

# 类氙 Rb XXVIII, Sr XXIX 和 Y XXX $2p^5 3l-2p^5 4l^1$ 跃迁波长和能级的相对论 多组态 Dirac-Fock 计算

梁爱华 潘守甫  
(吉林大学原子与分子物理研究所)

张同发  
(吉林职业师范学院)

## 提 要

本文用 MCDF-EAL 计算模式, 计算了可能成为超真空紫外区的类氙等离子体激光工作物质的 Rb XXVIII, Sr XXIX 和 Y XXX 类氙离子的  $1s^2 2s^2 2p^5 3l$  与  $1s^2 2s^2 2p^5 4l$  组态的精细结构能级的能量值, 首次预言了  $3l-4l^1$  各精细结构能级间可能的跃迁波长值。  
关键词: 类氙离子, 精细结构能级。

## 一、引 言

自从 Rasen<sup>[1]</sup>和 Matthews<sup>[2]</sup>等报道用高能激光辐照 Y 和 Se 靶时, 产生了 Y 和 Se 的类氙等离子体, 并观测到该等离子体发射软 X-射线的相干辐射以后, 类氙等离子体的实验和理论研究发展得十分迅速。

在理论上, Vinogradov<sup>[3]</sup>等就类氙等离子体可能成为短波激光工作物质, 提出了模型理论, 计算结果预示了其产生激光的一些理论参数。Feldmam<sup>[4]</sup>按照 Vinogradov 的理论模型计算了 Kr XXVII 离子; Cogordan<sup>[5, 6]</sup>等先后计算了  $20 \leq z \leq 54$  类氙离子  $2p^5 3l$  组态能级及 Ti XIII, F XVII, Se XXV, Y XXX 离子的某些跃迁波长; Haar 等<sup>[8]</sup>计算了 Ni XLX 的一些跃迁波长。

在实验上, 用强激光辐照靶子产生类氙等离子体, 已经做了一些元素的类氙离子的实验, 识别出了  $2p^5 3l$  组态内某些谱线的波长<sup>[8]</sup>。但是, 所有的实验和理论研究全部局限在类氙离子的主量子数  $n=3$  上。最近, Jupen 等<sup>[9]</sup>做了 Ca XI-Mn XVI 的类氙离子实验, 标识了  $2p^5 3l-4l^1$  组态间某些谱线的波长。这是文献报道中首次进行较为系统的  $n=4$  的类氙离子的实验工作。但是到目前为止, 尚没有类氙离子  $n=4$  的理论研究。在此领域内, 由于缺少完整的实验数据, 精确的理论计算更是十分有意义的。最近, 我们用相对论多组态 Dirac-Fock 广义平均模式 (MCDF-EAL) 计算了 Ca XI 和 Mn XVI 的  $2p^5 3l$  和  $4l$  的精细结构能级以及可能的  $3l-4l^1$  和  $4l-4l^1$  的跃迁波长值<sup>[13]</sup>。 $3l-4l^1$  的波长计算值与实验值<sup>[9]</sup>符合得很好, 误差平均在  $1\text{\AA}$  之内<sup>[13]</sup>。所以, MCDF-EAL 计算模式的计算结果是相当可靠的。本文用 MCDF-EAL 计算模式, 计算了可能成为超真空紫外区激光工作物质的 Rb XXVIII、

Sr XXIX 和 Y XXX  $2p^53l$  和  $4l^1$  的精细结构能级, 首次预言了其  $2p^53l-4l^1$  各精细结构能级间的跃迁波长。

## 二、理论概述

本文使用 Grant<sup>[10]</sup>程序包, 同时调用了 McKenzie<sup>[11]</sup>的修正程序包(包括 Breit 修正及含有真空极化和自能的量子电动力学(QED)修正)。用相对论多组态 Dirac-Fock 广义平均模式, 计算了 Rb XXVII, Sr XXIX 和 Y XXX 的  $2p^53l$  和  $2p^54l$  组态所有的精细结构能级以及  $3l-4l^1$  的偶极跃迁波长。有关 MCDF 理论和计算程序的理论请参阅文献[10, 11, 12]。

单组态的计算结果不能令人满意<sup>[6]</sup>。因此, 在本文计算中, 考虑了预计与所计算的组态。

有较强相互作用的  $2s2p^63l$  组态的混合作用<sup>[5, 6, 7, 9]</sup>, 在计算  $2p^53s(4s)$ ,  $2p^53d(4d)$  组态时, 混入了  $2s2p^63p$  组态; 计算  $2p^53p(4p)$  组态时, 混入了  $2p^6$ 、 $2s^2p^63s$ 、 $2s2p^63d$  组态; 计算  $2p^54f$  组态时, 混入了  $2p^6$ 、 $2p^53p$ 、 $2s2p^63s$ 、 $2s2p^63d$  组态。

## 三、结果与讨论

在表 1 中, 给出了在  $j-j$  耦合表象下,  $2p^53l-2p^54l^1$  各精细结构能级间跃迁波长的预言值(波长的单位为 Å)。

Table 1. predicted transition wavelengths (Å) of  $3l-4l^1$  for Rb XXVIII, Sr XXIX and Y XXX ions

$nL \dots \dots \dots n'L'$	$j-j$	Rb XXVIII	Sr XXIX	Y XXX
$3S \dots \dots \dots 4P$				
(3/2, 1/2) (3/2, 1/2)	2 1	19.052	17.850	16.757
(3/2, 1/2) (3/2, 1/2)	2 2	19.081	17.831	16.740
(3/2, 3/2) (3/2, 3/2)	3 3	18.872	17.672	16.580
(3/2, 3/2) (3/2, 3/2)	1 1	18.864	17.665	16.574
(3/2, 3/2) (3/2, 3/2)	2 2	18.823	17.626	16.538
(1/2, 1/2) (3/2, 1/2)	1 1	19.152	17.940	16.839
(1/2, 1/2) (3/2, 1/2)	2 2	19.130	17.926	16.822
(1/2, 1/2) (3/2, 3/2)	1 1	18.961	17.753	16.654
(1/2, 1/2) (3/2, 3/2)	2 2	18.919	17.714	16.618
(1/2, 1/2) (3/2, 3/2)	0 0	18.716	17.529	16.448
(1/2, 1/2) (1/2, 1/2)	0 1	19.040	17.839	16.747
(1/2, 1/2) (1/2, 3/2)	1 1	18.855	17.656	16.565
(1/2, 1/2) (1/2, 1/2)	1 1	19.090	17.884	16.788
(1/2, 1/2) (1/2, 1/2)	0 0	18.915	17.726	16.644
(1/2, 1/2) (1/2, 3/2)	1 1	18.904	17.699	16.604
(1/2, 1/2) (1/2, 3/2)	2 2	18.893	17.690	16.595
$3P \dots \dots \dots 4S$				
(3/2, 1/2) (3/2, 1/2)	1 2	21.569	20.141	18.850
(3/2, 1/2) (3/2, 1/2)	1 1	21.529	20.109	18.817
(3/2, 1/2) (3/2, 1/2)	2 2	21.683	20.239	18.934
(3/2, 1/2) (3/2, 1/2)	1 1	21.642	20.202	18.901

[continued]

(3/2, 3/2)	(3/2, 1/2)	3	2	22.200	20.758	19.454
(3/2, 3/2)	(3/2, 1/2)	1	2	22.219	20.772	19.465
	(3/2, 1/2)		1	22.176	20.733	19.429
(3/2, 3/2)	(3/2, 3/2)	2	2	22.400	20.938	19.618
	(3/2, 1/2)		1	22.356	20.899	19.582
(3/2, 3/2)	(3/2, 1/2)	0	1	23.086	21.580	20.218
(1/2, 1/2)	(1/2, 1/2)	1	0	21.624	20.184	18.884
	(1/2, 1/2)		1	21.643	20.156	18.863
(1/2, 3/2)	(1/2, 1/2)	1	0	22.229	20.782	19.474
	(1/2, 1/2)		1	22.250	20.752	19.452
(1/2, 3/2)	(1/2, 1/2)	2	1	22.304	20.802	19.499
(1/2, 1/2)	(1/2, 1/2)	0	1	22.615	21.009	19.619
3P.....4D						
(3/2, 1/2)	(3/2, 3/2)	1	0	19.729	18.455	17.300
	(3/2, 3/2)		1	19.699	18.428	17.274
	(3/2, 3/2)		2	19.648	14.380	17.231
(3/2, 3/2)	(3/2, 3/2)	2	1	19.794	18.509	17.344
	(3/2, 3/2)		3	19.758	18.477	17.316
	(3/2, 3/2)		2	19.742	18.462	17.301
(3/2, 3/2)	(3/2, 3/2)	3	3	20.187	18.909	17.750
	(3/2, 3/2)		2	20.170	18.892	17.733
	(3/2, 5/2)		4	20.171	18.890	17.728
	(3/2, 5/2)		2	20.134	18.857	17.700
	(3/2, 5/2)		3	20.095	18.821	17.665
(3/2, 3/2)	(3/2, 3/2)	1	0	20.271	18.983	17.816
	(3/2, 3/2)		1	20.240	18.954	17.788
	(3/2, 3/2)		2	20.185	18.904	17.742
	(3/2, 5/2)		2	20.149	18.869	17.708
	(3/2, 5/2)		1	19.924	18.702	17.551
(3/2, 3/2)	(3/2, 3/2)	2	..... 1	20.390	19.093	17.197
	(3/2, 3/2)		3	20.351	19.059	17.887
	(3/2, 3/2)		2	20.334	19.042	17.870
	(3/2, 5/2)		1	20.069	18.837	17.676
	(3/2, 5/2)		2	20.298	19.006	17.835
	(3/2, 5/2)		3	20.258	18.969	17.800
(3/2, 3/2)	(3/2, 3/2)	0	1	20.995	19.660	18.448
	(3/2, 5/2)		1	20.656	19.388	18.192
(1/2, 1/2)	(1/2, 3/2)	1	2	19.719	18.441	17.282
	(1/2, 3/2)		1	19.591	18.326	17.178
(1/2, 3/2)	(1/2, 3/2)	1	2	20.222	18.939	17.776
	(1/2, 5/2)		2	20.173	18.890	17.727
	(1/2, 3/2)		1	20.087	18.817	17.665
(1/2, 3/2)	(1/2, 3/2)	2	2	20.266	18.890	17.814
	(1/2, 5/2)		2	20.217	18.931	17.765
	(1/2, 5/2)		3	20.199	18.914	17.750
	(1/2, 3/2)		1	20.131	18.858	17.703
(1/2, 1/2)	(1/2, 3/2)	0	1	20.384	19.028	17.802
3D.....4P						
(3/2, 3/2)	(3/2, 1/2)	0	1	24.093	22.461	20.997

[continued]

	(3/2, 3/2)		1	23.792	22.169	20.706
(3/2, 3/2)	(3/2, 1/2)	1	1	24.212	22.571	21.094
	(3/2, 1/2)		2	24.177	22.541	21.068
	(3/2, 3/2)		1	23.908	22.276	20.805
	(3/2, 3/2)		2	23.842	22.215	20.749
	(3/2, 3/2)		0	23.519	21.923	20.484
(3/2, 3/2)	(3/2, 1/2)	3	2	24.361	22.704	21.211
	(3/2, 3/2)		3	24.102	22.445	20.954
	(3/2, 3/2)		2	24.021	22.372	20.888
(3/2, 3/2)	(3/2, 1/2)	2	1	24.433	22.776	21.282
	(3/2, 1/2)		2	24.398	22.745	21.256
	(3/2, 1/2)		3	24.138	22.486	20.997
	(3/2, 3/2)		1	24.125	22.475	20.988
	(3/2, 3/2)		2	24.057	22.413	20.931
(3/2, 5/2)	(3/2, 3/2)	4	3	24.137	22.490	21.008
(3/2, 5/2)	(3/2, 3/2)	2	3	24.291	22.624	21.124
	(3/2, 3/2)		1	24.277	22.613	21.114
	(3/2, 3/2)		2	24.209	22.550	21.057
(3/2, 5/2)	(3/2, 3/2)	3	3	24.446	22.769	21.261
	(3/2, 3/2)		2	24.363	22.694	21.193
(3/2, 5/2)	(3/2, 3/2)	1	1	25.032	23.306	21.753
	(3/2, 3/2)		2	24.959	23.239	21.691
	(3/2, 3/2)		0	24.606	22.921	21.403
(1/2, 3/2)	(1/2, 1/2)	2	1	24.349	22.692	21.199
	(1/2, 3/2)		1	24.047	22.395	20.908
	(1/2, 3/2)		2	24.030	22.380	20.894
(1/2, 5/2)	(1/2, 3/2)	2	1	24.202	22.548	21.059
	(1/2, 3/2)		2	24.184	22.532	21.045
(1/2, 5/2)	(1/2, 3/2)	3	2	24.262	22.603	21.109
(1/2, 3/2)	(1/2, 1/2)	1	1	24.990	23.260	21.706
	(1/2, 1/2)		0	24.691	22.993	21.446
	(1/2, 3/2)		1	24.673	22.949	21.400
	(1/2, 3/2)		2	24.655	22.933	21.386
3D.....4F						
(3/2, 3/2)	(3/2, 5/2)	0	1	22.058	20.598	19.279
(3/2, 3/2)	(3/2, 5/2)	1	1	22.160	20.690	19.365
	(3/2, 5/2)		2	22.134	20.669	19.344
(3/2, 3/2)	(3/2, 5/2)	3	4	22.298	20.814	19.474
	(3/2, 5/2)		2	22.289	20.806	19.465
	(3/2, 5/2)		3	22.259	20.779	19.441
(3/2, 3/2)	(3/2, 5/2)	2	1	22.343	20.862	19.524
	(3/2, 5/2)		2	22.320	20.840	19.503
	(3/2, 5/2)		3	22.290	20.819	19.479
(3/2, 5/2)	(3/2, 5/2)	4	4	22.328	20.853	19.520
	(3/2, 7/2)		5	22.310	20.835	19.502
	(3/2, 5/2)		3	22.288	20.817	19.487
	(3/2, 7/2)		3	22.276	20.804	19.474

[continued]

	(3/2, 7/2)		4	22.261	20.790	19.461
(3/2, 5/2)	(3/2, 5/2)	2	1	22.473	20.981	19.633
	(3/2, 5/2)		2	22.450	20.959	19.612
	(3/2, 5/2)		3	22.420	20.931	19.587
	(3/2, 7/2)		2	22.411	20.923	19.578
	(3/2, 7/2)		3	22.407	20.918	19.574
(3/2, 5/2)	(3/2, 5/2)	3	4	22.592	21.093	19.739
	(3/2, 5/2)		2	22.583	21.084	19.730
	(3/2, 5/2)		3	22.552	21.056	19.705
	(3/2, 7/2)		2	22.543	21.047	19.696
	(3/2, 7/2)		3	22.539	21.043	19.691
	(3/2, 7/2)		4	22.524	21.029	19.678
(3/2, 5/2)	(3/2, 5/2)	1	1	23.119	21.577	20.184
	(3/2, 5/2)		2	23.094	21.553	20.161
	(3/2, 7/2)		2	23.053	21.515	20.126
(1/2, 3/2)	(1/2, 5/2)	2	3	22.252	20.772	19.435
	(1/2, 5/2)		2	22.237	20.758	19.422
(1/2, 5/2)	(1/2, 5/2)	2	3	22.384	20.903	19.565
	(1/2, 5/2)		2	22.369	20.889	19.552
	(1/2, 7/2)		3	22.356	20.875	19.538
(1/2, 5/2)	(1/2, 5/2)	3	3	22.451	20.964	19.621
	(1/2, 5/2)		2	22.435	20.950	19.608
	(1/2, 7/2)		4	22.424	20.938	19.595
	(1/2, 7/2)		3	22.422	20.936	19.593
(1/2, 3/2)	(1/2, 5/2)	1	2	22.771	21.233	19.846

从已有的文献中得知<sup>[5,6]</sup>, 用 MCDF 计算模式计算的 Ti、Fe、Se、Y 等的类氦离子  $3l-3l'$  的跃迁波长与实验符合得相当好。误差均在  $1 \text{ \AA}$  之内。而且, 多组态的计算结果比单组态的结果更符合实验测量结果<sup>[6]</sup>。因而, 多组态的理论计算可得到相当好的预言结果。

我们最近计算的 Ca XI 和 Mn XVI 的  $3l-4l'$  的跃迁波长与实验值符合得相当好, 误差平均在  $1 \text{ \AA}$  之内。其能量值的理论预言值与实验测量值的最大相对误差, 对于 Ca XI 和 Mn XVI, 分别是 1.41% 和 0.31%。而且, 随着  $z$  的增大, 真实的电子间的耦合情况更接近我们使用的  $j-j$  耦合表象<sup>[5]</sup>。因此, 本文用相对论多组态 Dirac-Fock 的计算模式, 预言的 Rb XXVIII、Sr XXIX 和 Y XXX 的  $3l-4l'$  的跃迁波长是十分可靠的。

组态相互作用的大小可用组态混合系数描述, 对 Rb、Sr、Y 的类氦离子,  $3s$ 、 $4s$  和  $3d$  组态的能级受  $2s2p^63p$  的影响较小, 混合系数多数为  $10^{-4} \sim 10^{-3}$  量级。微扰组态  $2s2p^63s$  比  $2s2p^63d$  对  $3p$  和  $4p$  电子的影响均高一个数量级。而且  $2s2p^63s$  对  $3p$  的扰动又比  $4p$  的扰动大一个数量级,  $2s2p^63s$  对  $3p$  的混合系数为  $10^{-2}$  量级。  $4F'$  组态受  $3s2p^63d$  的影响远大于  $2s2p^63s$  和  $2p^53p$  组态,  $2s2p^63d$  组态对  $4F'$  组态的混合系数为  $10^{-2}$  量级。与 Ca XI 和 Mn XVI 的组态作用比较, Rb XXVIII、Sr XXIX 和 Y XXX 受  $2p2p^63l$  组态的影响较弱, 对于某些组态, 大约弱一个量级。

由于篇幅限制, 未给出计算的能级值。

本文数值计算工作是在沈阳东北电力试验研究院计算中心的 IBM-4381 计算机上完成的, 对于他们给予的大力帮助和支持, 作者致以衷心的感谢。

### 参 考 文 献

- [ 1 ] M. D. Rosen *et al.*; *Phys. Rev. Lett.*, 1985, **54**, No. 2 (Jan), 106.
- [ 2 ] D. L. Matthews *et al.*; *Phys. Rev. Lett.*, 1985, **54**, No. 2 (Jan), 110.
- [ 3 ] A. V. Vinogradov *et al.*; *Sov. J. Quantum Electron.*, 1980, **10**, No. 6 (Jun), 754. and 1983, **13**, No. 3 (Mar), 303.
- [ 4 ] U. Feldman *et al.*; *J. Appl. Phys.*, 1985, **54**, No. 5 (May), 2188.
- [ 5 ] J. A. Cogordan *et al.*, *Physica Scripta*, 1985, **31**, No. 6 (June), 545.
- [ 6 ] J. A. Cogordan *et al.*; *Phys. Rev. (A)*; 1985, **32A**, No. 3 (Sep), 1885.
- [ 7 ] J. A. Cogordan *et al.*; *Physica Scripta*, 1986, **33**, No. 5 (May), 406.
- [ 8 ] R. R. Haar *et al.*; *Physica Scripta*, 1987, **35**, No. 3 (Mar), 296 (以及该文所引的文献)。
- [ 9 ] C. Jupen *et al.*; *Phys. Rev. (A)*, 1987, **35A**, No. 1 (Jan), 116.
- [ 10 ] I. P. Grant *et al.*; *Comput. Phys. Commun.*, 1980, **21**, No. 2 (Dec), 207.
- [ 11 ] B. J. McKenzie *et al.*, *Comput. Phys. Commun.*, 1980, **21**, No. 21, (Dec), 233.
- [ 12 ] I. P. Grant, *Adv. Phys.*; 1970, **19**, No. 82 (Nov), 747.
- [ 13 ] 梁爱华, 张同发, 潘守甫; «中国激光»(待发表)。

## Multiconfiguration Dirac-Fock calculations of Ne-like Rb XXVIII, Sr XXIX and Y XXX $2p^53l-2p^54l^1$ transition wavelengths and fine-structure energies

LIANG AIHUA AND PAN SHOUFU

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

ZHANG TONGFA

(*Vocational Teachers College of Jilin*)

(Received 24 February 1988)

### Abstract

The fine-structure energies of  $2p^53l$  and  $2p^54l$  and transition wavelenths of  $2p^53l-4l^1$  have been calculated with the MCDF-EAL computer code for Ne-like RbXXVIII, SrXXIX and YXXX ions which may be the candidates for lasing action in the extreme vacuum ultraviolet region.  $3l-4l^1$  possible transition wavelenths are predicted.

**Key words:** Ne-like ions; fine-structure energy.