

计算原子跃迁几率的库仑近似的 BASIC 程序及其应用

张 挺 健

林 福 成

(福建光学技术研究所,福州)

(中国科学院上海光学精密机械研究所)

提 要

本文将计算原子跃迁几率的库仑近似的 FORTRAN 程序改编成 BASIC 程序,并将其应用于对类 He 电子序列,类 Li 电子序列的振子强度的计算以及较重元素的原子跃迁几率的计算,并利用它来计算跃迁的分支比。

一、BASIC 程序

原子跃迁几率或振子强度的研究是原子和分子物理学、化学动力学、高超音速空气动力学、物理力学、等离子体物理学、天体物理学等学科中十分重要的基础研究,其中库仑近似是比较简便的^[1,2]。

这个计算方法曾被编成 FORTRAN 语言的计算程序^[3]。本文把它改编成 BASIC 程序,改编的目的是为了能适用国内广泛使用的 TP-803 微处理机,此程序曾在美国的 HP-85 机上被试过。

BASIC 程序是在 FORTRAN 程序的基础上,稍加修改,使之变得更加简洁。其中,主程序是由 FORTRAN 的主程序改编而成,对于子程序:波函数展开系数的计算,波函数的计算, r^{-1} 函数的计算也是由 FORTRAN 程序中相应的子程序改编来的,而计算 Racah 系数的子程序是由文献[4]所列出的计算公式编成。在使用此程序时,只需输入以下十二个数,它们是:元素名称(THE NAME OF THE ELEMENT);库仑场下的电荷(ZET=Z,Z=1 为中性原子,Z=2 为一价离子),原子的电离能(E(ION));原子实的轨道角动量量子数(L(ION));高、低能级的能量(ENERG(1), ENERG(2));高、低能级电子所处的轨道角量子数(L(1), L(2));高、低能级的总的轨道角动量量子数(LTOT(1), LTOT(2))以及多重态数(SMULT);等价电子数;部分亲缘系数的平方之积(EQUIV)。运算的结果将得到多重线的总谱线强度(TOTAL STR);振子强度(G*OSCILL STR)和跃迁几率(G*A),以及不同(J_1, J_2)组态下的振子强度(G*F)和跃迁几率。如需整个程序,可与作者联系。

例: BI $3s^2S-3p^2P^0$ (在中心力场下)

原子实的电子组态 $1s^22s^2 1S$

$Z=1$

$E_{ion}=66930 \text{ cm}^{-1}$ $L_{ion}=0$

$E_1 = 40040 \text{ cm}^{-1}$ $l_1 = 0$ $L_1 = 0$
 $E_2 = 48613 \text{ cm}^{-1}$ $l_2 = 1$ $L_2 = 1$
 SMULT=2 EQUIV=1

OSCILLATOR STRENGTH IN COULOMB APPROXIMATION

THE NAME OF THE ELEMENT=B ZET= 1
 E(ION)= 66930 /CM L(ION)= 0
 ENERG(1)= 40040 /CM L(1)= 0 LTOT(1)= 0
 ENERG(2)= 48613 /CM L(2)= 1 LTOT(2)= 1
 WAVE LENGH= 11664.5 A
 N(1)= 2.02014 N(2)= 2.44765
 EQUIV= 1 SMULT= 2
 Z*R INTEGRAL= 6.40217 JES= .780537
 TOTAL MULTIPLET LINE STRENGTH= 81.9757
 G*OSCILL STR= 2.13644 G*A= 1.04336E+08
 SPIN= .5

J1	J2	G*F	G*A
.5	.5	.712148	3.47787E+07
.5	1.5	1.4243	6.95574E+07

二、应 用

利用库仑近似的 BASIC 程序可以很方便地计算原子跃迁几率或振子强度,但由于库仑近似本身具有局限性,它仅是前十个元素及其等电子序列的计算结果与实验结果符合得甚好^[2]。我们在此只作如下应用:

1. 类 He 电子序列

我们用库仑近似法计算从 He 到 Al 的类 He 离子的振子强度,并与 Wiese^[5,6] 所得的结果相比较,从曲线可以看出:库仑近似所得的结果小于 Wiese 所得结果,但总变化趋势是一致的(——Wiese 曲线;---库仑近似所得的曲线)。

2. 类 Li 等电子序列

我们对 Li-Ne 的类 Li 等电子元素的库仑近似计算与 Wiese^[5] 和 X_α 法^[7] 所得的结果进行了比较。由以上曲线可以看出:库仑近似所得的值与 Wiese 值的差别大于 X_α 法与 Wiese 的差别,这是不足为奇的。因为 X_α 法只对 Li 及其等电子序列作专门性的研究。但很值得注意的是:在 $3S-3P$ 的跃迁中, X_α 出现了与 Wiese 变化不同的趋势,而库仑近似却并未出现这个现象。

类 He、类 Li 的等电子序列的跃迁几率在目前发展的短波长的激光器中有很重要的应用。尤其是 O、Mg、Al 的类 He,类 Li 的等电子序列,应用更为广泛,在这种情况下,库仑近似法比 X_α 法将更为有效。

3. 较重元素

我们可以利用库仑近似计算方法来粗略地估计重元素振子的强度或跃迁几率及寿命。

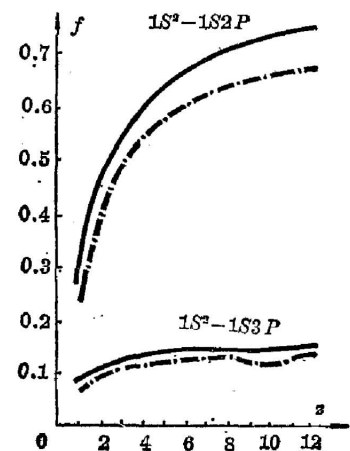


图 1 类 He 等电子序列的振子强度曲线

Fig. 1 Oscillator strength of Helium-like isoelectronic sequence vs Z
 —— Wiese; --- Coulomb approximation

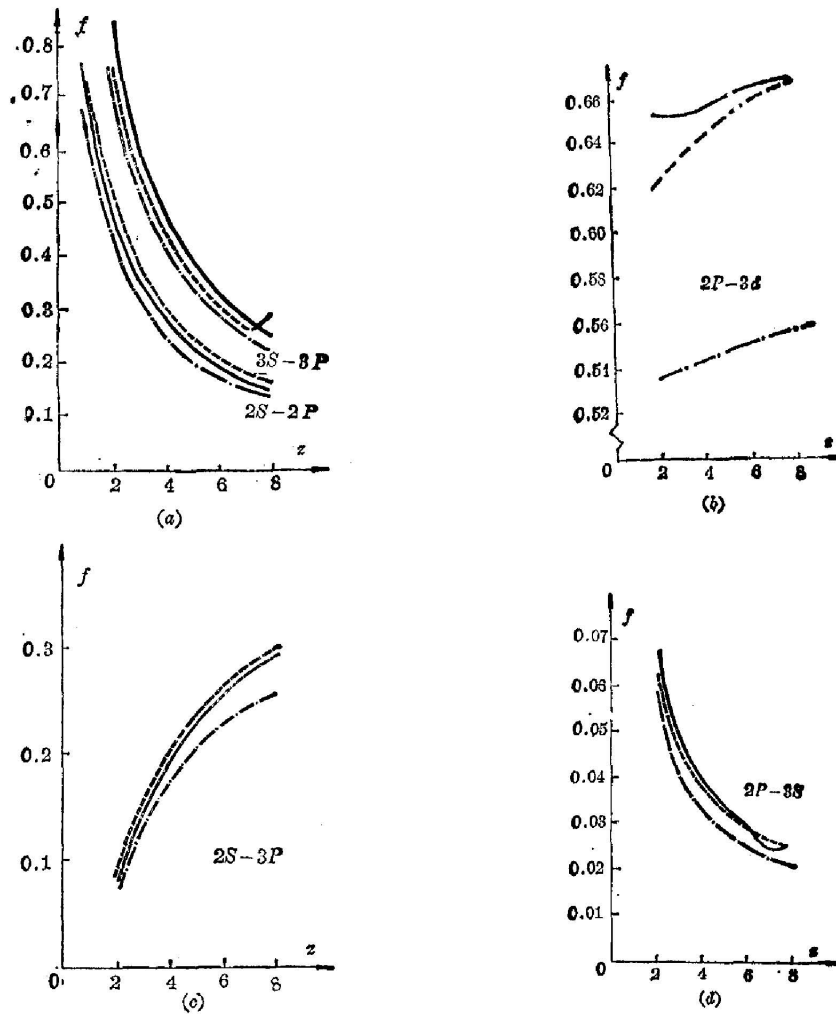


图 2 类 Li 等电子序列的振子强度

Fig. 2 Oscillator strength of Lithium-like isoelectronic sequence vs s
 — Wiese, - - - Coulomb approximation, — X_α approximation

表 1 Cd II 跃迁的库仑近似计算

Table 1 Coulomb approximation calculation on Cd II transitions

No.	$\lambda(\text{\AA})$	跃 迁 能 级	$gA(10^8 \text{s}^{-1})$	gf
1	3421.18	95383.63~124613.3	0.14093	0.024824
2	25032.29	120618.48~124613.3	132.65	1250.9
3	25627.095	120711.18~124613.3	2.7985×10^2	2766
4	160023.04	123988.39~124613.3	1.3089	504.43
5	8248.845	112490.39~124613.3	0.021574	0.022093
6	558172	123972~124151	1.58928×10^{-5}	0.07451774
7	17839.7	118546~124151	1.12082	5.36824

表 2 Cu I 跃迁的库仑近似计算

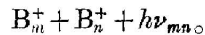
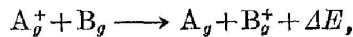
Table 2 Coulomb approximation calculation on Cu I transitions

No.	$\lambda(\text{\AA})$	跃 迁 能 级	$gA(10^8\text{s}^{-1})$	gf
1	2200.27	11202.565~56651.48	2.289	0.16677
2	2230.78	11202.565~56029.95	1.8112	0.13564
3	2325.20	11202.565~46398.34	5.0549	0.6072
4	2962.03	11202.565~44963.223	14.559	1.9224
5	3064.299	13345.423~45879.311	2.754	0.38918
6	3274.898	0~30535.302	3.0116	0.48609
7	4022.76	30535.302~55387.668	0.84394	0.20564

4. Cd II 的分支比和碰撞截面

由库仑近似的 BASIC 程序可以计算原子跃迁的分支比, 应用于文献[8]中, 可以得到 $\text{Cd}^+ - \text{He}$ 碰撞的碰撞截面。

在文献[8]中, 考虑中性原子束和惰性离子束交叉入射时, 产生反应:



式中 A 为惰性气体原子, B 为金属蒸气原子, g 、 m 分别表示基态的激发态, ΔE 为能量亏损。

B^+ 离子在 $m \rightarrow n$ 的电荷转移碰撞跃迁过程中, 可得如下关系式: $I_{mn}/\nu_{mn} \propto \sigma R_{mn}$, 式中 I_{mn} 为光强, ν_{mn} 为频率, R_{mn} 为分支比, σ 为碰撞截面。

I_{mn}/ν_{mn} 由文献[8]的实验结果给出, R_{mn} 由库仑近似的 BASIC 程序得到, 因此可以计算出 σ 值, 即碰撞截面。我们以能量亏损 ΔE 作横坐标, 以 $\log \sigma$ 值为纵坐标, 可得到以上的曲线, 这个结果有待于作进一步的研究。

作者感谢 Trefftz 博士提供了计算库仑近似的 FORTRAN 程序。

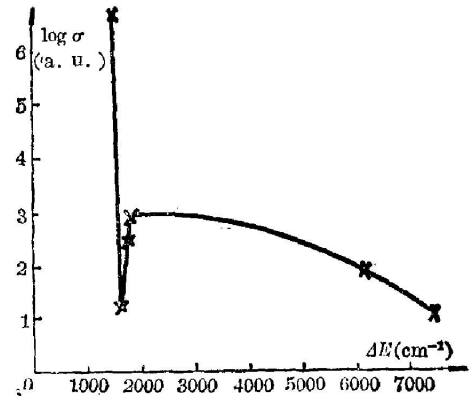


图 3 碰撞截面与能量亏损的关系

Fig. 3 Charge transfer cross section vs energy defect for $\text{He}^+ - \text{Cd}$ collision

参 考 文 献

- [1] H. Friedrich et al.; *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.*, 1970, 10, No. 1 (Jan), 11.
- [2] Hans R. Griem; *Plasma Spectroscopy*, (Mc Graw-Hill book company, 1964), Chapter 3.
- [3] 与 E. Trefftz 的私人通信。
- [4] M. E. Rose; *Elementary Theory of Angular Momentum*, (John Wiley & Sons, Inc., 1957).
- [5] W. L. Wiese et al.; *Atomic Transition Probabilities, Vol. 1. Elements Hydrogen through Neon*, NSRDS-NBS 4 (1966).
- [6] W. L. Wiese et al.; *Atomic Transition Probabilities, Vol. 2. Elements Sodium through Calcium*, NSRDS-NBS 22 (1969).
- [7] 宋庆峰等; *光学学报*, 1983, 3, No. 5 (Aug), 416.
宋庆峰等; *光学学报*, 1984, 4, No. 4 (Apr), 379.
- [8] 林福成; *光学学报*, 1984, 4, No. 3 (Mar), 193.

BASIC program of Coulomb approximation for the calculation of atomic transition probability and its application

ZHANG TINGJIAN* AND LIN FUCHENG

(Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Academia Sinica)

(Received 3 July 1984)

Abstract

A BASIC program of Coulomb approximation for the calculation of atomic transition probability based on Trefftz's FORTRAN program is given. It is used to calculate the oscillator strength of Helium-like and Lithium-like isoelectronic sequences for the first ten elements. Oscillator strength and transition probability for heavier elements Cu I and Cd II, which are important in laser application, are tabulated. Branching ratio of some transitions for Cd II is calculated to obtain the charge transfer cross section for Cd-He II collision.