

类锂离子与软 X 射线激光研究有关的跃迁波长和振子强度

王永昌

袁 萍

(西安交通大学物理系, 西安 710049)

(西北师范大学物理系, 兰州 730070)

范 品 忠

(中国科学院上海光学精密机械研究所, 上海 201800)

提 要

本文用多组态HXR自洽场方法和优化Slater径向积分法相结合计算了类锂离子($Z=13\sim 17, 19$) $1s^2nl^2L_J$ ($2\leq n\leq 5, 0\leq l\leq 4$)能级之间的跃迁波长和振子强度, 并和实验进行了比较。就软 X 射线激光跃迁 $4f-3d$ 而言, 本文计算的波长值比其它文献的计算值更接近于观测值。

关键词: 类锂离子; 软 X 射线; 激光振子强度。

一、引 言

近年来国内外几个实验室均成功地演示了激光等离子体软 X 射线范围自发发射的放大性质, 特别是明显地观测到类锂离子 Mg^{9+} , Al^{10+} 和 Si^{11+} 的 $4f-3d$, $5f-3d$, $5d-3p$ 等跃迁的粒子数反转和激光增益^[1~4]。在实现更短波长的软 X 射线激光放大方面, 类锂离子的复合泵浦机理比电子碰撞激发泵浦机理所要求的条件较低, 为了得到同样波长的激光放大, 前者要求等离子体的温度和靶材料的原子序数 Z 均比后者低。最近文献[5]报道用一个低功率驱动的 6J 脉冲激光装置成功地观测到 Al^{9+} 和 Al^{10+} 的软 X 射线激光作用, 因此复合泵浦方案引起人们特别的关注和兴趣。

理论上为了探索出激光等离子体最佳泵浦状态所对应的等离子体参量如电子温度、电子和离子密度等, 对类锂离子激发能级粒子数反转比率和激光增益系数进行了大量的模拟计算。约化粒子数(粒子数除以统计权重)反转比率和激光增益系数的计算, 通常是利用与时间有关的碰撞辐射模型求解耦合速率方程组^[3], 然而这需要提供高离化态离子的能级结构、电偶极自发发射速率和各种原子过程的速率等数据, 因此关于类锂离子有关能级跃迁波长和振子强度的精确计算对开展等离子体软 X 射线激光工作具有重要作用。

本文用多组态HXR(Hartree plus Statistical Exchange and Relativistic Corrections)方法和最小二乘法优化径向积分相结合计算了类锂离子($Z=13\sim 17, 19$) $1s^2nl^2L_J$ ($2\leq n\leq 5, 0\leq l\leq 4$)能级之间的跃迁波长和相应的振子强度。最近 Brown 等人^[6]在线状激光等离子

体中观测到类锂离子 P^{12+} 、 S^{13+} 、 Cl^{14+} 和 K^{16+} $n=2\sim 3$ 和 $n=3\sim 4$ 跃迁的光谱, 将本文计算结果与他们的观测值相比较, 在实验误差范围内基本符合, 与 Edlén^[7]和 Vainshtein 等人^[8]的计算结果也相近。并发现对 $4f-3d$ 激光跃迁的计算结果比文献 [7] 和 [9] 的结果更接近于实验值, 振子强度计算值也与 Wiese 等人^[10]已报道的数据基本相符合。

二、理论方法

本文用多组态 HXR 自洽场方法计算了类锂离子 Al^{10+} 、 Si^{11+} 、 P^{12+} 、 S^{13+} 、 Cl^{14+} 和 K^{16+} 在 $2\leq n\leq 5$, $0\leq l\leq 4$ 范围内与激光增益系数计算有关的能级跃迁波长和振子强度, 计算使用了 Cowan^[11]的多组态 HXR 程序包, 同时还联用了最小二乘法拟合实验数据优化径向积分的程序。关于 HXR 自洽场方法的理论可参见文献 [12], 这里仅叙述与输入数据有关的内容。

原子全部 q 个亚壳层电子占有数组 (W_1, W_2, \dots, W_q) 构成原子组态, 其电子总数为

$$\sum_{i=1}^q W_i = N,$$

与各亚壳层相应的单电子轨函数为

$$\varphi = \frac{1}{r} P_{nl}(r) Y_{lm} \chi_{sm_s}, \quad (1)$$

对于一定的原子组态, 耦合全部电子角动量, 由全部单电子轨函数的反对称化乘积建立原子组态波函数 $\phi_i(I\gamma) = \phi_i(\tau SL M_s M_z)$, I 表 τSL , γ 表 $M_s M_z$, SL 为 N 个电子的总自旋和总轨道角动量, $M_s M_z$ 为相应的磁量子数, τ 为完全确定组态波函数的其余量子数。所有组态波函数的集合 $\{\phi_i(I\gamma)\}$ 组成多电子体系希尔伯特空间的正交完备基, 原子状态 α 的总波函数 $\Psi_\alpha(I\gamma)$ 可按这组正交完备基线性展开

$$\Psi_\alpha(I\gamma) = \sum_i C_i(\alpha) \phi_i(I\gamma). \quad (2)$$

实际计算中组态混合系数 $C_i(\alpha)$ 取决于组态的选择, 即方程 (2) 仅为重要的组态的线性组合。将原子哈密顿算符矩阵对角化, 可求得原子能级值及其对应的原子总波函数 $\Psi_\alpha(I\gamma)$ 。原子哈密顿算符矩阵元由组态平均能量 E_{av} , 径向积分 F^k 、 G^k , 组态相互作用积分 R^k 和自旋—轨道积分 ζ 乘以相应的角度系数组成, 角度系数是耦合量子数组 τSL 的函数, 可通过计算机程序得到, 径向积分的从头计算值由 HXR 自洽场方法得到。HXR 自洽场方法的特点对 H-F 方程中的势能交换项用统计近似势能函数表示, 并在非相对论性方法的框架下, 考虑最主要的相对论效应 (质量-速度 和 Darwin 两项修正) 的贡献。对高离化态原子当仅考虑与原子最外亚壳层电子的跃迁时, HXR 方法的计算结果是相当精确的。对每一亚壳层, HXR 的径向波函数方程为^[12] (能量单位为 Rydberg)

$$-\left\{ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} - V^i(r) + \frac{\alpha^2}{4} [\varepsilon_i - V^i(r)]^2 + \delta_{l_0} \frac{\alpha^2}{4} \right. \\ \left. \cdot \left[1 + \frac{\alpha}{4} (\varepsilon_i - V^i(r)) \right]^{-1} \frac{dV^i}{dr} \left(\frac{dP_i/dr}{P_i} - \frac{1}{r} \right) \right\} P_i(r) = \varepsilon_i P_i(r), \quad (3)$$

式中 α 为精细结构常数, $V^i(r)$ 为 HX 势能函数,

$$V^i(r) = -\frac{2Z}{r} + \sum_{j=1}^q (W_i - \delta_{ij}) \int_0^{\infty} \frac{2}{r_2} P_j^2(r_2) dr_2 - 0.65 \left[\frac{\rho'}{\rho' + 0.5/(n_i - l_i)} \right] \left(\frac{\rho'}{\rho} \right) \left(\frac{24\rho}{\pi} \right)^{1/3}, \quad (4)$$

其中

$$\rho'(r) = \rho(r) - [\min(2, W_i)] \rho_i(r), \quad (5)$$

式中 $\rho_i(r)$ 为 i 亚壳层中电子的球面平均几率密度, $\rho(r)$ 为原子总的球面平均电子数密度

$$\rho(r) = \sum_i^q w_i \rho_i(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \sum_{i=1}^q W_i P_i^2(r). \quad (6)$$

整个计算分两步进行, 首先用上述多组态 HXR 方法计算出径向积分。实际计算表明, 对类 Li 离子, 各组态之间相互作用均较弱, 其中只有 $1s^2nl$ 和 $1s2snl$ 组态之间相互作用稍强, 因此为了方便起见, 本文将混合的组态划分为五组分别进行计算:

- (1) $1s^22s, 1s^23s, 1s^24s, 1s^25s, 1s2s^2, 1s2s3s, 1s2s4s, 1s2s5s;$
- (2) $1s^23d, 1s^24d, 1s^25d, 1s2s3d, 1s2s4d, 1s2s5d;$
- (3) $1s^25g, 1s2s5g;$
- (4) $1s^22p, 1s^23p, 1s^24p, 1s^25p, 1s2s2p, 1s2s3p, 1s2s4p, 1s2s5p;$
- (5) $1s^24f, 1s^25f, 1s2s4f, 1s2s5f.$

由于计算中混合的组态数目有限和理论模型本身固有的近似性, 能级的计算值与观测值之间还有一定误差, 为了减少这一误差, 有必要对 Slater 径向积分参量进行调整, 本文将上述 HXR 自洽场方法计算程序与非线性最小二乘法优化径向积分程序联用, 将 E_{av} 、 F^k 、 G^k 、 R^k 和 ζ 等参量作为可调参量, 拟合已有的实验能级值使能级计算值与观测值之间标准偏差最小, 得到优化的 Slater 参量值, 然后将它们作为输入计算出能级值、跃迁波长及相应的电偶极振子强度。

三、计算结果与讨论

在表 1 中, 列出了类锂离子 Al^{10+} 、 Si^{11+} 、 P^{12+} 、 S^{13+} 、 Cl^{14+} 和 K^{16+} 在 $2 \leq n \leq 5$, $0 \leq l \leq 4$ 范围内与软 X 射线激光作用有关的跃迁波长和振子强度。最近 Brown 等人^[6]在线状激光等离子体中观测到类锂离子 P^{12+} 、 S^{13+} 、 Cl^{14+} 和 K^{16+} 的 $n=2 \sim 3$ 及 $n=3 \sim 4$ 跃迁光谱, 为了检验我们计算结果的精度, 在表 1 中, 对离子 Cl^{14+} 的观测波长值及相对强度与本文的波长计算值、电偶极振子强度进行了比较, 表 2 还列出了文献 [7] 和 [8] 的理论计算值。由表 2 可知, 本文的波长计算值在实验误差范围内与文献 [6] 的观测值基本符合, 与文献 [7, 8] 的计算结果也相近并发现对激光等离子体中具有软 X 射线自发发射放大的 $4f-3d$ 跃迁, 本文的计算结果比文献 [7] 和 [9] 的计算结果均好, 更接近于实验值, 如表 3 所示, 对离子 S^{13+} 的 $4f^2 F_{7/2} - 3d^2 D_{5/2}$ 跃迁, 波长观测值为 $9.5488 (\pm 0.01) \text{ nm}$, 本文计算值为 9.5489 nm , 文献 [7] 与 [9] 的计算值分别为 9.5508 nm , 9.5604 nm 。这可能是本文考虑了多组态相互作用的影响并对实验能级进行了非线性最小二乘法拟合的结果。振子强度的计算值也与 Wiese 等人^[10] 已报道的数据相符合。在类锂离子激光等离子体典型参数条件下, 关于激发能级粒子数反转与激光增益系数的计算正在进行中。

(continued)

transition		AlXI	SiXII	PXIII	SXIV	ClXV	KXVII
<i>4p</i> ² <i>P</i> — <i>5d</i> ² <i>D</i>							
3/2—3/2	λ	326.174	274.461	233.842	202.159	176.266	138.874
	<i>gf</i>	0.22	0.23	0.23	0.23	0.23	0.23
3/2—5/2	λ	326.052	274.348	23.720	202.036	176.143	138.031
	<i>gf</i>	2.02	2.03	2.04	2.04	2.05	2.05
1/2—3/2	λ	325.414	273.635	233.009	201.399	175.506	138.098
	<i>gf</i>	1.12	1.13	1.14	1.14	1.14	1.14
<i>4d</i> ² <i>D</i> — <i>5p</i> ² <i>P</i>							
3/2—1/2	λ	338.606	284.536	242.605	209.131	181.916	141.407
	<i>gf</i>	0.11	0.11	0.11	0.11	0.11	0.11
5/2—3/2	λ	338.442	284.374	242.481	208.969	181.756	142.339
	<i>gf</i>	0.20	0.20	0.20	0.20	0.20	0.19
3/2—3/2	λ	338.187	284.131	242.188	208.714	181.501	140.994
	<i>gf</i>	0.023	0.023	0.022	0.022	0.022	0.022
<i>4d</i> ² <i>D</i> — <i>5f</i> ² <i>F</i>							
5/2—5/2	λ	333.584	280.581	239.324	206.379	179.692	139.948
	<i>gf</i>	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25	0.25
5/2—7/2	λ	333.520	280.517	239.259	206.315	179.629	139.885
	<i>gf</i>	5.08	5.08	5.07	5.06	5.07	5.02
3/2—5/2	λ	333.337	280.345	239.038	206.130	179.444	139.700
	<i>gf</i>	3.56	3.56	3.55	3.55	3.55	3.54
<i>4f</i> ² <i>F</i> — <i>5d</i> ² <i>D</i>							
5/2—3/2	λ	334.785	281.508	239.264	206.524	179.884	141.376
	<i>gf</i>	0.051	0.051	0.051	0.051	0.051	0.051
7/2—5/2	λ	334.783	281.516	239.216	206.521	179.881	140.628
	<i>gf</i>	0.072	0.072	0.073	0.073	0.073	0.073
5/2—5/2	λ	334.658	281.389	239.136	206.396	179.757	140.502
	<i>gf</i>	0.0036	0.0036	0.0036	0.0036	0.0036	0.0036
<i>4f</i> ² <i>F</i> — <i>5g</i> ² <i>G</i>							
7/2—7/2	λ	334.100	281.058	238.673	205.993	179.610	140.078
	<i>gf</i>	0.30	0.30	0.30	0.30	0.30	0.30
7/2—9/2	λ	334.061	281.019	238.635	205.955	179.572	140.572
	<i>gf</i>	10.48	10.47	10.50	10.49	10.48	10.46
5/2—7/2	λ	333.976	280.932	238.594	205.869	179.486	139.953
	<i>gf</i>	8.09	8.08	8.11	8.10	8.09	8.07

Table 2 Calculated wavelengths, weighted oscillator strengths and observed wavelengths, relative intensities of ion ClXV

configuration	transition	$J-J$	I^a	gr	Wavelength(0.1nm)			
					obs. ^a	pres.	cal. ^b	cal. ^c
2s—3p	$^2s-^2p$	1/2—3/2	5	0.47	26.636	26.636	26.636	26.635
		1/2—1/2	3	0.24	26.675	26.677	26.678	26.676
2p—3d	$^2P-^2D$	1/2—3/2	5	1.36	28.257	28.263	28.258	28.258
		3/2—5/2	7	2.42	28.403	28.407	28.402	28.403
2p—3s	$^2P-^2S$	1/2—1/2	1	0.040	29.056	29.030	29.055	29.057
		3/2—1/2	1	0.079	29.222	29.227	29.223	29.226
3s—4p	$^2S-^2P$	1/2—3/2	1	0.56	77.568	77.572	77.593	77.583
		1/2—1/2	1	0.26	77.743	77.740	77.742	77.732
3p—4d	$^2P-^2D$	1/2—3/2	2	1.17	81.122	81.091	81.097	81.104
		3/2—5/2	3	2.11	81.461	81.445	81.434	81.442
3d—4f	$^2D-^2F$	3/2—5/2	7	4.07	83.087	83.085	83.097	83.097
		5/2—7/2	8	5.80	83.185	83.185	83.197	83.197
3p—4s	$^2P-^2S$	1/2—1/2	1	0.091	83.828	83.789	83.810	83.888
		3/2—1/2	1	0.18	84.254	84.221	84.225	84.305
3d—4p	$^2D-^2P$	5/2—3/2	1	0.080	84.040	84.039	84.044	84.046
		3/2—1/2	1	0.044	84.098	84.094	84.097	84.092

a. measured wavelengths(± 0.0010 nm) and line intensities from Brown et al.^[6]

b. calculated wavelengths from Edlén.^[7]

c. calculated wavelengths from Vainshtein et al.^[8]

Table 3 Comparison of observed and calculated wavelengths(0.1nm) for the 3d—4f transition of ions PXIII, SXIV, ClXV and KXVII

transition	PXIII			SXIV			
	obs. ^a	pres.	cal. ^b	obs. ^a	pres.	cal. ^b	cal. ^c
3/2—5/2	blended	110.656	110.666	95.386	95.389	95.408	95.503
5/2—7/2	110.722	110.760	110.766	95.488	95.489	95.508	95.604
transition	ClXV			KXVII			
	obs. ^a	pres.	cal. ^b	obs. ^a	pres.	cal. ^b	
3/2—5/2	83.087	83.085	83.097	64.643	64.639	64.670	
5/2—7/2	83.185	83.185	83.197	64.747	64.739	64.770	

a. measured wavelengths (± 0.0010 nm) from Brown et al.^[6]

b. calculated wavelengths from Edlén.^[7]

c. calculated wavelengths from Guennou et al.^[9]

参 考 文 献

- [1] G. Jamelot et al.; *J. Phys. (B)*, 1985, 18, No. 23 (Dec), 4647.
 [2] P. Jaegle et al.; *J. Opt. Soc. Am. (B)*, 1987, 4, No. 4 (Apr), 563.

- [3] D. Kim *et al.*; *J. Opt. Soc. Am. (B)*, 1989, **6**, No. 1 (Jan), 115.
 [4] 徐至展等.; «中国激光», 1989, **16**, No. 7 (Jul), 385.
 [5] T. Hara *et al.*; *Japan. J. Appl. Phys.*, 1989, **28**, No. 6 (Jun), L1010.
 [6] C. M. Brown *et al.*; *J. Opt. Soc. Am (B)*, 1989, **6**, No. 9 (Sep), 1650.
 [7] B. Edlén; *Phys. Scr.*, 1979, **19**, No. 4 (Apr), 255.
 [8] L. A. Vainshtein *et al.*; *Phys. Scr.*, 1985, **31**, No. 6 (Jun), 519.
 [9] H. Guennou *et al.*; *J. Phys. (B)*, 1987, **20**, No. 5 (Mar), 919.
 [10] W. L. Wiese *et al.*; *Atomic Transition Probabilities*, NSRDS-NBS22. (Washington DC, US Govt Printing Office, 1969).
 [11] R. D. Cowan; *Atomic Structure Program-Package*. (Los Alamos National Laboratory, 1984).
 [12] R. D. Cowan; «*The Theory of Atomic Structure and Spectra*», (Univ. of California Press. Los Angeles, 1981).

Transition wavelengths and oscillator strengths of Li-like ions correlated to X-ray laser research

WANG YONGCHANG

(Department of Physics, Xian Jiaotong University, Xian 710049)

YUAN PING

(Department of Physics Northwest Normal University Lanzhou 730070)

FAN PINZHONG

(Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Academia Sinica, Shanghai 201800)

(Received 13 July 1990; revised 28 December 1990)

Abstract

Wavelengths and weighted oscillator strengths of transitions between $1s^2nl^2L_j$ levels up to $n=5$, $l=4$ are calculated for the Li-like ions ($Z=13\sim 17, 19$). Multi-configuration HXR method and optimization of Slater radial integrals are used in the computations. Comparisons with existing experimental results are given. It is found that for the $4f-3d$ transition the calculated wavelengths are in better agreement with the measured data.

Key words: Li-like ions, X-ray laser, oscillator strengths.