

类氮 KXIII, CaXIV, ScXV 和 TiXVI 精细结构能级和跃迁波长的相对 论多组态 Dirac-Fock 计算

王宛珏

兰州铁道学院基础课部, 兰州 730070
1991年4月24日收到

本文用相对论多组态 Dirac-Fock 广义平均模型 (MCDF-EAL) 计算了可能成为激光工作物质的类氮 KXIII, CaXIV, ScXV 和 TiXVI 的 $2s^2 2p^3$, $2s 2p^4$, $2p^5$, $2s^2 2p^2 3s$, $2s^2 2p^2 3p$ 组态的各 44 条精细结构和 24 条 $3s-3p$ 组态跃迁波长, 其中关于 KXIII, CaXIV, ScXV 的 $3s, 3p$ 组态的计算值是本文预言的。

PACC: 3150; 3120T; 3270

一、引 言

高荷电离化的类铍-类氟离子 $3s-3p$ 组态跃迁可能产生短波长激光^[1]。要研究这种激光产生的机理, 必须首先研究这些离子 $3s, 3p$ 组态的能级。很多类氟和类氟离子 $3s, 3p$ 组态的能级及其间的跃迁已从实验上和理论上进行了系统的研究^[2-5]。我们最近也曾用 MCDF 方法对 $15 \leq Z \leq 54$ 类氟离子的包括 $3s, 3p$ 组态在内的各 30 条精细结构能级进行了系统计算^[6-9], 得到满意的结果。

目前对可能成为激光工作物质的类氮离子还多限于 $2s, 2p$ 及 $3d$ 组态^[10-13]。直到最近 Bhatia^[14] 才对几个类氮离子包括 $3s, 3p$ 组态在内的若干能级及 $3s-3p$ 跃迁的几条波长进行了理论计算。本文仍使用 MCDF 方法对类氮 KXIII, CaXIV, ScXV 和 TiXVI 的包括 $3s, 3p$ 组态在内的各 44 条精细结构能级和 24 条可能辐射的激光波长进行系统计算。计算结果可为类氮短波激光器的研制可能提供必要的原子参数。

二、理 论 方 法

在相对论多组态 Dirac-Fock (MCDF) 方法^[15]中, 一个核电荷为 Z 、电子数为 N 的离子的 Hamiltonian 量在原子单位中为

$$H = \sum_{i=1}^N [c\alpha_i \cdot p_i + (\beta - 1)c^2 + V_Z(r)] + \sum_{\substack{i,j \\ i < j}}^N \frac{1}{r_{ij}}.$$

单电子波函数为 Dirac 旋子,

$$u_a(r) = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_a(r) & \chi_a(r) \\ iQ_a(r) & \chi_a(r) \end{pmatrix}.$$

组态波函数 $\phi(r, JM)$ 通过单电子波函数的 $i-j$ 耦合得到. 原子态波函数由于组态相互作用的存在, 应为组态波函数的线性组合,

$$\phi_a(JM) = \sum_{r=1}^{n_c} C_r \phi(r, JM),$$

式中 $C_r(\alpha)$ 为组态 r 在原子态 α 中的混合系数.

广义平均能级由下式给出:

$$E_{opt} = \sum_r w_r H_{rr} / \sum_i w_i,$$

式中 H_{rr} 为 Hamiltonian 矩阵的对角元素, w_r 为统计权重因数.

使用 Grant 等人根据上述理论而编制的 MCDF 程序^[16], 同时还调用 McKenzie 等人考虑到 Breit 修正和包括真空极化和电子自能在内的量子电动力学修正而编制的 MCBP 修正程序^[17], 在我院 VAX-11/785 型计算机上作适当修改后, 选用均匀核电荷分布和广义平均能级模型计算类氮 KXIII, CaXIV, ScXV, TiXVI 的 $2s^2 2p^3$, $2s 2p^4$, $2p^5$, $2s^2 2p^2 3s$, $2s^2 2p^2 3p$ 组态的各 44 个精细结构能级, 再根据波长的计算公式

$$\lambda = \frac{99999217}{E_p - E_q} \text{ \AA}$$

对 $3s, 3p$ 向可能辐射的激光波长值进行计算. 其中 E_p 为上能级, E_q 为下能级.

三、计算结果与讨论

组态混合系数对能量本征矢贡献的份额表示组态相互作用的强弱. 由计算得知, $2s^2 2p^2 3s$ 组态中 J 值相同的相对论组态间有较强的相互作用, $2s^2 2p^2 3s$ 组态与 $2s 2p^4$ 组态间 J 值相同的相对论组态间有较弱的相互作用, 后者较前者一般要小两个数量级. 如 ScXV 离子的 $2s^2 2p^2 3s \ ^4P_{3/2}$ 态: 它自身的贡献为 7.59×10^{-1} , $2s^2 2p^2 3s \ ^2P_{3/2}$ 态的贡献为 6.51×10^{-1} , 而 $2s 2p^4 \ ^4P_{3/2}$ 态的贡献为 4.49×10^{-3} , $2s 2p^4 \ ^2D_{3/2}$ 态的贡献为 5.37×10^{-3} . 在 $2s^2 2p^2 3p$ 组态中 J 值相同的组态间也有较强的相互作用. 如 ScXV 离子的 $2s^2 2p^2 3p \ ^4D_{7/2}$ 态: 它自身的贡献为 7.50×10^{-1} , $2s^2 2p^2 3p \ ^2F_{7/2}$ 态的贡献为 6.61×10^{-1} .

4 个类氮离子的精细结构能级值列于表 1 和表 2 之中. 为便于比较, 在表 1 和表 2 中除列出本文计算值外, 还分别列出文献[10—12]的实验值和 Bhatia 的理论计算值^[14]. 表 1 和表 2 中能级值都是以基态 $2s^2 2p^3 \ ^4S_{3/2}$ 的能级为零点计算的. 单位为 cm^{-1} . 目前这 4 个类氮离子只有 $2s^2 2p^3$, $2s 2p^4$, $2p^5$ 组态的 15 个能级有实验值. $3s$, $3p$ 组态的能级值在实验上还未观察到. Cheng 等人曾对这 4 个离子及其他离子的较低 15 个能级值进行过计算^[12], Bhatia 对这个离子中的 TiXVI 进行过系统计算^[14]. 从表 1 和表 2 中可以看到: 对于 KXIII 离子, 本文计算值与实验值间的相对误差在 (0.087—3.70)% 之间,

表1 KXIII, CaXIV 离子相对于基态 $2p^3\ ^4S_{3/2}$ 的能级(单位为 cm^{-1})

序号	名 称			KXIII		CaXIV	
	LS	$i-j$	J	本文计算值	文献[10]实验值	本文计算值	文献[10]实验值
1	$2s^2 2p^3\ ^4S_{3/2}$	$2p(0, 3/2)$	3/2	0	0	0	0
2	$^2D_{3/2}$	$2p(1/2, 2)$	3/2	104161	100551	109503	105966
3	$^2D_{5/2}$	$2p(1/2, 2)$	5/2	109647	105727	117518	113591
4	$^2P_{1/2}$	$2p(1/2, 0)$	1/2	160556	160640	172370	172464
5	$^2P_{3/2}$	$2p(0, 3/2)$	3/2	168290	168084	183683	183415
6	$2s2p^4\ ^4P_{3/2}$	$2s(1/2, 2)$	5/2	480071	480518	515382	515821
7	$^4P_{3/2}$	$2s(1/2, 2)$	3/2	495718	496255	535331	535877
8	$^4P_{1/2}$	$2s(1/2, 0)$	1/2	503226	503723	544589	545078
9	$^2D_{3/2}$	$2s(1, 3/2)$	3/2	674136	661721	723226	710774
10	$^2D_{5/2}$	$2s(1, 3/2)$	5/2	675071	662809	724793	712546
11	$^2S_{1/2}$	$2s(1, 3/2)$	1/2	781238	769705	836872	825137
12	$^2P_{3/2}$	$2s(0, 3/2)$	3/2	822681	801462	879601	858335
13	$^2P_{1/2}$	$2s(1/2, 0)$	1/2	843023	822583	905953	885673
14	$^2P^o\ ^2P_{3/2}$	$2p(0, 3/2)$	3/2	1287648	1256395	1379273	1347970
15	$^2P_{1/2}$	$2p(1/2, 0)$	1/2	1312737	1281725	1441227	1380199
16	$2s^2 2p^2 3s^4\ ^4P_{1/2}$	$3s(0, 1/2)$	1/2	3309437		3773641	
17	$^4P_{3/2}$	$3s(2, 1/2)$	3/2	3320619		3788397	
18	$^4P_{1/2}$	$3s(2, 1/2)$	5/2	3334350		3805415	
19	$^2P_{1/2}$	$3s(1, 1/2)$	1/2	3344771		3813563	
20	$^2P_{3/2}$	$3s(1, 1/2)$	3/2	3360775		3833125	
21	$^2D_{3/2}$	$3s(2, 1/2)$	5/2	3413839		3890310	
22	$^2D_{5/2}$	$3s(2, 1/2)$	3/2	3415059		3891996	
23	$^2S_{1/2}$	$3s(0, 1/2)$	1/2	3513863		3999013	
24	$2s^2 2p^2 3p^4\ ^4D_{1/2}$	$3p(0, 1/2)$	1/2	3440366		3915001	
25	$^4D_{3/2}$	$3p(0, 3/2)$	3/2	3448063		3925738	
26	$^2S_{1/2}$	$3p(1, 1/2)$	1/2	3450945		3927782	
27	$^4D_{5/2}$	$3p(2, 1/2)$	5/2	3461388		3941401	
28	$^4P_{3/2}$	$3p(2, 1/2)$	3/2	3468461		3947831	
29	$^4P_{1/2}$	$3p(2, 3/2)$	1/2	3468856		3949484	
30	$^4P_{3/2}$	$3p(2, 3/2)$	5/2	3474051		3957207	
31	$^4D_{7/2}$	$3p(2, 3/2)$	7/2	3476723		3958212	
32	$^2D_{3/2}$	$3p(2, 3/2)$	3/2	3484068		3965255	
33	$^2D_{5/2}$	$3p(1, 3/2)$	5/2	3502375		3988205	
34	$^2P_{3/2}$	$3p(1, 3/2)$	3/2	3511717		3996058	
35	$^4S_{3/2}$	$3p(2, 1/2)$	3/2	3515061		4001278	
36	$^2P_{1/2}$	$3p(0, 1/2)$	1/2	3527782		4011753	
37	$^2F_{5/2}$	$3p(2, 1/2)$	5/2	3551598		4039150	
38	$^2F_{7/2}$	$3p(2, 3/2)$	7/2	3556120		4044782	
39	$^2P_{3/2}$	$3p(2, 3/2)$	3/2	3582375		4071753	
40	$^2D_{5/2}$	$3p(2, 3/2)$	5/2	3583678		4074017	
41	$^2P_{1/2}$	$3p(2, 3/2)$	1/2	3595638		4085748	
42	$^2D_{3/2}$	$3p(1, 1/2)$	3/2	3608792		4103183	
43	$^2P_{1/2}$	$3p(1, 3/2)$	1/2	3679512		4175882	
44	$^2P_{3/2}$	$3p(0, 3/2)$	3/2	3681477		4178624	

表2 ScXV, TiXVI 离子相对基态 $2p^1\ ^4S_{3/2}$ 的能级(单位为 cm^{-1})

序号	名称			ScXV		TiXVI		
	LS	<i>l-l</i>	J	本文计算值	文献[11] 实验值	本文计算值	文献[12] 实验值	文献[14] 计算值
1	$2s^2 2p^3\ ^4S_{3/2}$	$2p(0, 3/2)$	3/2	0	0	0	0	
2	$^2D_{3/2}$	$2p(1/2, 2)$	3/2	114550	111200	119396	116030	119567
3	$^2D_{5/2}$	$2p(1/2, 2)$	5/2	125797	121960	134631	130720	135581
4	$^2P_{1/2}$	$2p(1/2, 0)$	1/2	184664	184840	197589	197700	197913
5	$^2P_{3/2}$	$2p(0, 3/2)$	3/2	200689	200450	219656	219250	200463
6	$2s 2p^4\ ^4P_{3/2}$	$2s(1/2, 2)$	5/2	551559	551980	588765	589140	587803
7	$^4P_{1/2}$	$2s(1/2, 2)$	3/2	576661	577220	619985	620470	618862
8	$^4P_{1/2}$	$2s(1/2, 0)$	1/2	587865	588360	633301	633660	632382
9	$^2D_{3/2}$	$2s(1, 3/2)$	3/2	773656	761250	825650	813080	822547
10	$^2D_{5/2}$	$2s(1, 3/2)$	5/2	776139	763990	829422	817210	827573
11	$^2S_{1/2}$	$2s(1, 3/2)$	1/2	893745	881890	952117	939920	948853
12	$^2P_{3/2}$	$2s(0, 3/2)$	3/2	937921	916720	997949	976650	994652
13	$^2P_{1/2}$	$2s(1/2, 0)$	1/2	971573	951660	1040352	1020500	1037978
14	$2p^5\ ^2P_{3/2}$	$2p(0, 3/2)$	3/2	1472971	1441710	1569078	1537660	1567689
15	$^2P_{1/2}$	$2p(1/2, 0)$	1/2	1513116	1482190	1618904	1587830	1619781
16	$2s^2 2p^2 3s\ ^4P_{1/2}$	$3s(0, 1/2)$	1/2	4267428		4790682		4804638
17	$^4P_{3/2}$	$3s(2, 1/2)$	3/2	4286713		4815656		4828831
18	$^4P_{5/2}$	$3s(2, 1/2)$	5/2	4307418		4842518		4854142
19	$^2P_{1/2}$	$3s(1, 1/2)$	1/2	4312775		4840410		4856455
20	$^2P_{3/2}$	$3s(1, 1/2)$	3/2	4336193		4870006		4884308
21	$^2D_{5/2}$	$3s(2, 1/2)$	5/2	4398148		4937753		4948723
22	$^2D_{3/2}$	$3s(2, 1/2)$	3/2	4400600		4941202		4952250
23	$^2S_{1/2}$	$3s(0, 1/2)$	1/2	4515263		5062706		5080460
24	$2s^2 2p^2 3p\ ^4D_{1/2}$	$3p(0, 1/2)$	1/2	4419038		4952445		4966148
25	$^4D_{3/2}$	$3p(0, 3/2)$	3/2	4434168		4971914		4985132
26	$^2S_{1/2}$	$3p(1, 1/2)$	1/2	4434783		4973361		4986123
27	$^4D_{5/2}$	$3p(2, 1/2)$	5/2	4452361		4994406		5007174
28	$^4P_{3/2}$	$3p(2, 1/2)$	3/2	4457644		4997958		5011808
29	$^4P_{1/2}$	$3p(2, 3/2)$	1/2	4461149		5003987		5016739
30	$^4P_{5/2}$	$3p(2, 3/2)$	5/2	4470517		5013701		5027365
31	$^4D_{7/2}$	$3p(2, 3/2)$	7/2	4471725		5017715		5031133
32	$^2D_{3/2}$	$3p(2, 3/2)$	3/2	4477450		5020820		5034798
33	$^2D_{5/2}$	$3p(1, 3/2)$	5/2	4505642		5054788		5068895
34	$^2P_{3/2}$	$3p(1, 3/2)$	3/2	4511446		5058005		5073328
35	$^4S_{3/2}$	$3p(2, 1/2)$	3/2	4519228		5069154		5082375
36	$^2P_{1/2}$	$3p(0, 1/2)$	1/2	4527286		5074670		5083866
37	$^2F_{5/2}$	$3p(2, 1/2)$	5/2	4558457		5109922		5121498
38	$^2F_{7/2}$	$3p(2, 3/2)$	7/2	4565297		5118017		5129565
39	$^2P_{3/2}$	$3p(2, 3/2)$	3/2	4591340		5144409		5162627
40	$^2D_{5/2}$	$3p(2, 3/2)$	5/2	4595844		5149423		5168917
41	$^2P_{1/2}$	$3p(2, 3/2)$	1/2	4607074		5159886		5176363
42	$^2D_{3/2}$	$3p(1, 1/2)$	3/2	4629709		5188702		5206794
43	$^2P_{1/2}$	$3p(1, 3/2)$	1/2	4703937		5263958		5274259
44	$^2P_{3/2}$	$3p(0, 3/2)$	3/2	4767721		5269116		5278658

表 3 类氮离子某些 $3s-3p$ 跃迁波长(单位为 $\text{\AA}$)

序号	低能级	序号	上能级	KXIII	CaXIV	ScXV	TiXVI	
16	$2s^2 2p^3 3s \ ^1P_{1/2}$	25	$2s^2 2p^3 3p \ ^4D_{3/2}$	721.365	657.475	599.736	551.779	554.035(f)
17	$\ ^1P_{3/2}$	27	$\ ^4D_{5/2}$	710.384	653.578	603.690	559.441	560.717(f)
		28	$\ ^4P_{3/2}$	676.398	627.219	585.031	548.540	546.517(f)
		29	$\ ^4P_{1/2}$	674.595	620.782	573.276	530.980	532.175(f)
		35	$\ ^4S_{3/2}$	514.292	469.746	430.080	394.480	394.409(f)
18	$\ ^3P_{3/2}$	30	$\ ^4P_{5/2}$	715.814	658.796	613.125	584.170	577.291(f)
		31	$\ ^4D_{7/2}$	702.380	654.463	608.617	570.786	565.000(f)
		33	$\ ^3D_{5/2}$	595.150	547.076	504.480	471.098	465.651(f)
		35	$\ ^4S_{1/2}$	553.370	510.561	472.121	441.236	438.149(f)
19	$\ ^3P_{1/2}$	32	$\ ^3D_{3/2}$	717.891	659.231	607.257	554.293	560.717(f)
		34	$\ ^3P_{3/2}$	598.996	547.960	503.345	459.569	461.099(f)
		39	$\ ^3P_{1/2}$	420.868	387.312	357.699	328.948	326.614(f)
20	$\ ^3P_{3/2}$	33	$\ ^3D_{5/2}$	706.215	644.828	590.148	541.178	541.750(f)
		34	$\ ^3P_{3/2}$	662.506	613.749	570.604	531.918	529.045(f)
		40	$\ ^3D_{3/2}$	448.626	415.124	385.132	357.888	351.359(f)
21	$\ ^3D_{5/2}$	33	$\ ^3D_{5/2}$	1130.761	1021.503	930.284	854.445	832.141(f)
		38	$\ ^1F_{7/2}$	703.329	647.367	598.269	554.742	552.969(f)
		39	$\ ^3P_{3/2}$	593.697	551.137	514.954	483.896	467.499(f)
		40	$\ ^3D_{5/2}$	589.140	544.345	505.827	472.434	454.145(f)
		42	$\ ^3D_{3/2}$	513.207	469.764	431.852	398.487	387.490(f)
22	$\ ^3D_{3/2}$	37	$\ ^1F_{5/2}$	732.391	679.560	633.485	592.698	590.849(f)
		39	$\ ^3P_{3/2}$	597.671	556.307	521.540	492.109	475.377(f)
		41	$\ ^3P_{1/2}$	553.774	516.124	484.322	457.281	446.203(f)
		42	$\ ^3D_{3/2}$	516.174	473.514	436.473	404.040	392.859(f)

注: (f)是根据文献[14]计算值算出的波长值。

而文献[13]在(0.15—4.23)%之间,对于 CaXIV 离子,本文在(0.085—3.45)%之间,而文献[13]在(0.14—4.01)%之间,对于 ScXV 离子,本文在(0.084—3.16)%之间,而文献[13]在(0.14—3.78)%之间;对于 TiXVI 离子,本文在(0.056—2.99)%之间,文献[13]在(0.10—3.74)%之间,而文献[14]在(0.11—3.72)%之间。由此可知,就与已知的 $2p$ 组态的 15 条实验能级相比较而言,本文的计算结果比他们的都要稍好一些。同时从表 1 和表 2 中还可看到,除 $2s^2 2p^3 \ ^2P_{1/2}, 2s2p^4 \ ^4P_{5/2}, \ ^4P_{3/2}, \ ^4P_{1/2}$ 组态的计算值比实验值稍小而外,其余的计算值(本文和文献[14])都比实验值稍大,而文献[14]中 TiXVI 离子的 $3s, 3p$ 组态的能级计算值比本文的计算值又稍大一些。由此推知,他们的误差也会比本文的稍大一些。

本文所计算的 24 条作为等离子体激光工作物质所可能发射出的激光波长值列于表 3 中。在表 3 中还列出根据文献[14]的 TiXVI 离子能级计算值算出的波长值 (f)。这两者的相对偏差在(0.018—4.03)%之间。这是由于两者的能级稍有差别所致。这 4 个类氮离子所可能发射的激光波长值在 $1130.761-326.614 \text{\AA}$ 之间,已进入短波范围。

由于目前尚无关于 KXIII, CaXIV, ScXV 的 $3s, 3p$ 组态能级及其间跃迁波长的实验数据和理论数据,所以本文的计算结果是关于它们的预言值。

- [1] R. C. Elton, *Appl. Opt.*, **14**(1975), 97.
- [2] C. Jupen *et al.*, *Phys. Rev.*, **A35**(1987), 116.
- [3] 张同发等, 中国激光, **16**(1989), 342.
- [4] C. Jupen, *Phys. Scr.*, **32**(1985), 527.
- [5] C. Jupen, *Phys. Scr.*, **32**(1985), 592.
- [6] 姜仁滨、王宛珏, 兰州铁道学院学报, **10**(1991), 30.
- [7] 姜仁滨、王宛珏, 原子与分子物理学报, **8**(1991), 1532.
- [8] 姜仁滨、王宛珏, 光学学报, **11**(1991), 704.
- [9] 王宛珏、姜仁滨, 光学学报, **11**(1991), 592.
- [10] B. Edlen, *Phys. Scr.*, **30**(1984), 141.
- [11] V. Kaufman *et al.*, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **17**(1988), 1766.
- [12] K. Mori, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **34**(1986), 113.
- [13] K. T. Cheng *et al.*, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **24**(1979), 130.
- [14] A. K. Bhatia, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **43**(1989), 107.
- [15] I. P. Grant, *Adv. Phys.*, **19**(1970), 747.
- [16] I. P. Grant *et al.*, *Comput. Phys. Commun.*, **21**(1980), 207.
- [17] B. J. McKenzie *et al.*, *Comput. Phys. Commun.*, **21**(1980), 233.

RELATIVISTIC MULTICONFIGURATION DIRAC-FOCK CALCULATION OF FINE-STRUCTURE ENERGY LEVELS AND TRANSITION WAVELENGTHS FOR N-LIKE KXIII, CaXIV, ScXV AND TiXVI

WANG WAN-JUE

Department of Basic Courses, Lanzhou Railway College, Lanzhou 730070

(Received 24 April 1991)

ABSTRACT

In this paper, by using extended average level (MCDF-EAL) model of relativistic multi-configuration Dirac-Fock code, we have calculated 44 fine-structure energy levels of $2s^2 2p^3$, $2s 2p^4$, $2p^5$, $2s^2 2p^3 3s$, $2s^2 2p^3 3p$ configurations and 24 transition wavelength of $3s-3p$ configuration of N-like KXIII; CaXIV, ScXV and TiXVI ions which may be the candidates for lasing action. The calculated values of $3s$, $3p$ configuration of KXIII, CaXIV and ScXV are our present results.

PACC: 3150; 3120T; 3270