

# 33 <math>\leq Z \leq 40</math> 类氟离子精细结构能级和跃迁波长的相对论多组态 Dirac-Fock 计算

王 宛 珏

(兰州铁道学院基础课部, 730070)

**摘要:** 本文用相对论多组态 Dirac-Fock 广义平均能级模型计算了可能成为激光工作物质的类氟 AsXXV、SeXXVI、BrXXVII、KrXXVIII、RbXXIX、SrXXX、YXXXI 和 ZrXXXII 的  $2s^2 2p^5$ 、 $2s 2p^6$ 、 $2s^2 2p^4 3s$ 、 $2s^2 2p^4 3p$  组态的各 30 个精细结构能级和 54 个  $3s-3p$  跃迁波长, 大部分计算值都是本文首次预言的。

**关键词:** 类氟离子, 精细结构能级, 波长, 组态混合, MCDF 方法

## Relativistic multi-configuration Dirac-Fock calculation of fine-structure energy levels and transition wavelengths from F-like ions of $33 \leq Z \leq 40$

Wang Wanju

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

**Abstract:** By means of extended average level model of relativistic multi-configuration Dirac-Fock code, we have calculated 33 fine-structure energy levels of  $2s^2 2p^5$ ,  $2s 2p^6$ ,  $2s^2 2p^4 3s$ ,  $2s^2 2p^4 3p$  configuration and 54 transition wavelengths of  $3s-3p$  for F-like ions of  $33 \leq Z \leq 40$ , which may be the candidates for lasing action. Greater part of the calculated values are firstly predicted.

**Key words:** F-like ion, fine-structure energy level, wavelength configuration mixture, MCDF method

### 一、引 言

Elton<sup>[1]</sup> 在 1975 年曾指出  $2p^{k-1}3p-2p^{k-1}3s$  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荷电离化的类 Be 一类 Ne 离子。显然, 要产生并识别这种激光必须首先计算出这些离子  $3s, 3p$  组态能级和  $3p-3s$  跃迁波长。现在从实验上和理论上对类 Ne 离子的上述问题已进行了大量系统的研究, 对可能成为激光工作物质的高荷电离化类 F 离子的研究也日益受到重视<sup>[2~4]</sup>, 但还不如类 Ne 离子那样系统全面。为此,

我们曾用 MODF 方法系统地计算了不少类氟离子的 3s、3p 组态能级和可能辐射的激光波长值, 得到了很好的结果<sup>[5~8]</sup>。现在我们又用同样的方法计算了较重离子的同样问题, 大部分计算结果是我们首先得到的。

## 二、理论方法

在相对论多组态 Dirac-Fock (MODF) 方法<sup>[9]</sup>中, 一个核电荷为  $Z$ 、电子数为  $N$  的离子的 Hamiltonian 量在原子单位中为

$$H = \sum_{i=1}^N [c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}_i + (\beta - 1)c^2 + V_Z(r)] + \sum_{\substack{i,j \\ i < j}}^N \frac{1}{r_{ij}}$$

单电子波函数是 Dirac 旋子, 组态波函数  $\phi(\gamma_r JM)$  通过单电子波函数的  $j$ - $j$  耦合得到, 原子态波函数是组态波函数的线性组合:

$$\psi_{\alpha}(JM) = \sum_{r=1}^{n_2} C_r(\alpha) \phi(\gamma_r JM)$$

广义平均能级由下式给出:

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

跃迁波长由初、末态能级值  $E_q$ 、 $E_p$  通过公式

$$\lambda = \frac{99999217.22}{E_p - E_q} (\text{\AA})$$

得到。

我们使用 MODF+MCBP 程序包<sup>[10]</sup> 并在我院 VAX-11/785 计算机上作了适当修改后, 选用 Fermi 两参数核电荷分布和广义平均能级模型, 计算了类氟 AsXXV、SeXXVI、BrXXVII、KrXXVIII、RbXXIX、SrXXX、YXXXI 和 ZrXXXII 离子的  $2s^2 2p^5$ 、 $2s 2p^6$ 、 $2s^2 2p^4 3s$ 、 $2s^2 2p^4 3p$  组态的各 30 个精细结构能级值。在计算中, 我们同时考虑了上述组态的 30 个相对论组态间的相互作用, 即使 30 个相对论组态一起混合。这样可以使 3s 组态能级更准确, 同时可以一次算出 30 个能级。

## 三、计算结果与讨论

在表 1 中一并列出了上述八个类氟离子精细结构能级的计算值以及各相对论组态在同一能级的本征矢中所占的百分组分, 即组态混合系数的平方。这八个类氟离子只有最低的两个能级有实验值<sup>[11]</sup> 可以对比。第一激发态  $(2s^2 2p-2p^4)_{1/2}$  能级的实验值与本文计算值间的相对误差是很少的, 在 0.013~0.13% 之间, 随  $Z$  逐渐增大; 第二激发态  $[2s 2p^2-2p^4]_{1/2}$  的相对误差最大, 在 2.08~1.59% 之间, 随  $Z$  逐渐减少。从前文<sup>[5,6,8]</sup> 的计算值与实验值的对比得知, 上述两个能级的相对误差是 29 个激发态能级中最大的。由此推知, 本文所计算的这八个类氟离子的 3s、3p 组态的 27 个能级值的相对误差也一定小于同一离子的第一激发态  $(2s^2 2p-2p^4)_{1/2}$  的相对误差。在文献[13]中曾对 AsXXV、SeXXVI、BrXXVII 离子的精细结构能级作过系统计算。他们所得第一激发态能级值与实验值<sup>[11]</sup> 间的相对误差依次是 0.059%、0.16% 和

Table 1. Energy levels of  $f$ -like ions ( $\text{cm}^{-1}$ )

$n$	Terms	J	AsXXV	SeXXVI	Br XXVII	Kr XXVIII	RbXXIX	SrXXX	YXXXI	Zr XXXII	AsXXV	Eigenvector components (%)
1	$2s^2 2p^2 2p^3$	3/2	0	0	0	0	0	0	0	0	100 (1)	100 (1)
2	$2s^2 2p-2p^4$	1/2	302539	345749	393923	446191	504090	567642	637105	712918	100 (2)	100 (2)
3	$2s^2 2p^2 2p^4$	1/2	1639682	1732673	1830541	1938615	2042254	2163537	2285324	2413911	100 (3)	100 (3)
4	$2s^2 2p-2p^2 3s$	5/2	11250221	12088298	12955555	1385 1912	14777297	15729562	16712425	17724002	96 (4)	99 (4)
5	$2s^2 2p^2 2p^2 3s$	3/2	11287049	12126242	13094601	13892060	14818527	15771888	16755847	17768526	97 (5)	99 (5)
6	$2s^2 2p-2p^2 3s$	1/2	11418115	12261376	13138525	14044555	14979396	15940961	16932981	17953602	90 (6) + 8 (25)	98 (6)
7	$2s^2 (2p-2p^3) 1s$	3/2	11536539	12416810	13330942	14279193	15261811	16277093	17329010	18416119	99 (7)	98 (7)
8	$2s^2 (2p-2p^3) 1s$	1/2	11566155	12449236	13362260	14311468	15295091	16311423	17364416	18452624	98 (8)	100 (8)
9	$2s^2 2p^2 2p^2 3p-$	3/2	11600130	12452811	13384771	14245939	15186223	16155242	17153474	18180560	96 (9)	98 (9)
10	$2s^2 2p^2 2p^2 3p-$	5/2	11610273	12463839	13346551	14258410	15199313	16168888	17167620	18195156	91 (10) + 5 (13)	98 (10)
11	$2s^2 (2p-2p^3) 3s$	5/2	11638212	12520768	13437153	14387631	15372449	16389906	17443976	18533212	96 (11)	99 (11)
12	$2s^2 (2p-2p^3) 3s$	3/2	11648173	12531696	13449056	14400512	15386311	16404754	17459805	18550023	97 (12)	98 (12)
13	$2s^2 2p^2 2p^2 3p$	5/2	11679051	12542851	13437265	14362303	15317922	16303972	17320877	18368436	90 (13) + 6 (10)	97 (13)
14	$2s^2 2p^2 2p^2 3p$	1/2	11682008	12545192	13438756	14362676	15316892	16301028	17315466	18359693	94 (14)	81 (14) + 19 (17)
15	$2s^2 2p^2 2p^2 3p$	7/2	11681228	12545322	13439948	14365129	15320873	16306921	17323825	18371352	97 (15)	99 (15)
16	$2s^2 2p^2 2p^2 3p$	3/2	11790516	12662285	13564503	14497189	15460347	16453725	17477874	18532571	80 (16) + 8 (20) + 5 (27)	89 (16) + 5 (19)
17	$2s^2 2p-2p^2 3p-$	1/2	11810610	12670808	13560400	14479410	15427841	16405432	17412850	18450018	94 (17)	81 (17) + 19 (14)
18	$2s^2 (2p-2p^3) 13p-$	1/2	11874994	12769431	13697900	14660615	15657809	16689511	17756454	18858714	93 (18)	98 (18)
19	$2s^2 2p^2 2p^2 3p$	3/2	11879198	12758918	13666655	14603345	15569716	16565908	17692689	18649942	53 (19) + 43 (20)	91 (19)
20	$2s^2 (2p-2p^3) 13p-$	3/2	11928290	12816900	13741937	14702800	15699039	16730296	17797103	18899419	29 (20) + 38 (19) + 24 (29)	74 (20) + 23 (29)
21	$2s^2 (2p-2p^3) 13p$	5/2	11958102	12864242	13805576	14782532	15795338	16844229	17930007	19052381	98 (21)	99 (21)
22	$2s^2 (2p-2p^3) 13p$	3/2	11985588	12892259	13834244	14811828	15825321	16874846	17961158	19084343	95 (22)	94 (22)
23	$2s^2 (2p-2p^3) 13p-$	5/2	11983376	12880487	13811502	14776608	15776182	16810190	17879387	18983851	96 (23)	99 (23)
24	$2s^2 (2p-2p^3) 13p$	1/2	11986402	12893270	13835326	14812924	15829419	16875975	17962406	19085921	73 (24) + 22 (30) + 5 (14)	74 (24) + 23 (30)
25	$2s^2 2p^3 s$	1/2	12015942	12941837	13906458	14910384	15954192	17036585	18161788	19328779	92 (25) + 8 (6)	98 (25)
26	$2s^2 (2p-2p^3) 33p$	7/2	12055001	12963435	13907049	14886197	15901230	16952309	18040247	19165249	97 (26)	99 (26)
27	$2s^2 (2p-2p^3) 33p$	3/2	12067634	12975568	13918687	14897248	15911149	16957411	18053243	19177630	90 (27) + 5 (16)	92 (27) + 5 (29)
28	$2s^2 (2p-2p^3) 33p$	5/2	12088975	12998468	13943153	14923389	15939518	16991714	18080787	19206945	95 (28)	97 (28)
29	$2s^2 (2p-2p^3) 33p-$	3/2	12120389	13020289	13954213	14922553	15926047	16967906	18032550	19141393	64 (29) + 18 (20) + 12 (16)	67 (29) + 19 (20) + 6 (16)
30	$2s^2 (2p-2p^3) 33p$	1/2	12232279	13148503	14099940	15086943	16109866	17168868	18266471	19397779	76 (30) + 23 (24)	76 (30) + 24 (24)

Components smaller than 5% are omitted.

Table 2. Predicted transition wavelengths (Å) of 3s-3p

Transition	AsXXV	SeXXVI	BrXXVII	KrXXVIII	RbXXIX	SrXXX	YXXXI	ZrXXXII
4-9	235.789	274.339	263.702	253.790	244.543	234.918	226.732	219.030
-10	277.738	266.283	255.757	246.004	236.958	227.621	219.686	212.245
-13	233.193	219.996	207.594	195.928	184.957	174.092	164.352	155.175
-15	232.015	218.807	206.444	194.849	183.967	173.202	163.559	154.476
-16	185.084	174.220	164.218	154.972	146.402	138.090	130.642	123.675
-19	158.988	149.116	140.627	133.079	126.196	119.568	113.602	107.998
5-9	319.406	306.214	293.971	282.582	271.964	260.856	251.492	242.698
-10	309.383	296.211	284.131	272.963	262.615	251.889	242.852	234.395
-13	255.101	240.033	225.905	212.656	200.226	187.940	176.982	166.692
-14	253.191	238.692	225.147	212.487	200.656	188.986	178.693	169.157
-16	198.623	186.552	175.469	165.254	155.807	146.663	138.499	130.882
-17	191.000	183.632	176.741	170.256	164.119	157.842	152.206	146.737
-19	168.876	158.059	148.798	140.591	133.122	125.941	119.497	113.454
6-9	534.716	522.371	509.565	496.564	483.496	466.677	453.529	440.610
-14	371.895	352.341	333.077	314.346	296.230	277.726	261.448	246.250
-16	264.970	249.433	234.754	220.929	207.921	195.021	183.522	172.721
-17	251.575	244.241	237.037	229.362	222.993	215.299	208.390	201.444
-19	214.600	200.988	189.347	178.958	169.340	160.014	151.582	143.608
7-18	295.460	283.951	272.511	262.177	252.527	242.472	233.949	225.940
-20	255.264	249.944	243.312	236.068	228.714	220.652	213.633	206.911
-21	237.212	223.498	210.689	198.673	187.432	176.325	166.390	157.045
-22	222.693	210.323	198.688	187.746	177.459	167.293	158.191	149.650
-23	223.795	215.667	208.091	201.039	194.412	187.583	181.694	176.139
-24	222.290	209.881	198.262	187.360	177.114	166.978	157.879	149.298
-27	188.290	178.968	170.143	161.798	154.003	146.990	138.077	131.318
-28	181.016	171.923	163.343	155.232	147.556	139.934	133.018	126.450
-29	171.277	165.706	160.444	155.434	150.549	144.757	142.138	137.879
-30	143.732	136.669	130.039	123.801	117.917	112.136	106.671	101.868
8-18	323.793	312.310	297.938	286.413	275.696	264.489	255.077	246.251
-20	276.140	271.987	263.382	255.537	247.557	238.736	231.114	223.816
-22	238.417	225.722	211.872	199.856	188.597	177.487	167.577	158.298
-23	239.681	231.884	222.597	214.989	207.861	200.494	194.186	188.243
-24	237.955	225.208	211.387	199.419	188.208	177.132	167.227	157.904
-27	199.410	189.994	179.718	170.713	162.322	154.802	145.174	137.930
-29	180.429	175.115	168.932	163.643	158.490	152.327	149.671	145.187
-30	150.122	143.007	135.560	128.953	122.733	116.626	110.858	105.803
11-20	344.735	337.687	328.101	317.290	306.194	293.781	283.184	273.070
-21	312.607	297.123	271.427	253.228	236.469	220.108	205.748	192.430
-22	287.873	269.186	251.831	235.740	220.813	206.211	193.356	181.445
-23	289.717	277.995	267.130	257.085	247.688	237.934	229.668	221.907
-26	239.930	225.903	212.813	200.575	189.114	177.808	167.709	158.219
-27	232.871	219.877	207.670	196.226	185.632	176.210	164.132	155.179
-28	221.846	209.336	197.628	186.651	170.345	166.166	157.032	148.427
-29	207.393	200.192	193.401	186.943	180.636	173.010	169.902	164.425
12-18	440.876	420.636	401.858	384.463	368.327	351.177	337.099	323.949
-20	356.994	350.626	341.436	330.810	319.767	307.180	296.474	286.208
-21	322.655	300.710	280.489	261.766	244.483	227.544	212.675	198.863
-22	296.371	277.344	259.613	243.122	227.785	212.720	199.460	187.154
-23	298.327	286.705	275.903	265.890	256.495	246.648	238.332	230.506
-24	295.658	276.569	258.886	242.476	227.217	212.215	198.965	186.603
-27	238.401	225.290	212.933	201.314	190.535	180.944	169.510	159.335
-28	226.859	214.237	202.389	191.250	180.764	170.369	161.035	152.225
-29	211.767	204.669	197.958	191.556	185.276	177.572	174.598	169.099
-30	171.202	162.125	153.637	145.681	138.206	130.871	123.967	117.958

1.71%，比本文的相对误差稍大、他们所得第二激发态能级值与实验值<sup>[11]</sup>间的相对误差依次是 1.24%、1.17%、1.47%，比本文的相对误差稍小，其他能级值和本文的相差甚微。

各相对论组态在同一能级的本征矢中所占的百分组分(components)表示了这些相对论组态间相互作用的大小。从表 1 所列的 AsXXV 和 ZrXXXII 的组分可知：3p 组态间的相互作用是很强的。如在 AsXXV 的第 19 个能级中，组态 19 所占的组分是 53%，而组态 20 所占的组分就有 43%；在第 20 个能级中，组态 20 所占的组分是 29%，而组态 19 所占的组分却有 38%，组态 29 所占的组分也有 24%；3s 组态间的相互作用一般较弱，只有组态 6 和组态 25 间有明显的相互作用；在不同的离子中，处于同一能级的各组态所占的百分组分是不一样的，离子越重，一般主要组态所占的组分越大，表示其他组态对它的作用相对减小。如在 AsXXV 离子中，组态 6 和组态 25 间有明显的相互作用。而在 ZrXXXII 离子中，它们间的作用就非常弱了，表中未列出，因小于 5% 的组分全省略了。由于组分的变化，使得在不同离子中组态能级的相对高低也发生了变化，如在 AsXXV 离子中，组态 26 的能级高于组态 25，但在 ZrXXXII 离子中，却低于组态 25。

本文着重计算了上述八个离子 54 个可能辐射的激光波长值。它们属于 3p-3s 跃迁<sup>[12]</sup>，列于表 2 中。在文献[12, 13]中，曾对 SeXXVI 离子 5 个 3p-3s 跃迁波长进行过计算。这 5 个跃迁是(11-29)，(11-26)，(12-29)，(12-28)和(7-21)。这 5 个波长的本文计算值与文献[12]的相对误差的平均值是 0.92%，与文献[13]的相对误差的平均值是 1.06%。上述波长的计算值目前尚无实验值可对比，仅是理论预言，但它们可为在实验上识别 3p-3s 跃迁谱线提供理论根据。

### 参 考 文 献

- 1 R. C. Elton, *Appl. Opt.*, **14** (2), 97 (1975)
- 2 张同发, 白云馨, 潘守甫, *计算物理*, **7**(3), 332 (1990)
- 3 张同发, 潘守甫, *原子与分子物理学报*, **8** (1), 1753 (1991)  
郭兴家 *et al.*, *原子与分子物理学报*, **8** (3), 1930 (1991)
- 5 姜仁滨, 王宛珏, *兰州铁道学院学报*, **10** (1), 30 (1991)
- 6 姜仁滨, 王宛珏, *原子与分子物理学报*, **8** (4), 2068 (1991)
- 7 王宛珏, 姜仁滨, *光学学报*, **11** (7), 592 (1991).
- 8 姜仁滨, 王宛珏, *中国激光*, **18**(12), 934~938 (1991)
- 9 I. P. Grant, *Adv. Phys.*, **19** (82), 747 (1970)
- 10 I. P. Grant *et al.*, *Comput. Phys. Commun.*, **21** (2), 207 (1980); B. J. McKenzie *et al.*, *Comput. Phys. Commun.*, **21** (2), 233 (1980)
- 11 B. Edlen, *Phys. Scripta*, **28**, 51 (1983)
- 12 P. L. Hagelstein, *Phys. Rev.*, **A34**, 924 (1986)
- 13 Qiren Zhu, Shoufu Pan, Yufen Yang, *Phys. Scripta*, **43**, 170 (1991)