

类氟 CoXIX, NiXX, CuXXI, ZnXXII, GaXXIII 和 GeXXIV 精细结构能级和跃迁波长 的相对论多组态 Dirac-Fock 计算

姜仁滨 王宛珏

(兰州铁道学院, 730070)

提要: 本文用相对论多组态 Dirac-Fock 广义平均能级模型(MCDF-EAL)计算了可能成为激光工作物质的类氟 CoXIX、NiXX、CuXXI、ZnXXII、GaXXIII 和 GeXXIV 的 $2s^2 2p^5$ 、 $2s 2p^6$ 、 $2s^2 2p^4 3s$ 、 $2s^2 2p^4 3p$ 组态的精细结构能级和若干 $3s-3p$ 组态跃迁波长值。大部份计算值都是本文预言值。

关键词: 类氟离子, 精细结构能级, MCDF 方法

Relativistic multiconfiguration Dirac-Fock calculation of fine-structure energy levels and transition wavelengths for F-like CoXIX, NiXX, CuXXI, ZnXXII, GaXXIII and GeXXIV

Jiang Renbin, Wang Wanjuan

(Lanzhou Railway College Lanzhou)

Abstract: In this paper, by the way of extended average level (EAL) model of relativistic multiconfiguration Dirac-Fock code, we have calculated fine-structure energies of $2s^2 2p^5$, $2s 2p^6$, $2s^2 2p^4 3s$, $2s^2 2p^4 3p$ configuration and some transition wavelengths of $2p^4 3s-2p^4 3p$ for F-like CoXIX, NiXX, CuXXI, ZnXXII, GaXXIII and GeXXIV ions which may be the candidates for lasing action. The most of the calculated values are predicted.

Key words: F-like ion, fine-structure energy, MCDF method

一、引言

高电离化离子能级和光谱的研究对热核聚变、等离子体诊断、天体物理,特别是对短波长激光器的研制都有着非常重要的意义。在理论上 Elton^[1]于1975年就已指出 $2p^{k-1}3p-2p^{k-1}3s$ 组态之间的跃迁可能形成真空紫外和软 X 射线的短波长激光,产生这种激光的工作物质可能是高电离化的 BeI—NeI 等电子序列离子。现在从实验上和理论上对可能成为激光工作物质的

高电离化的 NeI 等电子列离子即类 Ne 离子的能级和波长已进行了大量系统的研究^[2,3]。对可能成为激光工作物质的高电离化的类 F 离子的能级和波长的研究也日益受到重视^[4,5]，但还远不如类 Ne 离子那样系统全面。为此，我们在[6]中用相对论多组态 Dirac-Fock 方法系统地计算了类氟 SoXIII、TiXIV、VXV、CrXVI、MnXVII 和 FeXVIII 离子的 30 个精细结构能级和若干可能发射出的激光波长值，取得了很好的结果。除最低两能级外，能级的相对误差在 0.03~0.80% 之间，波长的相对误差在 0.15~2.07% 之间。现在我们又用同样的方法计算了 $27 \leq Z \leq 32$ 类氟离子的 30 个精细结构能级和若干可能发射出的激光波长。和已有的实验数据相比，相对误差一般比前文的都更小一些。由于在这个范围内的离子的实验数据非常缺乏，所以准确的理论计算就显得更加重要。

二、理论方法

在 MODF 方法中，单电子波函数是 Dirac 旋子

$$U_a(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_a(r) & X_a(\mathbf{r}) \\ iQ_a(r) & \bar{X}_a(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \quad (1)$$

组态波函数 $\phi(r, JM)$ 通过单电子波函数的 $j-j$ 耦合得到。原子态波函数为组态波函数的线性组合：

$$\psi_a(JM) = \sum_{r=1}^{n_a} O_r(\alpha) \phi(r, JM) \quad (2)$$

Dirac 旋子中的大小分量满足 Dirac-Fock 方程

$$\left. \begin{aligned} \frac{dP_a}{dr} + K_a \frac{P_a}{r} - \left(2C - \frac{\epsilon_a}{O} + \frac{Y_a}{O_r} \right) Q_a &= -\frac{X_a^{(p)}}{r} \\ \frac{dQ_a}{dr} - K_a \frac{Q_a}{r} - \left(-\frac{\epsilon_a}{O} + \frac{Y_a}{O_r} \right) P_a &= -\frac{X_a^{(q)}}{r} \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

均匀核电荷分布的核势为

$$V_{\text{nuc}}(r) = \begin{cases} -\frac{Z}{Z_r} \left(\frac{r}{R_{\text{nuc}}} \right) \left[3 - \left(\frac{r}{R_{\text{nuc}}} \right)^2 \right], & r \leq R_{\text{nuc}} \\ -\frac{Z}{r}, & r > R_{\text{nuc}} \end{cases} \quad (4)$$

其中

$$R_{\text{nuc}} = 2.2677 \times 10^{-5} A^{1/3},$$

广义平均能级由下式给出：

$$E_{\text{opt}} = \frac{\sum_r W_r H_{rr}}{\sum_s W_s}$$

三、计算结果

根据上述方法，使用我们在本院 VAX-11/785 机上进行过适当修改的 Grant^[7] 和 McKenzie^[8] 的程序包，并选用了均匀核电荷分布和广义平均能级模型 (EAL) 计算了类氟 CoXIX、NiXX、CuXXI、ZnXXII、GaXXIII、GeXXIV 离子的 $2s^2 2p^5$ 、 $2s 2p^6$ 、 $2s^2 2p^4 3s$ 和 $2s^2 2p^4 3p$ 组态的 30 个精细结构能级。在计算中同时考虑了 30 个相对论组态间的相互作用。在

能级中包括了作为微扰的 Breit 修正和量子电动力学 (Q. E. D) 修正的贡献。能级的计算值如表 1、表 2 所示。表中的数值都是以基态 $2p^5 P_{3/2}$ 的能量为零计算的, 单位是 cm^{-1} 。CoXIX 离子 $3s$ 能级的计算值和实验值^[9,11,12] 相比, 除第二个能级外, 相对误差在 0.17~0.75% 之间。各个离子的第一个能级的计算值和相应的实验值^[13] 相比, 相对误差由 CoXIX 的 0.75% 到 GeXXIV 的 0.054% 有规律地减小。波长的计算值和已知 NiXX 的 5 条谱线的实验值^[6] 相比, 相对误差在 0.22~0.77% 之间。波长列于表 3 中。

根据本文的计算发现文献[10]中关于 NiXX 的一个实验能级的名称有错。 $2s 2p^4(^3P) 3s^2 P_{2/2}$ 应为 $2s 2p^4(^3P) 3s^4 P_{3/2}$, 更正后已列于表 1 中。

本文的计算值大都没有实验值对比, 但根据前文^[6] 和本文的计算值和实验值的对比可知, 本文的计算值是相当准确的, 没有实验值对比的计算值也是可靠的。比 CuXXI 更重的离子的 $3s, 3p$ 组态所有能级和它们之间的一些跃迁波长是我们作出的理论预言。本文的计算结果可为类氟离子短波激光器的研制提供部份重要的原子参数。

Table 1 Energy levels of CoXIX, NiXX to the ground state (in cm^{-1})

| Terms | | | | CoXIX | | NiXX | | |
|---------------|---------------|--------------|--------------|---------|----------------------|---------|------------------|--|
| LS | | $j-j$ | J | Theor | Exp | Theor | Exp ^d | |
| $2p^5$ | $2P_{3/2}$ | $2p(0, 3/2)$ | $3/2$ | 0 | 0 | 0 | 0 | |
| | $1P_{1/2}$ | $2p(0, 1/2)$ | $1/2$ | 122514 | 121600 ^a | 144458 | 144000 | |
| $2s2p^6$ | $2S_{1/2}$ | $2s(0, 1/2)$ | $1/2$ | 1166919 | 1131850 ^b | 1236993 | 1202400 | |
| $2p^4(^3P)3s$ | $4P_{5/2}$ | $3s(2, 1/2)$ | $5/2$ | 6839109 | 6855900 ^a | 7500409 | | |
| | $4P_{3/2}$ | $3s(2, 1/2)$ | $3/2$ | 6868406 | 6882300 ^a | 7531131 | 7545000 | |
| $2p^4(^1D)3s$ | $4P_{1/2}$ | $3s(0, 1/2)$ | $1/2$ | 6934042 | 6944444 ^c | 7607350 | | |
| | $2P_{3/2}$ | $3s(1, 1/2)$ | $3/2$ | 6953700 | 6969100 ^a | 7635324 | 7649000 | |
| | $2P_{1/2}$ | $3s(1, 1/2)$ | $1/2$ | 6981222 | 6993000 ^a | 7662891 | 7677000 | |
| | $2D_{5/2}$ | $3s(2, 1/2)$ | $5/2$ | 7040508 | 7053200 ^a | 7724820 | 7736000 | |
| | $2D_{3/2}$ | $3s(2, 1/2)$ | $3/2$ | 7045103 | 7057400 ^a | 7730224 | 7742000 | |
| $2p^4(^1S)3s$ | $2S_{1/2}$ | $3s(0, 1/2)$ | $1/2$ | 7200222 | 7226900 ^a | 7838859 | | |
| $2p^4(^3P)3p$ | $4P_{5/2}$ | $3p(2, 1/2)$ | $5/2$ | 7103154 | | 7778590 | | |
| | $4P_{3/2}$ | $3p(2, 1/2)$ | $3/2$ | 7105972 | | 7782834 | | |
| | $4P_{1/2}$ | $3p(0, 1/2)$ | $1/2$ | 7137295 | | 7818383 | | |
| | $4D_{7/2}$ | $3p(2, 3/2)$ | $7/2$ | 7138992 | | 7819212 | | |
| | $4D_{5/2}$ | $3p(2, 3/2)$ | $5/2$ | 7141072 | | 7821984 | | |
| | $2P_{1/2}$ | $3p(1, 1/2)$ | $1/2$ | 7207922 | | 7902999 | | |
| | $4D_{1/2}$ | $3p(2, 3/2)$ | $1/2$ | 7230702 | | 7925957 | | |
| | $4D_{3/2}$ | $3p(2, 3/2)$ | $3/2$ | 7243111 | | 7944450 | | |
| | $2P_{3/2}$ | $3p(0, 3/2)$ | $3/2$ | 7243924 | | 7954263 | | |
| | $2D_{5/2}$ | $3p(2, 1/2)$ | $5/2$ | 7263521 | | 7948637 | | |
| | $4S_{3/2}$ | $3p(2, 1/2)$ | $3/2$ | 7264956 | | 7965293 | | |
| | $2S_{1/2}$ | $3p(2, 3/2)$ | $1/2$ | 7273802 | | 7969190 | | |
| | $2D_{3/2}$ | $3p(1, 1/2)$ | $3/2$ | 7299551 | | 7998071 | | |
| | $2p^4(^1D)3p$ | $2F_{5/2}$ | $3p(2, 3/2)$ | $5/2$ | 7313783 | | 8004317 | |
| | | $2F_{7/2}$ | $3p(2, 3/2)$ | $7/2$ | 7325560 | | 8029419 | |
| $2D_{3/2}$ | | $3p(2, 3/2)$ | $3/2$ | 7342053 | | 8045173 | | |
| $2D_{5/2}$ | | $3p(1, 3/2)$ | $5/2$ | 7353185 | | 8058128 | | |
| $2P_{3/2}$ | | $3p(1, 3/2)$ | $2/2$ | 7419150 | | 8120921 | | |
| | $2P_{1/2}$ | $3p(1, 3/2)$ | $1/3$ | 7456799 | | 8168232 | | |

a: cf. [11]; b: cf. [12]; c: cf. [9]; d: cf. [10]

Table 2 Energy levels of CuXXI, ZnXXII, GaXXIII, GeXXIV to the ground state(in cm⁻¹)

| Terms | | | | CuXXI | ZnXXII | GaXXIII | GeXXIV | |
|-----------------------------|-----------------------------|-------------------------|------------|---------|---------|----------|----------|----------|
| LS | | <i>j-j</i> | <i>J</i> | Theor | Theor | Theor | Theor | |
| 2p⁵ | 2P_{3/2} | 2p(0, 3/2) | 3/2 | 0 | 0 | 0 | 0 | |
| | 1P_{1/2} | 2p(0, 1/2) | 1/2 | 169280 | 197231 | 228574 | 262581 | |
| 2s2p⁵ | 2S_{1/2} | 2s(0, 1/2) | 1/2 | 1310194 | 1386788 | 1467040 | 1551239 | |
| 3p⁴(3P)3s | 4P_{5/2} | 3s(2, 1/2) | 5/2 | 8191371 | 8911906 | 9061949 | 10441413 | |
| | 4P_{3/2} | 3s(2, 1/2) | 3/2 | 8223427 | 8945224 | 9696475 | 10477105 | |
| | 4P_{1/2} | 3s(0, 1/2) | 1/2 | 8310174 | 9042274 | 9803521 | 10593820 | |
| 3p⁴(3P)3s | 2P_{3/2} | 3s(1, 1/2) | 3/2 | 8349577 | 9096624 | 9876668 | 10689901 | |
| | 2P_{1/2} | 3s(1, 1/2) | 1/2 | 8377249 | 9124545 | 9905006 | 10718813 | |
| | 2p⁴(1D)3s | 2D_{5/2} | 3s(2, 1/2) | 5/2 | 8441651 | 9191188 | 9973653 | 10776811 |
| 2D_{3/2} | | 3s(2, 1/2) | 3/2 | 8447908 | 9198335 | 9982925 | 10785988 | |
| 2p⁴(1S)3s | 2S_{1/2} | 3s(0, 1/2) | 1/2 | 8608139 | 9357983 | 10138357 | 10949204 | |
| 3p⁴(3P)3p | 4P_{5/2} | 3p(2, 1/2) | 5/2 | 8483746 | 9218544 | 9981719 | 10789253 | |
| | 4P_{3/2} | 3p(2, 1/2) | 3/2 | 8489368 | 9225458 | 9991026 | 10798258 | |
| | 4P_{1/2} | 3p(0, 1/2) | 1/2 | 8529988 | 9271340 | 10043300 | 10845869 | |
| | 4D_{7/2} | 3p(2, 3/2) | 7/2 | 8529966 | 9272031 | 10044596 | 10847658 | |
| | 4D_{5/2} | 3p(2, 3/2) | 5/2 | 8533236 | 9274843 | 10046836 | 10849224 | |
| | 2P_{1/2} | 3p(1, 1/2) | 1/2 | 8630734 | 9390827 | 10176706 | 10979695 | |
| | 4D_{1/2} | 3p(1, 3/2) | 1/2 | 8653507 | 9409587 | 10189164 | 11014515 | |
| | 4D_{3/2} | 3p(1, 3/2) | 3/2 | 8666941 | 9413260 | 10204863 | 11027384 | |
| | 2P_{3/2} | 3p(0, 3/2) | 3/2 | 8679228 | 9447695 | 10250140 | 11075806 | |
| | 2D_{5/2} | 3p(2, 1/2) | 5/2 | 8688899 | 9465927 | 10257008 | 11086841 | |
| | 4S_{3/2} | 3p(2, 1/2) | 3/2 | 8699977 | 9465231 | 10278281 | 11114098 | |
| | 2S_{1/2} | 3p(2, 3/2) | 1/2 | 8704473 | 9473702 | 10276927 | 11114394 | |
| | 2D_{3/2} | 3p(1, 1/2) | 3/2 | 8726309 | 9481958 | 10278171 | 11119920 | |
| | 3p⁴(1D)3p | 2F_{5/2} | 3p(2, 3/2) | 5/2 | 8729170 | 9493034 | 10289882 | 11128233 |
| | | 2F_{7/2} | 3p(2, 3/2) | 7/2 | 8766662 | 9537548 | 10342372 | 11181421 |
| | | 2D_{3/2} | 3p(1, 3/2) | 3/2 | 8781713 | 9551931 | 10356126 | 11194591 |
| 2D_{5/2} | | 3p(2, 3/2) | 5/2 | 8796435 | 9568375 | 10374247 | 11214343 | |
| 2P_{3/2} | | 3p(1, 3/2) | 3/2 | 8855060 | 9621806 | 10421433 | 11254200 | |
| | 2F_{1/2} | 3p(1, 3/2) | 1/2 | 8913095 | 9691641 | 10504162 | 11350939 | |

Table 3 Some transition wavelengths (\AA) of $3s-3p$ configuration for F-like

| Transitions | wavelengths | CoXXIX | NiXX | CuXXI | ZnXXII | GaXXIII | HeXXIV |
|---------------------|--|--------|------------------------------|--------|--------|---------|--------|
| $(^3P) 3s^4P_{5/2}$ | λ_c | 234.83 | 215.11 | 196.62 | 180.73 | 162.25 | 148.66 |
| $(^3P) 3p^4S_{3/2}$ | λ_0 $\Delta\lambda/\lambda_0$ | | | | | | |
| $(^3P) 3s^4P_{1/2}$ | λ_c | 302.19 | 279.37 | 256.54 | 236.43 | 210.63 | 192.20 |
| $(^3P) 3p^4S_{3/2}$ | λ_0 $\Delta\lambda/\lambda_0$ | | | | | | |
| $(^1D) 3s^2D_{3/2}$ | λ_c | 336.76 | 315.51 | 299.58 | 282.81 | 267.95 | 244.74 |
| $(^1D) 3p^2D_{3/2}$ | λ_0 $\Delta\lambda/\lambda_0$ | | | | | | |
| $(^3P) 3s^2F_{3/2}$ | λ_c | 321.28 | 303.06 | 285.39 | 271.29 | 249.00 | 235.74 |
| $(^3P) 3p^4S_{3/2}$ | λ_0 $\Delta\lambda/\lambda_0$ | | | | | | |
| $(^3P) 3s^4P_{5/2}$ | λ_c | 333.46 | 313.67 | 295.34 | 277.68 | 261.34 | 246.16 |
| $(^3P) 3p^4D_{7/2}$ | λ_0 $\Delta\lambda/\lambda_0$ | | 312.66 ^e 0.32% | | | | |
| $(^1D) 3s^2D_{5/2}$ | λ_c | 350.81 | 328.30 | 307.68 | 288.72 | 271.21 | 247.15 |
| $(^1D) 3p^2F_{7/2}$ | λ_0 $\Delta\lambda/\lambda_0$ | | 325.97 ^e 0.71% | | | | |
| $(^3P) 3s^4P_{3/2}$ | λ_c | 366.75 | 343.82 | 322.78 | 303.38 | 285.42 | 268.73 |
| $(^3P) 3p^4D_{5/2}$ | λ_0 $\Delta\lambda/\lambda_0$ | | 346.50 ^e 0.77% | | | | |
| $(^1D) 3s^2D_{3/2}$ | λ_c | 372.19 | 364.84 | 355.54 | 339.33 | 325.78 | 292.19 |
| $(^1D) 3p^2F_{5/2}$ | λ_0 $\Delta\lambda/\lambda_0$ | | 365.63 ^e 0.22% | | | | |
| $(^3P) 3s^1P_{5/2}$ | λ_c | 378.72 | 359.48 | 342.03 | 326.12 | 312.72 | 287.49 |
| $(^3P) 3p^4P_{5/2}$ | λ_0 $\Delta\lambda/\lambda_0$ | | 356.89 ^e 0.73% | | | | |

e: cf. [5]

参 考 文 献

- 1 R. C. Elton, *Appl. Opt.*, **14**(1), 97 (1975)
- 2 J. A. Cogordan *et al.*, *Physica Scripta*, **33**(5), 406 (1986)
- 3 张同发 *et al.*, *中国激光*, **16**(6), 342 (1989)
- 4 A. Trigueiros, C. Jupen, *Physica Scripta*, **31**, 359 (1985)
- 5 B. Juysics, *Nuclear Instrument and Methods in Physics Research*, **B31**, 116 (1989)
- 6 姜仁滨, 王宛珏, *中国激光*, (待发表)
- 7 I. P. Grant *et al.*, *Comput. Phys. Commun.*, **21**(2), 207 (1980)
- 8 B. J. McKenzie *et al.*, *Comput. Phys. Commun.*, **21**(2), 207 (1980)
- 9 张正泉 *et al.*, *光学学报*, **7**(4), 324 (1987)
- 10 C. Corliss *et al.*, *J. Phys. Chem. Refer. Data*, **10**(1), 280 (1981)
- 11 U. Feldman *et al.*, *J. Opt. Soc. Am.*, **63**(11), 1445 (1973)
- 12 J. Sugar *et al.*, *J. Phys. Chem. Refer. Data*, **10**(4), 1162 (1981)
- 13 B. Edlen, *Phys. Scripta*, **28**(1), 51 (1983)