

Fe XVII 离子能级和振子强度的 相对论多组态 Dirac-Fock 计算

赵永芳 潘守甫

(吉林大学原子与分子物理研究所)

提 要

本文用相对论多组态的狄拉克-福克(Dirac-Fock) (MCDF) 近似方法计算了铁类氦离子 Fe XVII 的 $2p^63s$, $3p$ 和 $3d$ 组态的所有能级以及 $3s-3p$, $3p-3d$ 跃迁的电偶极振子强度 f 值。理论计算的能级值同实验值的比较表明, 使用 MCDF 方法计算类氦等电子序列的能级会得到与实验值符合得比较好的结果。因无实验数据可作比较, 本文得到的振子强度值纯属理论预言值。

关键词: 振子强度, 跃迁波长, 相对论的多组态的狄拉克-福克法。

一、引 言

相于 X-射线源将在生命科学、化学、物理、材料科学、军事领域引起革命。但目前它仍处于理论和实验探索阶段。潜在的产生短波激光的物理图象中, 用高电离离子作为工作物质将最有希望。

Elton^[1] 研究了将已有的近紫外离子激光延伸到真空紫外和软 X-射线区之可能性。提出在 $1s^22s^22p^{k-1}3p$, $1s^22s^22p^{k-1}3s$ 组态之间的跃迁可产生此激光。它们发生在 BI-NeI 等电子序列的离子中。

在这样的理论和实验工作中, 需要必须使用的原子数据, 尤其是与跃迁有关的能量间隔的精确值以及跃迁的振子强度 f 值。Cogordan 等^[2] 对 Ti XIII 和 Fe XVII 离子的能级和跃迁波长做了相对论的计算, 因为目前已有这两种离子能级的实验数据, 因此有可能用实验数据来检验计算值的可靠性。本文是在他们工作的基础上又计算了 $3s-3p$, $3p-3d$ 跃迁的电偶极振子强度值。

二、理论和方法

在相对论的多组态自洽场方法(MCDF)中, N 个电子原子状态波函数可以表示为^[3]

$$\Phi(\pi, J, M) = \sum_{\nu} W_{\nu} \phi_{\nu}(\gamma, \pi, J, M), \quad (1)$$

式中求和是对所有的组态进行的。 π , J 和 M 分别表示宇称, 总角动量和总磁量子数。 W 是组态混合系数, 组态波函数 ϕ 是 J 和 J_z 算符的共同本征函数, γ 是确定 ϕ 需要的其它量

子数。在相对论的情况中,使用 jj 耦合, ϕ 是单电子狄拉克旋子反对称乘积(Slater 行列式)的线性组合。狄拉克旋子有形式

$$\psi_{nk}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{nk}(r) & \mathcal{Y}_{lm}(\theta, \varphi) \\ i Q_{nk}(r) & \mathcal{Y}_{\bar{l}m}(\theta, \varphi) \end{pmatrix}, \quad (2)$$

这里 P 和 Q 分别是径向波函数的大分量和小分量。 K 是相对论量子数, 定义为

$$K = \begin{cases} l & \text{当 } j = l - \frac{1}{2} \text{ 时,} \\ -(l+1) & \text{当 } j = l + \frac{1}{2} \text{ 时.} \end{cases}$$

$l = \left| K - \frac{1}{2} \right| - \frac{1}{2}$, \mathcal{Y} 是自旋-轨道的本征函数

$$\mathcal{Y}_{lm}(\theta, \varphi) = \sum_{m_s = \pm \frac{1}{2}} \left\langle lm - m_s, \frac{1}{2} m_s \left| l \frac{1}{2} jm \right\rangle Y_{lm}(\theta, \varphi) X_{m_s},$$

Y_{lm} 是球谐函数, X_{m_s} 是自旋函数,

$$\left\langle lm_s, \frac{1}{2} m_s \left| l \frac{1}{2} jm \right\rangle$$

是 $C-G$ 系数。

N 个电子原子总哈密顿(原子单位)是

$$H = \sum_i H_D(i) + \sum_{i < j} \frac{1}{r_{ij}} + H_B(i, j), \quad (3)$$

式中, $H_D(i)$ 是狄拉克单电子哈密顿算符, $1/r_{ij}$ 是库仑排斥能, $H_B(i, j)$ 是布伦特(Breit)相互作用, 与库仑相互作用相比, 它是 $(\alpha z)^2$ 量级的 ($\alpha = 1/137$), 因此在通常的理论中作为微扰处理。

当忽略布伦特相互作用时, 原子状态的总能量是

$$E = \sum_{\nu} \sum_{\mu} W_{\nu} W_{\mu} \langle \phi_{\nu} | H | \phi_{\mu} \rangle / \sum_{\nu} W_{\nu}^2. \quad (4)$$

MCDF 方法最佳化总能量(4)式, 求 H 的本征值和本征矢, 然后用微扰的方法求布伦特相互作用和拉姆(Lamb)位移的能量。

对于类氦离子, 需要考虑如下组态: $2p^6$, $2p^5 3s$, $2p^5 3p$ 和 $2p^5 3d$, 它们各有 1, 2, 4, 4 个相对论组态。根据[2]的计算结果表明, 除了组态 $2s 2p^6 3s$ 的 1S_0 和 3S_1 状态对组态 $2p^5 3p$ 的 1S_0 和 3S_1 状态有较强的耦合作用外, 考虑更多的组态对计算结果没有明显地影响, 因此我们的计算只涉及上述的相对论多组态。它们共包括 27 条能级, 我们采用与文献[2]一致的方法表示级的名称, 即对于组态 $2p^5 3s$ 的级用 jj 耦合的名称, 对其它组态用 $L-S$ 耦合名称。

理论计算的能级和波函数是用 Desolaux^[4] 的 MCDF 计算程序计算的。在计算中取了有限核近似。

电偶极跃迁振子强度 f 可以表示为

$$f = (303.8/\lambda g) S, \quad (5)$$

式中 λ 是跃迁波长(\AA), g 是较低能量状态的退化度, S 是电偶极跃迁的线强度, 本文采用 Sobel'man^[5] 的线强度公式。

三、结果和讨论

表 1 给出了 Fe XVII 离子的能级, 它包括 MCDF 值和用 MCDF (B. L) 表示的考虑布伦特相互作用和拉姆位移修正的能级值。表 2 给出了 Fe XVII 离子的 $2p^53s-2p^53p$, $2p^53p-2p^53d$ 所有允许跃迁的波长和电偶极跃迁振子强度 gf 值。

Table 1 The energy levels in Fe XVII (cm^{-1})

configuration	levels	observed ^[2] values	calculated values ^[2]	this work	
				MCDF	MCDF (B. L)
$2p^6$	$1S_0$	0.0	0.0	0.0	0.0
$2p^53s$	$(3/2\ 1/2)_2$	5849320	5843240	5846508	5843517
	$(3/2\ 1/2)_1$	5864590	5858989	5862188	5853283
	$(1/2\ 1/2)_0$	5951018	5945170	5950854	5944601
	$(1/2\ 1/2)_1$	5960870	5955175	5961045	5954650
$2p^53p$	$3S_1$	6092950	6093941	6096772	6093177
	$3D_2$	6122830	6115475	6118788	6115315
	$3D_3$	6134630	6128464	6132422	6123224
	$3D_1$	6143730	6137782	6141332	6137504
	$1D_2$	6158360	6151547	6155185	6151364
	$3P_0$	6202146	6196245	6193728	6194413
	$1P_1$	6219395	6212364	6218698	6212916
	$3P_1$	6244472	6239683	6245712	6239656
	$3P_2$	6248350	6241850	6248384	6241849
	$1S_0$	6353230	6365261	6337755	6333114
$2p^53d$	$3P_0$	6463490	6459792	6462859	6459190
	$3P_1$	6472500	6467320	6471084	6466840
	$3P_2$	6485830	6481534	6485922	6481238
	$3F_4$	6486530	6480347	6485092	6480062
	$3F_3$	6494010	6486903	6491378	6486651
	$3F_2$	6506650	6500893	6505090	6500758
	$1F_3$	6515320	6509633	6514163	6509492
	$3D_1$	6522200	6549182	6552891	6547989
	$1D_2$	6594831	6588286	6595172	6588263
	$3D_2$	6601730	6595352	6602503	6595541
	$3D_3$	6606500	6599263	6606415	6599191
	$1P_1$	6660000	6665655	6664928	6668006

从表 2 看到, 在 50 条谱线中有 29 条 $\lambda=200\sim 300\text{ \AA}$, 有 20 条 $\lambda=300\sim 400\text{ \AA}$, 这说明 Fe XVII 离子的 $3s-3p$, $3p-3d$ 跃迁波长是在短波范围内。

表 1 和表 2 的理论计算结果和实验值的比较表明, 计算的能级顺序与实验上的能级顺序完全一致, 在数值上存在 3 条偏差较大的能级: $2p^53p$ 的 $1S_0$ 和 $3S_1$ 态, $2p^53d$ 的 $3D_1$ 态。引用的理论值^[2]也同样有较大的偏差, 但是考虑了 $2s2p^63s$ 与 $2p^53p$ 的组态混合后, $1S_0$ 和 $3S_1$ 状态能量有了明显地改善。 $2p^53d$ 的 $3D_1$ 状态能量的偏差可能是由于实验值较大的相对不可靠性造成的。除了这 3 条能级外, MCDF 能级的相对偏差达到小于或等于 $(1/1000)$ 的

Table 2 The wavelengths and oscillator strengths of the $3s-3p$,
 $3p-3d$ transition in the Fe XVII

transition $i-j$	oscillator strengths $g_{if_{ij}}$	wavelengths(\AA) ^[2]		transition $i-j$	oscillator strengths $g_{if_{ij}}$	wavelengths(\AA) ^[2]	
		observed values	calculated values			observed values	calculated values
$3s-3p$				3F_3	0.13050	278.3	279.0
$(3/2\ 1/2)_2-^3S_1$	0.26062	410.5	399.0	3F_2	0.014787	268.8	268.4
3D_2	0.28404	365.6	366.6	1F_3	0.21402	262.7	262.3
3D_3	0.82778	350.5	350.0	$^3D_1-^3P_0$	0.021153	312.7	310.9
3D_1	0.054060	339.7	339.0	3P_1	0.0086813	304.2	303.6
1D_2	0.32977	323.6	323.8	3P_2	0.035711	292.3	290.9
$(3/2\ 1/2)_1-^3S_1$	0.049086	437.9	425.7	3F_2	0.45497	275.5	275.3
3D_2	0.26892	387.2	389.1	3D_1	0.21620	264.2	243.6
3D_1	0.29390	358.2	358.1	$^1D_2-^3P_1$	0.033897	318.3	317.0
1D_2	0.31454	340.4	341.2	3P_2	0.043636	305.4	303.2
3P_0	0.14553	296.2	297.5	3F_3	0.031150	297.9	298.2
$(1/2\ 1/2)_0-^1P_1$	0.11195	372.6	372.7	3F_2	0.24779	287.1	286.2
3P_1	0.24847	340.8	338.9	1F_3	0.82109	280.1	279.2
$(1/2\ 1/2)_1-^1P_1$	0.21637	386.8	387.2	3D_1	0.026173	274.8	252.1
3P_1	0.12049	352.6	350.9	$^3P_0-^3P_1$	0.018395	369.9	367.1
3P_2	0.61064	347.8	348.2	3D_1	0.21191	312.4	282.8
1S_0	0.16832	254.9	264.2	$^1P_1-^1D_2$	0.61692	266.4	266.4
$3p-3d$				1P_1	0.16002	227.0	224.7
$^3S_1-^3P_0$	0.12033	269.9	273.2	$^3P_1-^1D_2$	0.011472	285.4	286.9
3P_1	0.30776	263.5	267.6	3D_2	0.63489	279.9	281.0
3P_2	0.31509	254.5	257.7	1P_1	0.068316	240.7	239.0
$^3D_2-^3P_1$	0.057922	286.0	284.5	$^3P_2-^1D_2$	0.10308	288.6	288.7
3P_2	0.29714	275.5	273.3	3D_1	0.070438	283.0	282.7
3F_3	0.84682	269.4	269.3	3D_3	1.01302	279.2	279.8
$^3D_3-^3P_2$	0.032037	284.7	283.3	1P_1	0.013653	242.9	240.3
3F_4	1.23404	284.2	284.2	$^1S_0-^1P_1$	0.21981	326.0	307.8

程度。对于跃迁波长，我们是用 MCDF(B. L) 能级值计算的。在 $3s-3p$ 跃迁中，除了与 $2p^5 3p$ 的 1S_0 和 3S_1 有关的跃迁外，波长相对于实验值的偏差在 2\AA 范围内。在 $3p-3d$ 跃迁中，与 $2p^5 3p$ 的 1S_0 和 3S_1 状态以及与 $2p^5 3d$ 的 3D_1 状态有关的 7 条谱线出现较大的偏差，其它的谱线与实验值的偏差在 3\AA 范围内。波长相对于实验值的最大相对偏差小于 $(1/100)$ 。

综上所述，用 MCDF 方法计算类氮离子的能级和跃迁波长会得到与实验值比较符合的结果，这对于研究真空紫外和软 X-射线激光来说，MCDF 方法是提供原子数据一种理想的理论计算方法。但是，要进一步提高计算结果的精度，需要考虑更多的组态混合。

因目前尚无 Fe XVII 的振子强度实验数据，所以本文得到的振子强度值无法同实验结果相比较。但是，用本文所给的理论方法计算的 f 值是相当可靠的^[3]。

参 考 文 献

- [1] R. C. Elton; *Appl. Opt.*, 1975, **14**, No. 1 (Jan), 97~101.
[2] J. A. Cogordan *et al.*; *Physica Scripta*, 1985, **31**, No. 6 (Jun), 545~552.
[3] I. P. Grant; *Adv. Phys.*, 1970, **19**, No. 82 (Nov), 747~811.
[4] J. P. Desclaux; *Comp. Phys. Comm.*, 1975, **9**, No. 1 (Jan), 31~45.
[5] L. I. Sobel'man; *Introduction to the Theory of Atomic Spectra*, (Pergamon, Oxford, 1972), Sect. 32.
[6] K. N. Huang *et al.*; *Atom. Data and Nucl. Data Tables*, 1983, **23**, No. 2 (Mar), 355~377.

Relativistic multiconfiguration Dirac-Fock calculation of energy levels and oscillator strengths in a Fe XVII ion

ZHAO YONGFANG AND PAN SHOUFU

(*Institute of Atomic and Molecular Physics, Jilin University, Changchun*)

(Received 30 December 1986; revised 12 August 1987)

Abstract

All energy levels of the $2p^53s$, $3p$ and $3d$ configurations and electric dipole oscillator strengths f values of $3s-3p$, $3p-3d$ transitions in a neon-like ion Fe XVII have been calculated by means of the relativistic multiconfiguration Dirac-Fock (MCDF) approximate method. Calculated energy levels show a good agreement with the observations, and the MCDF approximation are well suited for the calculations of energy levels in the neon-like isoelectronic sequence. The oscillator strengths given in this paper are only theoretically prophetic values, thus far experimental values are unknown.

Key words: oscillator strength, transition wavelength: relativistic multiconfiguration Dirac-Fock method.