

类 Li 钙离子精细结构能级和软 X 射线光谱 的理论计算

滕华国 徐至展 沈百飞 张文琦

(中国科学院上海光学精密机械研究所, 上海 201800)

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)

提 要

用多组态 HFR 方法计算了类 Li 等电子序列钙(Ca, $Z=20$)离子 $1s^2nl$ ($n=2\sim 6, l=0\sim 5$) 组态的所有能级和电偶极跃迁的软 X 射线光谱, 其中 $4f \rightarrow 3d, 5f \rightarrow 3d$ 及 $5d \rightarrow 3p, 4d \rightarrow 3p$ 由于其下能级跃迁速率较大, 容易形成粒子数反转因而可作为激光跃迁, $5f \rightarrow 3d, 6f \rightarrow 3d$ 跃迁已处于“水窗”波段, 而 $4f \rightarrow 3d$ 的激光跃迁(5.77 nm)已为我们最近的实验所证实. 并将我们的计算结果与其它理论计算和实验数据进行了比较.

关键词 光谱, 组态, 能级, 软 X 射线激光.

1 引 言

以三体复合作为泵浦机制的类 Li 离子软 X 射线激光研究已经取得了重要进展^(1~3). 目前实验上为了把软 X 射线激光波长推向具有实用意义的“水窗”波段, 迫切需要类 Li 系列高离化态原子的光谱数据; 对软 X 射线激光方案的理论模拟也需要大量类 Li 离子高离化态的光谱数据; 为了研究激光等离子体的发射特性, 上述光谱数据同样也是必不可少的.

有关类 Li 钙离子的光谱数据, 很不全面, 较为系统的为 Vainshtein 等人⁽⁴⁾ 的理论计算和 Edlen⁽⁵⁾ 及王永昌等人⁽⁶⁾ 的半经验计算. Fawcett 等人⁽⁷⁾ 进行的实验只有较少的几条谱线被观察到, 而我们用于软 X 射线激光研究需要的高主量子数和高次量子数组态的能级、波长及振子强度、跃迁几率仍是缺乏的.

为配合实验研究, 本文系统计算了类 Li 钙离子 $1s^2nl$ ($n=2\rightarrow 6, l=0\rightarrow 6$) 组态的所有能级及电偶极跃迁的光谱, 为检验计算准确性, 与其它理论及实验结果进行了比较, 由于本文考虑了相对论效应和相关效应并对能量参数(Slater 径向积分)进行了优化, 结果是比较准确的.

有关原子结构和光谱计算的多组态 HFR 方法及组态相与作用理论的详细介绍可参看文献[8,9], 本文不再赘述, 本文只将与计算有关的内容概述如下:

原子序数为 Z 的带 N 个电子的原子体系

$$(n_1l_1)^{w_1}(n_2l_2)^{w_2}\cdots(n_q l_q)^{w_q}, \quad w_1 + w_2 + \cdots + w_q = N$$

的状态波函数应为原子所有组态(束缚态和连续态)的无微扰态构成的行列式波函数的线性组合:

$$\Psi_a = \sum_i C_i \Psi_i(\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N)$$

式中, Ψ_i 为行列式波函数, C_i 为组态混合系数, 原子的无微扰态波函数

$$\varphi_i = (1/r) P_{nl}(r) Y_{lm} X_{sm}$$

可由 Hartree-Fock 方程加相对论性修正而求得:

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

式中 α 为精细结构常数, ε_i 为第 i 个电子轨道函数的本征值, V^i 为 $H-F$ 势函数:

$$V^i(r) = -\frac{2Z}{r} + \sum_{j=1}^q (W_j - \delta_{ij}) \int_0^\infty \frac{2}{r_j} P_j^2(r_2) dr_2 \\ - (W_i - 1) A_i(r) - \sum_{j(\neq i)=1}^q W_j [\delta_{l_i l_j} \varepsilon_{ij} + B_{ij}] \cdot \frac{P_j(r)}{P_i(r)} \\ A_i(r) = \frac{2l_i + 1}{4l_i + 1} \sum_{k>0} \begin{pmatrix} l_i & k & l_i \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \int_0^\infty \frac{2r_1^k}{r_1^{k+1}} P_i^2(r_2) dr_2, \\ B_{ij}(r) = \frac{1}{2} \sum_k \begin{pmatrix} l_i & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 \int_0^\infty \frac{2r_1^k}{r_1^{k+1}} P_j(r_2) P_i(r_2) dr_2.$$

实际计算中只能考虑有限数目的组态. 首先应考虑有较强相互作用的那些组态. 类 Li 系列离子由于其特殊的结构(闭壳层之外带一个价电子), 各 $1s^2 nl$ 组态之间无相互作用^[8]. 根据实际计算, $1s^2 nl$ 组态与 $1s2s nl$ 组态之间相互作用稍强, 其它情况均很弱, 因此可以把组态分为如下几组进行计算:

- | | | | | |
|-----|-------------|--------------------|-------------|--------------------|
| (1) | $1s^2 ns$ | ($n = 2 - 6$). | $1s2s ns$ | ($n = 2 - 6$). |
| (2) | $1s^2 nd$ | ($n = 3 - 6$). | $1s2s nd$ | ($n = 3 - 6$). |
| (3) | $1s^2 ng$ | ($n = 5, 6$). | $1s2s ng$ | ($n = 5, 6$). |
| (4) | $1s^2 np$ | ($n = 2 - 6$). | $1s2s np$ | ($n = 2 - 6$). |
| (5) | $1s^2 nf$ | ($n = 4, 5, 6$). | $1s2s nf$ | ($n = 4, 5, 6$). |
| (6) | $1s^2 6h$, | | $1s2s 6h$. | |

本文计算采用的程序是 Cowan^[8] 的原子结构和光谱计算程序库^[10]. 此程序首先用 HFR 方法得出径向波函数用来计算原子组态的能量参数 E_w 、 F^k 、 G^k 和 R^k 及 ξ_i . 然后用 Racah 代数方法^[8] 求出与各能量参数相联系的角系数. 进而对角化哈密顿能量矩阵求出原子各状态的能量本征值及电偶极跃迁的光谱.

由于理论模型的固有近似, 能级的计算值与实验值之间还有一定误差, 为减少这种误差对 Slater 径向积分作了调整, 这种调整是运用最小二乘优化方法沿类锂等电子序列拟合已有的实验能级值使能级实验值与计算值之间的偏差达最小, 得到优化的 Slater 参量, 然后沿等电子序列外推得到类锂钙离子的 Slater 参量. 运用这些参量计算出能级值, 跃迁波长及相应的电偶极跃迁的振子强度.

3 结果和讨论

表 1 为类 Li 钙离子各 $1s^2 nl$ 组态的能级值, 表 2 为各 $1s^2 nl$ 组态电偶极跃迁的软 X 射线光谱包括波长(40 nm 以下)和振子强度. 为便于比较, 表 1 和表 2 中也列出了 Vainshtein^[4] 和 Kelly^[11] 的结果及 Fawcett^[7] 等人的实验观测结果, 与他们的结果比较可以看出, 我们的计算值在实验误差范围内与文献[7, 11]的实验值基本符合, 与 Edlen^[5] 和 Vainshtein 等人^[4] 的理论计算也很接近, 振子强度的计算值也与 Wiese^[12] 的结果一致.

从表 2 看出, $4f \rightarrow 3d$ 、 $5f \rightarrow 3d$ 和 $6f \rightarrow 3d$ 跃迁由于 $3d \rightarrow 2p$ 跃迁有较大振子强度(较大跃迁几率), 下能级容易倒空从而形成粒子数反转, 因而可作为激光跃迁的上下能级; 而 $6d \rightarrow 3p$ 、 $5d \rightarrow 3p$ 及 $4d \rightarrow 3p$ 跃迁也具有上述跃迁特点; 上列跃迁中已有 12 条线处于“水窗”波段. 其中 $4f \rightarrow 3d$ 跃迁(5.77 nm)作为激光跃迁实现软 X 射线自发辐射放大(ASE)已为我们最近的实验所证实.

Table 1. Energy Levels(in cm^{-1}) of $1s^2 nl$ configurations
for Li-like Ca XVIII ion

Configurations	Terms	J	Energy Levels		
			Present	[Vainshtein]	[Exp.]
$1s^2 2s$	2S	1/2	0.0	0.0	0.0K
$3s$	2S	1/2	5258930	5257352	5258020K
$4s$	2S	1/2	7063566	7060310	7061700K
$5s$	2S	1/2	7890741	7887130	
$6s$	2S	1/2	8336078		
$1s^2 2p$	2P	1/2	290065	289972	290060K
		3/2	330927	331002	330890K
$3p$	2P	1/2	5338009	5337640	5337921F
		3/2	5350013	5349760	5350000K
$4p$	2P	1/2	7098457	7094040	7101000K
		3/2	7103543	7099152	7101000K
$5p$	2P	1/2	7912576	7904360	7914000K
		3/2	7915176	7906977	7914000K
$6p$	2P	1/2	8340248		8341000K
		3/2	8341752		8341000K
$1s^2 3d$	2D	3/2	5380999	5380198	5381000K
		5/2	5384001	5383996	5384000K
$4d$	2D	3/2	7112222	7111980	7112000K
		5/2	7113534	7113583	7113200F
$5d$	2D	3/2	7912001	7913530	7912000K
		5/2	7913007	7914351	7913000K
$6d$	2D	3/2	8344595		
		5/2	8345072		8345000K
$1s^2 4f$	2F	5/2	7115684		7113400F
		7/2	7116485		7114200F
$5f$	2F	5/2	7917087		
		7/2	7917498		
$6f$	2F	5/2	8351692		
		7/2	8351930		
$1s^2 5g$	2G	7/2	7916108		
		9/2	7916354		
$6g$	2G	7/2	8352897		
		9/2	8353023		
$1s^2 6h$	2H	9/2	8356970		
		11/2	8357070		

Note K: Measured Value from reference [11]. F: Measured Value from reference [7]
[Vainshtein]: Calculated Value from reference [4].

参 考 文 献

- [1] G. J. Tallents, X-ray lasers 1990, *The 2nd International Colloquium on X-ray Lasers*, New York: Institute of Physics, Bristol, Philadelphia and New York, 1990
- [2] Xu Zhizhan, Fan Pinzhong, Zhang Zhengquan, *et al.*, Soft X-ray lasing and its spatial characteristics in a lithium-like Silicon Plasma. *Appl. Phys. Lett.*, 1990, **56**(24):2370~2372
- [3] Xu Zhizhan, Zhang Zhenquan, Fan Pinzhong, *et al.*, Soft X-ray amplification by Li-like Al and Si ions in recombining plasmas. *Appl. Phys. B*, 1990, **50**(3):147~151
- [4] L. A. Vainshtein, U. I. Safronova, Energy levels of He- and Li-like ions(States $1sn1$, $1s2n1$ with $n=2-5$). *Phys. Scripta*, 1985, **31**(6):519~532
- [5] B. Edlen, Accurate semi-empirical formula for the energy structure of Li-like spectra. *Phys. Scripta*, 1979, **19**(3):255~266
- [6] 王永昌,王曼英,王雄基, 类锂等电子系列离子 LiI-SiX II 能量的半经验计算值与量子数亏损的规律性, 原子与分子物理学报, 1985, **2**(3):67~78
- [7] B. C. Fawcett, A. Ridgeley, Analysis of $n=3$ to 4 spectra for ions from MgX to Fe XXIV and P XI, XII. *J. Phys. B: At. Mol. Phys.*, 1981, **14**(2):203~208
- [8] R. D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra*, Ind, Los Angeles, Univ. of California press, 1981
- [9] 赵中新,李家明,非相对论性和相对论性原子组态相互作用理论,物理学报, 1985, **34**(11):1469~1478
- [10] R. D. Cowan, *Atomic Structure and Spectra Program-package*, Los Angeles, LosAlamos National Laboratory, Unpublished Report, 1981
- [11] R. L. Kelly, Atomic and ionic spectrum lines Below 200nm. *J. Chem. Phys. Ref. Data*, 1987, **16**(Suppl. 1):472
- [12] W. L. Wiese, *Atomic Transition Probabilities*, NSRDS-NBS22, Washington DC; US Govt. printing office, 1969

A numerical calculation of fine structure energy levels and soft X-ray spectra of Li-like Ca ion

TENG Huaguo XU Zhizhan SHEN Beifei ZHANG Wenqi

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

Wang Yongchang

(Department of Physics, Xi'an Jiaotong University, Xi'an 710049)

Yuan Ping

(Department of Physics, Northwest Normal University, Lanzhou 730070)

(Received 3 April 1992; revised 8 June 1992)

Abstract

The Soft X-ray spectra and energy levels of the $1s^2 nl(n = 2-6, l = 0-6)$ configurations for the Li-like Ca ion are calculated with the aid of the multi-configuration HFR program developed by Cowan. The results are discussed and compared with other theoretical and experimental values. The $3d-4f$ transition (5.77 nm) as a soft X-ray laser transition has been confirmed by our latest experiment.

Key words X-ray laser, spectra, energy level, configuration.