

类锂等电子系列高位三激发态 $2p^2np\ 4S^0$ 能量和 到 $1s2pmp\ 4P$ 态的辐射跃迁*

韩利红 苟秉聪 王 菲

(北京理工大学应用物理系, 北京 100081)

(2000 年 1 月 30 日收到, 2000 年 5 月 31 日收到修改稿)

利用多组态相互作用方法及 Rayleigh-Ritz 变分法, 计算了类锂离子 $2p^2np\ 4S^0$ ($n=2-4$) 和 $1s2pmp\ 4P$ ($m=2, 3$) 的能量. 运用截断变分方法得到能量的改进量. 计算了相对论修正、质量极化效应, 从而获得了高精度的能量计算值. 同时还计算了该系统之间的辐射跃迁波长、振子强度和辐射跃迁率. 计算结果与实验符合得很好.

关键词: 三激发态, 类锂离子, 振子强度, 辐射跃迁

PACC: 3150, 3130J

1 引 言

类锂离子三激发态的研究是当前的前沿和热门课题. 由于同步辐射和计算机技术的发展, 它越来越引起国际上实验和理论工作者的极大兴趣和关注. 类锂三激发共振态中三个电子均处于 K 壳层之外, 是一个高激发的四体原子系统, 此课题对考察多激发态原子与分子理论和电子关联效应等具有重要的学术意义. 原子高位三激发态的研究对等离子体理论、天体物理、核聚变、软 X 射线激光等领域均有重要应用价值.

近年来, 此研究领域十分活跃, 不断有新的进展. 在束箔实验中, Bruch 等人^[1, 2]首次观察到 $Li\ 2l^2l'$ 三激发态, 之后 Muller 和 Kiernan 等人^[3, 4]在碰撞实验中也观察到三激发态. Agentoft^[5]观察到 $Li\ 2p2p2p\ 4S^0$ 等. Mannervik^[6]测量了这个态的寿命与 Agentoft 的结果符合得较好. Davis 等人^[10]也报道了这个态的低 Z (核电荷数) 系统能量计算, 但他们仅使用了小尺度的波函数. 1995 年, Kiernan^[7]和 Azuma^[8]分别报道了许多高位三激发态的测量. Journel^[9]首次取得了三激发态能量附近的分光离化截面的测量. 他们分别采用 CIHF (configuration-interaction Hartree-Fock) 方法、MCDF (multiconfigu-

ration Dirac-Fock) 方法和 R 矩阵方法进行计算. 他们的实验彼此符合得很好, 但理论结果差别较大. 这是因为高位三激发态能量的计算是一项十分困难、具有挑战性的工作, 至今高位三激发态的实验和理论数据甚少, 这方面有待进一步开展工作.

本文采用多组态相互作用方法及 Rayleigh-Ritz 变分法, 系统地计算了类锂离子 ($Z=3-20$) $2p^2np\ 4S^0$ ($n=2-4$) 和 $1s2pmp\ 4P$ ($m=2, 3$) 的能量, 运用截断变分方法进一步饱和函数空间得到能量的改进量, 并考虑了相对论修正、质量极化效应等获得了高精度的能量计算值. 同时还计算了该系统之间的辐射跃迁波长、振子强度、辐射跃迁率等. 本文的波长和寿命的计算结果与实验符合得很好.

2 理论与方法

在 LS 耦合表象中, 类锂离子内壳激发共振态非相对论 Hamiltonian 量为

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^3 \left[-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right] + \sum_{\substack{i, j=1 \\ i < j}}^3 \frac{1}{r_{ij}} \quad (1)$$

其径向波函数采用 Slater 型:

$$\Phi_{mnk}(r_1, r_2, r_3) = r_1^m r_2^n r_3^k \exp(-\alpha_i r_1 - \beta_i r_2 - \gamma_i r_3) \quad (2)$$

轨道角动量部分为

* 国家自然科学基金(批准号: 19774012)资助的课题.

$$Y_{l_1 l_2 l_3}^{LM}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \sum_{m_1 m_2 m_3} l_1 m_1 l_2 m_2 l_3 m_3 | L_{12} M_{12} \cdot L_{12} M_{12} l_3 m_3 | LM \cdot \prod_{i=1}^3 Y_{l_i m_i}(\mathbf{r}_i). \quad (3)$$

自旋部分为

$$\chi(1 2 3) = \alpha(1) \cdot \alpha(2) \cdot \alpha(3). \quad (4)$$

于是,本工作中类锂离子三激发态的闭通道波函数取为

$$\psi_b = A \sum C_{mnk}^{l_1 l_2 l_3} \phi_{mnk}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \cdot Y_{l_1 l_2 l_3}^{LM}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \chi(1 2 3), \quad (5)$$

式中 A 为反对称化算符,非相对论能量 E_b 由 Rayleigh-Ritz 变分法,对非线性参数 $\alpha_i, \beta_i, \gamma_i$, 以及线性参数 C 变分优化能量极小而得

$$\delta H_0 = \delta \frac{\psi_b | \hat{H}_0 | \psi_b}{\psi_b | \psi_b} = 0. \quad (6)$$

为了获得高精度波函数,我们进一步饱和束缚函数空间,采用截断变分方法得到能量改进量 ΔE_{RV} , 总波函数为

$$\psi(1 2 3) = D_0 \psi_b(1 2 3) + \psi_2(1 2 3), \quad (7)$$

式中

$$\psi_2(1 2 3) = A \sum_{i=1}^l D_i \psi_{\alpha(i)} \chi(i)(1 2 3), \quad (8)$$

波函数 ψ_2 为进一步饱和函数空间的部分,其中非线性参数由截断变分方法优化能量极小得到.总的非相对论能量为 $E_{\text{nonrel}} = E_b + \Delta E_{RV}$.

为进一步获得高精度的能量计算值,还必须考虑相对论修正和质量极化.在 Pauli-Breit 近似下,相对论能量微扰算符包括^[11,12]

$$\hat{H}_{KE} = -\frac{1}{8C^2} \sum_{i=1}^3 P_i^4 \quad (\text{动能修正项}), \quad (9)$$

$$\hat{H}_{DT} = \frac{Z\pi}{2C^2} \sum_{i=1}^3 \delta(r_i) \quad (\text{Darwin 项}), \quad (10)$$

$$\hat{H}_{EECT} = -\frac{\pi}{C^2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^3 \left(1 + \frac{\delta}{3} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j \right) \delta(\hat{r}_{ij}) \quad (\text{电子与电子相互作用项}), \quad (11)$$

$$\hat{H}_{OO} = -\frac{1}{2C^2} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^3 \frac{1}{r_{ij}} \left[\hat{P}_i \cdot \hat{P}_j + \frac{r_{ij}(\hat{r}_{ij} \cdot \hat{P}_i) \cdot \hat{P}_j}{r_{ij}^2} \right] \quad (\text{轨道与轨道相互作用项}). \quad (12)$$

质量极化算符为

$$\hat{H}_{MP} = -\frac{1}{M} \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^3 \nabla_i \cdot \nabla_j, \quad (13)$$

式中 M 为核质量,常数 $C = 137.0360$,除质量极化计算到无穷级外,其他的相对论微扰项计算到一级.于是相对论和质量极化修正能量为

$$\Delta E_{REL} = \Psi_b | \hat{H}_{KE} + \hat{H}_{DT} + \hat{H}_{EECT} + \hat{H}_{OO} + \hat{H}_{MP} | \Psi_b, \quad (14)$$

则共振态的总能量可描述为

$$E_{\text{total}} = E_b + \Delta E_{RV} + \Delta E_{REL}. \quad (15)$$

在辐射跃迁计算中,运用振子强度的三种规范:

$$\text{长度规范: } \gamma' L' \parallel \sum_i r_i \parallel \gamma L;$$

$$\text{速度规范: } (E' - E)^{-1} \gamma' L' \parallel \sum_i \nabla_i \parallel \gamma L;$$

$$\text{加速度规范: } (E' - E)^{-2} \gamma' L' \parallel \sum_i \nabla_i V \parallel \gamma L. \quad (16)$$

通过对三种规范的振子强度计算结果的一致性程度的比较,可判定出波函数描述三激发态的精确程度.

3 结果与讨论

本工作采用多组态相互作用方法及 Rayleigh-Ritz 变分法给出了锂原子的 $2p^2 n p^4 S$ ($n = 2-4$) 和 $1s 2p m p^4 P$ ($m = 2, 3$) 态以及其他类锂等电子系列 ($Z = 4-20$) 的 $2p^3 4S^o$ 和 $1s 2p^2 4P$ 态非相对论能量值,计算结果列于表 1. 波函数采用 Slater 型基函数,含有线性参数数目从 384 到 673,角度自旋分波数从 13 到 20,对应每一个角度,自旋成分有一组不同的非线性参数集,这些参数由变分能量极小得到,从变分波函数 Ψ_b 得到能量 E_b . 进一步通过截断变分方法扩大函数空间,可得到能量改进量 ΔE_{RV} ,改进范围为 $-1.6 - 15.3 \mu a. u.$

为进一步改进能量值,还计算了质量极化及相对论修正效应.相对论微扰算符包括 P^4 项、Darwin 项、电子与电子相互作用项和轨道与轨道相互作用项.除质量极化计算到无穷级外,其他各项均采用一级微扰方法计算,计算该系统的相对论能量值列于表 2. 从表 2 可以看出,本文的结果均比其他文献结果更低更好,例如,对于锂的三激发 $2p^3 4S^o$ 态,本文的计算结果为 $-2103762 \mu a. u.$, 而 Agentoft 等人^[5]的计算结果为 $-2103465 \mu a. u.$, Davis 等人^[15]的计算结果为 $-2103684 \mu a. u.$, 分别改进了 297 和 78 $\mu a. u.$; 对于 Ne^{7+} 的 $1s 2p^2 4P$ 态,本文的计算结果为 $-69240309 \mu a. u.$, 而 Safronova 等人^[14]的计算结果

表 1 锂三激发态 $2p^2np^4S^o$ ($n=2-4$) 和 $1s2pmp^4P$ 态 ($m=2,3$) 和类锂等电子系列离子 $2p^3^4S^o$ 和 $1s2p^2^4P$ 态的非相对论能量 ($\mu a. u.$) (N_l 为波函数角度分波个数, N 为线性参数个数)

Z	共振态	N_l	N	E_b	ΔE_{RV}	E_{nonrel}
3	$1s2p^2^4P^e$	20	673	-5245395.2	-2.2	-5245397.4
	$1s2p3p^4P^e$	16	530	-5096797.4	-13.9	-5096811.3
	$2p2p2p^4S^o$	17	570	-2103665.6	-1.6	-2103667.2
	$2p2p3p^4S^o$	14	399	-1873669.7	-12.3	-1873682.0
	$2p2p4p^4S^o$	15	498	-1835706.0	-6.8	-1835712.8
4	$1s2p^2^4P^e$	20	613	-9870865.8	-14.8	-9870880.6
	$2p2p2p^4S^o$	15	486	-4236420.1	-2.7	-4236422.8
6	$1s2p^2^4P^e$	19	569	-23631774.1	-8.4	-23631782.5
	$2p2p2p^4S^o$	14	502	-10752234.8	-8.3	-10752243.1
8	$1s2p^2^4P^e$	17	598	-43397055.6	-5.3	-43397060.9
	$2p2p2p^4S^o$	15	471	-20268031.9	-2.3	-20268034.2
10	$1s2p^2^4P^e$	17	530	-69163913.9	-6.4	-69163920.3
	$2p2p2p^4S^o$	15	499	-32783759.4	-2.8	-32783762.2
12	$1s2p^2^4P^e$	15	527	-100931536.4	-5.2	-100931541.6
	$2p2p2p^4S^o$	15	456	-48299466.4	-1.9	-48299468.3
14	$1s2p^2^4P^e$	18	571	-138699537.7	-10.5	-138699548.2
	$2p2p2p^4S^o$	12	384	-66815147.2	-2.1	-66815149.3
16	$1s2p^2^4P^e$	16	566	-182467781.9	-11.0	-182467792.9
	$2p2p2p^4S^o$	15	489	-88330826.2	-3.3	-88330829.5
18	$1s2p^2^4P^e$	18	664	-232236235.8	-15.3	-232236251.1
	$2p2p2p^4S^o$	13	486	-112846472.7	-2.8	-112846475.5
20	$1s2p^2^4P^e$	19	600	-288004568.3	-7.1	-288004575.4
	$2p2p2p^4S^o$	13	431	-140362133.2	-4.8	-140362138.0

为 $-69228445 \mu a. u.$, Davis 等人^[15]的计算结果为 $-69240169 \mu a. u.$, 分别改进了 11864 和 $140 \mu a. u.$. 类锂等电子系列三激发 $2p^3^4S^o$ 态的质量极化效应 H_{mp} 随 Z 的变化曲线示于图 1. 从图 1 可以看出, 质量极化效应 H_{mp} 从 $Z=3$ 的 $15.3 \mu a. u.$ 变化到 $Z=20$ 的 $28.2 \mu a. u.$, 随 Z 的增加曲线变得更光滑, 同时图 1 也显示, 从 $Z=3-8$, 曲线光滑而且很陡, 当 Z 大于 8 时, 曲线变得平缓. 类锂等电子系列三激发 $2p^3^4S^o$ 态和内壳激发 $1s2p^2^4P$ 态的相对论修正值 H_{rel} 随 Z 的变化曲线示于图 2. 图 2 显示, 三激发 $2p^3^4S^o$ 态的相对论效应比内壳激发 $1s2p^2^4P$ 态更小些, 这是因为后者有一个 $1s$ 电子的缘故. 相对论修正值 H_{rel} 随核电荷 Z 的增加而光滑度增加, 对三激发 $2p^3^4S^o$ 态 $Z \geq 10$ 系统, 相对论效应开始十分明显而不可忽视, 而对内壳激发 $1s2p^2^4P$ 态当 $Z \geq 8$ 时, 相对论效应就相当明显.

一般而言, 三激发态的衰变过程(对低 Z 系统)以自电离的 Auger 衰变过程为主, 本工作中计算的类锂等电子系列的三激发 $2p^2mp^4S^o$ ($m \geq 2$) 态处于两电子电离阈 $2p^2^3P$ 之下, 根据 Auger 跃迁的选择定则, 此系统 Auger 跃迁是禁戒的, 因此该系统是研究辐射跃迁的理想系统. 三激发的类锂离子比双激发的类氦离子有更丰富的离化和光谱结构, 考察锂原子的离化结构, Li I $2p^3^4S^o$ 态的一次离化态为 Li II $2p^2^3P$ 二次离化态为 Li III $2p^2P^o$, 如图 3 所示. 对高位三激发态更丰富的阈值结构研究, 有利于分析高位三激发态的光谱结构, 即它可能的辐射和 Auger 跃迁通道. 在锂的离化系统中, Li I ($1s2p^2^4P \rightarrow 2p^3^4S^o$), Li II ($1s2p^3P^o \rightarrow 2p^2^3P$), Li III ($1s^2S \rightarrow 2p^2P^o$) 中, 后面系统中的态均是由前面系统中的态离化一个 $2p$ 电子组成, 多重激发态的 Auger 跃迁通道是与相应的 Rydberg 系列中的阈值对应的. Li I $1s2p^2^4P \rightarrow 2p^3^4S^o$ 的辐射跃迁波长为 14.5018 nm ,

表 2 锂三激发态 $2p^2np\ ^4S$ ($n=2-4$) 和 $1s2pmp\ ^4P$ 态 ($m=2,3$) 和类锂等电子系列离子 $2p^3\ ^4S^\circ$ 和 $1s2p^2\ ^4P$ 态的相对论能量 ($\mu\text{a. u.}$) (H_{rel} 为相对论修正, 包括 P^4 和 Darwin 项、电子-电子相互作用项和轨道-轨道相互作用项, H_{mp} 为质量极化效应)

Z	共振态	E_{nonrel}	相对论修正值			E_{total}	
			H_{rel}	H_{mp}	本工作	其他文献	
3	$1s2p^2\ ^4P^e$	-5245397.4	-534.7	-27.4	-5245960	-5245308 ^a , -5245841 ^e	
	$1s2p3p\ ^4P^e$	-5096811.3	-537.7	-24.4	-5097373	-5097273 ^e	
	$2p2p2p\ ^4S^\circ$	-2103667.2	-110.4	15.3	-2103762	-2103465 ^b , -2103684 ^e	
	$2p2p3p\ ^4S^\circ$	-1873682.0	-108.3	7.6	-1873783	-1873516 ^e	
	$2p2p4p\ ^4S^\circ$	-1835712.8	-107.9	6.8	-1835814	-1835583 ^e	
4	$1s2p^2\ ^4P^e$	-9870880.6	-1738.1	-60.9	-9872680	-9872539 ^e	
	$2p2p2p\ ^4S^\circ$	-4236422.8	-416.8	18.5	-4236821	-4236578 ^b , -4236732 ^e	
6	$1s2p^2\ ^4P^e$	-23631782.5	-9268.4	-149.0	-23641200	-23641069 ^e	
	$2p2p2p\ ^4S^\circ$	-10752243.1	-2546.9	23.8	-10754766	-10754559 ^b , -10754671 ^e	
8	$1s2p^2\ ^4P^e$	-43397060.9	-30374.7	-232.4	-43427668	-43427473 ^e , -43427550 ^e	
	$2p2p2p\ ^4S^\circ$	-20268034.2	-8867.4	25.4	-20276876	-20276679 ^b , -20276776 ^e	
10	$1s2p^2\ ^4P^e$	-69163920.3	-76071.6	-316.8	-69240309	-69228445 ^d , -69240169 ^e	
	$2p2p2p\ ^4S^\circ$	-32783762.2	-22957.1	26.3	-32806693	-32806601 ^e	
12	$1s2p^2\ ^4P^e$	-100931541.6	-160557.9	-401.7	-101092501	-101077687 ^d	
	$2p2p2p\ ^4S^\circ$	-48299468.3	-49513.6	26.9	-48348955		
14	$1s2p^2\ ^4P^e$	-138699548.2	-301501.2	-487.0	-139001536	-138982984 ^d	
	$2p2p2p\ ^4S^\circ$	-66815149.3	-94352.3	27.4	-66909474		
16	$1s2p^2\ ^4P^e$	-182467792.9	-519727.8	-572.3	-182988093	-182966205 ^d	
	$2p2p2p\ ^4S^\circ$	-88330829.5	-164407.8	27.7	-88495210		
18	$1s2p^2\ ^4P^e$	-232236251.1	-839470.7	-591.9	-233076314	-233052510 ^d	
	$2p2p2p\ ^4S^\circ$	-112846475.5	-267731.7	25.2	-113114182		
20	$1s2p^2\ ^4P^e$	-288004575.4	-1288515.3	-743.1	-289293834	-289272355 ^d	
	$2p2p2p\ ^4S^\circ$	-140362138.0	-413492.5	28.2	-140775602		

注 ^a 为引自文献 [3] ^b 为引自文献 [5] ^c 为引自文献 [15] ^d 为引自文献 [14] ^e 为引自文献 [10]

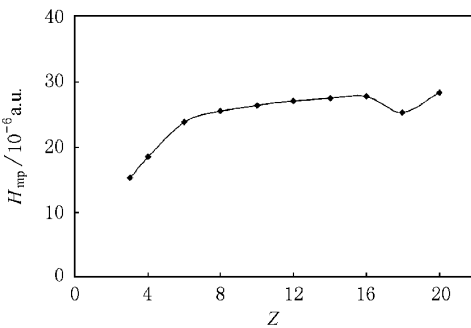


图 1 类锂等电子系列三激发 $2p^3\ ^4S$ 态的质量极化效应 H_{mp} 随核电荷 Z 的变化曲线

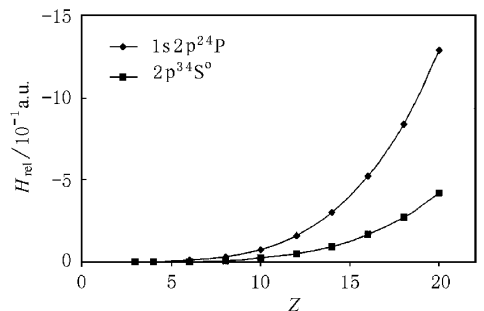


图 2 类锂等电子系列 $2p^3\ ^4S^\circ$ 态和 $1s2p^2\ ^4P^\circ$ 态的相对论修正效应 H_{rel} 随核电荷 Z 的变化曲线

其一次离化 $Li II 1s2p^3P^o \rightarrow 2p^2^3P$ 的辐射跃迁波长为 14.1030 nm, 而其二次离化 $Li III 1s^2S \rightarrow 2p^2P^o$ 的辐射跃迁波长为 13.5041 nm. 锂三激发 $2p^3^4S^o$ 态的离化结构及相关辐射跃迁波长的计算结果列于表 3, 并与 Mannervik 等人^[6]用束箔实验所观测到的谱线结构相比较, 本文的计算结果与实验结果符合得很好. 例如, 对于锂的 $2p^3^4S^o \rightarrow 1s2p^2^4P$ 的跃迁波长与寿命, 本文的计算结果波长 $\lambda = 14.5018$ nm, 寿命 $\tau = 12.569$ ps, 与他们的测量结果 $\lambda = 14.5016 \pm 0.0006$ nm, $\tau = 13.5 \pm 1.5$ ps 符合得非常好, 误差分别为 0.0138% 和 6.8%. 此研究结果显示锂原子三激发态的辐射跃迁波长约在 14.5 nm, 而类氦锂离子

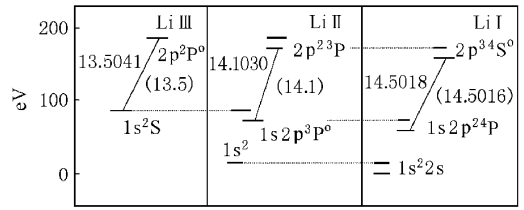


图 3 锂原子离化结构分析及辐射跃迁波长 λ (nm) (括号内数据引自文献^[6]实验结果)

子的双激发态的辐射跃迁波长约在 14.1 nm, 这些计算结果对今后的实验工作是有意义的.

表 4 给出类锂离子 $2p^2np^4S^o \rightarrow 1s2pmp^4P$ 的辐

表 3 锂原子离化结构分析

跃迁	$E_{total}/\mu a.u.$		λ/nm		$\tau/10^{-12}s$	
	初态	末态	本工作	实验值 ^[6]	本工作	实验值 ^[6]
$2p^2P^o \rightarrow 1s^2S$	-1125179	-4499589	13.5041	13.5		
$2p^2^3P \rightarrow 1s2p^3P^o$	-1796627	-5027679	14.1030	14.1	13.391	
$2p^3^4S^o \rightarrow 1s2p^2^4P$	-2103762	-5245960	14.5018	14.5016 ± 0.0006	12.569	13.5 ± 1.5

表 4 类锂等电子系列的振子强度 (f_l, f_v, f_a) 跃迁率 (s^{-1}) 跃迁波长 λ (nm) 及 $2p^3^4S^o$ 态的寿命 ($\tau/10^{-12}s$) (括号内数据为 10 的幂级数, 如 $2.45[-1] = 2.45 \times 10^{-1}$)

Z	跃迁	f_l	f_v	f_a	A_l	A_v	A_a	τ	λ	
									本工作	其他文献
3	$1s2p2p^4P^e \rightarrow 2p2p2p^4S^o$	2.45[-1]	2.45[-1]	2.45[-1]	7.76[10]	7.77[10]	7.77[10]	12.569 13.5 ± 1.5 ^a 12.91 ^c	14.5018	14.5016 ± 0.0006 ^a 14.502 ± 0.005 ^b 14.5009 ^c
	$2p2p3p^4S^o$	2.22[-3]	2.26[-3]	2.26[-3]	8.11[8]	8.27[8]	8.28[8]		13.5127	
	$2p2p4p^4S^o$	2.53[-4]	2.57[-4]	2.57[-4]	9.46[7]	9.61[7]	9.60[7]		13.3623	
	$1s2p3p^4P^e \rightarrow 2p2p2p^4S^o$	6.46[-3]	6.52[-3]	6.60[-3]	1.83[9]	1.85[9]	1.87[9]		15.2215	
	$2p2p3p^4S^o$	2.14[-1]	2.14[-1]	2.14[-1]	7.14[10]	7.16[10]	7.16[10]		14.1356	
	$2p2p4p^4S^o$	4.07[-3]	3.97[-3]	3.98[-3]	1.39[9]	1.35[9]	1.36[9]		13.9710	
4	$1s2p2p^4P^e \rightarrow 2p2p2p^4S^o$	2.96[-1]	2.96[-1]	2.96[-1]	3.02[11]	3.02[11]	3.02[11]	3.306 3.283 ^c	8.0851	8.085 ± 0.003 ^b 8.0850 ^c
	$1s2p2p^4P^e \rightarrow 2p2p2p^4S^o$	3.41[-1]	3.41[-1]	3.41[-1]	1.82[12]	1.82[12]	1.82[12]	0.549 0.5498 ^c	3.5360	3.5359 ^c
8	$1s2p2p^4P^e \rightarrow 2p2p2p^4S^o$	3.61[-1]	3.61[-1]	3.61[-1]	6.21[12]	6.21[12]	6.21[12]	0.161 0.1609 ^c	1.9682	1.9682 ^c
	$1s2p2p^4P^e \rightarrow 2p2p2p^4S^o$	3.73[-1]	3.73[-1]	3.73[-1]	1.58[13]	1.58[13]	1.58[13]		0.063	1.2270
12	$1s2p2p^4P^e \rightarrow 2p2p2p^4S^o$	3.80[-1]	3.80[-1]	3.80[-1]	3.39[13]	3.39[13]	3.39[13]		0.029	0.8639
	$1s2p2p^4P^e \rightarrow 2p2p2p^4S^o$	3.86[-1]	3.86[-1]	3.86[-1]	6.41[13]	6.41[13]	6.41[13]		0.016	0.6320
16	$1s2p2p^4P^e \rightarrow 2p2p2p^4S^o$	3.89[-1]	3.90[-1]	3.90[-1]	1.11[14]	1.11[14]	1.11[14]		0.009	0.4822
	$1s2p2p^4P^e \rightarrow 2p2p2p^4S^o$	3.93[-1]	3.93[-1]	3.93[-1]	1.80[14]	1.80[14]	1.80[14]		0.006	0.3798
20	$1s2p2p^4P^e \rightarrow 2p2p2p^4S^o$	3.95[-1]	3.95[-1]	3.95[-1]	2.76[14]	2.77[14]	2.77[14]		0.004	0.3068

a 为引自文献^[6]实验值, b 为引自文献^[5]实验值, c 为引自文献^[5]理论计算值.

射跃迁波长、振子强度和辐射跃迁率及寿命. 本文所计算的振子强度的三个规范彼此之间符合得很好, 如对 Li 的 $2p^3 4S^o \rightarrow 1s2p^2 4P$, $f_l = 2.450[-1]$, $f_v = 2.450[-1]$, $f_a = 2.450[-1]$. 但同时注意到对于 Li 的 $2p^2 3p 4S^o \rightarrow 1s2p3p 4P$, $f_l = 2.141[-1]$, $f_v = 2.147[-1]$, $f_a = 2.147[-1]$, f_v 和 f_a 之间符合得很好, 而 f_l 与它们则有一定的误差. 这是因为本工作中仅使用了波函数 ψ_b 来计算振子强度, 束缚空间与连续空间相互作用没有考虑, 而对于越高的多激发态, 原子就越松散, 相应的长程的效果就越明显, 但是这些计算值仍显示了合理的令人满意的结果. 将类锂等电子系列 $2p^3 4S^o \rightarrow 1s2p^2 4P$ 之间的跃迁波长随 Z 的变化规律示于图 4. 从图 4 可以看到, 辐射跃迁波长 λ 随 Z 的增加光滑地迅速地变小, 从

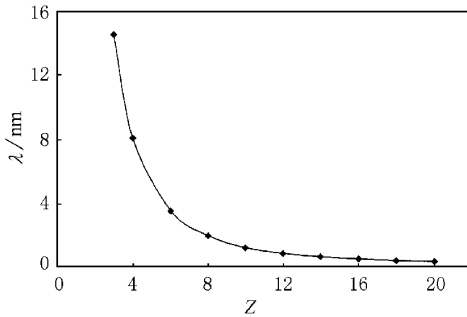


图 4 类锂等电子系列 $2p^3 4S^o \rightarrow 1s2p^2 4P$ 的跃迁波长 λ 随核电荷 Z 的变化曲线

$Z=3$ 的 14.5018 nm 到 $Z=20$ 的 0.3068 nm. 而且曲线也显示, 从 $Z=3-10$, 曲线光滑而且很陡, 当 Z 大于 10 时, 曲线光滑且平缓. 虽然三激发态的结构

复杂, 电子关联效应强, 但仍然可以用外延法得到更高 Z 系统近似的光谱数据, 以期指导实验工作.

- [1] R. Bruch, G. Paul, J. Andra, L. Lipsky, *Phys. Rev.*, **A12** (1975), 1808.
- [2] M. Rodbro, R. Bruch, P. Bisgaard, *J. Phys.*, **B12** (1979), 2413.
- [3] A. Muller, G. Hofmann, B. Welssbecker *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **63** (1989), 758.
- [4] L. M. Kiernan, E. T. Kennedy, J. P. Mosnier, J. T. Costello, B. F. Sonntag, *Phys. Rev. Lett.*, **72** (1994), 2359.
- [5] M. Agentoft, T. Andersen, K. T. Chung, *J. Phys.*, **B17** (1984), L433.
- [6] S. Mannervik, R. T. Short, D. Sonnek, E. Trabert, G. Moller, V. Lodwig, P. H. Heckmann, J. H. Blanke, K. Brand, *Phys. Rev.*, **A39** (1989), 3964.
- [7] L. M. Kiernan, M. K. Lee, B. F. Sonntag, P. Sladeczek, P. Zimmermann, E. T. Kennedy, J. P. Mosnier, J. T. Costello, *J. Phys.*, **B28** (1995), L161.
- [8] Y. Azuma, S. Hasegawa, F. Koike, G. Kutluk, T. Nagata, E. Shigemasa, A. Yagishita, I. A. Sellin, *Phys. Rev. Lett.*, **74** (1995), 3770.
- [9] L. Journel, D. Cubaynes, J. M. Bizau *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **76** (1996), 30.
- [10] B. F. Davis, K. T. Chung, *Phys. Rev.*, **A42** (1990), 5121.
- [11] H. Y. Yang, K. T. Chung, *Phys. Rev.*, **A51** (1995), 3621.
- [12] K. T. Chung, X. W. Zhu, *Phys. Rev.*, **A48** (1993), 1944.
- [13] C. F. Bunge, A. V. Bunge, *Phys. Rev.*, **A17** (1978), 822.
- [14] U. I. Safronova, A. S. Shlyaptseva, *Phys. Scri.*, **54** (1996), 254.
- [15] R. Bruch, N. Stolterfoht, S. Datz, P. D. Miller, P. L. Pepmiller, Y. Yamazaki, H. F. Krause, J. K. Swenson, K. T. Chung, B. F. Davis, *Phys. Rev.*, **A35** (1987), A114.

RADIATIVE TRANSITION OF TRIPLY EXCITED $2p^2np\ ^4S^o$ STATES TO THE $1s2pmp\ ^4P$ STATES IN LITHIUM-LIKE IONS*

HAN LI-HONG GOU BING-CONG WANG FEI

(*Department of Applied Physics, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China*)

(Received 30 January 2000; revised manuscript received 31 May 2000)

ABSTRACT

The Rayleigh-Ritz variational method is used with a multiconfiguration-interaction function and restricted variation method to obtain the energies of $2p^2np\ ^4S^o$ ($n=2-4$) and $1s2pmp\ ^4P$ ($m=2, 3$) in lithium-like ions, including the mass polarization and relativistic corrections. Oscillator strengths, transition rates, lifetimes and wavelengths are also calculated. The results are compared with other theoretical and experiment data in the literature.

Keywords : triply excited state, lithium-like ions, oscillator strength, radiative transition

PACC : 3150, 3130J

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 19774012).