

# 高离化类铍离子 $2s^2\ ^1S_0-2s2p\ ^3P_1$ ( $Z = 10-103$ ) 自旋禁戒光谱跃迁

易有根<sup>1)2)</sup> 汪 蓉<sup>2)</sup> 李向东<sup>2)</sup> 王红艳<sup>2)</sup> 朱正和<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup>湘潭师范学院物理系,湘潭 411201)

<sup>2)</sup>四川大学原子分子工程研究所,成都 610065)

(2000 年 1 月 30 日收到,2000 年 3 月 21 日收到修改稿)

利用全相对论性多组态 Dirac-Fock 平均能级(MCDF-AL)方法系统地计算了高离化类铍离子自旋禁戒  $2s^2\ ^1S_0-2s2p\ ^3P_1$  ( $Z = 10-103$ ) 跃迁的能级间隔和跃迁概率,计算中考虑了重要的核的有限体积效应,Breit 修正和 QED 修正,所得结果和最近的实验数据及理论计算值进行了比较,结果表明,高原子序数的高荷电离子的自旋禁戒跃迁的跃迁概率和中性原子的电偶极 E1 的相当,在 ICF 和 MCF 高温激光等离子体中,自旋禁戒跃迁概率过程不容被忽视.

关键词:高离化态,跃迁概率

PACC:3130,3270

## 1 引 言

高离化原子离子结构的实验和理论研究是近代物理学中发展最为迅猛的领域之一<sup>[1]</sup>,高离化原子数据在 X-ray 激光,磁约束 MCF 聚变和惯性约束 ICF 聚变,天体等离子体物理,原子光谱学等方面具有特别重要的意义和广泛的应用价值.特别是近几十年来,高  $Z$  元素的高剥离离子的能级结构与光谱特性越来越受到有关研究人员的重视,等离子体中高离化原子光谱一直作为等离子体状态诊断的重要工具而被广泛采用<sup>[2]</sup>.由于高离化原子光谱在许多领域都有重要的应用价值,因此,提供高离化原子光谱的跃迁能级间隔和跃迁概率等跃迁参数就显得尤为重要.

对类铍离子自旋禁戒  $2s^2\ ^1S_0-2s2p\ ^3P_1$  跃迁已有一些实验和理论报道,Dave 等<sup>[3]</sup>在托克马克等离子体中观测到了类铍铁离子的能级间隔  $379130\text{cm}^{-1}$ ,Denne 和 Hinnov 等<sup>[2]</sup>在激光等离子体中观测到了类铍镍、铜、锆、硒和氟离子的跃迁,1993 年 Kwong 等<sup>[4]</sup>在托克马克等离子体中观测到了类铍碳离子的能级间隔,理论上 Lindroth 和 Hvarfner<sup>[5]</sup>用全阶方法(all-order)计算类铍铁和钼的  $2s^2\ ^1S_0$  和  $2s2p\ ^3P_1$  态的能级,Ynnerman 等用 MCDF<sup>[6]</sup>研究了类铍碳、

氮、氧、硅、铁和钼离子  $2s^2\ ^1S_0-2s2p\ ^3P_1$  跃迁,Safronova 等<sup>[7]</sup>报道了用含二阶扰动理论的 MBPT 方法系统计算了类铍离子( $Z = 4-100$ )的  $n = 2$  状态.1997 年 Chen 和 Cheng 等<sup>[8]</sup>用 CI 方法重新计算了类铍离子( $Z = 10-92$ )的  $n = 2$  跃迁的能级间隔,理论和实验之间符合得比较好,但以前的工作主要集中在能级的理论计算和测量方面,而对于光谱的重要参数跃迁概率则很少涉及到.

为了对激光等离子体进行诊断和跟踪一些杂质元素,对所涉及的元素谱的了解是非常重要的.例如,铁是其中杂质之一,却频繁用于等离子体诊断.然而,对中等和高荷电离子,由于相对论效应和电子关联是强烈地缠绕在一起的,可靠的理论预言只有通过相对论量子力学才能获得,本文根据相对论多组态 Multi-configuration Dirac-Fock 理论的程序 GRASP<sup>2</sup>(General-purpose Relativistic Atomic Structure Program 2,1992)<sup>[9]</sup>,Grant 的多组态 Dirac-Fock 程序包<sup>[10,11]</sup>,系统计算了类铍离子  $2s^2\ ^1S_0-2s2p\ ^3P_1$  ( $Z = 10-103$ ) 光谱跃迁的能级间隔和跃迁概率,结果表明:对低原子序数  $Z$ ,类铍离子的能级间隔在紫外区域,具有很低的跃迁概率,而对高原子序数  $Z$ ,自旋禁戒跃迁的能级间隔转移到超紫外区域,具有很高的跃迁概率,很容易被探测得到.

## 2 理论方法

计算基于全相对论多组态 Dirac-Fock 方法,理论方法在文献 [12] 中已有详细的描述,这里仅作一扼要介绍.在 Dirac-Fock 多组态理论中, $N$  电子原子或离子体系的 Hamiltonian 量为

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i + \sum_{i < j}^N |\hat{r}_i - \hat{r}_j|^{-1}, \quad (1)$$

$\hat{H}_i$  是第  $i$  个电子的 Dirac-Coulomb Hamiltonian 量,它由下式给出:

$$\hat{H}_i = c\hat{\alpha} \cdot \hat{P}_i + (\hat{\beta} - 1)c^2 + V_{\text{nucl}}(r), \quad (2)$$

式中  $V_{\text{nucl}}(r)$  是核势场, $\hat{\alpha}$  和  $\hat{\beta}$  分别是 Dirac-Fock 矢量和标量矩阵, $\hat{P}_i$  是相对论宇称算符, $c$  是真空中光速.

单电子中心场 Dirac 轨道可表示为

$$\hat{r} | nkm \rangle = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} P_{nk}(r) & \chi_{km}(\hat{r}/r) \\ iQ_{nk}(r) & \chi_{-km}(\hat{r}/r) \end{bmatrix}, \quad (3)$$

这里  $P_{nk}(r)$  和  $Q_{nk}(r)$  分别是大、小分量径向波函数, $\chi_{km}(\hat{r}/r)$  是旋子球谐函数.

为了使用 GRASP<sup>2</sup> 程序,必须选择和组成所谓的组态状态函数 CSF, $N$  电子的组态状态函数  $\Phi(\gamma JM)$  由上述单电子 Dirac 轨道所组成的  $N$  阶 Slater 行列式的线性组合得到,由于组态相互作用,原子态函数  $\Psi(\Gamma JM)$  由具有  $P, J$  和  $M$  值的组态状态函数  $\Phi(\gamma JM)$  线性叠加而成,即

$$\Psi_{\alpha}(\Gamma JM) = \sum_{i=1}^{n_c} c_i(\alpha) \Phi(\gamma_i JM), \quad (4)$$

式中  $c_i$  是组态混合系数, $n_c$  是组态状态函数的数目. $P, J$  和  $M$  分别表示原子的电子态的宇称,总角动量子数和总磁量子数. $\gamma$  和  $\Gamma$  代表除  $P, J$  和  $M$  之外的信息.如轨道占有数,耦合方法和高位数等信息.

考虑到能量函数和径向波函数有关,得到了相对论自洽场方程如下:

$$\begin{aligned} \frac{dP_a}{dr} + \kappa_a \frac{P_a}{r} - \left( 2c - \frac{\epsilon_a}{c} + \frac{Y_a}{cr} \right) Q_a &= -\frac{x_a^{(P)}}{r}, \\ \frac{dQ_a}{dr} - \kappa_a \frac{Q_a}{r} + \left( -\frac{\epsilon_a}{c} + \frac{Y_a}{cr} \right) P_a &= -\frac{\chi_a^{(Q)}}{r}. \end{aligned} \quad (5)$$

径向波函数  $P_{nk}(r)$  和  $Q_{nk}(r)$  可以用自洽场迭代方法通过求解径向 Dirac 方程得到,以 Breit 修正和量子电动力学 QED 修正(包含自能和真空极化能)作

为微扰,可得到能量和波函数的高阶近似.

对具体的平均能级 AL 方法,优化加权对角哈密顿矩阵元得到能量函数

$$E_{\text{opt}} = \sum_i (2J_i + 1) H_{ii} \left( \sum_i (2J_i + 1) \right)^{-1}. \quad (6)$$

根据含时微扰理论,单位时间内( $\tau_0 = h^3/me^4$ )从高能态  $b | \gamma' J' M' \rangle$  到所有低能态  $a | \gamma J \rangle$  的爱因斯坦自发辐射的跃迁概率是

$$A_{b \rightarrow a} = 2\alpha\omega \begin{bmatrix} j_a & L & j_b \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{bmatrix} \left| \overline{M}_{ab} \right|^2, \quad (7)$$

这里  $\alpha = 4\pi^2 e^2/mc$ ,  $\omega$  是能级差  $[L] = 2L + 1$ ,  $(\quad)$  是  $3-j$  符号, $L$  是不可约张量的阶, $\overline{M}_{ab}$  是由 Grant 定义的径向积分<sup>[13]</sup>.

## 3 计算结果与讨论

我们用带有 Breit 和 QED 修正的多组态 Dirac-Fock 平均能级(MCDF-AL)方法系统地计算了高离化类铍离子自旋禁戒  $2s^2 1S_0 - 2s2p^3 P_1$  ( $Z = 10 - 103$ ) 跃迁的能级间隔和跃迁概率.计算中,我们选取四个电子组态为  $1s^2 2s^2$ ,  $1s^2 2s2p$ ,  $1s^2 2p^2$  和  $1s^1 2s^2 2p^1$ , 由这些电子组态耦合出 14 个组态状态波函数 CSF(Configuration state wavefunction),进而构造原子的状态函数 ASF(Atomic state wavefunction),尽管由  $1s^2 2s^2$  和  $1s^2 2p^2$  耦合得到为偶态 CSF,它们与  $1s^2 2s2p$  和  $1s^1 2s^2 2p^1$  耦合得到的奇态 CSF 没有非动力组态相关,但存在动力学组态相关<sup>[14-16]</sup>.表 1 中列出了类铍离子  $2s^2 1S_0 - 2s2p^3 P_1$  光谱跃迁的 Coulomb 相互作用能, Breit 修正和 QED 修正对跃迁能级间隔  $\omega$  贡献和谱线的跃迁概率  $A$  值.由表 1 可以看出, Breit 修正和量子电动力学 QED 修正均随核电荷数的增加而增加,对高  $Z$  元素重原子离子, Breit 修正和量子电动力学 QED 修正对原子离子的总能级间隔的贡献不能被忽略.另外当原子的核电荷数增加到  $Z = 35$  时,类铍离子光谱跃迁从 LS 耦合过渡到  $j-j$  耦合.

表 2 中列出了类铍离子自旋阻禁  $2s^2 1S_0 - 2s2p^3 P_1$  光谱跃迁的能级间隔的理论计算值和一些有关的实验值和参考数据,从表中可以看出对低  $Z$  和中等  $Z$  值( $Z < 25$ ) 元素的原子离子,目前的计算结果与 Cf<sup>[8]</sup>, MBPT<sup>[7]</sup>, FCPC(full core plus correction)<sup>[17]</sup> 和实验一致,而对于高荷电原子离子,结果与 CI,

表 1 类铍离子自旋禁戒  $2s^2S_0-2s2p^3P_1$  ( $Z=10-35$ ) 和  $(2s^2)_0-(2s_{1/2}2p_{-1/2})$  ( $Z=36-103$ ) 跃迁能级间隔  $\omega$  (单位: a. u.) 和跃迁概率  $A$  (单位:  $s^{-1}$ )

$Z$	Coulomb	Breit	QED	$\omega$	$A$
10	0.50841	0.00024	-0.00041	0.50824	$1.1777 \times 10^4$
11	0.57659	0.00038	-0.00060	0.57637	$2.9699 \times 10^4$
12	0.64522	0.00056	-0.00085	0.64494	$6.7155 \times 10^4$
13	0.71450	0.00070	-0.00116	0.71413	$1.3945 \times 10^5$
14	0.78457	0.00107	-0.00153	0.78411	$2.7039 \times 10^5$
15	0.85559	0.00142	-0.00200	0.85501	$4.9550 \times 10^5$
16	0.92770	0.00183	-0.00255	0.92698	$8.6600 \times 10^5$
17	1.00104	0.00233	-0.00321	1.00015	$1.4535 \times 10^6$
18	1.07573	0.00290	-0.00398	1.07466	$2.3549 \times 10^6$
19	1.15189	0.00358	-0.00491	1.15056	$3.6987 \times 10^6$
20	1.22962	0.00436	-0.00595	1.22803	$5.6513 \times 10^6$
21	1.30900	0.00526	-0.00713	1.30713	$8.4214 \times 10^6$
22	1.39011	0.00628	-0.00851	1.38788	$1.2264 \times 10^7$
23	1.47300	0.00745	-0.01004	1.47040	$1.7486 \times 10^7$
24	1.55765	0.00877	-0.01180	1.55463	$2.4439 \times 10^7$
25	1.64411	0.01026	-0.01370	1.64066	$3.3526 \times 10^7$
26	1.73235	0.01192	-0.01578	1.72849	$4.5186 \times 10^7$
27	1.82234	0.01377	-0.01816	1.81795	$5.9866 \times 10^7$
28	1.91402	0.01582	-0.02073	1.90911	$7.8044 \times 10^7$
29	2.00731	0.01808	-0.02354	2.00185	$1.0016 \times 10^8$
30	2.10216	0.02056	-0.02668	2.09604	$1.2664 \times 10^8$
31	2.19847	0.02326	-0.03009	2.19164	$1.5783 \times 10^8$
32	2.29617	0.02619	-0.33364	2.28873	$1.9407 \times 10^8$
33	2.39519	0.02936	-0.03758	2.38697	$2.3552 \times 10^8$
34	2.49544	0.03278	-0.04199	2.48623	$2.8226 \times 10^8$
35	2.59689	0.03645	-0.04645	2.58688	$3.3450 \times 10^8$
36	2.69945	0.04037	-0.05160	2.68822	$3.9194 \times 10^8$
37	2.80312	0.04455	-0.05695	2.79072	$4.5467 \times 10^8$
38	2.90786	0.04899	-0.06291	2.89394	$5.2233 \times 10^8$
39	3.01368	0.05370	-0.06880	2.99858	$5.9510 \times 10^8$
40	3.12055	0.05869	-0.07583	3.10341	$6.7203 \times 10^8$
41	3.22851	0.06396	-0.08261	3.20986	$7.5375 \times 10^8$
42	3.33755	0.06952	-0.08979	3.31728	$8.3964 \times 10^8$
43	3.44775	0.07536	-0.09741	3.42570	$9.2946 \times 10^8$
44	3.55910	0.08152	-0.10602	3.53460	$1.0225 \times 10^9$
45	3.67171	0.08798	-0.11456	3.64513	$1.1196 \times 10^9$
46	3.78556	0.09476	-0.12446	3.75585	$1.2191 \times 10^9$
47	3.90081	0.10187	-0.13405	3.86863	$1.3227 \times 10^9$
48	4.01736	0.10931	-0.14412	3.98255	$1.4294 \times 10^9$
49	4.13546	0.11711	-0.15549	4.09708	$1.5383 \times 10^9$
50	4.25503	0.12526	-0.16670	4.21360	$1.6510 \times 10^9$
54	4.75027	0.16170	-0.21889	4.69371	$2.1299 \times 10^9$
64	6.13364	0.28409	-0.40075	6.01698	$3.5588 \times 10^9$
74	7.78473	0.46413	-0.67338	7.57548	$5.4267 \times 10^9$
79	8.72881	0.58223	-0.84850	8.46254	$6.5718 \times 10^9$
82	9.33145	0.66404	-0.97775	9.01773	$7.2960 \times 10^9$
92	11.4750	1.0104	-1.4874	10.9981	$9.8280 \times 10^9$
103	13.4125	1.5734	-2.3049	12.6810	$1.0500 \times 10^{10}$

MBPT 和全阶 (all-order)  $S^1$  计算值稍有偏差, 但较 MCDFF<sup>[6]</sup> 的结果要好. 对所有实验数据的离子而言,

理论和实验之间的误差估计大约在 0.3%. 对低  $Z$  离子理论和实验之间的较小差别主要在关联能, 由

于我们的计算结果只包含有限的几个电子组态,所以低  $Z$  元素的结果不如 CI,FCPC 和 all-order 等方法的结果精确,而对高  $Z$  离子,由于结果易受 QED 关联不确定因素的影响,与它们之间的不符主要由不同的模型势所引起,这说明电子之间具有屏蔽效应.不同的模型势引起的量子电动力学关联并不一样,造成的不同的量子电动力学关联修正结果,因而量子电动力学 QED 关联强烈地依赖模型势的选

取. FCPC 方法(这是一种非相对论多组态相互作用方法,其相对论效用以 Breit-Pauli 算符作为一阶微扰)对低  $Z$  元素能够产生很精确的关联能,由于相对论扰动处理,但不能延伸到重离子系统.另一方面,CI 和含二阶关联 MBPT 的结果和中等  $Z$  和高  $Z$  符合得很好,MCDF 结果对  $^1S_0-^3P_1$  跃迁不精确,all-order 方法,看起来似乎很好,直到目前为止仅  $Fe^{22+}$ ,  $Mo^{38+}$  可以获得.

表 2 类铍离子  $2s^2S_0-2s2p^3P_1$  ( $Z = 10-35$ )和  $(2s^2)_0-(2s_{1/2}2p_{-1/2})$  ( $Z = 36-42$ )自旋禁戒跃迁的能级间隔和实验数据及其他理论值的比较(单位:  $cm^{-1}$ )

$Z$	Present	CF <sup>[8]</sup>	MBPT <sup>[7]</sup>	MCDF <sup>[6]</sup>	all-order <sup>[5]</sup>	FCPC <sup>[17]</sup>	Experiment
10	111544	111720	111582			111696	111717(5) <sup>[18]</sup> 111706 <sup>[19]</sup>
11	126495		126521				126612 <sup>[20]</sup>
12	141545		141564				141631 <sup>[21]</sup>
13	156730		156748				156798 <sup>[22]</sup>
14	172088		172104	172453			172144 <sup>[23]</sup>
15	187649	187711	187664				187690 <sup>[24]</sup>
16	203445		203437				203474 <sup>[25]</sup>
17	219504		219486				
18	235856		235834				235860 <sup>[18]</sup>
19	252516		252500				252520 <sup>[26]</sup>
20	269518	269507	269497				269505(15) <sup>[26]</sup>
21	286879		286843				286860 <sup>[24]</sup>
22	304601		304547				304600 <sup>[26]</sup>
23	322711		322620				322600 <sup>[24]</sup>
24	341197		341073				341120 <sup>[27]</sup>
25	360080		359900				359970 <sup>[28]</sup>
26	379357	379185	379102	382591	379118		379140(20) <sup>[29]</sup> 379130 <sup>[30]</sup> 379204 <sup>[31]</sup>
27	398990		398669				398720 <sup>[28]</sup>
28	418998		418591				418708 <sup>[2]</sup> 418603 <sup>[31]</sup>
29	439350		438842				438970 <sup>[32]</sup> 438982 <sup>[2]</sup>
30	460024		459418				459615 <sup>[33]</sup> 459432 <sup>[31]</sup>
31	481005						
32	502313	501535	501449				501605(75) <sup>[34]</sup> 501605 <sup>[2]</sup>
33	523876						
34	545660						544722 <sup>[2]</sup>
35	567753						
36	589991		588584				588755 <sup>[2]</sup> 588770(90) <sup>[35]</sup> 588770 <sup>[36]</sup>
42	728056	725948	725841	745924	725751		725758(158) <sup>[29]</sup>

表 1 同时也给出了类铍离子自旋禁戒  $E1$   $2s^2S_0-2s2p^3P_1$  光谱的自发跃迁概率理论计算值.

从表 1 中可以看出,很有趣的是类铍离子的跃迁概率随原子序数的增加而迅速增加.一般而言,对大

多数中性原子而言,电偶极矩的跃迁概率在范围  $10^7-10^9s^{-1}$ ,禁戒跃迁的概率要小  $10^5$  倍,即为  $10^2-10^4s^{-1}$ ,只有在一些特殊的情况下才能观测到.然而,对高原子序数的高荷电离子情形则有所不同,目前的计算表明,对类铍离子自旋禁戒跃迁,当原子序数从 10—103 变化,跃迁概率从  $1.1777 \times 10^4$  到  $1.0500 \times 10^{10}s^{-1}$ ,增加至少  $-10^6$ ,这里  $1 \times 10^{10}$  值和电偶极 E1 跃迁概率相当,因此,在 ICF 和 MCF 高温激光等离子体中,高原子序数的高荷电离子  $2s^21S_0-2s2p^3P_1$  自旋阻禁跃迁谱线将相当强烈.一般以(7)式为基础,高原子系数的高荷电离子的跃迁概率和径向积分  $|\overline{M}_{ab}|^2$  有关,也和跃迁能级间隔  $\omega$  有关.目前的工作表明,能级  $\omega$  与原子序数  $Z$  的关系为

$$\log(\omega/Z^2) = -2.14634 + 0.66248(\log Z) - 1.10379(\log Z)^2 + 0.29218(\log Z)^3.$$

因此,  $A$  值部分原因是由于  $\omega$ .

另外,计算的类铍  $2s^21S_0-2s2p^3P_1$  高离化铬离子、锰离子和铁离子,其跃迁概率的  $A$  值分别为  $2.44 \times 10^7$ ,  $3.35 \times 10^7$  和  $4.52 \times 10^7s^{-1}$  和最近的实验参考数据值分别为  $2.6 \times 10^{27}$ ,  $3.7 \times 10^{28}$  和  $4.8 \times 10^{30}s^{-1}$  基本一致,其误差不到 10%.

## 4 结 论

我们用多组态 Dirac-Fock 平均能级(MCDF-AL)方法计算了类铍离子自旋禁戒跃迁  $2s^21S_0-2s2p^3P_1$  ( $Z=10-103$ ) 光谱跃迁的能级间隔和跃迁概率.结果表明,高原子序数的高荷电离子的自旋禁戒跃迁的跃迁概率随原子序数的增加而迅速增加,甚至和中性原子的电偶极 E1 跃迁概率相当,因此,在 ICF 和 MCF 高温激光等离子体中,自旋禁戒跃迁概率过程不容被忽视.

最后,我们希望给出的类铍高离化原子离子谱线的能级间隔和跃迁概率这项工作将有助于实验物理学家在托克马克装置中对仍未观察到的类铍离子的激光等离子体诊断领域谱线的辨认和跃迁概率的测量研究,同时并为这方面提供深入的多体原子结构理论和实验工作的推动.

- [ 5 ] E. Lindroth, J. Hvarfner, *Phys. Rev.*, **A45**(1992) 2771.
- [ 6 ] A. Ynnerman, C. Froese Fischer, *Phys. Rev.*, **A51**(1995), 2020.
- [ 7 ] M. S. Safronova, W. R. Johnson, U. I. Safronova. *Phys. Rev.*, **A53**(1996) A036.
- [ 8 ] M. H. Chen, K. T. Cheng, *Phys. Rev.*, **A55**(1997) 166.
- [ 9 ] I. P. Grant, C. F. Fisher, GRASP2 Version 1992 (Private Communication).
- [ 10 ] I. P. Grant, B. J. Mckerzie, P. H. Norrington, D. F. Mayers, N. C. Pyper, *Comput. Phys. Commun.*, **21**(1980) 207.
- [ 11 ] B. J. Mckenzie, I. P. Grant, P. H. Norrington, *Comput. Phys. Commun.*, **21**(1980) 233.
- [ 12 ] K. G. Dyall, I. P. Grant, C. T. Johnson, F. A. Parpia, E. P. Plummer, *Comput. Phys. Commun.*, **55**(1989) A25.
- [ 13 ] I. P. Grant, *J. Phys.*, **B7**(1974) 1458.
- [ 14 ] Zheng-he Zhu, *Chinese Journal of Atomic and Molecular Physics*, **13**(1996) 119 (in Chinese) [朱正和,原子与分子物理学报, **13**(1996) 119].
- [ 15 ] Z. H. Zhu Invited report for the first East Asian International Seminar on AM Physics, 1992 p. 89.
- [ 16 ] Zheng-he Zhu, *Chinese Journal of Atomic and Molecular Physics*, **1**(1984) 74 (in Chinese) [朱正和,原子与分子物理学报, **1**(1984) 74].
- [ 17 ] X. W. Zhu, K. T. Chung, *Phys. Rev.*, **A50**(1994) 3818.
- [ 18 ] B. Edlen, *Phys. Scr.*, **28**(1983) 51.
- [ 19 ] S. Baskin, J. O. Stoner, Jr., Atomic Energy Level and Grotrian Diagrams II (Elsevier, New York, 1975).
- [ 20 ] W. C. Martin, R. Zalubas, Musgrove, *J. Phys. Chem. Ref. Data.*, **10**(1981) 153.
- [ 21 ] W. C. Martin, R. Zalubas, Musgrove, *J. Phys. Chem. Ref. Data.*, **9**(1981) 1.
- [ 22 ] W. C. Martin, R. Zalubas, and Musgrove, *J. Phys. Chem. Ref. Data.*, **8**(1979) 817.
- [ 23 ] W. C. Martin, R. Zalubas., *J. Phys. Chem. Ref. Data.*, **12**(1983) 323.
- [ 24 ] W. C. Martin, R. Zalubas, Musgrove, *J. Phys. Chem. Ref. Data.*, **14**(1985) 751.
- [ 25 ] V. Kaufman, W. C. Martin., *J. Phys. Chem. Ref. Data.*, **22**(1993) 279.
- [ 26 ] J. Sugar, C. Corliss, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **14**(1985), Suppl. 2.
- [ 27 ] T. Shirai, Y. Nakai, T. Nakagaki, *J. Phys. Chem. Ref. Data.*, **22**(1993) 1279.
- [ 28 ] T. Shirai, T. Nakagaki, *J. Phys. Chem. Ref. Data.*, **23**(1994) 179.
- [ 29 ] B. Denne, G. Magyar, *J. Jacquinet*, *Phys. Rev.*, **A40**(1989) 3702.
- [ 30 ] T. Shirai, Y. Funatake, *J. Phys. Chem. Ref. Data.*, **19**(1990) 127.
- [ 31 ] A. Wouters, J. L. Schwob, S. Suckewer., *J. Opt. Soc. Am.*, **B5**(1988) 1520.
- [ 1 ] I. Martinson, *Rep. Prog. Phys.*, **52**(1989) 157.
- [ 2 ] B. Denne, Hinnov, *Physica Scripta.*, **35**(1987) 818.
- [ 3 ] J. H. Dave et al, *J. Opt. Soc. Am.*, **B4**(1987) 635.
- [ 4 ] H. S. Kwong et al, *Astrophys. J.*, **411**(1993) 431.

- [ 32 ] J. Sugar , A. Musgrove , *J. Phys. Chem. Ref. Data.* , **19** ( 1990 ) ,527. ( 1993 ) ,1213.
- [ 33 ] J. Sugar , A. Musgrove , *J. Phys. Chem. Ref. Data.* , **24** ( 1995 ) ,1803. [ 35 ] B. Denne , E. Hinnov , *Phys. Rev.* , **A40**( 1989 ) ,1488.
- [ 34 ] J. Sugar , J. Musgrove , *J. Phys. Chem. Ref. Data.* , **22** ( 1995 ) ,1577. [ 36 ] T. Shirai , K. Okazaki , J. Sugar , *J. Phys. Chem. Ref. Data.* , **24**( 1995 ) ,1577.

## SPIN-FORBIDDEN TRANSITIONS FOR BE-LIKE IONS ( $Z = 10—103$ )

YI YOU-GEN<sup>1,2)</sup> WANG RONG<sup>2)</sup> LI XIANG-DONG<sup>2)</sup> WANG HONG-YAN<sup>2)</sup> ZHU ZHENG-HE<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup>*Department of Physics , Xiangtan Normal College , Xiangtan 411201 , China )*

<sup>2)</sup>*Institute of Atomic and Molecular Physics , Sichuan University , Chengdu 610065 , China )*

( Received 30 January 2000 ; revised manuscript received 21 March 2000 )

### ABSTRACT

A fully relativistic multiconfiguration Dirac-Fock method with Breit and QED corrections is used to calculate the spin-forbidden  $2s^2 1S_0—2s2p^3 P_1$  (  $Z = 10—103$  ) transition energy level separations and transition probabilities for the Be-like ions. The results are in good agreements with recent experimental data and other theoretical values. The results show that the spin-forbidden transition probabilities are in correspondence with these of E1 transitions and cannot be ignored in the laser plasma of high temperature in ICF and MCF fusions.

**Keywords** : highly stripped ion , transition probability

**PACC** : 3130 , 3270