

## 58 ≤ Z ≤ 71 类氦离子 2p<sup>5</sup>3l 能级的相对论多组态 Dirac-Fock 计算

张同发

梁爱华 潘守甫

(吉林职业师范学院)

(吉林大学原子与分子物理研究所)

### Relativistic MCDF calculations of 2p<sup>5</sup>3l energy levels and transition wavelenths from Ne-like ions of 58 ≤ Z ≤ 71

Zhang Tongfa

(Vocational Teachers College of Jilin, Changchun)

Liang Aihua, Pan Shoufu

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

**提要:** 本文用相对论多组态 Dirac-Fock 广义平均模型 (MCDF-EAL) 计算了 58 ≤ Z ≤ 71 的 2p<sup>5</sup>3s、2p<sup>5</sup>3p 和 2p<sup>5</sup>3d 组态的各 27 条精细结构能级, 以及其作为等离子体激光工作物质所可能发射出的激光波长值。

**关键词:** 相对论多组态, 精细结构能级, 跃迁波长

### 一、引言

真空紫外和软 X 射线短波激光的产生, 将引起自然科学、工程技术、遗传和生命科学、空间科学与技术等领域有阶段性的突破。由此, 世界各工业发达国家都致力于研究开发等离子体激光工作物质。在理论上, Elton<sup>[1]</sup> 早已指出 2p<sup>k-1</sup>3p-2p<sup>k-1</sup>3s 组态之间的跃迁可能形成真空紫外、软 X 射线的短波激光, 产生这种激光的工作物质可能是高荷电离化的 BeI-NeI 等电子序列离子。因此, 类氦离子的理论研究和计算工作十分活跃, 如 Vinogradov 等<sup>[2]</sup> 计算了 MgIII、

FeXVII 离子; Feldman 等<sup>[3]</sup> 计算了 Kr XXVII 离子; Cogordan<sup>[4]</sup> 等计算了 TiXIII、FeXVII、SeXXV、YXXX 离子的 3s-3p 跃迁波长, 最近他们用 Grant 程序的 MCDF-EAL 模型计算了 20 ≤ Z ≤ 54 离子的 2p<sup>5</sup>3s, 3p 和 3d 组态的精细结构能级和某些组态能级之间的跃迁波长, 以及 TiXIII、FeXVII 离子的能级和波长<sup>[5,6]</sup>; Haar 等最近又进行了 NiXIX 离子的实验测定和理论计算。从上述若干人计算结果和实验测量得知, 3s-3p 跃迁的激光波长均处于短波范围之内。

本文考虑到, 目前无论是在理论上还是在实验测量上尚无 58 ≤ Z ≤ 71 类氦离子数

收稿日期: 1988 年 1 月 4 日。

据, 所以, 我们用多重组态 Dirac-Fock 方法计算了这些元素的类氦离子精细结构能级和某些组态的激光波长数据, 以利于开展等离子体短波激光工作物质的研究。

## 二、理论概述

本文用相对论多重组态 Dirac-Fock 广义平均模型 (MCDF-EAL), 计算了 CeII, PrI, NdII, PmLII, SmLIII, EuLIV, GdLV, TbLVI, DyLVIII, HoLVIII, ErLIX, TmLX, YbLXI, LuLXII 离子的精细结构能级和某些能级间的选择跃迁波长。计算使用了 Grant<sup>[7]</sup> 程序包, 同时联接调用了 Mckenzie<sup>[8]</sup> 的 Breit、QED (包括真空极化和自能) 修正程序包。有关计算程序的理论模型等理论问题可参阅文献 [9] 的论述。本节涉及的理论叙述仅与输入数据的内容有关。

原子状态  $\alpha$  的总波函数可以写为

$$\psi_{\alpha}(\Pi, J, M) = \sum_{r=1}^{n_c} C_r(\alpha) \phi_r(\nu_r, \Pi, J, M) \quad (1)$$

其中  $\Pi, J$  和  $M$  分别表示奇偶性、总角动量和总磁量子数。 $\phi_r(\nu_r, \Pi, J, M)$  为组态函数 (CSF), 完全由反对称  $j-j$  耦合下的中心场 Dirac 旋量产生,  $\nu_r$  表示完全确定组态函数的所有剩余的量子数。通常, 物理状态  $\alpha$  不能用单一组态函数描述, 而用组态函数的线性组合表示。混合系数  $C_r(\alpha)$  可由计算程序得到的结果给出最可能的能级。

本文计算选用了平均核电荷分布, 其核势  $V_{nuc}(r)$  为

$$V_{nuc}(r) = \begin{cases} -\frac{Z}{2r} \left( \frac{r}{R_{nuc}} \right) \left[ 3 - \left( \frac{r}{R_{nuc}} \right)^2 \right], & r \leq R_{nuc}, \\ -\frac{Z}{r}, & r > R_{nuc}. \end{cases} \quad (2)$$

式中,  $R_{nuc} = 2.2677 \times 10^{-5} A^{1/3}$ ,  $A$  为原子量。

广义平均模型对含有不同总角动量  $J$ ,

组态的对角哈密顿矩阵元  $H_{rr}$  进行权重求和并最佳化, 即最佳化能级为

$$E_{opt} = 1 \cdot \left[ \sum_s W_s \right]^{-1} \cdot \sum_r W_r H_{rr} \quad (3)$$

其中  $W_r$  见文献 [7]。式中权重因子  $W_s = 2J_s + 1$ , 于是, 每个组态的权重与  $|J_s, M_s\rangle$  的状态数相符。

在计算中, (1) 式中的混合系数取决于组态的选择, 对于某些能级, 如能级  $3p^1S_0$  和  $3p^3S_1$ , 受  $2s2p^63s$  组态的  $^1S_0$  和  $^3S_1$  态影响很大。因此, 本文考虑了多重组态间的相互作用, 在满足组态混合宇称奇偶性的条件下, 在计算  $2p^53s$  组态的能级时, 混入  $2p^53d$ 、 $2s2p^63p$  组态; 计算  $2p^53p$  组态时混入  $2p^6$ 、 $2s2p^63d$  和  $2s2p^63s$  组态; 计算  $2p^53d$  组态时混入  $2p^53s$  和  $2s2p^63p$  组态; 计算  $2p^6$  基态时混入  $2p^53p$ 、 $2s2p^63s$  和  $2s2p^63d$  组态。上述的组态混合比文献 [5] 的多。

## 三、计算结果与讨论

在表 1 中, 列出了  $58 \leq Z \leq 71$  元素的类氦离子广义平均模型的  $2p^53s$ 、 $2p^53p$  和  $2p^53d$  组态  $j-j$  耦合的相对于基态  $2p^6^1S_0$  的理论计算精细结构能级值。能量单位为波数  $\text{cm}^{-1}$ 。表中给出的组态能级符号除按光谱学惯例, 用  $LS$  光谱项表示之外, 还加标了  $j-j$  耦合关系符号予以标识。

由于目前高离化态较重的稀土元素实验技术还存在一定困难, 上述理论计算的能级值尚无实验数据与之对比。但文献 [4] 和 [10] 表明理论计算值与实验值符合很好。

本文计算的某些组态能级跃迁的波长值列于表 2。从波长的数据可以看出, 当原子序数增加时, 其对应的能级跃迁波长向更短的方向变化, 且跃迁波长处在超真空紫外 ( $1 \sim 10 \text{ nm}$ ) 区内。

本文计算中, 多重组态混合相互作用的效果, 可从各组态对本征矢量贡献的份额得知, 如在 ErLIX 离子的  $^1P_13p(1/2, 1/2)_1$  能

表 1  $58 \leq Z \leq 71$  类氦离子的相对基态  $2p^{61}S_0$  的能级 ( $\text{cm}^{-1}$ )

LS	谱项符号 J-J	总量子数 J	CeIII	PrL	NdLI	PmLII
$^3P_2$	$3s(3/2, 1/2)$	2	59780476	41245506	42785689	44351365
$^3P_1$	$3s(3/2, 1/2)$	1	39731082	41296039	42837369	44404202
$^1P_1$	$3s(1/2, 1/2)$	1	43463626	42571047	47123138	49020223
$^3P_0$	$3s(1/2, 1/2)$	0	43434057	45242789	47095584	48993054
$^3S_1$	$3p(3/2, 1/2)$	1	40562485	42098041	43659593	45246920
$^3D_2$	$3p(3/2, 1/2)$	2	40581358	42116690	43678012	45265101
$^3D_3$	$3p(3/2, 3/2)$	3	41545017	43161044	44808245	46486652
$^3D_1$	$3p(3/2, 3/2)$	1	41545793	43161915	44809223	46487750
$^1D_2$	$3p(3/2, 3/2)$	2	41469146	43236961	44885970	46566204
$^3P_0$	$3p(3/2, 3/2)$	0	41951087	43577678	45235474	46924514
$^1P_1$	$3p(1/2, 1/2)$	1	44257773	46086555	47959593	49877544
$^3P_1$	$3p(1/2, 3/2)$	1	45249887	47158737	49117319	51125979
$^3P_2$	$3p(1/2, 3/2)$	2	45277110	47187982	49148317	51159026
$^1S_0$	$3p(1/2, 1/2)$	0	44545935	46380691	48259854	50184032
$^3P_0$	$3d(3/2, 3/2)$	0	42490120	44126824	45794800	47494085
$^3P_1$	$3d(3/2, 3/2)$	1	42544349	44182788	45852503	47553529
$^3P_2$	$3d(3/2, 5/2)$	2	42805251	44462516	46152245	47874524
$^3F_2$	$3d(3/2, 3/2)$	2	42609784	44248759	45918989	47620509
$^3F_3$	$3d(3/2, 3/2)$	3	4550174	44208305	45877072	47577103
$^3F_4$	$3d(3/2, 5/2)$	4	42767277	44423495	46112153	47833337
$^1F_3$	$3d(3/2, 5/2)$	3	42866391	44524971	46216009	47939586
$^1D_2$	$3d(1/2, 3/2)$	2	46265662	48197612	50179113	52211079
$^3D_1$	$3d(3/2, 5/2)$	1	43046995	44710786	46406561	48134097
$^3D_2$	$3d(1/2, 5/2)$	2	46500260	48451836	50454178	52508252
$^3D_3$	$3d(1/2, 5/2)$	3	46524580	48476519	50479208	52533614
$^1F_1$	$3d(1/2, 3/2)$	1	46415621	48348687	50330974	52363274

续

LS	J-J	J	SmLIII	EuLIV	GdLV	TbLVI
$^3P_2$	$3s(3/2, 1/2)$	2	45942363	47558363	49199187	50864482
$^3P_1$	$3s(3/2, 1/2)$	1	45996368	47613546	49255560	50922055
$^1P_1$	$3s(1/2, 1/2)$	1	50962898	52951729	54897476	57070794
$^3P_0$	$3s(1/2, 1/2)$	0	50935931	52924850	54960612	57043897
$^3S_1$	$3p(3/2, 1/2)$	1	46859804	48497999	50161268	51849244
$^3D_2$	$3p(3/2, 1/2)$	2	46877738	48515676	50178678	51866474
$^3D_3$	$3p(3/2, 3/2)$	3	48196307	49937242	51709501	53513116
$^3D_1$	$3p(3/2, 3/2)$	1	48197538	49938617	51711031	53514812
$^1D_2$	$3p(3/2, 3/2)$	2	48277706	50020508	51794655	53600179
$^3P_0$	$3p(3/2, 3/2)$	0	48644842	50396495	52179521	53993957
$^1P_1$	$3p(1/2, 1/2)$	1	51841091	53850943	55907838	58012544
$^3P_1$	$3p(1/2, 3/2)$	1	53185565	55296929	57460883	59678184
$^3P_2$	$3p(1/2, 3/2)$	2	53221056	55335396	57503068	59725142
$^1S_0$	$3p(1/2, 1/2)$	0	52154062	54170504	56234149	58245767
$^3P_0$	$3d(3/2, 3/2)$	0	49224726	50986757	52780229	54605170
$^3P_1$	$3d(3/2, 3/2)$	1	49285909	51040673	52844869	54671521
$^3P_2$	$3d(3/2, 5/2)$	2	49629445	51417093	53237571	55090957
$^3F_2$	$3d(3/2, 3/2)$	2	49353363	51117587	52913229	54740317
$^3F_3$	$3d(3/2, 3/2)$	3	49308459	51071155	52865246	54690758
$^3F_4$	$3d(3/2, 5/2)$	4	49587140	51373648	53192963	55045165
$^1F_3$	$3d(3/2, 5/2)$	3	49695800	51484734	53506492	55161154
$^1D_2$	$3d(1/2, 3/2)$	2	54294460	56430246	58619465	60863180
$^3D_1$	$3d(3/2, 5/2)$	1	49894227	51686908	53512286	55370469
$^3D_2$	$3d(1/2, 5/2)$	2	5461057	56775637	58991073	61262484
$^3D_3$	$3d(1/2, 5/2)$	3	54640736	56801617	59017338	61289018
$^1F_1$	$3d(1/2, 3/2)$	1	54446325	56580768	58766952	61004595

续

<i>LS</i>	<i>J-J</i>	<i>J</i>	DyLVII	HoLVIII	ErLIX
$^3P_2$	3s(3/2, 1/2)	2	52554042	54267536	56904673
$^3P_1$	3s(3/2, 1/2)	1	52612827	54327544	56065918
$^1P_1$	3s(1/2, 1/2)	1	59202525	61382444	63614411
$^3P_0$	3s(1/2, 1/2)	0	59175561	61356393	63587259
$^3S_1$	3p(3/2, 1/2)	1	53561965	55298845	57059692
$^3D_2$	3p(3/2, 1/2)	2	53578803	55315378	57075906
$^3D_3$	3p(3/2, 3/2)	3	55348134	57214590	59112529
$^3D_1$	3p(3/2, 3/2)	1	55350006	57216650	59114786
$^1D_2$	3p(3/2, 3/2)	2	55437172	57305537	59205451
$^3P_0$	3p(3/2, 3/2)	0	55839851	57717245	59626184
$^1P_1$	3p(1/2, 1/2)	1	60165857	62368609	64621663
$^3P_1$	3p(1/2, 3/2)	1	61949414	64274868	66654222
$^3P_2$	3p(1/2, 3/2)	2	62002725	64336973	66729088
$^1S_0$	3p(1/2, 1/2)	0	60506159	62716159	64976633
$^3P_0$	3d(3/2, 3/2)	0	56461635	58349662	60269259
$^3P_1$	3d(3/2, 3/2)	1	56529683	58419390	60340684
$^3P_2$	3d(3/2, 5/2)	2	56977364	58896883	60849617
$^3F_2$	3d(3/2, 3/2)	2	56598907	58489036	60410749
$^3F_3$	3d(3/2, 3/2)	3	56547744	58436242	60356250
$^3F_4$	3d(3/2, 5/2)	4	56930366	58848357	60800142
$^1F_3$	3d(3/2, 5/2)	3	57048831	58969617	60923614
$^1D_2$	3d(1/2, 3/2)	2	63162508	65518607	67932678
$^3D_1$	3d(3/2, 5/2)	1	47261585	59185742	61143051
$^3D_2$	3d(1/2, 5/2)	2	63591043	65977964	68424509
$^3D_3$	3d(1/2, 5/2)	3	63617830	66004988	68451754
$^1P_1$	3d(1/2, 3/2)	1	63291849	65624157	67995762

续

<i>LS</i>	<i>J-J</i>	<i>J</i>	TmLX	YbLXI	LuLXII
$^3P_2$	3s(3/2, 1/2)	2	57765127	59548630	61354744
$^3P_1$	3s(3/2, 1/2)	1	57827620	59612384	61419774
$^1P_1$	3s(1/2, 1/2)	1	65896304	68230101	70616690
$^3P_0$	3s(1/2, 1/2)	0	65869045	68202731	70589210
$^3S_1$	3p(3/2, 1/2)	1	58844197	60652045	62482890
$^3D_2$	3p(3/2, 1/2)	2	58860077	60667576	62498056
$^3D_3$	3p(3/2, 3/2)	3	61041991	63003023	64995664
$^3D_1$	3p(3/2, 3/2)	1	61044455	63005706	64998574
$^1D_2$	3p(3/2, 3/2)	2	61136911	63099966	65094653
$^3P_0$	3p(3/2, 3/2)	0	61566714	63538885	65542738
$^1P_1$	3p(1/2, 1/2)	1	66925917	69282306	71691807
$^3P_1$	3p(1/2, 3/2)	1	69086040	71567167	74093495
$^3P_2$	3p(1/2, 3/2)	2	69180323	71691976	74265412
$^1S_0$	3p(1/2, 1/2)	0	67288486	69652656	72070126
$^3P_0$	3d(3/2, 3/2)	0	62220579	64203563	66218287
$^3P_1$	3d(3/2, 3/2)	1	62293608	64278208	66294521
$^3P_2$	3d(3/2, 5/2)	2	62835669	64855149	66908157
$^3F_2$	3d(3/2, 3/2)	2	62364089	64349108	66365842
$^3F_3$	3d(3/2, 3/2)	3	62307945	64291241	66306222
$^3F_4$	3d(3/2, 5/2)	4	62784923	64803110	66854804
$^1F_3$	3d(3/2, 5/2)	3	62910925	64931660	66985921
$^1D_2$	3d(1/2, 3/2)	2	70405977	72939806	75535531
$^3D_1$	3d(3/2, 5/2)	1	63133623	65157574	67215009
$^3D_2$	3d(1/2, 5/2)	2	70931994	73501780	76135298
$^3D_3$	3d(1/2, 5/2)	3	70959442	73529416	76163105
$^1P_1$	3d(1/2, 3/2)	1	70689390	73194424	75771947

表2 类氙离子某些  $3l-3l'$  的跃迁波长计算值(nm)

Ions	$^3P_{13s}^1D_{23p}$	$^1P_{13s}^3P_{23p}$	$^3D_{33p}^3F_{23d}$	$^3D_{23p}^3F_{33d}$
Ce II	5.2964	5.5142	9.3917	5.0266
Pr L	5.1521	5.2166	9.1935	4.7810
Nd LI	4.8813	4.9378	9.0029	4.5474
Pm LII	4.6253	4.6755	8.8194	4.3252
Sm LIII	4.3834	4.4284	8.6426	4.1140
Eu LIV	4.1546	4.1952	8.4720	3.9131
Gd LV	3.9384	3.9752	8.3075	3.7222
Tb LVI	3.7339	3.7674	8.1486	3.5407
Dy LVII	3.5406	3.5711	7.9950	3.3682
Ho LVIII	3.3579	3.3858	7.8465	3.2042
Er LIX	3.1852	3.2106	7.7028	3.0484
Tu LX	3.0218	3.0450	7.5637	2.9003
Yb LXI	2.8673	2.8886	7.4289	2.7569
Lu LXII	2.7212	2.4407	7.2983	2.6259

级计算中,  $^1P_{13p}(1/2, 1/2)_1$  态的自身贡献分量为  $9.9956 \times 10^{-1}$ ; 态  $^3S_{13p}(3/2, 1/2)_1$  为  $3.37 \times 10^{-4}$ ; 态  $^3D_{13p}(3/2, 3/2)_1$  的贡献为  $8.53 \times 10^{-3}$ ;  $^3P_{13p}(1/2, 3/2)_1$  的贡献为  $1.21 \times 10^{-3}$ ; 而态  $2s2p^63p(1/2, 1/2)_1$  的贡献为  $2.27 \times 10^{-2}$ ,  $2s2p^63p(1/2, 3/2)_1$  的贡献为  $1.696 \times 10^{-2}$ , 可知, 组态  $2s2p^63p$  的贡献高于  $^3S_{13p}$ 、 $^3D_{13p}$ 、 $^3P_{13p}1 \sim 2$  个数量级。可见, 多重组态混合作用是明显的。这与文献 [4, 6] 的结论是一致的。

综上所述, MCDF-EAL 模型计算类氙离子精细结构能级和跃迁波长是一种快速省时的方法, 在考虑多重组态混合情况下, 计算结果、尤其是波长数据, 与实验值符合精度很高。因此许多文献<sup>[4, 5, 10]</sup> 的计算都使用 MCDF-EAL 模型。其次, 从我们的计算结果得知, 稀土元素的类氙离子, 其跃迁波长属于超真空紫外区, 因此肯定会有比 FeXVII、YXXX 更短波长的相干辐射输出。

本文计算工作是在 IBM 4381 计算机上

完成的。在此, 对给我们计算工作以大力支持和帮助的东北电力试验研究院计算中心致以诚挚的谢意!

### 参 考 文 献

- 1 R. C. Elton, *Appl. Opt.*, **14** (1), 97(1975)
- 3 A. V. Vinogradov *et al.*, *Sov. J. Quant. Electr.*, **10** (6), 754(1980)
- 3 U. Feldman *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **54** (5), 2188 (1983)
- 4 J. A. Cogordan and S. Lunell *et al.*, *Phys. Rev. A*, **32**(3), 1885(1985)
- 5 J. A. Cogordan and S. Lunell *et al.*, *Physica Scripta*, **33**(5), 406(1985)
- 6 J. A. Cogordan and S. Lunell *et al.*, *Physica Scripta*, **31**(6), 545(1985)
- 7 I. P. Grant *et al.*, *Comput. Phys. Commun.*, **21** (2), 207 (1980)
- 8 B. J. McKenzie *et al.*, *Comput. Phys. Commun.*, **21**(2), 233(1980)
- 9 I. P. Grant, *Adv. Phys.* **19** (82), 747(1970)
- 10 R. R. Haar and L. J. Curtis *et al.*, *Physica Scripta*, **35**(3), 296(1987)