

类锂硅离子的辐射跃迁几率*

朱顺人 潘守甫 周忠源

(吉林大学原子与分子物理研究所, 长春 130023)

提要: 在多组态 Dirac-Fock (MCDF) 理论框架下, 精细地计算了类锂硅离子各能级 $(n_l)_i - (n_l)_k$ 间 ($n_i \leq 5, n_k \leq 12$) 的电偶极辐射跃迁几率, 并据此得到了 $n \leq 6$ 各能级的辐射衰变速率; 发现了高荷电类锂离子辐射跃迁的新规律。

关键词: 类锂硅离子软 X 射线激光, MCDF, 辐射跃迁几率, 负三次方规律

Radiative transition probabilities for Li-like Si

Zhu Qiren, Pan Shoufu, Zhou Zhongyuan

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

Abstract: The electric dipole radiative transition probabilities between levels $n_l l_i - n_l l_k$ ($n_i \leq 5, n_k \leq 12$) for Li-like Si have been calculated within multi-configuration Dirac-Fock framework, and the radiative decay rates of the levels ($n \leq 6$) were obtained. The new regularity was found for the transition of Li-like Si.

Key words: Li like Si soft-X-ray laser, MCDF, radiative transition probability, minus 3rd power regularity

为了彻底澄清类锂硅离子软 X 射线激光^[1]物理, 需要准确地知道各种主要的原子基元过程的数据。这些基元过程可分为两大类: 辐射过程和电子碰撞过程; 而对每类过程, 不但需要大量的数据, 而且需要知道它们变化的确切规律, 才能满足严格求解动力学方程组的要求。本文即是对该激光物理所涉及的辐射过程向上述目标所做的尝试。

一、计算方法

本文对于辐射过程的计算, 是运行 MCDF 程序包^[2], 连同其横向 Breit 修正和量子电动力学修正程序^[3], 以及我们最近自编的计算相对论辐射跃迁几率的后续程序^[4]完成的。对于每对能级, 均分别在 Coulomb 规范和长度规范下求得两个跃迁几率值, 它们的相对偏差非常灵敏地反映了所得波函数的准确度。对于本文所涉及的大部分跃迁, 这种偏差均在 1% 之内; 对于少数由于径向相消效应^[5]所造成的弱跃迁, 其相对偏差亦在 5% 之内。取它们的算术平

收稿日期: 1990年5月17日

* 本文是在国家教委博士点基金与中国原子分子数据研究点基金的资助下完成的。

均值作为该对能级间跃迁几率的理论值。

表 1 列出了 $n \leq 12$, $l \leq 3$ 全部能级值。对于 $n \leq 5$, 给出了所有精细结构能级值 (包括 $l=4$), 当 $n \geq 6$ 时, 由于相对论效应明显减弱, 已无必要列出精细能级值。值得说明的是, 表中虽

Table 1 Si¹¹⁺ fine structure levels (eV)

Level	Energy	Level	Energy	Level	Energy	Level	Energy
2s	0	5s	442.909	7s	482.570	10f	503.680
2p _{1/2}	23.954	5p _{1/2}	444.275	7p	483.076	11s	506.899
2p _{3/2}	24.961	5p _{3/2}	444.340	7d	483.269	11p	507.028
3s	296.117	5d _{3/2}	444.838	7f	483.284	11d	507.078
3p _{1/2}	302.705	5d _{5/2}	444.860	8s	492.181	11f	507.082
3p _{3/2}	303.004	5f _{5/2}	444.885	8p	492.518	12s	509.555
3d _{3/2}	305.364	5f _{7/2}	444.895	8d	492.647	12p	509.581
3d _{5/2}	305.453	5g _{7/2}	444.895	8f	492.659	12d	509.686
4s	396.895	5g _{9/2}	444.901	9s	498.747	12f	509.689
4p _{1/2}	399.599	6s	467.704	9p	498.985	:	
4p _{3/2}	399.725	6p	468.511	9d	499.077	:	
4d _{3/2}	400.704	6d	468.818	9f	499.084	1s ²	523.296
4d _{5/2}	400.745	6f	468.842	10s	503.435		
4f _{5/2}	400.791	6g	468.842	10p	503.609		
4f _{7/2}	400.810	6h	468.842	10d	503.677		

Table 2 The transition probabilities * $A(n_i l_i j_i - n_f l_f j_f)$ (s⁻¹) between fine structure levels. * Here X(Y) means X × 10^Y

$2l_j - n_i l_i j_i$	A	$2l_j - n_i l_i j_i$	A	$2l_j - n_i l_i j_i$	A		
2s	2p _{1/2}	9.12(8)	2s	2p _{3/2}	1.04(9)		
	3p _{1/2}	4.470(11)		3p _{3/2}	4.425(11)		
	4p _{1/2}	2.008(11)		4p _{3/2}	1.994(11)		
	5p _{1/2}	1.042(11)		5p _{3/2}	1.036(11)		
	6p _{1/2}	6.06(10)		6p _{3/2}	6.02(10)		
	7p _{1/2}	3.76(10)		7p _{3/2}	3.73(10)		
	8p _{1/2}	2.55(10)		8p _{3/2}	2.53(10)		
2p _{1/2}	3s	6.72(10)	2p _{3/2}	3s	1.362(11)		
	4s	2.74(10)		4s	5.53(10)		
	5s	1.35(10)		5s	2.73(10)		
	6s	7.64(9)		6s	1.55(10)		
	7s	4.74(9)		7s	9.59(9)		
	8s	3.15(9)		8s	6.37(9)		
2p _{3/2}	3d _{3/2}	1.152(12)	2p _{3/2} - 3d _{3/2}	2.296(11)	3p _{3/2} - 3d _{5/2}	1.378(13)	
	4d _{3/2}	3.777(11)		4d _{3/2}	7.50(10)	4d _{5/2}	4.508(11)
	5d _{3/2}	1.743(11)		5d _{3/2}	3.42(10)	5d _{5/2}	2.079(11)
	6d _{3/2}	9.56(10)		6d _{3/2}	1.87(10)	6d _{5/2}	1.140(11)
	7d _{3/2}	5.84(10)		7d _{3/2}	1.14(10)	7d _{5/2}	6.96(10)
	8d _{3/2}	3.76(10)		8d _{3/2}	7.45(9)	8d _{5/2}	4.48(10)
	9d _{3/2}	2.60(10)		9d _{3/2}	5.16(9)	9d _{5/2}	3.10(10)
	10d _{3/2}	1.88(10)		10d _{3/2}	3.72(9)	10d _{5/2}	2.24(10)

* 括号中的数表示 10 的幂次, 如, 9.12(8) = 9.12 × 10⁸.

然仅列出了 $l \leq 3$ 的各能级值, 但 $l=3$ 的能级已在有效数字之内精确地代表了所有 $l > 3$ 的能级值。我们曾经^[6]由这些理论能级值准确地确认过徐至展等的实验^[1]激光波长; 这里, 我们还可以由表中 $12f$ 的能量值推算出 Si^{11+} 的离化阈能为 523.3 eV , 与实验值 (523.5 eV)^[7] 也符合得相当好。

表 2 和表 3 分别列出了 $2l_j - (nl_j)_k$ 的精细结构跃迁几率值和 $n_i l_i - n_k l_k (n_i \geq 3)$ 的多重态跃迁几率平均值:

$$A_{n_i l_i - n_k l_k} = \frac{1}{(\bar{\lambda}_{ik})^3 \sum_{J_k} (2J_k + 1)} \sum_{J_i, J_k} (2J_k + 1) \lambda^3(J_i, J_k) A(J_k, J_i). \quad (1)$$

(1) 式中, 平均波长 $\bar{\lambda}_{ik}$ 为

$$\bar{\lambda}_{ik} = 12398.52 \times \left[\frac{\sum_k (2J_k + 1) E(J_k)}{\sum_k (2J_k + 1)} - \frac{\sum_i (2J_i + 1) E(J_i)}{\sum_i (2J_i + 1)} \right]^{-1} \quad (2)$$

(2) 式中, 能量 E 的单位为 eV , 波长单位为 \AA 。

为了使用方便, 表 4 给出了 $n \leq 6$ 所有精细能级的辐射衰变速率 Γ_k ,

$$\Gamma_k = \sum_i A_{(nl^j)_k - (nl^j)_i}$$

二、结果与讨论

由表 2 和表 3 可以看到, 对于所有里德伯线系, 当跃迁上能级的主量子数足够大之后, 其跃迁几率(而不是振子强度或线强度)仅与主量子数(而不是等效主量子数)的三次方成反比, 其精度完全在我们对跃迁几率的计算误差之内。这一规律, 是我们在计算前并不知道的。其物理原因, 将另文讨论。实际上, 对于所有里德伯线系, 我们已经一律将主量子数算到了 12。表中, 对于若干里德伯线系, 其主量子数之所以仅取到 $n < 12$, 是因为届时已经收敛到 n^{-3} 定律中去了, 这对应于 l_i 和 l_k 都较小的情形; 当 l_i, l_k 都较大时, 收敛得较慢。表中, 当 $n_k = 12$ 时仍未很好地收敛 ($< 2\%$) 于 n^{-3} 定律中去的仅有涉及 $5f$ 和 $5g$ 的四个里德伯线系, 但从趋势上看, 也定将收敛于 n^{-3} 定律中去的。

当跃迁下能级的主量子数大于(和等于)6 之后, 同一主量子数不同角量子数各能级间隔越来越小, 因此, 美国国家标准局(NBS)的跃迁几率表^[8]中给出了氢原子的不同主量子数各能级间的平均跃迁几率值:

$$A_{n_k, n_i} = \frac{1}{n_k^2} \sum_{l_k, l_i} (2l_k + 1) A_{n_k l_k - n_i l_i} \quad (3)$$

对于类氢离子(Z), 有确定的规律为

$$A^{(Z)} = Z^4 A^{(H)}, \quad (4)$$

对于高荷电类锂离子的高激发态 ($n_i, n_k \geq 6$) 间的跃迁理当有极好的类氢行为:

$$A(\text{Si}^{11+}) = Z_c^4 A^{(H)} = 12^4 A^{(H)}, \quad (5)$$

为了确认这一点, 我们首先由 NBS 的氢原子跃迁几率表查得 $A_{5-12}^{(H)} = 1.402 \times 10^4 (\text{s}^{-1})$, 且若 (5) 式成立, 应有 $A_{5-12}(\text{Si}^{11+}) = 12^4 \cdot A_{5-12}^{(H)} = 2.91 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$; 然后, 我们又由本文表 3 的数据代入 (3) 式算得 $A_{5-12}(\text{Si}^{11+}) = 2.92 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ 。上述由两个完全独立的方法所算得的数据间

Table 3 Transition probabilities $A(n_i l_i - n_k l_k)$ (s^{-1}) ($n_i \leq 5, n_k \leq 12$). Here $X(Y)$ means $X \times 10^Y$

$n_i l_i - n_k l_k$		A	$n_i l_i - n_k l_k$		A	$n_i l_i - n_k l_k$		A		
3s	3p	1.23(8)	3p	4d	1.443(11)	3d	4f	2.862(11)		
	4p	5.64(10)		5d	7.13(10)		5f	9.44(10)		
	5p	3.16(10)		6d	3.99(10)		6f	4.46(10)		
	6p	1.87(10)		7d	2.46(10)		7f	2.51(10)		
	7p	1.19(10)		8d	1.62(10)		8f	1.51(10)		
	8p	8.01(9)		9d	1.13(10)		9f	1.05(10)		
	3p	4s		5.54(10)	3d		4p	8.68(9)	10f	7.41(9)
		5s		2.64(10)			5p	3.41(9)	11f	5.44(9)
6s		1.48(10)	6p	1.79(9)		12f	4.12(9)			
7s		9.07(9)	7p	1.06(9)						
8s		5.97(9)	8p	6.85(8)						
			9p	4.68(8)						
		10p	3.35(8)							
		11p	2.48(8)							
		12p	1.89(8)							
4s	4p	2.8(7)	4p	8d		7.35(9)	4d	10f	4.56(9)	
	5p	1.30(10)		9d		5.12(9)		11f	3.35(9)	
	6p	8.27(9)		10d		3.71(9)		12f	2.53(9)	
	7p	5.34(9)	4d	5p	4.60(9)	4f	5d	1.06(9)		
	8p	3.62(9)		6p	2.14(9)		6d	4.51(8)		
	9p	2.56(9)		7p	1.23(9)		7d	2.36(8)		
	10p	1.88(9)		8p	7.75(8)		8d	1.41(8)		
	4p	5s		1.88(10)	9p		5.23(8)	9d	9.18(7)	
		6s		1.01(10)	10p		3.70(8)	10d	6.34(7)	
		7s		6.07(9)	11p		2.72(8)	11d	4.58(7)	
8s		3.95(9)	12p	2.06(8)	12d	3.42(7)				
9s		2.72(9)	4d	5f	5.36(10)	4f	5g	8.83(10)		
10s	1.96(9)	6f		2.68(10)	6g		2.85(10)			
4p	5d	2.99(10)		7f	1.53(10)		7g	1.34(10)		
	6d	1.77(10)		8f	9.59(9)		8g	7.56(9)		
	7d	1.11(10)		9f	6.45(9)		9g	4.75(9)		
4f	10g	3.21(9)	5p	8d	3.96(9)	5d	11f	2.01(9)		
	11g	2.28(9)		9d	2.77(9)		12f	1.53(9)		
	12g	1.69(9)		10d	2.01(9)		5f	6d	8.20(8)	
5s	6p	4.21(9)	11d	1.51(9)	7d	4.01(8)				
	7p	2.89(9)	5d	6p	2.31(9)	8d		2.29(8)		
	8p	1.99(9)		7p	1.27(9)	9d	1.44(8)			
	9p	1.41(9)		8p	7.33(8)	10d	9.76(7)			
	10p	1.03(9)		9p	4.85(8)	11d	6.95(7)			
5p	6s	7.65(9)		10p	3.39(8)	12d	5.14(7)			
	7s	4.47(9)	11p	2.47(8)	5f	6g	2.29(10)			
	8s	2.83(9)	12p	1.86(8)		7g	1.14(10)			
	9s	1.93(9)	5d	6f		1.50(10)	8g	6.51(9)		
	10s	1.37(9)		7f		9.00(9)	9g	4.11(9)		
11s	1.01(9)	8f		5.72(9)		10g	2.78(9)			
5p	6d	8.93(9)		9f	3.86(9)	11g	1.98(9)			

(续表)

$n_i l_i - n_k l_k$	A	$n_i l_i - n_k l_k$	A	$n_i l_i - n_k l_k$	A			
	7d	5.89 (9)	10f	2.74 (9)	12g	1.47 (9)		
5g	6f	2.37 (8)	5g	11f	1.31 (7)	5g	9h	2.70 (9)
	7f	9.70 (7)		12f	9.49 (6)		10h	1.69 (9)
	8f	4.98 (7)	5g	6h	3.41 (10)		11h	1.14 (9)
	9f	2.94 (7)		7h	1.06 (10)		12h	8.06 (8)
	10f	1.90 (7)		8h	4.85 (9)			

Table 4 The radiative decay rates Γ_k (s^{-1}) of lower excited levels ($n_k \leq 6$) for Si^{11+} . Here $X(Y)$ means $X \times 10^Y$.

$(nl_j)_k$	Γ_k	$(nl_j)_k$	Γ_k	$(nl_j)_k$	Γ_k
2p _{1/2}	9.12 (8)	5s	8.60 (10)	6f _{5/2}	8.67 (10)
2p _{3/2}	1.04 (9)	5p _{1/2}	1.573 (11)	6f _{7/2}	8.65 (10)
3s	2.034 (11)	5p _{3/2}	1.561 (11)	6g _{7/2}	5.14 (10)
3p _{1/2}	4.471 (11)	5d _{3/2}	3.107 (11)	6g _{9/2}	5.14 (10)
3p _{3/2}	4.426 (11)	5d _{5/2}	3.101 (11)	6h _{9/2}	3.41 (10)
3d _{3/2}	1.382 (12)	5f _{5/2}	1.483 (11)	6h _{11/2}	3.41 (10)
3d _{5/2}	1.378 (12)	5f _{7/2}	1.480 (11)		
4s	1.381 (11)	5g _{7/2}	8.83 (10)		
4p _{1/2}	2.665 (11)	5g _{9/2}	8.83 (10)		
4p _{3/2}	2.642 (11)	6s	5.57 (10)		
4d _{3/2}	5.970 (11)	6p _{1/2}	9.85 (10)		
4d _{5/2}	5.951 (11)	6p _{3/2}	9.76 (10)		
4f _{5/2}	2.865 (11)	6d _{3/2}	1.821 (11)		
4f _{7/2}	2.862 (11)	6d _{5/2}	1.817 (11)		

的完美符合确证了 (5) 式的成立。

综合上述两条确定的规律, 我们相信, 由本文的数表加上 NBS 的氢原子跃迁几率表, 便可以准确求得 Si^{11+} 所有能级间的跃迁几率值, 获得动力学方程组中所需的全部辐射数据。

参 考 文 献

- 1 徐至展 *et al.*, 中国激光, **16**, 616 (1989)
- 2 I. P. Grant *et al.*, *Comput. Phys. Commun.*, **21**, 207 (1980)
- 3 B. J. McKenzie *et al.*, *Comput. Phys. Commun.*, **21**, 233 (1980)
- 4 朱頌人, 潘守甫, 计算物理, **7**(4), 403 (1990)
- 5 R. D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (Univ. of California Press, Berkeley, 1981) 433
- 6 朱頌人, 潘守甫 *et al.* 中国激光, **18**(3), 183 (1991)
- 7 R. D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (Univ. of California Press, Berkeley, 1981) 12
- 8 W. L. Wiese *et al.*, *Atomic Transition Probabilities*, Vol I, NSRDS-NBS4-, **4**(1966)