

21 ≤ Z ≤ 26 类氟离子精细结构能级和跃迁波长的 MCDF 计算

王 宛 珏

(兰州铁道学院基础课部, 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 ScXIII、TiXVI、VXV、CrXVI、MnXVII 和 FeXVIII 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 $3s-3p$ 跃迁波长值。预言了一些离子的 $3p$ 组态能级和 $3s-3p$ 跃迁波长值。

关键词: 类氟离子, 精细结构能级, MCDF 方法

MCDF calculation of fine-structure energy levels and transition wavelengths for F-like ions of $21 \leq Z \leq 26$

Wang Wanjuan

(Department of Basic Courses, Lanzhou Railway College, Lanzhou)

Abstract: By means of extended average level model of relativistic multiconfiguration Dirac-Fock (MCDF-EAL) code, we have calculated fine-structure energy levels of $2s^2 2p^5$, $2s 2p^6$, $2s^2 2p^4 3s$, $2s^2 2p^4 3p$ configurations and some transition wavelengths of $3s-3p$ for F-like ions of $21 \leq Z \leq 26$, which may be the candidates for lasing action. Some energy levels of $3p$ configuration and transition wavelengths of $3s-3p$ are predicted.

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

根据 MCDF 理论^[1], 使用我们在本院 VAX-11/785 计算机上调试成功的 Grant^[2] 和 Mckenzie^[3] 的程序包计算了类氟 ScXIII、TiXIV、VXV、CrXVI、MnXVII 和 FeXVIII 离子的 $1s^2 2p^5$ 、 $2s 2p^6$ 、 $2s^2 2p^4 3s$ 、 $2s^2 2p^4 3p$ 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, 即使 30 个相对论组态参加混合。它们是 $2s^2 2p^2 2p^3$ 、 $2s^2 2p 2p^4$ 、 $2s 2p^2 2p^4$ 、 $2s 2p^2 2p^2 3s$ 的三个组态, $2s^2 2p 2p^3 3s$ 的四个组态, $2s^2 2p^4 3s$ 、 $2s^2 2p^2 2p^2 3p$ 的三个组态, $2s^2 2p^2 2p^2 3p$ 的五个组态, $2s^2 2p$ 、 $2p^3 3p$ 的四个组态, $2s^2 2p^2 2p^2 3p$ 的七个组态。它们包含七个了能产生激光跃迁的全部组态其他的未计。

三、计算结果和讨论

在表 1 中, 一并列出了上述六个类氟离子精细结构能级本文计算值和已有的实验值^[6,7]。表

Table 1 Energy levels of ScXIII, TiXIV, Vxv, CrXXVI, MnXVII, FeXVIII (cm⁻¹)

n	terms	J	Sc XIII		TiXIV		Vxv		CrXXVI		MnXVII		FeXVIII	
			Theor	Exp ^a	Theor	Exp ^b	Theor	Exp ^a	Theor	Exp ^a	Theor	Exp ^a	Theor	Exp ^a
1	2s ² 2p ² 2p ³	3/2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
2	2s ² 2p-2p ⁴	1/2	37277	37900	46518	47200	58950	58320	70043	70600	84702	85500	101559	102650
3	2s ² 2p ² 2p ⁴	1/2	791390	763590	847621	819810	905666	878190	965721	938090	1027996	1000000	1092709	1064610
4	2s ² 2p-2p ² 3s	5/2	3498153	3513300	3979924	3995165	4491974	4506100	5033896	5048700	5605777	5619900	6207528	6221600
5	2s ² 2p ² 2p ² 3s	3/2	3515672	3530600	3999869	4014945	4514161	4528400	5058124	5072500	5631853	5644600	6235288	6248800
6	2s ² 2p-2p ² 3s	1/2	3532332	3547200	4021889	4036045	4542796	4556800	5094611	5110200	5677298	5690900	6290540	6310500
7	2s ² (2p-2p ³)13s	3/2	3540247	3554800	4029295	4043430	4550253	4564300	5102953	5118200	5687657	5700900	6304514	6318700
8	2s ² (2p-2p ³)13s	1/2	3560473	3574100	4051962	4065750	4574898	4588900	5129017	5143500	5714613	5728700	6331898	6343600
9	2s ² (2p-2p ³)23s	5/2	3606858	3619500	4099898	4112700	4624850	4638500	5180722	5193500	5768642	5780000	6388485	6400800
10	2s ² (2p-2p ³)23s	3/2	3607977	3620800	4101406	4114075	4626557	4639900	5183246	5197000	5771789	5783500	6392328	6404400
11	2s ² 2p-2p ² 3p-	3/2	3674374		4171406	4182685	4697570		5234567		5841639		6457462	
12	2s ² 2p-2p ² 3p-	5/2	3678184		4173953	4183830	4699870		5255791		5841713		6458821	
13	2s ² 2p ² 2p ² 3p	7/2	3690560		4189266	4200090	4717879		5276975		5866584		6486623	
14	2s ² 2p-2p ² 3p	1/2	3691228		4190352	4205890	4720051		5279967		5870099		6489234	
15	2s ² 2p ² 2p ² 3p	5/2	3696339		4194407	4210405	4723229		5281139		5870006		6490389	
16	2s ² 2p-2p ² 3p	3/2	3717062		4218755	4221200	4752251		5317722		5915220		6542375	
17	2s ² (2p-2p ³)13p-	1/2	3717095		4219933	4229530	4753964		5319071		5915400		6545380	
18	2s ² (2p-2p ³)13p-	3/2	3723964		4229549	4232160	4767266		5337581		5936763		6567650	
19	2s ² 2p ⁴ 3s	1/2	3730943	3718400	4234366	4237360	4769605	4757600	5337250	5324400	5938942	5922900	6574170	6558200
20	2s ² (2p-2p ³)13p	5/2	3731760		4234962	4244010	4770591		5337791		5939742		6574888	
21	2s ² (2p-2p ³)13p	3/2	3739759		4246230	4244915	4784798		5355585		5958834		6594750	
22	2s ² (2p-2p ³)13p	1/2	3739765		4246706	4257150	4785715		5356901		5960492		6596593	
23	2s ² 2p ² 2p ² 3p-	1/2	3782319		4289117	4264070	4827506		5379560		5997553		6620355	
24	2s ² (2p-2p ³)23p-	5/2	3789283		4298036	4264860	4841870		5404726		5999472		6633381	
25	s ² (2p-2p ³)3p	7/2	3806163		4308976	4303140	4838785		5411662		6016923		6654068	
26	2s ² 2p-2p ² 3p	3/2	3805156		4313913	4312210	4854094		5424914		6024818		6654733	
27	2s ² (2p-2p ³)23p	3/2	3809643		4319725	4324920	4863524		5432570		6035437		6672116	
28	2s ² (2p-2p ³)23p	5/2	3820245		4326375	4329210	4861751		5435854		6042302		6681329	
29	2s ² (2p-2p ³)23p-	3/2	3875882		4387902	4378635	4931151		5505698		6111753		6740735	
30	2s ² (2p-2p ³)23p	1/2	3876576		4392421	4390320	4940370		5520543		6133191		6778978	

a: cf[6]; b: cf[7]

中的数值都是以基态 $2s^2 2p^2 2p^3 (J=3/2)$ 的能量为零点计算的, 单位是波数 (cm^{-1})。从表 1 列出的数据可知: 除最低两个能级外, 计算值与实验值间的相对误差在 0.03~0.80% 之间。两者符合很好。本文同时还计算了作为等离子体激光工作物质 $3s-3p$ 跃迁所可能发射出的若干激光波长值。波长的计算值及其与已有的实验值^[8]间的相对误差(在波长值下的括号中, “%”没写出)列在表 2 中。从表 2 列出的数据可知, 波长处于真空紫外区内, 波长随 Z 的增大而减小, $3s-3p$ 跃迁波长的计算值和实验值间的相对误差在 0.24~2.76% 之间。 $3s-2p$ 跃迁波长的相对误差比 $3s-3p$ 跃迁波长的相对误差小得多, 一般在 0.5% 以下。由于它们与激光谱线无关, 故在表中未列出。

组态混合系数的大小反映了组态相互作用的强弱。由对 Mn XV II 的计算得知, 在基态 $2s^2 2p^2 2p^3 (J=3/2)$ 中, 它自身的混合系数是 0.9993, 而 $2s^2 2p^2 2p^3 p (J=3/2)$ 态的混合系数

Table 2 Wavelengths(Å) for some $3s-3p$ lines in F-like ions

Transition	ScXIII	TiXIV	VXV	CrXVI	MnXVII	FeXVIII
4-11	567.469	522.242 (2.07) b	486.391	453.163 (1.46) c	423.887	400.106 (0.57) c
-12	555.460	515.387 (2.76) b	481.100	450.664 (2.00) c	423.844	397.942 (1.11) c
-13	519.732	477.687 (0.67) c	442.664	411.389 (0.69) c	383.425	358.301 (0.65) c
-15	504.068	466.237 (0.35) b	433.548	404.460	378.460	353.531
5-11	630.112	582.965 (2.21) b	545.230	509.054	476.563	450.098
-14	569.619	524.981 (0.24) b	485.676	450.769	419.734	393.785
-15	552.892	514.038 (0.47) b	479.690	448.400 (0.44) c	419.898	392.002 (0.15) c
6-11	704.017	668.820 (1.93) b	646.103	625.172	608.306	599.082
-14	629.342	593.602 (0.82) b	564.159	539.502	518.670	503.286
7-15	639.828	605.649 (1.13) b	580.127	561.211	548.399	537.996
-22	501.208	459.958 (1.70) b	424.697	393.781	366.522	342.361
8-14	764.789	722.596 (1.27) b	688.928	662.471	643.145	635.582
-22	557.749	513.495 (1.72) b	474.345	438.820	406.704	377.793
9-25	501.744	478.290	466.843	433.013 (0.71) c	402.761	376.530 (0.97) c
10-22	758.794	688.231 (1.53) b	628.306	575.854	529.933	489.560

b: cf[7]; c: cf[8]

是 0.02682, $2s^2(2p-2p^3)_23p_-$ 态的混合系数是 0.01753, $2s^2(2p-2p^3)_13p_-(J=3/2)$ 态的混合系数是 0.01541。即后三个态对基态都有明显的相互作用; 在 $2s^2(2p-2p^3)_13p(J=3/2)$ 态中, 它自身的混合系数是 0.6217, 而 $2s^2(2p-2p^3)_23p(J=3/2)$ 态的混合系数是 0.4483, $2s^2(2p-2p^3)_23p_-(J=3/2)$ 态的混合系数是 0.4130, $2s^2(2p-2p^3)_1, 3p(J=3/2)$ 态的混合系数是 0.2369, 基态的混合系数是 0.01069。这说明 $3p$ 组态间的作用是很强的, 基态是 $2p$ 组态, 对 $3p$ 组态的作用就弱得多。其他离子亦如此。

在计算的能级中包括了作为微扰的 Breit 修正及包括真空极化和自能在内的量子电动力学修正。离子越重, 修正越明显。能级和波长的相对误差一般都随 Z 的增大而减小。这是和非相对论计算不同之处。这是由于 Z 越大, 相对论效应和场论效应都更显著的原因。

由于目前类氟离子的能级和波长的实验数据和理论数据都比较缺乏, 特别是和可能产生激光跃迁可有的 $3p$ 组态能级及可能产生的激光波长值很缺乏。因此, 本文的计算结果可为激光谱线的识别提供必要的原子参数。

参 考 文 献

- 1 I. P. Grant, *Adv. Phys.*, **19** (82), 747 (1970)
- 2 I. P. Grant *et al.*, *Comput. Phys. Commun.*, **21** (2), 207 (1980)
- 3 B. J. McKenzie *et al.*, *Comput. Phys. Commun.*, **21** (2), 233 (1980)
- 4 J. A. Cogordan *et al.*, *Physica Scripta*, **33** (5), 406 (1986)
- 5 张同发, 梁爱华, 潘守甫, 中国激光, **16** (6), 342 (1989)
- 6 U. Feldman *et al.*, *J. Opt. Soc. Am.*, **63** (11), 1445 (1973)
- 7 C. Jupen *et al.*, *Phys. Scripta*, **32** (6), 527 (1985)
- 8 C. Jupen, *Nuclear Instrument and Methods in Physics Research*, **B31**, 166 (1988)