

$$H_0 = \sum_{i=1}^{28} h_0(i) = \sum_{i=1}^{28} a_i^\dagger a_i \epsilon_i$$

$$V = - \sum_{ij} a_i^\dagger a_i \delta_{ij} |u|j\rangle + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_l a_k \delta_{ij} | \frac{1}{r_{12}} |lk\rangle$$

定义核心(core)轨道为占满电子轨道, 虚(virtual)轨道为完全没有被电子占据轨道, 虚(valence)轨道或没有电子或有电子。

$$P = \sum_{\alpha \in P} |\alpha\rangle \langle\alpha|$$

$$a_{\text{core}}^+ P = a_{\text{virt}} P = 0$$

3 数值计算和讨论

组态 $3d^{10}$ 取为零点能。

组态 $3d^9 4s$ 与 $3d^9 4p$ 组态间发射的谱线有 36 条, 在“水窗”波段有 5 条(3.92021 nm、3.91718 nm、3.89606 nm、3.88667 nm、3.86588 nm) 其余谱线分布在 11.8~12.3 nm、8.0~8.1 nm、6.6~6.7 nm、5.03~5.3 nm 之间, 在 3.93~5.0 nm 之间没有一条谱线。组态 $3d^9 4s$ 与 $3d^9 4f$ 间发射的谱线有 42 条, “水窗”波段有 11 条, 这对组态产生的谱线不像前对组态产生的谱线分布在几个波段内, 而是全部集中在 1.80~2.53 nm 之间, 没有分散到其它波段中去。

组态 $3d^9 4d$ 与组态 $3d^9 4p$ 间产生 117 条谱线, 在“水窗”波段集中了 32 条, 17.7~20.0 nm 间有 9 条, 7.9~8.5 nm 间分布了 17 条, 6.7~7.0 nm 间占有 18 条, 5.1~6.1 nm 间有 12 条, 4.5~4.8 nm 间分有 10 条, 其余谱线分布在 < 20.0 nm 之短波各个区域, 并不集中。 $3d^9 4d$ 组态与 $3d^9 4f$ 组态间产生的谱线最多, 共 169 条, 其中最短波长进入“水窗”波段, 在“水窗”波段内有 9 条, 与前述相比, 这对组态间产生的“水窗”波长谱线要少些, 其余分布在 20.0 nm 到 4.4 nm 间各个波段。

由上述分析可见, 类镍铈离子在“水窗”波段有丰富的谱线, 这为把 X 射线激光推向“水窗”波段的研制提供了有利的原子参数数据。

Table 1. The energy and wavelength of Ni-like L_r ion

No.	state	energy(1000.0 cm^{-1})	state	energy(1000.0 cm^{-1})	wavelength(nm)
0	$3d^{10}$	0.0	-	-	-
1	$3d^9 4s - {}^3D_2$	14722.9859	$3d^9 4p - {}^3P_2$	14862.2221	71.82036
2	$3d^9 4s - {}^3D_2$	14722.9859	$3d^9 4p - {}^3F_3$	14869.9663	68.36246
3	$3d^9 4s - {}^3D_1$	14713.4055	$3d^9 4p - {}^3P_2$	14862.2221	67.19678
4	$3d^9 4d - {}^3P_1$	17131.2261	$3d^9 4p - {}^3D_2$	16631.4721	20.00984
5	$3d^9 4d - {}^1S_0$	18160.6803	$3d^9 4p - {}^3P_1$	18684.5882	19.08732
6	$3d^9 4d - {}^3G_4$	17161.1569	$3d^9 4p - {}^3F_3$	16611.4329	18.19095
7	$3d^9 4d - {}^3F_3$	17187.8447	$3d^9 4p - {}^3F_1$	16611.4329	17.34871
8	$3d^9 4d - {}^3P_1$	18034.8583	$3d^9 4f - {}^3P_0$	18658.8690	16.02537
9	$3d^9 4d - {}^3F_3$	18086.8909	$3d^9 4f - {}^3G_4$	18753.3362	15.00498
10	$3d^9 4d - {}^3D_2$	18072.8150	$3d^9 4f - {}^1D_2$	18779.4169	14.15219
11	$3d^9 4d - {}^3G_4$	18059.8095	$3d^9 4f - {}^1F_3$	18828.4588	13.00983
12	$3d^9 4d - {}^1D_2$	17415.4896	$3d^9 4p - {}^3P_1$	16609.4642	12.40659
13	$3d^9 4d - {}^3D_1$	17825.5430	$3d^9 4f - {}^3D_2$	18722.0099	11.15490

No.	state	energy(1000.0 cm ⁻¹)	state	energy(1000.0 cm ⁻¹)	wavelength(nm)
14	3d ⁹ 4d - ³ G ₃	17825. 8303	3d ⁹ 4f - ³ F ₄	18813. 5407	10. 12443
15	3d ⁹ 4d - ³ F ₂	17868. 4315	3d ⁹ 4f - ³ D ₁	18946. 8319	9. 27299
16	3d ⁹ 4s - ³ D ₂	14722. 9859	3d ⁹ 4p - ³ D ₃	15968. 9947	8. 02563
17	3d ⁹ 4d - ³ F ₄	1742. 84709	3d ⁹ 4f - ³ G ₄	18753. 3362	7. 50475
18	3d ⁹ 4d - ³ D ₂	18072. 8150	3d ⁹ 4f - ³ D ₂	19435. 3854	7. 33907
19	3d ⁹ 4d - ³ P ₀	17558. 3485	3d ⁹ 4f - ³ D ₁	18946. 8319	7. 20210
20	3d ⁹ 4d - ³ F ₄	17420. 8470	3d ⁹ 4f - ¹ F ₃	18828. 4588	7. 10423
21	3d ⁹ 4d - ³ P ₁	18034. 8583	3d ⁹ 4p - ³ P ₁	16609. 4642	7. 01560
22	3d ⁹ 4d - ³ G ₄	18059. 8095	3d ⁹ 4p - ³ F ₃	16611. 4329	6. 90428
23	3d ⁹ 4d - ¹ D ₂	17415. 4894	3d ⁹ 4p - ¹ D ₂	15946. 4596	6. 80721
24	3d ⁹ 4d - ³ F ₄	17420. 8470	3d ⁹ 4p - ³ F ₄	15931. 2559	6. 71325
25	3d ⁹ 4d - ³ D ₂	17173. 1355	3d ⁹ 4f - ³ P ₁	18684. 5882	6. 61615
26	3d ⁹ 4d - ³ F ₃	17187. 8447	3d ⁹ 4f - ³ D ₂	18722. 0099	6. 51820
27	3d ⁹ 4d - ³ G ₃	17825. 8303	3d ⁹ 4f - ³ H ₄	19380. 7787	6. 43108
28	3d ⁹ 4d - ³ G ₄	17161. 1569	3d ⁹ 4f - ³ F ₃	18746. 4260	6. 30808
29	3d ⁹ 4d - ³ D ₁	17825. 5430	3d ⁹ 4f - ³ D ₂	19435. 3854	6. 21179
30	3d ⁹ 4d - ³ D ₂	17173. 1355	3d ⁹ 4p - ³ D ₁	15555. 2355	6. 18085
31	3d ⁹ 4d - ³ G ₄	17161. 1569	3d ⁹ 4f - ³ G ₅	18824. 9173	6. 01048
32	3d ⁹ 4d - ³ G ₃	17825. 8303	3d ⁹ 4f - ³ G ₄	19493. 0179	5. 99813
33	3d ⁹ 4d - ³ F ₂	17868. 4315	3d ⁹ 4f - ¹ P ₁	19600. 2613	5. 77424
34	3d ⁹ 4d - ³ D ₁	17825. 5430	3d ⁹ 4f - ¹ P ₁	19600. 2613	5. 63470
35	3d ⁹ 4d - ³ P ₁	17131. 2261	3d ⁹ 4f - ³ D ₁	18946. 8319	5. 50780
36	3d ⁹ 4d - ¹ P ₁	17368. 5761	3d ⁹ 4p - ³ F ₂	15531. 2786	5. 44278
37	3d ⁹ 4s - ³ D ₃	14044. 7369	3d ⁹ 4p - ³ F ₄	15931. 2559	5. 30077
38	3d ⁹ 4d - ³ F ₂	17868. 4315	3d ⁹ 4p - ¹ D ₂	15946. 4596	5. 20299
39	3d ⁹ 4d - ³ F ₄	17420. 8470	3d ⁹ 4f - ³ H ₄	19380. 7787	5. 10222
40	3d ⁹ 4d - ³ D ₃	17407. 7237	3d ⁹ 4f - ¹ D ₂	19395. 5504	5. 03062
41	3d ⁹ 4d - ³ F ₄	17420. 8470	3d ⁹ 4f - ³ H ₅	19457. 8920	4. 90907
42	3d ⁹ 4d - ³ G ₅	17378. 2517	3d ⁹ 4f - ³ H ₅	19457. 8920	4. 80852
43	3d ⁹ 4d - ³ D ₂	18072. 8150	3d ⁹ 4s - ¹ D ₂	15946. 4596	4. 70283
44	3d ⁹ 4d - ³ F ₃	18086. 8909	3d ⁹ 4s - ³ F ₄	15931. 2559	4. 63900
45	3d ⁹ 4d - ³ G ₄	17161. 1569	3d ⁹ 4f - ³ H ₄	19380. 7787	4. 50527
46	3d ⁹ 4d - ³ D ₁	17825. 5430	3d ⁹ 4s - ³ D ₁	15555. 2355	4. 40469
47	3d ⁹ 4d - ³ G ₄	17161. 1569	3d ⁹ 4f - ³ F ₃	19482. 2193	4. 30837
48	3d ⁹ 4d - ³ P ₁	17131. 2261	3d ⁹ 4f - ¹ P ₁	19600. 2613	4. 05017
49	3d ⁹ 4d - ³ F ₃	18086. 8909	3d ⁹ 4s - ³ F ₂	15531. 2786	3. 91296
50	3d ⁹ 4s - ³ D ₃	14044. 7369	3d ⁹ 4s - ³ D ₂	16631. 4721	3. 86588
51	3d ⁹ 4d - ³ F ₂	17868. 4315	3d ⁹ 4s - ³ P ₂	14862. 2221	3. 32645
52	3d ⁹ 4d - ³ F ₃	18086. 8909	3d ⁹ 4s - ³ P ₂	14862. 2221	3. 10109
53	3d ⁹ 4s - ³ D ₂	14722. 9859	3d ⁹ 4f - ³ D ₂	18722. 0099	2. 50061
54	3d ⁹ 4s - ³ D ₂	14722. 9859	3d ⁹ 4f - ¹ F ₃	18828. 4588	2. 43577
55	3d ⁹ 4s - ³ D ₁	14713. 4055	3d ⁹ 4f - ³ D ₁	18946. 8319	2. 36215
56	3d ⁹ 4s - ³ D ₂	14722. 9859	3d ⁹ 4f - ³ F ₃	19482. 2193	2. 10118
57	3d ⁹ 4s - ¹ D ₂	14058. 5785	3d ⁹ 4f - ³ D ₁	18946. 8319	2. 04572
58	3d ⁹ 4s - ¹ D ₂	14058. 5785	3d ⁹ 4f - ¹ P ₁	19600. 2613	1. 80451

本工作得到张文琦高工、宋向阳、李儒新、邓健等大力支持,在此特表示衷心的感谢。

参 考 文 献

- [1] 蔡灵仓, 李孝昌, 杨向东, 高剥离态原子能级的等电子序列拟合公式. 光学学报, 1995, **15**(6) : 678~681
- [2] 沈百飞, 徐至展, 韩申生, 类氦铝离子软 X 射线激光. 光学学报, 1995, **15**(3) : 272~ 275
- [3] I. Lindgren J. Morrison, Atomic Many-Body Theory, Berlin, Heidelberg, New York, Springer-Verlag, 1982

Spectrum of the Ni-Like Ir Ion

Jin Shiqi Teng Huaguo Liu Yaqing Xu Zhizhan

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

(Received 14 May 1996)

Abstract The characteristics of the high Z ions are very important to the study of X-ray lasing and other field. The energy and spectrum transition of the Ni-like Ir ion are calculated by using the cofiguration $3d^94s$, $3d^94d$, $3d^94p$, $3d^94f$.

Key words configuration, transition, Ni-like ions.