

类氮 V XVII Cr XVIII Mn XIX 和 Fe XX 精细结构能级和跃迁波长的相对论 多组态 Dirac-Fock 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 Dirac-Fock 广义平均模型 (MCDF-EAL) 计算了可能成为激光工作物质的类氮 V XVII、Cr XVIII、Mn XIX 和 Fe XX 的 $2s^2 2p^3$ 、 $2s 2p^4$ 、 $2p^5$ 、 $2s^2 2p^2 3s$ 、 $2s^2 2p^2 3p$ 组态的各 44 个精细结构能级和 33 个 $3s-3p$ 组态跃迁波长。其中关于 V XVII、Cr XVIII、Mn XIX 离子 $3s$ 、 $3p$ 组态的计算值是本文首次预言的。

关键词: 类氮离子、精细结构能级。

一、引 言

高荷电离化的类 Be-类 Ne 离子 $3s-3p$ 组态的跃迁可能产生短波长激光^[1], 要研究这种激光产生的机理, 必须首先研究这些离子 $3s$ 、 $3p$ 组态的能级和波长。现今很多类 Ne 和类 F 离子 $3s$ 、 $3p$ 组态的能级及其间的跃迁波长已从实验上和理论上进行了系统的研究^[2~5]。作者最近也曾用 MCDF 方法对 $15 \leq z \leq 54$ 类氟离子的包括 $3s$ 、 $3p$ 组态在内的各 30 个精细结构能级进行了系统计算, 得到了很好的结果, 其中相当一部分是首先得到的^[6~8]。目前对可能成为激光工作物质的类氮离子的研究还多限于 $2s$ 、 $2p$ 及 $3d$ 组态^[9~12]。直到最近 Bhatia^[13] 才对几个类氮离子的包括 $3s$ 、 $3p$ 组态在内的若干能级和几个波长进行了理论计算。为弥补类氮离子能级和波长数据的不足, 本文又使用 MCDF 方法对类氮离子进行了系统计算。计算结果可为类氮短波激光器的研制提供部分必要的原子数据。

二、理 论 方 法

根据 MCDF 理论^[14], 使用我们在 VAX-11/785 型计算机上作过适当修改的 Grant^[15] 和 McKenzie^[16] 的程序包并选用均匀核电分布和广义平均能级模型 (EAL) 计算了类氮 V XVII、Cr XVIII、Mn XIX、Fe XX 的 $2s^2 2p^3$ 、 $2s 2p^4$ 、 $2p^5$ 、 $2s^2 2p^2 3s$ 、 $2s^2 2p^2 3p$ 组态的各 44 个精细结构能级。在计算的能级中包括了作为微扰的 Breit 修正及包括真空极化 (V. P) 和自能 (S. E) 在内的量子电动力学 (Q.E.D.) 修正的供献。

根据计算出的 $3s$ 、 $3p$ 组态的精细结构能级和波长的计算公式,

$$\lambda = \frac{9999921.7}{\varepsilon_p - \varepsilon_q} \quad (\text{nm})$$

对 $3s-3p$ 跃迁可能辐射的激光波长进行了计算。其中 ε_p 是上能级、 ε_q 是下能级。

三、计算结果与讨论

组态对能量本征矢贡献的份额即组态混合系数表示了组态相互作用的强弱。由本文的计算得知, $2s^2 2p^2 3s$ 组态中总角动量 J 相同的相对论组态间有较强的相互作用, $2s^2 2p^2 3s$ 组态和 $2s 2p^4$ 组态间 J 值相同的相对论组态间有较弱的相互作用。后者较前者一般要小两

Table 1 Wavelengths (in nm) for transitions of $3s-3p$

Transition	V XVII ^a	Cr XVIII ^a	Mn XIX ^a	Fe XX ^a	Fe XX ^b
$(^3P)3s\ ^4P_{1/2}-(^3P)3p\ ^2D_{3/2}$	44.5629	40.7485	37.4526	34.3957	34.5126
$(^3P)3s\ ^4P_{3/2}-(^3P)3p\ ^4P_{1/2}$	59.5096	56.0428	52.9316	50.1479	50.2669
$(^3P)3s\ ^4P_{3/2}-(^3P)3p\ ^2D_{3/2}$	51.9872	48.8630	46.3667	44.1209	43.8608
$(^3P)3s\ ^4P_{3/2}-(^3P)3p\ ^4D_{5/2}$	51.6692	48.4238	45.1904	42.2538	42.3609
$(^3P)3s\ ^4P_{3/2}-(^3P)3p\ ^2S_{1/2}$	40.3053	45.8852	42.7818	39.9583	40.0683
$(^3P)3s\ ^4P_{3/2}-(^3P)3p\ ^4P_{5/2}$	47.0568	44.0211	41.3215	38.9138	38.7216
$(^3P)3s\ ^4P_{3/2}-(^3P)3p\ ^4P_{3/2}$	45.4120	42.3885	39.6372	37.1104	37.0155
$(^3P)3s\ ^4P_{3/2}-(^3P)3p\ ^2P_{3/2}$	38.3815	35.7999	33.4987	31.4008	31.0643
$(^3P)3s\ ^2P_{1/2}-(^3P)3p\ ^4P_{1/2}$	71.1997	66.5925	62.4969	58.8762	59.2256
$(^3P)3s\ ^2P_{1/2}-(^3P)3p\ ^2D_{3/2}$	60.6925	56.6938	53.5455	50.7388	50.5301
$(^3P)3s\ ^2P_{1/2}-(^3P)3p\ ^2S_{1/2}$	57.0685	52.7240	48.8212	45.3106	45.5618
$(^3P)3s\ ^2P_{1/2}-(^3P)3p\ ^4P_{3/2}$	51.9168	48.1591	44.7682	41.6833	41.6554
$(^3P)3s\ ^2P_{1/2}-(^3P)3p\ ^2P_{3/2}$	42.9273	39.8308	37.0914	34.6139	34.2676
$(^3P)3s\ ^2P_{1/2}-(^3P)3p\ ^2P_{1/2}$	39.7923	36.8054	33.7334	30.9732	30.8549
$(^3P)3s\ ^2P_{1/2}-(^1D)3p\ ^2P_{3/2}$	30.7334	28.5475	26.5593	24.6748	24.5198
$(^2P)3s\ ^4P_{5/2}-(^3P)3p\ ^2D_{3/2}$	61.2565	58.4922	56.4204	54.5230	54.4603
$(^3P)3s\ ^4P_{5/2}-(^3P)3p\ ^4P_{5/2}$	54.5250	51.6868	49.1222	46.7865	46.7552
$(^3P)3s\ ^4P_{5/2}-(^3P)3p\ ^4D_{7/2}$	52.3988	48.7841	45.4932	42.4912	42.5807
$(^3P)3s\ ^4P_{5/2}-(^3P)3p\ ^2P_{3/2}$	43.2087	40.7101	38.4485	36.3343	36.0310
$(^3P)3s\ ^4P_{5/2}-(^3P)3p\ ^2D_{5/2}$	43.2395	40.1777	37.4932	35.1820	34.8871
$(^3P)3s\ ^2P_{3/2}-(^3P)3p\ ^4P_{5/2}$	62.5601	61.3606	57.8219	54.6033	54.6433
$(^3P)3s\ ^2P_{3/2}-(^3P)3p\ ^4P_{3/2}$	62.1388	58.2343	54.5768	51.1177	51.3063
$(^3P)3s\ ^2P_{3/2}-(^3P)3p\ ^2P_{3/2}$	49.6855	46.4820	43.5808	40.8791	40.5410
$(^3P)3s\ ^2P_{3/2}-(^3P)3p\ ^2D_{5/2}$	49.7263	45.7892	42.3574	39.4263	39.0985
$(^3P)3s\ ^2P_{3/2}-(^3P)3p\ ^2P_{1/2}$	45.5334	42.4135	39.0172	35.8955	35.8499
$(^3P)3s\ ^2P_{3/2}-(^1D)3p\ ^2F_{5/2}$	33.2831	30.9553	28.8180	26.7660	26.5183
$(^3P)3s\ ^2P_{3/2}-(^1D)3p\ ^2P_{1/2}$	32.2677	30.1831	28.2280	26.3343	26.3777
$(^1D)3s\ ^2D_{3/2}-(^3P)3p\ ^2P_{1/2}$	71.9057	65.7337	61.7787	58.2045	60.0417
$(^1D)3s\ ^2D_{3/2}-(^1D)3p\ ^2P_{3/2}$	46.9164	43.3420	41.3323	39.3362	39.9541
$(^1D)3s\ ^2D_{3/2}-(^1D)3p\ ^2F_{5/2}$	45.4742	41.7709	39.5920	37.4766	37.7775
$(^1D)3s\ ^2D_{3/2}-(^1D)3p\ ^2P_{1/2}$	43.5998	40.3770	38.4869	36.6357	37.4928
$(^1D)3s\ ^2D_{3/2}-(^1D)3p\ ^2D_{3/2}$	37.6838	34.2630	31.9586	29.7724	30.1453
$(^1D)3s\ ^2D_{3/2}-(^1S)3p\ ^2P_{3/2}$	28.7322	26.5477	24.9903	23.5219	24.2565

个数量级。如 Fe XX 离子的 $2s^2 2p^2(^1D) 3s^2 D_{3/2}$ 态: 它自身的贡献为 9.37×10^{-1} , $2s^2 2p^2(^3P) 3s^2 P_{3/2}$ 态的贡献为 3.46×10^{-1} , $2s^2 2p^2(^3P) 3s^2 P_{3/2}$ 态的贡献为 5.14×10^{-2} , 而 $2s^2 2p^2(^4P_{3/2}) 3s^2 P_{3/2}$ 态的贡献为 5.07×10^{-3} , $2s^2 2p^2(^4P_{3/2}) 3s^2 P_{3/2}$ 态的贡献为 1.64×10^{-3} , $2s^2 2p^2(^4D_{3/2}) 3s^2 P_{3/2}$ 态的贡献为 7.93×10^{-4} 。 $2s^2 2p^2 3s$ 组态和 $2s^2 2p^3$ 、 $2p^5$ 、 $2s^2 2p^2 3p$ 组态间无相互作用, 因为它们的宇称相反。此外, 从计算中还发现一个现象: 在 $2s^2 2p^2 3p$ 组态中的 12 个相对论组态间, 除了 J 值相同的态间有较强的相互作用而外, J 值不同的态间还有很微弱的相互作用, 后者较前者一般要小 8~9 个数量级。如 Fe XX 离子的 $2s^2 2p^2(^3P) 3p^2 S_{1/2}$ 态: 它自身的贡献为 7.30×10^{-1} , $2s^2 2p^2(^1D) 3p^2 P_{1/2}$ 态的贡献为 6.42×10^{-1} , $2s^2 2p^2(^1S) 3p^2 P_{1/2}$ 态的贡献为 2.11×10^{-1} , $2s^2 2p^2(^3P) 3p^2 D_{1/2}$ 态的贡献为 1.02×10^{-1} , 而 $2s^2 2p^2(^1D) 3p^2 D_{5/2}$ 态的贡献为 8.02×10^{-9} , $2s^2 2p^2(^3P) 3p^2 D_{5/2}$ 态的贡献为 4.45×10^{-9} , $2s^2 2p^2(^1D) 3p^2 F_{7/2}$ 态的贡献为 2.95×10^{-10} , $2s^2 2p^2 2s^2 2p^2(^3P) 3p^2 D_{7/2}$ 态的贡献为 1.60×10^{-10}。有微弱相互作用的这些相对论组态往往是好几个同时出现, 这一现象如何解释, 还有待进一步研究。

本文所计算的 33 个可能发射的激光波长值 a 列于表 1 中, 在表 1 中还列出了根据文献 [13] Fe XX 离子能级计算值计算出的波长值 b , 这两者的相对偏差在 0.067~3.06% 之间, 这是由于两者的能级值稍有差别所致, 这四个类氮离子所可能发射的激光波长值在 23.5219 nm~71.9057 nm 之间, 已进入短波范围。

由于目前尚无关于 V XVII、Cr XVIII、Mn XIX 离子 $3s$ 、 $3p$ 组态能级及其间跃迁波长的实验数据和理论数据, 所以本文的计算结果是关于它们的首次预言值。

参 考 文 献

- [1] R. C. Elton; *Appl. Opt.*, 1975, **14**, No. 1 (Jan), 97.
- [2] O. Jupen *et al.*; *Phys. Rev. (A)*, 1987, **35**, No. 1, 116.
- [3] 张同发等;《中国激光》, 1989, **16**, No. 6 (Jun), 342.
- [4] O. Jupen; *Phys. Scr.*, 1985, **32**, No. 6, 527.
- [5] O. Jupen; *Phys. Scr.*, 1985, **32**, No. 6, 592.
- [6] 姜仁滨, 王宛珏;《兰州铁道学院学报》, 1990, **9**, No. 3, 45.
- [7] 姜仁滨, 王宛珏;《原子与分子物理学报》, 1991, **8**, No. 3, (待发表).
- [8] 王宛珏, 姜仁滨;《光学学报》, 1991, **11**, No. 7 (Jul), 592~597.
- [9] B. Edlen; *Phys. Scr.*, 1984, **30**, No. 2, 141.
- [10] V. Kanfmann *et al.*; *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 1988, **17**, No. 4, 1766.
- [11] K. Mori; *Atomic Data & Nuclear Data tables*, 1986, **34**, No. 1, 113.
- [12] K. T. Cheng *et al.*; *Atomic Data & Nuclear Data Tables*, 1979, **24**, No. 2, 130.
- [13] A. K. Bhatia; *Atomec Data & Nuclear Data Tables*, 1989, **43**, No. 1, 107.
- [14] I. P. Grant; *Adv. Phys.*, 1970, **19**, No. 82, 747.
- [15] I. P. Grant *et al.*; *Comput. Phys. Commun.*, 1980, **21**, No. 2, 207.
- [16] B. J. McKenzie *et al.*; *Comput. Phys. Commun.*, 1980, **21**, No. 2, 233.

Relativistic multiconfiguration Dirac-Fock calculation of fine-structure energy levels and transition wavelengths for N-like V XVII, Cr XVIII, Mn XIX and Fe XX

WANG WANJUE AND JIANG RENBIN

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

(Received 7 January 1991; revised 25 February 1991)

Abstract

In this paper, by the way of extended average level (MODF-EAL) model of relativistic multiconfiguration Dirac-Fock code. We have calculated 44 fine-structure energy levels of $2s^2 2p^2$, $2s 2p^4$, $2p^5$, $2s^2 2p^2 3s$, $2s^2 2p^2 3p$ configuration and 33 transition wavelengths of $3s-3p$ from N-like V XVII, Cr XVIII, Mn XIX and Fe XX ions which may be the candidates for lasing action. The calculated values of $3s$, $3p$ configuration for V XVII, Cr XVIII and Mn XIX are first predicted.

Key words: N-like ions; fine-structure energy levels.

第四届全国光学测试学术交流会在杭州召开

由中国光学学会光学测试专业委员会委托浙江大学光学电子科学仪器系、浙江省光学学会、浙江省计量测试学会和中国计量学院等联合主办的第四届全国光学测试学术交流会于 1991 年 5 月 20 日~23 日在杭州浙江大学举行。来自全国 20 个省市的 70 多个高校、科研和工矿企业 180 多位代表出席了会议,此外,还有一名保加利亚访问学者和一名香港中文大学物理系学者应邀参加了学术交流。这是光学测试界的一次盛会。

会议由本届学术交流会组委会主席浙大唐晋发教授主持,开幕式上,浙江省人大常委会副主任委员吴敏达教授作了关于科学技术重要性的报告,他重温了科学技术是第一生产力的精辟论述以及又一个科学春天的到来,赢得了全体与会者的一次又一次热烈掌声。陈进榜教授代表专业委员会作了热情洋溢的讲话,重申了光测试学科的二个主要方面:光学量的光学与非光学测量和非光学量的光学测量。强调光学测试学科对科学技术发展的促进作用与科学技术促使光学测试学科的开拓。

会议共收到学术论文 305 篇,经过严格的评审,录取了其中 193 篇论文在会议上宣讲交流。就论文的主题分类有:光干涉测试、全息、散斑测试技术共 42 篇;光谱、光度、色度参量测试技术方面共 35 篇;激光及红外参量测量的共 36 篇;光电器件、光纤传感器等测试技术方面共 38 篇;其它光学和非光学测试技术共 42 篇。

根据上述分类,学术交流以五个分会场形式进行交流,从论文的宣讲和讨论情况知悉,本届光测试学术论文具有这样几个特点:

1. 水平有明显的提高,个别论文已走向世界先进水平行列。