

相对论效应对类锂离子能级结构及辐射跃迁性质的影响*

刘尚宗 颌录有[†] 丁晓彬 董晨钟

(甘肃省原子分子物理与功能材料重点实验室, 西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070)

(2011年9月30日收到; 2012年2月22日收到修改稿)

利用基于多组态 Dirac-Hartree-Fock(MCDHF) 理论方法的相对论原子结构计算程序包 GRASP2K, 细致计算了中性锂原子、类锂 Be^+ , C^{3+} , O^{5+} , Ne^{7+} , Ar^{15+} , Fe^{23+} , Mo^{39+} , W^{71+} 及 U^{89+} 离子基组态及较低的激发组态 $1s^2nl$ ($n = 2-4$, $l = s, p, d, f$) 的精细结构能级, 以及各能级间发生电偶极 (E1) 自发辐射跃迁的能量、概率及振子强度. 同时, 在非相对论极限下, 计算了其相关原子参数. 通过对相对论及非相对论计算结果比较, 系统研究了相对论效应对类锂等电子系列离子能级结构及 E1 跃迁性质的影响, 揭示了随原子核电荷数 Z 变化时, 跃迁能、振子强度强烈依赖于量子数 n, l, j 变化的规律; 同时, 目前的计算结果与其他已有的理论计算及实验测量结果进行了比较.

关键词: MCDHF 方法, 等电子系列, 跃迁能, 振子强度

PACS: 31.15.am, 31.30.jc, 32.70.Cs

1 引言

高电荷态离子能级结构和辐射跃迁性质的研究是近几十年来原子物理研究的重要内容, 尤其是对于等电子系列离子和等核系列离子的系统研究, 不仅对于揭示原子内部的基本物理规律有重要意义, 同时高精度的能谱数据在天体物理、等离子体物理以及激光物理等研究中有重要的应用^[1-7]. 类锂等电子系列离子是除类 He 之外最简单的多电子体系, 由于其特殊的“原子实 + 价电子”结构, 且原子实与价电子间的关联比较强^[8], 因此已成为系统研究原子内部电子关联效应^[9,10]、相对论效应^[6,7,9]、量子电动力学 (QED) 效应^[9-12] 以及原子核效应 (如超精细结构、同位素位移)^[9] 等重要原子体系, 并被用于检验各种理论计算. 另外, 在天体物理、热核聚变的研究中, 人们已经观测到了大量高电荷态类锂离子的光谱, 这些谱线作为类氦离子的伴线出现, 为高温等离子体温度、密度的诊断提供了重要的诊断参数^[13,14].

对于高电荷态的类锂离子, 随着原子核电荷数 Z 的增加, 相对论效应、QED 效应以及原子核

效应等的影响将变得越来越重要^[9,15]. 为了系统研究这些效应对其能级结构和动力学性质的影响, 并提供实验和应用研究所需的高精度原子参数, 已有大量的针对不同电荷态的类锂离子的理论计算^[6,7,9,11,16,17] 及实验测量^[18,19] 方面的工作. 例如, 理论方面, Armstrong L 等人^[6] 利用 MCDF 方法计算了锂原子及其等电子系列离子 Be^+ , B^{2+} , C^{3+} , N^{4+} , O^{5+} , F^{6+} , Ne^{7+} , Ar^{15+} , Fe^{23+} , Mo^{39+} , W^{71+} 及 U^{89+} $2s_{1/2}-2p_{1/2,3/2}$, $2s_{1/2}-3p_{1/2,3/2}$, $2p_{1/2}-3d_{3/2}$ 和 $2p_{3/2}-3d_{3/2,5/2}$ 的跃迁能和振子强度, Kim 等人^[7] 利用 Hartree-Fock 方法计算了类锂的 N^{7+} , Mo^{39+} 和 W^{71+} 等电子系列离子 $2s_{1/2}-2p_{1/2,3/2}$ 及 $2s_{1/2}-3p_{1/2,3/2}$ 跃迁的振子强度, Theodosiou 等人^[11] 利用半经验库仑近似方法计算了 $2s_{1/2}-2p_{1/2,3/2}$ 的跃迁能和振子强度, Fulton 等人^[16] 利用 Dirac-Fock 方法计算了锂原子 $2s_{1/2}-2p_{1/2,3/2}$ 的跃迁能和振子强度, Cheng 等人^[17] 利用 MCDF 方法计算了类锂等电子系列离子 ($Z = 3-30, 35, 36, 41, 42, 48, 53, 54, 59, 64, 69, 74, 79, 80, 82, 92$) $2s_{1/2}-2p_{1/2}$ 跃迁的振子强度, Bieroń 等人^[9] 利用 MCDF 方法计算了 Be^+ 和 F^{6+}

* 国家自然科学基金 (批准号: 10875017, 10876028, 10964010, 91126007) 和甘肃省高等学校科研业务费专项基金资助的课题.

[†] E-mail: xiely@nwnu.edu.cn

的基态及 Be^+ 最低的两个激发态的超精细结构常数; 实验方面, Pegg 等人 [18] 利用束箔光谱技术测量了类锂和类铍铁离子涉及 L 壳层价电子 $\Delta n = 0$ 跃迁的辐射寿命和振子强度, Dietrich 等人 [19] 测量了类锂的 Fe^{23+} 离子 $2s^2S_{1/2}-2p^2P_{1/2,3/2}^0$ 跃迁振子强度的值. 这些研究主要涉及类锂离子基态及 $n = 2$ 和 $n = 3$ 激发态的能级结构和辐射性质, 对 $n > 3$ 的激发态的研究非常少, 然而这些较高的激发态, 甚至是一些双激发态的能谱在天体光谱的模拟以及等离子体状态的诊断中同样非常重要 [13,20].

本文利用基于 MCDHF 理论方法 [21-24] 的相对论原子结构计算程序包 GRASP2K [25], 通过细致考虑电子关联效应, 详细计算了中性锂原子、类锂 Be^+ , C^{3+} , O^{5+} , Ne^{7+} , Fe^{23+} , Mo^{39+} , W^{71+} 及 U^{89+} 离子基态及涉及 $1s^2nl(n = 2-4, l = s, p, d, f)$ 激发组态所有的精细结构能级, 以及各能级间发生电偶极 (E1) 跃迁的跃迁能、概率及振子强度. 并在非相对论极限下计算了其相关的原子参数. 通过对相对论和非相对论结果比较, 重点研究了相对论效应对辐射跃迁能和振子强度的影响, 揭示了随类锂等电子系列变化时, 跃迁能和振子强度依赖于核电荷数 Z 以及辐射跃迁初、末态量子数 n, l, j 变化的基本规律; 同时, 将目前的计算结果与其他理论计算及实验测量结果进行了比较.

2 理论方法

2.1 能级和波函数的计算

有关 MCDHF 理论方法及 GRASP2K 程序包, 文献 [24,25] 已有详细描述. 在该理论方法中, 一个核电荷数为 Z 、具有 N 个电子的原子 (或离子) 的 Dirac-Coulomb 哈密顿量可以表示为 (原子单位)

$$\hat{H}^{\text{DC}} = \sum_{i=1}^N \left(c\hat{\alpha} \cdot \hat{p}_i + (\beta - 1)c^2 + V_{\text{nuc}}(\hat{r}_i) \right) + \sum_{i<j}^N |\hat{r}_i - \hat{r}_j|^{-1}, \quad (1)$$

其中第一个求和项来自单电子的贡献, 包括了电子的动能和电子与核的势能 $V_{\text{nuc}}(\hat{r}_i)$, 第二项来自电子与电子的相互作用. $\hat{\alpha}$ 和 β 为 Dirac 矩阵, \hat{p}_i 是第 i 个电子的动量算符, c 是真空中光速.

原子态的波函数 $|\Psi(PJM)\rangle$ 由具有相同宇

称 P 、总角动量 J 和 z 分量 M 的组态波函数线性组合而成, 即

$$|\Psi(PJM)\rangle = \sum_{r=1}^{n_c} C_r(\alpha) |\Gamma_r(PJM)\rangle, \quad (2)$$

其中, n_c 为组态波函数的个数, $C_r(\alpha)$ 为组态混合系数, $|\Gamma_r(PJM)\rangle$ 为组态波函数, 它由单电子自旋轨道波函数乘积构成的 N 阶 Slater 行列式线性组合而成 [21,26]. 具体计算中, 利用活动空间 (active space) [21,27] 方法来系统扩大组态基 (Base), 电子的关联效应可以被很好地考虑.

单电子的自旋轨道波函数可以表示为

$$\psi_{n\kappa m} = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} P_{n\kappa}(r)\chi_{\kappa m}(\theta, \phi) \\ iQ_{n\kappa}(r)\chi_{-\kappa m}(\theta, \phi) \end{bmatrix}, \quad (3)$$

其中, n 为主量子数, κ 为相对论量子数, $P_{n\kappa}(r)$ 和 $Q_{n\kappa}(r)$ 分别为径向波函数的大、小分量, $\chi_{\kappa m}(\theta, \phi)$ 为旋量球谐函数 [26]. 对于任意一个子壳层 i , 电子的径向波函数满足耦合的 Dirac 方程 [24,27]

$$\begin{aligned} & \left(\frac{d}{dr} + \frac{\kappa_i}{r} \right) P_{n_i\kappa_i}(r) - \left(2c - \frac{\varepsilon_i}{c} + \frac{Y_i(r)}{cr} \right) \\ & \times Q_{n_i\kappa_i}(r) = -\frac{\chi_i^{(P)}(r)}{r}, \\ & \left(\frac{d}{dr} - \frac{\kappa_i}{r} \right) Q_{n_i\kappa_i}(r) + \left(-\frac{\varepsilon_i}{c} + \frac{Y_i(r)}{cr} \right) \\ & \times P_{n_i\kappa_i}(r) = \frac{\chi_i^{(Q)}(r)}{r}, \end{aligned} \quad (4)$$

其中, $Y_i(r)$ 为与径向波函数有关的直接势能函数, ε_i 为能量本征值, $\chi_i^{(P)}(r)$ 和 $\chi_i^{(Q)}(r)$ 是非齐次项 [26], 包含了交换势的贡献. 这样的一组积分微分方程不能直接求解, 通常通过迭代自洽方法 (SCF) 求解. 在非相对论极限下, 即 $c \rightarrow \infty$ 时, 相对论单电子径向波函数的小分量 $Q_{n\kappa} \rightarrow 0$, 而大分量 $P_{n\kappa} \rightarrow P$, 其中 P 为满足非相对论 Schrödinger 方程的径向波函数 [21,23,28].

2.2 振子强度的计算

从初态 Ψ_i 到末态 Ψ_f 的辐射跃迁振子强度可表示为 [26]

$$f_{i \rightarrow f} = \frac{\pi c}{(2L+1)\omega^2} \left| \left\langle \Psi_i(P_i J_i M_i) \left| \hat{O}^{(L)} \right| \Psi_f(P_f J_f M_f) \right\rangle \right|^2, \quad (5)$$

其中, ω 为辐射光子的能量, $|\Psi_i(P_i J_i M_i)\rangle$ 和 $|\Psi_f(P_f J_f M_f)\rangle$ 分别为辐射跃迁初、末态的原

子态波函数, $\hat{O}^{(L)}$ 是秩为 L 的多级辐射场算符, 对于电偶极跃迁, $L = 1$. 跃迁矩阵元可进一步表示为

$$\langle \Psi_i(P_i J_i M_i) \| \hat{O}^{(L)} \| \Psi_f(P_f J_f M_f) \rangle = \sum_{r,s} c_r c_s \langle \Gamma_r(P_i J_i M_i) \| \hat{O}^{(L)} \| \Gamma_s(P_f J_f M_f) \rangle, \quad (6)$$

$$\langle \Gamma_r(P_i J_i M_i) \| \hat{O}^{(L)} \| \Gamma_s(P_f J_f M_i) \rangle = \sum_{a,b} d_{ab}^L(rs) \langle n_a \kappa_a \| \hat{O}^{(L)} \| n_b \kappa_b \rangle, \quad (7)$$

其中, $d_{ab}^L(rs)$ 为角系数^[26]. $\langle n_a \kappa_a \| \hat{O}^{(L)} \| n_b \kappa_b \rangle$ 为约化矩阵元, 可进一步表示为

$$\langle n_a \kappa_a \| \hat{O}^{(L)} \| n_b \kappa_b \rangle = \left(\frac{(2j_b + 1)\omega}{\pi c} \right)^{\frac{1}{2}} (-1)^{j_a - \frac{1}{2}} \begin{pmatrix} j_a & L & j_b \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \bar{M}_{ab}, \quad (8)$$

其中, \bar{M}_{ab} 是由 Grant 定义的辐射跃迁积分^[26].

在相对论理论框架下, E1 跃迁振子强度可以在 Babushkin 及 Coulomb 规范下计算, 在非相对论极限 ($c \rightarrow \infty$) 下, 其分别对应非相对论的长度和速度规范, 两种规范计算结果的一致性一定程度上反映了波函数计算的精确性.

3 结果与讨论

利用 GRASP2K 程序包, 在全相对论理论框架下本文首先计算了锂原子及类锂 Be^+ , C^{3+} , O^{5+} , Ne^{7+} , Ar^{15+} , Fe^{23+} , Mo^{39+} , W^{71+} 及 U^{89+} 离子基态 $1s^2 2s^2 S_{1/2}$ 及激发组态 $1s^2 2p$, $1s^2 3l (l = s, p, d)$, $1s^2 4l (l = s, p, d, f)$ 对应 14 个精细结构能级的能量以及能级间发生 E1 跃迁的跃迁能、概率及振子

强度. 同时, 选取 $c = 10000$ a.u. 计算得到了其在非相对论近似下的结果. 计算中, 对于中性的 Li 原子, 利用活动空间方法, 我们细致考虑了 $1s^2 2s$ 参考组态轨道占据电子被单、双激发直至 $5l (l = s, p, d)$ 子壳层产生共计 5174 个关联组态的影响. 对于其他类 Li 离子, 考虑了重要的 $1s^2 nl (n = 2-4, l = 0, 1, \dots, n-1)$ 及 $1s 2snp (n = 2, 3, 4)$, $1s 3snp (n = 3, 4)$ 共 50 个相对论关联组态的影响, 计算结果已基本收敛. 计算中 EOL^[25] 方法被用来对基态和较低激发态的 15 个精细结构能级及相关的电子态波函数进行了优化. 作为对目前计算结果的检验, 表 1 以 $2s_{1/2}-2p_{1/2,3/2}$, $3p_{1/2,3/2}$ 的跃迁为例, 给出了 10 个类锂离子相对论和非相对论极限下计算的跃迁能及振子强度, 并与以往已有的理论计算^[6,7,11,16,17] 及实验测量^[19] 结果进行了比较. 为了检验规范一致性, 表中同时给出了振子强度在长度和速度两种规范下的值, 分别用 L 和 V 来表示. 从表中可以看出, 对于跃迁能, 目前相对论和非相对论的计算结果与其他已有的理论计算结果^[6,11,16] 符合的都比较好, 相对偏差普遍小于 1.5%; 对于振子强度, 两种规范下相对论和非相对论的计算结果偏差均小于 2.0%, 反映了比较好的规范一致性. 与其他相对论理论^[6,7,11,16,17] 计算结果比较, 目前相对论的振子强度与其偏差普遍在 2.5% 范围内, 与实验^[19] 及 NIST^[28] 结果相比偏差小于 1.5%; 非相对论的结果与其他理论计算结果^[6,7] 符合得也很好, 偏差普遍小于 2.5%. 对于不同的类锂离子, 比较其相对论和非相对论的跃迁能和振子强度, 从表 1 中不难发现, 随着 Z 的增大, 两种理论模拟计算结果间呈现出很大的差异, 而且这种差异强烈依赖于辐射跃迁初、末态的 n, l, j 等量子数, 反映了相对论效应影响的基本规律.

表 1 $2s_{1/2}-2p_{1/2,3/2}$ 及 $2s_{1/2}-3p_{1/2,3/2}$ 跃迁相对论和非相对论的跃迁能 (a.u.) 和振子强度 (L 和 V 分别表示长度和速度规范)

离子	跃迁	跃迁能/a.u.			振子强度				
		相对论	非相对论	NIST ^(g)	相对论		非相对论		NIST ^(g)
					f_L	f_V	f_L	f_V	
	$2s_{1/2}-2p_{1/2}$	0.0678	0.0678	0.0679	0.2541	0.2584	0.2541	0.2584	0.2490
		0.0677 ^(a) 0.0677 ^(b)	0.0677 ^(a)		0.255 ^(a) 0.253 ^(b)	0.265 ^(a)	0.255 ^(a)	0.265 ^(a)	
		0.0679 ^(e)			0.2552 ^(d) 0.2472 ^(e)				
Li	$2s_{1/2}-2p_{3/2}$	0.0678		0.0679	0.5082	0.5168	0.5081	0.5168	0.4980
		0.0677 ^(a) 0.0677 ^(b)			0.511 ^(a) 0.507 ^(b)	0.524 ^(a)	0.510 ^(a)	0.523 ^(a)	
		0.0679 ^(e)			0.5104 ^(d) 0.4943 ^(e)				
	$2s_{1/2}-3p_{1/2}$	0.1399	0.1399	0.1409	0.0012	0.0011	0.0012	0.0011	0.0016
		0.140 ^(a) 0.1396 ^(b)	0.140 ^(a)		0.001 ^(a) 0.0012 ^(b)	0.001 ^(a)	0.001 ^(a)	0.001 ^(a)	
		0.1399		0.1409	0.0024	0.0022	0.0024	0.0022	0.0031
	$2s_{1/2}-3p_{3/2}$	0.140 ^(a) 0.1396 ^(b)			0.002 ^(a) 0.0024 ^(b)	0.002 ^(a)	0.002 ^(a)	0.002 ^(a)	

表 1 续

Be ⁺	2s _{1/2} —2p _{1/2}	0.1464 0.147 ^{a)} 0.1455 ^{e)}	0.1464 0.147 ^{a)}	0.1455	0.1710 0.171 ^{a)} 0.1715 ^{d)} 0.1647 ^{e)}	0.1737 0.183 ^{a)}	0.1710 0.171 ^{a)}	0.1737 0.180 ^{a)}	0.1660
	2s _{1/2} —2p _{3/2}	0.1465 0.147 ^{a)} 0.1455 ^{e)}		0.1455	0.3422 0.343 ^{a)} 0.3431 ^{d)} 0.3295 ^{e)}	0.3476 0.367 ^{a)}	0.3420 0.343 ^{a)}	0.3474 0.360 ^{a)}	0.3320
	2s _{1/2} —3p _{1/2}	0.4377 0.438 ^{a)}	0.4376 0.438 ^{a)}	0.4397	0.0261 0.026 ^{a)}	0.0253 0.024 ^{a)}	0.0261 0.026 ^{a)}	0.0253 0.025 ^{a)}	0.0277
	2s _{1/2} —3p _{3/2}	0.4377 0.438 ^{a)}		0.4397	0.0522 0.052 ^{a)}	0.0506 0.049 ^{a)}	0.0523 0.052 ^{a)}	0.0507 0.050 ^{a)}	0.0554
C ³⁺	2s _{1/2} —2p _{1/2}	0.2962 0.297 ^{a)} 0.2938 ^{e)}	0.2958 0.296 ^{a)}	0.2938	0.0969 0.097 ^{a)} 0.0974 ^{d)} 0.0941 ^{e)}	0.0958 0.107 ^{a)}	0.0969 0.097 ^{a)}	0.0958 0.104 ^{a)}	0.0952
	2s _{1/2} —2p _{3/2}	0.2968 0.297 ^{a)} 0.2943 ^{e)}		0.2943	0.1943 0.195 ^{a)} 0.1951 ^{d)} 0.1886 ^{e)}	0.1922 0.215 ^{a)}	0.1938 0.195 ^{a)}	0.1916 0.208 ^{a)}	0.190
	2s _{1/2} —3p _{1/2}	1.4558 1.46 ^{a)}	1.4550 1.46 ^{a)}	1.4583	0.0666 0.066 ^{a)}	0.0657 0.064 ^{a)}	0.0667 0.066 ^{a)}	0.0658 0.065 ^{a)}	0.0678
	2s _{1/2} —3p _{3/2}	1.4560 1.46 ^{a)}		1.4584	0.1329 0.132 ^{a)}	0.1311 0.128 ^{a)}	0.1333 0.133 ^{a)}	0.1315 0.130 ^{a)}	0.136
O ⁵⁺	2s _{1/2} —2p _{1/2}	0.4422 0.443 ^{a)} 0.4391 ^{e)}	0.4408 0.441 ^{a)}	0.4391	0.0669 0.067 ^{a)} 0.0672 ^{d)} 0.0655 ^{e)}	0.0650 0.075 ^{a)}	0.0669 0.067 ^{a)}	0.0649 0.072 ^{a)}	0.066
	2s _{1/2} —2p _{3/2}	0.4449 0.445 ^{a)} 0.4415 ^{e)}		0.4415	0.1348 0.135 ^{a)} 0.1353 ^{d)} 0.1318 ^{e)}	0.1310 0.151 ^{a)}	0.1337 0.134 ^{a)}	0.1299 0.144 ^{a)}	0.133
	2s _{1/2} —3p _{1/2}	3.0326 3.03 ^{a)}	3.0292 3.03 ^{a)}	3.0350	0.0876 0.087 ^{a)}	0.0868 0.085 ^{a)}	0.0877 0.087 ^{a)}	0.0869 0.086 ^{a)}	0.0885
	2s _{1/2} —3p _{3/2}	3.0334 3.03 ^{a)}		3.0358	0.1745 0.174 ^{a)}	0.1729 0.170 ^{a)}	0.1754 0.175 ^{a)}	0.1737 0.172	0.177
Ne ⁷⁺	2s _{1/2} —2p _{1/2}	0.5873 0.589 ^{a)} 0.5839 ^{e)}	0.5843 0.585 ^{a)}	0.5839	0.0510 0.051 ^{a)} 0.0512 ^{d)} 0.0502 ^{e)}	0.0490 0.058 ^{a)}	0.0509 0.051 ^{a)}	0.0489 0.055 ^{a)}	0.0502
	2s _{1/2} —2p _{3/2}	0.5956 0.596 ^{a)} 0.5914 ^{e)}		0.5914	0.1037 0.104 ^{a)} 0.1040 ^{d)} 0.1018 ^{e)}	0.0996 0.117 ^{a)}	0.1019 0.102 ^{a)}	0.0978 0.109 ^{a)}	0.102
	2s _{1/2} —3p _{1/2}	5.1686 5.17 ^{a)}	5.1593 5.16 ^{a)}	5.1707	0.0998 0.099 ^{a)}	0.0991 0.098 ^{a)}	0.1000 0.100 ^{a)}	0.0992 0.098 ^{a)}	0.101
	2s _{1/2} —3p _{3/2}	5.1711 5.17 ^{a)}		5.1730	0.1984 0.198 ^{a)}	0.1970 0.195 ^{a)}	0.1999 0.199 ^{a)}	0.1985 0.197 ^{a)}	0.201
Ar ¹⁵⁺	2s _{1/2} —2p _{1/2}	1.1747 1.18 ^{a)} 1.1711 ^{e)}	1.1533 1.15 ^{a)}		0.0262 0.026 ^{a)} 0.0263 ^{d)} 0.0260 ^{e)}	0.0246 0.030 ^{a)}	0.0260 0.026 ^{a)}	0.0245 0.027 ^{a)}	
	2s _{1/2} —2p _{3/2}	1.2972 1.30 ^{a)} 1.2876 ^{e)}			0.0582 0.058 ^{a)} 0.0581 ^{d)} 0.0575 ^{e)}	0.0551 0.066 ^{a)}	0.0520 0.052 ^{a)}	0.0489 0.054 ^{a)}	
	2s _{1/2} —3p _{1/2}	19.3537 19.4 ^{a)}	19.2366 19.2 ^{a)}		0.1205 0.120 ^{a)}	0.1201 0.119 ^{a)}	0.1208 0.121 ^{a)}	0.1204 0.120	
	2s _{1/2} —3p _{3/2}	19.3899 19.4 ^{a)}			0.2363 0.236 ^{a)}	0.2353 0.234 ^{a)}	0.2417 0.241 ^{a)}	0.2407 0.240	

表 1 续

Fe ²³⁺	2s _{1/2} —2p _{1/2}	1.7898	1.7202	0.0177	0.0165	0.0175	0.0163	
		1.81 ^{a)}	1.72 ^{a)}	0.018 ^{a),c)}	0.0177 ^{d)}	0.020 ^{a)}	0.017 ^{a),c)}	0.017 ^{a)}
		1.7861 ^{e)}		0.0177 ^{e)}				
			0.01±0.001 ^{f)}					
	2s _{1/2} —2p _{3/2}	2.3966		0.0481	0.0458	0.0349	0.0326	
		2.39 ^{a)}		0.048 ^{a),c)}	0.0478 ^{d)}	0.053 ^{a)}	0.035 ^{a),c)}	0.035 ^{a)}
2.3730 ^{e)}			0.0476 ^{e)}					
		0.04±0.002 ^{f)}						
Mo ³⁹⁺	2s _{1/2} —3p _{1/2}	42.7514	42.2033	0.1280	0.1276	0.1285	0.1281	
		42.7 ^{a)}	42.2 ^{a)}	0.128 ^{a)}	0.127 ^{a)}	0.128 ^{a)}	0.128 ^{a)}	
	2s _{1/2} —3p _{3/2}	42.9308		0.2452	0.2445	0.2570	0.2563	
		42.9 ^{a)}		0.245 ^{a)}	0.244 ^{a)}	0.257 ^{a)}	0.256 ^{a)}	
W ⁷¹⁺	2s _{1/2} —2p _{1/2}	3.1755	2.8512	0.0109	0.0101	0.0105	0.0097	
		3.28 ^{a)}	2.85 ^{a)}	0.011 ^{a)}	0.0109 ^{d)}	0.012 ^{a)}	0.011 ^{a)}	0.010 ^{a)}
		3.1642 ^{e)}		0.0109 ^{e)}				
	2s _{1/2} —2p _{3/2}	7.8983		0.0565	0.0550	0.0211	0.0195	
		7.89 ^{a)}		0.056 ^{a)}	0.0558 ^{d)}	0.060 ^{a)}	0.021 ^{a)}	0.019 ^{a)}
		7.7887 ^{e)}		0.0562 ^{e)}				
2s _{1/2} —3p _{1/2}	118.8646	114.8028	0.1337	0.1335	0.1349	0.1347		
	118.8 ^{a)}	114.8 ^{a)}	0.133 ^{a)}	0.133 ^{a)}	0.135 ^{a)}	0.134 ^{a)}		
2s _{1/2} —3p _{3/2}	120.2639		0.2378	0.2374	0.2698	0.2693		
	120.2 ^{a)}		0.238 ^{a)}	0.237 ^{a)}	0.270 ^{a)}	0.269 ^{a)}		
U ⁸⁹⁺	2s _{1/2} —2p _{1/2}	7.2161	5.0928	0.0063	0.0058	0.0058	0.0054	
		8.05 ^{a)}	5.12 ^{a)}	0.0064 ^{a)}	0.0063 ^{d)}	0.0066 ^{a)}	0.0059 ^{a)}	0.0043 ^{a)}
		7.1092 ^{e)}		0.0065 ^{e)}				
	2s _{1/2} —2p _{3/2}	63.1626		0.1292	0.1284	0.0117	0.0108	
		63.2 ^{a)}		0.129 ^{a)}	0.1275 ^{d)}	0.131 ^{a)}	0.012 ^{a)}	0.009 ^{a)}
		62.3259 ^{e)}		0.1315 ^{e)}				
2s _{1/2} —3p _{1/2}	412.6185	366.6547	0.1360	0.1360	0.1393	0.1392		
	412.5 ^{a)}	366.7 ^{a)}	0.136 ^{a)}	0.136 ^{a)}	0.139 ^{a)}	0.139 ^{a)}		
2s _{1/2} —3p _{3/2}	429.2710		0.1763	0.1761	0.2786	0.2784		
	429.0 ^{a)}		0.176 ^{a)}	0.176 ^{a)}	0.279 ^{a)}	0.278 ^{a)}		
U ⁸⁹⁺	2s _{1/2} —2p _{1/2}	10.5619	6.3440	0.0049	0.0045	0.0047	0.0043	
		13.2 ^{a)}	6.39 ^{a)}	0.0062 ^{a)}	0.0049 ^{d)}	0.0053 ^{a)}	0.0047 ^{a)}	0.0030 ^{a)}
		10.3289 ^{e)}		0.0052 ^{e)}				
	2s _{1/2} —2p _{3/2}	165.9513		0.1994	0.1989	0.0093	0.0086	
		166.9 ^{a)}		0.200 ^{a)}	0.1970 ^{d)}	0.202 ^{a)}	0.009 ^{a)}	0.006 ^{a)}
		163.8793 ^{e)}		0.2076 ^{e)}				
2s _{1/2} —3p _{1/2}	695.4292	570.7976	0.1355	0.1355	0.1405	0.1404		
	696.1 ^{a)}	570.8 ^{a)}	0.135 ^{a)}	0.135 ^{a)}	0.140 ^{a)}	0.140 ^{a)}		
2s _{1/2} —3p _{3/2}	741.7802		0.1226	0.1222	0.2809	0.2807		
	742.1 ^{a)}		0.121 ^{a)}	0.122 ^{a)}	0.281 ^{a)}	0.280 ^{a)}		

a) 文献 [6]; b) 文献 [16]; c) 文献 [7]; d) 文献 [17]; e) 文献 [11]; f) 文献 [19]; g) 文献 [28].

图 1—5 分别给出了类 Li 等电子系列离子 2s—np ($n = 2—4$), 3s—np ($n = 3—4$), 3p—4s, nd ($n = 3—4$) 以及 3d—4s E1 跃迁 Z 标度的跃迁能和长度规范下的振子强度. 为了系统研究相对论效应的影响, 并探究跃迁属性随 Z 变化的规律,

图中同时给出了目前计算的相对论及非相对论极限下的结果, 为便于比较, 图中也给出了 NIST^[28] 的结果. 从图中可以看出, 类锂离子的跃迁能和振子强度根据 E1 跃迁初、末态主量子数 n 的不同明显分为两类, 即 $\Delta n \neq 0$ 和 $\Delta n = 0$ 的跃迁. 对

于 $\Delta n \neq 0$ 的跃迁, 其波长相对较短, 谱线较弱, 随电子系列变化时, 由于库仑势对跃迁能的影响是主要的, 因此通常采用 Z^2 标度; 对于 $\Delta n = 0$ 的跃迁, 其波长相对较长, 谱线较强, 由于精细结构能级的分裂主要由自旋轨道相互作用引起, 因此跃迁能通常是 Z^4 标度的^[29-31].

从图 1(b), (c), 图 2(a), (b), (c), (d), 图 3(b), 图 4(b), (c) 和图 5(a) 可以看出, 对于 $\Delta n \neq 0$ 的跃迁, 随着 Z 的增大, 相对论和非相对论的跃迁能

均逐渐增大; 在 Z 较小时 ($Z < 25$), 相对论效应的影响比较小, 非相对论理论可以比较好地描述类 Li 离子的性质, 然而, 在 $Z \geq 25$ 时, 相对论效应的影响开始逐渐凸显, 如对于 U^{89+} ($Z = 92$) 离子 $2s_{1/2}-3p_{1/2}$ 的跃迁, 相对论的跃迁能约为 695.4292 a.u., 非相对论的结果为 570.7976 a.u., 两者偏差接近 18%. 另外, 对于 $\Delta n \neq 0$ 的跃迁, 由于相对论效应除了与 n 有关 (n 越小, 相对论效应越强), 也与精细结构能级的 l, j 量子数密切相关. 因

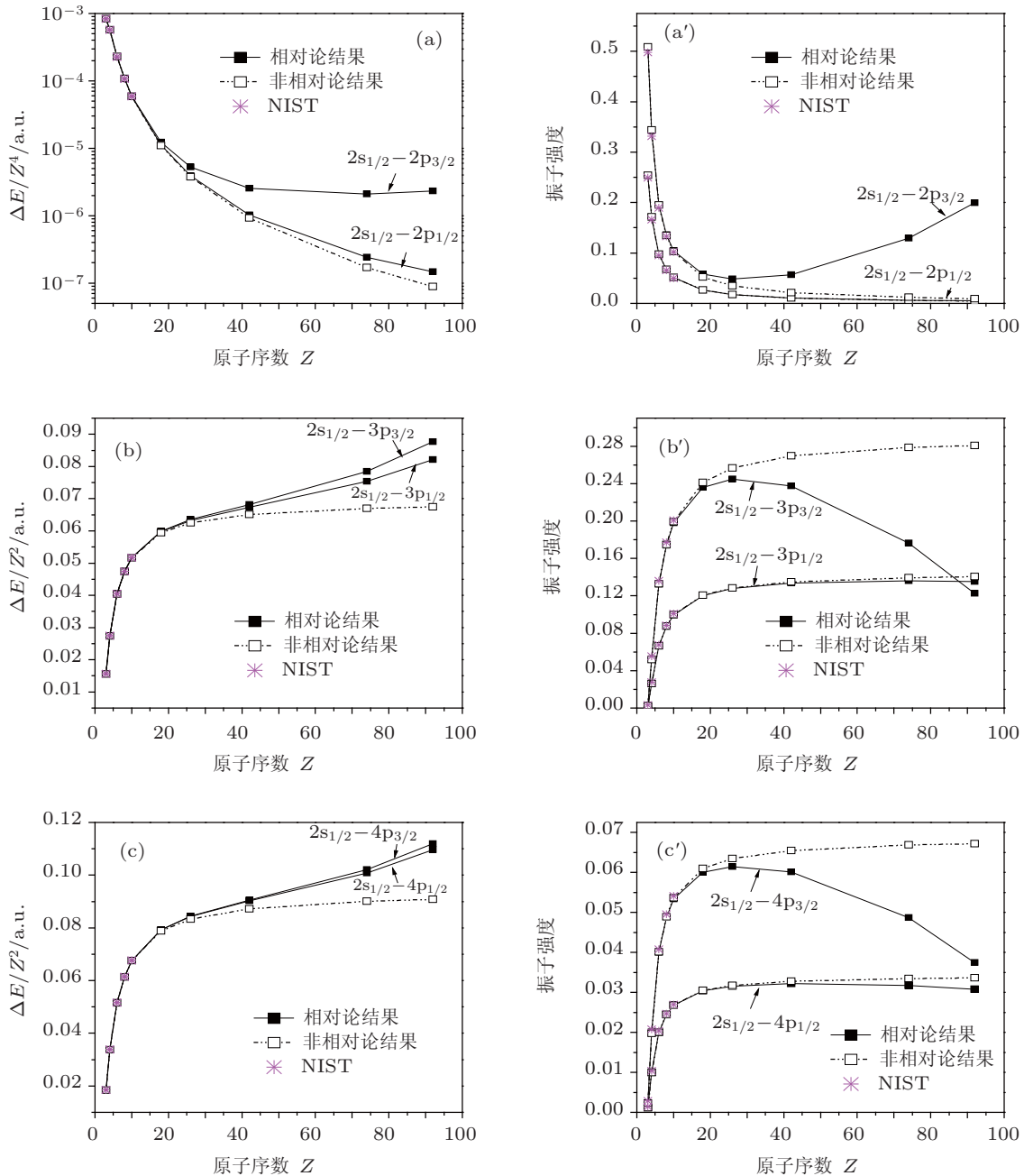


图 1 类 Li 等电子系列离子 $2s-np$ ($n = 2, 3, 4$) 的跃迁能和振子强度 (实线为目前相对论的计算结果, 虚线为非相对论 ($c = 10000$ a.u.) 的计算结果, 星号表示 NIST^[28] 的结果)

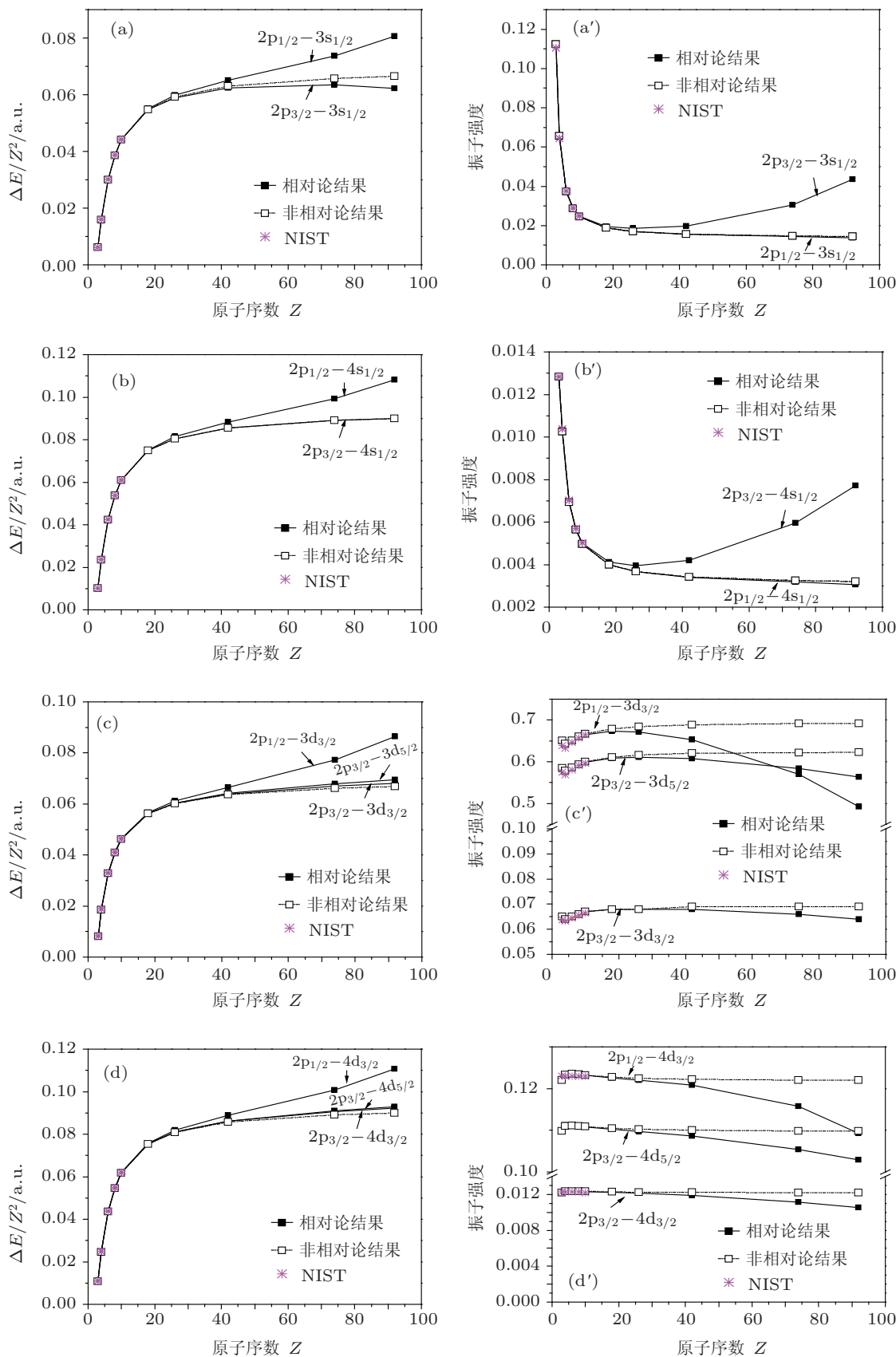


图 2 类 Li 等电子系列离子 $2p\text{--}ns, nd$ ($n = 3, 4$) 的跃迁能和振子强度 (实线为目前相对论的计算结果, 虚线为非相对论 ($c = 10000$ a.u.) 的计算结果, 星号表示 NIST^[28] 的结果)

此,从图中可以看出,对于 $\Delta n \neq 0$ 的跃迁相对论效应的影响进一步体现为两种情况,即对 $nl \rightarrow n'(l+1)$ 和 $nl \rightarrow n'(l-1)$, ($n' > n$) 跃迁的影响. 对于 $nl \rightarrow n'(l+1)$ ($n' > n$) 的跃迁,如 $2s-n'p$ ($n' = 3, 4$) (图 1(b), (c)), $2p-n'd$ ($n' = 3, 4$) (图 2(c), (d)), $3s-4p$ (图 3(b)) 及 $3p-4d$ (图 4(b)), 相对论的跃迁能普遍大于非相对论的结果,而对于振子强度,由于跃迁能与跃迁矩阵元受相对论效应影响的不同,两者相互竞争的结果导致相对论的振子强度普遍小于非相对论的结果,并且随 Z 增大相对论与非相对论结果之间的偏差逐渐增大,而且不难发现这种偏差对 $ns-n'p$ 的跃迁要比 $np-n'd$ 的跃迁更为显著,反映了相对论效应对电子轨道影响的一般规律,即 l 越小,相对论效应越强. 另外,对于相同的 $nl \rightarrow n'(l+1)$ 的跃迁,精细结构能级的不同导致跃迁属性,包括跃迁能和振子强度也有非常大的差异,如对 $ns \rightarrow n'p$ (包括 $2s-3p$, $4p$; $3s-4p$) 的跃迁,精细结构能级间 $ns_{1/2}-n'p_{3/2}$ 的跃迁能最大,其与非相对论结果的差别也最大. 随着 Z 的增大,振子强度的变化要明显比跃迁能

的变化显著,如对于 $2s_{1/2}-3p_{1/2}$ 的跃迁,其振子强度在 Z 小时快速增大,在中、高 Z 时逐渐平滑上升,而 $2s_{1/2}-3p_{3/2}$ 的振子强度在低 Z 时变化与 $2s_{1/2}-3p_{1/2}$ 相似,在 $Z = 26$ 元素附近达到最大,然后会逐渐减小,非相对论的振子强度随 Z 增大总是增大,因此导致 $2s_{1/2}-3p_{3/2}$ 跃迁相对论与非相对论的振子强度的偏差最大;另外,从图中可以看出,同一组 $np \rightarrow n'd$ ($n' > n$) (包括 $2p-3d$, $4d$; $3p-4d$) 精细结构能级的跃迁中,相对论效应对 $np_{1/2}-n'd_{3/2}$ 跃迁能及振子强度的影响要比 $np_{3/2}-n'd_{3/2}$ 和 $np_{3/2}-n'd_{5/2}$ 大. 产生这一现象的主要原因是相对论效应导致类锂离子的电子轨道波函数收缩,且收缩量大小与量子数 n, l, j 的大小通常成反比^[21,23,32]. 比如在 $2s-3p$ 的跃迁中,相对论效应使 $2s_{1/2}$ 轨道波函数收缩最大, $3p$ 轨道中 $3p_{1/2}$ 的收缩要大于 $3p_{3/2}$, 这种初、末态轨道波函数变化的不平衡导致跃迁能和振子强度强度依赖于量子数 n, l, j , 由于 $3p_{3/2}$ 与 $2s_{1/2}$ 之间的相对差别比 $3p_{1/2}$ 与 $2s_{1/2}$ 的大,因此表现为 $2s-2p_{3/2}$ 的跃迁属性对相对论效应更敏感.

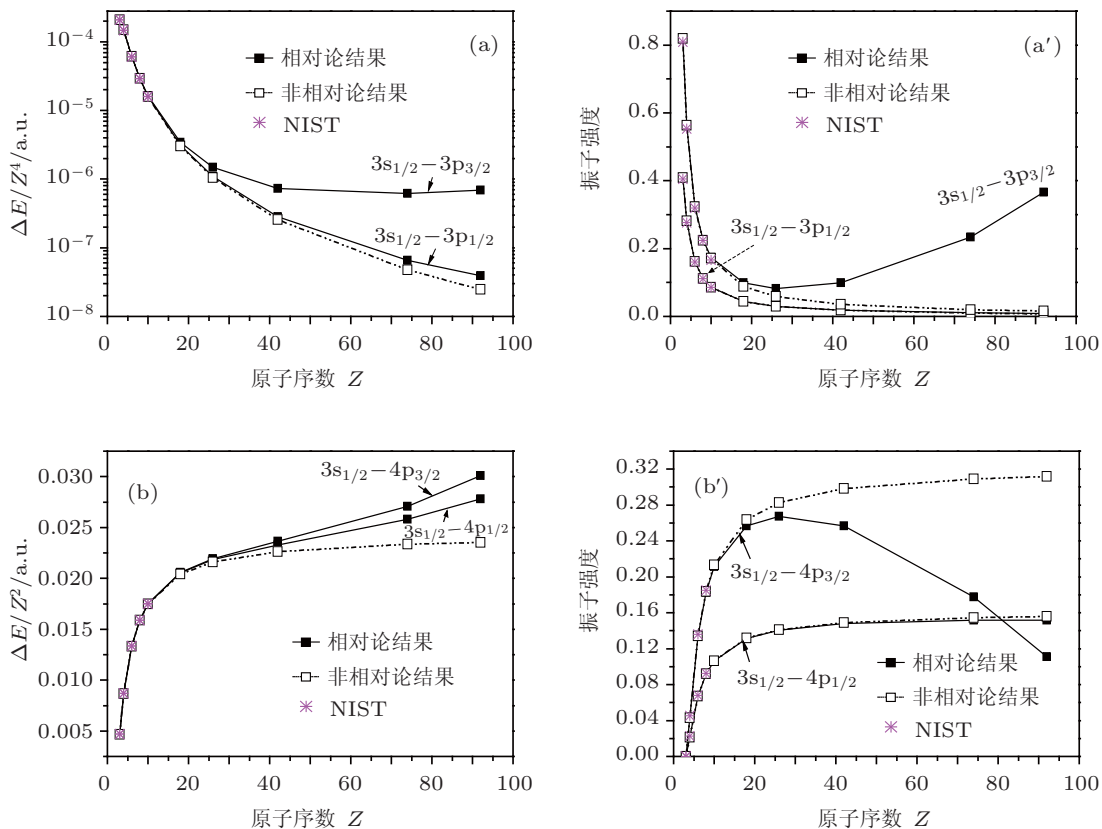


图 3 类 Li 等电子系列离子 $3s-np$, ($n = 3, 4$) 的跃迁能和振子强度 (实线为目前相对论的计算结果, 虚线为非相对论 ($c = 10000$ a.u.) 的计算结果, 星号表示 NIST^[28] 的结果)

对于 $\Delta n \neq 0$ 跃迁中 $nl \rightarrow n'(l-1)$, ($n' > n$) 的跃迁, 如 $2p \rightarrow ns$ ($n = 3, 4$) (图 2(a), (b)), $3p \rightarrow 4s$ (图 4(c)), 和 $3d \rightarrow 4p$ (图 5(a)), 尽管末态的主量子数 n' 大于初态主量子数 n , 但由于末态的轨道角量子数 $(l-1)$ 小于初态 l , 因此相对论效应对此类跃迁的影响相比 $nl \rightarrow n'(l+1)$, ($n' > n$) 更为复杂. 通过细致比较可以发现, 对于 $nl \rightarrow n'(l-1)$, ($n' > n$) 的跃迁相对论效应对跃迁能和振子强度的影响强烈依赖于初、末态精细结构能级的总角动量子数 j ; 对于初、末态 $\Delta j = 0$ 的跃迁 (如 $2p_{1/2} -$

$3s_{1/2}$), 其相对论的跃迁能普遍大于非相对论的结果, 而 $\Delta j = 1$ 的跃迁 (如 $2p_{1/2} - 3s_{3/2}$) 结果正好相反; 对于振子强度, 相对论效应对 $\Delta j = 1$ 的影响最为显著, 沿等电子系列变化时, 相对论的振子强度首先迅速减小, 然后在高 Z 区间又快速增大, 而非相对论的振子强度始终是减小的, 而且相对论的结果普遍大于非相对论的结果; 然而对 $\Delta j = 0$ 的跃迁, 相对论的计算结果要小于非相对论的计算结果, 而且相对论与非相对的振子强度随 Z 增大均减小, 但相对论效应的影响并不明显.

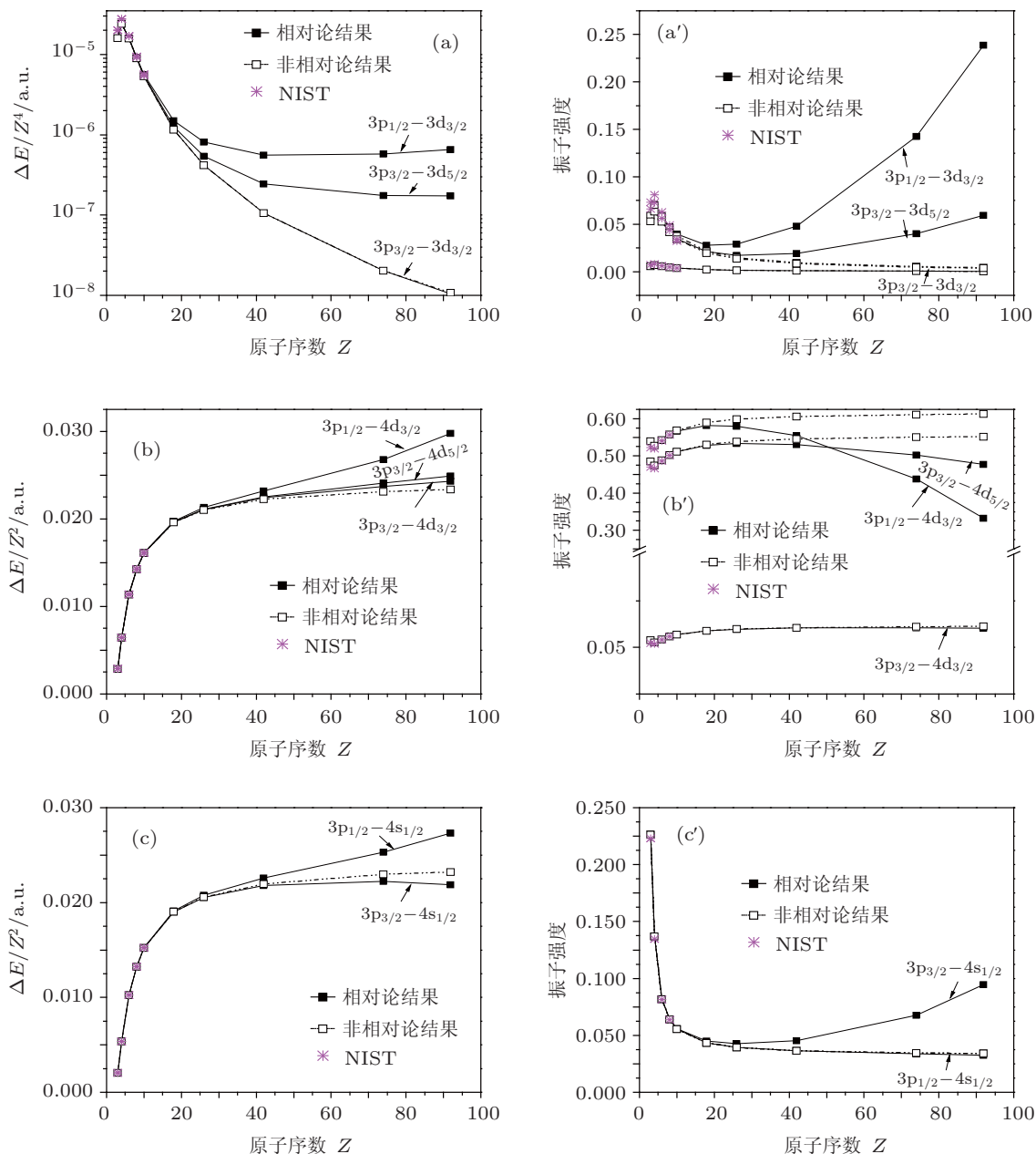


图 4 类 Li 等电子系列离子 $3p \rightarrow nd, 4s$ ($n = 3, 4$) 的跃迁能和振子强度 (实线为目前相对论的计算结果, 虚线为非相对论 ($c = 10000$ a.u.) 的计算结果, 星号表示 NIST^[28] 的结果)

图 1(a), (a'), 图 3(a), (a') 和图 4(a), (a') 分别展示了相对论效应对 2s—2p, 3s—3p 和 3p—3d 跃迁能和振子强度的影响. 对于此类跃迁, 初、末态主量子数 n 相同, 即 $\Delta n = 0$, 相对论效应是导致其精细结构能级分裂的主要原因, 因此从图中可以看出, 此类跃迁相对论效应的影响比 $\Delta n \neq 0$ 的跃迁更为显著. 对于此类跃迁, 相对论效应导致其跃迁能普遍增大, 而且随着核电荷数 Z 的增加, 相对论效应的影响强烈依赖于初、末态能级的总角动量子数 j . 对于 $\Delta j = 0$ 的跃迁, 如 $2s_{1/2}—2p_{1/2}$, $3s_{1/2}—3p_{1/2}$ 和 $3p_{3/2}—3d_{3/2}$, 相对论和非相对论的跃迁能

和振子强度随 Z 增大均逐渐减小, 相对论效应的影响比较小; 而对于 $\Delta j = 1$ 的跃迁, 如 $2s_{1/2}—2p_{3/2}$, $3s_{1/2}—3p_{3/2}$ 以及 $3p_{1/2}—3d_{3/2}$ 和 $3p_{3/2}—3d_{5/2}$, 在低 Z 区间 ($Z < 18$), 相对论的跃迁能及振子强度与非相对论结果比较接近且随 Z 增大两者均逐渐减小, 然而当 $Z \geq 18$ 之后, 相对论效应的影响开始逐渐凸显, 其使得跃迁能和振子强度随 Z 增大开始逐渐增大; 当 $Z = 92$ 时, 相对论与非相对论结果的偏差已变得异常显著, 如对 U^{89+} 离子 $2s_{1/2}—2p_{3/2}$ 的跃迁, 相对论与非相对论跃迁能的相对偏差已超过 40%.

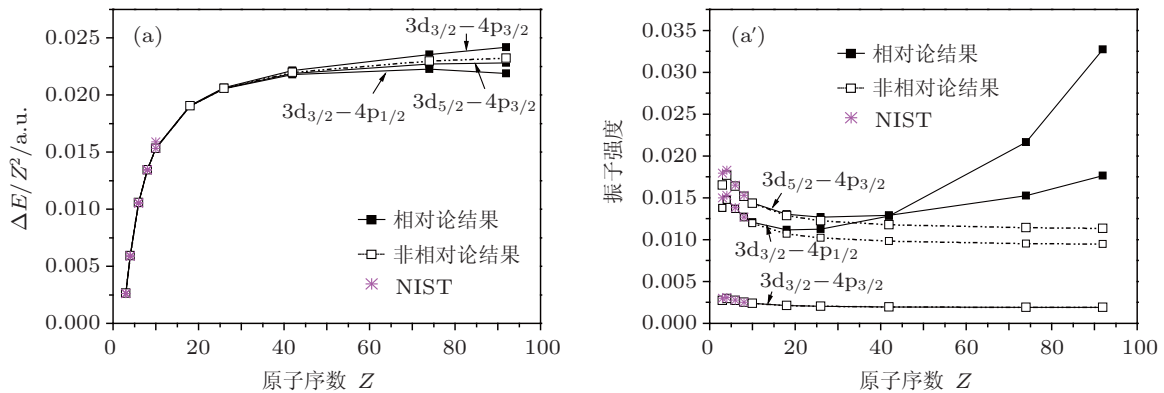


图 5 类 Li 等电子系列离子 3d—4s 的跃迁能和振子强度 (实线为目前相对论的计算结果, 虚线为非相对论 ($c = 10000$ a.u.) 的计算结果, 星号表示 NIST^[28] 的结果)

4 结论

利用基于 MCDHF 理论方法的相对论原子结构计算程序包 GRASP2K, 通过对电子关联效应的系统考虑, 分别在相对论及非相对论极限 ($c = 10000$ a.u.) 下, 计算了锂原子及类锂等电子系列离子 ($Be^+, C^{3+}, O^{5+}, Ne^{7+}, Ar^{15+}, Fe^{23+}, Mo^{39+}, W^{71+}$ 及 U^{89+}) 基态 $1s^2 2s^2 S_{1/2}$ 及较低的激发组态 $1s^2 2p, 1s^2 3l$ ($l = s, p, d$), $1s^2 4l$ ($l = s, p, d, f$) 对应 14 个精细结构能级间发生 E1 跃迁的能量、概率及振子强度, 并重点研究了相对论效应对类锂等电子系列离子辐射跃迁能及振子强度的影响. 研究表明, 对于中、高 Z 的类锂离子, 随着核电荷数 Z 的增大, 相对论效应对跃迁能和振子强度的影响越来越重要, 而且这种影响强烈依赖于 E1 跃迁初、末态的量子数 n, l, j , 具体表现在: 1) 所有的

跃迁明显分为两类, 即 $\Delta n = 0$ 和 $\Delta n \neq 0$ 的跃迁, 相对论效应对 $\Delta n = 0$ 的跃迁普遍比 $\Delta n \neq 0$ 的跃迁显著; 2) 依据 l 的不同, $\Delta n \neq 0$ 的跃迁进一步可分为两种情况, 即 $nl \rightarrow n'(l-1)$ 和 $nl \rightarrow n'(l+1)$, ($n' > n$) 的跃迁, 两种跃迁相对论效应的影响有明显区别, 而且这种影响与初、末态精细结构能级的总角动量子数 j 密切相关; 3) 对于 $\Delta n = 0$ 的跃迁, 相对论效应对初、末态 $\Delta j = 1$ 的跃迁影响非常显著, 但对 $\Delta j = 0$ 的跃迁的影响很小. 这些结论揭示了相对论效应对类锂等电子系列离子 E1 跃迁性质影响的基本规律, 有助于人们对更为复杂的高电荷态离子辐射性质研究中相对论效应的影响有更为深入的理解. 另外, 本文计算结果与已有的实验测量及其他理论计算结果进行比较, 符合得很好, 因此这些原子数据可以被进一步用于相关的实验及应用研究中.

- [1] Lin D L, Fielder W, Armstrong L 1977 *Phys. Rev. A* **16** 589
- [2] Johnson W R, Huang K N 1975 *Phys. Rev. L* **48** 315
- [3] Shorer P, Lin C D, Johnson W R 1977 *Phys. Rev. A* **16** 1109
- [4] Pegg D J, Forester J P, Vane C R, Elston S B, Griffin P M, Groeneweld K O, Peterson R S, Thoe R S, Sellin I A 1977 *Phys. Rev. A* **15** 1958
- [5] Samii M V, That D T, Armstrong L 1981 *Phys. Rev. A* **23** 3034
- [6] Armstrong L, Fielder W R, Lin D L 1976 *Phys. Rev. A* **14** 1114
- [7] Kim Y K, Desclaux J P 1976 *Phys. Rev. L* **36** 139
- [8] Çelik G 2007 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **103** 578
- [9] Bieroń J, Jönsson P, Fischer C F 1999 *Phys. Rev. A* **60** 3547
- [10] Yerokhin V A, Artemyev A N, Shabaev V M 2007 *Phys. Rev. A* **75** 062501
- [11] Theodosiou C E, Curtis L J, Mekki M E 1991 *Phys. Rev. A* **44** 7144
- [12] Seely J F 1989 *Phys. Rev. A* **39** 3682
- [13] Natarajan L, Natarajan A 2007 *Phys. Rev. A* **75** 062502
- [14] Natarajan L, Natarajan A, Kadrekar R 2010 *Phys. Rev. A* **82** 062514
- [15] Cheng K T, Johnson W R 1977 *Phys. Rev. A* **16** 263
- [16] Fulton T, Johnson W R 1986 *Phys. Rev. A* **34** 1686
- [17] Cheng K T, Kim Y K, Desclaux J P 1979 *At. Data Nucl. Data Tables* **24** 111
- [18] Pegg D J, Griffin P M, Alton G D, Elston S B, Forester J P, Suter M, Thoe R S, Vane C R, Johnson B M 1978 *Phys. Scr.* **18** 18
- [19] Dietrich D D, Leavitt J A, Bashkin S, Conway J G, Gould H, MacDonald D, Marrus R, Johnson B M, Pegg D J 1977 *Phys. Rev. A* **18** 208
- [20] Liang G Y, Badnell N R 2011 *Astron Astrophys* **528** A 69
- [21] Fricke B 1984 *Phys. Scr.* **T8** 129
- [22] Fritzsche S 2002 *Phys. Scr.* **T100** 37
- [23] Grant I P 2007 *Relativistic Quantum Theory of Atoms and Molecules: Theory and Computation* (New York : Springer)
- [24] Grant I P and Quiney H M 1987 *Adv. At. Mol. Phys.* **23** 37
Grant I P, McKenzie B J, Norrington P H 1980 *Comp. Phys. Commun.* **21** 207
- [25] Jönsson P, He X, Fischer C F, Grant I P 2007 *Comput. Phys. Commun.* **177** 597
- [26] Dylla K G, Grant I P, Johnson C T, Parpia F A, Plummer E P 1989 *Comput. Phys. Commun.* **55** 425
- [27] Cowan R D 1981 *The theory of atomic structure and spectra* (London: University of California press) p450—455
- [28] <http://www.nist.gov/pml/data/asd.cfm>
- [29] Gillaspay J D 2001 *J. Phys. B* **34** R93
- [30] Voge M, Quint W 2010 *Physics Reports* **490** 1
- [31] Gillaspay J D, Pomeroy J M, Perrella A C, Grube H 2007 *J. Phys.: Conf. Ser.* **58** 451
- [32] Burke V M, Grant I P 1966 *Proc. Phys. Soc.* **90** 297

The effect of relativity on the structures and transition properties of Li-like ions*

Liu Shang-Zong Xie Lu-You[†] Ding Xiao-Bin Dong Chen-Zhong

(Key Laboratory of Atomic and Molecular Physics & Functional Materials of Gansu Province, College of Physics and Electronic Engineering,
Northwest Normal University, Lanzhou 730000, China)

(Received 30 November 2011; revised manuscript received 22 January 2012)

Abstract

The transition energies, probabilities, and oscillator strengths for the electric dipole (E1) transitions between all levels of the ground state and the low-lying excited states of $1s^2nl$ ($n = 2-4$, $l = s, p, d, f$) configurations of Li atom and Li-like ions (Be^+ , C^{3+} , O^{5+} , Ne^{7+} , Ar^{15+} , Fe^{23+} , Mo^{39+} , W^{71+} , U^{89+}) have been calculated, using the relativistic atomic computational code GRASP2K, which based on the Multi-configuration Dirac-Hartree-Fock (MCDHF) method. The norelativistic results for all of those transitions have been also obtained for comparative purposes by performing the similar calculations in the non-relativistic limit. The effects of relativity on the E1 transition energies and oscillator strengths of Li-like isoelectronic sequence are discussed with a particular emphasis, and some important conclusions are drawn. Comparison of the present results with other available data is also made, good agreement is obtained.

Keywords: MCDHF method, lithium isoelectronic sequence, transition energies, oscillator strengths

PACS: 31.15.am, 31.30.jc, 32.70.Cs

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10875017, 10876028, 10964010, 91126007), and the Scientific Research Foundation of the Higher Education Institutions of Gansu Province of China.

[†] E-mail: xiely@nwnu.edu.cn