

Sc¹⁸⁺ 和 Ti¹⁹⁺ 的辐射跃迁几率*

朱 颀 人 曾 天 海 潘 守 甫

(吉林大学原子与分子物理研究所, 长春 130023)

提 要

计算表明, Sc¹⁸⁺ 和 Ti¹⁹⁺ 的 5*f*—3*d* 和 5*d*—3*p* 跃迁波长处于水窗当中, 进而, 详尽地计算了这两个元素类锂离子精细能级 ($n \leq 12, l \leq 5$) 及它们间的辐射跃迁几率.

关键词 类锂离子水窗激光, 精细能级, 辐射跃迁几率.

1 引 言

徐至展等在成功地实现了 Si¹¹⁺ 的软 X 射线激光^[1] 之后, 进一步预言: 使用较高功率密度的驱动激光, 可以指望采用同一方案在较大元素同类跃迁上实现水窗激光^[2]. 作者在研究 Si¹¹⁺ 的已发现的两条激光谱线 (5*f*—3*d* 和 5*d*—3*p*) 时曾经指出, 由于从类氦离子复合生成的类锂离子优先布居它的较高能级, 而且上述两跃迁的下能级均由于它们同基态的 2*s* 或 2*p* 能级具有很强的电偶极耦合而被迅速排空, 这就形成了在上述两跃迁实现激光作用的基本条件. 作者认为, 这些基本条件对本文讨论的 Sc¹⁸⁺ 和 Ti¹⁹⁺ 亦当成立. 本文选取 Sc¹⁸⁺ 和 Ti¹⁹⁺ 为计算对象, 是因为它们的上述跃迁正处于水窗中间.

作者注意到, 对于类锂离子的能级和辐射跃迁几率, 前人已有过多次计算^[3~8]. 考虑到: 1) 中等元素 ($Z > 20$) 的高荷电离子的辐射跃迁几率的相对论效应应予考察; 2) 跃迁几率计算中的两种常用规范, Babushkin 规范和 Coulomb 规范 (分别对应于非相对论的长度和速度规范), 计算结果的自洽性应予考察; 3) 最主要的是, 激光物理所需要的数据比迄今已发表的数据多得多. 为了满足这一实际需求, 本文不仅计算了迄今最大量的跃迁数据**, 而且指明了利用这些数据如何进行数据外推的可靠方法.

2 计 算 方 法

本文对辐射过程的计算, 是运行 MCDF 程序包^[9], 连同其横向 Breit 修正和量子电动力学修正程序^[10], 以及自编的计算相对论辐射跃迁几率的后处理程序^[11] 完成的. 对于每对能级, 均分别在 Babushkin 规范和 Coulomb 规范下独立地求得两个跃迁几率值, 它们的相对偏差非常灵敏地反映了所得波函数的准确度. 对于本文所涉及的大部分跃迁, 这种偏差

收稿日期: 1990年12月10日; 收到修改稿日期: 1991年4月30日

* 本文是在国家自然科学基金、国家教委博士点基金以及中国原子分子数据研究联合体共同资助下完成的.

** 读者若需要这些数据, 可直接向作者索取.

均在 1% 之内; 对于少数由于径向相消效应^[12]所造成的弱跃迁, 其相对偏差亦在 5% 之内, 并取它们的算术平均值作为该对能级间跃迁几率的理论值。

3 结果与讨论

在已经发表的文献中, 关于类锂离子的光谱数据, 较为完备的资料载于文献[8]: 就跃迁波长而论, 那里载入了经过仔细鉴别而优选的实验或/和理论的结果. 为便于对照, 将那里已载入的能级值同本文的计算结果(亦变换成 cm^{-1} 单位)一并列于表 1. 由表 1 可见, 两者相对偏差一律小于 0.3%; 就跃迁几率而言, 那里的数据则取自各种非相对论的理论计算. 为便于对照, 将那里的数据同本文的相对论计算结果一并列于表 2. 由表 2 可知, 除了 $4p_{1/2}-7d_{3/2}$ 和 $4p_{3/2}-7d_{5/2}$ 两跃迁几率值由于文献[8]作者们的明显笔误(将 $7.1+10$ 误写成 $7.1+11$ 和将 $8.8+10$ 误写成 $8.8+11$), 而两者相差一个数量级之外, 其余数据则完全在 10% 之内符合. 这证实了一个被人们普遍接受的说法, 即, 在 $z \leq 25$ 之内, 相对论对辐射跃迁几率的影响不很大. 但是, 如果仔细去看, 则可发现两者数据间存在着带有明显规律性的差别. 揭示这一规律, 正是本文的主要目的之一. 跃迁几率的计算值决定于其跃迁能和线强度. 由表 1 已知, 相对论对能量的影响是很小的(当 $z \leq 25$), 而它对线强度计算中的径向积分的影响有时却是显著的. 如所周知, 当原子序数 z 增大时, 原子中的所有电子旋轨函数均经历着相对论性收缩. 但是, 它们各自收缩的幅度却大不相同, n, l, j 越小的电子相对论性收缩幅度越大. 由此, 可以原则地解释几乎所有表 2 所列数据的对比关系. 例如, 对于 $2s-3p_{1/2}$ 和 $2s-3p_{3/2}$ 跃迁, $2s$ 轨道原本处在 $3p$ 轨道的内侧, 考虑了相对论之后, $2s$ 轨

Table 1 The comparison for energy levels of Ti^{19+} in this paper with those in relevant literature (in cm^{-1})

Energy levels	Energy		Energy levels	Energy	
	ref [8]	this paper		ref [8]	this paper
$2s$	0	0	$6p_{1/2}$	10274000	10266561
$2p_{1/2}$	323549	324876	$6p_{3/2}$	10274000	10268844
$2p_{3/2}$	385695	386803	$6d_{3/2}$	10278000	10272917
$3s$	6466000	6464932	$6d_{5/2}$	10278000	10273642
$3p_{1/2}$	6556000	6554934	$7p_{1/2}$	10600000	10593059
$3p_{3/2}$	6574000	6573243	$7p_{3/2}$	10600000	10594494
$3d_{3/2}$	6610000	6606965	$7d_{3/2}$	10601000	10597043
$3d_{5/2}$	6610000	6612748	$7d_{5/2}$	10601000	10597503
$4p_{1/2}$	8732000	8723704	$8p_{1/2}$	10815000	10804721
$4p_{3/2}$	8732000	8731414	$8p_{3/2}$	10815000	10805680
$4d_{3/2}$	8747000	8745416	$8d_{3/2}$	10812000	10807382
$4d_{5/2}$	8748000	8747852	$8d_{5/2}$	10812000	10807689
$5p_{1/2}$	9730000	9724256	$9p_{1/2}$	10955000	10949705
$5p_{3/2}$	9730000	9728200	$9p_{3/2}$	10955000	10950383
$5d_{3/2}$	9740000	9735314	$9d_{3/2}$	10960000	10951568
$5d_{5/2}$	9740000	9735556	$9d_{5/2}$	10960000	10951778

Table 2 The comparison for radiative transition probabilities of Ti¹⁹⁺ in this paper with those in relevant literature (in sec⁻¹)

transition	Probabilities		transition	Probabilities	
	ref [8]	this paper		ref [8]	this paper
2s—3p _{1/2}	3.58+12	3.564+12	8p _{3/2}	6.5+10	6.292+10
3p _{3/2}	3.50+12	3.477+12	3p _{1/2} —4d _{3/2}	9.6+11	9.307+11
4p _{1/2}	*1.676+12	1.572+12	5d _{3/2}	4.64+11	4.584+11
4p _{3/2}	*1.678+12	1.546+12	3p _{1/2} —6d _{3/2}	2.58+11	2.560+11
5p _{1/2}	8.4+11	8.099+11	7d _{3/2}	1.57+11	1.574+11
5p _{3/2}	8.4+11	7.990+11	8d _{3/2}	1.1+11	1.037+11
6p _{1/2}	4.95+11	4.691+11	3p _{3/2} —4d _{3/2}	1.8+11	1.870+11
6p _{3/2}	4.95+11	4.636+11	4d _{5/2}	1.1+12	1.118+12
7p _{1/2}	3.1+11	2.953+11	5d _{3/2}	9.2+10	9.134+10
7p _{3/2}	3.1+11	2.922+11	5d _{5/2}	5.49+11	5.470+11
8p _{1/2}	2.0+11	1.977+11	6d _{3/2}	5.1+10	5.083+10
8p _{3/2}	2.0+11	1.958+11	6d _{5/2}	3.05+11	3.002+11
2p _{1/2} —3s	4.5+11	4.486+11	7d _{3/2}	3.1+10	3.120+10
2p _{3/2} —3s	8.7+11	9.336+11	7d _{5/2}	1.89+11	1.874+11
2p _{1/2} —3d _{3/2}	8.84+12	8.872+12	8d _{3/2}	2.0+10	2.054+10
4d _{3/2}	2.8+12	2.888+12	8d _{5/2}	1.2+11	1.235+11
5d _{3/2}	1.34+12	1.330+12	3d _{3/2} —4p _{1/2}	6.3+10	6.681+10
6d _{3/2}	7.3+11	7.291+11	4p _{3/2}	6.3+9	6.286+9
7d _{3/2}	4.45+11	4.446+11	5p _{1/2}	2.7+10	2.862+10
8d _{3/2}	2.9+11	2.919+11	5p _{3/2}	2.6+9	2.698+9
2p _{3/2} —3d _{3/2}	1.8+12	1.753+12	6p _{1/2}	1.40+10	1.497+10
3d _{5/2}	1.05+13	1.052+13	6p _{3/2}	1.4+9	1.412+9
2p _{3/2} —4d _{3/2}	5.6+11	5.670+11	3d _{5/2} —4p _{3/2}	5.6+10	5.752+10
4d _{5/2}	3.4+12	3.415+12	5p _{3/2}	2.4+10	2.468+10
5d _{3/2}	2.6+11	2.603+11	6p _{3/2}	1.20+10	1.291+10
5d _{5/2}	1.58+12	1.570+12	4p _{1/2} —5d _{3/2}	1.97+11	1.928+11
6d _{3/2}	1.4+11	1.424+11	6d _{3/2}	1.12+11	1.143+11
6d _{5/2}	8.6+11	8.598+11	7d _{3/2}	7.1+11	7.137+10
7d _{3/2}	8.6+10	8.677+10	4p _{1/2} —8d _{3/2}	4.73+10	4.735+10
7d _{5/2}	5.26+11	5.241+11	4p _{3/2} —5d _{3/2}	3.9+10	3.902+10
8d _{3/2}	5.7+10	5.692+10	5d _{5/2}	2.37+11	2.328+11
8d _{5/2}	3.4+11	3.439+11	6d _{3/2}	2.2+10	2.295+10
3s—4p _{1/2}	4. +11	4.653+11	6d _{5/2}	1.35+11	1.373+11
4p _{3/2}	4.8+11	4.518+11	7d _{3/2}	1.4+10	1.428+10
5p _{1/2}	2.54+11	2.553+11	7d _{5/2}	8.8+11	8.555+10
5p _{3/2}	2.54+11	2.498+11	8d _{3/2}	9.5+9	9.457+9
6p _{1/2}	1.5+11	1.502+11	8d _{5/2}	5.8+10	5.669+10
6p _{3/2}	1.5+11	1.475+11	4d _{3/2} —5p _{1/2}	3.35+10	3.541+10
7p _{1/2}	9.4+10	9.515+10	5p _{3/2}	3.4+9	3.354+9
7p _{3/2}	9.4+10	9.358+10	4d _{5/2} —5p _{3/2}	3.00+10	3.065+10
8p _{1/2}	6.5+10	6.391+10			

* These transition probability values were calculated by us from corresponding oscillator strength f values in the reference [8].

道的较强的相对论性收缩使得它与 $3p$ 轨道的电子云分布相距得更远了. 这应当是本文计算的这两个跃迁的几率值小于文献[8]所列数据的最基本的物理原因. 又如, 对于 $2p_{3/2}-3s$ 和 $2p_{1/2}-3s$ 两跃迁, $3s$ 轨道原本处于 $2p$ 轨道的外侧, 相对论使得 $3s$, $2p_{1/2}$ 和 $2p_{3/2}$ 这三个轨道发生了程度明显不同的收缩: 由于 n, l, j 三个量子数综合起作用的结果, 使得 $2p_{1/2}$ 和 $3s$ 两轨道的收缩程度相当, 于是, 对于 $2p_{1/2}-3s$ 跃迁, 本文结果与文献[8]的数据甚为接近; 但是, $3p_{3/2}$ 轨道的收缩比另两个轨道的收缩明显地小, 所以, 其外侧 $3s$ 轨道较大收缩的结果, 使得本文对 $2p_{3/2}-3s$ 跃迁几率的计算结果显著高于文献[8]所列数据(+7.3%).

综合上述, 我们自信, 本文结果应是迄今发表的数据中较为准确的.

此外, 本文另一个主要目的, 是要通过这些数据间固有的规律性向人们推荐较为可靠的数据外推方法. 这里, 可以给出两条信息:

1) 对于每个里德堡系, 当跃迁上能级的主量子数 n_k 足够大之后, 其跃迁几率仅与 n_k^3 成反比;

2) 对于每个跃迁, Sc^{18+} 和 Ti^{19+} 的跃迁几率值几乎保持着一个共同比值: 0.815. 这是高荷电类锂离子的类氢行为的又一生动反映: 对于 Sc^{18+} , 其光学电子所感受到的有效核电荷数 $z_{\text{eff}} \cong 21 - 2 = 19$; 对于 Ti^{19+} , $z_{\text{eff}} \cong 22 - 2 = 20$. 所以, 其跃迁几率比应为它们有效核电荷数比的 4 次方. 这一规律, 可使人们较有把握地推断相邻几个元素类锂离子的相应数据.

参 考 文 献

- [1] 徐至展, 范品忠, 张正泉等. 类理硅离子软 X 射线激光实验研究. 中国激光, 1989, **16** (10): 616
- [2] 徐至展, 张正泉, 范品忠等. 软 X 射线激光增益实验研究. 中国科学, A 辑, 1990, (1): 27~36
- [3] C. Laughlin, M. N. Lewis, Z. J. Horak, Transition Probabilities in the Lithium Isoelectronic Sequence. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, 1973, **6** (10): 1953~66
- [4] W. L. Wiese, J. R. Fuhr, Atomic Transition Probabilities for Scandium and Titanium (A Critical Data Compilation of Allowed Lines). *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 1975, **4** (2): 263~352
- [5] G. A. Martin, W. L. Wiese, Tables of Critically Evaluated Oscillator Strengths for the Lithium Isoelectronic Sequence. *J. Phys. Chem. Ref. Data*, 1976, **5** (3): 537~70
- [6] L. Armstrong, Jr., W. R. Fielder, D. L. Liu, Relativistic Effects on Transition Probabilities in the Li and Be Isoelectronic Sequences. *Phys. Rev. (A)*, 1976, **14** (3): 1114~28
- [7] A. Lindgren, S. E. Nielsen, Transition Probabilities for the Alkali Isoelectronic Sequences LiI, NaI, KI, RbI, CsI, FrI. *At. Data Nucl. Data Tables*, 1977, **19** (6): 533~633
- [8] K. Mori, W. L. Wiese, T. Shirai *et al.*, Spectral Data and Grotrian Diagrams for Highly Ionized Titanium, TiV-TiXXII. *At. Data Nucl. Data Tables*, 1986, **34** (1): 79~184
- [9] I. P. Grant, B. J. McKenzie, P. H. Norrington, An Atomic Multiconfigurational Dirac-Fock Package. *Comput. Phys. Commun.* 1980, **21** (2): 207~32
- [10] B. J. McKenzie, I. P. Grant, P. H. Norrington, A Program to Calculate Transverse Breit and QED Corrections to Energy Levels in a Multiconfiguration Dirac-Fock Environment. *Comput. Phys. Commun.*, 1980, **21** (2): 233~46
- [11] 朱颖人, 潘守甫. MCDF 程序包和电偶极辐射跃迁几率的相对论计算程序. 计算物理, 1990, **7** (4): 403~6
- [12] R. D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (1st ed.). Berkeley: Univ. California Press, 1981: 433~4

Radiative transition probabilities of Sc¹⁸⁺ and Ti¹⁹⁺

ZHU QIREN ZENG TIANHAI PAN SHOUFU

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

(Received 10 December 1990; revised 30 April 1991)

Abstract

The investigation by Xu Zhizhan *et al.*^[1] predicts that the lasing in the 'Water Window' (4.38—2.33 nm) could be possibly realized with the Li-like recombination scheme at a large-scale high-power laser facility. Our calculations show that the wavelengths of the transitions $5f-3d$ and $5d-3p$ of Sc¹⁸⁺ and Ti¹⁹⁺ lie in the center of the water window. The fine-structures levels ($n \leq 12$, $l \leq 5$) for these two Li-like ions and the radiative transition probabilities between them are calculated. **Key words** water window lasers of Li-like ions, fine-structure levels, radiative transition probabilities.

CLEO '93 征文通知

CLEO '93 会议将于 1993 年 5 月 2~7 日在美国马里兰州巴尔的摩(Baltimore)会议中心召开。中国地区节目委员会已开始受理中国地区的征稿工作。征文的主要内容:

- | | |
|-------------------------------|-----------------|
| 1. 激光器件(气体,自由电子,固体,液体,半导体等器件) | 7. 大气、空间和海洋光学 |
| 2. 非线性光学和激光光谱学的应用 | 8. 光开关、逻辑与存储系统 |
| 3. 相位共轭与光致折射器件 | 9. 电-光器件与红外传感技术 |
| 4. 光学材料和制作 | 10. 诊断、分析和工业应用 |
| 5. 激光聚变和强场物理 | 11. 医学和生物学应用 |
| 6. 超快光学与电子学 | 12. 光通信 |

来稿请附中英文 35 字摘要和 200~500 字摘要各两份,其中一份不写单位和姓名,便于审稿。来稿或打印或书写均务必清楚,并在投寄信封上标明“CLEO '93”字样。挂号寄: 邮政编码 201800 上海 800-211 信箱《中国激光》编辑部 切勿直接寄往国外,以免延误!

CLEO '93 中国地区节目委员会主席徐至展。通讯地址: 上海 800-211 信箱,电话 9528896。

英文征文通知备索,需者可来函来人与《中国激光》编辑部联系。

注意: 中国地区征稿的截止日为 1993 年 10 月 30 日(以投邮日戳为准)

CLEO '93 中国地区节目委员会