

Be, Mg 和 Ca 原子电四极矩 $E2$ $^1D-^1S$ 跃迁的能级和跃迁概率

易有根¹⁾²⁾ 朱正和²⁾ 唐永建³⁾ 付依备³⁾

¹⁾湘潭师范学院物理系,湘潭 411201)

²⁾四川大学原子分子工程研究所,成都 610065)

³⁾中国工程物理研究院核物理与化学研究所,成都 610003)

(2000 年 5 月 26 日收到,2000 年 7 月 6 日收到修改稿)

利用多组态 Dirac-Fock 广义扩展平均能级 (MCDF-EAL) 方法系统地计算了重要的中性原子 Be, Mg 和 Ca 单光子电四极矩 $E2$ $^1D-^1S$ 光谱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. 此外还从理论上预言了 Ba 和 Mg 单光子电四极矩 $E2$ $^1D-^1S$ 光谱跃迁概率过程, 在库仑规范中, 跃迁概率 $A(\text{Be})=3884.9\text{s}^{-1}$, 跃迁概率 $A(\text{Mg})=2357.2\text{s}^{-1}$ 和跃迁概率 $A(\text{Ca})=48.1\text{s}^{-1}$.

关键词: 电四极矩 $E2$ 光谱跃迁, 能级间隔, 跃迁概率

PACC: 3110, 3130, 3270

1 引 言

近几年来, 群 II A 金属的化学荧光反应已引起人们的广泛重视^[1]. 人们研究这些反应的目的是为了更好地了解这些化学反应中各种各样的电子态产物是如何产生的及激发态在电子能量转移过程中所起的作用, 从而探索在这些化学反应中形成电子跃迁化学激光器的可能性及在化学激光器中的跃迁概率^[2]. 分析这些实验需要低激发态原子的寿命和布居, 其中涉及到低激发态 $n(n-1)d$ 1D 和基态 ns^2 1S_0 之间的单光子电四极矩光谱跃迁 ($E2$) 过程. 由于这些禁戒跃迁的跃迁概率很弱 (相对电偶极矩 $E1$ 要小 10^6 量级), 吸收截面很小, 使得实验观测电四极矩 $E2$ $^1D-^1S$ 的跃迁概率难度变得非常困难. 此外, 由于自旋禁戒偶极允许衰变的存在使得 $^1D-^1S$ 爱因斯坦系数不能由 1D 态寿命直接得到. 据我们所知, 群 II A 原子的电四极矩 $E2$ $^1D-^1S$ 光谱跃迁的实验测量至今仅见 Fukuda 和 Kueda 等人^[3] 报道过, 他们在稀有气体原子中采用吸收光谱方法观测到了 Ca 原子电四极矩 $E2$ $^1D-^1S$ 光谱的跃迁概率 $40 \pm 8\text{s}^{-1}$, 易有根、姚德成等人^[4-6] 在原子束装置中采用飞行时间质谱加光电离的特殊实验方法 (电荷放大机制通常达 10^7 , 能解决电四极矩的跃迁概率

低的问题) 亦在实验上成功地观测到了 Mg 电四极矩 $E2$ $^1D-^1S$ 光谱跃迁谱线. 由于碱土金属电四极矩 $E2$ $^1D-^1S$ 光谱跃迁的跃迁概率很低, 实验观测难度很大, 因此, 从理论上提供群 II A 金属原子电四极矩 $E2$ $^1D-^1S$ 光谱跃迁的跃迁概率等重要跃迁参数就显得很有必要.

早期的研究群 II A 金属原子电四极矩 $E2$ $^1D-^1S$ 光谱跃迁的跃迁概率的理论方法一般是采用多组态自洽场 MCSCF 处理^[7], FOTOS 多电子理论计算^[8] 和扩展的 GTO 和 STO 基集合方法^[9]. 对 Ca 原子电四极矩 $E2$ $^1D-^1S$ 光谱跃迁的跃迁概率, 不同的理论工作者给出不同的理论计算结果, 但大多和实验之间存在一定的偏差. 对 Be 和 Mg 原子的电四极矩 $E2$ $^1D-^1S$ 光谱跃迁的跃迁概率, 却未见有关文献作出相应的报道.

碱土金属元素的电四极矩 $E2$ $^1D-^1S$ 光谱跃迁的理论和实验工作国外开展不多, 国内仅我们报道过, 对电四极矩 $E2$ 跃迁的光谱研究工作目前仍处于探索阶段. 我们采用最新版本 GRASP2^[10], Grant 的多组态 Dirac-Fock 程序包^[11,12] 系统地计算了碱土金属 Be, Mg 和 Ca 的单光子电四极矩 $E2$ $^1D-^1S$ 光谱跃迁能级间隔和跃迁概率. 此外, 还从理论上预言了 Be 和 Mg 的单光子电四极矩 $^1D-^1S$ 光谱跃迁概率过程.

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 [13] 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

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

式中 $V_{\text{nuc}}(r)$ 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 GRASP2 程序, 我们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

$$\Psi_a(JM) = \sum_{i=1}^{n_c} c_i(a) \Phi(\gamma_i JM), \quad (4)$$

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、总角动量量子数和总磁量子数. γ 和 Γ 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为

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

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价近似.

对具体的广义扩展平均能级 (EAL) 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 ($\tau_0 = h^3/mc^4$) 从上能态 $b | \gamma' J' M' \rangle$ 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

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

这里 $\alpha = 4\pi^2 e^2/mc$, ω 是能级差 $[L] = 2L + 1$, $\left(\begin{smallmatrix} j_a & L & j_b \\ [L] & & \end{smallmatrix} \right)$ 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^[14].

对电性多极矩 (electric multipoles)

$$\overline{M}_{ab}(G_L) = \overline{M}_{ab}(0) + G_L \overline{M}_{ab}^L, \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \overline{M}_{ab}(0) &= i^L \left\{ \left(\frac{L}{L+1} \right)^{1/2} [(k_a - k_b) I_{L+1}^+ + (L+1) I_{L+1}^-] - \left(\frac{L+1}{L} \right)^{1/2} [k_a - k_b) I_{L-1}^+ + L I_{L-1}^-] \right\}, \end{aligned} \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \overline{M}_{ab}^L &= i^L \{ (2L+1) J^L + (k_a - k_b) \{ I_{L+1}^+ + I_{L-1}^+ - L I_{L-1}^- + (L+1) I_{L+1}^- \} \}, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} J^L(\omega) &= \int_0^\infty \left(P_{n_a k_a}(r) P_{n_b k_b}(r) + Q_{n_a k_a}(r) Q_{n_b k_b}(r) \right) j_L \left(\frac{\omega r}{c} \right) dr, \\ I_L^\pm(\omega) &= \int_0^\infty \left(P_{n_a k_a}(r) Q_{n_b k_b}(r) \pm Q_{n_a k_a}(r) P_{n_b k_b}(r) \right) j_L \left(\frac{\omega r}{c} \right) dr, \end{aligned} \quad (11)$$

这里 G_L 为规范参数. 取库仑规范 $G_L = 0$, 对电四极矩 E2 光谱跃迁 $L = 2$.

3 组态相互作用规则和组态波函数的选择

对轻原子电子相关能大约是总能量的 1%, 这个误差对总能量还可以接受, 但对计算光谱跃迁, 多重态间隔和精细结构以及化学变化过程, 则会导致严重误差. 此外, 电子相关能误差对激发态、离子、自由基和过渡态计算亦不能接受. 对目前的碱土金属元素原子体系, 双重激发态和相对论电子关联显得十分明显. 因为质量随能量的变化和旋轨相互作用

对双重激发电子尤为突出。

多组态相互作用是说明电子关联效应最有效的方法。在相对论从头计算中要得到很高精度,必须包含足够多的组态,但包含过多的组态势必增加 CPU 运行时间。从原理上讲,只有取无穷多的电子组态才能包含所有的电子关联能量,这显然是不切实际的。问题是如何选择一最优化组态,这组态数目少但又能最有效地考虑电子关联能量。

组态相互作用规则^[15,16]可以根据选择定则和最优化定则划分。然而,就电四极矩 E2 跃迁而言,即使满足电四极选择定则,组态状态函数相互作用(CSFI)矩阵元也可以忽略。因此,在优化规则中,我们有 1)对同样的宇称和同样的 J 值,两个组态之间的能量差别愈小,CSFI 贡献愈大。2)对同样的 LS 耦合,即使能量差别相当大,也会有相当大的 CSFI 贡献。3)从原理上讲,具有同样的电子组态的基和同样的 CSF 基在数量上相当大。4)对轻元素,即使它们具有同样的 J 值,基最好采用 LS 耦合。

考虑到以上的电四极矩 E2 组态相互作用规则,用来构造碱土金属 Be, Mg 和 Ca 的单光子电四极矩跃迁 E2 ¹D—¹S 的电子组态状态函数列于表 1。

表 1 构造 Be, Mg 和 Ca 原子电四极矩跃迁 E2 ¹D—¹S 的电子组态状态函数

Be	1s ² 2s ²	¹ S ₀
	1s ² 2s3d	¹ D ₂ , ³ D ₂
	1s ² 2p ²	³ P ₀ , ¹ S ₀
	1s ² 3s ²	¹ S ₀
	1s ² 3d ²	³ F ₂ , ³ P ₂ , ¹ D ₂
	1s ² 2s3s	¹ S ₀ , ³ S ₁
	1s ² 2p3d	¹ P ₀ , ³ P ₀
	1s ² 3s3d	¹ D ₂ , ³ D ₂
	Mg	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ²
1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ¹ 3d ¹		¹ D ₂ , ³ D ₂
1s ² 2s ² 2p ⁶ 3d ²		³ F _{4, 3, 2} , ³ P _{2, 1, 0} , ¹ G ₃ , ¹ D ₂ , ¹ S ₀
1s ² 2s ² 2p ⁶ 4s ²		¹ S ₀
Ca	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ²	¹ S ₀
	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 4s ¹ 3d ¹	¹ D ₂ , ³ D _{2, 1, 0}
	1s ² 2s ² 2p ⁶ 3s ² 3p ⁶ 5s ²	¹ S ₀

4 计算结果与讨论

对目前的 GRASP2 计算, Dirac-Fock 能级值中

包含了 Breit 修正和 QED 修正,其中 Breit 修正能包括磁衰变能和退化能。QED 修正能包括自能和真空极化能。因此,对一个给定的原子或离子的能级值,总能级可以表述为

$$E = E_{DF} + E_{Breit} + E_{QED} \\ = E_{DF} + E_{Breit} + E_{SE} + E_{VP}, \quad (12)$$

其中 E_{DF} 能量通过求解多组态 Dirac-Fock 方程而获得。

Breit 相互作用能由下式给出:

$$E_{Breit} = \psi_a | \sum_{i < j} \left\{ (-\alpha_i \cdot \alpha_j) \mathcal{Y} r_{ij} \right. \\ \left. + \left(\frac{1}{2} \right) \alpha_i \cdot p_i \mathcal{X} \alpha_j \cdot p_j \right\} r_{ij} | \psi_a. \quad (13)$$

自能对 QED 的关联能贡献是

$$E_{SE} = (Z^4/c^3\pi) \sum_a F_a \left(\frac{Z}{c} \right) q_a/n^3, \quad (14)$$

其中 $F_a(Z/c)$ 表的内插数值, n 是主量子数, q_a 是轨道占有数, $\alpha \equiv [nkm]$ 。真空极化能贡献由下式计算:

$$E_{VP} = \sum_{j, a}^n c_j(\alpha)^2 q_a(j) \int_0^\infty \left\{ P_a^2(r) \right. \\ \left. + Q_a^2(r) \right\} V_{VI}(r) dr, \quad (15)$$

其中 $V_{VI}(r)$ 是真空极化势, c_j 是能级混合系数, n_c 是组态状态函数 CSF 数目。

考虑到上述组态相互作用规则,用带有 Breit 和 QED 修正的多组态 Dirac-Fock 扩展平均能级(MCDF-EAL)方法,通过求解 Dirac-Fock 全相对论量子力学方程,我们系统地计算了碱土金属 Be, Mg 和 Ca 的单光子电四极矩 E2 ¹D—¹S 跃迁的能量间隔、最大跃迁概率。所得结果连同实验能级间隔^[18]列于表 2 和表 3,作为比较同时给出了有关文献的理论计算值。

表 2 Be, Mg 和 Ca 的电四极矩 E2 的跃迁概率 $A(^1D—^1S)$

计算方法	$A(^1D—^1S)$ 爱因斯坦系数 (s^{-1})		
	Be	Mg	Ca
VCf ^[8]			71.0
CVCf ^[8]			37.4
MRCVCf ^[8]			39.6
MCSCf ^[6]			116
FOTOS ^[7]			65.9
MCHI ^[7]			76
GRASP2	3884.9	2357.2	48.1
EXPT ^[3]			40 ± 8

表 3 Be, Mg 和 Ca 的电四极矩 E2 的跃迁能级间隔

计算方法	$^1D-^1S$ 能级间隔 (cm^{-1})		
	Be	Mg	Ca
SCF (STO)			23707
NHF			23536
SCF (GTO)			23716
RHF			24400
CVCX (GTO) ^[8]			20854
CVCX (STO) ^[8]			20839
MRCVCX (GTO) ^[8]			20896
TDCHF ^[17]		43017	
GRASP2	64452	45837	23130
EXPT ^[18]	64429	46404	21850

从表 1、表 2 和表 3 可以看出,对轻元素 Be, Mg 和中等元素 Ca, 电子组态关联效应相当强烈,但相对论效应并不是很明显. 对 Be 原子电四极矩 E2 $^1D-^1S$ 光谱跃迁,我们采用 GRASP2 计算的跃迁能级间隔为 64452cm^{-1} 和实验值 64429cm^{-1} 符合得很好,给出的跃迁概率为 3884.9s^{-1} . 对 Mg 原子电四极矩 E2 $^1D-^1S$ 光谱跃迁,计算的跃迁能级间隔为 45837cm^{-1} 比 Ray 等用 TDCHF^[17] 方法计算的跃迁能级间隔 43017cm^{-1} 更趋向实验值 46404cm^{-1} , 给出的跃迁概率为 2357.2s^{-1} . 对 Ca 原子电四极矩 E2 $^1D-^1S$ 光谱跃迁,不同的理论工作者给出不同的能级间隔和跃迁概率,Charles 等^[8]用 GTO 和 STO 价基集合和全电子处理处理的结果显示出的结果基本一致, VCI 的结果^[8]和以前的 MCSCF 处理的方法^[6]符合得很好,这说明了大多数的价电子关联,然而,考虑了实价关联后的能级间隔和跃迁概率明显趋于实验值, Charles 等^[8]的 CVCI 结果和 MRCVCI 结果给出跃迁概率分别为 37.4s^{-1} 和 39.6s^{-1} , FOTOS 值^[7]为 65.9s^{-1} , 落在 VCI 和 CVCI 的结果的中间,可能他们的 STO 基函数(没有给出)不足以说明全 CVCI 效应. 我们计算的钙 Ca

$^1D-^1S$ 电四极矩的跃迁概率是 48.1s^{-1} , 比 VCI 的结果^[8]和 FOTOS 值^[7]要小,和 CVCI 和 MRCVCI 的结果^[8]基本一致,落在实验测量的误差 $40 \pm 8\text{s}^{-1}$ 范围内. 计算过程中,考虑到组态相互作用规则,通过对组态状态波函数的选取,我们发现电子组态的选择对计算结果影响十分明显,每增加一个电子组态,电四极矩 E2 光谱跃迁的理论波数更加接近于实验值,因而收敛的爱因斯坦系数从理论上更加逼近实验值. 理论计算结果表明碱土金属电四极矩 E2 $^1D-^1S$ 的光谱能量误差 Be 是 0.04% , Mg 是 1.22% , Ca 是 5.86% , 同时表 2 也首次给出了 Be 和 Mg 电四极矩 E2 $^1D-^1S$ 的光谱跃迁概率.

5 结 论

本文利用 GRASP2 程序和电四极矩 E2 的电子组态相互作用规则,通过求解相对论性 Dirac-Fock 方程,系统地计算了碱土金属 Be, Mg 和 Ca 的电四极矩 E2 $^1D-^1S$ 光谱能量间隔和跃迁概率. 计算中考虑到了主要的组态状态函数,电子关联效应和相对论效应,计算结果精确到 10% . 在库仑规范中,我们对 Ca 原子电四极矩 E2 $^1D-^1S$ 光谱的跃迁概率获得了令人满意的结果,理论跃迁概率值 48.1s^{-1} 和实验值 $40 \pm 8\text{s}^{-1}$ 符合得很好,另外,我们给出 Be 电四极矩 E2 $^1D-^1S$ 光谱的最好跃迁概率是 3884.9s^{-1} , Mg 电四极矩 E2 $^1D-^1S$ 光谱的最好跃迁概率是 2357.2s^{-1} . 此外,还从理论上预言了 Be 和 Mg 单光子电四极矩 E2 $^1D-^1S$ 光谱跃迁.

鉴于中性原子和低离化原子离子的禁戒线的跃迁概率过程目前仍处于探索阶段,我们希望目前的理论计算结果和简短的讨论将引起实验物理学家的兴趣和为多体原子结构理论和实验提供有益的指导.

[1] D. J. Benard, W. D. Slafer, *J. Chem. Phys.*, **66** (1997) 1017.
 [2] C. R. Jone, H. P. Broida, *J. Chem. Phys.*, **60** (1974) 4369.
 [3] K. Fukuda, K. Kueda, *J. Phys. Chem.*, **86** (1982) 676.
 [4] Y. G. Yi, D. C. Yao, S. H. Li *et al.*, *Chinese Journal of Atomic and Molecular Physics.*, **14** (1997) 557 (in Chinese)
 [易有根、姚德成、李邵辉等,原子与分子物理学报, **14** (1997) 557]

[5] S. H. Li, Y. G. Yi, D. C. Yao *et al.*, *Chinese Journal of Atomic and Molecular Physics.*, **15** (1998) 487 (in Chinese)
 [李邵辉、易有根、姚德成等,原子与分子物理学报, **15** (1998) 487].
 [6] Y. G. Yi, H. Y. Wang, Z. H. Zhu *et al.*, *Chinese Journal of Atomic and Molecular Physics.*, **16** (1999) 39 (in Chinese)
 [易有根、王红艳、朱正和等,原子与分子物理学报, **16** (1999), 39].

- [7] L. Pastemack , D. M. Silver , P. R. Yarkony , P. J. Olagdigian , *J. Phys.* , **B13** (1980) 2231.
- [8] D. R. Beck , C. A. Nicolaidis , *J. Phys.* , **B16** (1983) 1627.
- [9] W. Charles , C. A. Bauschlicher , *J. Phys.* **B16** (1983) 1427.
- [10] I. P. Grant , C. F. Fisher , GRASP2 Versbr 1992 (Private Communication).
- [11] I. P. Grant , B. J. Mckerzie , P. H. Norrington , D. F. Mayers , N. C. Pyper , *Comput. Phys. Commun.* , **21** (1980) 207.
- [12] B. J. Mckenzie , I. P. Grant , P. H. Norrington , *Comput. Phys. Commun.* **21** (1980) 233.
- [13] North-Holland , Amsterolam , *Comput. Phys. Commun.* , **55** (1989) 456.
- [14] I. P. Grant , *J. Phys.* , **B7** (1974) 1458.
- [15] Z. H. Zhu , J. N. Murrell , *Chinese Journal of Atomic and Molecular Physics.* , **13** (1996) 119 (in Chinese) 朱正和等 , *原子与分子物理学报* **13** (1996) 119]
- [16] Z. H. 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] D. Ray , P. K. Mukherjee , *J. Phys.* , **B22** (1989) 2103.
- [18] C. E. Moore , *Atomic Energy Levels NBS* 1949.

THEORETICAL ELECTRIC QUADRUPOLE ENERGY LEVELS AND TRANSITION PROBABILITIES FOR THE LOWEST ¹D METASTABLE STATE IN Be , Mg AND Ca

YI YOU-GEN¹⁾²⁾ ZHU ZHENG-HE²⁾ TANG YONG-JIAN³⁾ FU YI-BEI³⁾

¹⁾*Department of Physics , Xiangtan Normal College , Xiangtan 411201 , China)*

²⁾*Institute of Atomic and Molecular Physics , Sichuan University , Chengdu 610065 , China)*

³⁾*Southwestern Institute of Nuclear Physics and Chemistry , China Academy of Engineering Physics , Chengdu 610003 , China)*

(Received 26 May 2000 ; revised manuscript received 6 July 2000)

ABSTRACT

The important electron quadrupole ¹D—¹S transition probabilities for Be , Mg and Ca have been computed using a fully relativistic multiconfiguration Dirac-Fock method with Breit and QED corrections. In Coulomb gauge , our computed Einstein coefficient for Ca of 48.1s^{-1} is in good agreement with the recent experimental value of $40 \pm 8\text{s}^{-1}$. Our best Einstein coefficients for Be and Mg are 3884.9s^{-1} and 2357.2s^{-1} , respectively. The existing discrepancy between theory and experiment in Ca is eliminated. There are no previous results for Be and Mg.

Keywords : electron quadrupole E2 transition , energy level separation , transition probability

PACC : 3110 , 3130 , 3270