

类镍等电子系列离子 $M1, M2, E2$ 禁戒跃迁特性的理论研究*

万建杰¹⁾ 颉录有¹⁾ 董晨钟^{1)†} 蒋 军¹⁾ 颜 君²⁾

1) 西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070)

2) 北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

(2006 年 5 月 16 日收到, 2006 年 5 月 25 日收到修改稿)

利用基于全相对论框架下的多组态 Dirac-Fock 理论方法发展起来的程序包 GRASP92 和新发展的处理辐射跃迁过程的程序 REOS99, 计算了类镍等电子系列离子 ($Z = 45-95$) 的基组态 $3s^2 3p^6 3d^{10} S_0$ 以及低激发组态 $3s^2 3p^6 3d^9 4l$, $3s^2 3p^5 3d^{10} 4l$ 和 $3s 3p^6 3d^{10} 4l$ ($l = s, p, d, f$) 的能级及其向基态的 $M1, M2, E2$ 禁戒跃迁概率. 通过分析高离化类镍离子在特定的原子序数范围内由于存在能级交叉而产生的强组态相互作用, 解释了高离化类镍离子禁戒跃迁概率的反常变化现象, 探讨了禁戒跃迁概率受强组态相互作用影响而变化的一般规律.

关键词: 类镍等电子系列, 组态相互作用, 能级交叉, 禁戒跃迁

PACC: 3130, 3120T, 3280B, 3270F

1. 引 言

类镍离子具有 28 个电子, 其基组态为 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10}$, 属于满壳层结构. 一般而言, 类镍离子的辐射跃迁可以根据主量子数的变化分为两类: $\Delta n \geq 1$ 和 $\Delta n = 0$. 其中 $\Delta n \geq 1$ 的跃迁谱线较强, 波长较短; $\Delta n = 0$ 的跃迁谱线较弱, 波长较长. 由于 $\Delta n \geq 1$ 跃迁较强, 在等离子体实验中易于分辨, 所以被普遍用于等离子体状态参量的诊断. 此外, 类镍离子的这种满壳层结构还有助于在较大的动态范围内产生粒子数反转. 实验表明, 类镍离子比较容易通过电子碰撞激发机理使 $3d^9 4d$ 和 $3d^9 4p$ 的粒子数发生反转, 并有希望产生水窗波段 (23.2—43.7 Å) 的 X 射线激光^[1]. 1987 年, LLNL 实验室用 Nova 激光装置在类镍 Eu 离子的 $4d-4p$ 能级间实现了粒子数反转, 产生了 X 射线激光^[2]. 此后, 卢瑟福实验室 (RAL), LLNL 实验室等又先后在类镍的 Sm, Yb, Ta, W 和 Au 的等离子体中观察到激光辐射^[2]. 1998 年, Li 等人^[3] 进一步在实验中观测了 $Z = 39-48$ 的低 Z 类镍离子的 $3d^9 4d^1 S_0-3d^9 4p^1 P_1$ 的 X 射线谱. 除了实验研究之外, 各种理论方法也被用于研究类镍

离子的能级结构和跃迁特性, 比如, Quinet 等人^[4] 利用 MCDF 理论方法研究了类镍 Ag^{19+} - Pb^{54+} 离子 $n = 3-4$ 的 X 射线谱, 计算了 $3d-4p$, $3d-4f$, $3p-4s$ 和 $3p-4d$ 的电偶极 ($E1$) 跃迁的波长和振子强度, 并且发现了在特定原子序数范围内存在强的组态相互作用. Safronova 等人^[5] 利用相对论多体微扰理论 (RMBPT) 计算了类镍离子 ($Z = 47-92$) 的 $3l^{-1} 4l'$ ($J^P = 1^-$) 能级到基态的跃迁波长以及 $3l^{-1} 4l'$ ($J^P = 1^-$) 到基态跃迁的振子强度, 并指出了部分振子强度随原子序数变化时出现的反常现象. 尽管, 人们对类镍离子的研究已经有大量的实验和理论结果, 但以往研究主要是集中在类镍离子低激发态的能级及其向基态的电偶极 ($E1$) 跃迁上, 而对电偶极禁戒跃迁的研究比较少. 然而, 随着原子序数的增大, 各类禁戒跃迁概率都迅速地增大^[6], 许多禁戒跃迁概率和 $E1$ 跃迁概率几乎相当, 甚至会大于 $E1$ 跃迁. 近年来, 人们在观测太阳日冕可见区光谱的基础上, 已经鉴别出许多谱线是源自高离化离子的禁戒跃迁. 同样, 在聚变等离子体中也观测到了高离化离子的大量禁戒谱线, 并用于等离子体状态诊断. 因此, 系统地研究高离化类镍离子的电偶极禁戒跃迁, 对于实验室、天体高温等离子体状态的精确诊

* 国家自然科学基金 (批准号: 10376062, 10434100) 科技部国际合作项目 (批准号: CI-2004-07), 兰州重离子加速器国家实验室原子核理论研究中心项目资助的课题.

† E-mail: dongcz@nwnu.edu.cn

断以及 X 射线激光的研究具有重要意义.

本文利用 GRASP92 和 REOS99 程序包,通过系统地考虑组态相互作用和弛豫效应^[7-9],计算了类镍等电子系列离子 ($Z = 45-95$) 的基态和 $n = 4$ 单激发态构成的 107 个能级及相关的磁偶极 ($M1$)、磁四极 ($M2$) 和电四极 ($E2$) 等禁戒跃迁的概率,分析了能级交叉现象,研究了强组态相互作用对禁戒跃迁概率的影响.

2. 理论方法

2.1. 能级的计算

关于多组态 Dirac-Fock (MCDF) 理论方法在文献 [9, 10] 中已有详细说明,这里仅作扼要的介绍.在相对论框架下,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 量可以表示为(原子单位)

$$\hat{H}^{\text{DC}} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i + \sum_{i<j}^N |r_i - r_j|^{-1}, \quad (1)$$

式中第一项表示所有电子的动能以及电子与核之间的库仑相互作用势能,第二项表示电子之间的库仑相互作用势能.在相对论理论中, \hat{H}_i 可进一步表示为

$$\hat{H}_i = c \sum_{j=1}^3 \alpha_j p_{ij} + (\beta - 1)c^2 + V_{\text{mc}}(r_i), \quad (2)$$

其中 c 为光速; p_{ij} 为动量算符; $V_{\text{mc}}(r_i)$ 为核势场,当忽略核的有限体积效应时,它可以近似表示为 $V_{\text{mc}}(r_i) = -Z/r_i$; α_j 和 β 都是 4×4 的 Dirac 矩阵,其具体形式如下:

$$\alpha_j = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_j \\ \sigma_j & 0 \end{pmatrix}, j = 1, 2, 3, \beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}, \quad (3)$$

其中 σ_j 为泡利自旋矩阵, I 为 2×2 的单位阵.

在 MCDF 方法中,任一原子态 α 的波函数 $|\alpha(PJM)\rangle$ 由具有相同宇称 P 、总角动量 J 和总角动量分量 M 的组态波函数 $|\Gamma_r(PJM)\rangle$ 线性组合而成,即

$$|\alpha(PJM)\rangle = \sum_{r=1}^{n_c} C_r(\alpha) |\Gamma_r(PJM)\rangle, \quad (4)$$

式中 $C_r(\alpha)$ 为组态混合系数, n_c 是组态波函数的个数.具体计算中,我们通过活动空间方法逐步扩大 n_c ,可以对组态相互作用予以很好地考虑^[11, 12]. $|\Gamma_r(PJM)\rangle$ 为 N 个电子体系的组态波函数,它由所有单电子自旋轨道波函数 $\psi_{n\kappa m}$ 构成的 N 阶 Slater 行

列式波函数线性组合而成.而单电子的旋轨波函数表示为

$$\psi_{n\kappa m} = \frac{1}{r} \left[\begin{matrix} P_{n\kappa}(r) \chi_{\kappa m}(\theta, \phi) \\ i Q_{n\kappa}(r) \chi_{-\kappa m}(\theta, \phi) \end{matrix} \right]. \quad (5)$$

在(5)式中, n 为主量子数, κ 为相对论角量子数,相应于 $l = j \pm \frac{1}{2}$, $\kappa = \pm \left(j + \frac{1}{2} \right)$, m 为总角动量 j 的分量, $P_{n\kappa}(r)$ 和 $Q_{n\kappa}(r)$ 分别为径向波函数的大小分量, $\chi_{\kappa m}(\theta, \phi)$ 为自旋球谐函数^[10].

对体系的 Dirac-Coulomb Hamiltonian 矩阵进行对角化,就可得到相关原子态 α 的能量和波函数分量.另外,为了提高计算的精度,我们进一步包括了其他效应,例如 Breit 相互作用、量子电动力学效应(包括自能和真空极化)以及原子核的有限体积效应^[10] 并将其作为微扰,对能级和波函数进行了修正.

2.2. 禁戒跃迁概率的计算

根据 Fermi 黄金定则可知,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

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

其中, J_i 是激发初态 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

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

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,即轨道弛豫时,跃迁初、末态的轨道波函数将不再严格正交,方程(7)中的矩阵元可以表示为

$$\begin{aligned} &\Gamma_r(P_f J_f M_f) | O^{(L)} | \Gamma_s(P_i J_i M_i) \rangle \\ &= \sum_{p,q} \sum_{a,b} D_{\text{sp},sq}(ab) \psi_a \parallel O^{(L)} \parallel \psi_b, \end{aligned} \quad (8)$$

其中, $D_{\text{sp},sq}(ab)$ 包含了与辐射跃迁初、末态相联系的两个行列式波函数的系数乘积及其重叠积分,而矩阵元 $\psi_a \parallel O^{(L)} \parallel \psi_b$ 是

$$\begin{aligned} \psi_a \parallel O^{(L)} \parallel \psi_b &= \left(\frac{(2j_b + 1)\omega}{\pi c} \right)^{1/2} (-1)^a j_a^{-1/2} \\ &\quad \times \begin{pmatrix} j_a & L & j_b \\ \times \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \bar{M}_{ab}^{(L)}, \end{aligned} \quad (9)$$

其中 $\bar{M}_{ab}^{(L)}$ 是 Grant 定义的辐射跃迁的径向积分^[10], 对应于磁偶极、磁四极和电四极分别为

$$\bar{M}_{ab}^{(M1)} = \frac{3}{\sqrt{2}}(\kappa_a + \kappa_b)I_1^+, \quad (10)$$

$$\bar{M}_{ab}^{(M2)} = \frac{5i}{\sqrt{6}}(\kappa_a + \kappa_b)I_2^+, \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \bar{M}_{ab}^{(E2)} = & -\sqrt{\frac{3}{2}}(-2I_1^- + (\kappa_a - \kappa_b)I_1^+) \\ & + \sqrt{\frac{2}{3}}(3I_3^- + (\kappa_a - \kappa_b)I_3^+) \\ & + G^{(E2)}(-2I_1^- + 3I_3^- - 5J_2 \\ & + (\kappa_a - \kappa_b)I_1^+ + (\kappa_a - \kappa_b)I_3^+), \quad (12) \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} I_L^\pm = & \int_0^\infty dr j_L(\omega r/c) \chi(P_{n_a, \kappa_a}(r)Q_{n_b, \kappa_b}(r) \\ & \pm Q_{n_a, \kappa_a}(r)P_{n_b, \kappa_b}(r)), \quad (13) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} J_L = & \int_0^\infty dr j_L(\omega r/c) \chi(P_{n_a, \kappa_a}(r)P_{n_b, \kappa_b}(r) \\ & \pm Q_{n_a, \kappa_a}(r)Q_{n_b, \kappa_b}(r)), \quad (14) \end{aligned}$$

$$G^{(E2)} = \begin{cases} \sqrt{\frac{3}{2}}, & \text{Babushkin 规范,} \\ 0, & \text{Coulomb 规范.} \end{cases} \quad (15)$$

3. 结果与讨论

3.1. 类镍离子的能级结构及能级交叉

类镍离子的基态为 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6 3d^{10} 1S_0$. 从 $n=3$ 的任一次壳层 $3l$ ($l=s, p, d$) 激发一个电子到 $n=4$ 的任一次壳层 $4l'$ ($l'=s, p, d, f$) 可形成 12 个激发组态 $3l^{-1}4l'$ 共 106 个激发能级. 在理论计算中, 为了考虑主要的弛豫效应, 我们选用 $1s^2 2s^2 2p^6$ 作为离子实, 根据宇称 P 和总角动量 J 将所要计算的能级分成了 11 组(即 $J^P = 0^+, 1^+, 2^+, 3^+, 4^+, 5^+$ 以及 $J^P = 0^-, 1^-, 2^-, 3^-, 4^-, 5^-, 6^-$), 然后利用 GRASP92 的扩展优化能级模式(EOL)^[9]分别独立地对初、末态的波函数进行了优化. 表 1 给出了基于以上计算方法所得的部分类镍离子的能级精细结构, 其中激发态能级均以基态能级为标准. 同时, 作为比较, 表中也列出了目前已有的一些实验^[13]和其他理论结果^[14, 15]. 从表 1 可以看出, 对于中、高 Z 的类镍离子, 目前的结果与实验和其他理论结果都符合得很好, 其相对误差普遍小于 0.5%. 对于 Z 较低的类

镍离子, 我们发现目前的结果与实验的差别较大, 其主要原因是对于类镍等电子系列的所有离子考虑了同等的组态相互作用, 而对于低 Z 离子能级的高精度计算, 这是不够充分的. 另外, 我们发现在中、高 Z 类镍离子中, 能级在特定的原子序数范围发生交叉现象, 一些具有相同 J^P 的激发态之间存在着强的组态相互作用, 这引起相关原子态波函数发生强烈的混合.

图 1 展示了 $J^P = 1^+$ 的 7 个能级交叉的情况. 从图 1(a) 可以看出, $3d_{3/2}^{-1}4d_{5/2}(1)$ 和 $3d_{3/2}^{-1}4d_{3/2}(1)$ 两能级分别与能级 $3p_{3/2}^{-1}4p_{1/2}(1)$ 在 $Z=87$ 和 91 附近发生交叉, 这表明这些组态之间存在相互作用. 为了定量的分析组态相互作用的强度, 本文针对图 1(a) 给出了 $3p_{3/2}^{-1}4p_{1/2}(1)$ 能级的组态混合系数的模方随原子序数的变化情况, 如图 2 所示. 不难看出, 在 $Z=87$ 和 91 附近, $3d_{3/2}^{-1}4d_{5/2}(1)$ 和 $3d_{3/2}^{-1}4d_{3/2}(1)$ 两态分别以 33% 和 40% 的比例与 $3p_{3/2}^{-1}4p_{1/2}(1)$ 混合, 而其余组态则以相当小的比例参与混合. 在其他原子序数 Z 处, 各波函数混合都相当少, 每个能级都几乎与一个纯耦合态相对应. 这说明, $3d_{3/2}^{-1}4d_{5/2}(1)$ 和 $3d_{3/2}^{-1}4d_{3/2}(1)$ 分别在 $Z=87$ 和 91 附近与 $3p_{3/2}^{-1}4p_{1/2}(1)$ 存在着强组态相互作用. 由于这种组态相互作用总是涉及到两个混合很强的组态, 因此可以近似地认为, 在这些特定的原子序数范围内, 强组态相互作用总是成对出现.

另外, 我们发现在 $J^P = 0^+, 2^+, 3^+$ 和 $J^P = 0^-, 1^-, 2^-, 3^-, 4^-$ 的能级间也存在这种能级交叉现象. 其中, 我们计算得到的 $J^P = 1^+, 2^+$ 的交叉区域与 Quinet 等人^[4], Safronova 等人^[5] 和 Dong 等人^[16] 预言都是一致的. 由于篇幅所限, 本文未列出相关的比较.

3.2. 禁戒跃迁($M1, M2, E2$) 概率

本文在对高离化态类镍离子($Z=45-95$) 激发态能级结构精确计算的基础上, 进一步计算了电偶极禁戒的 $M1, M2, E2$ 跃迁的波长、概率和振子强度. 表 2 以 $E2$ 跃迁为例, 给出了 Babushkin 规范下类镍等电子系列离子在能级交叉区域内($Z=70-92$) 部分激发态能级向基态的禁戒跃迁概率, 并与其他理论结果进行了比较. 从表中可以看出, 目前结果普遍与 Quinet 等人^[4] 的计算符合得很好, 仅个别数据差别较大, 比如 $2p_{1/2}^{-1}4p_{3/2}(2)$ 和 $3p_{3/2}^{-1}4f_{5/2}(2)$ 两个能级向基态的跃迁概率. 另外, 对于高 Z 、高离化类镍离

子,其禁戒跃迁概率非常大,甚至超过了 10^{12}s^{-1} . 比较同一离化态下的 $M1, M2, E2$ 跃迁的概率,我们发现 $E2$ 谱线最强,其次分别是 $M1$ 和 $M2$. 另外,由于类镍离子体系本身的复杂性,其禁戒跃迁概率随着

原子序数的变化完全不同于类氢离子按照 Z 的幂次律^[6]来变化,特别是在能级交叉的区域,由于存在强的组态相互作用,其禁戒跃迁概率出现了异常的变化.

表 1 类镍等电子系列离子能级的比较(单位: eV)

Z	$3d_{5/2}^1 4s_{1/2}(1)$	$3d_{5/2}^1 4s_{1/2}(2)$	$3d_{5/2}^1 4d_{5/2}(1)$	$3d_{5/2}^1 4d_{5/2}(2)$	$3d_{5/2}^1 4p_{1/2}(2)$	$3d_{5/2}^1 4p_{1/2}(2)$	$3d_{5/2}^1 4p_{3/2}(2)$	$3d_{5/2}^1 4p_{3/2}(2)$
45	293.16	293.84	393.98	395.43	323.11	328.58	331.26	336.96
理论 ^[14]	294.32	294.95	395.06	396.50	324.50	329.73	332.39	337.94
46	322.66	323.36	429.54	431.12	353.86	359.99	362.94	369.37
理论 ^[14]	323.79	324.44	430.58	432.13	355.22	361.10	364.04	370.31
实验 ^[13]	323.77	324.42			355.22	361.11	364.05	370.31
47	353.41	354.13	466.48	468.18	385.81	392.67	395.92	403.15
理论 ^[14]	354.52	355.19	467.48	469.15	387.14	393.73	396.99	404.04
实验 ^[13]	354.48	355.14			387.13	393.72	396.98	404.02
48	385.41	386.14	504.79	506.61	418.94	426.59	430.18	438.28
理论 ^[14]	386.49	387.18	505.75	507.55	420.25	427.61	431.23	439.12
实验 ^[13]	386.46	387.14			420.23	427.61	431.22	439.10
49	418.65	419.40	544.47	546.43	453.25	461.77	465.73	474.76
理论 ^[14]	419.69	420.40	545.41	547.33	454.53	462.74	466.75	475.56
实验 ^[13]	419.67	420.36			454.50	462.75	466.72	475.52
50	453.11	453.88	585.53	587.62	488.72	498.19	502.56	512.61
理论 ^[14]	454.13	454.85	586.45	588.50	489.97	499.11	503.55	513.35
实验 ^[13]	454.08	454.80			489.96	499.11	503.52	513.32
52	525.71	526.52	671.82	674.18	563.13	574.74	580.06	592.39
54	603.15	604.00	763.69	766.31	642.08	656.19	662.66	677.61
56	685.38	686.27	861.17	864.06	725.47	742.47	750.34	768.31
58	772.33	773.26	964.31	967.45	813.22	833.54	843.06	864.48
60	863.93	864.91	1073.14	1076.54	905.20	929.33	940.81	966.15
62	960.12	961.14	1187.70	1191.36	1001.33	1029.77	1043.56	1073.34
64	1060.81	1061.88	1308.03	1311.95	1101.47	1134.79	1151.29	1186.06
理论 ^[15]	1061.98	1063.05	1307.57	1311.46	1101.06	1134.37	1151.01	1185.77
66	1165.94	1167.05	1434.20	1438.36	1205.50	1244.32	1263.97	1304.35
68	1275.39	1276.55	1566.24	1570.64	1313.29	1358.27	1381.57	1428.22
70	1389.08	1390.29	1704.19	1708.83	1424.69	1476.53	1504.06	1557.70
72	1506.91	1508.16	1848.13	1853.00	1539.54	1599.03	1631.43	1692.81
74	1628.74	1630.04	1998.08	2003.20	1657.67	1725.63	1763.62	1833.59
76	1754.46	1755.81	2154.13	2159.48	1778.91	1856.22	1900.64	1980.07
78	1883.93	1885.33	2316.31	2321.90	1903.05	1990.66	2042.42	2132.27
80	2016.98	2018.43	2484.70	2490.53	2029.87	2128.80	2188.95	2290.23
82	2153.46	2154.96	2659.34	2665.42	2159.15	2270.48	2340.19	2453.98
84	2293.16	2294.72	2840.27	2846.62	2290.63	2415.51	2496.11	2623.55
86	2435.92	2437.54	3027.30	3033.99	2424.04	2563.69	2656.66	2798.97
88	2581.46	2583.13	3222.81	3228.80	2559.07	2714.79	2821.81	2980.27
90	2729.56	2731.28	3422.66	3429.35	2695.39	2868.57	2991.52	3167.47
92	2879.92	2881.71	3629.66	3636.64	2832.64	3024.73	3165.74	3360.47

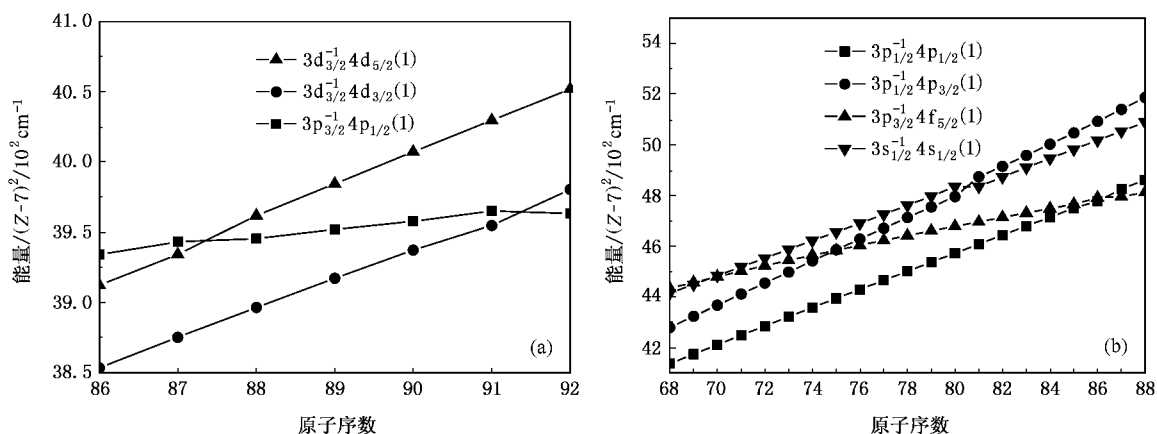
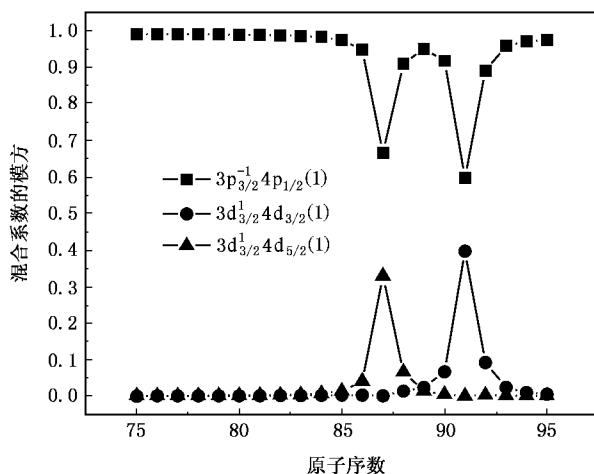
图 1 $J^p = 1^+$ 的能级交叉

图 2 组态混合系数的模方随原子序数的变化

图 3 展示了类镍离子激发态能级到基态的 $M1$ 、 $E2$ 和 $M2$ 禁戒跃迁概率随原子序数的变化情况. 其中, 图 3(a)(b) 为 $M1$ 跃迁, (c)(d) 为 $E2$ 跃迁, (e)(f) 为 $M2$ 跃迁. 从图 3(a)(b) 中可以看出, 在发生能级交叉的区域 (参看图 1), $M1$ 跃迁概率总是突然增大或减小. 例如, 在图 3(a) 中, $3d_{3/2}^{-1}4d_{5/2}(1)$ 和 $3d_{3/2}^{-1}4d_{3/2}(1)$ 的跃迁概率分别在 $Z = 82-86$ 和 $Z = 85-89$ 范围内都有减小的趋势, 但是在 $Z = 86$ 和 89 附近转而开始急剧增大, 这使得相应的两个跃迁概率在 $Z = 86$ 和 89 附近出现了极小值, 并在 $Z = 88$ 和 92 附近分别达到极大值. 对应地, $3d_{3/2}^{-1}4d_{1/2}(1)$ 到基态的 $M1$ 跃迁概率在 $Z = 88$ 和 92 附近出现了极小值. 图 3(b)-(f) 的情况与图 3(a) 完全相似, 在能级发生交叉的区域, 与交叉能级相关的禁戒跃迁概

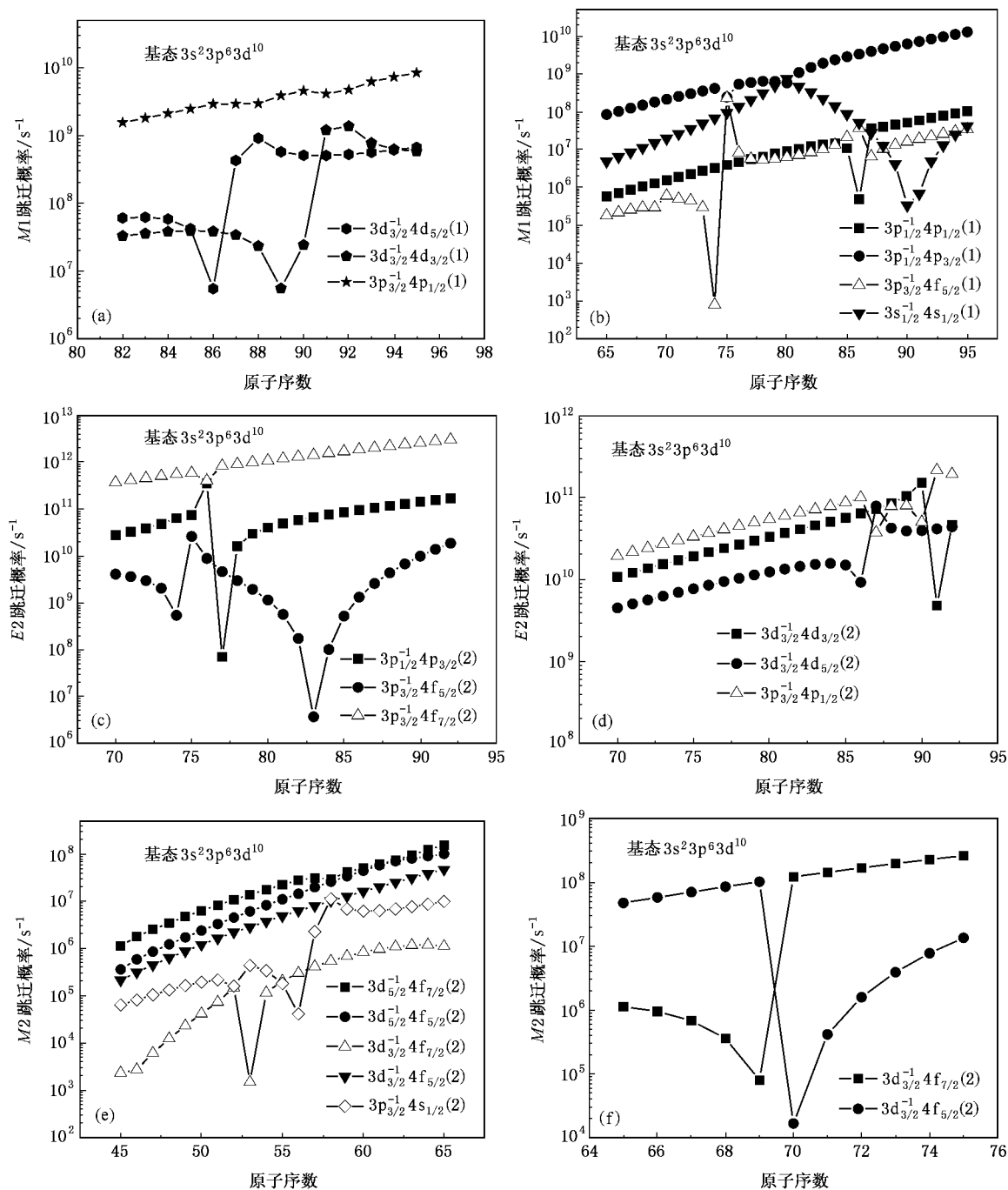
率发生了突变. 通过仔细的分析, 我们发现这种由于强组态相互作用引起的跃迁概率突变的一般规律是在能级交叉区域, 组态之间成对出现强的相互作用, 其概率也总是成对地发生突变, 随着一个的突然增大, 相应地另一个总是突然减小. 这种规律与类氦和类镍等电子系列离子电偶极 ($E1$) 跃迁概率受强组态相互作用影响而发生突变的规律是一致的^[17,18].

另外, 从图 3(b) 和 (c) 中我们发现, 对于 $3d_{1/2}^{-1}4d_{1/2}(1)$ 到基态的 $M1$ 跃迁和 $3d_{3/2}^{-1}4d_{7/2}(2)$ 到基态的 $E2$ 跃迁, 其禁戒跃迁概率分别在 $Z = 90$ 和 83 附近出现极小值. 通过系统分析, 我们发现这种极小值的出现并不是由于强组态相互作用引起, 对于这种现象, 我们正在寻求新的理论解释.

表 2 类镍等电子系列离子 E2 跃迁概率的比较 单位 s^{-1}

Z	$3d_{5/2}^{-1}4s_{1/2}(2)$	$3d_{5/2}^{-1}4s_{3/2}(2)$	$3d_{5/2}^{-1}4d_{3/2}(2)$	$3d_{5/2}^{-1}4d_{5/2}(2)$	$3d_{5/2}^{-1}4p_{3/2}(2)$	$3d_{5/2}^{-1}4p_{5/2}(2)$	$3d_{5/2}^{-1}4f_{5/2}(2)$	$3p_{3/2}^{-1}4f_{7/2}(2)$	$3p_{1/2}^{-1}4f_{5/2}(2)$	$3p_{1/2}^{-1}4f_{7/2}(2)$	$3p_{1/2}^{-1}4d_{3/2}(2)$	$3s_{1/2}^{-1}4d_{3/2}(2)$	$3s_{1/2}^{-1}4d_{5/2}(2)$
70	3.7X(9)	2.8X(9)	2.5X(9)	1.5X(10)	1.0X(10)	4.5X(9)	1.9X(10)	2.7X(10)	4.0X(9)	3.7X(11)	2.8X(11)	4.1X(10)	1.1X(11)
理论 ^[4]	3.8X(9)	2.9X(9)	2.57(9)	1.6X(10)	1.1X(10)	4.5X(9)	1.9X(10)	2.6X(10)	3.8X(9)	3.6X(11)	2.8X(11)		
71	4.2X(9)	3.2X(9)	2.97(9)	1.8X(10)	1.2X(10)	5.0X(9)	2.1X(10)	3.2X(10)	3.6X(9)	4.1X(11)	3.2X(11)	4.7X(10)	1.3X(11)
理论 ^[4]	4.3X(9)	3.3X(9)	3.0X(9)	1.8X(10)	1.2X(10)	5.07(9)	2.1X(10)	3.07(10)	3.51(9)	4.05(11)	3.2X(11)		
72	4.7X(9)	3.6X(9)	3.4X(9)	2.0X(10)	1.3X(10)	5.6X(9)	2.4X(10)	3.9X(10)	2.9X(9)	4.6X(11)	3.6X(11)	5.3X(10)	1.4X(11)
理论 ^[4]	4.9X(9)	3.7X(9)	3.48(9)	2.0X(10)	1.3X(10)	5.66(9)	2.4X(10)	3.6X(10)	2.97(9)	4.51(11)	3.6X(11)		
73	5.3X(9)	4.1X(9)	3.97(9)	2.2X(10)	1.5X(10)	6.2X(9)	2.7X(10)	4.8X(10)	2.0X(9)	5.1X(11)	4.0X(11)	6.0X(10)	1.6X(11)
理论 ^[4]	5.57(9)	4.24(9)	4.0X(9)	2.3X(10)	1.5X(10)	6.31(9)	2.6X(10)	4.4X(10)	2.21(9)	5.00(11)	4.0X(11)		
74	6.0X(9)	4.6X(9)	4.57(9)	2.5X(10)	1.7X(10)	6.9X(9)	3.0X(10)	5.4X(10)	5.6X(11)	5.60(11)	4.5X(11)	6.7X(10)	1.8X(11)
理论 ^[4]	6.2X(9)	4.7X(9)	4.64(9)	2.5X(10)	1.7X(10)	6.98(9)	3.0X(10)	6.4X(10)	5.40(8)	5.60(11)	4.5X(11)		
75	6.7X(9)	5.1X(9)	5.24(9)	2.8X(10)	1.9X(10)	7.7X(9)	3.3X(10)	7.4X(10)	2.6X(10)	5.9X(11)	5.0X(11)	7.6X(10)	2.0X(11)
理论 ^[4]	7.0X(9)	5.3X(9)	5.3X(9)	2.9X(10)	1.9X(10)	7.77(9)	3.3X(10)	8.1X(10)	2.6X(10)	5.9X(11)	5.0X(11)		
76	7.5X(9)	5.7X(9)	5.9X(9)	3.2X(10)	2.1X(10)	8.5X(9)	3.7X(10)	3.5X(11)	8.8X(9)	4.0X(11)	5.6X(11)	8.5X(10)	2.3X(11)
理论 ^[4]	7.8X(9)	5.91(9)	6.0X(9)	3.24(10)	2.1X(10)	8.60(9)	3.7X(10)	2.27(11)	8.7X(10)	5.16(11)	5.6X(11)		
77	8.4X(9)	6.3X(9)	6.8X(9)	3.5X(10)	2.4X(10)	9.4X(9)	4.0X(10)	6.97(7)	4.61(9)	8.46(11)	6.3X(11)	9.4X(10)	2.5X(11)
理论 ^[4]	8.74(9)	6.58(9)	6.95(9)	3.6X(10)	2.4X(10)	9.48(9)	4.0X(10)	1.1X(9)	4.05(9)	8.26(11)	6.2X(11)		
78	9.3X(9)	7.07(9)	7.74(9)	3.9X(10)	2.6X(10)	1.0X(10)	4.5X(10)	1.6X(10)	2.9X(9)	9.20(11)	7.0X(11)	1.0X(11)	2.8X(11)
理论 ^[4]	9.7X(9)	7.3X(9)	7.9X(9)	4.0X(10)	2.7X(10)	1.0X(10)	4.5X(10)	1.4X(10)	2.5X(9)	9.01(11)	6.9X(11)		
79	1.0X(10)	7.8X(9)	8.77(9)	4.4X(10)	2.9X(10)	1.1X(10)	4.97(10)	5.1X(10)	1.9X(9)	1.00(12)	7.8X(11)	1.1X(11)	3.1X(11)
理论 ^[4]	1.0X(10)	8.0X(9)	8.95(9)	4.4X(10)	3.0X(10)	1.1X(10)	4.9X(10)	2.8X(10)	1.59(9)	9.83(11)	7.7X(11)		
80	1.1X(10)	8.67(9)	9.9X(9)	4.8X(10)	3.3X(10)	1.2X(10)	5.47(10)	4.0X(10)	1.1X(9)	1.10(12)	8.7X(11)	1.3X(11)	3.5X(11)
理论 ^[4]	1.1X(10)	8.94(9)	1.01(10)	4.9X(10)	3.3X(10)	1.2X(10)	5.4X(10)	3.9X(10)	1.08(12)	1.08(12)	8.5X(11)		
81	1.2X(10)	9.57(9)	1.1X(10)	5.3X(10)	3.7X(10)	1.3X(10)	6.0X(10)	4.9X(10)	5.6X(8)	1.20(12)	9.7X(11)	1.4X(11)	3.9X(11)
理论 ^[4]	1.3X(10)	9.87(9)	1.1X(10)	5.47(10)	3.7X(10)	1.3X(10)	6.0X(10)	4.8X(10)	3.97(8)	1.18(12)	9.47(11)		
82	1.4X(10)	1.0X(10)	1.2X(10)	5.9X(10)	4.1X(10)	1.4X(10)	6.57(10)	6.8X(10)	5.8X(10)	1.3X(12)	1.0X(12)	1.5X(11)	4.3X(11)
理论 ^[4]	1.4X(10)	1.0X(10)	1.2X(10)	6.0X(10)	4.1X(10)	1.4X(10)	6.5X(10)	5.7X(10)	5.70(10)	1.29(12)			
83	1.5X(10)	1.1X(10)	1.4X(10)	6.5X(10)	4.5X(10)	1.5X(10)	7.2X(10)	7.5X(10)	3.67(6)	1.44(12)	1.1X(12)	1.7X(11)	4.7X(11)
理论 ^[4]	1.6X(10)	1.2X(10)	1.57X(10)	6.5X(10)	4.5X(10)	1.5X(10)	7.2X(10)	7.66(10)	1.01(8)	1.57(12)	1.3X(12)	1.9X(11)	5.2X(11)
84	1.8X(10)	1.3X(10)	1.7X(10)	7.1X(10)	5.0X(10)	1.5X(10)	8.0X(10)	8.6X(10)	5.20(8)	1.7X(12)	1.4X(12)	2.0X(11)	5.7X(11)
理论 ^[4]	1.8X(10)	1.3X(10)	1.7X(10)	7.1X(10)	5.0X(10)	1.5X(10)	8.0X(10)	9.6X(10)	1.3X(9)	1.87(12)	1.6X(12)	2.27(11)	6.3X(11)
86	2.0X(10)	1.5X(10)	1.9X(10)	8.6X(10)	6.4X(10)	1.01(11)	9.9X(10)	1.07(11)	2.58(9)	2.04(12)	1.77(12)	2.47(11)	6.9X(11)
理论 ^[4]	2.0X(10)	1.6X(10)	1.9X(10)	8.6X(10)	6.4X(10)	1.0X(11)	9.9X(10)	1.0X(11)	2.58(9)	2.04(12)	1.77(12)	2.47(11)	6.9X(11)
87	2.2X(10)	1.8X(10)	2.4X(10)	9.4X(10)	8.4X(10)	1.1X(11)	1.1X(11)	1.18(11)	4.38(9)	2.22(12)	1.9X(12)	2.69(11)	7.6X(11)
理论 ^[4]	2.2X(10)	1.8X(10)	2.4X(10)	9.4X(10)	8.4X(10)	1.1X(11)	1.1X(11)	1.18(11)	4.38(9)	2.22(12)	1.9X(12)	2.69(11)	7.6X(11)
88	2.6X(10)	2.1X(10)	2.7X(10)	1.1X(11)	1.0X(11)	1.3X(11)	1.2X(11)	1.30(11)	6.79(9)	2.41(12)	2.1X(12)	2.91(11)	8.3X(11)
理论 ^[4]	2.6X(10)	2.1X(10)	2.7X(10)	1.1X(11)	1.0X(11)	1.3X(11)	1.2X(11)	1.30(11)	6.79(9)	2.41(12)	2.1X(12)	2.91(11)	8.3X(11)
89	2.8X(10)	2.1X(10)	3.0X(10)	1.2X(11)	1.5X(11)	1.4X(11)	1.4X(11)	1.4X(11)	9.91(9)	2.61(12)	2.3X(12)	3.14(11)	9.1X(11)
理论 ^[4]	2.8X(10)	2.1X(10)	3.0X(10)	1.2X(11)	1.5X(11)	1.4X(11)	1.4X(11)	1.4X(11)	9.91(9)	2.61(12)	2.3X(12)	3.14(11)	9.1X(11)
90	3.0X(10)	2.3X(10)	3.3X(10)	1.3X(11)	1.6X(11)	1.5X(11)	1.5X(11)	1.5X(11)	1.38(10)	2.8X(12)	2.6X(12)	3.3X(11)	9.9X(11)
理论 ^[4]	3.0X(10)	2.3X(10)	3.3X(10)	1.3X(11)	1.6X(11)	1.5X(11)	1.5X(11)	1.5X(11)	1.38(10)	2.8X(12)	2.6X(12)	3.3X(11)	9.9X(11)
91	3.3X(10)	2.5X(10)	3.6X(10)	1.4X(11)	1.7X(11)	1.6X(11)	1.6X(11)	1.71(11)	1.87(10)	3.07(12)	2.8X(12)	3.6X(11)	1.0X(12)
理论 ^[4]	3.3X(10)	2.5X(10)	3.6X(10)	1.4X(11)	1.7X(11)	1.6X(11)	1.6X(11)	1.71(11)	1.87(10)	3.07(12)	2.8X(12)	3.6X(11)	1.0X(12)

注:表中 a、b 表示 $a \times 10^b$, 例如 3.7X(9) = 3.72×10^9 .

图3 $M1$, $E2$ 和 $M2$ 禁戒跃迁概率随原子序数的变化

4. 结 论

利用 MCDF 理论方法, 本文详细计算了类镍等电子系列离子 ($Z = 45-95$) 的基态和较低激发态共 107 个能级的精细结构以及激发态到基态的磁偶极 ($M1$)、磁四极 ($M2$) 和电四极 ($E2$) 禁戒跃迁的概率.

并在此基础上, 进一步系统地研究了强组态相互作用对能级和跃迁概率的影响. 我们发现, 在高离化类镍等电子系列离子的特定原子序数范围内, 存在大量的能级交叉现象, 并且与这些能级相关的禁戒跃迁概率也出现了有规律的突变, 即在某些禁戒跃迁概率的增大的同时, 相应地总是有其他禁戒跃迁概率的减小.

- [1] Zhang J 1995 *Physics* **24** 129 (in Chinese) 张 杰 1995 物理 **24** 129]
- [2] Scofield J H , MacGowan B J 1992 *Physica Scripta* **46** 361
- [3] Li Y L , Nilsen J , Dunn J , Osterheld A L 1998 *Phys. Rev. A* **58** R2668
- [4] Quinet P , Biemont E 1991 *Physica Scripta* **43** 150
- [5] Safronova U I , Johnson W R , Albritton J R 2000 *Phys. Rev. A* **62** 052505
- [6] Zou Y M , Roger H 2003 *Nuclear Science and Techniques* **14** 230
- [7] Fritzsche S , Fischer C F , Dong C Z 2000 *Comp. Phys. Commun.* **124** 340
- [8] Dong C Z , Xie L Y , Zhou X X , Ma X W , Fritzsche S 2003 *Hyperfine Interaction* **146/147** 161
- [9] Parpia F A , Fischer C F , Grant I P 1996 *Comp. Phys. Commun.* **94** 249
- [10] Dyllal K G , Grant I P , Johnson C T , Parpia F A , Plummer E P 1989 *Comp. Phys. Commun.* **55** 425
- [11] Dong C Z , Fritzsche S , Fricke B 2003 *Euro. Phys. J. D* **23** 5
- [12] Dong C Z , Fritzsche S 2005 *Phys. Rev. A* **72** 012507
- [13] Churilov S S , Ryabtsev A N , Wyart J F 1988 *Physica Scripta* **38** 326
- [14] Wyart J F 1987 *Physica Scripta* **36** 234
- [15] Hagelstein P L 1986 *Phys. Rev. A* **34** 874
- [16] Dong C Z , Fritzsche S , Xie L Y 2003 *J. Quant. Spec. Radiat. Transfer.* **76** 447
- [17] Dong C Z , Xie L Y , Wan J J , Jiang J 2005 *Chin. Phys.* **14** 1108
- [18] Dong C Z , Xie L Y , Wan J J , Jiang J , Yan J 2005 *J. Plasma Fusion Res.* **7** 1

Theoretical study of forbidden $M1, M2, E2$ transitions for highly charged Ni-like ions *

Wan Jian-Jie¹⁾ Xie Lu-You¹⁾ Dong Chen-Zhong¹⁾ Jiang Jun¹⁾ Yan Jun²⁾

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

2) *Institute of Applied Physics and Computed Mathematics of Beijing, Beijing 100088, China*

(Received 16 May 2006 ; revised manuscript received 25 May 2006)

Abstract

In this paper, the energy structure and the forbidden $M1, M2, E2$ transition probabilities between the ground state $3s^2 3p^6 3d^{10} 1S_0$ and the low-lying excited $3s^2 3p^6 3d^9 4l$, $3s^2 3p^5 3d^{10} 4l$ and $3s 3p^6 3d^{10} 4l$ ($l = s, p, d, f$) states have been calculated for Ni-like ions of $Z = 45-95$, by using GRASP92 package and REOS99 code based on the relativistic multi-configuration Dirac-Fock method. By Analyzing the effects of strong configuration interaction (CI) existing in Ni-like sequence, the abnormalities of forbidden transition probabilities existing in several highly charged Ni-like ions are explained and some general laws for the influence of CI on forbidden transition probabilities are discussed.

Keywords : Ni-like sequence, energy crossing, configuration interaction, forbidden transition

PACC : 3130, 3120T, 3280B, 3270F

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10376062, 10434100), the China/Ireland Science and Technology Collaboration Research Fund (Grant No. CI-2004-07), the Foundation of Center of Theoretical Nuclear Physics of National Laboratory of Heavy Ion Accelerator of Lanzhou.