

类硼S离子K壳层激发共振态的辐射和俄歇跃迁

孙言 胡峰 桑萃萃 梅茂飞 刘冬冬 苟秉聪

Radiative and Auger transitions of K-shell excited resonance states in boron-like sulfur ion

Sun Yan Hu Feng Sang Cui-Cui Mei Mao-Fei Liu Dong-Dong Gou Bing-Cong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 68, 163101 (2019) DOI: 10.7498/aps.68.20190481

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.68.20190481>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

硼原(离)子内壳激发高自旋态能级和辐射跃迁

Energy levels and radiative transitions of the core-excited high-spin states in boron atom (ion)

物理学报. 2017, 66(12): 123101 <https://doi.org/10.7498/aps.66.123101>

近玻尔速度氙离子激发钒的K壳层X射线

Vanadium K-shell X-ray emission induced by xenon ions at near the Bohr velocity

物理学报. 2016, 65(2): 027901 <https://doi.org/10.7498/aps.65.027901>

AlK壳层等离子体辐射谱模型的比对

Comparisons and analyses of the aluminum K-shell spectroscopic models

物理学报. 2015, 64(20): 205201 <https://doi.org/10.7498/aps.64.205201>

高能脉冲C<sub>6+</sub>离子束激发Ni靶的K壳层X射线

K-shell X-ray emission from high energy pulsed C<sub>6+</sub> ion beam impacting on Ni target

物理学报. 2017, 66(14): 143401 <https://doi.org/10.7498/aps.66.143401>

ZnH分子激发态的电子结构和跃迁性质的理论计算

Theoretical study on the electronic structure and transition properties of excited state of ZnH molecule

物理学报. 2017, 66(6): 063103 <https://doi.org/10.7498/aps.66.063103>

<sup>6</sup>Li<sup>32</sup>S双原子分子的光谱和辐射跃迁理论研究

Theoretical study of the spectra and radiative transition properties of <sup>6</sup>Li<sup>32</sup>S

物理学报. 2016, 65(3): 033101 <https://doi.org/10.7498/aps.65.033101>

# 类硼 S 离子 K 壳层激发共振态的 辐射和俄歇跃迁\*

孙言<sup>1)†</sup> 胡峰<sup>1)</sup> 桑萃萃<sup>2)</sup> 梅茂飞<sup>1)</sup> 刘冬冬<sup>1)</sup> 苟秉聪<sup>3)</sup>

1) (徐州工程学院数学与物理科学学院, 徐州 221018)

2) (兰州理工大学理学院, 兰州 730050)

3) (北京理工大学物理学院, 北京 100081)

(2019 年 4 月 2 日收到; 2019 年 6 月 11 日收到修改稿)

采用多组态鞍点变分方法计算了类硼 S 离子 K 壳层激发共振态  $1s2s^22p^2$ ,  $1s2s2p^3$ ,  $1s2p^4$ ,  $^4L$  ( $L = S, P, D$ ) 的非相对论能量和波函数, 利用截断变分方法饱和波函数空间, 改进体系的非相对论能量. 利用微扰理论计算了相对论修正和质量极化效应, 利用屏蔽的类氢公式计算了 QED (quantum electrodynamics) 效应和高阶相对论修正. 进一步, 考虑闭通道和开通道相互作用, 计算了由俄歇共振效应引起的能级移动, 从而得到了共振态的精确相对论能级. 利用优化的波函数, 计算了类硼 S 离子 K 壳层激发共振态的电偶极辐射跃迁的线强度、振子强度、跃迁率和跃迁波长. 计算的振子强度和辐射跃迁率均给出了长度规范、速度规范、加速度规范的结果. 三种规范结果的一致性表明了本文计算的波函数是足够精确的. 利用鞍点复数转动方法计算了类硼 S 离子 K 壳层激发共振态的俄歇跃迁率、俄歇分支率和俄歇电子能量. 本文的计算结果与其他文献数据符合较好.

**关键词:** K 壳层激发共振态, 辐射跃迁, 俄歇跃迁, 俄歇电子

**PACS:** 31.15.A-, 32.30.Rj, 32.80.Zb

**DOI:** 10.7498/aps.68.20190481

## 1 引言

多电子原子内壳激发共振态的研究有助于考察原子的结构, 分析离子(电子)与原子(分子)的碰撞过程, 探究原子高激发态的退激发机制. S 作为天体物理中的重要元素之一, 其离子高激发态研究研究与天体物理、等离子体物理、化学物理以及 X 射线物理等学科都密切相关<sup>[1,2]</sup>. 类硼 S 离子的 K 壳层激发共振态, 其 K 壳层的  $1s$  电子被激发, 存在着“空洞”, 能级较高并位于多重离化阈之上, 可以通过辐射跃迁或俄歇跃迁进行退激发衰

变. 在辐射跃迁过程中产生 X 射线波段的光谱, 在俄歇跃迁过程中, 能够释放出俄歇电子, 具有“指纹”特性, 其研究对等离子诊断、光谱线鉴定、软 X 射线激光器设计、元素鉴定和成分分析具有重要的应用价值<sup>[3,4]</sup>.

近年来, 理论和实验工作者对类硼离子 K 壳层激发共振态的辐射跃迁光谱和俄歇电子谱开展了系列研究. 实验方面, 实验物理学家利用高能离子碰撞实验和束箔碰撞实验技术对 B 原子<sup>[5]</sup>,  $C^+$ <sup>[5,6]</sup>,  $O^{3+}$ <sup>[7]</sup>,  $Ne^{5+}$ <sup>[7-9]</sup> 离子俄歇电子谱进行了测量, 报道了精确测量的俄歇电子谱线. 在 K 壳层激发态的辐射跃迁光谱实验中, Armour 等<sup>[10,11]</sup> 利用

\* 国家自然科学基金(批准号: 11604284, 51506184)、江苏省高等学校自然科学研究面上项目(批准号: 17KJB140025)和江苏省青蓝工程资助课题.

† 通信作者. E-mail: [suenyangu@163.com](mailto:suenyangu@163.com)

束箔实验技术测量了高离化 Mg, Al, Si 离子的 X 射线谱. Faenov<sup>[12]</sup> 利用 CO<sub>2</sub> 激光等离子体实验测量了 Mg, Al, Si, P, S 离子的伴线波长, 其中部分谱线来源于类硼离子的 K 壳层激发共振态的辐射跃迁. 利用合并光子-离子束技术, Schlachter 等<sup>[13]</sup> 利用 1s→2p 内壳层光激发实验测量 C<sup>+</sup>离子 K 壳层激发态 (1s2s<sup>2</sup>2p<sup>2</sup>, 1s2s(3S)2p<sup>3</sup>)<sup>2,4</sup>L 的线宽度和能级寿命. Gharaibeh 等<sup>[14]</sup> 测量了 N<sup>2+</sup>离子 K 壳层激发电离截面. Müller 等<sup>[15,16]</sup> 研究了 C<sup>+</sup>离子 K 壳层电离区域附近的自电离过程, 分析了其单电子俄歇、双电子俄歇、三电子俄歇的自电离机制.

理论方面, Chen 和 Crasemann<sup>[17,18]</sup> 利用 MCDF-AL(multiconfiguration Dirac-Fock with average-level) 方法系统计算了类硼等电子序列 ( $Z = 6 - 54$ ) 离子 K 壳层激发共振态 1s2s<sup>2</sup>2p<sup>2</sup>, 1s2s2p<sup>3</sup>, 1s2p<sup>4</sup> 的俄歇电子能量、俄歇跃迁率、X 射线波长和跃迁强度. Safronova 和 Shlyaptseva<sup>[19]</sup> 利用 1/Z 微扰理论计算了类硼等电子序列 ( $Z = 6 - 54$ ) K 壳层激发态 1s2s<sup>2</sup>2p<sup>n</sup>, 1s2s2p<sup>n</sup>, 1s2p<sup>n</sup> ( $n = 1 - 3$ ) 的能级和自电离跃迁率. Zhou 等<sup>[20]</sup> 利用微扰理论计算了 C<sup>+</sup>离子 K 壳层激发共振态 1s2s<sup>2</sup>2p<sup>2</sup> <sup>2</sup>D, <sup>2</sup>P 的单电子俄歇、双电子俄歇和三电子俄歇跃迁率. 利用 SCUNC (screening constant by unit nuclear charge) 模型, Sako 等<sup>[21]</sup> 计算了类 B 等电子序列 ( $Z = 5 - 18$ ) 的 K 壳层激发共振态 1s2p<sup>4</sup> (<sup>2</sup>S, <sup>2,4</sup>P, <sup>2</sup>D) 的 X 射线波长和俄歇电子能量. 目前, 人们对类硼离子的 K 壳层高激发共振态的能级、辐射跃迁和俄歇过程开展了相关研究, 得到了一些精确的理论和实验数据结果. 然而, 与类硼 S 离子 K 壳层激发共振态的相关报道还甚少. 理论上主要有 MCDF 方法<sup>[17,18]</sup> 和 1/Z 微扰理论<sup>[19]</sup> 对类硼 S 离子的 K 壳层激发共振态的能级、辐射光谱和俄歇跃迁数据进行了计算. 然而受限于早期的计算条件, 这些计算仅考虑了很少组态相互作用, 数据的精确度不够高.

在前期的工作中<sup>[22,23]</sup>, 我们利用鞍点变分方法和鞍点复数转动方法对类硼离子 K 壳层激发共振态的辐射跃迁和俄歇跃迁开展了相关计算, 得到了较为精确的理论结果. 本文采用该方法对类硼 S 离子 K 壳层激发共振态 1s2s<sup>2</sup>2p<sup>2</sup>, 1s2s2p<sup>3</sup>, 1s2p<sup>4</sup> <sup>2,4</sup>L ( $L = S, P, D$ ) 进行研究, 在本文计算过程中, 进一步考虑了 QED(quantum electrodynamics) 效应和高阶相对论的修正, 得到了精确的理论数据. 利

用鞍点变分方法计算类硼 S 离子 K 壳层激发共振态的能级和波函数. 利用优化的波函数计算这些 K 壳层激发共振态的电偶极辐射跃迁线强度、振子强度、辐射跃迁率、跃迁波长. 利用鞍点复数转动方法计算这些 K 壳层激发共振态的俄歇跃迁率、俄歇分支率及俄歇电子能量. 本文计算结果与相关的实验理论数据进行对比, 符合较好.

## 2 理论计算方法

在 LS 表象下, 类硼五电子体系的非相对论哈密顿算符为

$$H_0 = \sum_{i=1}^5 \left[ -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right] + \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^5 \frac{1}{r_{ij}}. \quad (1)$$

内壳层激发共振态的波函数可写成如下形式:

$$\begin{aligned} & \psi_b(1, 2, \dots, 5) \\ & = A \sum_i^n C_i [1 - P_j] \phi_{n(i), l(i)}(R) Y_{l(i)}^{LM}(\Omega) \chi_{ss_z}, \end{aligned} \quad (2)$$

式中,  $A$  为反对称算符,  $C_i$  为线性参数,  $\phi_{n(i), l(i)}$  代表径向波函数,  $Y_{l(i)}^{LM}$  代表轨道角动量波函数,  $\chi_{ss_z}$  为自旋波函数. 径向部分采用 Slater 基函数进行展开,

$$\phi_{n(i), l(i)} = \prod_{j=1}^5 r_j^{n_j} \exp(-\alpha_j r_j), \quad (3)$$

$\alpha_j$  为每个电子对应的非线性参数; 五个电子对应的非线性参数  $\{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5\}$  构成非线性参数集;  $l_i$  表示一组  $l_1, l_2, l_3, l_4, l_5$ ;  $n_i$  为对应的一组主量子数. 角向部分的波函数为

$$\begin{aligned} & Y_{LM}(\Omega) \\ & = \sum_{m_j} \langle l_1 l_2 m_1 m_2 | l_{12} m_{12} \rangle \\ & \quad \times \langle l_{12} l_3 m_{12} m_3 | l_{123} m_{123} \rangle \\ & \quad \times \langle l_{123} l_4 m_{123} m_4 | l_{1234} m_{1234} \rangle \\ & \quad \times \langle l_{1234} l_5 m_{1234} m_5 | l_{12345} m_{12345} \rangle \prod_{j=1}^5 Y_{l_j m_j}(\Omega_j), \end{aligned} \quad (4)$$

展开系数

$\langle l_1 l_2 m_1 m_2 | l_{12} m_{12} \rangle, \langle l_{12} l_3 m_{12} m_3 | l_{123} m_{123} \rangle \dots \langle l_{1234} l_5 m_{1234} m_5 | l_{12345} m_{12345} \rangle$  为 C.G. 系数. 为简便

表示, 将角动量波函数表示为

$$l(i) = [(l_1, l_2)l_{12}, l_3]l_{123}, l_4]l_{1234}, l_5; \quad (5)$$

自旋部分波函数表示为

$$\chi_{s s_z} = [(s_1, s_2)s_{12}, s_3]s_{123}, s_4]s_{1234}, s_5. \quad (6)$$

对于 K 壳层激发共振态, 由于能级高, 在计算过程中很容易产生变分崩溃. 因此, 在波函数中引入空轨道, 在 (2) 式中, 投影算符表示为

$$P_j = |\phi_o(r_j)\rangle \langle \phi_o(r_j)|, \quad (7)$$

空轨道可表示为

$$\phi_o(r) = N e^{-qr}, \quad (8)$$

$q$  为空轨道的有效核电荷数,  $N$  为归一化常数. 在鞍点变分计算过程中, 首先对非线性参数集  $\{\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4, \alpha_5\}$  以及线性参数  $C_i$  变分优化能量极小, 之后再对  $q$  参数优化能量极大, 从而在鞍点处求得共振态最佳的非相对论能量值  $E_b$ . 如在本文变分优化过程中, 在 1s 轨道位置加入空轨道, 排除了 1s(2)  $nl n' l' n'' l''$  的组态, 从而防止 2s 轨道坍塌到 1s 轨道引起变分崩溃 [24]. 对于 K 壳层激发态, 空轨道的非线性参数  $q$  值接近  $Z-0.5$ , 这里初始值定为 15.5. 当试探波函数非线性参数全部优化完毕后, 再对空轨道的  $q$  参数优化能量极大, 最大值的能量即为 K 壳层激发共振态的能量.

在计算过程中, 为了防止遗漏重要的组态相互作用波函数, 本文利用截断变分方法计算了非相对论能量的修正值  $\Delta E_{RV}$ , 从而得到共振态的非相对论能量  $E_b + \Delta E_{RV}$ . 对于截断变分方法的相关理论, 文献 [23] 有详细描述, 这里不再赘述. 利用微扰理论, 本文还考虑相对论修正  $\Delta E_{rel}$  和质量极化效应的修正  $\Delta E_{mp}$ . 微扰算符包括质量极化项、动能修正项、达尔文项、电子和电子相互作用项以及轨道和轨道相互作用项. 这些算符的在文献 [22] 中有详细描述, 这里不再展开.

随着核电荷数  $Z$  的增加, QED 效应和高阶相对论效应修正变得愈发重要, 因此为了得到精确的能级数据, 本文利用屏蔽的类氢公式 [25-27], 计算了类硼  $S^{11+}$  离子 K 壳层激发共振态的 QED 效应和高阶相对论修正. 在 QED 效应计算中, 仅考虑了主要部分自能修正和真空极化修正效应. 对于  $ns$  电子, QED 效应修正公式为

$$\begin{aligned} \Delta E_{QED}(n, 0) = & \frac{4Z_{\text{eff}}^4 \alpha^3}{3\pi n^3} \left\{ \frac{19}{30} - 2 \ln(\alpha Z_{\text{eff}}) \right. \\ & - \ln[K(n, 0)] + 7.214\alpha Z_{\text{eff}} \\ & - (Z_{\text{eff}}\alpha)^2 [3 \ln^2(Z_{\text{eff}}\alpha) \\ & \left. + 8.695 \ln(Z_{\text{eff}}\alpha)] \right\}. \quad (9) \end{aligned}$$

对于其他的  $nl$  电子,

$$\begin{aligned} \Delta E_{QED}(n, l) = & \frac{4Z_{\text{eff}}^4 \alpha^3}{3\pi n^3} \left\{ \frac{3c_{l,j}}{8(2l+1)} \right. \\ & - \ln K(n, l) + (\alpha Z_{\text{eff}})^2 \ln(\alpha Z_{\text{eff}})^{-2} \\ & \times \left[ \left(1 - \frac{1}{n^2}\right) \left(\frac{1}{10} + \frac{1}{4} \delta_{j, \frac{1}{2}}\right) \delta_{l,1} \right. \\ & \left. + \frac{8(3-l(l+1)/n^2)}{(2l-1)(2l)(2l+1)(2l+2)(2l+3)} \right] \\ & \left. + \frac{3\alpha}{4\pi} (-0.3285) c_{l,j} / (2l+1) \right\}, \quad (10) \end{aligned}$$

其中

$$c_{l,j} = \begin{cases} l/(l+1) & j = l+1/2, \\ -1/l & j = l-1/2. \end{cases}$$

$\ln K(n, l)$  的值来自于文献 [28], 有效核电荷数  $Z_{\text{eff}}$  的值由文献 [27] 中计算方法求得. 对单电子狄拉克方程的能量本征值为

$$E_{\text{Dirac}}(Z) = \frac{1}{\alpha^2} \left\{ 1 + \left[ \frac{\alpha Z}{n-k + \sqrt{k^2 - \alpha^2 Z^2}} \right]^2 \right\}^{-\frac{1}{2}} - \frac{1}{\alpha^2}, \quad (11)$$

其中  $k = j + 1/2$  ( $j$  是电子的总轨道角动量). 对 (11) 式进行泰勒展开, 如果仅考虑到  $\alpha^2 Z^4$  阶,  $E_{\text{Dirac}}(Z)$  可简写为

$$E^{(1)}(Z) = -\frac{Z^2}{2n^2} \left\{ 1 + \frac{\alpha^2 Z^2}{n} \left[ \frac{1}{k} - \frac{3}{4n} \right] \right\}. \quad (12)$$

$nl$  电子的高阶相对论为

$$\Delta E_{HO}(nl) = E_{\text{Dirac}}(Z_{\text{eff}}) - E^{(1)}(Z_{\text{eff}}). \quad (13)$$

通过依次求得每个电子的 QED 效应修正和高阶相对论修正, 求和得到体系的总 QED 效应和高阶相对论效应为

$$\Delta E_{QED} = \sum_{i=1}^5 \Delta E_{QED}(n_i l_i j_i, LSJ), \quad (14)$$

$$\Delta E_{\text{HO}} = \sum_{i=1}^5 \Delta E_{\text{HO}}(n_i l_i j_i, LSJ). \quad (15)$$

K 壳层激发共振态的宽度和能量位移, 是共振态波函数中连续通道与束缚通道之间相互作用的结果. 共振态束缚通道波函数  $\psi_b(R_N, \Omega_N)$ , 加上连续通道波函数构成体系的总波函数.  $R_N$  表示  $N$  个电子的径向坐标,  $\Omega_N$  代表  $N$  个电子的角向坐标. 在  $LS$  耦合表象下的实空间, 共振态的总波函数表示为

$$\begin{aligned} \Psi(R_N, \Omega_N) &= \psi_b(R_N, \Omega_N) \\ &+ A \sum_{i,k} d_{ik} \phi_i(R_{N-1}, \Omega_{N-1}) U_k(\mathbf{r}_N), \end{aligned} \quad (16)$$

式中,  $A$  为反对称算符,  $d_{ik}$  为线性参数,  $\phi_i(R_{N-1}, \Omega_{N-1})$  是四电子靶态的波函数,  $U_k(\mathbf{r}_N)$  为出射电子波函数, 可写为

$$U_k(\mathbf{r}_N) = r^k e^{-\alpha r}, \quad (17)$$

$\alpha$  为电子的非线性参数,  $U_k$  构成一维的完备基, 在计算过程中, 非线性参数是可选择的. 利用复数转动方法<sup>[29,30]</sup>, 哈密顿算符经转动变为

$$H = H(R_N e^{i\theta}, \Omega_N), \quad (18)$$

其中,  $R_N e^{i\theta}$  表示每个径向坐标  $r_j$  变换为  $r_j \rightarrow r_j e^{i\theta}$ ,  $\theta$  为相位角, 为了保证体系本征值更好的收敛性, 鞍点复数转动方法采用基组的复旋转代替哈密顿量的旋转. 基组经旋转变变为

$$\varphi_j = \varphi_j(R_N e^{i\theta}, \Omega_N). \quad (19)$$

于是, 共振态的波函数 (16) 式可写为

$$\begin{aligned} \Psi(R_N e^{i\theta}, \Omega_N) \\ &= \psi_b(R_N e^{i\theta}, \Omega_N) \\ &+ A \sum_{i,k} d_{ik} \phi_i(R_{N-1} e^{i\theta}, \Omega_{N-1}) U_k(\mathbf{r}_N), \end{aligned} \quad (20)$$

在复平面内, 共振态的波函数是平方可积的. 利用转动后的波函数  $\Psi$ , 共振态的能级和宽度可通过求解久期方程求得:

$$\delta \frac{\langle \Psi | H_0 | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = 0. \quad (21)$$

求得本征值  $E - i\Gamma/2$ , 其中, 实部  $E$  为能级位置, 虚部  $\Gamma$  为能级的宽度.  $\Delta E_S = E - E_b$ , 表示考虑了闭通道与连续态相互作用引起的能级位移. 通过文献<sup>[29, 30]</sup>可知, 在鞍点复数转动计算中, 转角  $\theta$

在 0.3 – 0.6 范围内, 俄歇共振能级位移和能级宽度数值呈现出良好的稳定性和收敛性. 当  $\theta = 0.5$  时, 出射电子的非线性参数  $\alpha$  的变化引起的共振能级位移和能级宽度变化最小, 收敛性最好. 因此, 本文的鞍点复数转动计算中, 取  $\theta = 0.5$ . 于是, 共振态的总能量为

$$\begin{aligned} E_{\text{total}} &= E_b + \Delta E_{\text{RV}} + \Delta E_{\text{mp}} + \Delta E_{\text{rel}} \\ &+ \Delta E_{\text{QED}} + \Delta E_{\text{HO}} + \Delta E_S. \end{aligned} \quad (22)$$

能级宽度和俄歇跃迁率的关系为

$$A_{\text{au}} = \Gamma/\hbar. \quad (23)$$

### 3 结果与讨论

本文采用多组态鞍点变分方法计算了类硼 S 离子 K 壳层激发共振态  $1s2s^22p^2$ ,  $1s2s2p^3$ ,  $1s2p^4$ ,  $2, 4L$  ( $L = S, P, D$ ) 的能级和波函数. 在  $LS$  耦合框架下, 为得到精确的理论计算结果, 需要充分考虑电子关联效应及各种修正效应. 在计算过程中, 根据组态相互作用定则选取重要的轨道-自旋角动量分波来考虑电子关联效应. 为了方便表示计算过程中所考虑的组态波函数, 本文利用每个电子的轨道角动量量子数组合  $[l_1, l_2, l_3, l_4, l_5]$  来表示所添加的组态, 称为轨道角动量分波, 其中每个电子对应的主量子数是可变的, 增大主量子数可增加每个分波中的 term 数目, 扩展更多的组态. 每个轨道角动量分波可能包含多种轨道角动量耦合方式, 如对于  $[0, 0, 1, 1, 1]$  分波耦合到总轨道角动量  $L = P$  态, 具有三种可能的耦合方式:  $[(((0, 0)0, 1)1, 1)0, 1]1$ ,  $[(((0, 0)0, 1)1, 1)1, 1]1$ ,  $[(((0, 0)0, 1)1, 1)2, 1]1$ . 在计算中, 本文考虑到所有可能的轨道角动量耦合方式. 对于 K 壳层激发四重态, 自旋角动量耦合方式多达五种. 不同耦合方式的轨道角动量和自旋角动量的组合称为轨道-自旋角动量分波. 对于偶宇称结构 ( $1s2s^22p^2$ ,  $1s2p^4$ ), 重要的轨道角动量分波系列  $[l_1, l_2, l_3, l_4, l_5]$  为  $[0, 0, 0, l, l]$ ,  $[0, 0, 0, l, l+2]$ ,  $[0, 0, 1, l, l+1]$ ,  $[0, 0, 1, l, l+3]$ ,  $[0, 1, 1, l, l]$ ,  $[0, 1, 1, l, l+2]$ ,  $[0, 0, 2, l, l]$ ,  $[1, 1, 1, l, l+1]$  等; 对于奇宇称结构 ( $1s2s2p^3$ ), 重要的轨道角动量分波系列  $[l_1, l_2, l_3, l_4, l_5]$  为  $[0, 0, 1, l, l]$ ,  $[0, 0, 1, l, l+2]$ ,  $[0, 0, 0, l, l+1]$ ,  $[0, 1, 1, l, l+1]$ ,  $[0, 1, 1, l, l+3]$ ,  $[0, 0, 2, l, l+1]$ ,  $[1, 1, 1, l, l]$  等. 在构建波函数过程中,

轨道角动量量子数  $l$  的取值范围为 0 到 8, 当  $l > 8$  时, 组态分波对体系的能量贡献很小, 可以忽略. 在计算过程中, 随着  $l$  的增加, 分波能量的贡献呈现收敛趋势. 对于每个轨道-自旋角动量分波, 当增加电子的主量子数  $n$  所引起的能量贡献小  $10^{-6}$  a.u. 时, 停止增加  $n$ . 在本文计算中, 轨道-自旋角动量组态分波的数目达到 148, 波函数 term 的总数达到 4500 项. 通过对构建的试探波函数的非线性参数集变分优化极小, 而后再对空轨道参数  $q$  优化能量极大, 从而得到组态的最佳波函数和对应的非相对论能量  $E_b$ . 为了防止遗漏的重要的角动量-自旋组态分波和考虑高  $l$  系列分波的能量贡献, 本文利用截断变分方法计算了非相对论能量改进  $\Delta E_{RV}$ , 于是得到共振态的非相对论能量  $E_b + \Delta E_{RV}$ .

为了得到精确的相对论能量, 本文利用微扰理论, 计算了质量极化和相对论效应修正  $\Delta E_{rel} + \Delta E_{mp}$ . 其中相对论微扰算符包括动能项、达尔文项、电子与电子相互作用项和轨道与轨道的相互作用项. 同时利用屏蔽的类氢公式本文还考虑了 QED 效应修正  $\Delta E_{QED}$  和高阶相对论修正  $\Delta E_{HO}$ , 于是总的修正能量  $\Delta E_{corr} = \Delta E_{mp} + \Delta E_{rel} + \Delta E_{QED} + \Delta E_{HO}$ .

K 壳层激发共振态位于多重离化阈之上, 镶嵌在连续态内, 这些 K 壳层激发共振态的原子存在一定的概率自电离, 导致 K 壳层激发态的寿命变短, 能级加宽. 同时由于相互作用能级间的“相互排斥”, 即来源于束缚空间和连续空间的相互作用, 这些 K 壳层激发态的能级将发生一定的能级移动  $\Delta E_S$ . 因此, 类硼 S 离子 K 壳层激发态的总能量为  $E_{total} = E_b + \Delta E_{RV} + \Delta E_{corr} + \Delta E_S$ .

表 1 列出了本文计算的类硼 S 离子的 K 壳层激发共振态权重中心的能级. 为便于对比, 表 1 还列出了这些 K 壳层激发共振态能量的绝对值 ( $-E_{total}$ , 单位 eV). 对比文献 [21] 的 SCUNC 理论计算结果, 可以发现, 对于  $1s2p^4 2, 4L$  激发态, 本文的理论计算结果与 SCUNC 理论值的均方根误差约为 5.01 eV. 考虑电子自旋与轨道、自旋与其他轨道、自旋与自旋相互作用, 表 2 列出了类硼 S 离子 K 壳层激发共振态的精细结构劈裂能级. 对比文献 [19] 利用  $1/Z$  微扰理论的计算数据, 本文的计算结果与  $1/Z$  微扰理论的均方根误差约为 3.28 eV. 相比 SCUNC 理论和  $1/Z$  微扰理论方法, 本文在计算过程中考虑了更多的组态相互作用和能量修

表 1 类硼 S 离子 K 壳层激发共振态  $1s2s^2 2p^2, 1s2s2p^3, 1s2p^4 2, 4L$  ( $L = S, P, D$ ) 的权重中心能级 (单位 a.u.), 能量转化关系: 1 a.u. = 27.21138 eV

Table 1. Center of gravity levels of  $1s2s^2 2p^2, 1s2s2p^3, 1s2p^4 2, 4L$  ( $L = S, P, D$ ) of K-shell excited resonance states in boron-like sulfur ion (unit: a.u.). The energy conversion relationship: 1 a.u. = 27.21138 eV.

共振态	$E_{nonrel}/a.u.$			$E_{total}/a.u.$	$-E_{total}/eV$	
	$E_b + \Delta E_{RV}$	$\Delta E_{corr}$	$\Delta E_S$		本文	SCUNC[21]
$1s2s^2 2p^2 4P$	-229.35389	-0.64011	-0.00245	-229.99645	6258.52	
$1s2s^2 2p^2 2S$	-228.66774	-0.66777	-0.00174	-229.33725	6240.58	
$1s2s^2 2p^2 2P$	-228.81110	-0.66633	-0.00089	-229.47832	6244.42	
$1s2s^2 2p^2 2D$	-228.91613	-0.67942	0.00322	-229.59233	6247.52	
$1s2s(3S)2p^3 4S^o$	-227.40768	-0.60823	0.00018	-228.01573	6204.62	
$1s2s(1S)2p^3 4S^o$	-228.21123	-0.62298	0.00151	-228.83270	6226.85	
$1s2s(3S)2p^3 4P^o$	-228.00558	-0.62215	0.00106	-228.62667	6221.25	
$1s2s(3S)2p^3 4D^o$	-228.30315	-0.62288	-0.00017	-228.92620	6229.40	
$1s2s(3S)2p^3 2S^o$	-226.86291	-0.62586	0.00070	-227.48807	6190.26	
$1s2s(3S)2p^3 2P^o$	-226.91669	-0.61114	0.00193	-227.52590	6191.29	
$1s2s(1S)2p^3 2P^o$	-227.28245	-0.61646	0.00620	-227.89271	6201.28	
$1s2s(3S)2p^3 2D^o$	-227.21472	-0.61330	0.00204	-227.82598	6199.46	
$1s2s(1S)2p^3 2D^o$	-227.56290	-0.62041	0.00280	-228.18051	6209.11	
$1s2p^4 4P$	-226.53817	-0.55727	-0.00249	-227.09793	6179.65	6173.07
$1s2p^4 2S$	-225.47488	-0.56220	0.00072	-226.03636	6150.76	6145.67
$1s2p^4 2P$	-225.94003	-0.56493	0.00251	-226.50245	6163.44	6159.02
$1s2p^4 2D$	-226.07283	-0.56074	0.00279	-226.63078	6166.94	6163.51

表 2  $S^{11+}$  离子 K 壳层激发共振态,  $S^{11+}$ ,  $S^{12+}$  离子低位激发态的精细结构能级 ( $-E$ , 单位 eV)  
 Table 2. Fine-structure energy levels of the K-shell excited resonance states in  $S^{11+}$  ion, and low-excited states in  $S^{11+}$ ,  $S^{12+}$  ion ( $-E$ , unit eV).

偶宇称			奇宇称		
$S^{11+}$ 离子 K 壳层激发态共振态					
共振态	本文	文献[19]	共振态	本文	文献[19]
$1s2s^2 2p^2 4P_{1/2}$	6259.50	6265.62	$1s2s(3S)2p^3 4S_{3/2}$	6204.62	6207.16
$1s2s^2 2p^2 4P_{3/2}$	6258.83	6264.85	$1s2s(1S)2p^3 4S_{3/2}$	6226.85	6229.68
$1s2s^2 2p^2 4P_{5/2}$	6257.99	6264.05	$1s2s(3S)2p^3 4P_{1/2}$	6221.05	6223.62
$1s2s^2 2p^2 2S_{1/2}$	6240.58	6243.03	$1s2s(3S)2p^3 4P_{3/2}$	6221.24	6223.52
$1s2s^2 2p^2 2P_{1/2}$	6245.72	6248.94	$1s2s(3S)2p^3 4P_{5/2}$	6221.32	6223.54
$1s2s^2 2p^2 2P_{3/2}$	6243.77	6247.23	$1s2s(3S)2p^3 4D_{1/2}$	6229.21	6231.96
$1s2s^2 2p^2 2D_{3/2}$	6247.38	6251.29	$1s2s(3S)2p^3 4D_{3/2}$	6229.21	6232.01
$1s2s^2 2p^2 2D_{5/2}$	6247.62	6251.38	$1s2s(3S)2p^3 4D_{5/2}$	6229.30	6232.00
$1s2p^4 4P_{1/2}$	6178.53	6180.77	$1s2s(3S)2p^3 4D_{7/2}$	6229.61	6231.85
$1s2p^4 4P_{3/2}$	6179.12	6181.26	$1s2s(3S)2p^3 2S_{1/2}$	6190.26	6192.27
$1s2p^4 4P_{5/2}$	6180.37	6182.44	$1s2s(3S)2p^3 2P_{1/2}$	6191.17	6193.98
$1s2p^4 2S_{1/2}$	6150.76	6152.75	$1s2s(3S)2p^3 2P_{3/2}$	6191.36	6193.65
$1s2p^4 2P_{1/2}$	6163.28	6165.34	$1s2s(1S)2p^3 2P_{1/2}$	6201.72	6204.18
$1s2p^4 2P_{3/2}$	6163.52	6166.42	$1s2s(1S)2p^3 2P_{3/2}$	6201.05	6206.82
$1s2p^4 2D_{3/2}$	6166.83	6169.56	$1s2s(3S)2p^3 2D_{3/2}$	6199.29	6199.03
$1s2p^4 2D_{5/2}$	6167.00	6169.69	$1s2s(3S)2p^3 2D_{5/2}$	6199.57	6202.14
			$1s2s(1S)2p^3 2D_{3/2}$	6209.23	6212.93
			$1s2s(1S)2p^3 2D_{5/2}$	6209.03	6212.33
$S^{11+}$ 离子低位激发态					
激发态	本文	NIST[31]	激发态	本文	NIST[31]
$1s^2 2s 2p^2 4P_{1/2}$	8617.38	8617.29	$1s^2 2s^2 2p 2P_{1/2}$	8641.58	8641.33
$1s^2 2s 2p^2 4P_{3/2}$	8616.83	8616.70	$1s^2 2s^2 2p 2P_{3/2}$	8639.78	8639.70
$1s^2 2s 2p^2 4P_{5/2}$	8615.98	8615.86	$1s^2 2p^3 4S_{3/2}$	8565.71	8565.69
$1s^2 2s 2p^2 2S_{1/2}$	8586.78	8586.83	$1s^2 2p^3 2P_{1/2}$	8545.44	8545.36
$1s^2 2s 2p^2 2P_{1/2}$	8584.06	8583.71	$1s^2 2p^3 2P_{3/2}$	8545.42	8545.14
$1s^2 2s 2p^2 2P_{3/2}$	8582.99	8582.88	$1s^2 2p^3 2D_{3/2}$	8555.97	8555.79
$1s^2 2s 2p^2 2D_{3/2}$	8598.49	8598.35	$1s^2 2p^3 2D_{5/2}$	8555.74	8555.72
$1s^2 2s 2p^2 2D_{5/2}$	8598.39	8598.31			
$S^{12+}$ 离子低位激发态					
激发态	本文	NIST[31]	激发态	本文	NIST[31]
$1s^2 2s^2 1S_0$	8076.99	8076.93	$1s^2 2s 2p 1P_1$	8028.74	8028.63
$1s^2 2p^2 1S_0$	7987.61	7987.44	$1s^2 2s 2p 3P_0$	8052.36	8052.23
$1s^2 2p^2 1D_2$	8004.12	8003.85	$1s^2 2s 2p 3P_1$	8051.81	8051.70
$1s^2 2p^2 3P_0$	8012.11	8012.06	$1s^2 2s 2p 3P_2$	8050.64	8050.50
$1s^2 2p^2 3P_1$	8011.53	8011.37			
$1s^2 2p^2 3P_2$	8010.43	8010.37			

正, 如 QED 和高阶相对论修正. 目前, 没有更多类硼 S 离子的 K 壳层激发共振态的能级数据可以对比, 因此需要更加精确的实验或理论数据来验证. 在研究类硼 S 离子 K 壳层激发共振态的辐射跃迁

和俄歇跃迁中, 需要  $S^{11+}$  离子低位激发态和  $S^{12+}$  离子低位激发态的能级和波函数. 本文采用多组态 Rayleigh-Ritz 变分方法对它们进行了计算, 结果列于表 2. 表 2 还列出了 NIST (National Institute

of Standards and Technology) 数据库<sup>[31]</sup>的实验数据, 对比发现, 本文的计算数据和 NIST 实验数据的均方根偏差仅为 0.15 eV, 符合得非常好.

表 3 给出了类硼 S 离子的 K 壳层激发共振态  $1s2s^22p^2$ ,  $1s2s2p^3$ ,  $1s2p^4$   $^2, ^4L$  ( $L = S, P, D$ ) 的电偶极辐射跃迁线强度  $S$ , 辐射跃迁率  $A_{ik}$ , 振子强度

$f_{ki}$  和跃迁波长  $\lambda$ . 对于辐射跃迁振子强度和辐射跃迁率, 表 3 均列出了三种规范的计算结果: 长度规范, 速度规范, 加速度规范. 三种规范的一致性可反映理论计算的波函数精确程度. 图 1 给出了电偶极辐射跃迁振子强度长度规范  $f_l$  和速度规范  $f_v$ , 长度规范  $f_l$  和加速度规范  $f_a$  的对比图. 从图 1 可以看

表 3 类硼 S 离子的 K 壳层激发共振态  $1s2s^22p^2$ ,  $1s2s2p^3$ ,  $1s2p^4$   $^2, ^4L$  ( $L = S, P, D$ ) 的电偶极辐射跃迁线强度  $S$  (a.u.), 辐射跃迁率  $A_{ik}$  ( $s^{-1}$ ) (长度规范  $A_l$ , 速度规范  $A_v$ , 加速度规范  $A_a$ ), 跃迁振子强度  $f_{ki}$  (长度规范  $f_l$ , 速度规范  $f_v$ , 加速度规范  $f_a$ ), 和跃迁波长  $\lambda$  ( $\text{\AA}$ ), 方括号的数代表 10 的幂次方

Table 3. Line strengths  $S$  (a.u.), radiative transition probabilities  $A_{ik}$  (length gauge  $A_l$ , velocity gauge  $A_v$ , acceleration gauge  $A_a$ ) ( $s^{-1}$ ), transition oscillator strengths  $f_{ki}$  (length gauge  $f_l$ , velocity gauge  $f_v$ , and acceleration gauge  $f_a$ ), and transition wavelengths  $\lambda$  ( $\text{\AA}$ ) of electric dipole transitions of the K-shell excited resonance states  $1s2s^22p^2$ ,  $1s2s2p^3$ ,  $1s2p^4$   $^2, ^4L$  ( $L = S, P, D$ ) in boron-like sulfur ion. The numbers in square brackets represent the power of 10.

初态	末态	$S/\text{a.u.}$	$A_{ik}/s^{-1}$				$f_{ki}$			$\lambda/\text{\AA}$		
			$A_l$	$A_v$	$A_a$	文献[17]	$f_l$	$f_v$	$f_a$	本文	文献[17]	文献[21]
$1s2s^22p^2\ ^4P$	$1s^22p^3\ ^4S^o$	5.06[-4]	5.48[11]	5.32[11]	5.31[11]	5.09[11]	7.14[-3]	6.94[-3]	6.92[-3]	5.374	5.379	
$1s2p^4\ ^4P$	$1s^22p^3\ ^4S^o$	2.14[-2]	2.55[13]	2.65[13]	2.67[13]	2.57[13]	3.12[-1]	3.23 [-1]	3.26[-1]	5.196	5.193	5.203
$1s2s^22p^2\ ^2S$	$1s^22s^22p\ ^2P^o$	3.81[-3]	2.78[13]	2.82[13]	2.80[13]	2.93[13]	3.72[-2]	3.78[-2]	3.76[-2]	5.166	5.176	5.167
	$1s^22p^3\ ^2P^o$	1.78[-4]	1.15[12]	1.15[12]	1.02[12]	9.87[11]	1.68[-3]	1.67[-3]	1.48[-3]	5.379	5.383	
$1s2s^22p^2\ ^2P$	$1s^22s^22p\ ^2P^o$	3.26[-2]	7.88[13]	7.87[13]	7.84[13]	7.53[13]	3.18[-1]	3.18[-1]	3.17[-1]	5.175	5.176	
	$1s^22p^3\ ^2P^o$	1.80[-4]	3.87[11]	3.88[11]	3.99[12]	3.20[11]	1.69[-3]	1.69[-3]	1.74[-3]	5.388	5.392	
	$1s^22p^3\ ^2D^o$	6.30[-4]	1.37[12]	1.39[12]	1.40[12]	1.23[12]	3.56[-3]	3.61[-3]	3.64[-3]	5.364	5.368	
$1s2s^22p^2\ ^2D$	$1s^22s^22p\ ^2P^o$	1.92[-2]	2.77[13]	2.67[13]	2.64[13]	2.71[13]	1.87[-1]	1.80[-1]	1.78[-1]	5.181	5.183	
	$1s^22p^3\ ^2P^o$	1.01[-4]	1.29[11]	1.28[11]	1.45[11]	1.35[11]	9.43[-4]	9.34[-4]	1.06[-3]	5.396	5.401	
	$1s^22p^3\ ^2D^o$	3.68[-4]	7.98[11]	8.18[11]	8.25[11]	7.74[11]	3.46[-3]	3.55[-3]	3.59[-3]	5.371	5.375	
$1s2p^4\ ^2S$	$1s^22p^3\ ^2P^o$	7.14[-3]	5.17[13]	5.26[13]	5.28[13]	5.13[13]	6.96[-2]	7.08[-2]	7.11[-2]	5.178	5.175	5.191
$1s2p^4\ ^2P$	$1s^22p^3\ ^2P^o$	1.75[-2]	4.17[13]	4.26[13]	4.26[13]	3.97[13]	1.70[-1]	1.74[-1]	1.73[-1]	5.205	5.205	5.217
	$1s^22p^3\ ^2D^o$	2.89[-2]	6.97[13]	6.80[13]	6.71[13]	6.17[13]	1.69[-1]	1.65[-1]	1.63[-1]	5.182	5.182	5.191
$1s2p^4\ ^2D$	$1s^22s^22p\ ^2P^o$	2.58[-4]	4.09[11]	4.42[11]	4.14[11]		2.59[-3]	2.80[-3]	2.62[-3]	5.013		
	$1s^22p^3\ ^2P^o$	9.20[-3]	1.30[13]	1.32[13]	1.33[13]	1.32[13]	8.91[-2]	9.04[-2]	9.11[-2]	5.213	5.212	5.220
	$1s^22p^3\ ^2D^o$	2.74[-2]	3.93[13]	4.10[13]	4.13[13]	4.02[13]	1.60[-1]	1.67[-1]	1.68[-1]	5.190	5.189	5.198
$1s2s(^1S)2p^3\ ^4S^o$	$1s^22s2p^2\ ^4P$	3.08[-2]	1.11[14]	1.09[14]	1.09[14]	1.09[14]	1.50[-1]	1.48[-1]	1.47[-1]	5.188	5.189	
$1s2s(^3S)2p^3\ ^4S^o$	$1s^22s2p^2\ ^4P$	7.57[-4]	2.80[12]	2.90[12]	2.99[12]	2.28[12]	3.72[-3]	3.85[-3]	3.97[-3]	5.141	5.135	
$1s2s(^3S)2p^3\ ^4P^o$	$1s^22s2p^2\ ^4P$	2.33[-2]	2.81[13]	2.79[13]	2.80[13]	2.67[13]	1.14[-1]	1.13[-1]	1.13 [-1]	5.176	5.174	
$1s2s(^3S)2p^3\ ^4D^o$	$1s^22s2p^2\ ^4P$	3.89[-2]	2.79[13]	2.78[13]	2.77[13]	2.63[13]	1.89[-1]	1.88[-1]	1.88[-1]	5.194	5.192	
$1s2s(^3S)2p^3\ ^2S^o$	$1s^22s2p^2\ ^2P$	1.57[-2]	1.13[14]	1.13[14]	1.13[14]	8.54[13]	1.53[-1]	1.52[-1]	1.52[-1]	5.181	5.180	
$1s2s(^1S)2p^3\ ^2P^o$	$1s^22s2p^2\ ^2P$	1.05[-3]	2.50[12]	2.78[12]	2.74[12]	2.53[12]	1.02[-2]	1.13[-2]	1.12[-2]	5.205	5.208	
	$1s^22s2p^2\ ^2D$	1.71[-2]	4.14[13]	4.17[13]	4.14[13]	3.92[13]	1.00[-1]	1.01[-1]	1.00[-1]	5.172	5.173	
	$1s^22s2p^2\ ^2S$	1.59[-3]	3.85[12]	3.93[12]	3.50[12]	3.55[12]	4.66[-2]	4.76[-2]	4.24[-2]	5.176	5.174	
$1s2s(^3S)2p^3\ ^2P^o$	$1s^22s2p^2\ ^2P$	1.00[-2]	2.42[13]	2.42[13]	2.30[13]	3.01[13]	9.79[-2]	9.79[-2]	9.31[-2]	5.183	5.183	
	$1s^22s2p^2\ ^2D$	2.01[-3]	4.95[12]	4.92[12]	5.19[12]	3.38[12]	1.18[-2]	1.19[-2]	1.25[-2]	5.151	5.149	
	$1s^22s2p^2\ ^2S$	1.85[-3]	2.60[12]	2.64[12]	2.64[12]	2.19[12]	1.79[-2]	1.81[-2]	1.81[-2]	5.222	5.225	
$1s2s(^1S)2p^3\ ^2D^o$	$1s^22s2p^2\ ^2P$	1.85[-3]	2.60[12]	2.64[12]	2.64[12]	2.19[12]	1.79[-2]	1.81[-2]	1.81[-2]	5.222	5.225	
	$1s^22s2p^2\ ^2D$	5.21[-2]	7.49[13]	7.54[13]	7.55[13]	7.13[13]	3.04[-1]	3.06[-1]	3.07[-1]	5.189	5.191	
$1s2s(^3S)2p^3\ ^2D^o$	$1s^22s2p^2\ ^2P$	1.70[-2]	2.43[13]	2.49[13]	2.50[13]	2.40[13]	1.65[-1]	1.69[-1]	1.70[-1]	5.201	5.201	
	$1s^22s2p^2\ ^2D$	5.16[-3]	7.51[12]	7.72[12]	7.83[12]	7.84[12]	3.02[-2]	3.11[-2]	3.15[-2]	5.168	5.166	



出, 大多数  $\lg(f_i/f_v)$  和  $\lg(f_i/f_a)$  取值位于  $[-0.025, 0.025]$  范围. 随着线强度的增大, 三种规范的结果符合得越来越好.  $f_i$  和  $f_v$  的符合程度要好于  $f_i$  和  $f_a$  符合程度. 整体上, 三种规范结果显示出了良好的一致性, 从而表明了本文计算的波函数是足够精确的. 本文计算的电偶极辐射跃迁率与 MCDF 理论<sup>[17]</sup> 计算的辐射跃迁率的对比见图 2. 可以发现, 本文的计算的辐射跃迁率和 MCDF 理论计算值符合得较好, 大部分误差在 20% 以内. 唯一误差较大的跃迁为  $1s2s(^3S)2p^3\ ^2P^o \rightarrow 1s^22s2p^2\ ^2D$ , 本文计算的辐射跃迁率为  $4.95 \times 10^{12} \text{ (s}^{-1}\text{)}$ , 比 MCDF<sup>[17]</sup> 理论值  $3.38 \times 10^{12} \text{ (s}^{-1}\text{)}$  大约 46%. 表 3 的最后两列还给出了 MCDF<sup>[17]</sup> 和 SCUNC<sup>[21]</sup> 的理论波长. 本文计

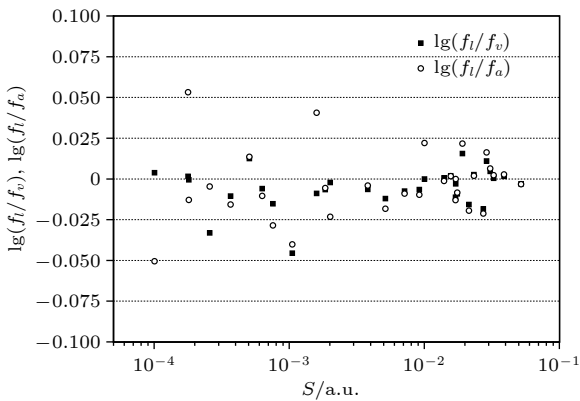


图 1 本文计算的电偶极跃迁振子强度的长度规范值分别与速度规范值及加速度规范值的对比

Fig. 1. Comparison diagram of the calculated electrical dipole transition oscillator strength values in length gauge with the velocity gauge and acceleration gauge.

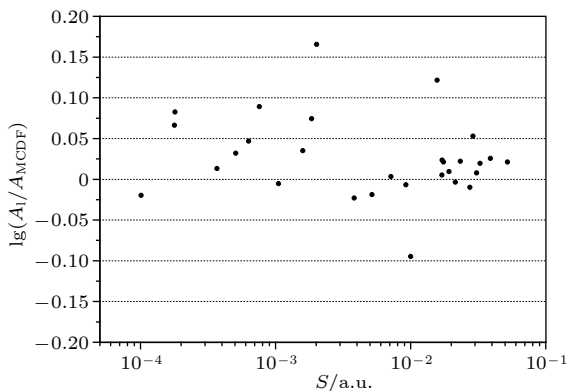


图 2 本文计算的长度规范的电偶极辐射跃迁率与 MCDF 理论计算的跃迁率的对比

Fig. 2. Comparison diagram of calculated radiative transition rates in length gauge with the theoretical data from MCDF calculations.

算的波长和 MCDF 理论波长符合得更好, 均方根偏差约为  $0.003 \text{ \AA}$ . 类硼 S 离子 K 壳层激发态的辐射跃迁波长位于 X 射线波段范围, 彼此十分靠近, 本文精确计算的理论值将为相关实验的光谱谱线鉴定提供有价值的理论参考数据.

俄歇跃迁过程起源于两个激发电子的库仑相互作用, 在类硼 S 离子 K 壳层激发共振态的俄歇跃迁过程中, 一个电子去填充 K 壳层的  $1s$  空位, 并且把多余的能量传递给另外一个电子, 通常情况下能量足够把电子离化, 因此接收能量的电子逃逸出系统成为自由电子, 剩余的系统为  $S^{12+}$  离子低位激发态. 利用鞍点复数转动方法, 我们计算了类硼 S 离子的 K 壳层激发态  $1s2s^22p^2$ ,  $1s2s2p^3$ ,  $1s2p^4\ ^2, ^4L(L = S, P, D)$  的俄歇跃迁率和俄歇分支率, 结果列于表 4. 计算中主要考虑了以下六个末态:  $1s^22s^2\ ^1S$ ,  $1s^22p^2\ ^1S$ ,  $1s^22p^2\ ^1D$ ,  $1s^22p^2\ ^3P$ ,  $1s^22s2p\ ^1P$ ,  $1s^22s2p\ ^3P$ , 其对应的能级列于表 2. 对比表 4 中列出的 MCDF 理论<sup>[17]</sup> 计算的俄歇跃迁率, 除  $1s2p^4$  共振态外, 本文的计算结果与 MCDF 的理论计算数值符合的较好. 表 5 给出了计算的俄歇电子能量. 本文的计算结果与 MCDF 方法的理论值<sup>[17]</sup> 约为  $1.97 \text{ eV}$ , 整体上符合得较好. 在俄歇跃迁计算中, MCDF 方法对于初态和末态仅采用了 35 个组态波函数和 10 个组态波函数. 在本文计算中, 对于初态和末态, 分别采用了 4500 和 300 个组态波函数. 由于考虑了更多的组态相互作用, 计算结果更为精确. 目前, 由于缺乏足够的实验和理论数据, 我们无法作出进一步的对比. 通过的俄歇分支率和俄歇电子能量可以更加清晰的了解类硼 S 离子 K 壳层激发共振态的俄歇跃迁过程, 综合利用这两者能够很好地对实验中的俄歇电子谱进行标定, 研究实验的动态反应过程. 本文的理论数据可为相关的实验提供有价值的理论数据.

## 4 结 论

本文采用多组态鞍点变分方法, 在考虑相对论修正、质量极化效应、QED 效应、共振能级移动的基础上, 充分考虑组态相互作用, 计算了类硼 S 离子 K 壳层激发共振态能级. 利用精确计算的波函数, 对这些 K 壳层激发共振态重要的电偶极辐射跃迁的线强度、振子强度、跃迁率、跃迁波长数据进行了系统计算, 得到了与其他文献符合较好的结

果. 本文计算的电偶极跃迁振子强度的长度规范、速度规范、加速度规范结果总体显示出良好的一致性, 从而证明本文计算的波函数是足够精确的. 利用鞍点复数转动方法, 对这些 K 壳层激发共振态

的俄歇跃迁率、俄歇分支率、俄歇电子能量进行了计算, 并与其他理论结果进行了对比. 本文的理论计算结果可为将来相关的实验光谱和俄歇电子谱线标定提供有价值的理论参考数据.

表 4 类硼 S 离子 K 壳层激发态  $1s2s^22p^2$ ,  $1s2s2p^3$ ,  $1s2p^4$ ;  ${}^4L(L=S, P, D)$  的俄歇跃迁率 ( $s^{-1}$ ) 和俄歇分支率 (BR), 方括号的数表示 10 的幂次方

Table 4. The Auger rates ( $s^{-1}$ ) and branching ratios (BR) of the K-shell excited resonance states  $1s2s^22p^2$ ,  $1s2s2p^3$ ,  $1s2p^4$ ;  ${}^4L(L=S, P, D)$  in boron-like sulfur ion. The numbers in square brackets represent the power of 10.

俄歇跃迁通道	俄歇跃迁率/ $s^{-1}$		BR/%	俄歇跃迁通道	俄歇跃迁率/ $s^{-1}$		BR(%)			
	本文	文献[17]			本文	文献[17]				
$1s2s^22p^2$	${}^2S \rightarrow 1s^22s^2 {}^1S$	5.05[13]	8.33[13]	23.3	$1s2s({}^1S)2p^3$	${}^2P^o \rightarrow 1s^22s^2 {}^1S$	6.63[11]	2.33[11]	0.3	
	${}^2S \rightarrow 1s^22s2p {}^1P^o$	6.35[13]	6.02[13]	29.3		${}^2P^o \rightarrow 1s^22s2p {}^1P^o$	1.18[12]	1.46[13]	0.5	
	${}^2S \rightarrow 1s^22s2p {}^3P^o$	1.61[13]	2.06[13]	7.4		${}^2P^o \rightarrow 1s^22s2p {}^3P^o$	1.29[14]	1.22[14]	59.6	
	${}^2S \rightarrow 1s^22p^2 {}^1S$	7.10[13]	7.85[13]	32.8		${}^2P^o \rightarrow 1s^22p^2 {}^1S$	6.50[12]	5.20[12]	3.0	
	${}^2S \rightarrow 1s^22p^2 {}^1D$	1.53[13]	1.48[13]	7.1		${}^2P^o \rightarrow 1s^22p^2 {}^1D$	5.25[12]	9.54[12]	2.4	
	${}^2P \rightarrow 1s^22s2p {}^1P^o$	1.82[13]	2.55[13]	14.7		${}^2P^o \rightarrow 1s^22p^2 {}^3P$	7.40[13]	7.54[13]	34.2	
	${}^2P \rightarrow 1s^22s2p {}^3P^o$	1.05[13]	7.34[12]	8.5		${}^2D^o \rightarrow 1s^22s2p {}^1P^o$	7.30[12]	8.82[12]	2.8	
	${}^2P \rightarrow 1s^22p^2 {}^1D_2$	1.97[10]	7.42[12]	0		${}^2D^o \rightarrow 1s^22s2p {}^3P^o$	1.74[14]	1.74[14]	66.1	
	${}^2P \rightarrow 1s^22p^2 {}^3P$	9.50[13]	8.68[13]	76.8		${}^2D^o \rightarrow 1s^22p^2 {}^1D$	9.55[12]	1.40[13]	3.6	
	${}^2D \rightarrow 1s^22s^2 {}^1S$	1.24[14]	1.14[14]	40.3		${}^2D^o \rightarrow 1s^22p^2 {}^3P$	7.25[13]	7.66[13]	27.5	
	${}^2D \rightarrow 1s^22s2p {}^1P^o$	6.80[13]	6.42[13]	22.1		${}^4S^o \rightarrow 1s^22p^2 {}^3P$	3.85[13]	3.88[13]	100	
	${}^2D \rightarrow 1s^22s2p {}^3P^o$	1.72[13]	2.26[13]	5.6	$1s2s({}^3S)2p^3$	${}^2S^o \rightarrow 1s^22p^2 {}^3P$	6.55[13]	4.35[13]	100	
${}^2D \rightarrow 1s^22p^2 {}^1S$	3.43[12]	2.82[12]	1.1			${}^2P^o \rightarrow 1s^22s^2 {}^1S$	4.33[12]	2.67[12]	1.6	
${}^2D \rightarrow 1s^22p^2 {}^1D$	9.15[13]	9.22[13]	29.8			${}^2P^o \rightarrow 1s^22s2p {}^1P^o$	1.28[14]	1.18[14]	46.9	
${}^2D \rightarrow 1s^22p^2 {}^3P$	3.37[12]	4.47[12]	1.1			${}^2P^o \rightarrow 1s^22s2p {}^3P^o$	5.40[12]	7.38[12]	2.0	
${}^4P \rightarrow 1s^22s2p {}^3P^o$	1.10[14]	1.18[14]	54.3			${}^2P^o \rightarrow 1s^22p^2 {}^1S$	4.54[13]	4.68[13]	16.6	
${}^4P \rightarrow 1s^22p^2 {}^3P$	9.25[13]	9.48[13]	45.7			${}^2P^o \rightarrow 1s^22p^2 {}^1D$	6.40[13]	6.23[13]	23.4	
$1s2p^4$	${}^2S \rightarrow 1s^22s^2 {}^1S$	2.75[12]	3.04[11]	0.6			${}^2P^o \rightarrow 1s^22p^2 {}^3P$	2.58[13]	3.47[13]	9.5
	${}^2S \rightarrow 1s^22s2p {}^1P^o$	4.15[12]	4.73[12]	1.0			${}^2D^o \rightarrow 1s^22s2p {}^1P^o$	1.76[14]	1.71[14]	54.5
	${}^2S \rightarrow 1s^22s2p {}^3P^o$	8.57[11]	1.48[12]	0.2			${}^2D^o \rightarrow 1s^22s2p {}^3P^o$	6.85[12]	1.16[13]	2.1
	${}^2S \rightarrow 1s^22p^2 {}^1S$	2.43[14]	3.66[13]	56.3			${}^2D^o \rightarrow 1s^22p^2 {}^1D$	1.18[14]	1.19[14]	36.5
	${}^2S \rightarrow 1s^22p^2 {}^1D$	1.81[14]	1.87[14]	41.9			${}^2D^o \rightarrow 1s^22p^2 {}^3P$	2.22[13]	1.99[13]	6.9
	${}^2P \rightarrow 1s^22s2p {}^1P^o$	2.73[11]	5.19[11]	0.1			${}^4S^o \rightarrow 1s^22p^2 {}^3P$	1.92[14]	2.02[14]	100
	${}^2P \rightarrow 1s^22s2p {}^3P^o$	2.38[11]	1.86[11]	0.1		${}^4P^o \rightarrow 1s^22s2p {}^3P^o$	1.35[14]	1.38[14]	88.9	
	${}^2P \rightarrow 1s^22p^2 {}^1D_2$	6.95[10]	2.06[13]	0		${}^4P^o \rightarrow 1s^22p^2 {}^3P$	1.68[13]	1.45[13]	11.1	
	${}^2P \rightarrow 1s^22p^2 {}^3P$	2.15[14]	1.90[14]	99.8		${}^4D^o \rightarrow 1s^22s2p {}^3P^o$	1.84[14]	1.84[14]	90.4	
	${}^2D \rightarrow 1s^22s^2 {}^1S$	2.95[12]	7.35[9]	1.0		${}^4D^o \rightarrow 1s^22p^2 {}^3P$	1.96[13]	1.41[13]	9.6	
	${}^2D \rightarrow 1s^22s2p {}^1P^o$	1.35[12]	1.38[12]	0.5						
	${}^2D \rightarrow 1s^22s2p {}^3P^o$	2.73[11]	4.54[11]	0.1						
${}^2D \rightarrow 1s^22p^2 {}^1S$	1.25[13]	4.09[13]	4.2							
${}^2D \rightarrow 1s^22p^2 {}^1D$	2.68[14]	2.74[14]	90.6							
${}^2D \rightarrow 1s^22p^2 {}^3P$	1.05[13]	1.26[13]	3.6							
${}^4P \rightarrow 1s^22s2p {}^3P^o$	1.96[12]	2.50[12]	0.9							
${}^4P \rightarrow 1s^22p^2 {}^3P$	2.08[14]	2.09[14]	99.1							

表 5 类硼 S 离子 K 壳层激发态  $1s2s^22p^2$ ,  $1s2s2p^3$ ,  $1s2p^4$   $^2, ^4L$  ( $L = S, P, D$ ) 的俄歇电子能量 (单位: eV)  
 Table 5. The Auger electron energies of the K-shell excited resonance states  $1s2s^22p^2$ ,  $1s2s2p^3$ ,  $1s2p^4$   $^2, ^4L$  ( $L = S, P, D$ ) in boron-like sulfur ion (unit: eV).

跃迁通道		本文	文献[17]	跃迁通道		本文	文献[17]	
$1s2s^22p^2\ ^2S_{1/2}$	$1s^22s^2\ ^1S_0$	1836.41	1837.80	$1s2s(^3S)2p^3\ ^2S_{1/2}$	$1s^22p^2\ ^3P_0$	1821.85	1825.18	
	$1s^22s2p\ ^1P_1$	1788.16	1787.75		$1s^22p^2\ ^3P_1$	1821.27	1824.50	
	$1s^22s2p\ ^3P_0$	1811.78	1812.97		$1s^22p^2\ ^3P_2$	1820.17	1823.49	
	$1s^22s2p\ ^3P_1$	1811.23	1812.44		$1s2s(^3S)2p^3\ ^2P_{1/2}$	$1s^22s^2\ ^1S_0$	1885.82	1888.35
	$1s^22s2p\ ^3P_2$	1810.06	1811.23			$1s^22s2p\ ^1P_0$	1837.57	1838.30
	$1s^22p^2\ ^1S_0$	1747.03	1746.35			$1s^22s2p\ ^3P_1$	1861.19	1863.52
	$1s^22p^2\ ^1D_2$	1763.54	1763.33			$1s^22s2p\ ^3P_2$	1860.64	1862.99
$1s2s^22p^2\ ^2P_{1/2}$	$1s^22s2p\ ^1P_1$	1783.02	1782.25	$1s^22s2p\ ^3P_3$	1859.47	1861.78		
	$1s^22s2p\ ^3P_0$	1806.64	1807.47	$1s^22p^2\ ^1S_0$	1796.44	1796.90		
	$1s^22s2p\ ^3P_1$	1806.09	1806.94	$1s^22p^2\ ^1D_2$	1812.95	1813.88		
	$1s^22s2p\ ^3P_2$	1804.92	1805.74	$1s^22p^2\ ^3P_0$	1820.94	1823.09		
	$1s^22p^2\ ^1D_2$	1758.40	1757.84	$1s^22p^2\ ^3P_1$	1820.36	1822.41		
	$1s^22p^2\ ^3P_0$	1766.39	1767.05	$1s^22p^2\ ^3P_2$	1819.26	1821.40		
	$1s^22p^2\ ^3P_1$	1765.81	1766.37	$1s2s(^3S)2p^3\ ^2P_{3/2}$	$1s^22s^2\ ^1S_0$	1885.63	1888.87	
$1s^22p^2\ ^3P_2$	1764.71	1765.36	$1s^22s2p\ ^1P_0$		1837.38	1838.83		
$1s2s^22p^2\ ^2P_{3/2}$	$1s^22s2p\ ^1P_1$	1784.97	1784.03	$1s^22s2p\ ^3P_1$	1861.00	1864.05		
	$1s^22s2p\ ^3P_0$	1808.59	1809.25	$1s^22s2p\ ^3P_2$	1860.45	1863.51		
	$1s^22s2p\ ^3P_1$	1808.04	1808.72	$1s^22s2p\ ^3P_3$	1859.28	1862.31		
	$1s^22s2p\ ^3P_2$	1806.87	1807.52	$1s^22p^2\ ^1S_0$	1796.25	1797.43		
	$1s^22p^2\ ^1D_2$	1760.35	1759.62	$1s^22p^2\ ^1D_2$	1812.76	1814.41		
	$1s^22p^2\ ^3P_0$	1768.34	1768.83	$1s^22p^2\ ^3P_0$	1820.75	1823.62		
	$1s^22p^2\ ^3P_1$	1767.76	1768.15	$1s^22p^2\ ^3P_1$	1820.17	1822.94		
$1s^22p^2\ ^3P_2$	1766.66	1767.14	$1s^22p^2\ ^3P_2$	1819.07	1821.93			
$1s2s^22p^2\ ^2D_{3/2}$	$1s^22s^2\ ^1S_0$	1829.61	1830.38	$1s2s(^1S)2p^3\ ^2P_{1/2}$	$1s^22s^2\ ^1S_0$	1875.27	1877.33	
	$1s^22s2p\ ^1P_1$	1781.36	1780.34		$1s^22s2p\ ^1P_0$	1827.02	1827.28	
	$1s^22s2p\ ^3P_0$	1804.98	1805.56		$1s^22s2p\ ^3P_1$	1850.64	1852.50	
	$1s^22s2p\ ^3P_1$	1804.43	1805.02		$1s^22s2p\ ^3P_2$	1850.09	1851.97	
	$1s^22s2p\ ^3P_2$	1803.26	1803.82		$1s^22s2p\ ^3P_3$	1848.92	1850.77	
	$1s^22p^2\ ^1S_0$	1740.23	1738.94		$1s^22p^2\ ^1S_0$	1785.89	1785.88	
	$1s^22p^2\ ^1D_2$	1756.74	1755.92		$1s^22p^2\ ^1D_2$	1802.40	1802.87	
$1s^22p^2\ ^3P_0$	1764.73	1765.13	$1s^22p^2\ ^3P_0$	1810.39	1812.08			
$1s^22p^2\ ^3P_1$	1764.15	1764.45	$1s^22p^2\ ^3P_1$	1809.81	1811.40			
$1s^22p^2\ ^3P_2$	1763.05	1763.44	$1s^22p^2\ ^3P_2$	1808.71	1810.39			
$1s2s^22p^2\ ^2D_{5/2}$	$1s^22s^2\ ^1S_0$	1829.37	1830.33	$1s2s(^1S)2p^3\ ^2P_{3/2}$	$1s^22s^2\ ^1S_0$	1875.94	1877.26	
	$1s^22s2p\ ^1P_1$	1781.12	1780.29		$1s^22s2p\ ^1P_0$	1827.69	1827.21	
	$1s^22s2p\ ^3P_0$	1804.74	1805.51		$1s^22s2p\ ^3P_1$	1851.31	1852.43	
	$1s^22s2p\ ^3P_1$	1804.19	1804.97		$1s^22s2p\ ^3P_2$	1850.76	1851.90	
	$1s^22s2p\ ^3P_2$	1803.02	1803.77		$1s^22s2p\ ^3P_3$	1849.59	1850.70	
	$1s^22p^2\ ^1S_0$	1739.99	1738.89		$1s^22p^2\ ^1S_0$	1786.56	1785.81	
	$1s^22p^2\ ^1D_2$	1756.50	1755.87		$1s^22p^2\ ^1D_2$	1803.07	1802.80	
$1s^22p^2\ ^3P_0$	1764.49	1765.08	$1s^22p^2\ ^3P_0$	1811.06	1812.01			
$1s^22p^2\ ^3P_1$	1763.91	1764.40	$1s^22p^2\ ^3P_1$	1810.48	1811.33			
$1s^22p^2\ ^3P_2$	1762.81	1763.39	$1s^22p^2\ ^3P_2$	1809.38	1810.32			

表 5 (续) 类硼 S 离子 K 壳层激发态  $1s2s^22p^2$ ,  $1s2s2p^3$ ,  $1s2p^4$   $^2, ^4L$  ( $L = S, P, D$ ) 的俄歇电子能量 (单位: eV)  
 Table 5 (continued). The Auger electron energies of the K-shell excited resonance states  $1s2s^22p^2$ ,  $1s2s2p^3$ ,  $1s2p^4$   $^2, ^4L$  ( $L = S, P, D$ ) in boron-like sulfur ion (unit: eV).

跃迁通道	本文	文献[17]	跃迁通道	本文	文献[17]	
$1s2p^4\ ^2S_{1/2}$	$1s^22s^2\ ^1S_0$	1926.23	$1s2s(^3S)2p^3\ ^2D_{3/2}$	$1s^22s2p\ ^1P_0$	1829.45	1831.14
	$1s^22s2p\ ^1P_1$	1877.98		$1s^22s2p\ ^3P_0$	1853.07	1856.36
	$1s^22s2p\ ^3P_0$	1901.60		$1s^22s2p\ ^3P_1$	1852.52	1855.83
	$1s^22s2p\ ^3P_1$	1901.05		$1s^22s2p\ ^3P_2$	1851.35	1854.62
	$1s^22s2p\ ^3P_2$	1899.88		$1s^22p^2\ ^1D_2$	1804.83	1806.72
	$1s^22p^2\ ^1S_0$	1836.85		$1s^22p^2\ ^3P_0$	1812.82	1815.93
	$1s^22p^2\ ^1D_2$	1853.36		$1s^22p^2\ ^3P_1$	1812.24	1815.25
	$1s2p^4\ ^2P_{1/2}$	$1s^22s2p\ ^1P_1$	1865.46		$1s^22p^2\ ^3P_2$	1811.14
$1s^22s2p\ ^3P_0$		1889.08	$1s2s(^3S)2p^3\ ^2D_{3/2}$	$1s^22s2p\ ^1P_0$	1829.17	1830.60
$1s^22s2p\ ^3P_1$		1888.53		$1s^22s2p\ ^3P_0$	1852.79	1855.82
$1s^22s2p\ ^3P_2$		1887.36		$1s^22s2p\ ^3P_1$	1852.24	1855.28
$1s^22p^2\ ^1D_2$		1840.84		$1s^22s2p\ ^3P_2$	1851.07	1854.08
$1s^22p^2\ ^3P_0$		1848.83		$1s^22p^2\ ^1D_2$	1804.55	1806.18
$1s^22p^2\ ^3P_1$		1848.25		$1s^22p^2\ ^3P_0$	1812.54	1815.39
$1s^22p^2\ ^3P_2$		1847.15		$1s^22p^2\ ^3P_1$	1811.96	1814.71
$1s2p^4\ ^2P_{3/2}$	$1s^22s2p\ ^1P_1$	1865.22		$1s^22p^2\ ^3P_2$	1810.86	1813.70
	$1s^22s2p\ ^3P_0$	1888.84	$1s2s(^1S)2p^3\ ^2D_{3/2}$	$1s^22s2p\ ^1P_0$	1819.51	1819.23
	$1s^22s2p\ ^3P_1$	1888.29		$1s^22s2p\ ^3P_0$	1843.13	1844.45
	$1s^22s2p\ ^3P_2$	1887.12		$1s^22s2p\ ^3P_1$	1842.58	1843.92
	$1s^22p^2\ ^1D_2$	1840.60		$1s^22s2p\ ^3P_2$	1841.41	1842.71
	$1s^22p^2\ ^3P_0$	1848.59		$1s^22p^2\ ^1D_2$	1794.89	1794.81
	$1s^22p^2\ ^3P_1$	1848.01		$1s^22p^2\ ^3P_0$	1802.88	1804.02
	$1s^22p^2\ ^3P_2$	1846.91		$1s^22p^2\ ^3P_1$	1802.30	1803.35
$1s2p^4\ ^2D_{3/2}$	$1s^22s^2\ ^1S_0$	1910.16		$1s^22p^2\ ^3P_2$	1801.20	1802.33
	$1s^22s2p\ ^1P_1$	1861.91	$1s2s(^1S)2p^3\ ^2D_{5/2}$	$1s^22s2p\ ^1P_0$	1819.71	1819.38
	$1s^22s2p\ ^3P_0$	1885.53		$1s^22s2p\ ^3P_0$	1843.33	1844.60
	$1s^22s2p\ ^3P_1$	1884.98		$1s^22s2p\ ^3P_1$	1842.78	1844.07
	$1s^22s2p\ ^3P_2$	1883.81		$1s^22s2p\ ^3P_2$	1841.61	1842.86
	$1s^22p^2\ ^1S_0$	1820.78		$1s^22p^2\ ^1D_2$	1795.09	1794.96
	$1s^22p^2\ ^1D_2$	1837.29		$1s^22p^2\ ^3P_0$	1803.08	1804.17
	$1s^22p^2\ ^3P_0$	1845.28		$1s^22p^2\ ^3P_1$	1802.50	1803.50
$1s2p^4\ ^2D_{5/2}$	$1s^22p^2\ ^3P_1$	1844.70		$1s^22p^2\ ^3P_2$	1801.40	1802.49
	$1s^22p^2\ ^3P_2$	1843.60	$1s2s(^3S)2p^3\ ^4S_{3/2}$	$1s^22p^2\ ^3P_0$	1807.49	1810.50
	$1s^22s^2\ ^1S_0$	1909.99		$1s^22p^2\ ^3P_1$	1806.91	1809.82
	$1s^22s2p\ ^1P_1$	1861.74		$1s^22p^2\ ^3P_2$	1805.81	1808.81
	$1s^22s2p\ ^3P_0$	1885.36	$1s2s(^1S)2p^3\ ^4S_{3/2}$	$1s^22p^2\ ^3P_0$	1785.26	1785.14
	$1s^22s2p\ ^3P_1$	1884.81		$1s^22p^2\ ^3P_1$	1784.68	1784.46
	$1s^22s2p\ ^3P_2$	1883.64		$1s^22p^2\ ^3P_2$	1783.58	1783.45
	$1s^22p^2\ ^1S_0$	1820.61	$1s2s(^3S)2p^3\ ^4P_{1/2}$	$1s^22s2p\ ^3P_0$	1831.31	1832.66
$1s^22p^2\ ^1D_2$	1837.12		$1s^22s2p\ ^3P_1$	1830.76	1832.13	
$1s^22p^2\ ^3P_0$	1845.11		$1s^22s2p\ ^3P_2$	1829.59	1830.93	
$1s^22p^2\ ^3P_1$	1844.53		$1s^22p^2\ ^3P_0$	1791.06	1792.24	
$1s^22p^2\ ^3P_2$	1843.43		$1s^22p^2\ ^3P_1$	1790.48	1791.56	

表 5 (续) 类硼 S 离子 K 壳层激发态  $1s2s^22p^2$ ,  $1s2s2p^3$ ,  $1s2p^4$ ,  ${}^4L$  ( $L = S, P, D$ ) 的俄歇电子能量 (单位: eV)  
 Table 5 (continued). The Auger electron energies of the K-shell excited resonance states  $1s2s^22p^2$ ,  $1s2s2p^3$ ,  $1s2p^4$ ,  ${}^4L$  ( $L = S, P, D$ ) in boron-like sulfur ion (unit: eV).

跃迁通道	本文	文献[17]	跃迁通道	本文	文献[17]		
$1s2s^22p^2\ {}^4P_{1/2}$	$1s^22s2p\ {}^3P_0$	1792.86	1791.05	$1s2s({}^3S)2p^3\ {}^4P_{3/2}$	$1s^22p^2\ {}^3P_2$	1789.38	1790.55
	$1s^22s2p\ {}^3P_1$	1792.31	1790.51		$1s^22s2p\ {}^3P_0$	1831.12	1832.56
	$1s^22s2p\ {}^3P_2$	1791.14	1789.31		$1s^22s2p\ {}^3P_1$	1830.57	1832.03
	$1s^22p^2\ {}^3P_0$	1752.61	1750.62		$1s^22s2p\ {}^3P_2$	1829.40	1830.83
	$1s^22p^2\ {}^3P_1$	1752.03	1749.94		$1s^22p^2\ {}^3P_0$	1790.87	1792.14
	$1s^22p^2\ {}^3P_2$	1750.93	1748.93		$1s^22p^2\ {}^3P_1$	1790.29	1791.46
$1s2s^22p^2\ {}^4P_{3/2}$	$1s^22s2p\ {}^3P_0$	1793.53	1791.83	$1s2s({}^3S)2p^3\ {}^4P_{5/2}$	$1s^22p^2\ {}^3P_2$	1789.19	1790.45
	$1s^22s2p\ {}^3P_1$	1792.98	1791.30		$1s^22s2p\ {}^3P_0$	1831.04	1832.48
	$1s^22s2p\ {}^3P_2$	1791.81	1790.09		$1s^22s2p\ {}^3P_1$	1830.49	1831.95
	$1s^22p^2\ {}^3P_0$	1753.28	1751.40		$1s^22s2p\ {}^3P_2$	1829.32	1830.75
	$1s^22p^2\ {}^3P_1$	1752.70	1750.72		$1s^22p^2\ {}^3P_0$	1790.79	1792.06
	$1s^22p^2\ {}^3P_2$	1751.60	1749.71		$1s^22p^2\ {}^3P_1$	1790.21	1791.38
$1s2s^22p^2\ {}^4P_{5/2}$	$1s^22s2p\ {}^3P_0$	1794.37	1792.66	$1s2s({}^3S)2p^3\ {}^4D_{1/2}$	$1s^22p^2\ {}^3P_2$	1789.11	1790.37
	$1s^22s2p\ {}^3P_1$	1793.82	1792.13		$1s^22s2p\ {}^3P_0$	1823.15	1824.54
	$1s^22s2p\ {}^3P_2$	1792.65	1790.92		$1s^22s2p\ {}^3P_1$	1822.60	1824.01
	$1s^22p^2\ {}^3P_0$	1754.12	1752.23		$1s^22s2p\ {}^3P_2$	1821.43	1822.80
	$1s^22p^2\ {}^3P_1$	1753.54	1751.55		$1s^22p^2\ {}^3P_0$	1782.90	1784.11
	$1s^22p^2\ {}^3P_2$	1752.44	1750.54		$1s^22p^2\ {}^3P_1$	1782.32	1783.43
$1s2p^4\ {}^4P_{1/2}$	$1s^22s2p\ {}^3P_0$	1873.83	1876.31	$1s2s({}^3S)2p^3\ {}^4D_{3/2}$	$1s^22p^2\ {}^3P_2$	1781.22	1782.42
	$1s^22s2p\ {}^3P_1$	1873.28	1875.78		$1s^22s2p\ {}^3P_0$	1823.15	1824.49
	$1s^22s2p\ {}^3P_2$	1872.11	1874.57		$1s^22s2p\ {}^3P_1$	1822.60	1823.96
	$1s^22p^2\ {}^3P_0$	1833.58	1835.88		$1s^22s2p\ {}^3P_2$	1821.43	1822.75
	$1s^22p^2\ {}^3P_1$	1833.00	1835.20		$1s^22p^2\ {}^3P_0$	1782.90	1784.06
	$1s^22p^2\ {}^3P_2$	1831.90	1834.19		$1s^22p^2\ {}^3P_1$	1782.32	1783.39
$1s2p^4\ {}^4P_{3/2}$	$1s^22s2p\ {}^3P_0$	1873.24	1875.77	$1s2s({}^3S)2p^3\ {}^4D_{5/2}$	$1s^22p^2\ {}^3P_2$	1781.22	1782.38
	$1s^22s2p\ {}^3P_1$	1872.69	1875.24		$1s^22s2p\ {}^3P_0$	1823.06	1824.41
	$1s^22s2p\ {}^3P_2$	1871.52	1874.03		$1s^22s2p\ {}^3P_1$	1822.51	1823.88
	$1s^22p^2\ {}^3P_0$	1832.99	1835.34		$1s^22s2p\ {}^3P_2$	1821.34	1822.67
	$1s^22p^2\ {}^3P_1$	1832.41	1834.66		$1s^22p^2\ {}^3P_0$	1782.81	1783.98
	$1s^22p^2\ {}^3P_2$	1831.31	1833.65		$1s^22p^2\ {}^3P_1$	1782.23	1783.30
$1s2p^4\ {}^4P_{5/2}$	$1s^22s2p\ {}^3P_0$	1871.99	1874.50	$1s2s({}^3S)2p^3\ {}^4D_{7/2}$	$1s^22p^2\ {}^3P_2$	1781.13	1782.29
	$1s^22s2p\ {}^3P_1$	1871.44	1873.96		$1s^22s2p\ {}^3P_1$	1822.20	1823.70
	$1s^22s2p\ {}^3P_2$	1870.27	1872.76		$1s^22s2p\ {}^3P_2$	1821.03	1822.50
	$1s^22p^2\ {}^3P_0$	1831.74	1834.07		$1s^22p^2\ {}^3P_1$	1781.92	1783.13
	$1s^22p^2\ {}^3P_1$	1831.16	1833.39		$1s^22p^2\ {}^3P_2$	1780.82	1782.12
	$1s^22p^2\ {}^3P_2$	1830.06	1832.38				

参考文献

[1] Altun Z, Yumak A, Badnell N R, Colgan J, Pindzol M S 2004 *A&A* **420** 775  
 [2] Rohringer N, Ryan D, London R A, Purvis M, Albert F, Dunn J, Bozek J D, Bostedt C, Graf A, Hill R, Hau-Riege S P, Rocca J J 2012 *Nature* **481** 488  
 [3] Martin A, Nicolas G, Jacques S 2006 *Nucl. Phys. A* **777** 1  
 [4] Feng L, Jiang G 2017 *Acta Phys. Sin.* **66** 153201 (in Chinese) [冯雷, 蒋刚 2017 *物理学报* **66** 153201]  
 [5] Rødbro M, Bruch R, Bisgaard P 1979 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **12** 2413  
 [6] Schneider D, Bruch R, Butscher W, Schwarz W H E 1981 *Phys. Rev. A* **24** 1223  
 [7] Bruch R, Schneider D, Schwarz W H E, Meinhart M, Johnson B M, Taulbjerg K 1979 *Phys. Rev. A* **19** 587

- [8] Itoh A, Schneider D, Schneider T, Zouros T J M, Nolte G, Schiwietz G, Zeitz W, Stolterfoht N 1985 *Phys. Rev. A* **31** 684
- [9] Kádár I, Ricz S, Végh J, Sulik B, Varga D, Berényi D 1990 *Phys. Rev. A* **41** 3518
- [10] Armour I A, Fawcett B C, Silver J D, Trabert E 1980 *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **13** 2701
- [11] Trabert E, Fawcett B C 1979 *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **12** L441
- [12] Faenov A Y 1994 *Phys. Scr.* **49** 41
- [13] Schlachter A S, Sant'Anna M M, Covington A M, Aguilar A, Gharaibeh M F, Emmons E D, Scully S W J, Phaneuf R A, Hinojosa G, Álvarez I, Cisneros C, Müller A, McLaughlin B M 2004 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **37** L103
- [14] Gharaibeh M F, Hassan N E I, Shorman M M A L, Bizau J M, Cubaynes D, Guilbaud S, Sakho I, Blancard C, McLaughlin B M 2014 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **47** 065201
- [15] Müller A, Borovik A, Buhr T, Hellhund J, Holste K, Kilcoyne A L D, Klumpp S, Martins M, Ricz S, Viehhaus J, Schippers S 2018 *Phys. Rev. A* **97** 013409
- [16] Müller A, Borovik A, Buhr J T, Hellhund J, Holste K, Kilcoyne A L D, Klumpp S, Martins M, Ricz S, Viehhaus J, Schippers S 2015 *Phys. Rev. Lett.* **114** 013002
- [17] Chen M H, Crasemann B 1988 *At. Data Nucl. Data Tables* **38** 381
- [18] Chen M H, Crasemann B 1987 *Phys. Rev. A* **35** 4579
- [19] Safronova U I, Shlyaptseva A S 1996 *Phys. Scr.* **54** 254
- [20] Zhou F Y, Ma Y L, Qu Y Z 2016 *Phys. Rev. A* **93** 060501
- [21] Sakho I, Sow M, Wagué A 2015 *Phys. Scr.* **90** 045401
- [22] Sun Y, Chen F, Gou B C 2011 *J. Chem. Phys.* **135** 124309
- [23] Sun Y, Gou B C, Chen C 2013 *Phys. Rev. A* **87** 032509
- [24] Chung K T 1979 *Phys. Rev. A* **20** 1743
- [25] Lin B, Berry H G, Shibata T, Livingston A E, Garnir H P, Bastin T, Désesquelles J, Savukov I 2003 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **67** 062507
- [26] Drake G W F 1982 *Adv. At. Mol. Phys.* **18** 399
- [27] Chung K T, Zhu X W, Wang Z W 1993 *Phys. Rev. A* **47** 1740
- [28] Drake G W F, Swainson R A 1990 *Phys. Rev. A* **41** 1243
- [29] Chung K T, Davis B F 1982 *Phys. Rev. A* **26** 3278
- [30] Davis B F, Chung K T 1984 *Phys. Rev. A* **29** 1878
- [31] Kramida A, Ralchenko Yu, Reader J, NIST ASD Team 2018 *NIST Atomic Spectra Database* (ver. 5.6.1) [Online]. Available: <https://physics.nist.gov/asd> [2019, March 28]. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, MD. DOI: <https://doi.org/10.18434/T4W30F>

# Radiative and Auger transitions of K-shell excited resonance states in boron-like sulfur ion<sup>\*</sup>

Sun Yan<sup>1)†</sup> Hu Feng<sup>1)</sup> Sang Cui-Cui<sup>2)</sup> Mei Mao-Fei<sup>1)</sup>  
Liu Dong-Dong<sup>1)</sup> Gou Bing-Cong<sup>3)</sup>

1) (*School of Mathematic and Physical Science, Xuzhou University of Technology, Xuzhou 221018, China*)

2) (*College of Science, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, China*)

3) (*School of Physics, Beijing institute of Technology, Beijing 100081, China*)

( Received 2 April 2019; revised manuscript received 11 June 2019 )

## Abstract

Non-relativistic energy values and wave functions of the K-shell excited resonance states  $1s2s^22p^2$ ,  $1s2s2p^3$ ,  $1s2p^4$ ,  ${}^4L$  ( $L = S, P, D$ ) in boron-like sulfur ion are calculated in the frame of multi-configuration saddle-point variation method. The electron correlation effects are considered by the expansion of configuration wave function. The wave functions are constructed and optimized by the orbital-spin angular momentum partial waves selected based on the rule of configuration interaction. To saturate the wave functional space and to improve the non-relativistic energy, the restricted variational method is used to calculate the restricted variational energy. Then, the mass polarization effect and relativistic correction are calculated by the perturbation theory. The quantum electrodynamics (QED) effect and higher-order relativistic correction are considered by the screened hydrogenic formula. Furthermore, the energy shift originating from the interaction between closed channel and open channel is also calculated. Finally, the accurate relativistic energy levels for these resonance states are obtained by adding the non-relativistic energy and all corrections.

Using the optimized wave functions, the line strengths, oscillator strengths, radiative transition rates and transition wavelengths of electric-dipole transitions for the K-shell excited resonance states in boron-like sulfur ion are systematically calculated. In this work, the oscillator strengths and transition rates are given in the length, velocity, and acceleration gauges. The good agreement among the three gauges reflects that the calculated wave functions are reasonably accurate. The calculated radiative transition rates and transition wavelengths are compared with other theoretical data. Good agreement is obtained except the transition:  $1s2s({}^3S)2p^3\ ^2P^o \rightarrow 1s2s^22p^2\ ^2D$ . The deviation between our theoretical result and the MCDF theoretical value is about 46%, which needs further verifying. The Auger rates, Auger branching ratios, and Auger electron energy values of the important decay channels of the K-shell excited states are calculated by the saddle-point complex-rotation method. The calculated Auger rates and Auger electron energy values are also in good agreement with the corresponding reference data. For some K-shell states, the related energy levels and Auger branching ratios are reported for the first time. The present calculations results will provide valuable theoretical data for the calibration of spectral lines and Auger electron spectra in the relevant experiments.

**Keywords:** K-shell excited resonance state, radiative transition, Auger transition, Auger electron

**PACS:** 31.15.A-, 32.30.Rj, 32.80.Zb

**DOI:** [10.7498/aps.68.20190481](https://doi.org/10.7498/aps.68.20190481)

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11604284, 51506184), the Natural Science Foundation of the Jiangsu Higher Education Institutions of China (Grant No. 17KJB140025), and Sun Yan is supported by the Qinlan Project of Jiangsu Province, China.

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [suenyangu@163.com](mailto:suenyangu@163.com)