

类铜 Au^{50+} 精细结构能级和光谱跃迁 的相对论多组态计算^{*}

谭明亮 朱正和

(成都科技大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

赵永宽 陈晓峰

(高温高密度等离子体物理重点实验室, 成都 610003)

(1995 年 6 月 22 日收到)

用相对论多组态方法计算了类铜离子 Au^{50+} 的精细结构能级和光谱跃迁参数, 所得结果很接近实验值. 通过对组态选取、有限核模型、Breit 修正和量子电动力学(QED)效应的分析, 指出该体系中存在更为明显的 QED 效应, 使 $4s-4p$ 跃迁波长的计算精度有了很大的提高.

PACC: 3220R; 3130; 3150

1 引 言

高离化重元素在磁约束和惯性约束聚变实验中起着重要作用^[1], 同时它与短波长 X 射线激光的研制也密切相关, 因此高 Z 元素高离化态的研究越来越引起人们重视. 由于高离化元素不同电荷态的大量谱线重叠, 使所观测的某个区域内出现了近于连续的谱线群, 给实验中谱线的辨认工作带来了困难. 因此, 对高离化元素的跃迁波长、跃迁几率和振子强度等跃迁参数进行准确的理论计算显得尤为重要.

Seely 等^[2]曾用激光打靶的方法得到了高离化 Au^{50+} 光谱, 并采用 Grant^[3]的多组态 Dirac-Fock(MCDF)程序对跃迁波长进行了计算, 其计算和实验结果多数符合较好, 并指出由于计算中考虑了量子电动力学(QED)修正, 提高了计算结果的精确度. 但对 $4s-4p$ 的跃迁, 实验值与计算值存在着很大的差别. 稍后, Cheng 等^[4]也采用 Grant 的 MCDF 方法, 在考虑了有限核修正的情况下重新进行了计算, 使计算结果有了一些改善. 后来 Seely 等^[5]又对类铜 Au^{50+} 的 $4s-4p$ 跃迁重新进行了光谱测量和理论计算, 得到的理论计算值与测量值间仍存在较大差别, 指出这种差别可能是计算中修正项(自能、真空极化、有限核和 Breit 修正)不准确所引起的. 但主要原因可能是由于 Grant 程序中忽略了对 Coulomb 项(也可能是 Breit 项)的电子相关效应所致.

本文采用原子结构的相对论多组态方法, 对类铜 Au^{50+} 的精细结构能级和光谱跃迁波长、跃迁几率和振子强度进行了较为系统的计算. 计算得到的波长值很接近实验观测

^{*} 国家教育委员会博士学科点科研基金及高温高密度等离子体物理重点实验室基金资助的课题.

值, 比以前的 MCDF 方法^[2]和模型势方法^[6]的计算结果要好. 同时指出, 该高离化的强电场体系中存在更为明显的量子电动力学效应.

2 理论方法

在相对论理论中, 一个核电荷为 Z , 电子数为 N 的离子 Hamiltonian 量为

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N [c\alpha \cdot P_i + (\beta - 1)c^2 + V_{nuc}(\mathbf{r}_i)] + \sum_{i<j}^N \frac{1}{r_{ij}}.$$

单电子的 Dirac 轨道在坐标表象中表示为:

$$\langle \mathbf{r} | nkm \rangle = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{nk}(\mathbf{r}) & \chi_{km}(\mathbf{r}/r) \\ iQ_{nk}(\mathbf{r}) & \chi_{-km}(\mathbf{r}/r) \end{pmatrix},$$

式中 $P_{nk}(\mathbf{r})$ 和 $Q_{nk}(\mathbf{r})$ 分别为径向波函数的大、小分量, $\chi_{km}(\mathbf{r}/r)$ 为旋子球谐函数 (spinor spherical harmonics).

N 电子体系的组态函数 $|\gamma PJM\rangle$ 由上述单电子 Dirac 轨道组成的 N 阶 Slater 行列式的线性组合得到.

由于组态相互作用, 原子态函数 $|\Gamma PJM\rangle$ 是具有相同 P, J 和 M 值的组态函数 $|\gamma PJM\rangle$ 线性组合而成

$$|\Gamma PJM\rangle = \sum_{r=1}^{n_c} C_{r\Gamma} |\gamma_r PJM\rangle,$$

式中 $C_{r\Gamma}$ 为组态混合系数.

径向波函数的大小分量 $P_{nk}(\mathbf{r})$ 和 $Q_{nk}(\mathbf{r})$ 可用自洽场方法通过解径向 Dirac 方程得出. 以 Breit 修正和 QED 修正作为微扰, 可得到能量和波函数的高阶近似.

本文根据上述相对论多组态理论, 采用最新版“多功能相对论原子结构程序”GRASP 2 (general purpose relativistic atomic structure program 2)¹⁾进行计算. 计算中根据宇称、角动量、能量等判据^[7], 分别选取偶宇称组态为 $3d^{10}4s, 3d^{10}4d, 3d^94s4d, 3d^94p4f, 3d^94s^2, 3d^94p^2, 3d^94d^2, 3d^94f^2, 3d^{10}5s, 3d^{10}5d, 3d^{10}5g, 3d^94s5s, 3d^94s5d$; 选取奇宇称组态为 $3d^{10}4p, 3d^{10}4f, 3d^94s4p, 3d^94s4f, 3d^94p4d, 3d^94d4f, 3d^{10}5p, 3d^{10}5f, 3d^94s5p, 3d^94s5f$ 等. 在计算时, 除考虑这些重要的组态外, 同时还采用了 Fermi 有限核模型、Breit 修正、自能修正和真空极化修正.

3 计算结果与讨论

表 1 给出了外层电子在 $n=4, 5$ 时跃迁波长的计算值与实验值, 波长单位为 nm, 每个计算值下面圆括号内的数字表示该计算值与实验值之差 $\Delta\lambda = \lambda_{\text{calc}} - \lambda_{\text{obs}}$, 单位为 10^{-4} nm. 由表 1 可知, 本文计算结果很接近实验值^[2], 比 Seely^[2]和 Ivanov^[6]分别用 MCDF 方法和模型势方法的计算结果更好. 限于篇幅, 表 2 只列出了部分跃迁的波长、跃迁几率和振子强度值. 从表 2 可知, 具有较大跃迁几率和振子强度的跃迁发生在 $3d-4f$ 之间, 这正

1) I. P. Grant, C. F. Fischer, GRASP 2, 私人通讯, 1992.

是实验室等离子体中高离化光谱的一大特征^[8].

特别值得注意的是,对 $4s-4p$ 间的跃迁, Seely^[2]和 Ivanov^[6]的理论计算与实验值间存在很大差别.如表 1 所示,对 $4s^2S_{1/2}-4p^2P_{1/2}$ 和 $4s^2S_{1/2}-4p^2P_{3/2}$ 间的跃迁, Seely 用 MCDF 方法的计算结果与实验值分别差 $955 \times 10^{-4}\text{nm}$ 和 $157 \times 10^{-4}\text{nm}$.对 $4s^2S_{1/2}-4p^2P_{1/2}$ 间的跃迁, Ivanov 用模型势方法的计算结果与实验值相差 $315 \times 10^{-4}\text{nm}$.这些差别远远超过了实验的不确定度 $15 \times 10^{-4}\text{nm}$ ^[2]. Seely^[2]和 Ivanov^[6]指出,理论计算和实验的差别是由于计算不准确所引起的,这种计算的不准确性可能主要源于计算中 QED 效应和剩余的电子相关效应考虑得不够充分^[2,4,5].

表 1 外层电子 ($n=4,5$) 跃迁波长的计算值与实验值(单位: nm)

跃迁	计算值 ¹⁾			实验值 ^[2]
	本文工作	文献[2]	文献[6]	
$4s^2S_{1/2}-4p^2P_{1/2}$	11.2485 (0)	11.153 (-955)	11.280 (315)	11.2485
$4s^2S_{1/2}-4p^2P_{3/2}$	4.8945 (17)	4.8771 (-157)	4.8919 (-9)	4.8928
$4p^2P_{1/2}-4d^2D_{3/2}$	3.9921 (-1)	3.9903 (-19)	3.9928 (6)	3.9922
$4p^2P_{3/2}-4d^2D_{5/2}$	6.2635 (-18)	6.2633 (-20)	6.2712 (59)	6.2653
$4d^2D_{3/2}-4f^2F_{5/2}$	5.9425 (-3)	5.9483 (55)	5.9007 (-421)	5.9428
$4d^2D_{5/2}-4f^2F_{7/2}$	6.6514 (14)	6.6574 (74)	6.6063 (-437)	6.6500
$4s^2S_{1/2}-5p^2P_{1/2}$	0.9563 (24)	0.9576 (37)	0.9067 (68)	0.9539
$4s^2S_{1/2}-5p^2P_{3/2}$	1.0100 (25)	1.0103 (28)	1.0133 (58)	1.0075
$4p^2P_{1/2}-5d^2D_{3/2}$	0.9802 (38)	0.9810 (46)	0.9851 (87)	0.9764
$4p^2P_{3/2}-5d^2D_{5/2}$	1.0905 (18)	1.0919 (32)	1.0966 (79)	1.0887
$4d^2D_{3/2}-5f^2F_{5/2}$	1.1829 (25)	1.1840 (36)	1.1901 (97)	1.1804
$4d^2D_{5/2}-5f^2F_{7/2}$	1.2120 (20)	1.2137 (37)	1.2210 (110)	1.2100
$4f^2F_{5/2}-5g^2G_{7/2}$	1.4003 (19)	1.4012 (28)	-	1.3984
$4f^2F_{7/2}-5g^2G_{9/2}$	1.4101 (14)	1.4110 (23)	-	1.4087

1) 圆括号内的数值为计算值和实验值之差,即 $\Delta\lambda = \lambda_{\text{calc}} - \lambda_{\text{obs}}$, 单位为 10^{-4}nm .

表 2 部分跃迁的波长、跃迁几率和振子强度¹⁾

跃迁	λ/nm	A/s^{-1}	g_f
$3d^{10}4s^2S_{1/2}-3d^94s(^3D)4p^4P_{1/2}$	0.6090	8.777(12)	9.762(-2)
$3d^{10}4s^2S_{1/2}-3d^94s(^3D)4p^4D_{1/2}$	0.5956	1.466(13)	1.559(-1)
$3d^{10}4s^2S_{1/2}-3d^94s(^1D)4p^2P_{1/2}$	0.5726	5.218(11)	5.130(-3)
$3d^{10}4s^2S_{1/2}-3d^94s(^3D)4p^2P_{1/2}$	0.5668	1.821(12)	1.754(-2)
$3d^{10}4s^2S_{1/2}-3d^94s(^3D)4p^4F_{3/2}$	0.6380	3.243(10)	7.915(-4)
$3d^{10}4s^2S_{1/2}-3d^94s(^3D)4p^2P_{3/2}$	0.6124	1.440(12)	3.238(-2)
$3d^{10}4s^2S_{1/2}-3d^94s(^3D)4p^2D_{3/2}$	0.6095	8.127(12)	1.810(-1)
$3d^{10}4s^2S_{1/2}-3d^94s(^3D)4p^4P_{3/2}$	0.5960	6.203(12)	1.321(-1)
$3d^{10}4s^2S_{1/2}-3d^94s(^3D)4p^4D_{3/2}$	0.5908	8.391(12)	1.756(-1)
$3d^{10}4s^2S_{1/2}-3d^94s(^1D)4p^2P_{3/2}$	0.5716	1.398(12)	2.739(-2)
$3d^{10}4s^2S_{1/2}-3d^94s(^1D)4p^2D_{3/2}$	0.5658	1.678(11)	3.221(-3)
$3d^{10}4s^2S_{1/2}-3d^94s(^3D)4f^4D_{1/2}$	0.5056	5.043(10)	3.865(-4)
$3d^{10}4s^2S_{1/2}-3d^94s(^3D)4f^4P_{1/2}$	0.5048	7.742(10)	5.916(-4)
$3d^{10}4s^2S_{1/2}-3d^94s(^3D)4f^2P_{1/2}$	0.4975	1.862(14)	1.388
$3d^{10}4s^2S_{1/2}-3d^94s(^1D)4f^2P_{1/2}$	0.4803	5.079(14)	3.513
$3d^{10}4s^2S_{1/2}-3d^94s(^3D)4f^4F_{3/2}$	0.5050	1.222(11)	1.869(-3)
$3d^{10}4s^2S_{1/2}-3d^94s(^3D)4f^4D_{3/2}$	0.5036	1.051(11)	1.599(-3)
$3d^{10}4s^2S_{1/2}-3d^94s(^3D)4f^4P_{3/2}$	0.5019	3.118(11)	4.710(-3)
$3d^{10}4s^2S_{1/2}-3d^94s(^3D)4f^2D_{3/2}$	0.4977	1.897(14)	2.818
$3d^{10}4s^2S_{1/2}-3d^94s(^3D)4f^2P_{3/2}$	0.4857	3.805(11)	5.382(-3)
$3d^{10}4s^2S_{1/2}-3d^94s(^1D)4f^2P_{3/2}$	0.4843	6.885(11)	9.682(-3)
$3d^{10}4s^2S_{1/2}-3d^94s(^1D)4f^2D_{3/2}$	0.4808	4.475(14)	6.203
$3d^{10}4p^2P_{1/2}-3d^94p^2(^3P)^4D_{1/2}$	0.5926	1.321(13)	1.391(-1)
$3d^{10}4p^2P_{1/2}-3d^94p^2(^3P)^2P_{1/2}$	0.5707	4.845(11)	4.731(-3)
$3d^{10}4p^2P_{1/2}-3d^94p^2(^1D)^2P_{1/2}$	0.5681	1.845(12)	1.786(-2)
$3d^{10}4p^2P_{1/2}-3d^94p^2(^3P)^4P_{1/2}$	0.5550	2.558(10)	2.363(-4)
$3d^{10}4p^2P_{1/2}-3d^94p^2(^1D)^2S_{1/2}$	0.5335	4.468(10)	3.813(-4)
$3d^{10}4p^2P_{1/2}-3d^94p^2(^3P)^2D_{3/2}$	0.6080	6.914(12)	1.533(-1)
$3d^{10}4p^2P_{1/2}-3d^94p^2(^3P)^4F_{3/2}$	0.5940	5.483(12)	1.160(-1)
$3d^{10}4p^2P_{1/2}-3d^94p^2(^3P)^4D_{3/2}$	0.5928	9.174(12)	1.939(-1)
$3d^{10}4p^2P_{1/2}-3d^94p^2(^3P)^2P_{3/2}$	0.5695	1.175(12)	2.285(-2)
$3d^{10}4p^2P_{1/2}-3d^94p^2(^1D)^2D_{3/2}$	0.5674	4.991(11)	9.634(-3)
$3d^{10}4p^2P_{1/2}-3d^94p^2(^3P)^4P_{3/2}$	0.5543	1.280(10)	2.359(-4)
$3d^{10}4p^2P_{1/2}-3d^94p^2(^1D)^2P_{3/2}$	0.5339	1.139(8)	1.946(-6)
$3d^{10}4p^2P_{1/2}-3d^94p^2(^1S)^2D_{3/2}$	0.5309	1.304(9)	2.204(-5)

表 2 (续)

跃迁	λ/nm	A/s^{-1}	g_f
$3\text{d}^{10}4\text{p}^2\text{P}_{3/2}-3\text{d}^94\text{p}^2(^3\text{P})^4\text{D}_{1/2}$	0.6360	3.631(8)	4.404(-6)
$3\text{d}^{10}4\text{p}^2\text{P}_{3/2}-3\text{d}^94\text{p}^2(^3\text{P})^2\text{P}_{1/2}$	0.6108	9.741(10)	1.090(-3)
$3\text{d}^{10}4\text{p}^2\text{P}_{3/2}-3\text{d}^94\text{p}^2(^1\text{D})^2\text{P}_{1/2}$	0.6079	9.657(12)	1.070(-1)
$3\text{d}^{10}4\text{p}^2\text{P}_{3/2}-3\text{d}^94\text{p}^2(^3\text{P})^4\text{P}_{1/2}$	0.5929	3.179(12)	3.350(-2)
$3\text{d}^{10}4\text{p}^2\text{P}_{3/2}-3\text{d}^94\text{p}^2(^1\text{D})^2\text{S}_{1/2}$	0.5684	2.213(12)	2.143(-2)
$3\text{d}^{10}4\text{p}^2\text{P}_{3/2}-3\text{d}^94\text{p}^2(^3\text{P})^2\text{D}_{3/2}$	0.6537	1.899(9)	4.866(-5)
$3\text{d}^{10}4\text{p}^2\text{P}_{3/2}-3\text{d}^94\text{p}^2(^3\text{P})^4\text{F}_{3/2}$	0.6378	3.470(9)	8.464(-5)
$3\text{d}^{10}4\text{p}^2\text{P}_{3/2}-3\text{d}^94\text{p}^2(^3\text{P})^4\text{D}_{3/2}$	0.6362	1.386(10)	3.364(-4)
$3\text{d}^{10}4\text{p}^2\text{P}_{3/2}-3\text{d}^94\text{p}^2(^3\text{P})^2\text{P}_{3/2}$	0.6095	7.100(10)	1.582(-3)
$3\text{d}^{10}4\text{p}^2\text{P}_{3/2}-3\text{d}^94\text{p}^2(^1\text{D})^2\text{D}_{3/2}$	0.6070	9.808(12)	2.167(-1)
$3\text{d}^{10}4\text{p}^2\text{P}_{3/2}-3\text{d}^94\text{p}^2(^3\text{P})^4\text{P}_{3/2}$	0.5920	1.094(13)	2.300(-1)
$3\text{d}^{10}4\text{p}^2\text{P}_{3/2}-3\text{d}^94\text{p}^2(^1\text{D})^2\text{P}_{3/2}$	0.5689	4.487(11)	8.709(-3)
$3\text{d}^{10}4\text{p}^2\text{P}_{3/2}-3\text{d}^94\text{p}^2(^1\text{S})^2\text{D}_{3/2}$	0.5655	4.232(11)	8.114(-3)
$3\text{d}^{10}4\text{p}^2\text{P}_{3/2}-3\text{d}^94\text{p}^2(^3\text{P})^4\text{F}_{5/2}$	0.6871	3.884(8)	1.650(-5)
$3\text{d}^{10}4\text{p}^2\text{P}_{3/2}-3\text{d}^94\text{p}^2(^3\text{P})^4\text{D}_{5/2}$	0.6375	5.295(8)	1.935(-5)
$3\text{d}^{10}4\text{p}^2\text{P}_{3/2}-3\text{d}^94\text{p}^2(^3\text{P})^4\text{P}_{5/2}$	0.6360	8.823(9)	3.211(-4)
$3\text{d}^{10}4\text{p}^2\text{P}_{3/2}-3\text{d}^94\text{p}^2(^1\text{D})^2\text{F}_{5/2}$	0.6093	3.994(12)	1.334(-1)
$3\text{d}^{10}4\text{p}^2\text{P}_{3/2}-3\text{d}^94\text{p}^2(^1\text{D})^2\text{D}_{5/2}$	0.6072	5.492(12)	1.821(-1)
$3\text{d}^{10}4\text{p}^2\text{P}_{3/2}-3\text{d}^94\text{p}^2(^3\text{P})^2\text{F}_{5/2}$	0.5923	1.339(13)	4.225(-1)
$3\text{d}^{10}4\text{p}^2\text{P}_{3/2}-3\text{d}^94\text{p}^2(^3\text{P})^2\text{D}_{5/2}$	0.5898	4.493(11)	1.406(-2)
$3\text{d}^{10}4\text{p}^2\text{P}_{3/2}-3\text{d}^94\text{p}^2(^1\text{S})^2\text{D}_{5/2}$	0.5683	1.130(12)	3.281(-2)

1)表中圆括号(*n*)代表 10^{*n*}.

表 3 列出了 $4\text{s}^2\text{S}_{1/2}-4\text{p}^2\text{P}_{1/2}$, $4\text{s}^2\text{S}_{1/2}-4\text{p}^2\text{P}_{3/2}$ 和 $4\text{p}^2\text{P}_{1/2}-4\text{p}^2\text{P}_{3/2}$ 能级间隔的计算值和实验值. 表中 Coulomb 一行是点核下的库仑作用能量; FNS(finite nuclear size)是有限核对库仑能量的修正, 本文采用有限 Fermi 核模型; VP 和 SE 分别为真空极化和自能修正, 两者之和即为 QED 效应; 总能量为表中前五项之和. 实验值引自文献[2]. 由表 3 知, 本文和 Seely 计算的能级间隔中, Coulomb, FNS, Breit 和 VP 的结果基本一致, 而自能间却存在着较大差别.

Cheng 等^[9]曾用局域中心势(local central potentials) 计算过类铜 Au^{50+} 的 $4\text{s}^2\text{S}_{1/2}$ 和 $4\text{p}^2\text{P}_{3/2}$ 两态的自能和真空极化修正, 对能级间隔 $4\text{s}^2\text{S}_{1/2}-4\text{p}^2\text{P}_{3/2}$, 其自能和真空极化分别为 2.041eV 和 0.463eV. 与本文表 3 结果比较, 真空极化(VP)与本文结果和 Seely 结果都符合得较好. 但自能(SE)与 Seely 结果差别较大, 与本文结果符合得较好(两者相差仅为 0.089eV).

从表 3 中总能级间隔来看, 本文计算结果比 Seely 等人的计算结果更接近实验值(对已有实验数据的能级间隔而言). 同时, 本文结果中 QED 效应(VP 与 SE 之和)分别比 Seely 计算结果低 0.393, 0.422 和 0.0300eV, 表明处于强核电场中的高离化 Au^{50+} , 有更强的量子电动力学效应(QED)应该考虑.

表 3 能级间隔的计算值和实验值(单位:eV)

	4s ² S _{1/2} —4p ² P _{1/2}		4s ² S _{1/2} —4p ² P _{3/2}		4p ² P _{1/2} —4p ² P _{3/2}	
	本文工作	文献[2]	本文工作	文献[2]	本文工作	文献[2]
Coulomb	111.133	111.134	255.760	255.668	144.627	144.534
FNS	-0.543	-0.540	-0.585	-0.582	-0.042	-0.042
Breit	1.469	1.416	-0.192	-0.241	-1.661	-1.658
VP	0.407	0.416	0.466	0.466	0.059	0.050
SE	-2.243	-1.859	-2.130	-1.708	0.113	0.152
总能量	110.223	110.568	253.319	253.604	143.096	143.036
实验值 ^[2]	110.22		253.40		143.18	

[1] M. Finkenthal, L. K. Huang, S. Lippmann *et al.*, *Phys. Lett.*, **A127**(1988), 255.
[2] J. F. Seely, J. O. Ekberg, C. M. Brown *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **57**(1986), 2924.
[3] I. P. Grant, B. J. Mckenzie, P. H. Norrington *et al.*, *Comput. Phys. Commun.*, **21**(1980), 207.
[4] K. T. Cheng and R. A. Wagner, *Phys. Rev.*, **A36**(1987), 5435.
[5] J. F. Seely, U. Feldman, A. W. Wouters *et al.*, *Phys. Rev.*, **A40**(1989), 5020.
[6] L. N. Ivanov, E. P. Ivanov, E. Y. Kononov *et al.*, *Phys. Scr.*, **33**(1986), 401.
[7] R. D. Cowan, *The Theory of Atomic Structure and Spectra* (University of California Press, 1981), p. 360.
[8] P. Mandelbaum, J. F. Seely, A. B. Shalom *et al.*, *Phys. Rev.*, **A44**(1991), 5744.
[9] K. T. Cheng, W. R. Johnson and J. Sapirstein, *Phys. Rev. Lett.*, **66**(1991), 2960.

RELATIVISTIC MULTICONFIGURATION CALCULATION
OF FINE-STRUCTURE ENERGY LEVELS AND
TRANSITIONS FOR Cu-LIKE Au⁵⁰⁺

TAN MING-LIANG ZHU ZHENG-HE

(Institute of Atomic and Molecular Physics, Chengdu University of Science and Technology, Chengdu 610065)

ZHAO YONG-KUAN CHEN XIAO-FENG

(Laboratory for High Temperature and High Density Plasma Physics, Chengdu 610003)

(Received 22 June 1995)

ABSTRACT

The fine-structure energy levels and transition parameters of Cu-like Au⁵⁰⁺ have been calculated by using the relativistic multi-configuration method (GRASP 2, 1992) with the corrections of finite nuclear size, Breit and QED. The results obtained are in good agreement with the experimental data available and better than those of the previous calculations. It can be concluded that the QED correction should be taken into account further, which greatly improves the accuracy of the calculated 4s—4p transition wavelengths.

PACC: 3220R; 3130; 3150