

N II 离子 $2p4f-2p3d$ 辐射跃迁概率的理论研究^{*}

申晓志¹⁾ 袁 萍^{1)†} 李冀光¹⁾ 董晨钟¹⁾ 颌录有¹⁾ 师应龙¹⁾

1) 西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070)

2) 中国科学院寒区旱区环境与工程研究所, 兰州 730000)

(2006 年 12 月 30 日收到, 2007 年 2 月 1 日收到修改稿)

在全相对论理论框架下, 利用多组态 Dirac-Fock (MCDF) 方法, 系统计算了 N II 离子 $2p4f-2p3d$ 的辐射跃迁概率, 得到的结果与已有实验值符合很好. 具体计算中, 详细分析了相对论效应、电子关联、弛豫效应、Breit 相互作用和量子电动力学 (QED) 效应对能级精细结构及辐射跃迁概率的影响. 结果表明: 相对论效应、电子关联和弛豫效应对 N II $2p4f-2p3d$ 辐射跃迁概率有很重要的影响, 考虑了这些效应后计算值得到明显改善.

关键词: N II 离子, 跃迁概率, 多组态 Dirac-Fock 方法

PACC: 3120T, 3270F

1. 引 言

氮是地球大气和星际含量最丰富的元素之一, 有关其一价离子跃迁特性的研究, 一直是天体等离子体、大气物理、大气化学以及实验室等离子体等相关领域所关心的课题. 这一方面已有许多理论工作, 并且取得了一定的进展. Luo 和 Pradhan^[1]在密耦合 (close-coupling) 近似基础上, 采用 R-矩阵方法对 N II 离子的跃迁特性进行了研究, 得到了 $2p5s$ 以下 $2pnl$ ($l \leq 2$) 的能级间跃迁的振子强度. Ellis 采用多组态 Hartree-Fock (MCHF) 方法研究了 $2s^2 2p3s-2s^2 2p^2$ 紫外光谱的跃迁概率和振子强度^[2]. Bell 等人用组态相互作用程序 (CIV3) 做了较系统的理论计算^[3,4], 他们在非相对论 LS 耦合框架下, 通过考虑一些主要的电子关联效应, 对所有组态采用相同的单电子轨道函数, 再引入赝轨道对不同组态加以修正, 研究了 N II $2p^2 2s2p^3 2p3s 2p3d 2p4s$ 和 $2p4p$ 组态间跃迁的振子强度^[3]和辐射跃迁概率^[4]. Yuan 等^[5]采用多组态 Dirac-Fock 方法详细计算了 $n \leq 3$ 组态能级之间的辐射跃迁概率与振子强度.

目前为止, 在用各种方法进行的理论工作中, 关于 $n \geq 4$ 激发态跃迁概率的研究, 尤其是涉及 $2p4f$ 组态的理论计算工作非常少. 而 $2p4f-2p3d$ 在可见光

范围的辐射比较强, 文献报道在弧光放电、星云和闪电光谱实验都观测到了它们的谱线^[6-13]. Mar 等也在实验上得到了 $2p4f-2p3d$ 跃迁的一些概率值^[14]. 所以从理论上得到其跃迁特性参数对等离子体诊断及相关工作都有重要的意义.

N II 的 $2p4f$ 组态是一种特殊的对耦合^[15]. 在这种特殊耦合下, 有些能级间隔非常小, 所以合理考虑各种效应对能级精细结构及跃迁概率值的影响尤为重要^[16-18]. 能级结构的这一特性加大了理论计算的难度, 这也是以往关于这一跃迁特性的理论工作非常少的主要原因之一. 因此, 开展对 N II 离子 $2p4f-2p3d$ 能级精细结构及辐射跃迁概率的理论研究是十分必要的.

本文采用相对论多组态 Dirac-Fock 方法^[19], 系统考虑了电子关联、弛豫效应、Breit 相互作用和 QED 效应, 计算了 N II $2p4f-2p3d$ 的辐射跃迁概率及振子强度. 并在具体计算中, 详细分析了相对论效应、电子关联、弛豫效应等对能级精细结构及辐射跃迁概率的影响.

2. 理论与方法

有关 MCDF 方法, 许多文献已有详细的阐述^[19], 这里只做简单的介绍.

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 40475007)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: yuamp@nwnu.edu.cn

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 哈密顿量为(原子单位)

$$H_{DC} = \sum_{i=1}^N [c\hat{\alpha} \cdot \hat{p}_i + \beta c^2 - V(r_i)] + \sum_{i,j}^N \frac{1}{r_{ij}}, \quad (1)$$

其中 r_i 为第 i 个电子的位置, c 为光速, \hat{p}_i 为动量算符, $\hat{\alpha}$ 和 β 为 4×4 阶 Dirac 矩阵, $V(r_i)$ 是第 i 个电子受到的原子核的库仑势.

在中心势场近似下,单电子 Dirac 轨道波函数为

$$\phi_{nk\mu} = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} P_{nk}(r) \chi_{k\mu}(\theta, \varphi) \\ i Q_{nk}(r) \chi_{-k\mu}(\theta, \varphi) \end{bmatrix}, \quad (2)$$

k 为 Dirac 量子数, μ 为角动量 j 的投影, $P_{nk}(Q_{nk})$ 为径向波函数的大(小)分量, $\chi_{k\mu}$ 为 2 分量旋量波函数.

在相对论多组态 Dirac-Fock 方法中,任一原子态波函数(ASF) $|\Psi_a(PJM)\rangle$ 是由具有相同宇称 P 、总角动量 J 和总角动量分量 M 的组态波函数(CSF) $|\Gamma_i(PJM)\rangle$ 的线性组合,即

$$|\Psi_a(PJM)\rangle = \sum_{r=1}^{n_c} C_r(\alpha) |\Gamma_r(PJM)\rangle, \quad (3)$$

其中 $C_r(\alpha)$ 为组态混合系数, n_c 是组态波函数的个数,其数目反映了计算中考虑电子关联影响的程度.

计算中进一步考虑了 Breit 相互作用和 QED 效应^[20,21]的贡献,这将对混合系数和能级做进一步的修正.

根据含时微扰理论,从初态 i 到末态 f 的爱因斯坦自发辐射跃迁概率为

$$A_{fi} = \frac{2\pi}{2j_i + 1} \sum_{M_i} \sum_{M_f} |M_{fi}^{(L)}|^2, \quad (4)$$

其中 j_i 是激发态 i 的总角动量, M_{fi} 是跃迁矩阵元,可表示为

$$\begin{aligned} M_{fi}^{(L)} &= \Psi_f(P_f J_f M_f) | O^{(L)} | \Psi_i(P_i J_i M_i) \\ &= \sum_{r,s} C_r(f) C_s(i) \Gamma_r(P_f J_f M_f) \\ &\quad \times | O^{(L)} | \Gamma_s(P_i J_i M_i), \end{aligned} \quad (5)$$

上式中 $O^{(L)}$ 是辐射电磁场的 L 阶张量算符.

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(即弛豫效应)时,跃迁初、末态的轨道波函数将不再严格正交.计算中利用 REOS99 程序^[20]充分考虑了这一效应对辐射跃迁概率的影响.

若用 $D_{pq}(kl) = \Phi_p | \Phi_q = \det\{d_{pq}(kl)\}$ 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 $d_{pq}(kl) = \phi_k | \phi_l$, ϕ_k 和 ϕ_l 分别表示一系列与初、末态相联系的单电子轨道波函数)则方程(5)中矩阵元可进一步表示为

$$\begin{aligned} &\Gamma_r(P_f J_f M_f) | O^{(L)} | \Gamma_s(P_i J_i M_i) \\ &= \sum_{p,q} \sum_{k,l} B_{rp} B_{sq} \phi_k || O^{(L)} || \phi_l D_{pq}(kl), \end{aligned} \quad (6)$$

其中

$$\begin{aligned} \phi_k || O^{(L)} || \phi_l &= \sqrt{\frac{(2j_l + 1)\omega}{\pi c}} \times (-1)^{j_l - 1/2} \\ &\quad \times \begin{pmatrix} j_k & L & j_l \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} M_{kl}, \end{aligned}$$

M_{kl} 为径向积分,对于不同的跃迁类型(如电偶极、磁偶极等)有不同的表达式.将径向积分 M_{kl} 分别在长度和速度规范下计算,可以得到长度和速度规范下的跃迁概率,通过比较数据的一致性可以判断计算结果的准确性.

3. 结果与讨论

3.1. 相对论效应的影响

相对论效应对能级结构的影响与 Z^2 成正比,氮是低 Z 元素,所以相对论效应对其原子或离子能级结构的影响不是太大.可以通过在单组态下增大光速 c 达到非相对论近似^[21].为了更好地研究相对论效应对能级精细结构及跃迁概率的影响,在单组态情况下,以 $2p4f-2p3d$ 一些跃迁能为例,将非相对论与相对论框架下的计算结果在表 1 列出.可以发现,非相对论框架下计算的跃迁能与相对论情况下得到的值差别不大,除 $(9/2)_4-^3F_3^o$ 的跃迁能相差 100 cm^{-1} 以上外,其余几项都是几十个 cm^{-1} .

由于跃迁概率对波函数非常敏感,即使相对论效应对原子态波函数很小的影响,也会使跃迁概率,尤其是自旋禁戒跃迁概率产生很大的变化.表 1 中前 3 项为允许跃迁,后 3 项为自旋禁戒跃迁.在长度规范下比较可以发现,相对论效应对前后 3 项跃迁概率的影响变化达 2 个数量级以上.以 $(9/2)_4-^3D_3^o$ 为例,在相对论与非相对论情况下的跃迁能虽然仅仅相差 11 cm^{-1} ,但跃迁概率却差 3 个数量级.这与文献[17]中的分析是一致的.

另外,也可从表 1 看出,非相对论情况中,长度

和速度两种规范下数据的一致性很差,大约相差 2 个数量级,而且非相对论情况下速度规范的数据误

差很大,尤其是自旋禁戒跃迁,其数据与相对论情况下得到的值相差 4 个数量级以上.

表 1 相对论效应对跃迁能及跃迁概率的影响

2p4f—2p3d	跃迁能/cm ⁻¹		跃迁概率 ^{a)} /s ⁻¹			
	非相对论	相对论	非相对论		相对论	
			长度规范	速度规范	长度规范	速度规范
$G(7/2)_4-^3F_3^o$	23304.10	23316.24	2.4519(8)	4.2066(6)	1.5161(7)	5.1830(7)
$F(7/2)_4-^3D_3^o$	22962.38	22888.86	2.2353(8)	3.9771(6)	1.0676(8)	1.0172(8)
$G(9/2)_4-^1F_3^o$	20678.92	20735.50	1.8287(8)	3.9897(6)	4.7426(7)	6.3070(7)
$G(9/2)_4-^3F_3^o$	23325.83	23435.51	3.0658(5)	4.2759(3)	7.3150(7)	6.5618(7)
$G(7/2)_4-^1F_3^o$	20657.19	20616.24	2.2735(5)	5.9583(3)	5.0152(7)	6.0859(7)
$G(9/2)_4-^3D_3^o$	23240.67	23251.14	6.6773(4)	1.6701(2)	1.1342(8)	1.0163(7)

a) A(B) 表示跃迁概率值为 $A \times 10^B$, 为与实验^[14]相对应, 2p4f 采用 LK 耦合形式表示^[15]

3.2. 电子关联的影响

电子关联效应是原子结构计算中误差的主要来源. 为了有效考虑电子关联效应, 我们采用最早用于量子化学的活动空间方法系统产生组态列表, 逐步扩大 CSF 数目. 具体计算中, 我们将 $n=1$ 以外其余电子皆考虑为价电子, 对于奇、偶宇称分别将 $\{2s^2 2p3d\}$ 和 $\{2s^2 2p4f\}$ 作为参考组态, 并且考虑从参考组态分别单(S)双(D)激发价电子到 nl 壳层 $\{n \geq 3, l \leq n-1\}$ 构成关联组态. 表 2 列出了不同关联模型下所用的 CSF 数目, 可以看出, 随着活动空间的扩大, 关联组态数目迅速增加, 6SD 模型下最大组态数达 15108 个. 在跃迁初、末态波函数和能级计算中

采用了扩展能级优化模式(EOL).

不同关联模型对不同能级的影响程度是不同的, 图 1 以能级 2p4f $G(9/2)_4$ 和能级 2p3d $^1F_3^o$ 为例来研究这种情况. 为了更好地看出不同关联模型对能级值的影响程度, 纵轴采用前后相邻两种关联模型下计算的能级差值. 从图 1 中可以发现 (i) 3SD 模型对两能级的影响都很重要, 但对 2p4f $G(9/2)_4$ 的影响更大; (ii) 4SD 模型对 2p3d $^1F_3^o$ 影响很大, 而对 2p4f $G(9/2)_4$ 的影响较小; (iii) 5SD 与 6SD 模型对能级的影响逐渐减小. 因此, 在具体的计算中, 3SD 及 4SD 关联模型必须予以充分考虑.

表 3 给出了逐步扩大活动空间时跃迁能的变化

表 2 不同关联模型下的 CSF 数目

J^p	2p4f 的 CSF 数目					J^p	2p3d 的 CSF 数目				
	SC	3SD	4SD	5SD	6SD		SC	3SD	4SD	5SD	6SD
1 ⁺	1	397	1145	3819	9022	0 ⁻	1	85	488	1428	3119
2 ⁺	3	575	1627	5494	13231	1 ⁻	3	219	1299	3887	8638
3 ⁺	4	600	1707	6043	15108	2 ⁻	4	258	1680	5294	12222
4 ⁺	3	533	1481	5616	14788	3 ⁻	3	211	1602	5470	13395
5 ⁺	1	379	1042	4471	12715	4 ⁻	1	126	1220	4671	12422

情况, 可以看出, 电子关联对跃迁能的影响很大. 随着 CSF 数目的增大, 跃迁能的变化越来越小, 结果逐渐趋于收敛. 当 CSF 数目达到 10000 左右时, 结果就已非常接近实验值. 此外, 表 3 也列出了在 6SD 关联基础上进一步考虑 Breit 相互作用和 QED 修正后跃迁能的结果. 通过比较可以看出, 考虑两种效应后跃迁能大都有一定的改善, 其中对 $G(9/2)_4-^1F_3^o$ 的

影响最大, 约为 0.23%.

从表 3 中我们注意到, 3SD 模型下的跃迁能与实验值相差很大, 在 4SD 模型下差值又变小. 对图 1 的分析得出, 这一原因是由于 3SD 模型下初末能级考虑的关联效应不平衡; 而在 4SD 模型下, 关联效应对初末能级的影响与 3SD 模型的情况相反, 从而弥补了跃迁能在 3SD 模型下的关联不平衡误差, 使

得4SD模型计算的跃迁能与实验值的误差开始 减小.

表3 不同关联模型对跃迁能的影响^{a)}

跃迁能/cm ⁻¹	方法							实验 ¹⁴
	SC	3SD	4SD	5SD	6SD	Breit + QED	NIST	
$\alpha(9/2)_4-^3F_3^o$	23435.51	17440.74	25123.36	24767.28	24820.57	24812.00	24831.05	24837.93
$\alpha(7/2)_3-^3F_2^o$	24281.39	17622.64	24149.13	24658.83	24665.9	24699.59	24775.65	24782.66
$\alpha(9/2)_3-^3F_4^o$	23532.89	18708.43	24232.53	24781.99	24776.78	24765.39	24737.46	24744.45
$\alpha(7/2)_4-^3F_3^o$	23316.24	17327.28	25010.31	24652.65	24712.03	24707.97	24723.87	24730.87
$\alpha(7/2)_3-^3F_3^o$	23474.17	17340.14	24434.66	24677.06	24719.98	24714.78	24716.25	24723.10
$\alpha(7/2)_4-^1F_3^o$	20616.24	14596.50	22183.75	21914.86	21974.28	21975.93	21959.69	21965.95
$F(7/2)_3-^3F_2^o$	24043.91	17341.89	23919.02	24420.80	24652.68	24673.69	24544.68	24551.93
$F(7/2)_4-^3F_3^o$	23073.21	17098.39	24782.08	24425.67	24455.64	24489.64	24489.26	24495.99
$D(3/2)_2-^3P_2^o$	21901.80	13509.84	22134.34	22426.64	22591.79	22662.53	22632.93	22639.28
$D(3/2)_2-^3P_1^o$	21837.43	14580.23	22491.19	22500.11	22587.61	22591.95	22581.13	22587.64
$\alpha(9/2)_4-^1F_3^o$	20735.50	14710.04	22297.44	22009.32	22029.54	22079.99	22066.87	22073.11

a) SC代表单组态模型, 3SD代表分别将1- X (single/double)个价电子从参考组态激发到3*l*壳层的关联模型, 4SD代表在3SD基础上, 分别将一个、两个电子从参考组态激发到4*l*壳层的关联模型, 5SD代表在4SD基础上, 分别将一个、两个电子从参考组态激发到5*l*壳层的关联模型, 6SD代表在5SD基础上, 分别将一个、两个电子从参考组态激发到6*l*壳层的关联模型; 实验跃迁能由实验观测到的跃迁谱线的波长值取 Kayser (cm⁻¹)单位得到

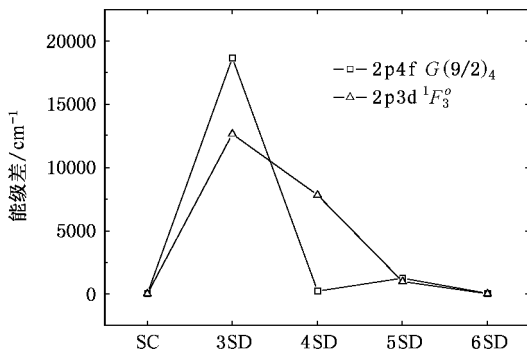


图1 不同关联模型对能级的影响

当活动空间逐步扩大时, 不仅跃迁能与实验值越来越接近, 而且两种规范下的跃迁概率与实验值符合得也越来越好. 虽然3SD情况下跃迁能计算值的误差比SC情况还大, 但此时计算的跃迁概率值

却比后者要好, 这说明波函数在逐步得到优化. 表4以 $\alpha(7/2)_4-^3F_3^o$ 和 $\alpha(9/2)_4-^1F_3^o$ 为例, 比较了电子关联对跃迁概率的影响. 可以看出, 关联组态数目从几百增加到上万的过程中, 跃迁概率的计算值会产生一个数量级甚至更大的变化. 当考虑的CSF数目足够多时, 已包括了最主要的关联效应, 5SD和6SD关联模型下数据比较接近, 并且与实验值的误差也进一步减小. 表4也列出了随关联组态数目的增加, 两种规范下计算结果一致性的对比, 到6SD时, 两种规范下的计算值符合得相当好, 都小于10%. 另外, 从表4也可以看出, 考虑Breit相互作用和QED修正后, 跃迁概率值也得到了改善, 并且两种规范下计算结果的一致性也进一步改善. 尽管这两种效应引起的修正与相对论和电子关联效应相比要小得多, 但对能级和跃迁概率计算值仍具有一定的影响.

表4 不同电子关联模型下辐射跃迁概率($10^8 s^{-1}$)的变化

2p4f-2p3d		SC	3SD	4SD	5SD	6SD	Breit + QED	实验 ^[14]
$\alpha(7/2)_4-^3F_3^o$	长度规范	0.1516	0.4376	1.0878	1.1567	1.2143	1.3461	1.25
	速度规范	0.5183	0.7454	0.9996	1.0525	1.1153	1.2371	
	规范一致性	70%	41%	10%	9%	8%	6%	
$\alpha(9/2)_4-^1F_3^o$	长度规范	0.4743	0.8135	1.4463	1.2398	1.396	1.4064	1.45
	速度规范	0.6307	0.9724	1.6008	1.4759	1.5316	1.5446	
	规范一致性	25%	16%	11%	11%	9%	8%	

3.3. 弛豫效应的影响

由于发射光子而引起的辐射跃迁初、末态的电子密度重排对跃迁概率的理论计算有一定的影响. 弛豫效应与电子关联影响相互耦合^[22], 因此, 弛豫效应对能级结构和跃迁概率的影响与电子关联密不可分. 以 $\alpha(7/2)_4-^3F_4^o$ 为例, 从单组态 SC 开始逐步增大活动空间 ($n = 3-6$) 来比较弛豫效应对 2p4f—2p3d 跃迁概率的影响. 图 2 给出在活动空间变化到 3SD 后, 考虑弛豫效应时的跃迁概率更快地向实验值靠近并且趋于稳定, 同时长度和速度规范下得到的跃迁概率一致性也比不考虑弛豫效应时好得多. 当活动空间扩大到一定程度时, 考虑弛豫效应后的结果更接近实验值.

为了比较弛豫效应对跃迁概率的影响, 表 5 给出在 6SD 关联模型下考虑了 Breit 相互作用和 QED 修正后, 考虑与不考虑弛豫效应的一些跃迁概率值. 可以看出, 弛豫效应对跃迁概率有明显的影响. 在

同一种规范下与实验结果比较发现, 不考虑弛豫效应时的计算值大都偏差较大, 有些甚至更大, 而且不考虑弛豫效应时两种规范下跃迁概率的一致性也很差. 考虑弛豫效应后, 结果得到显著优化, 长度和速度两种不同规范下跃迁概率的一致性较好, 与实验值都很接近.

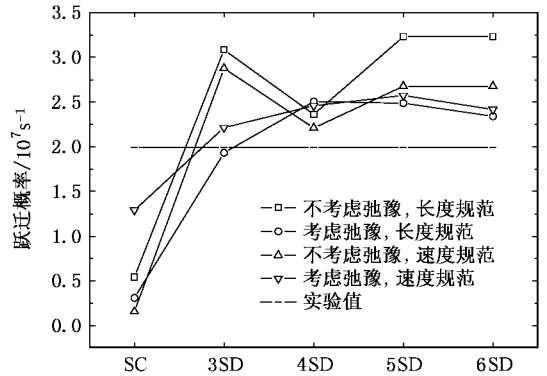


图 2 $\alpha(7/2)_4-^3F_4^o$ 的跃迁概率随关联模型的变化

表 5 弛豫效应对 2p4f—2p3d 辐射跃迁概率的影响

2p4f—2p3d	不考虑弛豫/ 10^8 s^{-1}		考虑弛豫/ 10^8 s^{-1}		实验 ^[14]
	长度规范	速度规范	长度规范	速度规范	
$D(3/2)_1-^3P_0^o$	1.0419	0.8699	0.9658	1.0247	
$D(3/2)_1-^3P_1^o$	0.7167	0.5626	0.8417	0.8048	
$D(3/2)_2-^3P_1^o$	0.0893	0.1047	0.6054	0.6027	0.568
$D(3/2)_2-^3P_2^o$	0.1819	0.2249	0.2165	0.2427	0.233
$F(7/2)_3-^3F_2^o$	0.0757	0.0894	0.5344	0.5169	0.499
$\alpha(7/2)_3-^3F_3^o$	0.0956	0.1549	0.3222	0.2819	0.214
$\alpha(9/2)_4-^1F_3^o$	1.1882	1.3596	1.4064	1.5446	1.45
$\alpha(7/2)_4-^3F_4^o$	0.3231	0.2675	0.2337	0.2413	0.199
$\alpha(9/2)_5-^3F_4^o$	2.3877	1.8737	2.5675	2.5622	2.08

3.4. 一些 2p4f—2p3d 的辐射跃迁概率和振子强度

表 6 列出了系统考虑相对论效应、弛豫效应、电子关联、Breit 相互作用、QED 效应等贡献后得到的 2p4f—2p3d 一些重要的辐射跃迁概率和振子强度,

其中许多跃迁概率值, 以往理论计算工作没有报道过. 另外, 作为比较, 表中也列出了最新的实验值及已有理论计算结果. 可以看出, 目前计算结果与实验值符合很好, 比以往报道的理论结果更接近实验值.

表 6 一些 $2p4f-2p3d$ 的辐射跃迁概率和振子强度^{a)}

$2p4f-2p3d$	波长	跃迁概率/ $10^8 s^{-1}$			比率	gf
		长度规范	速度规范	实验 ^[14]		
$\alpha 9/2 \lambda_4-^3 F_3^o$	402.722	0.9529	0.8619	0.672	1.06	2.0886
$\alpha 7/2 \lambda_3-^3 F_2^o$	403.622	1.9001	1.8057	1.3		3.2087
$\alpha 9/2 \lambda_4-^3 F_4^o$	404.048	0.055	0.0518			0.1201
$\alpha 9/2 \lambda_3-^3 F_4^o$	404.245	2.5675	2.5622	2.08	0.975	6.8589
$\alpha 7/2 \lambda_4-^3 F_3^o$	404.467	1.3461	1.2371	1.25	0.549	2.9752
$\alpha 7/2 \lambda_3-^3 F_3^o$	404.592	0.3222	0.2819	0.214		0.5535
$\alpha 7/2 \lambda_4-^3 F_4^o$	405.805	0.2337	0.2413	0.199	0.14	0.5142
$F(7/2 \lambda_3-^3 F_2^o)$	407.42	0.5344	0.5169	0.499		0.9192
$F(5/2 \lambda_2-^3 F_2^o)$	407.808	0.2252	0.2253			0.2763
$F(7/2 \lambda_4-^3 F_3^o)$	408.342	0.4269	0.4027	0.335		0.9606
$F(7/2 \lambda_3-^3 F_3^o)$	408.409	0.0174	0.016			0.0306
$F(5/2 \lambda_3-^3 F_3^o)$	408.846	0.1332	0.1183			0.2338
$F(7/2 \lambda_4-^3 F_4^o)$	409.706	0.1299	0.1449			0.2909
$D(5/2 \lambda_2-^1 D_2^o)$	411.12	0.1688	0.1849			0.2187
$\alpha 7/2 \lambda_3-^1 D_2^o$	413.294	0.1252	0.1281	0.204		0.23
$D(3/2 \lambda_2-^3 D_1^o)$	415.753	0.0559	0.0528			0.0716
$D(3/2 \lambda_1-^3 D_1^o)$	415.817	0.2848	0.2636			0.2193
$D(5/2 \lambda_3-^3 D_3^o)$	418.085	0.4624	0.4478			0.8426
$\alpha 7/2 \lambda_3-^3 D_3^o$	420.25	0.0254	0.023			0.0467
$F(7/2 \lambda_3-^3 D_3^o)$	424.369	0.1107	0.1026			0.2079
$D(3/2 \lambda_2-^3 P_2^o)$	441.834	0.2165	0.2427	0.233		0.316
$D(3/2 \lambda_2-^3 P_1^o)$	442.848	0.6054	0.6027	0.568		0.8809
$D(3/2 \lambda_1-^3 P_1^o)$	442.921	0.8417	0.8048			0.7359
$D(5/2 \lambda_2-^3 P_2^o)$	443.306	0.2377	0.2704			0.3502
$D(5/2 \lambda_3-^3 P_2^o)$	443.398	1.6356	1.8089			3.3803
$D(3/2 \lambda_1-^3 P_0^o)$	443.472	0.9658	1.0247			0.8519
$D(5/2 \lambda_2-^3 P_1^o)$	444.326	0.8436	0.8382			1.239
$D(5/2 \lambda_3-^1 F_3^o)$	452.995	0.008	0.0088			0.0173
$\alpha 9/2 \lambda_4-^1 F_3^o$	453.168	1.4064	1.5446	1.45	0.834	3.8924
$\alpha 7/2 \lambda_4-^1 F_3^o$	455.379	0.6428	0.7321	0.611	0.84	1.7959
$\alpha 7/2 \lambda_3-^1 F_3^o$	455.538	0.0237	0.0243			0.0514
$F(7/2 \lambda_4-^1 F_3^o)$	460.297	0.0914	0.1042			0.2605
$F(7/2 \lambda_3-^1 F_3^o)$	460.382	0.0916	0.0992			0.2031
$F(5/2 \lambda_3-^1 F_3^o)$	460.938	0.106	0.1176			0.2358

a) 比率为本工作在长度规范下的跃迁概率值与其他理论跃迁概率^[23]的比值, gf 为长度规范下的加权振子强度.

4. 结 论

本文在全相对论理论框架下, 利用多组态 Dirac-Fock(MCDF)方法, 系统计算了 N II $2p4f-2p3d$

的辐射跃迁概率, 得到了与已有实验符合很好的结果. 在具体计算中, 详细分析了相对论效应、电子关联、弛豫效应、Breit 相互作用和量子电动力学(QED)效应对能级结构及辐射跃迁概率的影响. 结果表明, 相对论效应对 N II 能级结构的影响很小, 但对跃迁

概率,尤其是对自旋禁戒跃迁概率的影响很大.电子关联效应不仅对能级结构影响较大,而且对跃迁概率也有很大的影响.而 Breit 相互作用和 QED 效应

虽然对能级结构和跃迁概率影响很小,但却起到进一步优化作用.另外,弛豫效应对跃迁概率的影响也很明显.

- [1] Luo D , Pradhan A K 1989 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **22** 3377
- [2] Ellis D G 1993 *Phys. Rev. A* **47** 161
- [3] Bell K L , Ramsbottom C A , Hibbert A 1992 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **25** 1735
- [4] Bell K L , Hibbert A , Stafford R P 1995 *Phys. Scr.* **52** 240
- [5] Yuan P , Liu X S , Zhang Y J , Xie L Y , Dong C Z 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2495 (in Chinese) [袁萍、刘欣生、张义军、颜录有、董晨钟 2002 物理学报 **51** 2495]
- [6] Milosavljevic V , Djenize S 1997 *Bull. Astron. Belgrade* **156** 43
- [7] Yang Z H , Wang Y D , Ma X W , Xu Q , Zhao M C , Liu H P 1994 *J. At. Mol. Phys.* **11** 147 (in Chinese) [杨治虎、王友德、马新文、徐谦、赵孟春、刘惠萍 1994 原子与分子物理学报 **11** 147]
- [8] Yuan P , Liu X S , Zhang Y J , Qie X S 2003 *The 12th International Conference on Atmospheric Electricity , Versailles , Paris , June* 565
- [9] Baldwin J A , Verner E M , Verner D A , Ferland G J , Martin P G , Korista K T , Rubin R H 2000 *Astrophys. J. Suppl. S.* **129** 229
- [10] Liu X W , Luo S G , Barlow M J , Danziger I J , Storey P J 2001 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **327** 141
- [11] Luo S G , Liu X W , Barlow M J 2001 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **326** 1049
- [12] Dempsey J T , Storey J W V , Phillips A 2005 *Publ. Astron. Soc. Aust.* **22** 91
- [13] Tsamis Y G , Barlow M J , Liu X W , Storey P J , Danziger I J 2004 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **353** 953
- [14] Mar S , Perez C , Gonzalez V R , Gigosos M A , del Val I J A , de la Rosa I , Aparicio J A 2000 *Astron. Astrophys. Suppl. Ser.* **144** 509
- [15] Cowan R D 1981 *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (London :University of California Press) p128
- [16] Dong C Z , Fritzsche S , Fricke B , Fricke B , Sepp W D 2001 *Phys. Scr.* **T92** 294
- [17] Dong C Z , Fritzsche S 2005 *Phys. Rev. A* **72** 012507
- [18] Yuan P , Liu X S , Zhang Y J , Xie L Y , Dong C Z 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 561 (in Chinese) [袁萍、刘欣生、张义军、颜录有、董晨钟 2003 物理学报 **52** 561]
- [19] Biemont E 1997 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **30** 4207
- [20] Fritzsche S , Fischer C F , Dong C Z 2000 *Comput. Phys. Commun.* **124** 340
- [21] Parpia F A , Fischer C F , Grant I P 1996 *Comput. Phys. Commun.* **94** 249
- [22] Dong C Z , Fritzsche S 2006 *Eur. Phys. J. D* **40** 317
- [23] Wiese W L , Fuhr J R , Deters T M 1996 *J. Phys. Chem. Ref. Data , Monograph 7.* (New York :AIP)

Theoretical research on radiative transition probabilities of $2p4f-2p3d$ for $N II$ *

Shen Xiao-Zhi¹⁾ Yuan Ping^{1)†} Li Ji-Guang¹⁾ Dong Chen-Zhong¹⁾ Xie Lu-You¹⁾ Shi Ying-Long¹⁾

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

²⁾ *Cold and Arid Regions Environmental and Engineering Research Institute, Chinese Academy of Sciences, Lanzhou 730000, China*

(Received 30 December 2006; revised manuscript received 1 February 2007)

Abstract

On the basis of full relativistic theory, transition probabilities of $2p4f-2p3d$ for $N II$ have been calculated using multi-configuration Dirac-Fock method. The results are well consistent with experimental value. In the present work, the influence of relativistic effects, electron correlation, relaxation effects, Breit interaction and quantum electrodynamic effects on fine structure and transition probabilities are investigated in detail. The results show that the relativistic effects, electron correlation and relaxation effects are important to the calculations of energy structure and transition probabilities.

Keywords : $N II$ ion, transition probabilities, multi-configuration Dirac-Fock method

PACC : 3120T, 3270F

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No.40475007).

† Corresponding author. E-mail : yuamp@nwnu.edu.cn