文章编号:0258-7025(2002)02-0156-05

类铍离子($Z = 21 \sim 92$)的 M_1 跃迁的 X 射线 激光光谱的理论研究

杨天丽,谭明亮,蒋 刚,朱正和

(四川大学原子与分子物理所,四川成都 610065)

提要 根据全相对论多组态方法,采用 GRASP² 程序,系统计算了类铍离子等电子序列($Z = 21 \sim 92$)禁戒跃迁 $(1s^{2}2pnd)(n = 3 \sim 4)(1s^{2}2p3 d)$ 的能级间隔、自发跃迁系数和加权振子强度。结果表明 高离化度($q \ge 51$)离 子激发态禁戒跃迁的跃迁几率与中性原子的电偶极 E_1 的跃迁几率相当。在 ICF 和 MCF 高温激光等离子体中,其 跃迁过程不容忽视。同时 对在双电子复合机制下实现粒子数反转的 X 射线激光工作物质进行了初步探讨。 关键词 类铍离子 禁戒跃迁,复合机制,激光工作物质 中图分类号 0.433.5⁺4 文献标识码 A

Studies on M_1 Transitions for Be-like Ions Related to X-ray

YANG Tian-li , TAN Ming-liang , JIANG Gang , ZHU Zheng-he

(Institute for Applied Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610065)

Abstract The energy intervals, spontaneous transition possibilities and oscillator strengths of forbidden transitions for Be-like ions ($Z = 21 \sim 92$) have been calculated by relativistic many configurations method with Breit correction, QED correction and nuclear effective volume correction. In addition, Be-like ions as a laser media with population reversion by combination mechanism has been discussed.

Key words Be-like ions , forbidden transition , combination mechanism , laser media

1 引 言

在可见光区范围内禁戒(磁偶极、电四极)跃迁 的振子强度约为 10^{-6[1]},跃迁几率相对电偶极跃迁 几率小 4~6个数量级,实验上观察禁戒跃迁比电偶 极跃迁的难度大。随着实验手段的不断进步,研究 者通过原子束技术、吸收光谱法、托克马克 (Tokamak)示踪元素注入等方法成功地观察到部分 中性原子、高离化离子的磁偶极、电四极跃迁光 谱^{2~4]}。

自 1984 年软 X 射线激光在实验室精确地演示 成功以来^[5],X 射线激光得到迅速发展。众多研究 者致力于寻找新的激光工作物质,探讨最佳抽运机 制。在高温低密度等离子体中,双电子复合对建立 和维持等离子体的电离平衡以及对离子激发态布局 起着主要作用⁶]。对冕区等离子体中类 Li W 离子 在双电子复合研究中,已经发现在能级($1s^22p_3d$), 与($1s^22p_3d$),之间($1s^22p4d$),与($1s^22p_3d$),之 间可能实现了粒子数反转⁷]。本文根据全相对论多 组态方法,采用 GRASP² 计算程序^[8]系统地计算了 类铍离子等电子序列($Z = 21 \sim 92$)($1s^22pnd$)(n= 3 ~ 4)($1s^22p_3d$),的能级间隔、自发跃迁系数 和加权振子强度。研究表明:重元素高离化的激发 态间的磁偶极、电四极跃迁几率较大,在 ICF 和 MCF 高温低密等离子体中其跃迁过程不容忽视,这使它 们之间的磁偶极 M_1 跃迁很可能成为复合机制下的 X 射线激光谱线。同时,对上述能级间能否产生 X 射线激光进行了初步讨论。

收稿日期 2000-09-18; 收到修改稿日期 2000-12-05

作者简介 杨天丽(1971.12—),女 四川大学原子与分子物理所 98 级硕士生,专业为原子与分子物理,主要从事原子结构 与原子光谱的理论研究。

2 理论方法

在相对论多组态理论中, N 个电子原子或离子 体系的 Hamiltonion 量为

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} [c\alpha \cdot P + (\beta - 1)c^{2} + V_{nuc}(r_{i})] + \sum_{i < j}^{N} |\hat{r_{i}} - \hat{r_{j}}|^{-1}$$
(1)

α,β分别为 Dirac 矢量和标量矩阵, P 为宇称算符。 单电子的轨道在坐标表象中表示为

$$\hat{r} + nkm = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{nk}(r) & X_{km}(\hat{r}/r) \\ iQ_{nk}(r) & X_{-km}(\hat{r}/r) \end{pmatrix}$$
(2)

 $P_{nk}(r)$ 为径向波函数大分量, $Q_{nk}(r)$ 为小分量, $X_{km}(\hat{r}/r)$ 为旋子球谐函数。

N 电子体系的组态状态函数 CSF(Configuration State Function)由单电子 Dirac 轨道组成的 N 阶 Slater 行列式的线性组合得到。由于组态相互作用,原子 态函数 ASF(Atomic State Function) | ΓPJM 由具有 相同的 P, J 和M 值的组态状态函数 CSF | r_rPJM 线 性组合而得到,即

 $| \Gamma PJM = \Sigma C_r | r_r PJM$

其中, Cr 为组态混合系数, P 为宇称。

径向波函数大小分量可通过自洽场方法对系列 径向方程求解得到。同时还考虑了 Briet 修正和 QED 修正。

不可约张量代数与多极矩跃迁理论中单位时间 从 $\beta \rightarrow \alpha$ 的自发跃迁几率定义为

$$A_{\beta \to \alpha} = 2\alpha \omega \left[\frac{j_{\alpha}}{j_{\beta}} \right] \left(\frac{j_{\alpha}}{2} \quad L \quad j_{\beta} \\ \frac{1}{2} \quad 0 \quad -\frac{1}{2} \right)^{2} |\bar{M}_{\alpha\beta}|^{2}$$

 $j_{\alpha} j_{\beta}$ 分别为上、下能态角动量 ω 为能级间隔, $|M_{\alpha\beta}|$ 为径向积分。

振子强度定义为

$$f_{\alpha \to \beta} = \frac{[j_{\beta}]A_{\beta \to \alpha}}{[j_{\alpha}] 2\alpha \omega^2}$$

3 计算结果与讨论

采用量子力学理论的 GRASP² 程序,选取了 1s²2s²,1s²2s2p,1s²2s3s,1s²2p3s,1s²2s3p, 1s²2s3d,1s²2p²,1s²2p3d,1s²2p4d,2s²2p² 等 10 个 电子组态 耦合出 53 个组态状态函数 CSF,进而构 造 53 个原子状态函数 ASF。

3.1 类铍离子等电子序列(Z = 21~92)禁戒跃迁
 (1s²2pnd)(n = 3~4)·(1s²2p3 d))的光谱数据

表 1 给 出 了 ($1s^22pnd$)(n = 3 ~ 4)-($1s^22p3d$))的能级间隔、自发跃迁系数和加权振子 强度。研究发现,1)对于($1s^22p3d$),-($1s^22p3d$), 单电子磁偶跃迁,能级间隔随着核电荷数 Z 增加明 显增加,且离化度越高能级间隔增长得越快。自发跃 迁系数在低 Z 值时很小,随着核电荷数 Z 增加呈非 线性增大,跃迁系数变化范围为 $10^1 ~ 10^7$,在高 Z 值 元素它已与中性原子电偶极 E_1 跃迁的值相当。例 如:

类别	过程	Z = 21	Z = 92
$E_1^{[9]}$	$1s^22s^2({}^1S_0) \cdot 1s^22s2p({}^3P_1)$	8.4214(6)	9.828(9)
M_1	$(1s^22p3d) - (1s^22p3d)$	7.4586(1)	8.729(7)

表 1 类铍离子(Z=21~92)禁戒跃迁的能级间隔、自发跃迁系数、加权振子强度

Table 1 Energy intervals , spontaneous transition possibilities and oscillator strengths of forbidden transition for Be-like ions

$(1s^2p3d)_1 - (1s^22p3d)_0$					$(1s^22p4)$	d) ₁ -(1 $s^2 2p3 d$) ₀	
Atomic number	Energy interval/cm ⁻¹	M_1 transition possibility/s ⁻¹	M_1 ocsillator strength	Atomic number	Energy interval/cm ⁻¹	M_1 transition possibility/s ⁻¹	M_1 ocsillator strength
21	51549	7.458(1)	1.262(-7)	21	1751002	2.537(1)	3.720(-11)
22	54276	1.062(2)	1.622(-7)	22	1950723	4.265(1)	5.041(-11)
23	57106	1.477(2)	2.038(-7)	23	2161014	6.999(1)	6.740(-11)
24	60074	2.014(2)	2.510(-7)	24	2382192	1.124(2)	8.907(-10)
25	63210	2.699(2)	3.038(-7)	25	2614285	1.769(2)	1.164(- 10)
26	66544	3.567(2)	3.623(-7)	26	2857297	2.738(2)	1.508(-10)
27	70104	4.662(2)	4.266(-7)	27	3112620	4.166(2)	1.935(- 10)
28	73916	6.036(2)	4.969(-7)	28	3425535	6.244(2)	2.463(-10)
29	78007	7.758(2)	5.734(-7)	29	3652007	9.229(2)	3.112(-10)
30	84483	9.911(2)	6.565(-7)	30	3941113	1.346(3)	4.860(-10)
31	87844	1.260(3)	7.467(-7)	31	4237751	1.940(3)	4.860(-10)
32	92195	1.595(3)	8.443(-7)	32	4546067	2.763(3)	6.014(-7)
33	07645	2.014(3)	0.501(-7)	22	4866103	380/(3)	7.306(7)

(续表)
-----	---

	$(1s^22n^2)$	$(1s^22n3t)$			$(1s^22n4)$	$\frac{d}{d} = (1s^2 2n^3 d)$	
A	En oner	M transition	M. accillator	A	En oner	M transition	M. accillator
Atomic	interval/om ⁻¹	M_1 transition	M ₁ ocsinator	Atomic	interval (cm ⁻¹	m_1 transition	M ₁ ocsinator
24	102409	possibility/s		24	5107429	possibility/s	
34 25	103498	2.535(3)	1.064(-6)	34 25	5197438	5.43(3)	9.043(-8)
35	109780	3.184(3)	1.188(-6)	35	5539825	1.00(2)	1.099(-8)
30	148530	3.991(3)	1.324 - 6	30	5893390	1.026(3)	1.329(-8)
3/	123/41	4.994(3)	1.400(-6)	3/	6258161	1.393(4)	1.599(-8)
38	131478	(5.238(3))	1.623(-6)	38	0039171	1.8/4(4)	1.915(-8)
39 40	139739	7.135(2)	1.791(-6)	39 40	7021455	1.424(4)	2.281(-8)
40	148010	9.091(3)	1.9/3(-6)	40	7420040	5.515(4)	2.700(-8)
41	158080	1.203(4)	2.109(-0)	41	7829981 8251200	4.33(4)	3.190(-8)
42	161613	1.49(4)	2.380(-0)	42	0128227	5.091(4)	5.73(-8)
44	202212	2.299(4)	2.80(-0)	44	9126237	9.320(4)	5.130(-8)
43	203212	2.642(4)	3.111(-0)	45	9364437	1.220(5)	5.974(-8)
40	4220600	3.305(4)	3.391(-0)	40	10530276	1.070(5)	0.921(-0)
47	4229009	4.320(4)	3.090(-0)	47	11020486	2.483(5)	7.990(-8)
40 70	250081	5.523(4)	4.010(-0)	40	11522635	2.40(5)	9.190(-8)
4 9 50	239981	8.027(4)	4.332(-6)	4 9 50	12036510	3.886(5)	1.004(-8)
51	200170	0.022(4)	4.71(-6)	51	12562166	4 875(5)	1.200(-8)
52	312804	1.200(5)	5.10(-6)	52	13099648	5,970(5)	1.573(-8)
53	322520	1.20(5)	5.958(-6)	53	13649010	7,351(5)	1.304(-8)
53 54	367596	2,235(5)	7 437(-6)	54	14724488	9.014(5)	2.007(-8)
55	390384	2.23(5)	7.44(-6)	55	14798523	1.101(6)	2.00(-8)
56	414466	3,236(5)	8 474(-6)	56	15384644	1.339(6)	2.200(-8)
50 57	439875	3.230(5)	9.033(-6)	50 57	15982902	1.53(0)	2.351(-8)
58	466668	4,659(5)	9.622(-6)	58	16594072	1.02(0)	3 211(-8)
59	494898	5,770(5)	1.024(-5)	59	17216083	2.36% (6)	3.591(-8)
60	524622	6.665(5)	1.02(-5)	60	17851131	2.834(6)	4.008(-8)
62	588782	9.474(5)	1.229(-5)	62	19158452	4.043(6)	1.965(-8)
63	623336	1.126(6)	1.304(-5)	63	19830857	4.807(6)	5.509(-8)
64	659622	1.338(6)	1.383(-5)	64	20515856	5.699(6)	6.104(-8)
65	696307	1.379(6)	1.380(-5)	65	31006400	6.738(6)	6.751(-8)
66	737640	1.878(6)	1.552(-5)	66	21943896	7.946(6)	7.454(-8)
67	779502	2.220(6)	1.643(-5)	67	22647073	9.347(6)	8.216(-8)
68	823357	2.620(6)	1.738(-5)	68	23383136	1.096(7)	9.043(-8)
69	869270	3.087(6)	1.837(-5)	69	24132147	1.284(7)	9.939(-8)
70	9173134	3.631(6)	1.941(-5)	70	24894194	1.499(7)	1.091(-7)
71	967558	3.834(6)	1.975(-5)	71	25669343	1.747(7)	1.195(-7)
72	1020073	4.519(6)	2.093(-5)	72	26457568	2.031(7)	1.308(-7)
73	1074943	5.317(6)	2.217(-5)	73	27259304	1.764(7)	1.430(-7)
74	1132340	6.245(6)	2.346(-5)	74	28074273	2.728(7)	1.561(-7)
75	1192021	7.323(6)	2.481(-5)	75	28902684	3.153(7)	1.702(-7)
76	1254399	8.574(6)	2.621(-5)	76	29744648	3.636(7)	1.853(-7)
77	1319439	1.002(7)	2.768(-5)	77	30600200	4.186(7)	2.016(-7)
78	1387215	1.169(7)	2.921(-5)	78	31469474	4.810(7)	2.191(-7)
79	1457820	1.363(7)	3.081(-5)	79	32352557	5.517(7)	2.377(-7)
80	1513134	1.585(7)	3.246(-5)	80	33249543	6.318(7)	2.578(-7)
81	1607877	1.841(7)	3.419(-5)	81	34160584	7.223(7)	2.792(-7)
82	1687492	2.136(7)	3.590(-5)	82	35085591	8.244(7)	3.021(-7)
83	1770294	2.623(7)	3.765(-5)	83	36024867	9.395(7)	3.266(-7)
89	2268370	5.803(7)	5.072(-5)	89	41893595	1.995(7)	5.112(-7)
90	2373096	6.657(7)	5.315(-5)	90	42932494	2.251(8)	5.492(-7)
91	2482350	7.628(7)	5.567(-5)	91	39864019	2.536(8)	5.896(-7)
92	2595296	8.729(7)	5.829(-5)	92	45055429	2.854(8)	6.325(-7)

注:(n)表示10ⁿ。

2)($1s^{2}2p4d$),-($1s^{2}2p3d$),能级间的磁偶跃迁,相 关光谱数据的规律与($1s^{2}2p3d$),-($1s^{2}2p3d$), ($1s^{2}2p3d$), 跃 迁规律大致一样,跃迁系数变化范围为 $10^{1} \sim 10^{8}$,对 于高 Z 值元素也与中性原子电偶极 E_{1} 跃迁的值相 当。3)由于主量子数的差异,在轻元素离子中 $\Delta n =$ 1的自发跃迁系数比 $\Delta n = 0$ 的自发跃迁系数小5倍 左右,随着 Z 增大 $\Delta n = 1$ 的自发跃迁系数与 $\Delta n = 0$ 的值相当, Z > 29的离子的跃迁几率比 $\Delta n = 0$ 的 付 信左右。对于加权振子强度而言,在轻元素离子 中 $\Delta n = 1$ 的值比 $\Delta n = 0$ 的值小3~4个量级,随着 Z 增大 $\Delta n = 1$ 的值缓慢增加,但仍然比 $\Delta n = 0$ 的 值小 10倍左右。这种规律可能是由于核电荷数的 增加,使得核的体积效应增大所致。

目前关于上述跃迁的光谱数据未见报道,只有 部分离子的($1s^{2}2p3d$),能级的能量^[10]。表2是能级 ($1s^22p3d$),的能量理论计算结果与实验值、文献值 的比较。由表可知,GRASP² 计算值与实验值一致, 并且普遍比相对论多体微扰(RMBPT)更接近实验 值。这主要是由于 RMBPT采用"frozen-core"Dirac-Fock 基计算电子组态的能量,没有充分考虑原子实 内的电子产生的相关能的影响。MZ¹¹(1/ZExpansion)方法在计算能量修正时插入了4个"屏蔽 常数",其计算结果较 GRASP²的计算值更接近实验 值,GRASP²的计算结果与实验误差估计大约在 0.092% 其原因在于:1)计算中选取有限个电子组 态,未能详尽地给出所有组态相互作用产生的关联 能 2)由不同的模型势引起的量子电动力学(QED) 关联的不确定因素影响计算结果。但采用 GRASP² 方法有四种离子(类铍钪、类铍钒、类铍镍、类铍铜) 的能量计算值比 MZ 的结果更接近实验值。

表 2(1*s*²2*p*3*d*),相对于基态 1*s*²2*s*²(¹S₀)的能量(单位 :cm⁻¹)

Table 2 Energies of $(1s^22p3d)$ related to the ground state $1s^22s^2(1S_0)$ (in cn
--

Nuclear charge	GRASP ²	$MBPT^{a}$	MZ^b	Experimental results ^c
21	6222975(975)	6225206 (3206)	6221083 (1083)	6222000
22	6875889(9889)	6878184(12184)	6872955 (6955)	6866000
23	7563319(- 8581)	7565702 (- 6198)	7561377 (- 10523)	7571900
24	828575(10750)	8288218 (13218)	8283784 (8784)	8275000
25	9043635(16635)	9046194 (19194)	9041643 (14643)	9027000
26	9837477 (9477)	9840135 (12135)	9835450(7450)	9828000
27	10667774(6774)	10670550(9550)	10665700(4700)	10661000
28	11535100(100)	11537990(4990)	11532950(- 2050)	11535000
29	12439982(- 1018)	12442996(1996)	12437740(- 3260)	12441000
30	13383021	13386183	13380660	

注:(n)表示误差(理论计算值 - 实验值),a 参见文献 10],b 参见文献 11],c:参见文献 10],

表 3 从 $1s^2 2s({}^{1}S_0)$ 复合到指定电子组态的速率系数(cm^3/s)($K_B T_B = 2.55$ keV)

Table 3	Total dielectronic	recombination ra	te coefficient	from 1 <i>s</i> ² 2 <i>s</i> ($^{1}S_{0}$)t	o indicated	states at $K_B T_B = 2$.55 keV
---------	--------------------	------------------	----------------	---	----------------	-------------	-------------------------	---------

Configuration	Recombination coefficient	Configuration	Recombination coefficient	Configuration	Recombination coefficient
$(1s^22p3d)_1$	1.924 (- 13)	$(1s^22p3 d)_0$	2.162(-24)	$(1s^22p4d)_1$	1.87(-14)

表4 类 Be W 离子的 M_1 跃迁的光谱数据

Table 4 Spectrocopy dataum of M_1 transition for Be-like W

Configuration	Wavelength/nm	Ref./nm	Transition possibility/s ⁻¹	Ocsillator strength
$(1s^22p3d)_1$ - $(1s^22p3d)_0$	913.9	876.515	6.245(6)	2.345(- 5)
$(1s^22p4d)_1$ - $(1s^22p3d)_0$	35.668	35.581	2.728(8)	1.561(-7)

注:(n)表示10ⁿ。

3.2 对 X 射线激光工作物质的讨论

< 10¹⁸ cm⁻³)中,双电子复合对建立和维持等离子体的电离平衡以及对离子激发态布局起着主要作用⁶¹。文献 8 冲发现 在 W 的类 Li 离子的 C 类双电子复合即内壳层电子衰落(见下)中由 $1s^{2}2s$ 复合 到($1s^{2}2p3d$) ($1s^{2}2p3d$),

 $A^{q+}(1s^22s) + e^- \Leftrightarrow A^{(q-1)+}(1s^23\ln l')^{**} \rightarrow$

 $(1s^{2}2\ln l')^{*} + h(n = 3 A, l = l' = 0, 1, 2)$ $(1s^{2}2p4d)$ 的总复合系数分别相差 11,10个量级, 从理论上基本实现了粒子数反转。

表 3 给出了复合速率系数。实现 X 射线激光的 另一个条件是有较大的增益。谱线的跃迁几率越大 增益越大。表 4 给出类 Be W 离子的 M_1 跃迁的自 发跃迁系数、振子强度。其值已达到中性原子的电偶 极跃迁的数量级。说明类铍钨离子的($1s^22p3d$),与 ($1s^22p3d$),之间、($1s^22p4d$),与($1s^22p3d$),之间 可能产生 X 射线激光。

4 结 论

文章采用多组态 Dirac-Fock 扩展平均能级 (MCDF-EAL)方法计算了类铍离子等电子序列($Z = 21 \sim 92$)禁戒跃迁($1s^{2}2pnd$)($n = 3 \sim 4$)-($1s^{2}2p3d$))的能级间隔、自发跃迁系数和加权振子 强度。结果表明:高离化度($q \ge 51$)离子激发态禁戒 跃迁的跃迁几率与中性原子的电偶极 E_1 的跃迁几 率相当。特别是类铍钨离子的 M_1 跃迁可能产生 X 射线激光谱线,此离子有望成为在双电子复合机制 下产生 X 射线激光的工作物质。目前,复合机制下 禁戒跃迁 X 射线激光研究还处于探索阶段,有待进 一步研究。

参考文献

- A. Corney. Atomic & Laser Spectrocopy [M]. Beijing : Science Press, 1984
- 2 Yi You-geng. Studies on single photon electric quadrupole transition of Magnesium 3s²¹S₀-3s3d¹D₂ [J]. Chinese Journal of Atomic and Molecular Physics (原子与分子物理 学报), 1997, 14(4) 557~560 (in Chines)
- 3 K. Fukuda , K. Ueda. Oscillator strength and rare-gasinduced broadening of the electric-quadrupole transition $4s^{21}S_0-4s3d^1D_2$ in Calcium [J]. J. Phys. Chem. , 1982 , 86(5) 576 ~ 681
- 4 S. Suckewer, J. Cecchi, S. Cohen *et al.*. Tracer element injection into POX Tokamak for spectral line identification and localized Doppler temperature measurement [J]. *Phys. Lett. A*, 1980, **80**(4) 259 ~ 262
- 5 D. L. Matthews, P. L. Hagelstein, M. D. Rosen et al.. Demonstration of soft X-ray amplifier [J]. Bull. Amer. Phys. Soc., 1984, 29:1231
- 6 A. Dasgupta. Dielectronic recombination rate to the n = 3 singly excited states : the neon sequence [J]. J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer., 1995, 54(4):737 ~ 743
- 7 Ye An-pei. Sichuan University Doctoral Dissertation , 1994 (in Chinese)
- 8 K. G. Dyall , I. P. Grant , C. T. Johnson *et al.*. GRASP : A general puprose relativistiv atomic structure program [J]. *Comput. Phys. Commun.*, 1989, 55 :425 ~ 456
- 9 Yi You-geng. Sichuan University Doctoral Dissertation , 2000 (in Chinese)
- 10 M. S. Safronova, W. R. Johson, U. I. Safronova *et al.*. Relativistic many-body calculations of energies of n = 3 states of Be-like ions [J]. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 1997, **30** 2375 ~ 2393
- K. Audo. Energy levels 1s²2lnl'(n = 2 3 A) of Na VII-S X
 III ions comparison of two calculation nethods : MCDF and MZ
 [J]. Physica Scripta , 1992 , 46 :107 ~ 114