

专题: 原子分子和材料物性数据

类碳离子 ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )  $1s^2 2s^2 2p^2$  和  $1s^2 2s 2p^3$  组态的能级和电偶极跃迁\*胡木宏<sup>†</sup> 何纪铮

(辽宁师范大学物理与电子技术学院, 大连 116029)

(2025 年 4 月 28 日收到; 2025 年 7 月 14 日收到修改稿)

利用多组态 Dirac-Hartree-Fock 方法对类碳等电子序列 ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )  $1s^2 2s^2 2p^2$  和  $1s^2 2s 2p^3$  组态的能级结构和电偶极跃迁行为进行理论研究. 在构建充分包含电子关联效应、规模适当的波函数后, 考虑 Breit 相互作用、量子电动力学效应和原子核质量效应, 比较分析了价-价关联效应、实-价关联效应和实-实关联效应对原子态激发能的影响, 完成了原子态激发能的高精度理论计算. 与其他理论结果相比, 本文计算的 Ne V 离子的激发能结果与 NIST (National Institute of Standards and Technology) 数据最为接近; 其他离子的激发能也具有较好的精度. 在此基础上, 结合 LS 耦合的原子态混合成分和 NIST 数据, 对出现的原子态命名情况进行分析, 推测了相应的原子态命名. 本文还计算了组态间电偶极跃迁的谱线波长、跃迁速率、线强和加权振子强度, Ne V 和 Si IX 离子的谱线波长与 NIST 数据符合得很好, 相对误差小于 0.62%; 跃迁速率与其他理论结果比较一致. 另外, 本文计算得到的 Babushkin 和 Coulomb 两种规范的电偶极跃迁参数具有良好的-致性, 进一步证明了本文采用的理论方法的准确性和可靠性. 本文数据集可在 <https://www.doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00145> 中访问获取.

**关键词:** 类碳离子, 多组态 Dirac-Hartree-Fock 方法, 能级, 电偶极跃迁**PACS:** 31.10.+z, 31.15.ac, 31.15.ag, 32.70.Cs**DOI:** 10.7498/aps.74.20250568**CSTR:** 32037.14.aps.74.20250568

## 1 引言

高精度的原子数据在天体物理学和聚变等离子体研究中具有重要的意义<sup>[1-5]</sup>, 准确可靠的原子态能级、多极电磁辐射跃迁速率、波长和加权振子强度等跃迁参数是分析光谱结构、识别和量化宇宙中元素的有效手段之一, 也是推断等离子体温度、密度、电离状态和化学丰度、构建聚变等离子体模型的理论基础<sup>[6-10]</sup>. 碳元素是宇宙中含量比较丰富的元素, 在天体的演化过程中具有重要作用. 目前, 在太阳日冕、星际介质、极端紫外和等离子体 X 射

线的光谱中发现了大量的类碳离子的谱线<sup>[11,12]</sup>, 高分辨率的光谱数据揭示了类碳离子在紫外线、远紫外线、极端紫外线和 X 射线范围内的光谱特征, 需要进一步的理论解释和验证. 因此, 类碳离子能级结构和光谱特性的理论研究对于推动相关学科和实验研究的发展具有积极作用.

近年来, 类碳离子的相关理论研究发展比较迅速, 不同的理论方法获得了丰富的理论结果. 1996 年 Vilkas 等<sup>[13]</sup> 利用多体微扰理论 (many-body perturbation theory, MBPT) 方法计算了类碳离子 ( $Z = 8-30$ )  $1s^2 2s^2 2p^2$ ,  $1s^2 2s 2p^3$  和  $1s^2 2p^4$  组态间的电四极跃迁 (electric quadrupole, E2) 和

\* 国家自然科学基金青年科学基金 (批准号: 12204214) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通信作者. E-mail: [huhuhong@163.com](mailto:huhuhong@163.com)

磁偶极跃迁 (magnetic dipole, M1) 的跃迁参数. 1999 年, Safronova 和 Shlyaptseva<sup>[14]</sup> 采用  $1/Z$  方法计算了类碳等电子序列 ( $Z = 6-54$ ) 的自电离态和非自电离态的激发能. 2003 年, Aggarwal 等<sup>[15]</sup> 采用多组态 Dirac-Hartree-Fock 方法 (multi-configuration Dirac-Hartree-Fock, MCDHF) 计算了类碳 K XIV, Sc XVI, Ti XVII, V XVIII, Cr XIX 和 Mn XX 离子的  $1s^2 2s^2 2p^2$ ,  $1s^2 2s 2p^3$ ,  $1s^2 2p^4$ ,  $1s^2 2s^2 2p 3s$ ,  $1s^2 2s^2 2p 3p$  和  $1s^2 2s^2 2p 3d$  组态的能级和电偶极 (electric dipole, E1) 跃迁振子强度. 2001 年和 2004 年 Tachiev 和 Fischer<sup>[16,17]</sup> 利用 MCHF+ Breit-Pauli 方法计算了类碳离子  $Z = 6-15$  的  $1s^2 2s^2 2p^2$ ,  $1s^2 2s 2p^3$  组态的能级、寿命和跃迁参数, 得到的结果与 NIST 符合得较好; 2005 年 Gu<sup>[18]</sup> 采用多组态相互作用和 MBPT 方法, 计算了类碳离子  $Z = 6-60$  之间的  $1s^2 2l^q$  ( $1 \leq q \leq 8$ ) 态的能级, 获得了丰富的理论结果, 与 NIST 数据比较一致. 2006 年 Safronova 等<sup>[19]</sup> 利用相对论 Hartree-Fock 方法计算了类碳  $O^{2+}$  离子  $1s^2 2s^2 2pnl$ ,  $1s^2 2s 2p^2 nl$  和  $1s^2 2p^3 nl$  ( $n = 2-8$ ,  $l \leq n-1$ ) 组态的能级和辐射跃迁参数. 2008 年 Aggarwal 等<sup>[20]</sup> 采用 MCDHF 方法计算了类碳 Kr 离子  $1s^2 2s^2 2p^2$ ,  $1s^2 2s 2p^3$ ,  $1s^2 2p^4$ ,  $1s^2 2s^2 2p 3l$ ,  $1s^2 2s 2p^2 3l$  和  $1s^2 2p^3 3l$  组态的能级、寿命以及 E1, E2, M1 和磁四极 (magnetic quadrupole, M2) 跃迁的跃迁速率、振子强度、线强等跃迁参数. 2010 年 Jönsson 和 Bieroń<sup>[21]</sup> 利用 MCDHF 计算了类碳离子  $Z = 7-22$  的  $1s^2 2s^2 2p^2$ ,  $1s^2 2s 2p^3$  组态的能级、同位素位移、超精细结构常数、朗德  $g$  因子和 E1 跃迁参数, 为小  $Z$  的类碳离子体系的研究提供了准确的超精细和同位素位移参数, 2011 年 Jönsson 等<sup>[22]</sup> 又计算了类碳离子  $Z = 9-28$  的  $1s^2 2s^2 2p^2$ ,  $1s^2 2s 2p^3$  和  $1s^2 2p^4$  组态的能级、同位素位移、超精细结构常数、朗德  $g$  因子和 E1 跃迁参数, 获得了高精度的类碳离子能级结构和跃迁参数的理论结果. 2013 年 Liu 等<sup>[23]</sup> 采用 MCDHF 方法计算了类碳等电子序列 ( $Z = 7-92$ ) 的  $1s^2 2s^2 2p^2 {}^3P_{1,2}$  和  $1s^2 2s 2p^3 {}^5S_2$  三个原子态的能级、E1 跃迁波长、跃迁速率和寿命. 2014 年 Ekman 等<sup>[24]</sup> 利用 MCDHF 方法对类碳离子  $Z = 18-30$  的 15 个组态 262 个能级和 E1 参数进行了计算, 计算结果具有足够的精度, 有效提高了实验测得谱线的识别率. 2014 年 Nazé 等<sup>[25]</sup> 利用 MCDHF 方法计算了类碳离子  $Z = 7-28$  的 3 个组态的能级、正常和特殊质量位

移, 计算结果与实验值和其他理论值比较接近. 2014 年 Wang 等<sup>[26]</sup> 利用 MBPT 方法计算了类碳离子  $13 \leq Z \leq 36$  的 6 个组态的能级和 E1 跃迁速率, 计算结果具有较高的精度. 2020 年 Alwadié 等<sup>[27]</sup> 利用 Hartree-Fock pseudo-relativistic (HFR) 计算了包含 Ca XV 离子的能级和振子强度. 2021 年 Almodlej 等<sup>[28]</sup> 基于 HFR 和 Thomas-Fermi-Dirac-Amaldi (TFDA) 方法计算了 Na VI 到 Ar XIII 离子  $n \leq 5$  的激发组态的能级、E1 跃迁振子强度和跃迁速率, 给出了未有数据的拟合结果, 计算结果和已有的 NIST 数据符合得较好. 2025 年 Tang 等<sup>[29]</sup> 基于 MCDHF 方法计算了类碳离子  $Z = 21-30$  的 4 个组态的能级、寿命和 E1 跃迁的跃迁参数, 与其他理论方法和实验观察结果对比具有较好的可靠性.

现有的理论研究大多集中于核电荷数较小 ( $Z \leq 30$ ) 的类碳离子, 高电荷态类碳体系的能级结构和跃迁参数的理论研究相对较少, 有些离子的基本数据还存在空白. 另外, 类碳离子的光谱参数在相关学科研究中应用广泛, Si IX 的谱线存在于太阳日冕、极端紫外和 X 射线范围内; Kr XXXI 因其在等离子体中不会引入污染而广泛应用于托卡马克核聚变等离子的诊断<sup>[20]</sup>. 因此, 本文利用 MCDHF 方法<sup>[30-32]</sup>, 以全相对论理论框架下的 GRASP<sup>[33]</sup> 程序为计算基础, 充分考虑相对论效应和电子关联效应, 对类碳等电子序列 ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )  $1s^2 2s^2 2p^2$  和  $1s^2 2s 2p^3$  组态的能级结构、E1 跃迁参数进行高精度的理论计算. 与现有的理论结果相比, 本文计算得到的 Ne V 离子原子态激发能最接近 NIST 数据, 具有较高的精度; Si IX, Ge XXVII, Kr XXXI 和 Sn XLV 离子的激发能结果与其他理论结果的精度相当. 另外, 本文还计算了 Ge XXVII, Kr XXXI 和 Sn XLV 离子的 E1 跃迁参数, 利用两种规范下跃迁参数的一致性检验了本文计算结果的可靠性, 获得类碳 Sn XLV 离子 E1 跃迁的基本数据. 本文原子态能级计算采用原子单位.

## 2 理论方法

$N$ -电子原子 (离子) 体系的哈密顿量由纵场相互作用和横场相互作用组成, 描述瞬时纵场相互作用的 Dirac-Coulomb 哈密顿量表达式为<sup>[34]</sup>

$$\hat{H}^{\text{DC}} = \sum_{i=1}^N \left[ c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}_i + (\beta - 1)c^2 - \frac{Z}{r_i} \right] + \sum_{i<j}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}. \quad (1)$$

式中  $\mathbf{p}_i$  是第  $i$  个电子的动量算符;  $c$  是真空中光速;  $\boldsymbol{\alpha}$  和  $\beta$  是  $4 \times 4$  的 Dirac 矩阵,  $\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$ ,  $\boldsymbol{\sigma}$  是泡利矩阵,  $\beta = \begin{pmatrix} \mathbf{I} & 0 \\ 0 & -\mathbf{I} \end{pmatrix}$ ,  $\mathbf{I}$  是  $2 \times 2$  的单位矩阵. 第 2 个求和项是电子间的相互作用项,  $\mathbf{r}_i$  和  $\mathbf{r}_j$  是第  $i$  个电子和第  $j$  个电子的位置矢量.

单电子相对论原子轨道  $|n\kappa m\rangle$  是角动量平方算符  $\hat{j}^2$  ( $\hat{j} = \hat{l} + \hat{s}$ )、角动量算符在  $z$  轴方向的分量  $\hat{j}_z$  和相对论宇称算符  $\hat{p}$  的共同本征函数, 可表示为

$$\langle r | n\kappa m \rangle = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{n\kappa}(r) & \chi_{\kappa m}(\mathbf{r}/r) \\ iQ_{n\kappa}(r) & \chi_{-\kappa m}(\mathbf{r}/r) \end{pmatrix}. \quad (2)$$

式中,  $P_{n\kappa}(r)$  和  $Q_{n\kappa}(r)$  分别为径向波函数的大分量和小分量,  $\chi_{\kappa m}(\mathbf{r}/r)$  是自旋球谐函数.

单电子自旋-轨道波函数的乘积反对称化后, 采取适当的耦合方式构成组态波函数 (configuration state function, CSF), 将具有相同宇称  $P$ 、总角动量量子数  $J$  和磁量子数  $M_J$  的组态波函数进行线性叠加后得到原子波函数 (atomic state wavefunction, ASF):

$$\Psi(PJM_J) = \sum_{i=1}^{n_c} c_i \Phi(\gamma_i PJM_J), \quad (3)$$

式中,  $\Phi(\gamma_i PJM_J)$  为组态波函数,  $n_c$  为组态波函数的数目,  $\gamma_i$  表示除  $P$ ,  $J$  和  $M_J$  之外的其他量子数,  $c_i$  为组态混合系数, 满足正交归一化条件:

$$\sum_{i,j}^{n_c} c_i^* c_j = \delta_{ij}. \quad (4)$$

由此得到中心场近似的 Dirac-Coulomb 哈密顿量的期望值:

$$E^{\text{DC}} = \langle \Psi(PJM_J) | \hat{H}^{\text{DC}} | \Psi(PJM_J) \rangle = (C^{\text{DC}})^* H^{\text{DC}} C^{\text{DC}} \quad (5)$$

式中,  $C^{\text{DC}} = \{c_i(\alpha), i = 1, 2, \dots, n_c\}$  为组态混合系数矩阵; 哈密顿量的矩阵元表示为

$$H_{ij}^{\text{DC}} = \langle \Phi(\gamma_i PJM_J) | \hat{H}^{\text{DC}} | \Phi(\gamma_j PJM_J) \rangle. \quad (6)$$

将哈密顿矩阵进行对角化, 可以确定对应原子

态的本征能量和本征矢的混合系数<sup>[35]</sup>. 在此基础上, 利用微扰法处理 Breit 相互作用、量子电动力学 (quantum electrodynamics, QED) 效应和原子核质量效应<sup>[36-38]</sup>, 以进一步提高理论计算的精度.

在状态  $J$  到状态  $J'$  的多极辐射跃迁中, 跃迁速率、加权振子强度、线强等辐射跃迁参数可以用跃迁算符的约化矩阵元表示<sup>[39]</sup>:

$$\langle \Psi(PJ) | \hat{O}^{(L)} | \Psi(P'J') \rangle, \quad (7)$$

式中,  $\hat{O}^{(L)}$  为电磁跃迁多极矩算符,  $L = 1$  为电偶极跃迁;  $\Psi(PJ)$  和  $\Psi(P'J')$  为跃迁初、末态波函数.

从初态  $i$  到末态  $j$  跃迁的线强  $S$  可表示为

$$S = |\langle \alpha_i P_i J_i | \hat{O}^{(L)} | \alpha_j P_j J_j \rangle|^2, \quad (8)$$

自发辐射跃迁速率  $A_{ij}$  和振子强度  $f_{ij}$  分别表示为

$$A_{ij} = \frac{4e^2 \omega_{ij}^3}{3\hbar c^3} |\langle \alpha_i P_i J_i M_i | \hat{O}^{(L)} | \alpha_j P_j J_j M_j \rangle|^2, \quad (9)$$

$$f_{ij} = \frac{\pi c}{(2L+1)\omega_{ij}^2} |\langle \alpha_i P_i J_i | \hat{O}^{(L)} | \alpha_j P_j J_j \rangle|^2, \quad (10)$$

式中,  $\omega_{ij}$  为辐射跃迁的光子频率. 加权振子强度  $gf_{ij}$  与跃迁速率满足如下关系:

$$gf_{ij} = \frac{mc}{8\pi^2 e^2} \lambda_{ji}^2 \frac{g_j}{g_i} A_{ji} = 1.49 \times 10^{-14} \lambda_{ji}^2 \frac{g_j}{g_i} A_{ji}. \quad (11)$$

式中,  $\lambda_{ji}$  为跃迁波长, 单位是  $\text{\AA}$ ;  $g_i$  和  $g_j$  分别为跃迁初、末态的统计权重.

### 3 结果与讨论

为了充分并准确地描述类碳离子  $1s^2 2s^2 2p^2$  和  $1s^2 2s 2p^3$  组态的电子关联效应, 本文采用双电子激发, 优化后的组态活性空间 (active space, AS) 表示为

$$\begin{aligned} \text{AS1} &= \{2s, 2p\}, \\ \text{AS2} &= \text{AS1} + \{3s, 3p, 3d\}, \\ \text{AS3} &= \text{AS2} + \{4s, 4p, 4d, 4f\}, \\ \text{AS4} &= \text{AS3} + \{5s, 5p, 5d, 5f, 5g\}, \\ \text{AS5} &= \text{AS4} + \{6s, 6p, 6d, 6f, 6g, 6h\}, \\ \text{AS6} &= \text{AS5} + \{7s, 7p, 7d, 7f, 7g, 7h, 7i\}, \\ \text{AS7} &= \text{AS6} + \{8s, 8p, 8d, 8f, 8g, 8h, 8i, 8k\}. \end{aligned}$$

图 1 所示为分别考虑 VV 关联 (valence-valence correlation), VV+CV 关联 (core-valence correlation), VV+CV+CC 关联 (core-core correlation) 时 Ne V ( $Z = 10$ ) 和 Si IX ( $Z = 14$ ) 离子  $1s^2 2s^2 2p^2$

基组态和  $1s^22s2p^3$  激发组态的原子态激发能与 NIST(National Institute of Standards and Technology) 数据<sup>[40]</sup> 的相对误差, 图中横坐标的数字对应于 15 个原子态, 其中 1—5 为基组态的 5 个原子态, 6—15 为激发组态的 10 个原子态 (具体对应详见表 1). 从图 1 可以看出, 不同的电子关联效应对原子态激发能的影响大不相同, VV+CV 与 VV+CV+CC 关联比较充分地考虑了原子实内电子与价电子之间的关联效应, 绝大多数的激发能结果与 NIST 数据最为接近, 相对误差范围集中于 0.05%—0.10% 之间. VV 关联主要侧重于价电子之间的关联效应, 忽略了原子实内电子对价电子的

屏蔽效应, 得到的激发能结果与 NIST 数据有所偏差. 但是在两个离子的原子态 4, 5, 6( $^1D_2$ ,  $^1S_0$  和  $^5S_2$ ) 中, 考虑 VV 关联的激发能结果更接近 NIST 数据, 相对而言, 少数低能级的 VV 关联的激发能结果较好, 而绝大多数的较高能级, VV+CV+CC 关联的激发能结果具有更好的精度. 由此可见, 细致考虑复杂原子或离子体系中价电子与原子实之间、价电子之间的关联效应, 是实现高精度能级结构计算的基础, 本文后续的相关计算以 VV+CV+CC 关联为理论基础.

在考虑 VV+CV+CC 关联的基础上, 补充材料中表 S1—表 S5 (online) 列出了类碳离子 ( $Z = 10$ ,

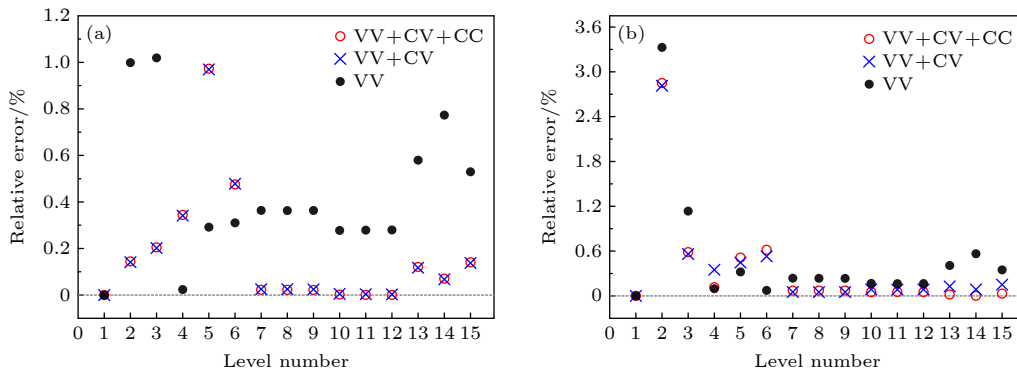


图 1 VV 关联、VV+CV 关联和 VV+CV+CC 关联对 Ne V 和 Si IX 离子  $1s^22s^22p^2$ ,  $1s^22s2p^3$  组态原子态激发能的影响 (a) Ne V 离子; (b) Si IX 离子

Fig. 1. Effects of VV, VV+CV and VV+CV+CC correlations on the excitation energies of atomic states for  $1s^22s^22p^2$  and  $1s^22s2p^3$  configurations in Ne V and Si IX ions: (a) Ne V ion; (b) Si IX ion.

表 1 Ne V 离子 ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )  $1s^22s^22p^2$  和  $1s^22s2p^3$  组态原子态的激发能

Table 1. Excitation energies of states for  $1s^22s^22p^2$  and  $1s^22s2p^3$  configurations in Ne V ions ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ ).

Lv. No.	State	$E_{cal}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{MBPT}^{[18]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{HFR}^{[27]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{TFDA}^{[28]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{MCHF}^{[31]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{MCDHF1}^{[22]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{MCDHF2}^{[23]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{NIST}^{[40]}$ /cm <sup>-1</sup>	$\delta/\%$	$\delta/cm^{-1}$
1	$1s^22s^22p^2\ ^3P_0$	0	0	—	—	0	0	—	0	0	0
2	$1s^22s^22p^2\ ^3P_1$	411.82	410.6660	—	—	413.52	411.4	412	411.227	0.1442	0.593
3	$1s^22s^22p^2\ ^3P_2$	1111.74	1105.544	—	—	1109.89	1108.6	1112	1109.467	0.2049	2.273
4	$1s^22s2p^2\ ^1D_2$	30394.93	29963.98	—	—	30388.87	30428.1	—	30290.67	0.3442	104.26
5	$1s^22s2p^2\ ^1S_0$	64537.13	64660.65	—	—	63932.41	64141.3	—	63915.4	0.9727	621.73
6	$1s^22s2p^3\ ^5S_2$	87979.45	89949.36	—	—	89417.23	88176.6	87782	88399.5	0.4752	420.05
7	$1s^22s2p^3\ ^3D_3$	175793.08	175362.7	—	—	177091.78	175906.6	—	175832.3	0.0223	39.22
8	$1s^22s2p^3\ ^3D_2$	175863.71	175431.2	—	—	177161.79	175976.7	—	175902.7	0.0222	38.99
9	$1s^22s2p^3\ ^3D_1$	175887.35	175453.0	—	—	177184.54	176000.3	—	175925.0	0.0214	37.65
10	$1s^22s2p^3\ ^3P_2$	208147.27	208283.8	—	—	209479.97	208347.0	—	208151.3	0.0019	4.03
11	$1s^22s2p^3\ ^3P_1$	208151.98	208288.6	—	—	209485.10	208351.9	—	208153.3	0.0006	1.32
12	$1s^22s2p^3\ ^3P_0$	208185.58	208321.7	—	—	209519.18	208388.7	—	208185	0.0003	0.58
13	$1s^22s2p^3\ ^1D_2$	270878.89	269549.6	—	—	271972.52	270855.6	—	270552.9	0.1205	325.99
14	$1s^22s2p^3\ ^3S_1$	279567.62	278211.2	—	—	280689.94	279582.4	—	279371.2	0.0703	196.42
15	$1s^22s2p^3\ ^1P_1$	304246.43	302434.5	—	—	305326.16	304289.6	—	303819.2	0.1406	427.23

14, 32, 38, 50)  $1s^2 2s^2 2p^2$ ,  $1s^2 2s^2 p^3$  组态对应的 15 个原子态在 AS2—AS7 活性空间的能级. 可以看出, 活性空间扩展到 AS3 时, 各原子态能级迅速减小; 活性空间由 AS3 扩展至 AS7 时, 原子态能级缓慢减小, 趋于稳定.

表 1—表 5 为本文计算的类碳离子 ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )  $1s^2 2s^2 2p^2$  和  $1s^2 2s^2 p^3$  组态的原子态激发能,  $E_{\text{cal}}$  是本文考虑 VV+CV+CC 关联、包含了 Breit 效应、QED 效应和原子核质量效应的计算结果, 表中还给出了其他理论结果 [18,22,23,27,28,31] 和 NIST [40] 数据, 表中最后一列为本文的激发能结果与 NIST 数据的相对误差. 本文计算的所有离子体系的激发能结果中, Breit 效应和 QED 效应贡献的数量级相当, 对能级的影响范围分别为  $33.5090\text{--}77774.7532 \text{ cm}^{-1}$ ,  $1.0400\text{--}34093.9904 \text{ cm}^{-1}$ ; 原子核质量效应的贡献相对比较小, 为  $0.1221\text{--}376.9990 \text{ cm}^{-1}$ . 与文献 [18,22,23] 的计算结果相比, 除了原子态 5, 本文计算的 Ne V 离子原子态激发能与 NIST 数据最为接近, 绝对误差小于  $430 \text{ cm}^{-1}$ , 相对误差范围为  $0.0003\%\text{--}0.48\%$ . 现有的 Si IX 离子的理论计算结果比较丰富, 相对而言, 文献 [22] 的绝大多数的激发能结果精度最好, 与 NIST 数据最为接近, 相对误差小于  $0.43\%$ ; 本文计算结果比较接近 NIST 数据, 除了原子态 2, 其他原子态激发能的绝对误差在  $1000 \text{ cm}^{-1}$  以内, 相对误差小于

$0.62\%$ , 与文献 [22] 的精度相当. 对于 Ge XXVII 离子, 本文的激发能结果、其他理论结果与有限的 NIST 数据都符合得很好, 与文献 [18] 的结果有效数字符合到 3—4 位. Kr XXXI 离子中, 除去原子态 4, 绝大多数激发能与 NIST 数据较为接近, 相对误差范围为  $0.001\%\text{--}0.070\%$ . 目前尚未有 Sn XLV 离子的 NIST 数据, 与现有的其他理论结果相比, 本文与文献 [23] 的 3 个激发能结果比较一致, 分别相差  $193 \text{ cm}^{-1}$ ,  $81 \text{ cm}^{-1}$ ,  $245 \text{ cm}^{-1}$ ; 与文献 [18] 的激发能结果也很接近, 二者的最小和最大差值分别为  $71 \text{ cm}^{-1}$  和  $1469 \text{ cm}^{-1}$ .

对于 Kr XXXI 离子原子态  $4(3P_2)$ , 本文和文献 [18] 的激发能分别为  $935443.18 \text{ cm}^{-1}$ ,  $934400.51 \text{ cm}^{-1}$ , 相对误差分别高达  $95.62\%$  和  $95.59\%$ ; 文献 [23] 的结果为  $478950 \text{ cm}^{-1}$ , 与 NIST 数据符合得较好. 而本文计算的原子态  $3(1D_2)$  的激发能为  $478893 \text{ cm}^{-1}$ , 更接近 NIST 数据, 相对误差为  $0.14\%$ . 另外, Kr XXXI 离子原子态 12 和 14 出现了相同的原子态命名 (表中分别标识为  $1D_2^a$  态和  $1D_2^b$  态), 二者的激发能结果分别为  $2064345.2 \text{ cm}^{-1}$  和  $2431024.8 \text{ cm}^{-1}$ , 而 LS 耦合预期的  $1s^2 2s^2 p^3 3P_2$  态原子态却“消失”了. 与 NIST 数据相比, 本文的原子态 12 ( $1D_2^a$ ) 的激发能与 NIST 的  $1s^2 2s^2 p^3 3P_2$  态激发能结果  $2062900 \text{ cm}^{-1}$  比较接近, 相对误差为  $0.07\%$ .

表 2 Si IX 离子 ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )  $1s^2 2s^2 2p^2$  和  $1s^2 2s^2 p^3$  组态原子态的激发能  
Table 2. Excitation energies of states for  $1s^2 2s^2 2p^2$  and  $1s^2 2s^2 p^3$  configurations in Si IX ions ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ ).

Lv. No.	State	$E_{\text{cal}}$ / $\text{cm}^{-1}$	$E_{\text{MBPT}}^{[18]}$ / $\text{cm}^{-1}$	$E_{\text{HFR}}^{[27]}$ / $\text{cm}^{-1}$	$E_{\text{TFDA}}^{[28]}$ / $\text{cm}^{-1}$	$E_{\text{MCHF}}^{[31]}$ / $\text{cm}^{-1}$	$E_{\text{MCDHF1}}^{[22]}$ / $\text{cm}^{-1}$	$E_{\text{MCDHF2}}^{[23]}$ / $\text{cm}^{-1}$	$E_{\text{NIST}}^{[40]}$ / $\text{cm}^{-1}$	$\delta/\%$	$\delta/\text{cm}^{-1}$
1	$1s^2 2s^2 2p^2 3P_0$	0	0	0	0	0	0	—	0	0	0
2	$1s^2 2s^2 2p^2 3P_1$	2472	2539.017	2533	2637	2582	2540	2473	2545.0	2.8684	73
3	$1s^2 2s^2 2p^2 3P_2$	6376	6404.025	6721	6753	6452	6411	6377	6414	0.5925	38
4	$1s^2 2s^2 2p^2 1D_2$	52987	52731.80	50726	56291	53076	53070	—	52925.9	0.1154	61.1
5	$1s^2 2s^2 2p^2 1S_0$	108352	108410.6	119027	132263	107826	108017	—	107799	0.5130	553
6	$1s^2 2s^2 p^3 5S_2$	149841	151487.8	146529	128561	154077	150120	149624	150770	0.6162	929
7	$1s^2 2s^2 p^3 3D_3$	292026	292093.6	286103	285832	296224	292323	—	292232	0.0705	206
8	$1s^2 2s^2 p^3 3D_2$	292089	292151.7	285850	286020	296405	292384	—	292296	0.0708	207
9	$1s^2 2s^2 p^3 3D_1$	292231	292290.4	285798	285866	296274	292525	—	292441	0.0718	210
10	$1s^2 2s^2 p^3 3P_1$	343838	344277.7	332017	337703	348047	344313	—	344009	0.0497	171
11	$1s^2 2s^2 p^3 3P_0$	343895	344330.1	332217	337800	348157	344202	—	344075	0.0523	180
12	$1s^2 2s^2 p^3 3P_2$	343941	344390.6	331907	337756	348103	344256	—	344118	0.0514	177
13	$1s^2 2s^2 p^3 1D_2$	440482	439823.7	431290	449098	444583	440751	—	440403	0.0179	79
14	$1s^2 2s^2 p^3 3S_1$	446940	446248.8	436901	454797	451039	447194	—	446942	0.0004	2
15	$1s^2 2s^2 p^3 1P_1$	492902	491959.4	477444	500967	497004	493218	—	492755	0.0298	147

表 3 Ge XXVII 离子 ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )  $1s^2s^2p^2$  和  $1s^2s2p^3$  组态原子态的激发能

Table 3. Excitation energies of states for  $1s^2s^2p^2$  and  $1s^2s2p^3$  configurations in Ge XXVII ions ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ ).

Lv. No.	State	$E_{\text{cal}}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{MBPT}}^{[18]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{HFR}}^{[27]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{TFDA}}^{[28]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{MCHF}}^{[31]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{MCDHF1}}^{[22]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{MCDHF2}}^{[23]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{NIST}}^{[40]}$ /cm <sup>-1</sup>	$\delta/\%$	$\delta/\text{cm}^{-1}$
1	$1s^2s^2p^2\ ^3P_0$	0	0	—	—	—	—	—	0	0	0
2	$1s^2s^2p^2\ ^3P_1$	219998	220040.9	—	—	—	—	219953	219880	0.0537	118
3	$1s^2s^2p^2\ ^3P_2$	288064	288046.4	—	—	—	—	288122	287736	0.1140	328
4	$1s^2s^2p^2\ ^1D_2$	562851	562703.1	—	—	—	—	—	—	—	—
5	$1s^2s^2p^2\ ^1S_0$	729240	729004.9	—	—	—	—	—	—	—	—
6	$1s^2s2p^3\ ^5S_2$	840329	841558.8	—	—	—	—	840075	—	—	—
7	$1s^2s2p^3\ ^3D_1$	1175235	1175835	—	—	—	—	—	—	—	—
8	$1s^2s2p^3\ ^3D_2$	1212157	1212816	—	—	—	—	—	—	—	—
9	$1s^2s2p^3\ ^3D_3$	1294534	1295181	—	—	—	—	—	—	—	—
10	$1s^2s2p^3\ ^3P_0$	1440794	1441490	—	—	—	—	—	—	—	—
11	$1s^2s2p^3\ ^3P_1$	1468812	1469518	—	—	—	—	—	—	—	—
12	$1s^2s2p^3\ ^3P_2$	1515861	1516612	—	—	—	—	—	1516690	0.0547	829
13	$1s^2s2p^3\ ^3S_1$	1634306	1634571	—	—	—	—	—	1633620	0.0420	686
14	$1s^2s2p^3\ ^1D_2$	1767417	1767693	—	—	—	—	—	—	—	—
15	$1s^2s2p^3\ ^1P_1$	1975301	1975518	—	—	—	—	—	—	—	—

表 4 Kr XXXI 离子 ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )  $1s^2s^2p^2$  和  $1s^2s2p^3$  组态原子态的激发能

Table 4. Excitation energies of states for  $1s^2s^2p^2$  and  $1s^2s2p^3$  configurations in Kr XXXI ions ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ ).

Lv. No.	State	$E_{\text{cal}}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{MBPT}}^{[18]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{HFR}}^{[27]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{TFDA}}^{[28]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{MCHF}}^{[31]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{MCDHF1}}^{[22]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{MCDHF2}}^{[23]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{NIST}}^{[40]}$ /cm <sup>-1</sup>	$\delta/\%$	$\delta/\text{cm}^{-1}$
1	$1s^2s^2p^2\ ^3P_0$	0	0	—	—	—	—	—	0	0	0
2	$1s^2s^2p^2\ ^3P_1$	397033	397090.1	—	—	—	—	396962	396820	0.0537	213
3	$1s^2s^2p^2\ ^1D_2$	478893	478885.2	—	—	—	—	—	—	—	—
4	$1s^2s^2p^2\ ^3P_2$	935443	935288.5	—	—	—	—	478950	478200	95.6175	457243
5	$1s^2s^2p^2\ ^1S_0$	1128073	1127837	—	—	—	—	—	—	—	—
6	$1s^2s2p^3\ ^5S_2$	1175162	1176400	—	—	—	—	1174960	—	—	—
7	$1s^2s2p^3\ ^3D_1$	1530587	1531276	—	—	—	—	—	1530200	0.0253	387
8	$1s^2s2p^3\ ^3D_2$	1653780	1654590	—	—	—	—	—	1653800	0.0012	20
9	$1s^2s2p^3\ ^3D_3$	1784435	1785211	—	—	—	—	—	1783500	0.0524	935
10	$1s^2s2p^3\ ^3P_0$	1954591	1955386	—	—	—	—	—	1955900	0.0669	1309
11	$1s^2s2p^3\ ^3P_1$	2000162	2000973	—	—	—	—	—	1999100	0.0531	1062
12	$1s^2s2p^3\ ^1D_2^a$ ( $1s^2s2p^3\ ^3P_2$ )	2064345	2065150	—	—	—	—	—	2062900	0.0700	1445
13	$1s^2s2p^3\ ^3S_1$	2151587	2152024	—	—	—	—	—	2151900	0.0145	313
14	$1s^2s2p^3\ ^1D_2^b$ ( $1s^2s2p^3\ ^1D_2$ )	2431025	2431535	—	—	—	—	—	—	—	—
15	$1s^2s2p^3\ ^1P_1$	2691220	2691625	—	—	—	—	—	—	—	—

表 5 Sn XLV 离子 ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )  $1s^2s^2p^2$  和  $1s^2s2p^3$  组态原子态的激发能

Table 5. Excitation energies of states for  $1s^2s^2p^2$  and  $1s^2s2p^3$  configurations in Sn XLV ions ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ ).

Lv. No.	State	$E_{\text{cal}}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{MBPT}}^{[18]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{HFR}}^{[27]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{TFDA}}^{[28]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{MCHF}}^{[31]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{MCDHF1}}^{[22]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{MCDHF2}}^{[23]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{NIST}}^{[40]}$ /cm <sup>-1</sup>	$\delta/\%$	$\delta/\text{cm}^{-1}$
1	$1s^2s^2p^2\ ^3P_0$	0	0	—	—	—	—	—	—	—	—
2	$1s^2s^2p^2\ ^3P_1$	1885654	1885837	—	—	—	—	1885461	—	—	—
3	$1s^2s^2p^2\ ^1D_2$	2004135	2004255	—	—	—	—	—	—	—	—

表 5 (续) Sn XLV 离子 ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )  $1s^22s^22p^2$  和  $1s^22s2p^3$  组态原子态的激发能  
 Table 5 (continued). Excitation energies of states for  $1s^22s^22p^2$  and  $1s^22s2p^3$  configurations in Sn XLV ions ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )

Lv. No.	State	$E_{\text{cal}}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{MBPT}}^{[18]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{HFR}}^{[27]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{TFDA}}^{[28]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{MCHF}}^{[31]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{MCDHF1}}^{[22]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{MCDHF2}}^{[23]}$ /cm <sup>-1</sup>	$E_{\text{NIST}}^{[40]}$ /cm <sup>-1</sup>	$\delta/\%$	$\delta/\text{cm}^{-1}$
4	$1s^22s2p^3 \ ^3P_2^a$ ( $1s^22s2p^3 \ ^5S_2$ )	3220891	3222265	—	—	—	—	3220810	—	—	—
5	$1s^22s2p^3 \ ^3D_1$	3674549	3675597	—	—	—	—	—	—	—	—
6	$1s^22s^22p^2 \ ^3P_2$	3979255	3979184	—	—	—	—	3979010	—	—	—
7	$1s^22s^22p^2 \ ^1S_0$	4273686	4273568	—	—	—	—	—	—	—	—
8	$1s^22s2p^3 \ ^3D_2$	5008169	5009638	—	—	—	—	—	—	—	—
9	$1s^22s2p^3 \ ^3D_3$	5265644	5266985	—	—	—	—	—	—	—	—
10	$1s^22s2p^3 \ ^3P_0$	5532862	5534116	—	—	—	—	—	—	—	—
11	$1s^22s2p^3 \ ^3S_1$	5638071	5639355	—	—	—	—	—	—	—	—
12	$1s^22s2p^3 \ ^1D_2$	5719867	5721043	—	—	—	—	—	—	—	—
13	$1s^22s2p^3 \ ^3P_1$	5751679	5752781	—	—	—	—	—	—	—	—
14	$1s^22s2p^3 \ ^3P_2^b$ ( $1s^22s2p^3 \ ^3P_2$ )	7434367	7435689	—	—	—	—	—	—	—	—
15	$1s^22s2p^3 \ ^1P_1$	7851752	7852863	—	—	—	—	—	—	—	—

为了分析上述原子态激发能差异较大问题, 补充材料中表 S6—表 S10 (online) 列出了本文计算的类碳离子 ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )  $1s^22s^22p^2$  和  $1s^22s2p^3$  组态中原子态的混合成分及寿命  $\tau$ . 从表中原子态的混合成分可以看出, Kr XXXI 离子原子态 3, 4 ( $1s^22s^22p^2 \ ^3P_2 \ ^1D_2$ ) 和 12, 14 ( $1s^22s2p^3 \ ^1D_2^{a,b}$ ) 都存在原子态高度混合现象. 在 GRASP 程序中, 通常以混合成分中贡献最大的原子态进行命名, 同一原子态在组态混合中贡献最大时, 极易出现原子态命名重复现象, 例如,  $1s^22s2p^3 \ ^1D_2$  在原子态 12 和 14 中的混合系数分别为 0.46 和 0.51, 对二者的贡献都是最大的, 导致原子态 12 和 14 命名重复. 与 NIST 数据和文献 [23] 的结果相比, 可以发现 Kr XXXI 离子的原子态 4 ( $^3P_2$ ) 应为  $^1D_2$  态, 而原子态 3 ( $^1D_2$ ) 应为  $^3P_2$  态; 原子态 12 ( $^1D_2^a$ ) 应为“消失”的  $^3P_2$  态, 原子态 14 ( $^1D_2^b$ ) 应为  $^1D_2$  态. 类似地, Sn XLV 离子的原子态 4 和 14 ( $^3P_2^a$  和  $^3P_2^b$ ) 也出现了命名重复的现象, 由于没有 NIST 数据, 本文分析 Sn XLV 离子的原子态 4 ( $^3P_2^a$ ) 可能为  $^5S_2$  态, 原子态 14 ( $^3P_2^b$ ) 可能为  $^3P_2$  态, 上述可能的原子态命名分别标识在表 1—表 5 中对应的原子态下方的括号内. 原子态命名重复现象大多出现于原子态高度混合的情形, 随着等电子序列核电荷数的增大, LS 耦合逐渐向 JJ 耦合过渡, 沿用 LSJ 耦合的命名方式不再合适, JJ 耦合的命名形式更适于高  $Z$  离子的原子态命名.

表 6—表 10 列出了本文计算的类碳离子 ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )  $1s^22s2p^3$ — $1s^22s^22p^2$  间 E1 跃迁的谱线波长  $\lambda$ 、Coulomb 和 Babushkin 规范下的跃迁速率  $A$ 、加权振子强度  $gf$ 、线强  $S$  以及现有的其他理论结果 [22,26-28,31] 和 NIST 数据 [40]. 对于 Ne V 和 Si IX 离子, 本文计算的 E1 跃迁波长与现有的 NIST 结果符合得较好, 相对误差范围分别为 0.00021%—0.48%, 0.001%—0.62%; 跃迁速率与精度较好的文献 [22] 结果比较一致, 二者的 Ne V 离子跃迁速率都小于 NIST 数据, Si IX 离子的跃迁速率与 NIST 数据比较接近. Coulomb 和 Babushkin 两种规范下的 E1 跃迁参数的一致性检验波函数品质的方法之一 [41], 因此表 6—表 10 列出了两种规范下跃迁速率的比值  $A_C/A_B$  以检验未有可比较数据的其他离子的 E1 跃迁结果. 从表中数据可以看出, 本文计算的绝大多数的强跃迁的  $A_C/A_B$  结果非常接近 1, 数值分布集中于 0.9—1.1 之间; 极少数的跃迁速率较小的弱跃迁  $A_C/A_B$  结果明显偏离于 1. 事实上, 弱跃迁中的负连续态对 Babushkin 规范 (速度规范) 的跃迁速率有重要贡献, 而对 Coulomb 规范 (长度规范) 的跃迁速率影响极为微小 [42,43], 导致两种规范下跃迁速率的比值严重偏离于 1, 失去检验原子态波函数品质的能力. 整体而言, 弱跃迁中两种规范下跃迁速率的差异性并不影响跃迁结果的总体准确性.

表 6 Ne V 离子 ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )  $1s^2 2s 2p^3$ - $1s^2 2s^2 2p^2$  间 E1 跃迁谱线波长、跃迁速率、加权振子强度和线强  
 Table 6. The E1 transition wavelength, rate, weighted oscillator strength, and line strength between the  $1s^2 2s 2p^3$  and  $1s^2 2s^2 2p^2$  configurations in Ne V ions with  $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ .

Transition A—B	$\lambda/\text{\AA}$	$A_C/s^{-1}$	$A_B/s^{-1}$	$gf_C$	$gf_B$	$S_C/\text{a.u.}$	$S_B/\text{a.u.}$	$A_C/A_B$
$^3D_1$ — $^3P_0$	568.53	6.721 <sup>8</sup>	6.729 <sup>8</sup>	9.770 <sup>-2</sup>	9.782 <sup>-2</sup>	1.829 <sup>-1</sup>	1.831 <sup>-1</sup>	1.00
	—	6.620 <sup>8</sup> [22]	6.615 <sup>8</sup> [22]	—	—	—	—	—
	568.424 [40]	—	7.70 <sup>8</sup> [40]	—	—	—	2.10 <sup>-1</sup> [40]	—
$^3P_1$ — $^3P_0$	480.40	1.032 <sup>9</sup>	1.029 <sup>9</sup>	1.072 <sup>-1</sup>	1.068 <sup>-1</sup>	1.695 <sup>-1</sup>	1.689 <sup>-1</sup>	1.00
	—	1.027 <sup>9</sup> [22]	1.031 <sup>9</sup> [22]	—	—	—	—	—
	480.415 [40]	—	1.39 <sup>9</sup> [40]	—	—	—	2.10 <sup>-1</sup> [40]	—
$^3S_1$ — $^3P_0$	357.68	2.347 <sup>9</sup>	2.410 <sup>9</sup>	1.351 <sup>-1</sup>	1.387 <sup>-1</sup>	1.590 <sup>-1</sup>	1.633 <sup>-1</sup>	0.97
	—	2.378 <sup>9</sup> [22]	2.385 <sup>9</sup> [22]	—	—	—	—	—
	357.947 [40]	—	2.50 <sup>9</sup> [40]	—	—	—	1.70 <sup>-1</sup> [40]	—
$^1P_1$ — $^3P_0$	328.67	8.756 <sup>4</sup>	8.510 <sup>4</sup>	4.254 <sup>-6</sup>	4.135 <sup>-6</sup>	4.603 <sup>-6</sup>	4.474 <sup>-6</sup>	1.03
	—	9.087 <sup>4</sup> [22]	8.488 <sup>4</sup> [22]	—	—	—	—	—
$^3D_1$ — $^1S_0$	898.04	1.779 <sup>4</sup>	1.679 <sup>4</sup>	6.452 <sup>-6</sup>	6.090 <sup>-6</sup>	1.908 <sup>-5</sup>	1.801 <sup>-5</sup>	1.06
	—	1.758 <sup>4</sup> [22]	1.730 <sup>4</sup> [22]	—	—	—	—	—
$^3P_1$ — $^1S_0$	696.29	1.083 <sup>5</sup>	9.244 <sup>4</sup>	2.361 <sup>-5</sup>	2.016 <sup>-5</sup>	5.411 <sup>-5</sup>	4.620 <sup>-5</sup>	1.17
	—	1.114 <sup>5</sup> [22]	9.474 <sup>4</sup> [22]	—	—	—	—	—
$^3S_1$ — $^1S_0$	465.04	4.082 <sup>5</sup>	4.136 <sup>5</sup>	3.971 <sup>-5</sup>	4.023 <sup>-5</sup>	6.079 <sup>-5</sup>	6.159 <sup>-5</sup>	0.99
	—	3.941 <sup>5</sup> [22]	3.908 <sup>5</sup> [22]	—	—	—	—	—
$^1P_1$ — $^1S_0$	417.16	3.080 <sup>9</sup>	3.136 <sup>9</sup>	2.411 <sup>-1</sup>	2.455 <sup>-1</sup>	3.311 <sup>-1</sup>	3.371 <sup>-1</sup>	0.98
	416.834 [40]	3.071 <sup>9</sup> [22]	3.064 <sup>9</sup> [22]	—	—	—	—	—
$^3P_0$ — $^3P_1$	481.28	3.144 <sup>9</sup>	3.134 <sup>9</sup>	1.092 <sup>-1</sup>	1.088 <sup>-1</sup>	1.730 <sup>-1</sup>	1.725 <sup>-1</sup>	1.00
	—	3.124 <sup>9</sup> [22]	3.140 <sup>9</sup> [22]	—	—	—	—	—
	481.293 [40]	—	4.00 <sup>9</sup> [40]	—	—	—	2.20 <sup>-1</sup> [40]	—
$^3D_1$ — $^3P_1$	569.86	4.700 <sup>8</sup>	4.711 <sup>8</sup>	6.864 <sup>-2</sup>	6.881 <sup>-2</sup>	1.288 <sup>-1</sup>	1.291 <sup>-1</sup>	1.00
	—	4.629 <sup>8</sup> [22]	4.630 <sup>8</sup> [22]	—	—	—	—	—
	569.756 [40]	—	5.80 <sup>8</sup> [40]	—	—	—	1.60 <sup>-1</sup> [40]	—
$^3P_1$ — $^3P_1$	481.36	8.289 <sup>8</sup>	8.264 <sup>8</sup>	8.638 <sup>-2</sup>	8.612 <sup>-2</sup>	1.369 <sup>-1</sup>	1.365 <sup>-1</sup>	1.00
	—	8.238 <sup>8</sup> [22]	8.275 <sup>8</sup> [22]	—	—	—	—	—
	481.366 [40]	—	1.00 <sup>9</sup> [40]	—	—	—	1.70 <sup>-1</sup> [40]	—
$^3S_1$ — $^3P_1$	358.21	7.047 <sup>9</sup>	7.235 <sup>9</sup>	4.067 <sup>-1</sup>	4.175 <sup>-1</sup>	4.796 <sup>-1</sup>	4.924 <sup>-1</sup>	0.97
	—	7.142 <sup>9</sup> [22]	7.159 <sup>9</sup> [22]	—	—	—	—	—
	358.474 [40]	—	7.30 <sup>9</sup> [40]	—	—	—	5.00 <sup>-1</sup> [40]	—
$^1P_1$ — $^3P_1$	329.12	4.731 <sup>6</sup>	4.908 <sup>6</sup>	2.305 <sup>-4</sup>	2.391 <sup>-4</sup>	2.497 <sup>-4</sup>	2.591 <sup>-4</sup>	0.96
	—	4.793 <sup>6</sup> [22]	4.851 <sup>6</sup> [22]	—	—	—	—	—
$^5S_2$ — $^3P_1$	1141.94	3.518 <sup>3</sup>	2.329 <sup>3</sup>	3.439 <sup>-6</sup>	2.277 <sup>-6</sup>	1.293 <sup>-5</sup>	8.558 <sup>-6</sup>	1.51
	—	3.485 <sup>3</sup> [22]	2.340 <sup>3</sup> [22]	—	—	—	—	—
	1136.515 [40]	—	—	—	—	—	—	—
$^3D_2$ — $^3P_1$	569.94	9.000 <sup>8</sup>	9.002 <sup>8</sup>	2.191 <sup>-1</sup>	2.192 <sup>-1</sup>	4.112 <sup>-1</sup>	4.113 <sup>-1</sup>	1.00
	—	8.866 <sup>8</sup> [22]	8.850 <sup>8</sup> [22]	—	—	—	—	—
	569.828 [40]	—	1.00 <sup>9</sup> [40]	—	—	—	4.60 <sup>-1</sup> [40]	—
$^3P_2$ — $^3P_1$	481.37	7.414 <sup>8</sup>	7.379 <sup>8</sup>	1.288 <sup>-1</sup>	1.282 <sup>-1</sup>	2.041 <sup>-1</sup>	2.031 <sup>-1</sup>	1.00
	—	7.373 <sup>8</sup> [22]	7.397 <sup>8</sup> [22]	—	—	—	—	—
	481.371 [40]	—	1.00 <sup>9</sup> [40]	—	—	—	2.80 <sup>-1</sup> [40]	—
$^1D_2$ — $^3P_1$	369.72	1.173 <sup>5</sup>	1.274 <sup>5</sup>	1.202 <sup>-5</sup>	1.306 <sup>-5</sup>	1.463 <sup>-5</sup>	1.589 <sup>-5</sup>	0.92
	—	1.159 <sup>5</sup> [22]	1.273 <sup>5</sup> [22]	—	—	—	—	—

表 6 (续) Ne V 离子 ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )  $1s^22s2p^3$ - $1s^22s^22p^2$  间 E1 跃迁谱线波长、跃迁速率、加权振子强度和线强  
 Table 6 (continued). The E1 transition wavelength, rate, weighted oscillator strength, and line strength between the  $1s^22s2p^3$  and  $1s^22s^22p^2$  configurations in Ne V ions with  $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ .

Transition A—B	$\lambda/\text{\AA}$	$A_C/s^{-1}$	$A_B/s^{-1}$	$gf_C$	$gf_B$	$S_C/a.u.$	$S_B/a.u.$	$A_C/A_B$
$^3D_1$ — $^3P_2$	572.15	2.736 <sup>7</sup>	2.750 <sup>7</sup>	4.029 <sup>-3</sup>	4.049 <sup>-3</sup>	7.589 <sup>-3</sup>	7.626 <sup>-3</sup>	1.00
	—	2.694 <sup>7</sup> [22]	2.700 <sup>7</sup> [22]	—	—	—	—	—
$^3P_1$ — $^3P_2$	482.98	1.273 <sup>9</sup>	1.270 <sup>9</sup>	1.336 <sup>-1</sup>	1.332 <sup>-1</sup>	2.124 <sup>-1</sup>	2.118 <sup>-1</sup>	1.00
	—	1.265 <sup>9</sup> [22]	1.272 <sup>9</sup> [22]	—	—	—	—	—
$^3S_1$ — $^3P_2$	482.990 [40]	—	1.70 <sup>9</sup> [40]	—	—	—	2.80 <sup>-1</sup> [40]	—
	359.11	1.180 <sup>10</sup>	1.211 <sup>10</sup>	6.842 <sup>-1</sup>	7.021 <sup>-1</sup>	8.089 <sup>-1</sup>	8.301 <sup>-1</sup>	0.97
$^3S_1$ — $^3P_2$	—	1.196 <sup>10</sup> [22]	1.198 <sup>10</sup> [22]	—	—	—	—	—
	359.374 [40]	—	1.20 <sup>10</sup> [40]	—	—	—	8.25 <sup>-1</sup> [40]	—
$^1P_1$ — $^3P_2$	329.88	5.077 <sup>5</sup>	5.506 <sup>5</sup>	2.485 <sup>-5</sup>	2.695 <sup>-5</sup>	2.699 <sup>-5</sup>	2.927 <sup>-5</sup>	0.92
	—	1.265 <sup>9</sup> [22]	1.272 <sup>9</sup> [22]	—	—	—	—	—
$^3D_1$ — $^1D_2$	687.30	3.189 <sup>4</sup>	2.338 <sup>4</sup>	6.776 <sup>-6</sup>	4.966 <sup>-6</sup>	1.533 <sup>-5</sup>	1.124 <sup>-5</sup>	1.36
	—	3.377 <sup>4</sup> [22]	2.398 <sup>4</sup> [22]	—	—	—	—	—
$^3P_1$ — $^1D_2$	562.55	2.923 <sup>5</sup>	2.795 <sup>5</sup>	4.161 <sup>-5</sup>	3.979 <sup>-5</sup>	7.706 <sup>-5</sup>	7.368 <sup>-5</sup>	1.05
	—	2.887 <sup>5</sup> [22]	2.789 <sup>5</sup> [22]	—	—	—	—	—
$^3S_1$ — $^1D_2$	401.32	6.659 <sup>5</sup>	6.588 <sup>5</sup>	4.823 <sup>-5</sup>	4.772 <sup>-5</sup>	6.372 <sup>-5</sup>	6.304 <sup>-5</sup>	1.01
	—	6.765 <sup>5</sup> [22]	6.891 <sup>5</sup> [22]	—	—	—	—	—
$^1P_1$ — $^1D_2$	365.15	1.303 <sup>10</sup>	1.326 <sup>10</sup>	7.815 <sup>-1</sup>	7.951 <sup>-1</sup>	9.394 <sup>-1</sup>	9.558 <sup>-1</sup>	0.98
	—	1.320 <sup>10</sup> [22]	1.330 <sup>10</sup> [22]	—	—	—	—	—
$^5S_2$ — $^3P_2$	365.593 [40]	—	1.35 <sup>10</sup> [40]	—	—	—	9.77 <sup>-1</sup> [40]	—
	1151.14	9.075 <sup>3</sup>	5.839 <sup>3</sup>	9.014 <sup>-6</sup>	5.800 <sup>-6</sup>	3.416 <sup>-5</sup>	2.198 <sup>-5</sup>	1.55
$^5S_2$ — $^3P_2$	1145.606 [40]	9.207 <sup>3</sup> [22]	5.877 <sup>3</sup> [22]	—	—	—	—	—
	572.22	2.613 <sup>8</sup>	2.620 <sup>8</sup>	6.413 <sup>-2</sup>	6.431 <sup>-2</sup>	1.208 <sup>-1</sup>	1.212 <sup>-1</sup>	1.00
$^3D_2$ — $^3P_2$	—	2.573 <sup>8</sup> [22]	2.574 <sup>8</sup> [22]	—	—	—	—	—
	572.105 [40]	—	3.50 <sup>8</sup> [40]	—	—	—	1.60 <sup>-1</sup> [40]	—
$^3P_2$ — $^3P_2$	482.99	2.376 <sup>9</sup>	2.368 <sup>9</sup>	4.155 <sup>-1</sup>	4.140 <sup>-1</sup>	6.607 <sup>-1</sup>	6.584 <sup>-1</sup>	1.00
	—	2.361 <sup>9</sup> [22]	2.372 <sup>9</sup> [22]	—	—	—	—	—
$^3P_2$ — $^3P_2$	482.994 [40]	—	3.00 <sup>9</sup> [40]	—	—	—	8.30 <sup>-1</sup> [40]	—
	370.68	2.673 <sup>6</sup>	2.815 <sup>6</sup>	2.753 <sup>-4</sup>	2.899 <sup>-4</sup>	3.360 <sup>-4</sup>	3.538 <sup>-4</sup>	0.95
$^1D_2$ — $^3P_2$	—	2.733 <sup>6</sup> [22]	2.733 <sup>6</sup> [22]	—	—	—	—	—
	1736.53	6.487 <sup>-1</sup>	3.006 <sup>-1</sup>	1.466 <sup>-9</sup>	6.796 <sup>-10</sup>	8.383 <sup>-9</sup>	3.885 <sup>-9</sup>	2.16
$^5S_2$ — $^1D_2$	—	9.084 <sup>-1</sup> [22]	3.080 <sup>-1</sup> [22]	—	—	—	—	—
	687.41	5.119 <sup>4</sup>	4.699 <sup>4</sup>	1.813 <sup>-5</sup>	1.664 <sup>-5</sup>	4.103 <sup>-5</sup>	3.766 <sup>-5</sup>	1.09
$^3D_2$ — $^1D_2$	—	5.048 <sup>4</sup> [22]	4.563 <sup>4</sup> [22]	—	—	—	—	—
	562.56	4.720 <sup>4</sup>	4.852 <sup>4</sup>	1.120 <sup>-5</sup>	1.151 <sup>-5</sup>	2.074 <sup>-5</sup>	2.132 <sup>-5</sup>	0.97
$^3P_2$ — $^1D_2$	—	4.214 <sup>4</sup> [22]	4.864 <sup>4</sup> [22]	—	—	—	—	—
	415.82	9.471 <sup>9</sup>	9.671 <sup>9</sup>	1.228	1.253	1.680	1.716	0.98
$^1D_2$ — $^1D_2$	—	9.507 <sup>9</sup> [22]	9.523 <sup>9</sup> [22]	—	—	—	—	—
	416.212 [40]	—	1.10 <sup>10</sup> [40]	—	—	—	1.96 [40]	—
$^3D_3$ — $^3P_2$	572.45	1.148 <sup>9</sup>	1.148 <sup>9</sup>	3.949 <sup>-1</sup>	3.946 <sup>-1</sup>	7.442 <sup>-1</sup>	7.437 <sup>-1</sup>	1.00
	—	1.131 <sup>9</sup> [22]	1.128 <sup>9</sup> [22]	—	—	—	—	—
$^3D_3$ — $^3P_2$	572.335 [40]	—	1.40 <sup>9</sup> [40]	—	—	—	9.10 <sup>-1</sup> [40]	—
	687.75	2.422 <sup>5</sup>	2.242 <sup>5</sup>	1.202 <sup>-4</sup>	1.113 <sup>-4</sup>	2.722 <sup>-4</sup>	2.520 <sup>-4</sup>	1.08
$^3D_3$ — $^1D_2$	—	2.392 <sup>5</sup> [22]	2.182 <sup>5</sup> [22]	—	—	—	—	—

注: 表中A, B分别为 $1s^22s2p^3$ 和 $1s^22s^22p^2$ 组态;  $a \times 10^b$ 表示为 $a^b$ .

表 7 Si IX 离子 ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )  $1s^2 2s 2p^3 - 1s^2 2s^2 2p^2$  间 E1 跃迁谱线波长、跃迁速率、加权振子强度和线强  
 Table 7. The E1 transition wavelength, rate, weighted oscillator strength, and line strength between the  $1s^2 2s 2p^3$  and  $1s^2 2s^2 2p^2$  configurations in Si IX ions with  $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ .

Transition A—B	$\lambda/\text{\AA}$	$A_C/s^{-1}$	$A_B/s^{-1}$	$gf_C$	$gf_B$	$S_C/\text{a.u.}$	$S_B/\text{a.u.}$	$A_C/A_B$
$^3D_1 - ^3P_0$	342.19	1.493 <sup>9</sup>	1.502 <sup>9</sup>	7.861 <sup>-2</sup>	7.910 <sup>-2</sup>	8.855 <sup>-2</sup>	8.911 <sup>-2</sup>	0.99
	—	1.494 <sup>9 [22]</sup>	1.494 <sup>9 [22]</sup>	—	—	—	—	—
	342.36 <sup>[26]</sup>	—	1.468 <sup>9 [26]</sup>	—	—	—	8.724 <sup>-2 [26]</sup>	—
	341.949 <sup>[40]</sup>	—	1.49 <sup>9 [40]</sup>	—	—	—	8.81 <sup>-2 [40]</sup>	—
$^3P_1 - ^3P_0$	290.83	1.916 <sup>9</sup>	1.907 <sup>9</sup>	7.29 <sup>-2</sup>	7.255 <sup>-2</sup>	6.980 <sup>-2</sup>	6.947 <sup>-2</sup>	1.00
	—	1.917 <sup>9 [22]</sup>	1.919 <sup>9 [22]</sup>	—	6.35 <sup>-2 [27]</sup>	—	—	—
	290.93 <sup>[26]</sup>	—	1.885 <sup>9 [26]</sup>	—	6.27 <sup>-2 [28]</sup>	—	6.871 <sup>-2 [26]</sup>	—
	290.69 <sup>[40]</sup>	—	1.94 <sup>9 [40]</sup>	—	7.37 <sup>-2 [31]</sup>	—	7.05 <sup>-2 [40]</sup>	—
$^3S_1 - ^3P_0$	223.74	3.975 <sup>9</sup>	4.037 <sup>9</sup>	8.950 <sup>-2</sup>	9.089 <sup>-2</sup>	6.592 <sup>-2</sup>	6.695 <sup>-2</sup>	0.98
	—	4.008 <sup>9 [22]</sup>	4.015 <sup>9 [22]</sup>	—	1.22 <sup>-1 [27]</sup>	—	—	—
	223.93 <sup>[26]</sup>	—	3.954 <sup>9 [26]</sup>	—	1.23 <sup>-1 [28]</sup>	—	6.574 <sup>-2 [26]</sup>	—
	223.743 <sup>[40]</sup>	—	4.04 <sup>9 [40]</sup>	—	9.12 <sup>-2 [31]</sup>	—	6.70 <sup>-2 [40]</sup>	—
$^1P_1 - ^3P_0$	202.88	4.495 <sup>5</sup>	4.114 <sup>5</sup>	8.320 <sup>-6</sup>	7.616 <sup>-6</sup>	5.557 <sup>-6</sup>	5.086 <sup>-6</sup>	1.09
	—	4.300 <sup>5 [22]</sup>	3.941 <sup>5 [22]</sup>	—	—	—	—	—
	203.22 <sup>[26]</sup>	—	4.477 <sup>5 [26]</sup>	—	—	—	5.563 <sup>-6 [26]</sup>	—
	202.941 <sup>[40]</sup>	—	3.52 <sup>5 [40]</sup>	—	—	—	4.36 <sup>-6 [40]</sup>	—
$^3D_1 - ^1S_0$	543.82	4.079 <sup>5</sup>	3.957 <sup>5</sup>	5.426 <sup>-5</sup>	5.263 <sup>-5</sup>	9.714 <sup>-5</sup>	9.423 <sup>-5</sup>	1.03
	—	4.079 <sup>5 [22]</sup>	4.029 <sup>5 [22]</sup>	—	—	—	—	—
	542.99 <sup>[26]</sup>	—	3.944 <sup>5 [26]</sup>	—	—	—	9.349 <sup>-5 [26]</sup>	—
	541.589 <sup>[40]</sup>	—	3.64 <sup>5 [40]</sup>	—	—	—	8.56 <sup>-5 [40]</sup>	—
$^3P_1 - ^1S_0$	424.65	2.190 <sup>6</sup>	1.977 <sup>6</sup>	1.776 <sup>-4</sup>	1.603 <sup>-4</sup>	2.483 <sup>-4</sup>	2.242 <sup>-4</sup>	1.11
	—	2.216 <sup>6 [22]</sup>	2.005 <sup>6 [22]</sup>	—	—	—	—	—
	424.08 <sup>[26]</sup>	—	1.970 <sup>6 [26]</sup>	—	—	—	2.225 <sup>-4 [26]</sup>	—
	423.352 <sup>[40]</sup>	—	1.87 <sup>6 [40]</sup>	—	—	—	2.10 <sup>-4 [40]</sup>	—
$^3S_1 - ^1S_0$	295.34	5.957 <sup>6</sup>	6.053 <sup>6</sup>	2.337 <sup>-4</sup>	2.375 <sup>-4</sup>	2.272 <sup>-4</sup>	2.309 <sup>-4</sup>	0.98
	—	5.874 <sup>6 [22]</sup>	5.828 <sup>6 [22]</sup>	—	—	—	—	—
	295.3 <sup>[26]</sup>	—	6.030 <sup>6 [26]</sup>	—	—	—	2.299 <sup>-4 [26]</sup>	—
	294.861 <sup>[40]</sup>	—	5.15 <sup>6 [40]</sup>	—	—	—	1.95 <sup>-4 [40]</sup>	—
$^1P_1 - ^1S_0$	260.04	5.801 <sup>9</sup>	5.889 <sup>9</sup>	1.764 <sup>-1</sup>	1.791 <sup>-1</sup>	1.510 <sup>-1</sup>	1.533 <sup>-1</sup>	0.99
	—	5.839 <sup>9 [22]</sup>	5.829 <sup>9 [22]</sup>	—	2.96 <sup>-1 [27]</sup>	—	—	—
	260.31 <sup>[26]</sup>	—	5.722 <sup>9 [26]</sup>	—	2.92 <sup>-1 [28]</sup>	—	1.494 <sup>-1 [26]</sup>	—
	259.770 <sup>[40]</sup>	—	5.80 <sup>9 [40]</sup>	—	1.79 <sup>-1 [31]</sup>	—	1.51 <sup>-1 [40]</sup>	—
$^3P_0 - ^3P_1$	292.89	6.069 <sup>9</sup>	6.054 <sup>9</sup>	7.804 <sup>-2</sup>	7.785 <sup>-2</sup>	7.525 <sup>-2</sup>	7.506 <sup>-2</sup>	1.00
	—	6.064 <sup>9 [22]</sup>	6.083 <sup>9 [22]</sup>	—	7.01 <sup>-2 [27]</sup>	—	—	—
	292.99 <sup>[26]</sup>	—	1.196 <sup>9 [26]</sup>	—	6.89 <sup>-2 [28]</sup>	—	7.422 <sup>-2 [26]</sup>	—
	292.800 <sup>[40]</sup>	—	6.07 <sup>9 [40]</sup>	—	7.90 <sup>-2 [31]</sup>	—	7.53 <sup>-2 [40]</sup>	—
$^3D_1 - ^3P_1$	345.11	8.744 <sup>8</sup>	8.830 <sup>8</sup>	4.684 <sup>-2</sup>	4.730 <sup>-2</sup>	5.321 <sup>-2</sup>	5.374 <sup>-2</sup>	0.99
	—	8.744 <sup>8 [22]</sup>	8.766 <sup>8 [22]</sup>	—	—	—	—	—
	345.37 <sup>[26]</sup>	—	8.606 <sup>8 [26]</sup>	—	—	—	5.249 <sup>-2 [26]</sup>	—
	344.951 <sup>[40]</sup>	—	8.77 <sup>8 [40]</sup>	—	—	—	5.33 <sup>-2 [40]</sup>	—
$^3P_1 - ^3P_1$	292.94	1.835 <sup>9</sup>	1.832 <sup>9</sup>	7.084 <sup>-2</sup>	7.069 <sup>-2</sup>	6.831 <sup>-2</sup>	6.817 <sup>-2</sup>	1.00
	—	1.834 <sup>9 [22]</sup>	1.838 <sup>9 [22]</sup>	—	6.71 <sup>-2 [27]</sup>	—	—	—
	293.1 <sup>[26]</sup>	—	1.806 <sup>9 [26]</sup>	—	6.51 <sup>-2 [28]</sup>	—	6.733 <sup>-2 [26]</sup>	—
	292.857 <sup>[40]</sup>	—	1.84 <sup>9 [40]</sup>	—	7.16 <sup>-2 [31]</sup>	—	6.85 <sup>-2 [40]</sup>	—

表 7 (续) Si IX 离子 ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )  $1s^22s2p^3$ - $1s^22s^22p^2$  间 E1 跃迁谱线波长、跃迁速率、加权振子强度和线强  
 Table 7 (continued). The E1 transition wavelength, rate, weighted oscillator strength, and line strength between the  $1s^22s2p^3$  and  $1s^22s^22p^2$  configurations in Si IX ions with  $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ .

Transition A—B	$\lambda/\text{\AA}$	$A_C/s^{-1}$	$A_B/s^{-1}$	$gf_C$	$gf_B$	$S_C/a.u.$	$S_B/a.u.$	$A_C/A_B$
$^3S_1 \rightarrow ^3P_1$	224.98	$1.194^{10}$	$1.212^{10}$	$2.719^{-1}$	$2.760^{-1}$	$2.014^{-1}$	$2.044^{-1}$	0.99
	—	$1.204^{10}$ [22]	$1.206^{10}$ [22]	—	$3.70^{-1}$ [27]	—	—	—
	225.21 [26]	—	$1.187^{10}$ [26]	—	$3.72^{-1}$ [28]	—	$2.008^{-1}$ [26]	—
	225.024 [40]	—	$1.21^{10}$ [40]	—	$2.77^{-1}$ [31]	—	$2.05^{-1}$ [40]	—
$^1P_1 \rightarrow ^3P_1$	203.90	$7.233^7$	$7.396^7$	$1.352^{-3}$	$1.383^{-3}$	$9.078^{-4}$	$9.284^{-4}$	0.98
	—	$7.236^7$ [22]	$7.298^7$ [22]	—	—	—	—	—
	204.27 [26]	—	$7.371^7$ [26]	—	—	—	$9.302^{-4}$ [26]	—
	203.994 [40]	—	$6.70^7$ [40]	—	—	—	$8.43^{-4}$ [40]	—
$^5S_2 \rightarrow ^3P_1$	678.56	$7.914^4$	$6.199^4$	$2.731^{-5}$	$2.139^{-5}$	$6.102^{-5}$	$4.779^{-5}$	1.28
	—	$8.052^4$ [22]	$6.330^4$ [22]	—	—	—	—	—
	673.72 [26]	—	$6.481^4$ [26]	—	—	—	$4.891^{-5}$ [26]	—
	674.65 [40]	—	$6.19^4$ [40]	—	—	—	$4.69^{-5}$ [40]	—
$^3D_2 \rightarrow ^3P_1$	345.28	$1.950^9$	$1.959^9$	$1.743^{-1}$	$1.751^{-1}$	$1.981^{-1}$	$1.990^{-1}$	1.00
	—	$1.951^9$ [22]	$1.947^9$ [22]	—	—	—	—	—
	345.5 [26]	—	$1.914^9$ [26]	—	—	—	$1.948^{-1}$ [26]	—
	345.124 [40]	—	$1.94^9$ [40]	—	—	—	$1.97^{-1}$ [40]	—
$^3P_2 \rightarrow ^3P_1$	292.85	$1.219^9$	$1.210^9$	$7.834^{-2}$	$7.778^{-2}$	$7.553^{-2}$	$7.499^{-2}$	1.01
	—	$1.219^9$ [22]	$1.219^9$ [22]	—	$6.47^{-2}$ [27]	—	—	—
	293.04 [26]	—	$5.974^9$ [26]	—	$6.46^{-2}$ [28]	—	$7.420^{-2}$ [26]	—
	292.763 [40]	—	$1.23^9$ [40]	—	$7.91^{-2}$ [31]	—	$7.64^{-2}$ [40]	—
$^1D_2 \rightarrow ^3P_1$	228.30	$2.834^6$	$2.958^6$	$1.107^{-4}$	$1.156^{-4}$	$8.323^{-5}$	$8.685^{-5}$	0.96
	—	$2.820^6$ [22]	$2.964^6$ [22]	—	—	—	—	—
	228.73 [26]	—	$2.947^6$ [26]	—	—	—	$8.703^{-5}$ [26]	—
	228.385 [40]	—	$2.88^6$ [40]	—	—	—	$8.48^{-5}$ [40]	—
$^3D_1 \rightarrow ^3P_2$	349.82	$3.588^7$	$3.654^7$	$1.9745^{-3}$	$2.011^{-3}$	$2.274^{-3}$	$2.316^{-3}$	0.98
	—	$3.625^7$ [22]	$3.644^7$ [22]	—	—	—	—	—
	350.05 [26]	—	$3.571^7$ [26]	—	—	—	$2.268^{-3}$ [26]	—
	349.617 [40]	—	$3.69^7$ [40]	—	—	—	$2.34^{-3}$ [40]	—
$^3P_1 \rightarrow ^3P_2$	296.32	$2.261^9$	$2.256^9$	$8.930^{-2}$	$8.909^{-2}$	$8.712^{-2}$	$8.691^{-2}$	1.00
	—	$2.259^9$ [22]	$2.269^9$ [22]	—	$7.90^{-2}$ [27]	—	—	—
	296.46 [26]	—	$2.227^9$ [26]	—	$7.80^{-2}$ [28]	—	$8.592^{-2}$ [26]	—
	296.213 [40]	—	$2.28^9$ [40]	—	$9.04^{-2}$ [31]	—	$8.79^{-2}$ [40]	—
$^3S_1 \rightarrow ^3P_2$	226.98	$2.040^{10}$	$2.068^{10}$	$4.726^{-1}$	$4.792^{-1}$	$3.532^{-1}$	$3.581^{-1}$	0.99
	—	$2.057^{10}$ [22]	$2.058^{10}$ [22]	—	—	—	—	—
	227.19 [26]	—	$2.026^{10}$ [26]	—	—	—	$3.517^{-1}$ [26]	—
	227.000 [40]	—	$2.07^{10}$ [40]	—	—	—	$3.58^{-1}$ [40]	—
$^1P_1 \rightarrow ^3P_2$	205.53	$2.576^6$	$2.866^6$	$4.895^{-5}$	$5.446^{-5}$	$3.312^{-5}$	$3.685^{-5}$	0.90
	—	$2.560^6$ [22]	$2.645^6$ [22]	—	—	—	—	—
	205.9 [26]	—	$2.948^6$ [26]	—	—	—	$3.811^{-5}$ [26]	—
	205.617 [40]	—	$2.06^6$ [40]	—	—	—	$2.66^{-5}$ [40]	—
$^3D_1 \rightarrow ^1D_2$	417.97	$8.632^5$	$7.114^5$	$6.782^{-5}$	$5.590^{-5}$	$9.332^{-5}$	$7.692^{-5}$	1.21
	—	$8.676^5$ [22]	$7.157^5$ [22]	—	—	—	—	—
	417.85 [26]	—	$7.123^5$ [26]	—	—	—	$7.694^{-5}$ [26]	—
	417.510 [40]	—	$7.11^5$ [40]	—	—	—	$7.66^{-5}$ [40]	—

表 7 (续) Si IX 离子 ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )  $1s^22s2p^3-1s^22s^22p^2$  间 E1 跃迁谱线波长、跃迁速率、加权振子强度和线强  
 Table 7 (continued). The E1 transition wavelength, rate, weighted oscillator strength, and line strength between the  $1s^22s2p^3$  and  $1s^22s^22p^2$  configurations in Si IX ions with  $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ .

Transition A—B	$\lambda/\text{\AA}$	$A_C/s^{-1}$	$A_B/s^{-1}$	$gf_C$	$gf_B$	$S_C/\text{a.u.}$	$S_B/\text{a.u.}$	$A_C/A_B$
$^3P_1-^1D_2$	343.81	6.293 <sup>6</sup>	6.123 <sup>6</sup>	3.346 <sup>-4</sup>	3.255 <sup>-4</sup>	3.787 <sup>-4</sup>	3.684 <sup>-4</sup>	1.03
	—	6.211 <sup>6</sup> [22]	6.107 <sup>6</sup> [22]	—	—	—	—	—
	343.7 [26]	—	6.114 <sup>6</sup> [26]	—	—	—	3.675 <sup>-4</sup> [26]	—
	343.545 [40]	—	5.76 <sup>6</sup> [40]	—	—	—	3.46 <sup>-4</sup> [40]	—
$^3S_1-^1D_2$	253.83	3.793 <sup>6</sup>	3.647 <sup>6</sup>	1.099 <sup>-4</sup>	1.057 <sup>-4</sup>	9.186 <sup>-5</sup>	8.832 <sup>-5</sup>	1.04
	—	3.734 <sup>6</sup> [22]	3.795 <sup>6</sup> [22]	—	—	—	—	—
	253.94 [26]	—	3.986 <sup>6</sup> [26]	—	—	—	9.664 <sup>-5</sup> [26]	—
	253.797 [40]	—	3.30 <sup>6</sup> [40]	—	—	—	8.00 <sup>-5</sup> [40]	—
$^1P_1-^1D_2$	227.31	2.260 <sup>10</sup>	2.273 <sup>10</sup>	5.251 <sup>-1</sup>	5.281 <sup>-1</sup>	3.930 <sup>-1</sup>	3.952 <sup>-1</sup>	0.99
	—	2.276 <sup>10</sup> [22]	2.284 <sup>10</sup> [22]	—	4.78 <sup>-1</sup> [27]	—	—	—
	227.63 [26]	—	2.235 <sup>10</sup> [26]	—	4.83 <sup>-1</sup> [28]	—	3.902 <sup>-1</sup> [26]	—
	227.361 [40]	—	2.31 <sup>10</sup> [40]	—	5.36 <sup>-1</sup> [31]	—	4.02 <sup>-1</sup> [40]	—
$^5S_2-^3P_2$	697.02	1.943 <sup>5</sup>	1.473 <sup>5</sup>	7.077 <sup>-5</sup>	5.363 <sup>-5</sup>	1.624 <sup>-4</sup>	1.231 <sup>-4</sup>	1.32
	—	1.915 <sup>5</sup> [22]	1.466 <sup>5</sup> [22]	—	—	—	—	—
	691.75 [26]	—	1.505 <sup>5</sup> [26]	—	—	—	1.229 <sup>-4</sup> [26]	—
	692.73 [40]	—	1.43 <sup>5</sup> [40]	—	—	—	1.18 <sup>-4</sup> [40]	—
$^3D_2-^3P_2$	350.00	3.949 <sup>8</sup>	3.999 <sup>8</sup>	3.626 <sup>-2</sup>	3.672 <sup>-2</sup>	4.178 <sup>-2</sup>	4.231 <sup>-2</sup>	0.99
	—	3.961 <sup>8</sup> [22]	3.972 <sup>8</sup> [22]	—	—	—	—	—
	350.18 [26]	—	3.895 <sup>8</sup> [26]	—	—	—	4.128 <sup>-2</sup> [26]	—
	349.795 [40]	—	4.00 <sup>8</sup> [40]	—	—	—	4.23 <sup>-2</sup> [40]	—
$^3P_2-^3P_2$	296.23	4.685 <sup>9</sup>	4.669 <sup>9</sup>	3.082 <sup>-1</sup>	3.071 <sup>-1</sup>	3.005 <sup>-1</sup>	2.995 <sup>-1</sup>	1.00
	—	4.682 <sup>9</sup> [22]	4.691 <sup>9</sup> [22]	—	2.83 <sup>-1</sup> [27]	—	—	—
	296.35 [26]	—	4.608 <sup>9</sup> [26]	—	2.76 <sup>-1</sup> [28]	—	2.959 <sup>-1</sup> [26]	—
	296.117 [40]	—	4.71 <sup>9</sup> [40]	—	3.12 <sup>-1</sup> [31]	—	3.02 <sup>-1</sup> [40]	—
$^1D_2-^3P_2$	230.35	5.812 <sup>7</sup>	6.002 <sup>7</sup>	2.312 <sup>-3</sup>	2.388 <sup>-3</sup>	1.753 <sup>-3</sup>	1.811 <sup>-3</sup>	0.97
	—	5.807 <sup>7</sup> [22]	5.911 <sup>7</sup> [22]	—	—	—	—	—
	230.78 [26]	—	5.874 <sup>7</sup> [26]	—	—	—	1.782 <sup>-3</sup> [26]	—
	230.421 [40]	—	5.46 <sup>7</sup> [40]	—	—	—	1.65 <sup>-3</sup> [40]	—
$^5S_2-^1D_2$	1032.47	2.584 <sup>2</sup>	1.338 <sup>2</sup>	2.065 <sup>-7</sup>	1.069 <sup>-7</sup>	7.018 <sup>-7</sup>	3.633 <sup>-7</sup>	1.93
	—	1.681 <sup>2</sup> [22]	1.080 <sup>2</sup> [22]	—	—	—	—	—
	1018.31 [26]	—	1.197 <sup>2</sup> [26]	—	—	—	3.120 <sup>-7</sup> [26]	—
$^3D_2-^1D_2$	418.22	1.118 <sup>6</sup>	1.074 <sup>6</sup>	1.466 <sup>-4</sup>	1.408 <sup>-4</sup>	2.019 <sup>-4</sup>	1.939 <sup>-4</sup>	1.04
	—	1.124 <sup>6</sup> [22]	1.059 <sup>6</sup> [22]	—	—	—	—	—
	418.05 [26]	—	1.052 <sup>6</sup> [26]	—	—	—	1.897 <sup>-4</sup> [26]	—
	417.763 [40]	—	9.82 <sup>5</sup> [40]	—	—	—	1.77 <sup>-4</sup> [40]	—
$^3P_2-^1D_2$	343.69	9.537 <sup>5</sup>	9.669 <sup>5</sup>	8.445 <sup>-5</sup>	8.561 <sup>-5</sup>	9.555 <sup>-5</sup>	9.686 <sup>-5</sup>	0.99
	—	9.018 <sup>5</sup> [22]	9.857 <sup>5</sup> [22]	—	—	—	—	—
	343.55 [26]	—	9.677 <sup>5</sup> [26]	—	—	—	9.683 <sup>-5</sup> [26]	—
	343.416 [40]	—	8.27 <sup>5</sup> [40]	—	—	—	8.26 <sup>-5</sup> [40]	—
$^1D_2-^1D_2$	258.06	1.759 <sup>10</sup>	1.781 <sup>10</sup>	8.781 <sup>-1</sup>	8.891 <sup>-1</sup>	7.460 <sup>-1</sup>	7.554 <sup>-1</sup>	0.99
	—	1.770 <sup>10</sup> [22]	1.770 <sup>10</sup> [22]	—	1.21 [27]	—	—	—
	258.42 [26]	—	1.738 <sup>10</sup> [26]	—	1.20 [28]	—	7.403 <sup>-1</sup> [26]	—
	258.08 [40]	—	1.77 <sup>10</sup> [40]	—	8.93 <sup>-1</sup> [31]	—	7.52 <sup>-1</sup> [40]	—

表 7 (续) Si IX 离子 ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )  $1s^22s2p^3$ - $1s^22s^22p^2$  间 E1 跃迁谱线波长、跃迁速率、加权振子强度和线强  
Table 7 (continued). The E1 transition wavelength, rate, weighted oscillator strength, and line strength between the  $1s^22s2p^3$  and  $1s^22s^22p^2$  configurations in Si IX ions with  $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ .

Transition A—B	$\lambda/\text{\AA}$	$A_C/s^{-1}$	$A_B/s^{-1}$	$gf_C$	$gf_B$	$S_C/\text{a.u.}$	$S_B/\text{a.u.}$	$A_C/A_B$
$^3D_3$ — $^3P_2$	350.07	2.247 <sup>9</sup>	2.255 <sup>9</sup>	2.890 <sup>-1</sup>	2.900 <sup>-1</sup>	3.331 <sup>-1</sup>	3.342 <sup>-1</sup>	1
	—	2.250 <sup>9</sup> [22]	2.241 <sup>9</sup> [22]	—	—	—	—	—
	350.25 [26]	—	2.201 <sup>9</sup> [26]	—	—	—	3.268 <sup>-1</sup> [26]	—
	349.873 [40]	—	2.24 <sup>9</sup> [40]	—	—	—	3.31 <sup>-1</sup> [40]	—
$^3D_3$ — $^1D_2$	418.33	5.808 <sup>6</sup>	5.575 <sup>6</sup>	1.067 <sup>-3</sup>	1.024 <sup>-3</sup>	1.469 <sup>-3</sup>	1.410 <sup>-3</sup>	1.04
	—	5.799 <sup>6</sup> [22]	5.492 <sup>6</sup> [22]	—	—	—	—	—
	418.15 [26]	—	5.483 <sup>6</sup> [26]	—	—	—	1.385 <sup>-3</sup> [26]	—
	417.875 [40]	—	5.19 <sup>6</sup> [40]	—	—	—	1.31 <sup>-3</sup> [40]	—

注: 表中A, B分别为 $1s^22s2p^3$ 和 $1s^22s^22p^2$ 组态;  $a \times 10^b$ 表示为 $a^b$ .

表 8 Ge XXVII 离子 ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )  $1s^22s2p^3$ - $1s^22s^22p^2$  间 E1 跃迁谱线波长、跃迁速率、加权振子强度和线强  
Table 8. The E1 transition wavelength, rate, weighted oscillator strength, and line strength between the  $1s^22s2p^3$  and  $1s^22s^22p^2$  configurations in Ge XXVII ions with  $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ .

Transition A—B	$\lambda/\text{\AA}$	$A_C/s^{-1}$	$A_B/s^{-1}$	$gf_C$	$gf_B$	$S_C/\text{a.u.}$	$S_B/\text{a.u.}$	$A_C/A_B$
$^3D_1$ — $^3P_0$	85.09	3.145 <sup>10</sup>	3.148 <sup>10</sup>	1.024 <sup>-1</sup>	1.025 <sup>-1</sup>	2.869 <sup>-2</sup>	2.872 <sup>-2</sup>	1.00
	85.07 [26]	—	3.143 <sup>10</sup> [26]	—	—	—	2.865 <sup>-2</sup> [26]	—
$^3P_1$ — $^3P_0$	68.08	5.270 <sup>9</sup>	5.255 <sup>9</sup>	1.099 <sup>-2</sup>	1.095 <sup>-2</sup>	2.462 <sup>-3</sup>	2.455 <sup>-3</sup>	1.00
	68.07 [26]	—	5.260 <sup>9</sup> [26]	—	—	—	2.456 <sup>-3</sup> [26]	—
$^3S_1$ — $^3P_0$	61.19	1.122 <sup>10</sup>	1.129 <sup>10</sup>	1.890 <sup>-2</sup>	1.902 <sup>-2</sup>	3.806 <sup>-3</sup>	3.831 <sup>-3</sup>	0.99
	61.18 [26]	—	1.125 <sup>10</sup> [26]	—	—	—	3.813 <sup>-3</sup> [26]	—
$^1P_1$ — $^3P_0$	50.62	4.671 <sup>7</sup>	4.619 <sup>7</sup>	5.384 <sup>-5</sup>	5.324 <sup>-5</sup>	8.973 <sup>-6</sup>	8.873 <sup>-6</sup>	1.01
	50.62 [26]	—	4.636 <sup>7</sup> [26]	—	—	—	8.902 <sup>-6</sup> [26]	—
$^3D_1$ — $^1S_0$	224.22	5.647 <sup>7</sup>	5.274 <sup>7</sup>	1.277 <sup>-3</sup>	1.193 <sup>-3</sup>	9.424 <sup>-4</sup>	8.803 <sup>-4</sup>	1.07
	223.88 [26]	—	5.329 <sup>7</sup> [26]	—	—	—	8.854 <sup>-4</sup> [26]	—
$^3P_1$ — $^1S_0$	135.21	4.114 <sup>8</sup>	3.848 <sup>8</sup>	3.383 <sup>-3</sup>	3.164 <sup>-3</sup>	1.506 <sup>-3</sup>	1.408 <sup>-3</sup>	1.07
	135.08 [26]	—	3.851 <sup>8</sup> [26]	—	—	—	1.405 <sup>-3</sup> [26]	—
$^3S_1$ — $^1S_0$	110.49	1.901 <sup>9</sup>	1.858 <sup>9</sup>	1.044 <sup>-2</sup>	1.020 <sup>-2</sup>	3.796 <sup>-3</sup>	3.710 <sup>-3</sup>	1.02
	110.41 [26]	—	1.850 <sup>9</sup> [26]	—	—	—	3.688 <sup>-3</sup> [26]	—
$^1P_1$ — $^1S_0$	80.25	2.852 <sup>10</sup>	2.849 <sup>10</sup>	8.260 <sup>-2</sup>	8.253 <sup>-2</sup>	2.182 <sup>-2</sup>	2.180 <sup>-2</sup>	1.00
	80.21 [26]	—	2.830 <sup>10</sup> [26]	—	—	—	2.169 <sup>-2</sup> [26]	—
$^3P_0$ — $^3P_1$	81.91	4.173 <sup>10</sup>	4.173 <sup>10</sup>	4.198 <sup>-2</sup>	4.198 <sup>-2</sup>	1.132 <sup>-2</sup>	1.132 <sup>-2</sup>	1.00
	81.89 [26]	—	4.174 <sup>10</sup> [26]	—	—	—	1.131 <sup>-2</sup> [26]	—
$^3D_1$ — $^3P_1$	104.69	2.621 <sup>7</sup>	3.133 <sup>7</sup>	1.292 <sup>-4</sup>	1.544 <sup>-4</sup>	4.452 <sup>-5</sup>	5.322 <sup>-5</sup>	0.84
	104.66 [26]	—	3.056 <sup>7</sup> [26]	—	—	—	5.188 <sup>-5</sup> [26]	—
$^3P_1$ — $^3P_1$	80.08	4.486 <sup>10</sup>	4.491 <sup>10</sup>	1.294 <sup>-1</sup>	1.295 <sup>-1</sup>	3.411 <sup>-2</sup>	3.414 <sup>-2</sup>	1.00
	80.06 [26]	—	4.485 <sup>10</sup> [26]	—	—	—	3.408 <sup>-2</sup> [26]	—
$^3S_1$ — $^3P_1$	70.71	2.941 <sup>10</sup>	2.945 <sup>10</sup>	6.613 <sup>-2</sup>	6.621 <sup>-2</sup>	1.539 <sup>-2</sup>	1.541 <sup>-2</sup>	1.00
	70.70 [26]	—	2.935 <sup>10</sup> [26]	—	—	—	1.535 <sup>-2</sup> [26]	—
$^1P_1$ — $^3P_1$	56.97	1.054 <sup>10</sup>	1.060 <sup>10</sup>	1.539 <sup>-2</sup>	1.547 <sup>-2</sup>	2.886 <sup>-3</sup>	2.902 <sup>-3</sup>	0.99
	56.96 [26]	—	1.058 <sup>10</sup> [26]	—	—	—	2.895 <sup>-3</sup> [26]	—
$^5S_2$ — $^3P_1$	161.20	4.005 <sup>8</sup>	3.772 <sup>8</sup>	7.802 <sup>-3</sup>	7.348 <sup>-3</sup>	4.1405 <sup>-3</sup>	3.900 <sup>-3</sup>	1.06
	161.01 [26]	—	3.792 <sup>8</sup> [26]	—	—	—	3.906 <sup>-3</sup> [26]	—
$^3D_2$ — $^3P_1$	100.79	1.580 <sup>10</sup>	1.567 <sup>10</sup>	1.203 <sup>-1</sup>	1.193 <sup>-1</sup>	3.991 <sup>-2</sup>	3.958 <sup>-2</sup>	1.01
	100.75 [26]	—	1.564 <sup>10</sup> [26]	—	—	—	3.948 <sup>-2</sup> [26]	—

表 8 (续) Ge XXVII 离子 ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ ) $1s^2s2p^3-1s^2s^2p^2$  间 E1 跃迁谱线波长、跃迁速率、加权振子强度和线强  
 Table 8 (continued). The E1 transition wavelength, rate, weighted oscillator strength, and line strength between the  $1s^2s2p^3$  and  $1s^2s^2p^2$  configurations in Ge XXVII ions with  $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ .

Transition A—B	$\lambda/\text{\AA}$	$A_C/s^{-1}$	$A_B/s^{-1}$	$gf_C$	$gf_B$	$S_C/a.u.$	$S_B/a.u.$	$A_C/A_B$
$^3P_2-^3P_1$	77.17	9.914 <sup>7</sup>	1.070 <sup>8</sup>	4.425 <sup>-4</sup>	4.774 <sup>-4</sup>	1.124 <sup>-4</sup>	1.213 <sup>-4</sup>	0.93
	77.15 [26]	—	1.054 <sup>8</sup> [26]	—	—	—	1.194 <sup>-4</sup> [26]	—
$^1D_2-^3P_1$	64.62	1.154 <sup>9</sup>	1.159 <sup>9</sup>	3.611 <sup>-3</sup>	3.629 <sup>-3</sup>	7.683 <sup>-4</sup>	7.721 <sup>-4</sup>	0.99
	64.62 [26]	—	1.163 <sup>9</sup> [26]	—	—	—	7.741 <sup>-4</sup> [26]	—
$^3D_1-^3P_2$	112.72	1.104 <sup>9</sup>	1.059 <sup>9</sup>	6.310 <sup>-3</sup>	6.050 <sup>-3</sup>	2.341 <sup>-3</sup>	2.245 <sup>-3</sup>	1.04
	112.68 [26]	—	1.058 <sup>9</sup> [26]	—	—	—	2.241 <sup>-3</sup> [26]	—
$^3P_1-^3P_2$	84.69	1.577 <sup>9</sup>	1.593 <sup>9</sup>	5.087 <sup>-3</sup>	5.140 <sup>-3</sup>	1.418 <sup>-3</sup>	1.433 <sup>-3</sup>	0.99
	84.67 [26]	—	1.599 <sup>9</sup> [26]	—	—	—	1.437 <sup>-3</sup> [26]	—
$^3S_1-^3P_2$	74.28	9.934 <sup>10</sup>	9.919 <sup>10</sup>	2.465 <sup>-1</sup>	2.462 <sup>-1</sup>	6.029 <sup>-2</sup>	6.020 <sup>-2</sup>	1.00
	74.27 [26]	—	9.905 <sup>10</sup> [26]	—	—	—	6.007 <sup>-2</sup> [26]	—
$^1P_1-^3P_2$	59.27	1.106 <sup>9</sup>	1.095 <sup>9</sup>	1.748 <sup>-3</sup>	1.730 <sup>-3</sup>	3.410 <sup>-4</sup>	3.376 <sup>-4</sup>	1.01
	59.26 [26]	—	1.104 <sup>9</sup> [26]	—	—	—	3.403 <sup>-4</sup> [26]	—
$^3D_1-^1D_2$	163.29	3.214 <sup>8</sup>	2.990 <sup>8</sup>	3.855 <sup>-3</sup>	3.586 <sup>-3</sup>	2.072 <sup>-3</sup>	1.928 <sup>-3</sup>	1.07
	163.19 [26]	—	3.010 <sup>8</sup> [26]	—	—	—	1.937 <sup>-3</sup> [26]	—
$^3P_1-^1D_2$	110.38	8.624 <sup>6</sup>	1.125 <sup>7</sup>	4.726 <sup>-5</sup>	6.167 <sup>-5</sup>	1.717 <sup>-5</sup>	2.241 <sup>-5</sup>	0.77
	110.33 [26]	—	1.168 <sup>7</sup> [26]	—	—	—	2.322 <sup>-5</sup> [26]	—
$^3S_1-^1D_2$	93.33	1.971 <sup>9</sup>	1.940 <sup>9</sup>	7.721 <sup>-3</sup>	7.599 <sup>-3</sup>	2.372 <sup>-3</sup>	2.335 <sup>-3</sup>	1.02
	93.30 [26]	—	1.921 <sup>9</sup> [26]	—	—	—	2.310 <sup>-3</sup> [26]	—
$^1P_1-^1D_2$	70.80	1.109 <sup>11</sup>	1.110 <sup>11</sup>	2.501 <sup>-1</sup>	2.503 <sup>-1</sup>	5.829 <sup>-2</sup>	5.835 <sup>-2</sup>	1.00
	70.78 [26]	—	1.109 <sup>11</sup> [26]	—	—	—	5.826 <sup>-2</sup> [26]	—
$^5S_2-^3P_2$	181.07	2.329 <sup>8</sup>	2.139 <sup>8</sup>	5.723 <sup>-3</sup>	5.258 <sup>-3</sup>	3.412 <sup>-3</sup>	3.134 <sup>-3</sup>	1.09
	180.81 [26]	—	2.153 <sup>8</sup> [26]	—	—	—	3.140 <sup>-3</sup> [26]	—
$^3D_2-^3P_2$	108.21	4.069 <sup>8</sup>	3.891 <sup>8</sup>	3.572 <sup>-3</sup>	3.416 <sup>-3</sup>	1.273 <sup>-3</sup>	1.217 <sup>-3</sup>	1.05
	108.17 [26]	—	3.907 <sup>8</sup> [26]	—	—	—	1.220 <sup>-3</sup> [26]	—
$^3P_2-^3P_2$	81.45	5.192 <sup>10</sup>	5.195 <sup>10</sup>	2.582 <sup>-1</sup>	2.583 <sup>-1</sup>	6.922 <sup>-2</sup>	6.927 <sup>-2</sup>	1.00
	81.42 [26]	—	5.191 <sup>10</sup> [26]	—	—	—	6.915 <sup>-2</sup> [26]	—
$^1D_2-^3P_2$	67.60	1.421 <sup>10</sup>	1.430 <sup>10</sup>	4.866 <sup>-2</sup>	4.898 <sup>-2</sup>	1.083 <sup>-2</sup>	1.090 <sup>-2</sup>	0.99
	67.59 [26]	—	1.422 <sup>10</sup> [26]	—	—	—	1.083 <sup>-2</sup> [26]	—
$^5S_2-^1D_2$	360.39	6.547 <sup>6</sup>	5.349 <sup>6</sup>	6.374 <sup>-4</sup>	5.207 <sup>-4</sup>	7.563 <sup>-4</sup>	6.178 <sup>-4</sup>	1.22
	359.24 [26]	—	5.433 <sup>6</sup> [26]	—	—	—	6.215 <sup>-4</sup> [26]	—
$^3D_2-^1D_2$	154.01	6.581 <sup>7</sup>	6.230 <sup>7</sup>	1.170 <sup>-3</sup>	1.108 <sup>-3</sup>	5.933 <sup>-4</sup>	5.616 <sup>-4</sup>	1.06
	153.89 [26]	—	6.150 <sup>7</sup> [26]	—	—	—	5.531 <sup>-4</sup> [26]	—
$^3P_2-^1D_2$	104.93	7.721 <sup>7</sup>	6.977 <sup>7</sup>	6.372 <sup>-4</sup>	5.758 <sup>-4</sup>	2.201 <sup>-4</sup>	1.989 <sup>-4</sup>	1.11
	104.88 [26]	—	6.908 <sup>7</sup> [26]	—	—	—	1.967 <sup>-4</sup> [26]	—
$^1D_2-^1D_2$	83.02	6.362 <sup>10</sup>	6.340 <sup>10</sup>	3.287 <sup>-1</sup>	3.275 <sup>-1</sup>	8.982 <sup>-2</sup>	8.951 <sup>-2</sup>	1.00
	82.99 [26]	—	6.325 <sup>10</sup> [26]	—	—	—	8.923 <sup>-2</sup> [26]	—
$^3D_3-^3P_2$	99.36	9.492 <sup>9</sup>	9.441 <sup>9</sup>	9.833 <sup>-2</sup>	9.781 <sup>-2</sup>	3.216 <sup>-2</sup>	3.199 <sup>-2</sup>	1.01
	99.31 [26]	—	9.418 <sup>9</sup> [26]	—	—	—	3.187 <sup>-2</sup> [26]	—
$^3D_3-^1D_2$	136.67	2.640 <sup>9</sup>	2.545 <sup>9</sup>	5.174 <sup>-2</sup>	4.988 <sup>-2</sup>	2.328 <sup>-2</sup>	2.244 <sup>-2</sup>	1.04
	136.58 [26]	—	2.539 <sup>9</sup> [26]	—	—	—	2.235 <sup>-2</sup> [26]	—

注: 表中A, B分别为 $1s^2s2p^3$ 和 $1s^2s^2p^2$ 组态;  $a \times 10^b$ 表示为 $a^b$ .

表 9 Kr XXXI 离子 ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )  $1s^2 2s 2p^3 - 1s^2 2s^2 2p^2$  间 E1 跃迁谱线波长、跃迁速率、加权振子强度和线强  
 Table 9. The E1 transition wavelength, rate, weighted oscillator strength, and line strength between the  $1s^2 2s 2p^3$  and  $1s^2 2s^2 2p^2$  configurations in Kr XXXI ions with  $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ .

Transition A—B	$\lambda/\text{\AA}$	$A_C/s^{-1}$	$A_B/s^{-1}$	$gf_C$	$gf_B$	$S_C/\text{a.u.}$	$S_B/\text{a.u.}$	$A_C/A_B$
$^3D_1 - ^3P_0$	65.33	$5.900^{10}$	$5.900^{10}$	$1.133^{-1}$	$1.133^{-1}$	$2.436^{-2}$	$2.436^{-2}$	1.00
	65.32 [26]	—	$5.894^{10}$ [26]	—	—	—	$2.432^{-2}$ [26]	—
$^3P_1 - ^3P_0$	50.00	$6.467^9$	$6.459^9$	$7.270^{-3}$	$7.261^{-3}$	$1.197^{-3}$	$1.195^{-3}$	1.00
	49.98 [26]	—	$6.468^9$ [26]	—	—	—	$1.196^{-3}$ [26]	—
$^3S_1 - ^3P_0$	46.48	$1.130^{10}$	$1.136^{10}$	$1.098^{-2}$	$1.103^{-2}$	$1.680^{-3}$	$1.688^{-3}$	0.99
	46.47 [26]	—	$1.132^{10}$ [26]	—	—	—	$1.681^{-3}$ [26]	—
$^1P_1 - ^3P_0$	37.16	$4.272^7$	$4.262^7$	$2.653^{-5}$	$2.646^{-5}$	$3.245^{-6}$	$3.237^{-6}$	1.00
	37.15 [26]	—	$4.272^7$ [26]	—	—	—	$3.244^{-6}$ [26]	—
$^3D_1 - ^1S_0$	248.44	$3.215^7$	$2.908^7$	$8.925^{-4}$	$8.073^{-4}$	$7.300^{-4}$	$6.603^{-4}$	1.11
	248.00 [26]	—	$2.943^7$ [26]	—	—	—	$6.646^{-4}$ [26]	—
$^3P_1 - ^1S_0$	114.67	$6.304^8$	$5.878^8$	$3.728^{-3}$	$3.476^{-3}$	$1.407^{-3}$	$1.312^{-3}$	1.07
	114.57 [26]	—	$5.880^8$ [26]	—	—	—	$1.309^{-3}$ [26]	—
$^3S_1 - ^1S_0$	97.70	$3.061^9$	$2.960^9$	$1.314^{-2}$	$1.271^{-2}$	$4.227^{-3}$	$4.087^{-3}$	1.03
	97.63 [26]	—	$2.952^9$ [26]	—	—	—	$4.067^{-3}$ [26]	—
$^1P_1 - ^1S_0$	63.97	$4.190^{10}$	$4.178^{10}$	$7.712^{-2}$	$7.691^{-2}$	$1.624^{-2}$	$1.620^{-2}$	1.00
	63.94 [26]	—	$4.168^{10}$ [26]	—	—	—	$1.614^{-2}$ [26]	—
$^3P_0 - ^3P_1$	64.20	$6.625^{10}$	$6.625^{10}$	$4.094^{-2}$	$4.094^{-2}$	$8.654^{-3}$	$8.653^{-3}$	1.00
	64.19 [26]	—	$6.627^{10}$ [26]	—	—	—	$8.650^{-3}$ [26]	—
$^3D_1 - ^3P_1$	88.22	$1.640^8$	$1.482^8$	$5.741^{-4}$	$5.187^{-4}$	$1.667^{-4}$	$1.506^{-4}$	1.11
	88.19 [26]	—	$1.493^8$ [26]	—	—	—	$1.516^{-4}$ [26]	—
$^3P_1 - ^3P_1$	62.38	$8.557^{10}$	$8.560^{10}$	$1.498^{-1}$	$1.498^{-1}$	$3.075^{-2}$	$3.076^{-2}$	1.00
	62.36 [26]	—	$8.553^{10}$ [26]	—	—	—	$3.072^{-2}$ [26]	—
$^3S_1 - ^3P_1$	56.99	$3.109^{10}$	$3.107^{10}$	$4.542^{-2}$	$4.539^{-2}$	$8.522^{-3}$	$8.517^{-3}$	1.00
	56.98 [26]	—	$3.100^{10}$ [26]	—	—	—	$8.494^{-3}$ [26]	—
$^1P_1 - ^3P_1$	43.59	$1.409^{10}$	$1.415^{10}$	$1.204^{-2}$	$1.209^{-2}$	$1.727^{-3}$	$1.735^{-3}$	1.00
	43.58 [26]	—	$1.412^{10}$ [26]	—	—	—	$1.731^{-3}$ [26]	—
$^5S_2 - ^3P_1$	128.51	$1.266^9$	$1.199^9$	$1.567^{-2}$	$1.483^{-2}$	$6.629^{-3}$	$6.276^{-3}$	1.06
	128.39 [26]	—	$1.202^9$ [26]	—	—	—	$6.280^{-3}$ [26]	—
$^3D_2 - ^3P_1$	79.57	$2.200^{10}$	$2.179^{10}$	$1.044^{-1}$	$1.034^{-1}$	$2.735^{-2}$	$2.709^{-2}$	1.01
	79.54 [26]	—	$2.177^{10}$ [26]	—	—	—	$2.703^{-2}$ [26]	—
$^3P_2 - ^3P_1$	59.98	$1.408^9$	$1.435^9$	$3.795^{-3}$	$3.870^{-3}$	$7.494^{-4}$	$7.641^{-4}$	0.98
	59.96 [26]	—	$1.430^9$ [26]	—	—	—	$7.607^{-4}$ [26]	—
$^1D_2 - ^3P_1$	49.16	$1.576^9$	$1.581^9$	$2.856^{-3}$	$2.865^{-3}$	$4.622^{-4}$	$4.637^{-4}$	1.00
	49.16 [26]	—	$1.587^9$ [26]	—	—	—	$4.650^{-4}$ [26]	—
$^3D_1 - ^3P_2$	95.08	$3.241^9$	$3.111^9$	$1.318^{-2}$	$1.265^{-2}$	$4.125^{-3}$	$3.960^{-3}$	1.04
	95.05 [26]	—	$3.111^9$ [26]	—	—	—	$3.955^{-3}$ [26]	—
$^3P_1 - ^3P_2$	65.73	$7.946^8$	$8.086^8$	$1.544^{-3}$	$1.571^{-3}$	$3.342^{-4}$	$3.401^{-4}$	0.98
	65.72 [26]	—	$8.139^8$ [26]	—	—	—	$3.420^{-4}$ [26]	—
$^3S_1 - ^3P_2$	59.78	$1.402^{11}$	$1.399^{11}$	$2.254^{-1}$	$2.250^{-1}$	$4.437^{-2}$	$4.423^{-2}$	1.00
	59.77 [26]	—	$1.398^{11}$ [26]	—	—	—	$4.421^{-2}$ [26]	—
$^1P_1 - ^3P_2$	45.20	$1.678^9$	$1.672^9$	$1.542^{-3}$	$1.537^{-3}$	$2.295^{-4}$	$2.287^{-4}$	1.00
	45.19 [26]	—	$1.684^9$ [26]	—	—	—	$2.302^{-4}$ [26]	—

表 9 (续) Kr XXXI 离子 ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )  $1s^2 2s 2p^3 - 1s^2 2s^2 2p^2$  间 E1 跃迁谱线波长、跃迁速率、加权振子强度和线强  
 Table 9 (continued). The E1 transition wavelength, rate, weighted oscillator strength, and line strength between the  $1s^2 2s 2p^3$  and  $1s^2 2s^2 2p^2$  configurations in Kr XXXI ions with  $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ .

Transition A—B	$\lambda/\text{\AA}$	$A_C/s^{-1}$	$A_B/s^{-1}$	$gf_C$	$gf_B$	$S_C/a.u.$	$S_B/a.u.$	$A_C/A_B$
$^3D_1 - ^1D_2$	168.03	$2.255^8$	$2.073^8$	$2.863^{-3}$	$2.632^{-3}$	$1.584^{-3}$	$1.456^{-3}$	1.09
	167.89 [26]	—	$2.090^8$ [26]	—	—	—	$1.465^{-3}$ [26]	—
$^3P_1 - ^1D_2$	93.92	$2.223^8$	$1.997^8$	$8.821^{-4}$	$7.921^{-4}$	$2.728^{-4}$	$2.449^{-4}$	1.11
	93.88 [26]	—	$1.975^8$ [26]	—	—	—	$2.419^{-4}$ [26]	—
$^3S_1 - ^1D_2$	82.23	$3.119^9$	$3.043^9$	$9.483^{-3}$	$9.254^{-3}$	$2.567^{-3}$	$2.505^{-3}$	1.02
	82.20 [26]	—	$3.025^9$ [26]	—	—	—	$2.487^{-3}$ [26]	—
$^1P_1 - ^1D_2$	56.95	$1.634^{11}$	$1.635^{11}$	$2.384^{-1}$	$2.385^{-1}$	$4.469^{-2}$	$4.473^{-2}$	1.00
	56.94 [26]	—	$1.634^{11}$ [26]	—	—	—	$4.466^{-2}$ [26]	—
$^5S_2 - ^3P_2$	143.62	$6.392^8$	$5.928^8$	$9.884^{-3}$	$9.166^{-3}$	$4.673^{-3}$	$4.334^{-3}$	1.08
	143.46 [26]	—	$5.955^8$ [26]	—	—	—	$4.339^{-3}$ [26]	—
$^3D_2 - ^3P_2$	85.11	$8.367^8$	$8.096^8$	$4.544^{-3}$	$4.396^{-3}$	$1.273^{-3}$	$1.232^{-3}$	1.03
	85.07 [26]	—	$8.106^8$ [26]	—	—	—	$1.232^{-3}$ [26]	—
$^3P_2 - ^3P_2$	63.07	$9.779^{10}$	$9.780^{10}$	$2.916^{-1}$	$2.916^{-1}$	$6.055^{-2}$	$6.056^{-2}$	1.00
	63.06 [26]	—	$9.773^{10}$ [26]	—	—	—	$6.047^{-2}$ [26]	—
$^1D_2 - ^3P_2$	51.23	$1.282^{10}$	$1.288^{10}$	$2.522^{-2}$	$2.534^{-2}$	$4.253^{-3}$	$4.274^{-3}$	1.00
	51.21 [26]	—	$1.282^{10}$ [26]	—	—	—	$4.249^{-3}$ [26]	—
$^5S_2 - ^1D_2$	417.15	$5.022^6$	$3.888^6$	$6.550^{-4}$	$5.072^{-4}$	$8.996^{-4}$	$6.966^{-4}$	1.29
	415.63 [26]	—	$3.957^6$ [26]	—	—	—	$7.011^{-4}$ [26]	—
$^3D_2 - ^1D_2$	139.21	$1.265^8$	$1.169^8$	$1.838^{-3}$	$1.699^{-3}$	$8.422^{-4}$	$7.785^{-4}$	1.08
	139.08 [26]	—	$1.160^8$ [26]	—	—	—	$7.705^{-4}$ [26]	—
$^3P_2 - ^1D_2$	88.58	$1.371^9$	$1.308^9$	$8.066^{-3}$	$7.691^{-3}$	$2.352^{-3}$	$2.243^{-3}$	1.05
	88.54 [26]	—	$1.303^9$ [26]	—	—	—	$2.232^{-3}$ [26]	—
$^1D_2 - ^1D_2$	66.86	$8.530^{10}$	$8.490^{10}$	$2.859^{-1}$	$2.845^{-1}$	$6.293^{-2}$	$6.263^{-2}$	1.00
	66.84 [26]	—	$8.479^{10}$ [26]	—	—	—	$6.249^{-2}$ [26]	—
$^3D_3 - ^3P_2$	76.60	$1.420^{10}$	$1.411^{10}$	$8.740^{-2}$	$8.686^{-2}$	$2.204^{-2}$	$2.190^{-2}$	1.01
	76.57 [26]	—	$1.409^{10}$ [26]	—	—	—	$2.184^{-2}$ [26]	—
$^3D_3 - ^1D_2$	117.79	$3.796^9$	$3.627^9$	$5.527^{-2}$	$5.280^{-2}$	$2.143^{-2}$	$2.048^{-2}$	1.05
	117.70 [26]	—	$3.621^9$ [26]	—	—	—	$2.040^{-2}$ [26]	—

注: 表中A, B分别为 $1s^2 2s 2p^3$ 和 $1s^2 2s^2 2p^2$ 组态;  $a \times 10^b$ 表示为 $a^b$ .

表 10 Sn XLV 离子 ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )  $1s^2 2s 2p^3 - 1s^2 2s^2 2p^2$  间 E1 跃迁谱线波长、跃迁速率、加权振子强度和线强  
 Table 10. The E1 transition wavelength, rate, weighted oscillator strength, and line strength between the  $1s^2 2s 2p^3$  and  $1s^2 2s^2 2p^2$  configurations in Sn XLV ions with  $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ .

Transition A—B	$\lambda/\text{\AA}$	$A_C/s^{-1}$	$A_B/s^{-1}$	$gf_C$	$gf_B$	$S_C/a.u.$	$S_B/a.u.$	$A_C/A_B$
$^3D_1 - ^3P_0$	27.21	$4.589^{11}$	$4.572^{11}$	$1.529^{-1}$	$1.523^{-1}$	$1.370^{-2}$	$1.364^{-2}$	1.00
$^3S_1 - ^3P_0$	17.74	$1.646^{10}$	$1.648^{10}$	$2.329^{-3}$	$2.332^{-3}$	$1.360^{-4}$	$1.362^{-4}$	1.00
$^3P_1 - ^3P_0$	17.39	$8.023^9$	$8.042^9$	$1.091^{-3}$	$1.093^{-3}$	$6.243^{-5}$	$6.258^{-5}$	1.00
$^1P_1 - ^3P_0$	12.74	$1.502^7$	$1.520^7$	$1.096^{-6}$	$1.109^{-6}$	$4.595^{-8}$	$4.650^{-8}$	0.99
$^3D_1 - ^1S_0$	166.91	$6.374^7$	$7.398^7$	$2.662^{-4}$	$3.090^{-4}$	$1.463^{-4}$	$1.698^{-4}$	0.86
$^3S_1 - ^1S_0$	73.29	$9.952^8$	$8.878^8$	$2.404^{-3}$	$2.145^{-3}$	$5.802^{-4}$	$5.175^{-4}$	1.12
$^3P_1 - ^1S_0$	67.66	$9.011^9$	$8.265^9$	$1.855^{-2}$	$1.702^{-2}$	$4.133^{-3}$	$3.790^{-3}$	1.09
$^1P_1 - ^1S_0$	27.95	$2.277^{11}$	$2.262^{11}$	$7.999^{-2}$	$7.945^{-2}$	$7.360^{-3}$	$7.310^{-3}$	1.01
$^3P_0 - ^3P_1$	27.42	$3.992^{11}$	$3.984^{11}$	$4.499^{-2}$	$4.490^{-2}$	$4.061^{-3}$	$4.053^{-3}$	1.00

表 10 (续) Sn XLV 离子 ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )  $1s^2 2s^2 2p^3$ - $1s^2 2s^2 2p^2$  间 E1 跃迁谱线波长、跃迁速率、加权振子强度和线强  
 Table 10 (continued). The E1 transition wavelength, rate, weighted oscillator strength, and line strength between the  $1s^2 2s^2 2p^3$  and  $1s^2 2s^2 2p^2$  configurations in Sn XLV ions with  $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ .

Transition A—B	$\lambda/\text{\AA}$	$A_C/s^{-1}$	$A_B/s^{-1}$	$gf_C$	$gf_B$	$S_C/\text{a.u.}$	$S_B/\text{a.u.}$	$A_C/A_B$
$^3D_1-^3P_1$	55.90	3.966 <sup>9</sup>	3.703 <sup>9</sup>	5.574 <sup>-3</sup>	5.204 <sup>-3</sup>	1.026 <sup>-3</sup>	9.578 <sup>-4</sup>	1.07
$^3S_1-^3P_1$	26.65	6.922 <sup>11</sup>	6.902 <sup>11</sup>	2.211 <sup>-1</sup>	2.205 <sup>-1</sup>	1.940 <sup>-2</sup>	1.934 <sup>-2</sup>	1.00
$^3P_1-^3P_1$	25.87	1.943 <sup>10</sup>	1.928 <sup>10</sup>	5.845 <sup>-3</sup>	5.801 <sup>-3</sup>	4.978 <sup>-4</sup>	4.940 <sup>-4</sup>	1.01
$^1P_1-^3P_1$	16.76	2.738 <sup>10</sup>	2.746 <sup>10</sup>	3.460 <sup>-3</sup>	3.469 <sup>-3</sup>	1.909 <sup>-4</sup>	1.914 <sup>-4</sup>	1.00
$^5S_2-^3P_1$	74.89	7.647 <sup>9</sup>	7.011 <sup>9</sup>	3.215 <sup>-2</sup>	2.948 <sup>-2</sup>	7.927 <sup>-3</sup>	7.268 <sup>-3</sup>	1.09
$^3D_2-^3P_1$	32.03	1.034 <sup>11</sup>	1.023 <sup>11</sup>	7.951 <sup>-2</sup>	7.864 <sup>-2</sup>	8.383 <sup>-3</sup>	8.291 <sup>-3</sup>	1.01
$^1D_2-^3P_1$	26.08	3.706 <sup>10</sup>	3.709 <sup>10</sup>	1.890 <sup>-2</sup>	1.891 <sup>-2</sup>	1.623 <sup>-3</sup>	1.624 <sup>-3</sup>	1.00
$^3P_2-^3P_1$	18.02	2.765 <sup>9</sup>	2.771 <sup>9</sup>	6.731 <sup>-4</sup>	6.747 <sup>-4</sup>	3.993 <sup>-5</sup>	4.003 <sup>-5</sup>	1.00
$^3D_1-^1D_2$	59.86	1.907 <sup>10</sup>	1.786 <sup>10</sup>	3.074 <sup>-2</sup>	2.878 <sup>-2</sup>	6.059 <sup>-3</sup>	5.673 <sup>-3</sup>	1.07
$^3S_1-^1D_2$	27.52	1.069 <sup>10</sup>	1.055 <sup>10</sup>	3.641 <sup>-3</sup>	3.593 <sup>-3</sup>	3.298 <sup>-4</sup>	3.255 <sup>-4</sup>	1.01
$^3P_1-^1D_2$	26.68	5.999 <sup>11</sup>	5.982 <sup>11</sup>	1.921 <sup>-1</sup>	1.916 <sup>-1</sup>	1.688 <sup>-2</sup>	1.683 <sup>-2</sup>	1.00
$^1P_1-^1D_2$	17.10	4.191 <sup>9</sup>	4.207 <sup>9</sup>	5.513 <sup>-4</sup>	5.534 <sup>-4</sup>	3.104 <sup>-5</sup>	3.115 <sup>-5</sup>	1.00
$^3D_1-^3P_2$	328.18	3.276 <sup>6</sup>	4.387 <sup>6</sup>	2.645 <sup>-4</sup>	3.542 <sup>-4</sup>	2.858 <sup>-4</sup>	3.826 <sup>-4</sup>	0.75
$^3S_1-^3P_2$	60.28	7.776 <sup>9</sup>	7.141 <sup>9</sup>	1.271 <sup>-2</sup>	1.167 <sup>-2</sup>	2.522 <sup>-3</sup>	2.316 <sup>-3</sup>	1.09
$^3P_1-^3P_2$	56.42	4.052 <sup>9</sup>	3.808 <sup>9</sup>	5.801 <sup>-3</sup>	5.452 <sup>-3</sup>	1.077 <sup>-3</sup>	1.013 <sup>-3</sup>	1.06
$^1P_1-^3P_2$	25.82	8.045 <sup>11</sup>	8.032 <sup>11</sup>	2.413 <sup>-1</sup>	2.409 <sup>-1</sup>	2.051 <sup>-2</sup>	2.048 <sup>-2</sup>	1.00
$^5S_2-^1D_2$	82.19	4.328 <sup>9</sup>	3.907 <sup>9</sup>	2.191 <sup>-2</sup>	1.978 <sup>-2</sup>	5.929 <sup>-3</sup>	5.352 <sup>-3</sup>	1.11
$^3D_2-^1D_2$	33.29	2.982 <sup>9</sup>	2.920 <sup>9</sup>	2.477 <sup>-3</sup>	2.425 <sup>-3</sup>	2.715 <sup>-4</sup>	2.658 <sup>-4</sup>	1.02
$^1D_2-^1D_2$	26.91	6.889 <sup>11</sup>	6.866 <sup>11</sup>	3.740 <sup>-1</sup>	3.728 <sup>-1</sup>	3.314 <sup>-2</sup>	3.303 <sup>-2</sup>	1.00
$^3P_2-^1D_2$	18.42	7.738 <sup>9</sup>	7.754 <sup>9</sup>	1.967 <sup>-3</sup>	1.971 <sup>-3</sup>	1.193 <sup>-4</sup>	1.195 <sup>-4</sup>	1.00
$^5S_2-^3P_2$	131.86	4.797 <sup>7</sup>	5.472 <sup>7</sup>	6.252 <sup>-4</sup>	7.133 <sup>-4</sup>	2.714 <sup>-4</sup>	3.096 <sup>-4</sup>	0.88
$^3D_2-^3P_2$	97.19	7.292 <sup>8</sup>	6.276 <sup>8</sup>	5.163 <sup>-3</sup>	4.443 <sup>-3</sup>	1.652 <sup>-3</sup>	1.422 <sup>-3</sup>	1.16
$^1D_2-^3P_2$	57.45	1.102 <sup>10</sup>	1.024 <sup>10</sup>	2.725 <sup>-2</sup>	2.534 <sup>-2</sup>	5.155 <sup>-3</sup>	4.793 <sup>-3</sup>	1.08
$^3P_2-^3P_2$	28.94	3.875 <sup>11</sup>	3.850 <sup>11</sup>	2.433 <sup>-1</sup>	2.418 <sup>-1</sup>	2.318 <sup>-2</sup>	2.303 <sup>-2</sup>	1.01
$^3D_3-^1D_2$	30.66	9.152 <sup>10</sup>	9.068 <sup>10</sup>	9.028 <sup>-2</sup>	8.946 <sup>-2</sup>	9.113 <sup>-3</sup>	9.030 <sup>-3</sup>	1.01
$^3D_3-^3P_2$	77.74	8.168 <sup>9</sup>	7.370 <sup>9</sup>	5.180 <sup>-2</sup>	4.674 <sup>-2</sup>	1.326 <sup>-2</sup>	1.196 <sup>-2</sup>	1.11

注: 表中A, B分别为 $1s^2 2s^2 2p^3$ 和 $1s^2 2s^2 2p^2$ 组态;  $a \times 10^b$ 表示为 $a^b$ .

## 4 结 论

本文利用 MCDHF 方法计算了类碳等电子序列 ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )  $1s^2 2s^2 2p^2$  基组态和  $1s^2 2s^2 2p^3$  激发组态的能级结构和 E1 辐射跃迁参数. 在构建了规模适当、充分包含电子关联效应的相对论原子态波函数的基础上, 利用微扰法处理 Breit 相互作用、QED 效应和原子核质量效应, 本文系统地分析了 VV 关联、CV 关联和 CC 关联三种电子关联效应对能级结构的影响, 完成了 Ne V, Si IX, Ge XXVII, Kr XXXI 和 Sn XLV 离子  $1s^2 2s^2 2p^2$  和  $1s^2 2s^2 2p^3$  组态能级结构的高精度理论计算. 与现有的其他理论结果相比, 本文计算的 Ne V 离子

原子态激发能更接近 NIST 数据; 其他离子的激发能具有相当的精度, 与有限的 NIST 数据符合得较好. 对于程序计算中出现的原子态命名混乱现象, 本文结合 LS 耦合的混合成分、其他理论结果和 NIST 数据, 比较分析后推测了原子态的实际命名.

本文还精确地计算了类碳离子  $1s^2 2s^2 2p^2$  和  $1s^2 2s^2 2p^3$  组态间的 E1 跃迁谱线波长、跃迁速率、加权振子强度、线强等跃迁参数. 本文计算的跃迁谱线波长与有限的 NIST 数据符合得很好, 相对误差小于 0.62%, 跃迁速率与其他理论结果比较一致. 本文还分析了 Coulomb 和 Babushkin 两种规范下跃迁参数的一致性, 进一步检验了跃迁速率的准确性. 对于缺乏可比较数据的 Sn XLV 离子, 希望本

文的结果能够获得进一步的检验, 以此促进对原子结构与辐射跃迁之间的内在联系的理解, 为相关学科的研究提供准确的光谱特性的信息.

## 数据可用性声明

支撑本研究成果的数据集可在科学数据银行 <https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00145> 中访问获取.

## 参考文献

- [1] Arav N, Edmonds D, Borguet B, Kriss G A, Kaastra J S, Behar E, Bianchi S, Cappi M, Costantini E, Detmers R G, Ebrero J, Mehdipour M, Paltani S, Petrucci P O, Pinto C, Ponti G, Steenbrugge K C, De Vries C P 2012 *Astron. Astrophys.* **544** A33
- [2] Mao J, Kaastra J S, Mehdipour M, Raassen A J J, Gu L, Miller J M 2017 *Astron. Astrophys.* **607** A100
- [3] Feldman U, Doschek G A 2007 *At. Data Nucl. Data Tables* **93** 779
- [4] Zatsarinny O, Gorczyca T W, Korista K T, Badnell N R, Savin D W 2004 *Astron. Astrophys.* **417** 1173
- [5] Curdt W, Landi E, Feldman U 2004 *Astron. Astrophys.* **427** 1045
- [6] Si R, Li S, Wang K, Guo X L, Chen Z B, Yan J, Chen, C Y, Brage T, Zou Y M 2017 *Astron. Astrophys.* **600** A85
- [7] Ramsbottom C, Ballance C, Smyth R, Conroy A, Fernández-Menchero L, Turkington M, Keenan F 2018 *Galaxies* **6** 90
- [8] Belmonte M T, Pickering J C, Clear C P, Concepción Mairey F, Liggins F 2018 *Galaxies* **6** 109
- [9] Raju P K, Dwivedi B N, Gupta A K 1994 *Sol. Phys.* **149** 289
- [10] Lyubimkov L S 2013 *Astrophysics* **56** 472
- [11] Koutchmy S, Baudin F, Abdi S, Golub L, Sèvre F 2019 *Astron. Astrophys.* **632** A86
- [12] Feldman U, Doschek G A, Mariska J T, Bhatia A K, Mason H E 1978 *Astrophys. J.* **226** 674
- [13] Vilkas M J, Martinson I, Merkelis G, Gaigalas G, Kisielius R 1996 *Phys. Scr.* **54** 281
- [14] Safronova U I, Shlyaptseva A S 1999 *Phys. Scr.* **60** 36
- [15] Aggarwal K M, Keenan F P, Msezane A Z 2003 *Astron. Astrophys.* **401** 377
- [16] Tachiev G, Froese Fischer C 2001 *Can. J. Phys.* **79** 955
- [17] Froese Fischer C, Tachiev G 2004 *At. Data Nucl. Data Tables* **87** 1
- [18] Gu M F 2005 *At. Data Nucl. Data Tables* **89** 267
- [19] Safronova U I, Ralchenko Y, Murakami I, Kato T, Kato D 2006 *Phys. Scr.* **73** 143
- [20] Aggarwal K M, Keenan F P, Lawson K D 2008 *At. Data Nucl. Data Tables* **94** 323
- [21] Jönsson P, Bieroń J 2010 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43** 074023
- [22] Jönsson P, Rynkun P, Gaigalas G 2011 *At. Data Nucl. Data Tables* **97** 648
- [23] Liu H, Jiang G, Hu F, Wang C K, Wang Z B, Yang J M 2013 *Chin. Phys. B* **22** 073202
- [24] Ekman J, Jönsson P, Gustafsson S, Hartman H, Gaigalas G, Godefroid M R, Froese Fischer C 2014 *Astron. Astrophys.* **564** A24
- [25] Nazé C, Verdebout S, Rynkun P, Gaigalas G, Godefroid M, Jönsson P 2014 *At. Data Nucl. Data Tables* **100** 1197
- [26] Wang K, Li D F, Liu H T, Han X Y, Duan B, Li C Y, Li J G, Guo X L, Chen C Y, Yan J 2014 *Astrophys. J. Suppl. Ser.* **215** 26
- [27] Alwadie N, Almodlej A, Ben Nessib N, Dimitrijević M S 2020 *Contrib. Astron. Obs. Skalnaté Pleso* **50** 86
- [28] Almodlej A, Alrashed H, Ben Nessib N, Dimitrijević M S 2021 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **507** 3228
- [29] Tang W, Deng B L, Zhang G S, Meng B, Yang R, Wang S 2025 *Indian J. Phys.* **99** 793
- [30] Fricke B 1984 *Phys. Scr.* **1984** 129
- [31] Fritzsche S 2002 *Phys. Scr.* **2002** 37
- [32] Grant I P 2007 *Relativistic Quantum Theory of Atoms and Molecules: Theory and Computation* (New York: Springer) pp384–431
- [33] Froese Fischer C, Gaigalas G, Jönsson P, Bieroń J 2019 *Comput. Phys. Commun.* **237** 184
- [34] Zeng J Y 1981 *Advanced Quantum Mechanics VI* (Beijing: Science Press) pp389–407
- [35] Cao M X 2019 *M. S. Thesis* (Lanzhou: Northwest Normal University) (in Chinese) [曹铭欣 2019 硕士学位论文 (兰州: 西北师范大学)]
- [36] Borschevsky A, Pašteka L F, Pershina V, Eliav E, Kaldor U 2015 *Phys. Rev. A* **91** 020501
- [37] Gaston N, Schwerdtfeger P, Nazarewicz W 2002 *Phys. Rev. A* **66** 062505
- [38] Glushkov A V, Ambrosov S V, Loboda A, Chernyakova Y G, Khetseliy O Y, Svinarenko A A 2004 *Nucl. Phys. A* **734** E21
- [39] Grant I P 1974 *J. Phys. B: Atom. Mol. Phys.* **7** 1458
- [40] Kramida A, Ralchenko Y, Reader J, NIST ASD Team (2024) <https://www.nist.gov/pml/atomic-spectra-database> [2024-6-5]
- [41] Kramida A 2024 *Eur. Phys. J. D* **78** 36
- [42] Goyal A, Khatri I, Aggarwal S, Singh A K, Mohan M 2015 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **161** 157
- [43] Chen M H, Reed K J, McWilliams D M, Guo D S, Barlow L, Lee M, Walker V 1997 *At. Data Nucl. Data Tables* **65** 289

SPECIAL TOPIC—Atomic, molecular and materials properties data

# Energy levels and electric dipole transitions of $1s^22s^22p^2$ and $1s^22s2p^3$ configurations in carbon-like ions ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )\*

HU Muhong<sup>†</sup> HE Jizheng*(School of Physics and Electronic Technology, Liaoning Normal University, Dalian 116029, China)*

( Received 28 April 2025; revised manuscript received 14 July 2025 )

**Abstract**

The atomic energy level structures and transition properties of  $1s^22s^22p^2$  ground configuration and  $1s^22s2p^3$  excited configuration in carbon-like ions with  $Z = 10, 14, 32, 36, 50$  are investigated theoretically using the fully relativistic multi-configuration Dirac-Hartree-Fock (MCDHF) method.

Based on the wavefunction constructed with careful consideration of electron correlations, the theoretical calculations are completed by taking into account the Breit interaction, quantum electrodynamic effect and nuclear mass effect. Then the effects of three types of electron correlations, namely valence-valence, core-valence, and core-core correlations, on energy levels are studied in detail, and high-precision excitation energies are obtained. Compared with other theoretical results, the calculated excitation energies for Ne V ion are the closest to the NIST (National Institute of Standards and Technology) data, and the excitation energies of other ions also possess relatively high precision. Additionally, by combining the NIST data and the LS coupled atomic state compositions, the fuzziness in identifying atomic states generated from the code is analyzed, and the corresponding renamed atomic states are presented.

For electric dipole transitions, the transition wavelengths of Ne V and Si IX ions reported in this work are in good agreement with the available NIST data, with the relative errors being less than 0.62%. Their transition rates accord well with other theoretical results. And for majority of electric dipole transitions, the electric dipole transition parameters calculated in Babushkin and Coulomb gauges are well consistent with each other, which demonstrates the feasibility and reliability of the MCDHF method for theoretically calculating the energy structures and spectral properties of  $1s^22s^22p^2$  and  $1s^22s2p^3$  configurations in carbon-like ions. The results cover a wide range of levels and transitions for carbon-like ions, and the data are expected to enrich the fundamental database for carbon-like ions and provide valuable theoretical references for relevant studies. The datasets presented in this paper are openly available at <https://doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00145>.

**Keywords:** carbon-like ion, multi-configuration Dirac-Hartree-Fock method, energy level, electric dipole transition

**PACS:** 31.10.+z, 31.15.ac, 31.15.ag, 32.70.Cs**DOI:** [10.7498/aps.74.20250568](https://doi.org/10.7498/aps.74.20250568)**CSTR:** [32037.14.aps.74.20250568](https://doi.org/10.26434/chemrxiv-2025-0568)

\* Project supported by the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12204214).

† Corresponding author. E-mail: [huhuhong@163.com](mailto:huhuhong@163.com)

类碳离子 ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )  $1s^2 2s^2 2p^2$  和  $1s^2 2s 2p^3$  组态的能级和电偶极跃迁

胡木宏 何纪铮

Energy levels and electric dipole transitions of  $1s^2 2s^2 2p^2$  and  $1s^2 2s 2p^3$  configurations in carbon-like ions ( $Z = 10, 14, 32, 36, 50$ )

HU Muhong HE Jizheng

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 153103 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250568

CSTR: 32037.14.aps.74.20250568

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250568>

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

Ga<sup>+</sup> 离子  $4s^2 1S_0 - 4s4p^3 P_0$  跃迁动态极化率的理论计算

Theoretical calculation of dynamic polarizability of  $4s^2 1S_0 - 4s4p^3 P_0$  transition for Ga<sup>+</sup> ion

物理学报. 2025, 74(10): 103202 <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250125>

高电荷态类硼离子  $2P_{3/2} - 2P_{1/2}$  跃迁的实验和理论研究进展

Experimental and theoretical research progress of  $2P_{1/2} - 2P_{3/2}$  transitions of highly charged boron-like ions

物理学报. 2024, 73(20): 203102 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20241190>

类铝离子钟跃迁能级的超精细结构常数和朗德  $g$  因子

Hyperfine interaction constants and Landé  $g$  factors of clock states of Al-like ions

物理学报. 2023, 72(22): 223101 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230940>

镱原子超精细诱导  $5d6s^3 D_{1,3} \rightarrow 6s^2 1S_0$  E2 跃迁及超精细常数的精确计算

Accurate calculation of hyperfine-induced  $5d6s^3 D_{1,3} \rightarrow 6s^2 1S_0$  E2 transitions and hyperfine constants of ytterbium atoms

物理学报. 2024, 73(9): 093101 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20240028>

Stark 效应诱导的类氢离子  $2s_{1/2} - 1s_{1/2}$  跃迁几率的理论研究

Theoretical investigation on Stark-induced transition probabilities of hydrogen-like ions

物理学报. 2021, 70(17): 173201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210181>

Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub>-Sb<sub>2</sub>S<sub>3</sub>-Ag<sub>2</sub>S 硫系玻璃和光纤的制备及性能研究

Preparation and properties of Ga<sub>2</sub>S<sub>3</sub>-Sb<sub>2</sub>S<sub>3</sub>-Ag<sub>2</sub>S chalcogenide glasses and fibers

物理学报. 2023, 72(4): 047101 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20221380>