

电子相关对 Xe^{10+} 离子 $4d^8-4d^75p$ 跃迁系跃迁概率的影响*

高 城† 沈云峰 曾交龙

(国防科技大学理学院, 长沙 410073)

(2007 年 9 月 10 日收到, 2007 年 10 月 19 日收到修改稿)

应用多组态 Dirac-Fock(MCDF)方法对 Xe^{10+} 离子进行了理论计算, 获得了跃迁波长和概率等数据. 通过逐步引入 $4d^n-5p^n$ ($n=1, 2, 3$) 电子相关的相互作用组态, 重点研究了电子相关效应对 $4d^8-4d^75p$ 跃迁系跃迁概率的影响. 结果显示电子相关效应显著, 表明了欲得到精确的 $4d^8-4d^75p$ 的振子强度(跃迁概率)数据, 理论计算中至少要包括到 $4d^2-5p^2$ 的电子相关组态的影响. 与实验测得的跃迁波长比较发现, 理论结果与之有着较好的一致性; 同时理论跃迁概率在两种规范下的结果符合得相当精确, 显示了计算结果的可靠性.

关键词: 多组态 Dirac-Fock(MCDF)方法, 电子相关, 跃迁概率

PACC: 3120T, 3270C

1. 引言

微电子技术的飞速发展, 对下一代光刻技术 NGL(next generation lithography)提出了更高的要求. 其中, 极端远紫外光刻技术 EUVL(extreme ultraviolet lithography)在各种光刻技术中最为引人注目. 发射波长为 13.5 nm 的 EUV 光源, 是比较理想的选择. 因为该光源一方面能够匹配常用的半导体材料 Mo/Si 多层结构的光学特性(其垂直反射时的反射率可以达到 65.5%); 另一方面能够把光刻扩展到 32 nm 以下的特征尺寸^[1]. 激光产生和气体放电产生的氙和锡的等离子体被认为是制造 EUV 光源的最佳材料. 这两种材料作为 EUV 光源各有优点, 实验和理论上对氙和锡的等离子体的研究较多^[2-7]. 因为氙在室温下为气体, 不会对光刻的工作表面造成污染, 具有很好的清洁性, 而且其转换效率也比较适中, 所以被认为是作为 EUV 光源很有前景的材料.

因此, 研究者围绕氙等离子体及其各价离子展开了大量的工作^[8-14]. 例如, Fahy 等人^[9]利用 NIST 的电子束离子阱(EBIT)研究了氙等离子体的 EUV 发射特性; Klosner 等人^[10]和 Gilleron 等人^[11]分别对

气体放电和激光产生的氙等离子体的 5—20 nm 和 10—14 nm 波长范围的发射谱进行了研究. 最近, Churilov 等人^[12,13]获得了 Xe^{9+} 和 Xe^{10+} 离子一些主线跃迁的原子数据. 这些理论和实验的研究表明, 波长为 13.5 nm 处的发射主要是由 Xe^{10+} 离子的 $4d-5p$ 跃迁引起的, 而发射最强的 $4d-4f$ 跃迁则位于 11 nm 处. 对实验得到的氙等离子体谱线的证认以及为了研究能够产生最适合 EUV 发射的氙等离子体条件, 需要一整套大量精确的原子参数, 如能级、振子强度和电子碰撞截面等. 而目前有关氙的各价离子的理论和实验数据还不很完整, 特别是对 EUVL 有重要研究价值的 Xe^{10+} 离子.

文献 [12] 给出了 Xe^{10+} 离子的 $4p^64d^8-(4p^54d^9+4d^74f+4d^75p)$ 的 200 条谱线证认, 同时理论计算了相应的能级和跃迁概率. 计算包括的组态如下:

$4s^24p^64d^8, 4s^24p^64d^75s, 4s^24p^64d^65s^2, 4s^24p^54d^9, 4s^24p^64d^7n\pi$ ($n=5, 6$) 和 $4s^24p^64d^7m\pi$ ($m=4, 5, 6$). 明显看出, 该计算包含的相互作用组态很有限, 而且考虑的电子相关效应也很不全面. 它主要包括了从价轨道激发出一个电子的相关组态, 如 $4d-5p, 4d-4f$, 而对双电子激发甚至三电子激发的相关组态, 如 $4d^2-4f^2, 4d^2-5p^2$ 以及 $4d^3-5p^3$ 的相关效应

* 国家自然科学基金(批准号: 30774191)和新世纪高校优秀人才支持计划项目资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: gao_chengzhi@hotmail.com

未作考虑.而事实上,这些电子相关的组态对 $4d^8-4d^75p$ 跃迁系振子强度的影响是很显著的,对得到精确的结果尤为重要.

如上文所述,为了获得更高精度的原子参数,本文对 Xe^{10+} 离子进行了大规模的组态相互作用的计算.重点研究了电子相关效应对和 EUVL 联系紧密的 $4d^8-4d^75p$ 跃迁系的影响,结果表明相关效应显著,同时与实验结果的比较和对理论数据的分析,表明了本文结果是可信的.

2. 理论计算方法

本文计算采用基于 Dirac-Fock 方程的原子结构计算程序 GRASP (general-purpose relativistic atomic structure program)^[15].原子状态波函数(ASF) $\Phi_a(J\pi)$ 由具有相同对称性的组态波函数(CSF)线性展开:

$$\Phi_a(J\pi) = \sum_i^{n_c} a_i(\alpha) | \gamma_i J\pi \rangle, \quad (1)$$

其中 n_c 是 CSF 的个数; $a_i(\alpha)$ 表示在这组 CSF 基下的原子状态.应用该程序首先计算了零阶的 Coulomb 本征矢和能级,然后得到增加了 QED 和截断项影响的高阶的能级和本征矢,计算过程中相对论效应自动地包括进来.振子强度的长度和速度表示形式分别为

$$gf_i = \frac{2\Delta E}{3} \langle | \Phi_i | \sum_{p=1}^N r_p | \Phi_f \rangle | \rangle, \quad (2)$$

$$gf_v = \frac{2}{3\Delta E} \langle | \Phi_i | \sum_{p=1}^N \nabla r_p | \Phi_f \rangle | \rangle, \quad (3)$$

其中 $\Delta E = E_i - E_f$. E_i 和 E_f 分别是初态和末态的能量. $g = 2J + 1$ 为初态的统计权重.

在对原子波函数 $\Phi_a(J\pi)$ 的线性展开式(1)中,如何选取相互作用组态,对波函数的收敛性有着重要影响^[16-18].本文重点研究组态相互作用对 $4d^8-4d^75p$ 跃迁系跃迁概率的影响,按照 $4d^n-5p^n$ ($n = 1, 2, 3$) 的不同程度的电子相关组态的选取规则选取组态.并据此设计了四种模型的计算.

首先进行单组态 Dirac-Fock 计算;接着在此基础上增加单电子激发组态: $4s^24p^64d^7nl$, $4s^24p^54d^9$, $4s^24p^54d^8nl$, $4s^14p^64d^9$, $4s^14p^64d^84f$ ($nl = 4f, 5s, 5p, 5d, 5f, 6s, 6p$); 然后再增加从 $4p, 4d$ 轨道激发的双电子激发组态如 $4p^64d^64f^2$, $4p^64d^65p^2$, $4s^24p^44d^{10}$ 等; 最后再增加由 $4d$ 轨道激发的三电子激发组态如 $4p^64d^64f^3$, $4p^64d^65p^3$ 等.以上四种模型分别记为 A,

B, C 和 D.在 D 模型的计算中,总的能级数目约为 50000.通过比较四种模型下的结果,可以显示不同程度的电子相关 $4d^n-5p^n$ ($n = 1, 2, 3$) 是如何影响 $4d^8-4d^75p$ 跃迁的原子参数的.

3. 结果和讨论

Xe^{10+} 离子的基组态为 $4s^24p^64d^8$, 其基态为 $4p_{1/2}^24p_{3/2}^44d_{3/2}^44d_{5/2}^4$.能级标记采用的是在原子状态波函数 $\Phi_a(J\pi)$ 的线性展开式(1)中,对其贡献最大的那个组态波函数所对应的相对论组态标记.为方便计,略去相对论满壳层的表示,简记为 $4d_{5/2}^4$,下文中的能级标识同此方法.

表 1 列出的是在上述四种模型下 Xe^{10+} 离子基态 $4d_{5/2}^4$ 的绝对能量.从表 1 可以看出,随着组态规模的扩大,组态间的相互作用增强,基态的绝对能量逐渐优化,趋于稳定.相比于单组态计算(模型 A),增加了单电子激发组态的模型 B 的结果,基态能量降低了约 3 eV; 而增加了双电子激发组态之后(模型 C),基态能量在模型 B 的基础上又降低了 3 eV; 最后我们注意到,相比于模型 C,模型 D 计算的基态能量基本无变化,说明基态能量已经收敛.由此可见,双电子激发组态对 Xe^{10+} 离子的基态能量优化起着非常重要的作用.

表 1 四种模型下 Xe^{10+} 离子基态的绝对能量

模型	绝对能量/ 10^5 eV
A	-2.0159291851
B	-2.0159512775
C	-2.0159894254
D	-2.0159894254

由于能级数目太多,作为示例,表 2 仅给出了属于基组态 $4s^24p^64d^8$ 的能级.四个模型的结果一并给出,以观察能级的收敛情况,同时给出实验值以便比较.从表 2 可以看出,从模型 A 到模型 D 的计算,随着组态规模的扩大,组态相互作用增强,能级逐步优化,和实验值符合得越来越精确.其中,比较模型 C 和 D 的结果可知, C 的结果已经收敛.同时应该注意到,在不同组态规模下,部分能级出现了“倒置”现象:如模型 A 和 B 中的能级 2 和 3($4d_{5/2}^4$)₂ 和 ($4d_{3/2}^4$)_{3/2}($4d_{5/2}^4$)_{3/2}).在扩大组态规模,引入足够的电子相关的影响后,这种“倒置”现象得以消除,与实验结果一致.同样,组态相互作用对激发态能级的收

敛作用与此相仿。

综合表 1 和表 2 结论可以看出, 激发电子组态, 特别是双电子激发态和三电子激发态对于 Xe^{10+} 离子能级的收敛性有很大影响。为了得到与实验相符的、正确的结果, 需要引入足够的相互作用组态, 考虑充分的电子相关的影响。

表 2 Xe^{10+} 离子基组态的能级的理论和实验结果

能级序号	能级标识	A	B	C	D	实验值 ^[12]
1	$(4d_{5/2}^4)_4$	0.00	0.00	0.00	0.00	0.00
2	$(4d_{5/2}^2)_2$	1.88	1.92	1.73	1.73	1.63
3	$((4d_{3/2}^3)_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{3/2})_3$	1.83	1.87	1.86	1.86	1.89
4	$((4d_{3/2}^3)_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{3/2})_2$	3.57	3.66	3.45	3.45	3.31
5	$(4d_{5/2}^4)_4$	4.59	4.78	4.31	4.31	3.99
6	$((4d_{3/2}^3)_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{3/2})_1$	4.80	4.92	4.58	4.58	4.29
7	$((4d_{3/2}^3)_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{3/2})_4$	5.54	5.48	5.39	5.39	5.06
8	$(4d_{5/2}^2)_2$	5.62	5.72	5.43	5.43	5.32
9	$(4d_{5/2}^4)_4$	12.14	13.17	11.46	11.46	10.93

注: 能级单位为 eV。

同样, 组态相互作用、电子相关对 $4d^8-4d^75p$ 跃迁的振子强度(跃迁概率)的影响也非常显著。作

表 3 四种模型下 Xe^{10+} 离子 $4d^8-4d^75p$ 的跃迁概率的长度和速度表示结果的收敛情况

跃迁标识		跃迁概率								文献 [12]
		A		B		C		D		
高态	低态	V	L	V	L	V	L	V	L	
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{3/2}5p_{1/2})_3$	7	38.23	29.32	53.47	61.47	53.01	54.24	50.51	50.24	35.2
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}5p_{3/2})_3$	7	28.07	28.10	36.17	39.38	33.96	35.78	38.42	37.73	49.2
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{3/2}5p_{3/2})_1$	6	10.14	9.35	5.29	5.86	7.71	8.04	12.75	12.51	9.3
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{3/2}5p_{3/2})_3$	4	21.97	22.14	15.15	17.21	19.44	20.73	21.56	21.67	13.0
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{3/2}5p_{3/2})_3$	4	18.83	18.20	7.08	8.13	23.88	21.3	19.56	19.67	28.3
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{3/2}5p_{1/2})_4$	3	56.82	55.44	42.34	47.13	54.44	58.22	47.14	47.35	58.1
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{1/2}5p_{1/2})_3$	1	70.91	69.01	63.21	65.43	61.14	65.47	45.29	45.61	62.9

注: 跃迁概率单位为 $10^{10} s^{-1}$ 。

2) 可以看出跃迁概率数值是在四种模型下不断变化, 最后逐渐趋于收敛的。仍以表 3 的第一条跃迁线为例。四种模型下, 该条跃迁线跃迁概率的速度表示结果分别为 38.23, 53.47, 53.01 和 50.51(为方便计, 省去单位 $\times 10^{10} s^{-1}$, 下同)。从模型 A 到模型 D 的计算, 跃迁概率有一个明显收敛的过程。表 3 其余跃迁谱线的跃迁概率也有类似的收敛情况。对表 3 的分析表明: 对 $4d^8-4d^75p$ 跃迁系, 为得到收敛的能级、振子强度, 电子相关的影响至少要考虑到

为示例, 表 3 给出了四种模型下计算的 $4d^8-4d^75p$ 跃迁的部分谱线的跃迁概率。其中 V 和 L 分别是跃迁概率的速度和长度表示结果; 第二列中数字表示跃迁中的低态, 与表 2 中基组态能级的顺序号码一致。如表 3 中的第一条跃迁线的低态“7”与表 2 中的能级序号“7”一致, 表示的能级为 $((4d_{3/2}^3)_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{3/2})_4$, 所以该跃迁线为 $((4d_{3/2}^3)_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{3/2}5p_{1/2})_3 - ((4d_{3/2}^3)_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{3/2})_4$ 。文献 [12] 的结果列在最后一列, 以便比较。

比较四种模型下跃迁概率的结果, 容易看出:

1) 四种模型下, 跃迁概率的长度和速度表示结果的符合程度越来越精确。以表 3 所列第一条跃迁线 $((4d_{3/2}^3)_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{3/2}5p_{1/2})_3 - 7$ 为例 $((4d_{3/2}^3)_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{3/2}5p_{1/2})_3 - ((4d_{3/2}^3)_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{3/2})_4$ 。在四种模型下, 跃迁概率的长度和速度表示值的相对差分别为 30.39%, -13.01%, -2.27% 和 0.5%。表明了随着相互作用组态规模的不断扩大, 电子相关 $4d^n-5p^n$ 的影响逐步引入, 波函数得以优化, 因而计算结果也越来越精确。在 D 模型下, 跃迁概率的长度和速度表示的符合程度相当高, 相对误差不超过 1%, 可以认为 D 模型的计算结果已基本收敛。

$4d^2-5p^2$ 的程度。

值得注意的是, D 模型的计算结果与文献 [12] 的结果存在较大的差别。以表 3 所示第一条谱线 $((4d_{3/2}^3)_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{3/2}5p_{1/2})_3 - ((4d_{3/2}^3)_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{3/2})_4$ 为例。本文的长度表示结果为 50.24, 而文献 [12] 的相应值为 35.2, 二者相对差约为 14.2%。而对表 3 所列的第四条谱线 $((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{3/2}5p_{3/2})_3 - ((4d_{3/2}^3)_{3/2}(4d_{5/2}^3)_{3/2})_2$, 二者相对差甚至达到了 -66.69%(分别为 21.67 和 13.0)。表 3 所列其余谱线的跃迁概率

与文献 [12] 结果的相对差也都在 18% 以上.

仔细分析可以发现, 文献 [12] 的大部分结果与本文 B 和 C 模型的结果最为接近. 例如, 对表 3 所列的文献 [12] 的最强跃迁 ($((4d_{3/2}^3)_{3/2} 4d_{5/2}^4)_{1/2} 5p_{1/2})_3 - (4d_{5/2}^4)_4$), 其跃迁概率为 62.9. 与之相应的四种模型下, 其跃迁概率的速度表示值分别为 70.91, 63.21, 61.14 和 45.29. 可见, B 模型的结果 63.21 与文献 [12] 最为接近. 这是因为, 如前文所示, 文献 [12] 所用组态的规模介于本文的 B 和 C 规模之间. 在对原子状态波函数 $\Phi_\alpha(J\pi)$ 的线性展开式 (1) 中, 截断项相似, 波函数精度相仿, 故而所得跃迁的振子强度 (跃迁概率) 值接近. 由以上讨论可

以看出, D 模型下跃迁概率的结果基本收敛, 比文献 [12] 更为可信.

表 4 列出了与文献 [12] 有对应的 $4d^8-4d^75p$ 的跃迁波长和概率, 采用的是可信度最高的 D 模型计算值. 表 4 第二列对跃迁低态的数字表示与表 3 的意义相同. 为了便于与实验波长比较, 理论跃迁能量系统地降低了 0.7 eV. 跃迁概率分别列出了本文结果的速度、长度表示以及文献 [12] 的结果. 最后一列为本文结果的长度和速度表示形式的相对误差. 可以看出, 最大误差不超过 7%, 其中绝大多数误差在 5% 以内. 说明二者符合的精度很高, 显示了本文结果的可靠性.

表 4 Xe^{10+} 离子 $4d^8-4d^75p$ 的跃迁波长和概率

跃迁		波长/nm		跃迁概率/ $10^{10} s^{-1}$			相对差/%
高态	低态	本文工作	实验值 ^[12]	V	L	文献 [12]	
$((4d_{3/2}^3)_1 4d_{5/2}^4)_{3/2} 5p_{3/2})_3$	1	11.845	11.929	2.549	2.651	2.8	3.8
$((4d_{3/2}^3)_3 4d_{5/2}^4)_{3/2} 5p_{3/2})_2$	3	12.215	12.290	2.587	2.688	3.2	3.8
$((4d_{3/2}^3)_3 4d_{5/2}^4)_{3/2} 5p_{3/2})_3$	7	12.740	12.761	15.53	15.68	13.6	1.0
$(4d_{3/2} 5p_{3/2})_2$	3	12.762	12.808	2.81	2.677	1.4	-0.5
$(4d_{3/2} 5p_{3/2})_2$	4	12.870	12.998	2.821	2.645	2.0	-6.7
$(4d_{3/2} 5p_{3/2})_2$	3	12.910	12.964	2.639	2.667	3.3	1.0
$((4d_{3/2}^2)_2 4d_{5/2}^4)_{7/2} 5p_{3/2})_4$	3	12.965	13.148	3.502	3.559	3.2	1.6
$((4d_{3/2}^2)_2 4d_{5/2}^4)_{3/2} 5p_{3/2})_3$	1	12.979	13.008	6.591	6.911	5.8	-0.6
$((4d_{3/2}^2)_3 4d_{5/2}^4)_{3/2} 5p_{3/2})_2$	3	13.000	13.044	6.359	6.307	7.8	-0.8
$((4d_{3/2}^2)_2 4d_{5/2}^4)_{3/2} 5p_{3/2})_1$	2	13.050	13.068	2.949	2.993	2.1	1.5
$((4d_{3/2}^2)_3 4d_{5/2}^4)_{3/2} 5p_{3/2})_4$	1	13.077	13.106	2.851	2.704	2.9	-5.4
$((4d_{3/2}^2)_3 4d_{5/2}^4)_{3/2} 5p_{3/2})_1$	4	13.082	13.128	4.219	4.156	5.0	-1.5
$((4d_{3/2}^2)_2 4d_{5/2}^4)_{3/2} 5p_{3/2})_3$	2	13.093	13.116	2.837	2.933	2.2	3.3
$((4d_{3/2}^2)_3 4d_{5/2}^4)_{3/2} 5p_{3/2})_2$	4	13.106	13.132	4.647	4.839	5.1	4.0
$((4d_{3/2}^2)_1 4d_{5/2}^4)_{3/2} 5p_{1/2})_3$	7	13.107	13.152	50.51	50.24	35.2	-0.5
$((4d_{3/2}^2)_1 4d_{5/2}^4)_{3/2} 5p_{1/2})_3$	8	13.112	13.187	11.1	11.18	12.4	0.7
$(4d_{3/2} 5p_{3/2})_2$	6	13.129	13.016	5.52	5.514	5.9	-0.1
$((4d_{3/2}^2)_1 4d_{5/2}^4)_{3/2} 5p_{1/2})_2$	8	13.140	13.157	4.414	4.142	5.9	-6.6
$((4d_{3/2}^2)_3 4d_{5/2}^4)_{3/2} 5p_{3/2})_3$	1	13.148	13.173	12.93	12.93	9.0	0.0
$((4d_{3/2}^2)_3 4d_{5/2}^4)_{3/2} 5p_{3/2})_3$	1	13.151	13.171	5.865	5.999	6.7	2.2
$(4d_{3/2} 5p_{3/2})_3$	6	13.195	13.198	5.265	5.071	4.9	-3.8
$((4d_{3/2}^2)_2 4d_{5/2}^4)_{3/2} 5p_{3/2})_3$	4	13.228	13.266	21.56	21.67	13.0	0.5
$((4d_{3/2}^2)_3 4d_{5/2}^4)_{3/2} 5p_{3/2})_4$	1	13.230	13.251	4.588	4.682	5.2	2.0
$((4d_{3/2}^2)_2 4d_{5/2}^4)_{3/2} 5p_{3/2})_3$	3	13.236	13.270	5.994	5.96	6.3	-0.6
$(4d_{3/2} 5p_{3/2})_2$	8	13.249	13.278	7.864	8.094	6.1	2.8
$((4d_{3/2}^2)_3 4d_{5/2}^4)_{3/2} 5p_{3/2})_3$	3	13.270	13.304	4.379	4.397	1.3	0.4
$(4d_{3/2} 5p_{3/2})_2$	6	13.286	13.298	12.78	12.83	16.9	0.4
$((4d_{3/2}^2)_3 4d_{5/2}^4)_{1/2} 5p_{1/2})_3$	1	13.319	13.469	2.096	2.217	2.4	5.5

续表 4

跃迁	波长/nm		跃迁概率/ $10^{10} s^{-1}$			相对差/%	
	高 态	低 态	本文工作	实验值 ^[12]	V		L
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{1/2}5p_{3/2} \lambda$	2	13.338	13.351	11.96	11.89	8.6	-0.6
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{3/2}5p_{3/2} \lambda$	8	13.363	13.412	7.805	7.767	7.6	-0.5
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{3/2}5p_{3/2} \lambda$	7	13.368	13.366	31.22	31.32	27.3	0.3
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{3/2}5p_{3/2} \lambda$	3	13.375	13.404	24.23	24.05	29.8	-0.8
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{3/2}5p_{1/2} \lambda$	2	13.389	13.458	13.67	13.43	19.5	-1.8
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}5p_{1/2} \lambda)$	1	13.404	13.424	36.67	36.37	38.2	-0.8
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}5p_{3/2} \lambda)$	3	13.412	13.520	2.454	2.407	3.4	-1.9
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}5p_{3/2} \lambda)$	1	13.437	13.522	10.16	10.10	10.6	-0.6
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}5p_{3/2} \lambda)$	2	13.438	13.484	18.22	18.17	14.4	-0.3
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{3/2}5p_{3/2} \lambda)$	9	13.444	13.475	18.29	18.45	20.2	0.9
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{1/2}5p_{3/2} \lambda)$	8	13.445	13.493	14.77	14.47	16.4	-2.0
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{3/2}5p_{3/2} \lambda)$	3	13.452	13.496	16.53	16.43	13.2	-0.6
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{3/2}5p_{1/2} \lambda)$	3	13.466	13.498	47.14	47.35	58.1	0.4
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{1/2}5p_{1/2} \lambda)$	1	13.476	13.507	45.29	45.61	62.9	0.7
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{1/2}5p_{3/2} \lambda)$	4	13.493	13.530	17.75	17.64	14.9	-0.6
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{1/2}5p_{3/2} \lambda)$	4	13.500	13.510	19.56	19.67	28.3	0.5
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{1/2}5p_{3/2} \lambda)$	3	13.502	13.600	10.75	10.66	9.1	-0.9
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{3/2}5p_{3/2} \lambda)$	8	13.513	13.557	9.259	9.397	11.3	1.5
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}5p_{1/2} \lambda)$	2	13.521	13.533	20.64	20.7	23.6	0.3
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{1/2}5p_{3/2} \lambda)$	4	13.525	13.516	3.163	3.142	4.0	-0.7
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}5p_{3/2} \lambda)$	2	13.529	13.532	6.36	6.32	9.6	-0.6
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{1/2}5p_{3/2} \lambda)$	1	13.569	13.561	37.09	37.09	31.5	0.0
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{3/2}5p_{1/2} \lambda)$	3	13.593	13.621	26.56	25.99	26.8	-2.2
$(4d_{3/2}5p_{1/2} \lambda)$	5	13.611	13.632	4.2	4.33	4.0	3.1
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{3/2}5p_{3/2} \lambda)$	4	13.623	13.667	8.254	8.149	9.9	-1.3
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}5p_{3/2} \lambda)$	1	13.631	13.626	10.56	10.42	11.8	-1.4
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{3/2}5p_{1/2} \lambda)$	7	13.641	13.640	3.18	3.149	3.71	-1.0
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{3/2}5p_{1/2} \lambda)$	2	13.653	13.619	6.499	6.381	5.5	-1.8
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}5p_{1/2} \lambda)$	3	13.679	13.703	3.26	3.32	2.5	1.9
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{3/2}5p_{1/2} \lambda)$	1	13.771	13.779	9.481	9.276	13.1	-2.2
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{3/2}5p_{3/2} \lambda)$	6	13.793	13.819	12.75	12.51	9.3	-1.9
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{1/2}5p_{3/2} \lambda)$	7	13.866	13.846	10.67	10.51	19.1	-1.5
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{3/2}5p_{1/2} \lambda)$	9	13.890	13.889	2.046	1.934	2.5	-5.8
$((4d_{3/2}^3)_{3/2}4d_{5/2}^4)_{1/2}5p_{3/2} \lambda)$	6	13.914	13.905	7.561	7.607	11.6	0.6

4. 结 论

氙等离子体是 EUV 光源的重要的备选材料之一. 各价氙离子中, 与 EUV 光源的波长要求相符的

主要来自 Xe^{10+} 离子 $4d-5p$ 跃迁, 所以精确的 Xe^{10+} 离子参数对 EUV 光源的研究具有重要意义. 本文通过对 Xe^{10+} 离子不同组态规模计算结果比较, 讨论了组态相互作用对 Xe^{10+} 离子原子参数的影响, 重点研究了不同程度的电子相关 $4d^n-5p^n$ ($n=1, 2, 3$)

对 $4d^8-4d^75p$ 跃迁概率的影响. 与实验波长比较发现 跃迁线的理论波长与其有较好的一致性. 而与文献 [12] 计算的跃迁概率相比, 二者有较大差异. 而本文计算的跃迁概率在两种规范下的相对差在 7% 以内, 而且在随着不同程度的电子关联影响的引入, 跃

迁概率逐步趋于收敛. 分析表明, 欲得到收敛的 $4d^8-4d^75p$ 跃迁系的原子参数, 理论计算至少需要包括到 $4d^2-5p^2$ 甚至 $4d^3-5p^3$ 的电子相关组态. 比较的结果表明了本文得到的波函数是很精确的, 同时跃迁概率的结果较文献 [12] 更为可信.

- [1] Xie C Q , Ye T C 2001 *Semiconductor Information* **38** 28 (in Chinese) [谢常青、叶甜春 2001 半导体情报 **38** 28]
- [2] Bowering N , Martins M , Partlo W N , Fomenkov I V 2003 *J. Appl. Phys.* **95** 16
- [3] Harilal S S , Shay B O , Tillack M S , Tao Y , Paguio R , Nikroo A , Back C A 2006 *J. Phys. D : Appl. Phys.* **43** 484
- [4] Juschkin L , Chuvatin A , Zakharov S V , Ellwi S , Kunze H J 2002 *J. Phys. D : Appl. Phys.* **35** 219
- [5] Joroen Jonkers 2006 *Plasma Sources Sci. Technol.* **15** S8
- [6] Kieft E R , Garloff K , van der Mullen J J A M 2005 *Phys. Rev. E* **71** 36402
- [7] Krucken T , Bergmann K , Juschkin L , Lebert R 2004 *J. Phys. D : Appl. Phys.* **37** 3213
- [8] Zeng S L , Dong C Z , Wang J G , Li Y M , Yan J 2006 *High power laser and particle beams* **18** 491 (in Chinese) [曾思良、董晨钟、王建国、李月明、颜 君 2006 强激光与离子束 **18** 491]
- [9] Fahy K , Dunne P , McKinney L , O ' Sullivan G , Sokell E , White J , Aguilar A , Pomeroy J M , Tan J N , Blagojevic B , LeBigot E O , Gillaspay J D 2004 *J. Phys. D : Appl. Phys.* **37** 3225
- [10] Klosner M A , Silfvast W T 2000 *J. Opt. Soc. Am. B* **17** 1279
- [11] Gilleron F , Poirier M , Blenski T , Schmidt M , Ceccotti T 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 2086
- [12] Churilov S S , Joshi Y N , Reader J , Kildiyarova R R 2004 *Phys. Scr.* **70** 126
- [13] Churilov S S , Joshi Y N 2002 *Phys. Scr.* **65** 40
- [14] Akira Sasaki , Katsunobu Nishihara , Masakatsu Murakami , Fumihiko Koile , Takashi Kagawa , Takashi Nishikawa , Kazumi Fujima , Tohru Kawamura , Hiroyuki Furukawa 2004 *App. Phys. Lett.* **85** 5857
- [15] Grant I P , McKenzie B J , Norrington P H , Mayers D F , Pyper N C 1980 *Compt. Phys. Commun.* **21** 207
- [16] Zhao Z X , Li J M 1985 *Acta Phys. Sin.* **34** 1469 (in Chinese) [赵中新、李家明 1985 物理学报 **34** 1469]
- [17] Xie L Y , Dong C Z , Ma X W , Yuan P , Yan J , Qu Y Z 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1965 (in Chinese) [颌录有、董晨钟、马新文、袁萍、颜 君、曲一至 2002 物理学报 **51** 1965]
- [18] Mu Z D , Wei Q Y 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1742 (in Chinese) [牟致栋、魏琦瑛 2004 物理学报 **53** 1742]

Electron correlation effects on transition probabilities from $4d^8—4d^75p$ of Xe^{10+} *

Gao Cheng[†] Shen Yun-Feng Zeng Jiao-Long

(*Department of Physics , National University of Defense Technology , Changsha 410073 , China*)

(Received 10 September 2007 ; revised manuscript received 19 October 2007)

Abstract

The atomic data such as energy levels and transition probabilities of Xe^{10+} have been obtained basing on multi-configuration Dirac-Fock (MCDF) method. The electron correlation effects on transition probabilities of $4d^8—4d^75p$ have been investigated by adding the electron correlation of $4d^n—5p^n$ ($n = 1 , 2 , 3$) step by step , which shows the effects are so obvious that one should include at least up to the correlation of $4d^2—45p^2$ to get a convergent result. The calculated wavelengths are in good accordance with the experimental ones. The agreement between the length and velocity forms of transition probabilities is excellent , which shows the atomic wavefunction is accurate and the present result is reliable.

Keywords : multi-configuration Dirac-Fock (MCDF) method , electron correlation , transition probabilities

PACC : 3120T , 3270C

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10774191) and the Program for New Century Excellent Talents in University (NCET).

[†] Corresponding author. E-mail : gao_chengzhi@hotmail.com