

# 类 Ge 离子 $4s^24p^2, 4s4p^3$ 与 $4s^24p5s$ 组态能级的递推公式

许宗荣 高艳玲

(四川联合大学西区原子分子科学所, 成都 610065)

**提要** 推广 HF 方程的微扰展式导出类 Ge 离子  $4s^24p^2, 4s4p^3$  与  $4s^24p5s$  组态能级的递推公式, 应用于该序列离子计算, 平均相对误差为  $10^{-6}$ 。

**关键词** 类 Ge 离子, 能级, 递推公式

## 1 引言

在热核聚变、激光及天体物理中广泛存在各种高离化态离子。尤其是高  $Z$  高离化离子在 X 射线激光技术中的重要性, 近年来各国已投入大量力量加以研究进行了一系列实验与计算。高离化态离子谱的研究从低  $Z$  向高  $Z$  元素发展, 但缺乏系统的数据库。尤其是实验数据较为分散而且可能存在误认。系统地考虑多组态相互作用的相对论层次上的计算近年来一直很活跃, 然而计算结果与观测值有显著偏差。为沟通实验与理论计算, 有必要发展各种行之有效的半经验方法。

本文推广非相对论性 HF 方程微扰处理得到的能量展式, 导出原子(离子)能级递推公式, 将其应用于类 Ge 等电子序列能级的研究。

## 2 能级递推公式

对原子序数为  $Z$ , 核外电子数为  $N$  的等电子离子序列, 由 HF(Hartree-Fock) 方程的微扰处理可得能量  $E$  对  $Z$  的展式<sup>[1]</sup>

$$E(N, Z) = Z^2 \sum_{i=0}^{\infty} c_i(N) Z^{-i} \quad (1)$$

式中  $c_i$  为展开系数, 仅与  $N$  有关, 它可由微扰方法计算。

由(1)式略去 3 次以上项, 可导出一个能量递推公式

$$E(N, Z+2) - 2E(N, Z+1) + E(N, Z) = 2c_0(N) \quad (2)$$

上式对 HF 方程的解是成立的。

对于高  $Z$  离子, 相对论效应是显著的, 因而(2)式成立尚有问题。本文将(2)式推广到中、高  $Z$  离子能量的计算。由(2)式的  $(m-2)$  次递推可得

$$E(Z + m) = mE(Z + 1) - (m - 1)E(Z) + \frac{m(m - 1)}{2}A \quad (3)$$

式中  $A = 2c_0(N)$ 。在非相对论 HF 方程微扰处理中,  $A$  仅与核外电子数有关。为考虑相对论等效效应,  $A$  应与  $Z$  有关, 因而与  $m$  有关, 设取如下形式

$$A = a_0 + (m - 2)a_1 + (m - 2)(m - 3)a_2 + \dots \quad (4)$$

式中  $a_0, a_1, a_2$  等可由实验数据拟合而得。本文工作详细考察了式(3)与(4)的适用性。

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

Levels	Ag <sup>16+</sup>			Cd <sup>16+</sup>			
	$J$	$N$	$a_0(\text{cm}^{-1})$	Obs. [3]	Calc.	Obs. [3]	Calc.
$4s^24p^2$	0	1	0	0	0	0	0
	0	2	1434	150039	150175		167390
	1	1	682	43364	43340	50622	50483
	2	1	731	57366	57445	65490	65597
	2	2	1328	112548	112448	128378	127925
$4s4p^3$	0	1	1354		425690		458021
	1	1	848	369836	369836	396359	396240
	1	2	1556		432575		466308
	1	3	1333	483331	483330	517151	516909
	1	4	2092	545974	546164	588233	588376
	2	2	1262	377080	376982	406214	405778
	2	3	1543	438459	438653	472709	472987
	2	4	1890	485082	484955	524051	523430
	3	1	1333	393860	393718	425385	424776
	$4s^24p5s$	0	1	5324		1245714	
1		1	5244		1247973		1371620
1		2	5969		1310158		1442111
2		1	5968		1305074		1437024

Table 2 Energy-levels of Rh<sup>13+</sup> and Pd<sup>14+</sup> ( $\text{cm}^{-1}$ )

$J$	$N$	$a_0(\text{cm}^{-1})$	$a_1(\text{cm}^{-1})$	$a_2(\text{cm}^{-1})$	Rh <sup>13+</sup>	Pd <sup>14+</sup>	
$4s^24p^2$	0	2	1434	- 227	24	119536 (120047) <sup>a</sup>	134593 (134394) <sup>a</sup>
	2	2	1328	- 148.5	15	85474 (85478) <sup>a</sup>	98315 (98299) <sup>a</sup>
	$4s^24p5s$	0	1	5324	11.44	- 0.49	1014014 (1014072) <sup>b</sup>
1		1	5244	46.84	- 4.23	1016483 (1016411) <sup>b</sup>	1129615 (1129570) <sup>b</sup>
1		2	5969	- 29.14	2.96	1064089 (1064159) <sup>b</sup>	1184169 (1184174) <sup>b</sup>
2		1	5968	- 53.29	6.36	1058836 (1059078) <sup>b</sup>	1179091 (1179092) <sup>b</sup>

$a$ : Obs. values, taken from Ref. [2]  $b$ : Obs. values, taken from Ref. [4]

对类 Ge 离子的实验观测数据,  $4s^24p^2$  组态<sup>[2]</sup>和  $4s4p^3$  组态<sup>[3]</sup>有  $Z \leq 48$  元素的大部分能级和跃迁波长,  $4s^24p5s$  只有  $Z \leq 42$  元素的部分能级和跃迁波长<sup>[4,5]</sup>。按文献[2~5]观测值由(3),(4)式确定的  $a_0, a_1, a_2$  值列于表 1 与表 2 中, 并做了大量递推计算, 证实(3),(4)式可应用于类 Ge 等电子序列。平均相对误差为  $10^{-5}$ , 最大相对误差为  $5 \times 10^{-4}$ 。部分结果列于表 1 与表 2 中。表中  $J$  为总角动量量子数,  $N$  为同一  $J$  值中能级顺序。表 1 为由  $Rh^{13+}$  与  $Pd^{14+}$  由式(3)与(4)式递推得出的  $Ag^{15+}$  与  $Cd^{16+}$  的能级值, 表 2 为由  $Rb^{5+}$  与  $Sr^{6+}$  由(3)与(4)式递推得出的  $Rh^{13+}$  与  $Pd^{14+}$  的部分能级。

### 3 结 论

从表中计算与观测值比较来看两者符合很好。证实了式(3),(4)对于类 Ge 离子序列是适用的。由已知的两相邻能级观测值, 利用递推公式可方便地算出整个序列其余离子的能级, 计算简便, 结果可靠。可以预言丢失的能级和新离子的能级, 可帮助观测能级的指认。

### 参 考 文 献

- 1 许宗荣, 王 凤, 朱正和. 高离化等电子离子系列基态能量的计算. 原子与分子物理学报, 1985, 2(3): 79~86
- 2 P. Dunne, P. K. Carroll, R. E. Corcorant *et al.*  $4s-5p$  transitions in Ge-like Ru and Rh. *J. Phys. B; At Mol. Opt. Phys.*, 1990, 23: L239~245
- 3 U. Litzén, Xiantang Zeng. The  $4s^24p^2 - 4s4p^3$  transition array and energy levels of the Ge-like ions Ru X III - Cd X VII. *J. Phys. B; At. Mol. Opt. Phys.*, 1991, 24: L45~50
- 4 G. O'Sullivan. The emission spectrum of a laser-produced plasma of rubidium in the 320~450 Å region. *J. Phys. B; At. Mol. Opt. Phys.*, 1989, 22: 987~996
- 5 J. F. Wyart. Addition to the analysis of the Sr VI and Sr VII spectra. *Phys. Rev. A*, 1989, 139(8): 387~390

## Recursion Formula of Energy Levels for $4s^24p^2$ , $4s4p^3$ and $4s^24p5s$ of Ge-like Ions

Xu Zongrong Gao Yanling

(Institute of Atomic and Molecular Sciences, Sichuan Union University, Chengdu 610065)

**Abstract** A recursion formula for the energy levels of  $4s^24p^2$ ,  $4s4p^3$  and  $4s^24p5s$  of Ge-like ions has been given based on the generalization of the perturbation expansion. It is found that this method is considerably simple and accurate.

**Key words** Ge-like ion, energy level, recursion formula