

41 ≤ z ≤ 48 类氟离子精细结构能级和跃迁波长的相对论多组态狄拉克-福克的计算

王宛珏 姜仁滨

(兰州铁道学院基础课部, 兰州 730070)

提 要

本文用相对论多组态狄拉克-福克(Dirac-Fock)广义平均能级(MCDF-EAL)模型计算可能成为激光工作物质的类氟NbXXXIII、MoXXXIV、TcXXXV、RuXXXVI、RhXXXVII、PdXXXVIII、AgXXXIX和CdXXXX的 $2s^2 2p^5$ 、 $2s 2p^6$ 、 $2s^2 2p^4 3s$ 、 $2s^2 2p^4 3p$ 组态的各30个精细结构能级和若干 $3s-3p$ 组态跃迁波长。除最低两级外的所有计算值都是本文首次作出的理论预言。

关键词: 类氟离子、精细结构能级。

一、引 言

高荷电离化离子能级和光谱的研究对热核聚变、等离子体诊断、天体物理、特别是对短波长激光器的研制都有着非常重要的意义, 1975年 Elton^[1]从理论上指出 $2p^{k-1}3p-2p^{k-1}$ 组态之间的跃迁可能形成真空紫外和软 X 射线的短波长激光, 产生这种激光的工作物质可能是高荷电离化的 BeI-NeI 等电子序列离子, 即类 Be-类 Ne 离子。现在从实验上和理论上对类 Ne 离子的能级和光谱已进行了大量系统的研究^[2~5], 对也可能成为激光工作物质的高荷电离化类 F 离子的能级和光谱的研究也日益受到重视^[6~13], 但还远不如类 Ne 离子那样系统全面, 特别是对 $3p$ 组态的研究。用相对论多组态狄拉克-福克法计算的则更少^[12], 为此, 作者曾用相对论多组态狄拉克-福克法系统地计算了 $15 \leq z \leq 40$ 类氟离子的(包括 $3p$ 组态在内的)各30个精细结构能级和可能发射的激光波长值, 取得了很好的结果^[14]。本文用同样的方法计算了 $41 \leq z \leq 48$ 类氟离子的同样问题。由于在这个范围内的离子除较低两能级外, 既没进行过实验研究, 也没有进行过理论计算, 所以是首次预言值。

二、理 论 方 法

在相对论多组态狄拉克-福克法^[16]中, 一个核电荷为 z 、电子数为 N 的离子的哈密顿量(在原子单位中)和单电子波函数是狄拉克旋子分别为

$$H = \sum_{i=1}^N [c\boldsymbol{\alpha}_i \cdot \mathbf{p}_i + (\beta - 1)c^2 + V_z(r)] + \sum_{i,j=1}^N \frac{1}{r_{ij}}, \quad (1)$$

$$u_a(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_a(r) & \chi_a(\mathbf{r}) \\ iQ(r) & \bar{\chi}_a(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (2)$$

组态波函数 $\phi(\gamma_r, J, M)$ 通过单电子波函数的 $j-j$ 耦合得到。原子态波函数由于组态相互作用的存在, 应为组态波函数的线性组合:

$$\psi_\alpha(J, M) = \sum_{r=1}^{n_\alpha} c_r(\alpha) \phi(\gamma_r, J, M), \quad (3)$$

式中 $c_r(\alpha)$ 是组态 r 在原子态 α 中的混合系数。狄拉克旋子中的大、小分量 $P(r)$ 、 $Q(r)$ 满足狄拉克-福克方程

$$\left. \begin{aligned} \frac{dP_\alpha}{dr} + k_\alpha \frac{P_\alpha}{r} - \left(2c - \frac{\epsilon_\alpha}{c} + \frac{Y_\alpha}{cr} \right) Q_\alpha &= -\frac{X_\alpha^{(P)}}{r}, \\ \frac{dQ_\alpha}{dr} - k_\alpha \frac{Q_\alpha}{r} - \left(-\frac{\epsilon_\alpha}{c} + \frac{Y_\alpha}{cr} \right) P_\alpha &= -\frac{X_\alpha^{(Q)}}{r}. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

广义平均能级为

$$E_{\text{opt}} = \sum_r W_r H_{rr} / \sum_s W_s, \quad (5)$$

式中 H_{rr} 是哈密顿矩阵的对角元素, W_r 是统计权重因子, 本文使用了 Grant 根据上述理论而编制的 MODF 程序^[16], 同时还调用了 McKenzie 考虑到 Breit 修正和包括真空极化和电子自能在内的量子电动力学修正而编制的 MCBP 修正程序^[17], 在我院的 VAX-11/785 型计算机上作了适当修改后, 选用费米(Fermi)两参数核电荷分布和广义平均能级模型, 计算了类氟 NbXXXIII、MoXXXIV、TcXXXV、RuXXXVI、RhXXXVII、PdXXXVIII、AgXXXIX、CdXXXX 离子的 $2s^2 2p^5$ 、 $2s 2p^6$ 、 $2s^2 2p^4 3s$ 、 $2s^2 2p^4 3p$ 组态的各 30 个精细结构能级值, 根据作者以前对 TiXIV 离子的计算得知, 在计算 $2p$ 和 $3s$ 组态时, 如加上 $3p$ 组态, $3s$ 组态各能级的相对误差将普遍减小 0.2% 左右。因此, 在本文中作者也是将 $2p$ 、 $3s$ 、 $3p$ 组态的 30 个相对论组态一起混合运算, 即同时考虑 30 个相对论组态间的相互作用, 这样不但可以减少相对误差, 而且可以一次算出 30 个能级。

三、计算结果与讨论

在表 1、表 2 中一并列出了八个类氟离子精细结构能级的计算值。在表 3、表 4 中列出了仅有的两个最低能级的实验值^[18]及其与计算值间的相对误差, 表中的能级值都是以基态 $2p^5 {}^2P_{3/2}$ 的能量为零点计算的, 单位是波数 cm^{-1} , 从表 3 和表 4 可以看出, 第一激发态 $2p^5 {}^2P_{1/2}$ 的计算值与实验值^[18]间的相对误差是很小的, 在 0.13~0.16% 之间。第二激发态 $2s 2p^6 {}^2S_{1/2}$ 的相对误差稍大, 在 1.51~1.04% 之间, 从前文^[14, 1]的计算值与实验值相比得知, 上述两个能级的相对误差是 29 个激发态能级中最大的, 由此推知, 本文所计算的这八个类氟离子的 $3s$ 、 $3p$ 组态的 27 个能级值的相对误差也一定小于同一离子的第一激发态 $2p^5 {}^2P_{1/2}$ 的相对误差。

组态间的相互作用可用组态混合系数或各态对本征矢贡献的份额表示。由本文的计算得知, 在 CdXXXX 离子的基态 $2p^5 {}^2P_{3/2}$ 能级计算中, 基态自身的贡献为 9.9983×10^{-1} , 而 $({}^3P) 3p^4 D_{3/2}$ 态的贡献为 1.3610×10^{-2} , $({}^3P) 3p^2 P_{3/2}$ 态的贡献为 4.4960×10^{-3} , $({}^3P) 3p^4 S_{3/2}$ 态的贡献为 9.0857×10^{-3} , $({}^1D) 3p^2 D_{3/2}$ 态的贡献为 7.6315×10^{-3} , $({}^1D) 3p^2 P_{3/2}$ 态的贡献为 1.1634×10^{-3} , $({}^3P) 3p^4 P_{3/2}$ 态的贡献为 7.6426×10^{-4} , $({}^3P) 3p^2 D_{3/2}$ 态的贡献为 9.9998×10^{-6} ; 在 $({}^3P) 3s^4 P_{3/2}$ 态的计算中, 它自身的贡献为 9.9875×10^{-1} ; $({}^3P) 3s^4 P_{3/2}$ 态

Table 1 The energy levels in NbXXXIII, MoXXXIV, TeXXXV, RuXXXVI (cm^{-1})

name				ion				
LS		$j-j$	J	NbXXXIII	MoXXXIV	TeXXXV	RuXXXVI	
$2p^5$	$2P_{3/2}$	$2p(0, 3/2)$	3/2	0	0	0	0	
	$2P_{1/2}$	$2p(0, 1/2)$	1/2	795482	885217	982559	1087663	
$2s2p^6$	$2S_{1/2}$	$2s(0, 1/2)$	1/2	2549717	2693178	2844746	3004900	
$2p^4(^3P)3s$	$4P_{5/2}$	$3s(2, 1/2)$	5/2	18764192	19832892	20929991	22055375	
	$4P_{3/2}$	$3s(2, 1/2)$	3/2	18809824	19879642	20977869	22104391	
	$4P_{1/2}$	$3s(0, 1/2)$	1/2	19002743	20080322	21186244	22320409	
$2p^4(^1D)3s$	$2P_{3/2}$	$3s(1, 1/2)$	3/2	19236402	20320902	21433954	22575450	
	$2P_{1/2}$	$3s(1, 1/2)$	1/2	19251405	20336272	21449655	22591449	
	$2D_{5/2}$	$3s(2, 1/2)$	5/2	19433284	20535598	21665776	22822975	
	$2D_{3/2}$	$3s(2, 1/2)$	3/2	19443665	20555582	21695203	22865549	
$2p^4(^1S)3s$	$2S_{1/2}$	$3s(0, 1/2)$	1/2	19657916	20818405	22005310	23185140	
$2p^4(^3P)3p$	$4P_{5/2}$	$3p(2, 1/2)$	5/2	19449523	20558361	21697887	22868125	
	$4P_{3/2}$	$3p(2, 1/2)$	3/2	19517285	20615223	21744606	22906194	
	$4P_{1/2}$	$3p(0, 1/2)$	1/2	19538720	20697134	21880248	23057438	
	$4D_{7/2}$	$3p(2, 3/2)$	7/2	19576344	20733728	21891686	23122717	
	$4D_{5/2}$	$3p(2, 3/2)$	5/2	19617845	20735892	21931592	23163782	
	$2P_{1/2}$	$3p(1, 1/2)$	1/2	19675767	20856197	22015005	23248054	
	$4D_{1/2}$	$3p(1, 3/2)$	1/2	19737756	20837177	22034755	23268783	
	$4D_{3/2}$	$3p(1, 3/2)$	3/2	19996594	21170415	22380508	23627218	
	$2P_{3/2}$	$3p(0, 3/2)$	3/2	20037488	21211574	22421997	23669080	
	$2D_{5/2}$	$3p(2, 1/2)$	5/2	20123888	21299822	22511983	23760716	
	$4S_{3/2}$	$3p(2, 1/2)$	3/2	20213273	21411628	22648405	23924083	
	$2S_{1/2}$	$3p(2, 3/2)$	1/2	20244486	21440766	22668982	23926302	
	$2D_{3/2}$	$3p(1, 1/2)$	3/2	20246947	21445925	22683318	23959604	
	$2p^4(^1D)3p$	$2F_{5/2}$	$3p(2, 3/2)$	5/2	20286158	21468676	22694904	23965822
		$2F_{7/2}$	$3p(2, 3/2)$	7/2	20327737	21528155	22766957	24044123
$2D_{3/2}$		$3p(1, 3/2)$	3/2	20339917	21540298	22779164	24056965	
$2D_{5/2}$		$3p(2, 3/2)$	5/2	20370610	21572226	22812250	24091159	
$2P_{3/2}$		$3p(1, 3/2)$	3/2	20538253	21776833	23023783	24309648	
$2P_{1/2}$		$3p(1, 3/2)$	1/2	20568318	21790942	23087598	24429013	

的贡献为 1.8230×10^{-2} ; $(^1D)3s^2D_{3/2}$ 态的贡献为 4.6604×10^{-2} ; 在 $(^3P)3p^4S_{3/2}$ 态的计算中, 它自身的贡献为 8.6699×10^{-1} , $(^3P)3p^4D_{3/2}$ 态的贡献为 1.3945×10^{-1} , $(^1D)3p^2D_{3/2}$ 态的贡献为 4.5543×10^{-1} , 基态 $2p^5 2P_{3/2}$ 的贡献为 1.3443×10^{-2} , $(^3P)3p^4P_{3/2}$ 态的贡献为 4.3912×10^{-2} , $(^3P)3p^2P_{3/2}$ 态的贡献为 6.4828×10^{-2} , $(^3P)3p^2D_{3/2}$ 态的贡献为 9.4418×10^{-2} , $(^1D)3p^2P_{3/2}$ 态的贡献为 7.8972×10^{-2} 。以上计算结果说明: $2p^5$ 组态(如基态)和 $3p$ 组态间的作用是很强的, $3s$ 组态间或 $3p$ 组态间的作用也是很强的; 但 $3s$ 组态和 $3p$ 组态间却没有相互作用; $3p$ 组态对 $3s$ 组态能级的影响是通过基态能量的影响而影响的, 因为 $3s$ 组态的能级是相对于基态能量计算的。

Breit 修正和量子电动力学修正对于重离子是显著的, 特别是对低能级如 NbXXXIII 离子的第二激发态 $2p^5 2P_{1/2}$, 修正项的供献占总能量的 0.40%, 第 29 激发态 $(^1D)3p^2P_{3/2}$ 修

Table 2 The energy levels in RhXXXVII, PdXXXVIII, AgXXXIX, CdXXXX (cm⁻¹)

name				ion			
LS		j-j	J	RhXXXVII	PdXXXVIII	AgXXXIX	CdXXXX
2p ⁵	² P _{3/2}	2p(0, 3/2)	3/2	0	0	0	0
	² P _{1/2}	2p(0, 1/2)	1/2	1201900	1324861	1457358	1599918
2s2p ⁶	² S _{1/2}	2s(0, 1/2)	1/2	3174126	3352926	3541843	3741403
2p ⁴ (³ P)3s	⁴ P _{5/2}	3s(2, 1/2)	5/2	23208927	24390529	25600050	26837364
	⁴ P _{3/2}	3s(2, 1/2)	3/2	23259093	24441857	25652553	26891052
2p ⁴ (¹ D)3s	⁴ P _{1/2}	3s(0, 1/2)	1/2	23482716	24673057	25891309	27137357
	² P _{3/2}	3s(1, 1/2)	3/2	23745278	24343322	26169459	27423564
	² P _{1/2}	3s(1, 1/2)	1/2	23761545	24959829	26186180	27440473
	² D _{5/2}	3s(2, 1/2)	5/2	24006714	25216997	26454080	27718228
2p ⁴ (¹ S)3s	² D _{3/2}	3s(2, 1/2)	3/2	24066641	25298507	26561176	27854650
	² S _{1/2}	3s(0, 1/2)	1/2	24432819	25739076	27082931	28464792
2p ⁴ (³ P)3p	⁴ P _{5/2}	3p(2, 1/2)	5/2	24069096	25300833	26563357	27856698
	⁴ P _{3/2}	3p(2, 1/2)	3/2	24100384	25327084	26585938	27876589
2p ⁴ (¹ D)3p	⁴ P _{1/2}	3p(0, 1/2)	1/2	24265331	25503962	26773364	28073571
	⁴ D _{7/2}	3p(2, 3/2)	7/2	24395723	25637099	26909297	28212354
	⁴ D _{5/2}	3p(2, 3/2)	5/2	24390587	25695669	27038341	28419014
	² P _{1/2}	2p(1, 1/2)	1/2	24517910	25824943	27169532	28552083
	⁴ D _{1/2}	3p(1, 3/2)	1/2	24539617	25847629	27193198	28576731
	⁴ D _{3/2}	2p(1, 3/2)	3/2	24910906	26231949	27590734	28987668
	² P _{3/2}	3p(0, 3/2)	3/2	24953172	26274640	27633866	29031250
	² D _{5/2}	3p(2, 1/2)	5/2	25046382	26369356	27730025	29128794
	⁴ S _{3/2}	3p(2, 1/2)	3/2	25217551	26545340	27910624	29313989
	² S _{1/2}	3p(2, 3/2)	1/2	25239161	26594159	27989613	29426087
	² D _{3/2}	3p(1, 1/2)	3/2	25275284	26630877	28026919	29463973
	² F _{5/2}	3p(2, 3/2)	5/2	25280175	26635350	28031321	29468469
	² F _{7/2}	3p(2, 3/2)	7/2	25361648	26718550	28115864	29554150
	² D _{3/2}	3p(1, 3/2)	3/2	25374187	26731339	28128952	29567583
² D _{5/2}	3p(2, 3/2)	5/2	25409450	26767643	28166271	29605896	
² P _{3/2}	3p(1, 3/2)	3/2	25634929	27000145	28405835	29852560	
² P _{1/2}	3p(1, 3/2)	1/2	25816011	27249454	28730230	30259275	

Table 3 The experimental values and relative errors between the experimental and calculated values (The upper data are experimental values)

2p ⁵	² P _{1/2}	2p(0, 1/2)	1/2	796581	886512	983824	1089360
				0.14%	0.15%	0.13%	0.13%
2s2p ⁶	² S _{1/2}	2s(0, 1/2)	1/2	2511805	2655134	2806432	2966432
				1.51%	1.43%	1.37%	1.30%

正项的供献占总能量的 0.17%；又如 CdXXXX 离子的 2p⁵²P_{1/2} 态、修正项的贡献占 0.52%，而 (¹D)3p²P_{1/2} 态的贡献占 0.24%。由此可见，低能级修正得较多，重离子修正得较显著。

本文还同时计算了若干可能发射出的激光波长值。波长的计算值列于表 5 中。从前

Tabel 4 The experimental values and relative errors between the experimental and calculated values (The upper data are experimental values)

$2p^5$	$^2P_{1/2}$	$2p(0, 1/2)$	1/2	1203520 0.13%	1326784 0.14%	1459584 0.15%	1602496 0.16%
$2s2p^6$	$^2S_{1/2}$	$2s(0, 1/2)$	1/2	3135632 1.23%	3314432 1.16%	3503360 1.10%	3703008 1.04%

Tabel 5 Some wavelengths(in Å) for transition of $3s-3p$ in F-like ions

transition	Nb XXXIII	Mo XXXIV	Tc XXXV	Ru XXXVI	Rh XXXVII	Pd XXXVIII	Ag XXXIX	Cd XXXX
$(^3P)3s^4P_{5/2}-(^3P)3p^4S_{3/2}$	69.01	63.34	58.19	53.51	49.79	46.41	43.28	40.38
$(^3P)3s^4P_{1/2}-(^3P)3p^4S_{3/2}$	82.61	75.11	68.39	62.36	57.64	53.41	49.52	45.94
$(^1D)3s^2D_{3/2}-(^1D)3p^2D_{3/2}$	111.95	101.55	92.25	83.93	76.48	69.79	63.78	58.38
$(^3P)3s^2P_{3/2}-(^3P)3p^4S_{3/2}$	102.37	91.68	82.34	74.15	67.92	62.42	57.43	52.90
$(^3P)3s^4P_{5/2}-(^3P)3p^4D_{7/2}$	123.13	111.01	103.98	93.69	84.26	80.22	76.38	72.73
$(^1D)3s^2D_{5/2}-(^1D)3p^2F_{7/2}$	111.80	100.75	90.81	81.86	73.80	66.60	60.18	54.47
$(^3P)3s^4P_{3/2}-(^3P)3p^4D_{5/2}$	123.76	116.79	104.85	94.39	88.38	79.76	72.16	65.45
$(^1D)3s^2D_{3/2}-(^1D)3p^2F_{5/2}$	119.12	109.52	100.12	90.89	82.40	74.80	68.02	61.96
$(^3P)3s^4P_{5/2}-(^3P)3p^4P_{5/2}$	145.91	137.84	130.23	123.04	116.26	109.85	103.81	98.10

文^[14,15]得知,波长的最大相对误差随着核电荷 z 的增大而减小。最大相对误差由 SVIII 的 2.31%, CrXVI 的 1.46% 减小到 NiXX 的 0.77%。本文所计算的这八个类氟离子的波长还没有实验值可以对比,但由上推知,它们的最大相对误差一定比 0.77% 小得多,由表 5 还知,它们的波长已进入超真空紫外区,有的已进入水窗波段。用这些离子作为工作物质的激光器可以期望获得波长相当短的相干输出。

由于目前比 NiXX 更重的类氟离子只有最低两个能级有实验数据,其它如可产生激光的 $3s, 3p$ 组态及其间的跃迁波长都没有实验数据;比 KrXXVII 更重的类氟离子、除最低两能级外,也没有理论数据。因此,本文的计算值可以弥补它们的不足,为研制重类氟离子激光器提供更多的原子参数。

参 考 文 献

- [1] R. C. Elton; *Appl. Opt.*, 1975, **14**, No. 1 (Jan), 97.
- [2] J. A. Cogordan *et al.*; *Physica Scripta*, 1985, **31**, No. 6 (Jun), 545.
- [3] J. A. Cogordan *et al.*; *Physica Scripta*, 1986, **33**, No. 5 (May), 406.
- [4] 张同发, 梁爱华等;《中国激光》, 1989, **16**, No. 6 (Jun), 342.
- [5] 梁爱华, 潘守甫等;《光学学报》, 1989, **9**, No. 3 (Mar), 200.
- [6] B. C. Fawcett; *Atomic Data & Nuclear Data Tables*, 1984, **31**, 495.
- [7] U. Feldman *et al.*; *J. O. S. A.*, 1973, **63**, No. 11 (Nov), 1445.
- [8] A. Trigueiros, C. Jupen; *Physica Scripta*, 1985, **31**, No. 4 (Apr), 359.
- [9] C. Jupen; *Physica Scripta*, 1985, **32**, No. 6 (Jun), 592.

- [10] C. Jupen; *Physica Scripta*, 1985, **32**, No. 6 (Jun), 527.
 [11] J. P. Desclaux; *Comput. Phys. Commun.*, 1975, **9**, No. 1 (Jan), 31.
 [12] K. T. Cheng *et al.*; *Atomic Data & Nuclear Data Tables*, 1979, **24**, No. 1 (Jan), 112.
 [13] V. A. Boiko *et al.*; *J. Phys.(B): Atom. & Molec. Phys.*, 1979, **12**, No. 12 (Dec), 1927.
 [14] 姜仁滨, 王宛珏; 《兰州铁道学院学报》1991, **10** No.1, 30.
 [15] I. P. Grant *et al.*; *Adv. Phys.*, 1970, **19**, No. 82 (Nov), 747.
 [16] I. P. Grant *et al.*; *Comput. Phys. Commun.*, 1980, **21**, No. 2 (Dec), 207.
 [17] B. J. McKenzie *et al.*; *Comput. Phys. Commun.*, 1980, **21**, No. 2 (Dec), 233.
 [18] B. Edlen; *Physica Scripta*, 1983, **28**, No. 1 (Jan), 51.

Relativistic multiconfiguration Dirac-Fock calculation of fine-structure energy levels and transition wavelengths from F-like ions of $41 \leq z \leq 48$

WANG WANJUE AND JIANG RENBIN

(Lanzhou Railway College, Department of Basic Courses Lanzhou 730070)

(Received 4 September 1990; revised 19 November 1990)

Abstract

In this paper, by means of the extended average level (MODF-EAL) model of relativistic multiconfiguration Dirac-Fock code, we have calculated the fine-structure energy levels of $2s^2 2p^5$, $2s 2p^6 2$, $s^2 2p^4 3s$, $2s^2 2p^4 3p$ configuration and some transition wavelengths of $3s-3p$ configuration from F-Like ions of $41 \leq z \leq 48$ which may be the candidates of lasing medium. The calculated values are first predicted except the two lowest levels.

Key words: F-like ions, fine-structure energy.

(上接第 583 页)

会议期间还举办了一个小型展览会。参展单位有瑞士的先利士真空公司、德国的蔡司公司、上海真空泵厂、上海光学仪器厂及上海冶金所等。展品包括镀膜设备、测试仪器、薄膜元件等的实物样品、样本、照片和录像等；此外，瑞士先利士真空公司、德国莱宝公司和蔡司公司的代表，分别就各自公司的薄膜设备的特点，作了技术性能报告及公司的技术力量等作了介绍。

大会于 4 月 16 日下午组织与会中外专家参观上海交通大学、中国科学院上海硅酸盐研究所、上海光学仪器厂和复旦大学，四个单位有关部门向参观者介绍了各自的研究设施、成果等，这次技术性的参观给人们留下了深刻的印象。

会议于 17 日下午进行了简短闭幕式，由大会主席、上海物理学会名誉理事长周世勋宣布'91 TFP A 会议胜利结束。

(黎 风 吴建政)