

# 类 Li 等电子序列振子强度的计算

宋庆峰 潘守甫

(吉林大学原子与分子物理研究所)

在前文<sup>[1]</sup>中,作者考虑到自旋极化效应,推广了过渡态  $X_{\alpha}$  方法<sup>[2]</sup>;并以此计算了 Li 原子的振子强度,得到了与实验值十分符合的结果;同时,把这些结果同其他理论方法相比,对于某些跃迁来说,甚至比诸如 Hartree-Fock 方法等那些更复杂的方法算得的数据更接近于列表值<sup>[3]</sup>。本文是作者对第二周期元素的七个类 Li 离子作了低激发态振子强度的计算。

表 1

离 子	跃 迁	波长 (Å)	$\Delta E_{X\alpha}$ (Ry)	$f_{X\alpha}$	$\Delta E_0$ (Ry)	$f_0$
BeII	2s-2p	8180.6	0.2993	0.5230	0.2913	0.505
	-3p	1036.27	0.8850	0.08453	0.8803	0.0804
	2p-3s	1776.2	0.5165	0.06334	0.5143	0.0665
	-3d	1512.4	0.6098	0.6200	0.6025	0.652
	3s-3p	1209.4	0.07159	0.7550	0.07535	0.839
	3d-4f	4673.46	0.1950	1.0134	0.1950	1.01
BIII	2s-2p	2066.3	0.4584	0.3866	0.4415	0.366
	-3p	518.25	1.7655	0.1550	1.7606	0.151
	2p-3s	758.60	1.2049	0.04585	1.2042	0.0470
	-3d	677.09	1.3533	0.632	1.3459	0.651
	3s-3p	7838.5	0.1087	0.550	0.1163	0.614
3d-4f	—	0.4390	1.013	—	—	
CIV	2s-2p	1549.1	0.6147	0.3046	0.5953	0.286
	-3p	312.43	2.9247	0.2048	2.9193	0.200
	2p-3s	419.65	2.1747	0.0371	2.1768	0.0376
	-3d	384.12	2.3787	0.642	2.3723	0.654
	3s-3p	5804.9	0.1453	0.431	0.1570	0.481
3d-4f	—	0.7810	1.013	—	—	
NV	2s-2p	1240.1	0.7714	0.2506	0.7355	0.234
	-3p	209.28	4.3623	0.2401	4.3574	0.235
	2p-3s	266.31	3.4241	0.03199	3.4302	0.0322
	-3d	247.66	3.6338	0.6490	3.6795	0.658
	3s-3p	4806.7	0.1818	0.353	0.1895	0.395
3d-4f	—	1.2190	1.013	—	—	
OVI	2s-2p	1033.8	0.9268	0.2127	0.8841	0.196
	-3p	150.10	6.0777	0.2663	6.0390	0.262
	2p-3s	184.06	4.9525	0.0286	4.9631	0.0287
	-3d	173.03	5.2679	0.655	5.2666	0.662
3s-3p	3818.9	0.2182	0.299	0.2386	0.335	
FVII	2s-2p	885.64	1.0817	0.1846	1.0320	0.168
	-3p	112.95	8.0710	0.2864	8.0920	0.286
	2p-3s	134.82	6.7594	0.0263	6.7757	0.0240
	-3d	127.75	7.1304	0.660	7.1332	0.666
	3s-3p	9256.5	0.2546	0.260	0.2798	0.288
NeVIII	2s-2p	773.69	1.2373	0.1630	1.1810	0.152
	-3p	88.134	10.3423	0.3022	10.037	0.298
	2p-3s	103.05	8.8444	0.0245	8.8646	0.0245
	-3d	98.308	9.2702	0.663	9.2694	0.667
	3s-3p	2860.1	0.3009	0.299	0.3189	0.256

在这里,作者只把本文对振子强度  $f$  的计算结果同其列表值<sup>[3]</sup>一起列入表 1 中作比较。对于理论和计算公式有兴趣的读者可详见文献[1]。

在表 1 中,  $\Delta E_{X\alpha}$  与  $f_{X\alpha}$  分别是用文献[1]的方法算得的跃迁始末态的能量和偶极跃迁的振子强度值,  $\Delta E_0$  和  $f_0$  是相应的列表值<sup>[3]</sup>。可以看出,本文的计算值与列表值的最大平均相对误差为 6.05% (对 FVII), 对其他离子皆在 5% 以下。事实上,从实验来看,绝对振子强度  $f$  值具有 10~20% 或者更多的不可靠性<sup>[4]</sup>。从理论角度看,对 He 原子的理论计算的  $f$  值已经达到 1% 的精度<sup>[5]</sup>,而在两个电子的等电子序列中,  $f$  值只能确定到 5% 左右<sup>[6]</sup>。至于更多电子的原子或离子的理论计算  $f$  值的误差,自然就更大了。由此可见,本文得到的  $f$  值的计算结果是令人满意的。从物理观点来看,正如前文<sup>[1]</sup>所分析的:实际上,自旋极化过渡态  $X_\alpha$  方法已经超出了独立粒子模型的框架,而部份地隐含着组态混合的物理图象。这是作者在文献[1]中所建议的理论方法求得较好的  $f$  值的根本原因。本文的结果再一次证明了这一方法是一种令人满意、简单可靠的计算原子和(或)离子的振子强度的方法。当然,应当看到对于高离化态离子的振子强度计算应当考虑相对论效应;计入这种修正后的结果,我们将在另文中报道。

作者感谢朱硕人同志给予的有益讨论。

### 参 考 文 献

- [1] 宋庆峰,朱硕人,潘守甫;《光学学报》,1983, **3**, No. 5 (Aug), 416.
- [2] P. Gwyn Ellis, O. Gosinski; *Phys. Scripta*, 1974, **9**, No. 2 (Feb), 104.
- [3] W. L. Weiss *et al.*; *Critic. Tables Atom. Trans. Prob.*, Vol. 1, (Nat. Bur. Stand., NSRDS4, Washington D. C., 1966).
- [4] J. S. Sims, C. Whiten; *Phys. Rev. (A)*, 1973, **A8**, No. 5 (Nov), 2220.
- [5] B. Schiff, C. L. Pekeris; *Phys. Rev. (A)*, 1964, **134**, No. 3A (May), A 638;  
B. Schiff, *et al.*; *Phys. Rev. (A)* 1971, **A4**, No. 2 (Aug), A885.
- [6] A. W. Weiss; *J. Res. Nat. Bur. Stand. (A)*, 1967, **A71**, No. 2 (Mar-Apr), 163.  
L. C. Green, N. C. Johnson, E. K. Kolchin; *Astrophys. J.*, 1966, **144**, No. 1 (Apr), 369.

## Calculations of oscillator strengths of lithium-like isoelectronic sequence

SONG QINGFENG AND PAN SHOUFU

(Institute of Atomic and Molecular Physics, Jilin University)

(Received 10 May 1983)

### Abstract

Oscillator strengths of low lying excited states of BeII, BIII, CIV, NV, OVI, FVII and NeVIII lithium-like isoelectronic sequence are calculated in terms of spin polarized  $X_\alpha$  methods and the results agree with experimental data.