	145756269
3P_2	3p(1/2, 3/2)	2	137064841	137234746	145554955	145768249
3P_0	3d(3/2, 3/2)	0	107612853	110595336	112241428	115948684
3F_1	3d(3/2, 3/2)	1	107710379	110694842	112340450	116049693
3F_3	3d(3/2, 3/2)	3	107690475	110676130	112316846	116027309
3F_2	3d(3/2, 3/2)	2	107790823	110776436	112422410	116132749
3F_4	3d(3/2, 5/2)	4	109375771	112361874	114181544	117893400
3D_2	3d(3/2, 5/2)	2	109459136	112444592	114268496	117979735
1F_3	3d(3/2, 5/2)	3	109559920	112545717	114371739	118083276
3D_1	3d(3/2, 5/2)	1	109844603	112830289	114659874	118373312
1D_2	3d(1/2, 3/2)	2	138781549	138941008	147321954	147524528
1P_1	3d(1/2, 3/2)	1	138994847	139161637	147536706	147745688
3D_2	3d(1/2, 5/2)	2	140549776	140701220	149273826	149467945
3D_3	3d(1/2, 5/2)	3	140570373	140729207	149293785	149495663

* 最佳能级

** 广义平均能级

表2 ThLXXXI 和 ULXXXIII 离子的跃迁波长和振子强度

LS	跃迁 $j-j$	ThLXXXI		ULXXXIII			
		LS	$j-j$	nm	f	nm	f
3P_2	3s(3/2, 1/2)	$-^3S_1$	3p(3/2, 1/2)	5.8100	0.01518	5.5591	0.01489
		$-^3D_2$	3p(3/2, 1/2)	5.7984	0.01522	5.5535	0.01492
		$-^3D_3$	3p(3/2, 3/2)	1.0410	0.26886	0.9431	0.28061
		$-^3D_1$	3p(3/2, 3/2)	1.0398	0.01923	0.9420	0.02003
		$-^1D_2$	3p(3/2, 3/2)	1.0258	0.09733	0.9301	0.10159
3P_1	3s(3/2, 1/2)	$-^3S_1$	3p(3/2, 1/2)	6.1436	0.00479	5.8754	0.00470
		$-^3D_2$	3p(3/2, 1/2)	6.1305	0.02402	5.8690	0.02355
		$-^3D_1$	3p(3/2, 3/2)	1.0500	0.15890	0.9507	0.16567
		$-^1D_2$	3p(3/2, 3/2)	1.0357	0.16131	0.9386	0.16803
		$-^3P_0$	3p(3/2, 3/2)	0.9758	0.06913	0.8875	0.07173
3P_0	3s(1/2, 1/2)	$-^1S_0$	3p(1/2, 1/2)	0.3010	0.2688	0.2688	
		$-^1P_1$	3p(1/2, 1/2)	2.2421	0.07870	1.9331	0.08568
		$-^3P_1$	3p(1/2, 3/2)	0.8044	0.49643	0.7090	0.53164
		$-^1P_1$	3p(1/2, 1/2)	2.2535	0.05224	1.9413	0.05692
		$-^1S_0$	3p(1/2, 1/2)	1.9990	0.02946	1.7404	0.03175
1P_1	3s(1/2, 1/2)	$-^3P_1$	3p(1/2, 3/2)	0.8058	0.08266	0.7101	0.08854
		$-^3P_2$	3p(1/2, 3/2)	0.8057	0.41357	0.7101	0.44295
		$-^3P_0$	3d(3/2, 3/2)	1.0464	0.04485	0.9500	0.04680
		$-^3P_1$	3d(3/2, 3/2)	1.0358	0.11360	0.9411	0.11844
		$-^3F_2$	3d(3/2, 3/2)	1.0273	0.11468	0.9339	0.11948
3S_1	3p(3/2, 1/2)	$-^3P_1$	3d(3/2, 3/2)	1.0362	0.01909	0.9413	0.01417
		$-^3F_3$	3d(3/2, 3/2)	1.0383	0.19058	0.9434	0.19869
		$-^3F_2$	3d(3/2, 3/2)	1.0276	0.06882	0.9341	0.07171
		$-^3F_3$	3d(3/2, 3/2)	5.7164	0.00390	5.5633	0.00380
		$-^3F_2$	3d(3/2, 3/2)	5.4063	0.00103	5.2547	0.00101
3D_2	3p(3/2, 1/2)	$-^3F_4$	3d(3/2, 5/2)	2.9115	0.07844	2.7306	0.07954
		$-^3P_2$	3d(3/2, 5/2)	2.8425	0.00089	2.6673	0.00091
		$-^1F_3$	3d(3/2, 5/2)	2.7633	0.01291	2.5958	0.01306
		$-^3P_0$	3d(3/2, 3/2)	6.0236	0.00153	5.8491	0.00150
		$-^3P_1$	3d(3/2, 3/2)	5.6894	0.00065	5.5289	0.00064
3D_3	3p(3/2, 3/2)	$-^3F_2$	3d(3/2, 3/2)	5.4404	0.00273	5.2892	0.00266
		$-^3P_2$	3d(3/2, 5/2)	2.8519	0.06548	2.6761	0.06636
		$-^3D_1$	3d(3/2, 5/2)	2.5694	0.03159	2.4224	0.03185
		$-^3P_1$	3d(3/2, 3/2)	6.1471	0.00145	5.9762	0.00141
		$-^3F_3$	3d(3/2, 3/2)	6.2232	0.00125	6.0617	0.00122
3D_1	3p(3/2, 3/2)	$-^3F_2$	3d(3/2, 3/2)	5.8574	0.00229	5.6971	0.00223
		$-^3P_2$	3d(3/2, 5/2)	2.9625	0.02104	2.7767	0.02135
		$-^1F_3$	3d(3/2, 5/2)	2.8766	0.06953	2.6993	0.07046
		$-^3D_1$	3d(3/2, 5/2)	2.6589	0.00204	2.5045	0.00206
		$-^3P_1$	3d(3/2, 3/2)	9.6724	0.00291	9.4347	0.00283
1D_2	3p(3/2, 3/2)	$-^3D_1$	3d(3/2, 5/2)	3.1565	0.08676	2.9591	0.08795
		$-^1D_2$	3d(1/2, 3/2)	1.0319	0.22793	0.9346	0.23835
		$-^1P_1$	3d(1/2, 3/2)	1.0097	0.04765	0.9163	0.04892
		$-^1S_0$	3d(1/2, 3/2)	1.0707	0.26567	0.9690	0.27796
		$-^3P_1$	3d(1/2, 3/2)	5.8180	0.00080	5.6576	0.00078
1P_1	3p(1/2, 1/2)	$-^1P_1$	3d(1/2, 3/2)	5.1757	0.00451	5.0447	0.00439
		$-^3D_2$	3d(1/2, 5/2)	2.8678	0.09293	2.6886	0.09426
		$-^1D_2$	3d(1/2, 3/2)	5.8251	0.00430	5.6593	0.00419
		$-^1P_1$	3d(1/2, 3/2)	5.1813	0.00054	5.0460	0.00053
		$-^3D_2$	3d(1/2, 5/2)	2.8694	0.00619	2.6890	0.00629
3P_2	3p(1/2, 3/2)	$-^3D_3$	3d(1/2, 5/2)	2.8526	0.08733	2.6746	0.08858

本文考虑了 ThLXXXI 离子和 ULXXXIII 离子的作为微扰修正的横向 Breit 修正和包括真空极化(V. P)、自由能(S. E)的量子电动力学(Q. E. D)修正对能级能量的贡献值,以及总修正贡献的能量值。根据最佳化模型计算结果,总修正贡献的能量值占该能级能量的百分数,ThLXXXI 离子为 $\sim 0.26\%$, ULXXXIII 离子为 $\sim 0.27\%$ 。其修正作用对波长数据的影响与未修正比较,结果是使跃迁波长值增加。对 ThLXXXI 离子的 $^3P_13s-^1S_03p$ 态跃迁波长增加 2.26% , $^3P_03p-^3P_13d$ 跃迁波长增加 3.8% ; 对 ULXXXIII 离子的 $^3P_13s-^1S_03p$ 态跃迁波长增加为 0.86% , $^3P_03p-^3P_13d$ 态跃迁波长增加为 4.30% 。可见,在计算理论波长时, Breit 和 Q. E. D 修正作用是不可忽略的。我们计算 CaXI、MnXVI 离子时也曾发现,与实验值相比,这些修正项的贡献使理论计算能级的相对误差降低了 1.70% 左右。可知,当用 MCDF 理论预言波长值时,必须考虑上述的修正效应,使得计算值更为精确。

根据^[8]和其他使用 MCDF 计算的文献^[9],以及我们计算 CaXI、MnXVI 等离子

的理论能级值与实验值比较,相对误差为 $0.3\sim 1.4\%$ 。可知,用相对论多组态 Dirac-Fock 程序计算离子的数据是相当可靠的。因此,尽管没有实验数据与之比较,我们计算的 ThLXXXI 和 ULXXXIII 离子的数据仍是可信的。

本计算工作是在 IBM 4381 型计算机上完成的,在此,对给予我们很大帮助的东北电力研究院计算中心表示谢意。

参 考 文 献

- 1 R. C. Elton, *Appl. Opt.*, **14**(1), 97(1975)
- 2 A. V. Vinogradov *et al.*, *Sov. J. Quant. Electr.*, **7**(1), 32(1977)
- 3 I. P. Grant *et al.*, *Comput. Phys. Commun.*, **21**(2), 207(1980)
- 4 B. J. Mckenize *et al.*, *Comput. Phys. Commun.*, **21**(2), 233(1980)
- 5 I. P. Grant, *Adv. Phys.*, **19**(82), 747(1970)
- 6 L. I. Sobeiman, *Introduction to the theory of atomic spectra* (Pergamon. Oxford, 1972), sect. 32
- 7 U. Feldman *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **56**(9), 24 75(1984)
- 8 R. R. Haar *et al.*, *Physica Scripta*, **35**(3), 269(1987)
- 9 J. A. Cogordon *et al.*, *Physica Scripta*, **33**(5), 406(1986)