第11卷 第2期　　光学学报　　Vol. 11, No. 2
1991年2月　　ACTA OPTICA SINICA　　February, 1991

类钠铁离子的辐射跃迁几率*

张　颖　朱颀人　潘守甫
(吉林大学原子与分子物理所，　长春 130023)

提　　要

本文在多组态 Dirac-Fock 理论框架下计算了类钠铁离子的能级及各能级 $n_il_i-n_kl_k$，($n_i\leqslant5, n_k\leqslant15$)间的电偶极辐射跃迁几率，证实了我们发现的新规律：在一个里德伯线系内，当上能级主量子数足够大之后，其跃迁几率仅与主量子数(不是等效主量子数)的三次方成反比。

关键词：软 X-射线激光，辐射跃迁几率，负三次方规律。

一、引　言

最近，中国科学院上海光学精密机械研究所徐至展等以低于同类实验一个数量级以上的驱动功率密度($2\times10^{12}\ \mathrm{W\cdot cm^{-2}}$)实现了类锂硅离子软 X-射线激光[1]。由此，可以预见高离化的类钠离子也应有软 X-射线激光。为了对这一预言提供理论依据，需要知道等离子体软 X-射线激光工作离子的各种主要原子过程的数据及其确切的变化规律。这些过程分为两大类：辐射跃迁过程和电子碰撞过程。本文以类钠铁离子为例对激光物理所涉及的辐射跃迁过程进行了计算，同时进一步证实了所发现的电偶极辐射跃迁几率中的新规律，在一个里德伯线系内，当上能级主量子数足够大之后，其电偶极辐射跃迁几率仅与主量子数(不是等效主量子数)的三次方成反比。

二、计 算 方 法

本文采用多组态 Dirac-Fock 程序[2]，连同其横向Breit修正、量子电动力学修正程序[3]和作者自编的计算相对论辐射跃迁几率的后续程序对电偶极辐射跃迁过程进行了计算。对每个能级均在库仑规范和长度规范下求得跃迁几率值。其相对偏差非常灵敏地反映了所得波函数的准确度**。

表1列出了 $n\leqslant15$, $l\leqslant5$ 的全部能级。对 $n\leqslant6$ 给出了精细结构能级值。对 $n\geqslant7$，由于相对论效应明显减弱，不必要列出精细结构能级值。表中虽然只列出了 $l\leqslant5$ 的能级，但 $l=5$ 的能级已在有效数字之内精确地代表了 $l>5$ 的能级值。对高离化离子 Fe^{15+} 的 $15h$ 能级，由于 n, l 很大，此能级的相对论效应和极化效应很小，可忽略，由表中 $15h$ 的能量值可推算出 Fe^{15+} 的离化阈能为 488.913 eV，与实验值(489.26 eV)[5]符合得相当好。

收稿日期：1990年6月11日；收到修改稿日期：1990年9月19日

* 本文是在国家教委博士点基金和中国原子分子数据研究联合体基金资助下完成的。

** 在本文的计算中，大部分跃迁的这种偏差在2%之内。对少数由于径向相消效应[4]造成的弱跃迁其相对偏差也在8%之内。本文取它们的算术平均值作为该对能级电偶极跃迁几率的理论值。

Table 1 Fe^{15+} fine levels

level	energy(eV)	level	energy(eV)	level	energy(eV)
3S	0	$5P_{3/2}$	337.020	$6g_{7/2}$	392.129
$3P_{1/2}$	34.381	$5d_{3/2}$	345.341	$6g_{9/2}$	392.140
$3p_{3/2}$	36.952	$5d_{5/2}$	345.427	$6h_{9/2}$	392.148
$3d_{3/2}$	83.906	$5f_{5/2}$	349.176	$6h_{11/2}$	392.155
$3d_{5/2}$	84.276	$5f_{7/2}$	349.207	7s	410.852
4s	231.244	$5g_{7/2}$	349.548	7P	413.291
$4P_{1/2}$	244.332	$5g_{9/2}$	349.566	7d	416.254
$4P_{3/2}$	245.867	6S	380.947	7f	417.651
$4d_{3/2}$	263.104	$6P_{1/2}$	384.718	7g	417.811
$4d_{5/2}$	263.268	$6P_{3/2}$	384.998	7h	417.823
$4f_{5/2}$	270.641	$6d_{3/2}$	389.665	7i	————
$4f_{7/2}$	270.701	$6d_{5/2}$	389.715	8S	429.849
5g	329.823	$6f_{5/2}$	391.887	8P	431.453
$5P_{1/2}$	336.525	$6f_{7/2}$	391.904	8d	433.417
8f	434.332	11P	458.934	13h	468.304
8g	434.486	11d	459.684	14S	470.266
8h	434.485	11f	460.045	14P	470.532
9S	442.664	11g	460.123	14d	470.901
9P	443.772	11h	460.127	14f	471.086
9d	445.143	12S	463.348	14g	471.142
9f	445.790	12P	463.792	14h	471.143
9g	445.903	12d	464.372	15S	472.714
9h	445.909	12f	464.654	15P	472.924
10S	451.716	12g	464.722	15d	473.228
10P	452.511	12h	464.725	15f	473.381
10d	453.509	13S	467.217	15g	473.433
10f	453.983	13P	467.557	15h	473.433
10g	454.076	13d	468.015	-	————
10h	454.081	13f	468.241	-	————
11s	458.347	13g	468.302	$2P^6$	488.913

表2列出了 $n_il_i-n_kl_k$ 的多重态跃迁几率平均值

$$A_{n_il_i-n_kl_k}=\frac{1}{(\bar{\lambda}_{ik})^3\sum\limits_{J_k}(2J_k+1)}\sum_{J_iJ_k}(2J_k+1)\lambda^3(J_iJ_k)A(J_k,\ J_i), \tag{1}$$

$$\bar{\lambda}_{ik}=12398.52\left[\frac{\sum\limits_k(2J_k+1)E(J_k)}{\sum\limits_k(2J_k+1)}-\frac{\sum\limits_i(2J_i+1)E(J_i)}{\sum\limits_i(2J_i+1)}\right], \tag{2}$$

(2)式中 E 以 eV 为单位，λ 以 Å 为单位。

三、结果与讨论

由表2可见，对各里德伯线系，当上能级主量子数足够大之后，其跃迁几率仅与主量子数的三次方成反比。其精度完全在本文的计算误差之内。这就进一步证明了我们发现的这

Table 2　Transition probabilities $A_{n_k l_k - n_i l_i}$ (sec^{-1})($n_i \leqslant 5$, $n_k \leqslant 15$)

$n_i l_i$	$-n_k l_k$	A	$n_i l_i$	$-n_k l_k$	A	$n_i l_i$	$-n_k l_k$	A
3S	3P	7.829(9)	3P	5d	2.316(11)	3d	6f	1.729(11)
	4P	1.894(11)		6d	1.383(11)		7f	9.850(10)
	5P	1.092(11)		7d	8.798(10)		8f	6.196(10)
	6P	6.481(10)		8d	5.727(10)		9f	4.179(10)
	7P	4.111(10)	3d	4P	8.447(10)		10f	2.960(10)
	8P	2.758(10)		5P	3.317(10)		11f	2.178(10)
3P	4S	3.300(11)		6P	1.680(10)		12f	1.566(10)
	5S	1.460(11)		7P	9.780(9)		13f	1.284(10)
	6S	7.802(10)		8P	6.226(9)	4S	4P	1.730(9)
	7S	4.675(10)		9P	4.221(9)		5P	3.742(10)
	8S	3.028(10)		10P	2.999(9)		6P	2.510(10)
	9S	2.076(10)		11P	2.211(9)		7P	1.646(10)
	10S	1.456(10)		12P	1.678(9)		8P	1.119(10)
	11S	1.101(10)		13P	1.305(9)	4P	5S	1.036(11)
3P	3d	2.017(10)	3d	4f	1.040(12)		6S	5.250(10)
	4d	3.907(11)		5f	3.579(11)		7S	3.066(10)
4P	8S	1.956(10)	4d	10P	2.877(9)	4f	8d	7.158(8)
	9S	1.328(10)		11P	2.107(9)		9d	4.688(8)
	10S	9.401(9)		12P	1.591(9)		10d	3.254(8)
	11S	6.866(9)		13P	1.233(9)		11d	2.357(8)
	12S	5.289(9)	4d	5f	1.804(11)		12d	1.768(8)
	13S	4.111(9)		6f	9.377(10)		13d	1.362(8)
4P	5d	6.174(10)		7f	5.465(10)		14d	1.072(8)
	6d	4.639(10)		8f	3.476(10)		15d	8.603(7)
	7d	3.167(10)		9f	2.356(10)	4f	5g	2.815(11)
	8d	2.183(10)		10f	1.675(10)		6g	9.123(10)
	9d	1.556(10)		11f	1.235(10)		7g	4.303(10)
4d	5P	3.769(10)		12f	9.382(9)		8g	2.431(10)
	6P	1.749(10)		13f	7.300(9)		9g	1.529(10)
	7P	9.797(9)	4f	5d	5.049(9)		10g	1.034(10)
	8P	6.105(9)		6d	2.221(9)		11g	7.351(9)
	9P	4.084(9)		7d	1.186(9)		12g	5.433(9)
4f	13g	4.145(9)	5P	13S	2.722(9)	5d	15P	6.378(8)
	14g	3.239(9)	5P	6d	1.725(10)	5d	6f	4.778(10)
	15g	2.547(9)		7d	1.377(10)		7f	2.985(10)
5S	5P	4.625(8)		8d	9.979(9)		8f	1.939(10)
	6P	1.145(10)		9d	7.286(9)		9f	1.327(10)
	7P	8.360(9)		10d	5.426(9)		10f	9.475(9)
	8P	5.839(9)		11d	4.131(9)		11f	7.009(9)
	9P	4.101(9)	5d	6P	1.713(10)		12f	5.334(9)
	10P	3.062(9)		7P	8.814(9)		13f	4.530(9)
5P	6S	3.990(10)		8P	5.288(9)		14f	3.304(9)
	7S	2.211(10)		9P	3.461(9)		15f	2.670(9)
	8S	1.374(10)		10P	2.404(9)	5f	6d	3.746(9)
	9S	9.199(9)		11P	1.716(9)		7d	1.877(9)
	10S	6.470(9)		12P	1.309(9)		8d	1.084(9)
	11S	4.738(9)		13P	1.008(9)		9d	6.896(8)
	12S	3.579(9)		14P	7.946(8)		10d	4.694(8)
5f	11d	3.356(8)	5f	13g	3.603(9)	5g	15f	1.464(7)
	12d	2.491(8)		14g	2.817(9)	5g	6h	1.089(11)
	13d	1.904(8)		15g	2.216(9)		7h	3.338(10)
	14d	1.491(8)	5g	6f	7.817(8)		8h	1.534(10)
	15d	1.190(8)		7f	3.227(8)		9h	8.548(9)
5f	6g	7.310(10)		8f	1.668(8)		10h	5.336(9)
	7g	3.638(10)		9f	9.890(7)		11h	3.592(9)
	8g	2.086(10)		10f	6.417(7)		12h	2.552(9)
	9g	1.320(10)		11f	4.433(7)		13h	1.888(9)
	10g	8.947(9)		12f	3.208(7)		14h	1.441(9)
	11g	6.377(9)		13f	2.406(7)		15h	1.128(9)
	12g	4.722(9)		14f	1.856(7)			

Here: $X(y)$ means $X \times 10^y$.

一新规律。实际上，对各里德伯线系，我们已经将主量子数算到了15。但表中，当 l_i，l_k 都较小时，有些里德伯线系主量子数之所以取到 $n<15$ 是因为此时已经归到 n^{-3} 规律中去了。当 l_i、l_k 都较大时，收敛较慢，但已有 n^{-3} 规律的趋势，故也必将收敛到此规律中去。

参 考 文 献

[1] 徐至展等;《中国激光》, 1989, **16**, No. 10 (Oct), 616.
徐至展等;《中国激光》, 1990, **17**, No. 2, (Feb), 104.

[2] I. P. Grant *et al.*; *Comput Phys. Comun.*, 1980, **21**, No. 2 (Dec), 207～232.

[3] B. J. Mckenzie *et al.*; *Comput Phys. Commun.*, 1980, **21**, No. 2 (Dec), 233～246.

[4] R. D. Cowan; *«The Theory of Atomic Structure and Spectra»*, (Univer. of California press, Berkeley, 1981), 433～434.

[5] R. D. Cowan; *«The Theory of Atomic Structure and Spectra»*, (University of California press, Berkeley, 1981), 12～15.

Radiative transition probabilities for Na-like Fe

ZHANG YING, ZHU QIREN AND PAN SHOUFU

(Institute of Atomic and Molecular Physics, Jilin University, Changchun 130023)

(Received 11 June 1990; revised 19 September 1990)

Abstract

The electric dipole radiative transition probabilities between levels n_il_i–n_kl_k ($n_i\leqslant 5$, $n_k\leqslant 15$) for Na-like Fe have been calculated with multiconfiguration Dirac-Fock framework. We have confirmed the new regularity which has been found recently: the transition probability is just inversely proportional to the 3rd power of the principal quantum number n of upper level for a Rydberg series of spectrum lines when n is large enough.

Key word: Na-like Fe soft-X-ray lasers, radiative transition probability, minus 3rd power regularity.