

类 Ne 等电子系列离子($Z = 11, \dots, 18$) $2p^5 3s-2p^6$ 辐射跃迁的多组态相对论理论计算*

颜录有¹⁾ 董晨钟^{1)†} 马新文²⁾ 袁 萍¹⁾ 颜 君³⁾ 曲一至⁴⁾

¹⁾ 西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070)

²⁾ 兰州重离子加速器国家实验室原子核理论研究中心, 兰州 730000)

³⁾ 北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

⁴⁾ 中国科学院研究生院, 北京 100039)

(2001 年 12 月 17 日收到 2002 年 1 月 20 日收到修改稿)

利用多组态 Dirac-Fock(MCDF)理论方法,系统研究了延迟、相关和相对论效应对类 Ne 等电子系列离子($Z = 11, \dots, 18$)的较低的激发组态 $2p^5 3s$ 和基组态 $2p^6$ 的能级结构及其能级之间辐射跃迁特性的影响. 给出了 $2p^5 3s \ ^1 3P_1^0-2p^6 \ ^1 S_0$ 电偶极($E1$)共振和复合跃迁、 $2p^5 3s \ ^3 P_2^0-2p^6 \ ^1 S_0$ 磁四极($M2$)跃迁和 $2p^5 3s \ ^3 P_0^0-2p^6 \ ^3 P_1^0$ 磁偶极($M1$)跃迁的跃迁能以及激发态 $^1 P_1^0, ^3 P_0^0, ^3 P_1^0, ^3 P_2^0$ 的辐射寿命,所得结果与最新实验观测和其他理论计算进行了比较.

关键词: MCDF 方法, 延迟和相关效应, 跃迁概率

PACC: 3120, 3130, 3270F

1. 引 言

类 Ne 等电子系列离子的跃迁波长、概率以及振子强度等光谱跃迁特性的实验和理论研究一直是人们普遍感兴趣的课题^[1,2]. 利用这些跃迁数据可以确定托克马克等离子体的温度和密度参数,以及太阳或星际空间所含元素的丰度. 如恒星中有关 Ne, Si, S, Ar 等元素丰度的精确数据,对于研究恒星的形成及其发展过程有着重要的物理意义;另外,中高 Z 类 Ne 离子体系的 $2p^5 3s \ ^1 3P_1^0$ 态是碰撞激发产生的 $2p^5 3p-2p^5 3s$ EUV 激光跃迁的低能态^[3-5]. 系统地研究低 Z 类 Ne 离子体系的辐射跃迁特性,有助于人们对中高 Z 类 Ne 离子体系辐射跃迁特性的进一步研究.

类 Ne 等电子系列离子($Z = 11, \dots, 18$)的基组态为 $2p^6$, 可形成 $^1 S_0$ 基态. 其第一激发组态为 $2p^5 3s$, 可形成单重态 $^1 P_1^0$ 和三重态 $^3 P_{0,1,2}$. 在这些态之间可

以发生多种辐射跃迁过程. 例如, $^1 P_1^0-^1 S_0$ 电偶极($E1$)共振跃迁, $^3 P_1^0-^1 S_0$ 复合跃迁, $^3 P_2^0-^1 S_0$ 磁四极($M2$)跃迁以及 $^3 P_0^0-^3 P_1^0$ 磁偶极($M1$)跃迁等. 其中 $^1 3P_1^0-^1 S_0$ 电偶极共振和复合跃迁最强,无论在实验还是理论方面的研究也最多. 1992 年 Westerlind 等人^[6]用束箔光谱技术测量了 S VII 和 Cl VIII 离子 $2p^5 3s \ ^1 P_1^0$ 和 $^3 P_1^0$ 态的寿命. 后来, Curtis 等人^[7]用相同的技术进一步测量了其他一些类 Ne 离子 $2p^5 3s \ ^1 P_1^0$ 和 $^3 P_1^0$ 态的寿命,同时从理论上预言了这些能级的寿命及其沿等电子系列的变化情况. 尽管,目前已有大量的有关类 Ne 等电子系列离子 $2p^5 3s \ ^1 3P_1^0-2p^6 \ ^1 S_0$ 辐射跃迁的能级和跃迁概率方面的研究工作,但不同的实验之间以及实验和理论之间仍然有很大的偏差. 特别是在 Ne I, Na II, S VII 和 Cl VIII 等离子^[3,7]上,这种偏差更为突出;另外,对于 $^3 P_2^0-^1 S_0$ 磁四极以及 $^3 P_0^0-^3 P_1^0$ 磁偶极辐射跃迁,由于其线强比较弱,无论实验测量还是理论计算方面的研究都相对比较匮乏. 因此,对类 Ne 等电子系列离子 $2p^5 3s-2p^6$ 光谱

* 教育部高等学校骨干教师资助计划(批准号:GG-140107361002)、国家自然科学基金(批准号:10074062)、兰州重离子加速器国家实验室原子核理论研究中心基金和西北师范大学科技创新工程项目基金(批准号:WNNU-KJCXGC-214)资助的课题.

† 通讯联系人.

跃迁特性的系统理论研究仍然是非常必要的。

类 Ne 等电子系列离子是一个涉及到具有开的 p 壳层结构的复杂的原子体系,其辐射跃迁特性的精确计算主要的困难在于对相关效应、相对论效应以及由于跃迁辐射光子引起的跃迁初末态电子密度的重排(即延迟效应)的处理。近年来,在多组态 Dirac-Fock(MCDF)方法^[8,9]基础上发展的系统考虑延迟和相关效应的理论方法^[10]已经为从理论上处理具有开的 p, d 和 f 壳层的复杂原子的结构和性质提供了一个难得的机会^[11-14]。本文利用这一方法系统考虑了强延迟和相关效应对跃迁能和概率的影响,给出了类 Ne 等电子系列离子 $2p^5 3s-2p^6$ 电偶极跃迁、磁四极跃迁和磁偶极跃迁的跃迁能以及 $1^3 P_1^0$, $3^3 P_0^0$, $3^3 P_2^0$ 态的辐射寿命,并与以往的理论 and 实验结果进行了比较。

2. 理论计算方法

2.1. 能级的计算

有关多组态 MCDF 理论方法,文献^[8,9]中已有详细的描述,这里仅作扼要的介绍。在多组态 Dirac-Fock 理论中,一个核电荷数为 Z 、具有 N 个电子的原子或离子体系的 Dirac-Coulomb Hamiltonian 量为(原子单位)

$$\hat{H}_{DC} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i + \sum_{i<j}^N |\hat{\tau}_i - \hat{\tau}_j|^{-1}. \quad (1)$$

这里 \hat{H}_i 是第 i 个电子的 Dirac Hamiltonian 量,可表示为

$$\hat{H}_i = c\hat{\alpha} \cdot \hat{p}_i + (\beta - 1)c^2 + V_{mc}(\hat{\tau}_i), \quad (2)$$

其中 $V_{mc}(\hat{\tau}_i)$ 是核势场, $\hat{\alpha}$ 和 β 分别是 Dirac 矢量和标量矩阵, \hat{p}_i 是第 i 个电子的动量算符, c 是真空中光速。

在中心力场近似下单电子的旋轨波函数可表示为

$$\psi_{nlm} = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} P_{nk}(r) \chi_{lm}(\theta, \phi) \\ i Q_{nk}(r) \chi_{-lm}(\theta, \phi) \end{bmatrix}, \quad (3)$$

式中 k 为 Dirac 量子数, $P_{nk}(r)$ 和 $Q_{nk}(r)$ 分别为径向波函数的大小分量, χ_{lm} 为自旋波函数。

N 个电子体系的组态波函数 $|\Gamma_r(PJM)\rangle$ 是所有单电子旋轨波函数组成的 N 阶 Slater 行列式波函

数 $|\Phi_p\rangle$ 的线性组合,即

$$|\Gamma_r(PJM)\rangle = \sum_p B_p |\Phi_p\rangle, \quad (4)$$

在 MCDF 方法中,任一原子态 α 的波函数 $|\Psi_\alpha(PJM)\rangle$ 由具有相同 P, J 和 M 量子数的组态波函数(4)式线性组合而成,即

$$|\Psi_\alpha(PJM)\rangle = \sum_{r=1}^{n_c} C_r(\alpha) |\Gamma_r(PJM)\rangle. \quad (5)$$

式中 n_c 是组态波函数的个数, $C_r(\alpha)$ 为组态混合系数。

将原子态波函数(5)式作用于体系的 Dirac-Coulomb Hamiltonian 量,则可得到相关原子态的能量。作为微扰,进一步考虑其他效应对这些 Hamiltonian 量的修正,如 Breit 修正^[8,15]和主要的量子电动力学 QED 效应^[15,16](即自能和真空极化),我们可以对能量作进一步的修正。

2.2. 跃迁概率的计算

根据 Fermi 黄金定则^[17],单位时间量子体系从激发初态 i 到末态 f 的爱因斯坦自发辐射跃迁概率为

$$A_{fi} = \frac{2\pi}{2j_i + 1} \sum_{M_i} \sum_{M_f} |M_{fi}^{(L)}|^2. \quad (6)$$

其中 j_i 是激发态 i 的总角动量, M_{fi} 是从激发态 i 到较低的 f 态的跃迁矩阵元,可表示为

$$\begin{aligned} M_{fi}^{(L)} &= \langle \Psi_f(P_f J_f M_f) | O^{(L)} | \Psi_i(P_i J_i M_i) \rangle \\ &= \sum_{r,s} C_r(f) C_s(i) \Gamma_r(P_f J_f M_f) | \\ &\quad \times O^{(L)} | \Gamma_s(P_i J_i M_i) \rangle, \end{aligned} \quad (7)$$

式中 $O^{(L)}$ 是辐射电磁场的阶数为 L 的张量算符。

当考虑由于发射光子而引起的辐射跃迁初、末态电子密度的重排(即延迟效应)时,跃迁初、末态的轨道波函数将不再严格正交。若用 $D_{pq}(kl) = \langle \Psi_p | \Psi_q = \det\{d_{pq}(kl)\}$ 来表示与辐射跃迁初、末态相联系的两个行列式波函数的重叠积分(其中 $d_{pq}(kl) =$

$\langle \psi_k | \psi_l, \psi_k$ 和 ψ_l 分别表示一系列与初、末态相联系的单电子的旋轨波函数),则(7)式中的矩阵元可进一步表示为

$$\begin{aligned} &\Gamma_r(P_f J_f M_f) | O^{(L)} | \Gamma_s(P_i J_i M_i) \rangle \\ &= \sum_{p,q} \sum_{k,l} B_p B_{sq} \langle \psi_k || O^{(L)} || \psi_l \rangle D_{pq}(kl), \end{aligned} \quad (8)$$

其中,矩阵元 $\langle \psi_k || O^{(L)} || \psi_l \rangle$ 可通过下式计算:

$$\phi_k \parallel O^{(L)} \parallel \psi_l = \left(\frac{2j_l + 1}{\pi c} \right)^{1/2} (-1)^{j_l - 1/2} \times \begin{pmatrix} j_k & L & j_l \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \bar{M}_{kl}. \quad (9)$$

式中 \bar{M}_{kl} 是径向积分, 对于不同的跃迁类型(如, 电偶极、磁偶极等)有不同的表达式^[18]. 在具体的计算中, 径向积分 \bar{M}_{kl} 可以分别在长度和速度规范下计算并用以检验所用波函数的精确性.

2.3. 延迟效应和相关效应的考虑

类 Ne 等电子系列离子的基组态为闭壳层, 当一个电子被激发变为开壳层时, 延迟效应变得非常明显. 这种效应对能级的计算影响不大, 但对于辐射寿命的计算影响比较大, 有时甚至是数量级的差别. 为了系统考虑延迟效应以及得到更好的辐射跃迁初、末态的波函数, 具体计算中我们首先根据宇称和总角动量(J^P)将跃迁初、末态的能级分为四组, 一组为 $2p^6$ ($J^P = 0^+$), 共一个能级(1S_0); 另一组为 $2p^5 3s$ ($J^P = 1^-$), 共两个能级($^1^3P_1^0$); 其他两组为 $2p^5 3s$ ($J^P = 0^-, 2^-$), 各一个能级($^3P_0^0$ 和 $^3P_2^0$). 然后用 GRASP92^[15] 程序的扩展能级优化模式(EOL)分别独立计算了跃迁初、末态的波函数和能级. 图 1 展示了分别相应于基态 $2p^6 \ ^1S_0$ 的激发态 $2p^5 3s \ ^1^3P_1^0$ 情况下的 $1s \ 2s \ 2p_{1/2}$ 和 $2p_{3/2}$ 次壳层电子轨道的平均半径值沿类 Ne 等电子系列($Z = 11, \dots, 18$)的变化. 从图 1 可看出, 同一离子的第一激发组态 $2p^5 3s$ 中各次壳层的电子轨道平均半径均小于其基组态 $2p^6$ 各次壳层的轨道平均半径, 且随着 n 和 l 的增大, 两组态间的轨道平均半径偏差越来越大. 在类 Ne 等电子系列中, 离子的离化度越低, 激发态和基态各次壳层的轨道平均半径的偏差越明显. 随着离化度的增高, 这种偏差逐渐减小. 因此在涉及到类 Ne 离子从 $2p^5 3s$ 激发态到 $2p^6$ 基态辐射跃迁特性的计算中, 对离化度越低的离子, 延迟效应越重要, 不可忽略, 特别是对中性的 Ne^[19] 和一次电离的 Na 原子. 这也是目前其实验测量和以往理论计算之间仍然有很大偏差的原因之一. 然而, 由于对跃迁初、末态波函数的分开独立计算, 跃迁初、末态的轨道波函数已不再严格的正交. 为了进一步考虑这一效应对跃迁概率的影响, 在辐射跃迁概率的计算中进一步包括了各种重叠积分的贡献^[10].

为了在原子态波函数的展开((5) 式) 中包括更

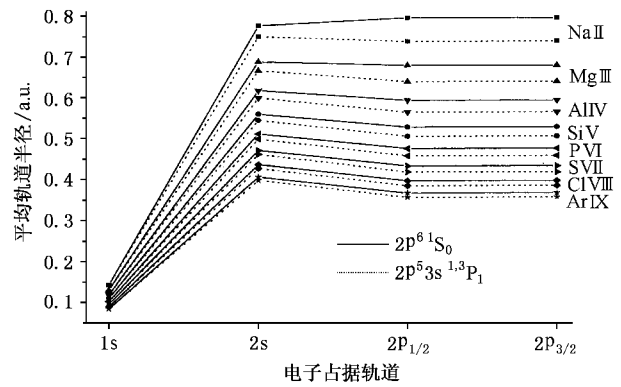


图 1 类 Ne 等电子系列离子($Z = 11, \dots, 18$)在激发态 $1^3P_1^0$ 和基态 1S_0 情况下各次壳层轨道的平均半径(原子单位) (实线表示基态 $2p^6 \ ^1S_0$ 对应的各次壳层的轨道平均半径; 虚线则对应于激发态 $2p^5 3s \ ^1^3P_1^0$ 情况下各次壳层的轨道平均半径)

多的组态波函数, 即更有效地考虑电子相关效应, 活动空间方法^[12, 15] 被用来系统地产生了各种各样的组态波函数列表. 具体来说, 就是将组态 $1s^2 2p^6$ 和 $1s^2 2p^5 3s$ 中两个 $1s$ 电子固定, 分别考虑其他电子由轨道占据的 $2s \ 2p_{1/2} \ 2p_{3/2}$ 和 $3s$ 壳层向 $3s \ 3p_{1/2} \ 3p_{3/2} \ 3d_{3/2} \ 3d_{5/2}$ 壳层的单激发(Single), 双激发(Double)以及三重激发(Triple)以及向 $4l$ 壳层的单激发、双激发形成的所有组态. 表 1 列出了几种不同相关近似下的组态波函数的个数. 其中, SC 表示所有电子不被激发, 即单组态近似; 3SDT 表示考虑从 $2l$ 和 $3s$ 壳层激发一个、两个以及三个电子到 $3l$ 壳层形成的所有组态的相关近似; 而 3SDT4SD 则表示在 3SDT 相关近似的基础上进一步考虑到 $4l$ 壳层上的单和双激发的贡献. 当然, 还可以列出许多到更高外壳层上的激发形成的相关组态波函数的数目, 但就像在下节将会看到的, 包括这些重要的相关效应后, 我们已经得到了较好的结果.

3. 结果和讨论

3.1. 辐射跃迁能

类 Ne 等电子系列离子能级计算的精确度在一定程度上影响着辐射跃迁概率、振子强度以及辐射寿命的精确计算. 为了得到较好的辐射跃迁能级和寿命, 计算中在考虑延迟效应(将能级按宇称和总角动量分开进行独立计算)的基础上, 进一步系统地考虑了组态相关效应对能级和辐射寿命的影响. 结果

表 1 几种不同相关近似下相关组态波函数的个数

参考组态	J^p	相关近似		
		SC	3SDT	3SDT4SD
$2s^2 2p^6 + 2s^2 2p^4 3p^2$	0^+	10	2390	7539
$2s^2 2p^5 3s$	0^-	1	766	1487
	1^-	2	2006	3916
	2^-	1	2521	4977

表明,在单组态(SC)相关近似下,所得结果非常粗略,与实验相比误差很大.当考虑到轨道占据的三个电子被激发到3l壳层(3SDT)所形成的组态波函数对跃迁能的贡献时,理论计算和实验的误差比单组态近似下减少了约2000—3000 cm^{-1} ,但与实验相比

其偏差还是比较大(约2%).只有在3SDT相关的基础上进一步考虑轨道占据的电子被激发到4l壳层(3SDT4SD)形成的组态波函数的贡献时,理论计算才与实验值符合得比较好.表2给出了在3SDT4SD相关近似下计算所得类Ne等电子系列离子 $2p^5 3s$ 各激发态的激发能,作为比较,我们也列出了实验测量的结果.从表2可以看出,理论计算与实验的偏差均小于0.5%.这说明无论是来自3SDT的相关还是4SD的相关,在处理类Ne等电子系列离子辐射跃迁的过程中都需要系统考虑.另外,在对一些低Z离子能级的计算中,除了考虑轨道占据的电子被激发到3l和4l轨道形成的组态相关之外,甚至还需要系统考虑来自3SDT5SD的相关效应^[14].

表 2 在3SDT4SD相关近似下计算所得 $2p^5 3s$ 各激发态 $^1P_1^0$, $^3P_0^0$, $^3P_1^0$ 和 $^3P_2^0$ 的激发能及与实验结果的比较(单位: cm^{-1})

	$^1P_1^0$		$^3P_0^0$		$^3P_1^0$		$^3P_2^0$	
	理论	实验 ^[20]	理论	实验 ^[20]	理论	实验 ^[20]	理论	实验 ^[20]
Na II	268559.25	268762.96	266081.61	266281.62	265553.55	265689.62	264649.31	264924.32
Mg III	431394.07	431530.0	427690.4	427852.1	426755.69	426868.1	425371.02	425640.3
Al IV	624674.62	624717.5	619958.6	620060.1	618393.04	618473.9	616394.06	616644.2
Si V	848593.17	848511.2	843055.8	843070.6	840556.23	840590.0	837803.14	838017.4
P VI	1103277.7	1103116.1	1097059.3	1097062.1	1093192.8	1093290.0	1089580.7	1089844.6
S VII	1388808.9	1388339	1382061.5	1381805	1376314.4	1376207	1371714.9	1371784
Cl VIII	1705303.8	1704360	1698123.8		1689823.8	1689450	1684153.9	
Ar IX	2052884.7	2051728	2046024.3	2044488	2033634.8	2033118	2026854.4	2026545

注:表中所列的激发能是相对于基态 $2p^6 \ ^1S_0$ 的能级而计算的.

3.2. 类Ne离子 $^3P_1^0$ 态的寿命

类Ne等电子系列离子 $2p^5 3s \ ^3P_1^0$ 态寿命的精确数据,不仅在天体物理、激光等离子体等相关领域的光谱诊断中是有用的,而且对于类Ne离子x射线激光的进一步深入研究也是重要的^[3,7].这两个态的寿命分别由它们到基态的电偶极共振跃迁($^1P_1^0 \rightarrow ^1S_0$)和复合跃迁($^3P_1^0 \rightarrow ^1S_0$)唯一地决定.表3列出了在系统地考虑延迟和相关效应的情况下计算所得类Ne等电子系列离子($Z = 11, \dots, 18$) $2p^5 3s \ ^3P_1^0$ 态的寿命及其他的一些理论和实验结果.为了检验结果的一致性,我们分别给出了长度(L)和速度(V)两种不同规范下的计算结果.从表3可以看出,两种规范下寿命的一致性都非常好,其相对误差均小于1.0%.另外,比较我们的计算与最新的实验,不难发现,不管是 $^1P_1^0$ 还是 $^3P_1^0$ 态的寿命,目前的计算与Träbert^[3]以及Curtis等人^[7]用束箔光谱技术测量的

结果符合得都比较好.特别是对于一些不同的实验测量以及实验和理论结果之间偏差比较大的离子.比如Na II离子,我们对 $^1P_1^0$ 态的计算,在两种规范下的结果分别为326.62(L)ps和323.83(V)ps,对 $^3P_1^0$ 态的结果分别为5732.54(L)和5677.46(V)ps.而实验上Träbert^[3]对单重态的测量结果为 $320 + 50 - 40$ ps, Curtis等人^[7]对单重态和三重态的测量分别为 350 ± 80 ps和 6000 ± 1200 ps,理论与实验符合得比较好.与其他理论相比较,对于 $^1P_1^0$ 态,我们的结果与NIST^[20]给出的结果非常接近;而对于 $^3P_1^0$ 态,我们的结果与Hibbert等人^[21]用CI方法计算的结果也比较接近.但是,由于目前计算中我们对组态相互作用的考虑更系统,对相关组态波函数的考虑更多,也更全面(参见表1),因此Hibbert等人的结果普遍要比我们目前的计算稍低一些.沿着等电子系列,类Ne离子 $^1P_1^0$ 与 $^3P_1^0$ 态的辐射寿命基本相差一个数量级,且随着核电荷数的增加,辐射寿命的数值逐渐减小,相

表 3 类 Ne 离子 $2p^5 3s^1 P_1^0$ 和 $^3 P_1^0$ 态的寿命及其与以往理论和实验的比较 (单位: $10^{-12} s$)

	$^1 P_1^0$			$^3 P_1^0$		
	目前计算	实 验	其他计算	目前计算	实 验	其他计算
Na II	326.6 \mathcal{L} (L)	$320 + 50 - 40^{[3]}$	$294^{[20]}$	5732.5 \mathcal{L} (L)		$6666^{[20]}$
	323.8 \mathcal{V} (V)	$350 \pm 80^{[7]}$ $580 \pm 60^{[25]}$	$286^{[21]}$	5677.4 \mathcal{V} (V)	$6000 \pm 1200^{[7]}$ $10600 \pm 500^{[25]}$	$6130^{[21]}$
Mg III	119.1 \mathcal{L} (L)	$110 + 15 - 10^{[3]}$	$115^{[20]}$	1861.8 \mathcal{L} (L)		$2222^{[20]}$
	118.7 \mathcal{V} (V)	$100 \pm 15^{[26]}$	$102^{[21]}$	1852.4 \mathcal{V} (V)	$1900 \pm 190^{[26]}$	$1870^{[21]}$
Al IV	57.3 \mathcal{L} (L)	$46 \pm 5^{[3]}$	$59^{[20]}$	665.3 \mathcal{L} (L)		$769^{[20]}$
	57.3 \mathcal{V} (V)	$46 + 10 - 5^{[7]}$	$48.5^{[21]}$ $53^{[24]}$	663.6 \mathcal{V} (V)		$640^{[21]}$ $721^{[24]}$
Si V	32.3 \mathcal{L} (L)	$28 \pm 3^{[3]}$	$33^{[20]}$	264.9 \mathcal{L} (L)		$303^{[20]}$
	32.4 \mathcal{V} (V)	$28 + 8 - 4^{[7]}$	$27.1^{[21]}$ $38.3^{[22]}$ $71.4^{[23]}$	264.6 \mathcal{V} (V)		$244^{[21]}$ $354^{[22]}$ $629^{[23]}$
P VI	20.2 \mathcal{L} (L)	$18 \pm 2^{[3]}$	$20.4^{[20]}$	118.0 \mathcal{L} (L)	$105 \pm 7^{[3]}$	$135^{[20]}$
	20.2 \mathcal{V} (V)	$18 + 7 - 2^{[7]}$	$16.9^{[21]}$ $24.5^{[22]}$	117.9 \mathcal{V} (V)	$130 \pm 30^{[7]}$	$106^{[21]}$ $157^{[22]}$
S VII	13.8 \mathcal{L} (L)		$11.6^{[20]}$	57.6 \mathcal{L} (L)	$52 \pm 5^{[3]}$	$66.7^{[20]}$
	13.8 \mathcal{V} (V)	$17.4 \pm 0.5^{[6]}$ $12 \pm 3^{[7]}$	$11.4^{[21]}$ $17.0^{[22]}$ $26.6^{[23]}$	57.6 \mathcal{V} (V)	$52 \pm 2^{[6]}$ $49 \pm 13^{[27]}$	$50.3^{[21]}$ $76.6^{[22]}$ $125^{[23]}$
Cl VIII	9.9 \mathcal{L} (L)	$13 \pm 1^{[6]}$	$10.3^{[20]}$	30.8 \mathcal{L} (L)	$27 \pm 1^{[6]}$	$35.7^{[20]}$
	10.0 \mathcal{V} (V)	$10 \pm 2^{[27]}$ $8 \pm 2^{[28]}$	$8.16^{[21]}$ $12.7^{[22]}$ $8.43^{[24]}$	30.8 \mathcal{V} (V)	$34 \pm 12^{[27]}$ $30 \pm 5^{[28]}$	$26.6^{[21]}$ $41.5^{[22]}$ $29.0^{[24]}$
Ar IX	7.5 \mathcal{L} (L)	$6.5 \pm 2.0^{[28]}$	$5.9^{[20]}$	17.9 \mathcal{L} (L)	$19 \pm 4^{[28]}$	$20.8^{[20]}$
	7.5 \mathcal{V} (V)		$6.2^{[21]}$ $10.4^{[22]}$ $13.1^{[23]}$	17.9 \mathcal{V} (V)		$14.9^{[21]}$ $24.2^{[22]}$ $35.7^{[23]}$

注 (L) 和 (V) 分别指长度和速度规范下的计算结果。

应地辐射跃迁的概率逐渐增大. 因此, 在研究低 Z 类 Ne 离子的基础上, 更为深入地研究中高 Z 类 Ne 离子的性质, 就显得尤为重要.

3.3. 类 Ne 离子 $^3 P_2^0$ 和 $^3 P_0^0$ 态的辐射寿命

在大气星云、低密等离子体等低密源中, 电子的碰撞退激发减小, 相应地电子处于亚稳态的概率增大. 此时, 电偶极禁戒的跃迁, 比如磁四极 (M_2) 以及磁偶极 (M_1) 跃迁等将变得很重要^[17]. 然而, 由于这些态的寿命比较长, 实验上测量比较困难; 另一方面, 这些寿命对延迟、相关和相对论效应很敏感. 因

此, 有关这方面的精确数据非常稀少. 本文在系统地考虑强的延迟、相关以及相对论效应并对辐射跃迁能级 (见表 2) 进行比较精确计算的基础上, 给出了类 Ne 等电子系列离子 $2p^5 3s^3 P_2^0, ^3 P_0^0$ 态的辐射跃迁寿命 (见表 4). 对于 $2p^5 3s^3 P_0^0$ 态, 由于其通过电四极 (E_2) 辐射跃迁到 $2p^5 3s^3 P_2^0$ 态的跃迁概率很小, 约为 $10^{-7} s$, 可以忽略. 因此, 表 4 中 $^3 P_0^0$ 态的寿命仅为其通过 M_1 跃迁的辐射寿命. 从表 4 可以看出, 沿类 Ne 等电子系列, $^3 P_0^0$ 态的寿命普遍较 $^3 P_2^0$ 态的寿命高两个数量级, 且随着 Z 的增大, 其辐射寿命逐渐减

小,即随着离化度的增大,这些禁戒跃迁将变得不再“禁戒”。因此,在具体的大气物理、天体物理以及低密等离子体研究中,对于高离化态类 Ne 离子,这些禁戒跃迁将会扮演非常重要的角色,需要被系统地考虑。

表 4 类 Ne 离子 $2p^5 3s^3 P_2^0$ 和 $3P_0^0$ 态的辐射跃迁寿命(单位: s)

离化态	$3P_2^0$	$3P_0^0$
Na II	1.014	133.096
Mg III	1.471×10^{-1}	24.147
Al IV	3.385×10^{-2}	5.245
Si V	1.020×10^{-2}	1.331
P VI	3.667×10^{-3}	3.752×10^{-1}
S VII	1.507×10^{-3}	1.207×10^{-1}
Cl VIII	6.834×10^{-4}	4.278×10^{-2}
Ar IX	3.347×10^{-4}	1.380×10^{-2}

4. 结 论

本文利用多组态 Dirac-Fock(MCDF)方法,通过系统地考虑延迟和相关效应,计算了类 Ne 等电子系列离子($Z = 11, \dots, 18$) $2p^5 3s-2p^6$ 光谱跃迁的能级和跃迁概率,并与以往的实验和理论作了比较,

结果与最新的实验符合得比较好。另外,对于 $3p^5 3s^1 3P_1^0-2p^6 1S_0$ 电偶极共振和复合跃迁,在长度和速度两种不同规范下计算所得 $2p^5 3s^1 3P_1^0$ 态的寿命,其一致性也非常好。这在一定程度上说明,我们计算中所用的辐射跃迁初、末态的波函数是比较精确的。鉴于目前的结果,我们可以得出如下两点结论: 1) 在研究低电离度的离子(特别是中性原子)电子从一个开壳层结构变到一个闭壳层结构的辐射激发(或延迟衰变)过程中,跃迁初、末态原子(或离子)中电子密度的重排引起的波函数的变化(即延迟效应)非常明显,在精确地计算低离化态离子跃迁能级、概率等跃迁特性的过程中需要被系统地考虑。2) 对于一些弱线跃迁特性的计算,比如 $3P_1^0-1S_0$, $3P_2^0-1S_0$ 等,来自于 3SDT 和 3SDT4SD 相关近似下组态相关效应的贡献必须考虑,另外,对于复杂原子(或离子)的计算,有时甚至还需考虑来自于 3SDT5SD 甚至 3SDT5SDT 等相关近似的影响。

最后,我们希望本工作有助于类 Ne 激光等离子体状态的诊断以及大气物理、低密等离子体等低密源中谱线的辨认和跃迁概率的进一步实验测量。同时,希望给出的有关 $M1$, $M2$ 辐射跃迁的结果得到实验上的进一步验证。

- [1] Woodyard J R Sr and Altick P L 1975 *J. Phys.* B **8** 718
- [2] Burkhalter P G, Nagel D J and Cowan R D 1975 *Phys. Rev.* A **11** 782
- [3] Träbert E 1996 *Phys. Scr.* **53** 167
- [4] Matthews D L *et al* 1985 *Phys. Rev. Lett.* **54** 110
- [5] Rosen M D, Hagelstein P L, Matthews D L *et al* 1985 *Phys. Rev. Lett.* **54** 106
- [6] Westerlind M *et al* 1992 *Phys. Rev.* A **45** 6198
- [7] Curtis L J, Maniak S T, Ghrist R W *et al* 1995 *Phys. Rev.* A **51** 4575
- [8] Grant I P and Quiney H M 1987 *Adv. At. Mol. Phys.* **23** 37
Grant I P, Mckenzie B J and Norrington P H 1980 *Comp. Phys. Commun.* **21** 207
Grant I P 1996 *Relativistic atomic structure*, in *Atomic, Molecular and Optical Physics Reference book* ed G W F Drake (New York: American Institute of Physics) p258
- [9] Fricke B 1984 *Phys. Scr.* T **8** 129
- [10] Fritzsche S, Froese Fischer C, Dong C Z 2000 *Comput. Phys. Commun.* **124** 340
- [11] Dong C Z, Fritzsche S, Fricke B and Sepp W D 1999 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **307** 809
- [12] Fritzsche S, Dong C Z and Gaigalas G 2000 *At. Data. Nucl. Data Tables.* **75** 155
- [13] Dong C Z, Fritzsche S and Fricke B 2001 *J. Electr. Spec. Rel. Phenon.* **114** 157
- [14] Dong C Z 2001 *Ph D thesis*(University of Kassel)
- [15] Parpia F A, Froese Fischer C and Grant I P 1996 *Comput. Phys. Commun.* **94** 247
- [16] Mohr P J 1974 *Ann. Phys.*(NY) **88** 26
Mohr P J 1975 *Phys. Rev. Lett.* **34** 1050
Mohr P J 1982 *Phys. Rev.* A **58** 1885
- [17] Cowan R D 1981 *The theory of atomic structure and spectra*.(University of California press) p450 - 455
- [18] Grant I P 1974 *J. Phys.* B **7** 1458
- [19] Dong C Z, Xie L Y, Zhou X X *et al* (to be published)
- [20] NIST Atomic Spectra Database Data, <http://physlab2.nist.gov/cgi-bin/AtData/>(Version2.0, 1999)
- [21] Hibbert A, Mohan M and Le Dourneuf J M 1993 *At. Data Nucl. Data Tables* **53** 23
- [22] Crance M 1973 *At. Data Nucl. Data Tables* **5** 185
- [23] Bureeva A L and Safronova I U 1979 *Physica Scripta.* **20** 81
- [24] LaJohn L 1994 *Physica Scripta.* **49** 169
- [25] Schlagheck W 1975 *Phys. Lett.* A **54** 181

- [26] Buchet J P *et al* 1980 *Phys. Lett. A* **77** 424
 [27] Gardner K R, Cocke L C, Saylor K T and Curmutte J B 1978 *J. Opt. Soc. Am.* **68** 830
 [28] Berry G H, Desequelles J, Cheng T K and Schectman M R 1978 *Phys. Rev. A* **8** 546

Multi-configuration Dirac-Fock calculations of energy levels and transition probabilities in the $2p^5 3s-2p^6$ spectra of neon-like ions($Z = 11, \dots, 18$)*

Xie Lu-You¹⁾ Dong Chen-Zhong^{1,2)} Ma Xin-Wen²⁾ Yuan Ping¹⁾ Yan Jun³⁾ Qu Yi-Zhi⁴⁾

¹⁾ College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China)

²⁾ Center of Theoretical Nuclear Physics, National Laboratory of Heavy Ion Accelerator of Lanzhou, Lanzhou 730000, China)

³⁾ Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China)

⁴⁾ Graduate School of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039, China)

(Received 17 December 2001 ; revised manuscript received 20 January 2002)

Abstract

The influence of strong relaxation, correlation and relativistic effects on the energy levels and transition properties of low-lying excitation configuration $2p^5 3s$ and closed-shell ground state $2p^6$ in Neon-like ions($Z = 11, \dots, 18$) are systematically studied using the Multi-configuration Dirac-Fock method(MCDF). The transition energies of electric-dipole allowed($E1$) resonance and intercombination transitions for $2p^5 3s \ ^1 3 P_1^0-2p^6 \ ^1 S_0$, magnetic quadrupole transition($M2$) for $2p^5 3s \ ^3 P_2^0-2p^6 \ ^1 S_0$ and magnetic dipole transition($M1$) for $2p^5 3s \ ^3 P_0^0-2p^5 3s \ ^3 P_1^0$ and the radiation lifetimes of the excitation states $^1 P_1^0$, $^3 P_0^0$, $^3 P_1^0$ and $^3 P_2^0$ are presented, and the results are compared with some existing experiments and theoretical calculations available and which shows an good agreement with recent experimental data.

Keywords : MCDF method, correlation and relaxation effects, transition probabilities

PACC : 3120, 3130, 3270F

* Project supported by the Foundation for University Key Teacher by the Ministry of Education(Grant No. GG-140107361002), the National Natural Science Foundation of China(Grant No. 10074062), by the Foundation of Center of Theoretical Nuclear Physics, National Laboratory of Heavy Ion Accelerator, Lanzhou, and by the Foundation of Northwest Normal University(Grant No. NWNU-KJXCXG-214).