

Mo XIV—Ru XVI 离子的 $3d^{10}4s-3d^94s4p$ 跃迁谱线 波长和振子强度的计算*

牟致栋 魏琦瑛

(中国矿业大学理学院, 徐州 221008)

(2003 年 7 月 24 日收到, 2003 年 10 月 13 日收到修改稿)

在对 Ge IV—Ru XVI 离子 $3d^94s4p$ 组态能级结构的组态相互作用理论分析计算的基础上, 进一步分析了关联效应, 量子电动力学 (QED) 效应及其他效应对等电子序列离子能级结构的影响, 找出了沿等电子序列离子能级变化的规律性. 在前人研究工作的基础上, 预测计算了 Mo XIV—Ru XVI 离子 $3d^94s4p\left(J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right)$ 组态能级, 由此计算了 Mo XIV—Ru XVI 离子 $3d^{10}4s-3d^94s4p\left(J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right)$ 跃迁谱线波长, 振子强度和跃迁概率.

关键词: Ge IV—Ru XVI 离子, 谱线波长, 振子强度, 跃迁概率

PACC: 3120, 3220R, 3270C, 3270F

1. 引 言

Mo XIV, Tc XV, Ru XVI 离子属 Cu I 等电子序列, 基组态为 $3d^{10}4s$. 对该序列单电子激发组态而言, 由于其外层单电子的结构特点, 一直是验证相对论从头计算理论的主要工具, 是理论研究的重要离子之一. 从实验方面来说, 由于单电子激发所需能量较低, 因而该序列中许多离子 ($1 \leq Z \leq 22$) 的单电子激发组态 $3d^{10}nl$ ($n = 4-7, l = s, p, d, f, g, h$) 大部分能级已有实验结果的报道^[1-8]. 与单电子激发组态相应的二电子激发组态主要是 $3d^94l4l'$ ($l = s, p, d, l' = s, p, d, f$). 近年来, 逐步有相关最新的实验观测结果的报道. 1981 年, Acquista 和 Reader 等人^[9]报道了 Sr X 离子 $3d^{10}4s-3d^94s4p$ 跃迁组态和 $3d^{10}4p-3d^94p^2$ 跃迁组态中的共 12 条谱线波长. 1984 年, Wyart 等人^[10]利用当时所能获得的有关实验数据计算了 Ge IV—Mo XIV 离子 $3d^94s4p$ 组态能级, 预测计算了部分实验上还未获得的有关数据. 1991 年随着束箔光谱实验技术的发展, Sugar 等人^[11]用 4MV 高输出重离子源获取了 Nb VIII, Mo XIV 和 Ag XIX 离子 $3d^94s4p$ 组态部分实验观测结果. 1992 年, Moller 等

人^[12]报道了 $3d^94s^2-3d^94s4p$ 组态跃迁谱线及对 $3d^94s4p\left(J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right)$ 组态能级的指认最新结果, 更正了文献 [9] 中个别不正确的结果. 综合上述文献资料分析, 尽管对于 $3d^94s4p\left(J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right)$ 组态的 Ge IV—Mo XIV 离子的大部分能级均有实验结果的报道, 但是对 Tc XV, Ru XVI 离子的上述能级无论从实验上还是从理论上研究都很少. 而上述研究所提供的实验结果足以实现对 Mo XIV, Tc XV, Ru XVI 离子的有关能级进行系统的理论外推计算. 一般来说, 这样做的目的在于通过可靠实验数据, 采用内插或外推的办法进行系统的理论拟合计算, 可以预测计算实验上还未得到的未知能级, 同时还可以发现和纠正个别谱线辨认错误的结果, 查找丢失能级等. 本文通过分析上述离子能级沿等电子序列随核电荷数的变化情况, 找出了这种变化的规律性. 预测计算了 Mo XIV, Tc XV, Ru XVI 离子 $3d^94s4p\left(J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right)$ 组态能级. 由此还进一步计算了 $3d^{10}4s-3d^94s4p\left(J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right)$ 跃迁谱线波长, 振子强度和跃迁概率.

* 中国矿业大学科技基金 (项目编号: XK1058) 资助的课题.

2. 理论与计算方法

2.1. 多组态强相互作用理论 HXR 方法概述

在本文的理论中,对 N 电子(离子)体系,其电子组态为

$[(n_1 l_1)^{q_1} (n_2 l_2)^{q_2} \dots (n_i l_i)^{q_i} \dots (n_N l_N)^{q_N}]$, $N = q_1 + q_2 + \dots + q_i + \dots + q_N$ 中,任一单电子径向薛定谔方程为(能量为 Rydberg)

$$\left\{ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} + V^i(r) - \frac{\alpha^2}{4}(\epsilon_i - V^i(r))^2 - \delta_{i,0} \frac{\alpha^2}{4} \left[1 + \frac{\alpha^2}{4}(\epsilon_i - V^i(r)) \right]^{-1} \times \left(\frac{dV^i(r)}{dr} \right) \left(\frac{dP_i/dr}{P_i} - \frac{1}{r} \right) \right\} P_i(r) = \epsilon_i P_i(r) \quad (1)$$

其中 α 为精细结构常数, $V^i(r)$ 为 HX 势能函数^[13] (Hartree 加统计交换势)具体表达式是

$$V^i(r) = -\frac{2Z}{r} + \sum_{j=1}^q (W_j - \delta_{ij}) \int_0^{\infty} \frac{2}{r_>} P_j^2(r_2) dr_2 - 0.65 \left[\frac{\rho'}{\rho' + 0.5(n_i - l_i)} \right] \left(\frac{\rho'}{\rho} \right) \left(\frac{24\rho}{\pi} \right)^{\frac{1}{3}}, \quad (2)$$

其中 $r_>$ 为 r 和 r_2 中的较大者,即 $r_> = \max(r, r_2)$, $\rho'(r) = \alpha(r) - [\min(2, w_i)] \rho_i(r)$, $\rho_i(r)$ 为第 i 个电子壳层中球面平均面密度,而 $\alpha(r)$ 则为原子体系中的总球面平均密度,具体为

$$\alpha(r) = \sum_{i=1}^q w_i \rho_i(r) = \frac{1}{4\pi r^2} \sum_{i=1}^q w_i P_i^2(r).$$

(1) 式中等式左边前三项为非相对论电子能量,第四项为相对论质量项,第五项为达尔文项.通过自洽场方法求解方程(1)获得单电子径向 HXR 波函数.

在构造整个原子(离子)体系波函数时,体系波函数在所有可能的组态基矢空间展开,即

$$\psi = \sum_b \sum_{\gamma} Y_{b\gamma} \psi_{b\gamma}, \quad (3)$$

式中 $\psi_{b\gamma}$ 是组态 b 的具有同一总角动量的第 γ 个谱项波函数, $Y_{b\gamma}$ 是展开系数,求和是对各种可能组态的具有同一总角动量的所有谱项进行的.

体系的哈密顿能量选取如下形式(原子单位):

$$H = -\sum \left(\nabla_i^2 + \frac{2Z}{r_i} \right) + \sum_{i \neq j} \frac{2}{r_{ij}} + \sum_i \xi_i (L_i \cdot s_i), \quad (4)$$

式中包括了所有电子的动能,电子在核场中的势能,

电子之间的静电相互作用能以及电子的自旋与轨道相互作用能.系统的能量矩阵元为在(3)式表示的波函数之间构成的能量矩阵的本征值,其形式为

$$H_{bb'} = E_{av} \delta_{bb'} + \sum_{ijk} [f_k F^k(l_i, l_j) + g_k G^k(l_i, l_j)] + \sum_i d_i \xi_i(l_i), \quad (5)$$

其中 l_i, l_j 为未满足壳层轨道角动量量子数, E_{av} 为组态平均能, F^k, G^k 分别为库仑直接积分和交换积分, ξ_i 为自旋-轨道相互作用积分, f_k, g_k, d_i 分别为相应的径向积分系数,只与径向积分有关,在本文计算中这些量均被当成可调参数处理.而角系数则由解析运算得到.

如何获得最佳的体系波函数 ψ [(3)式]来保证计算的收敛是具体计算时需要认真考虑的问题,也是相互作用理论的一个重要课题^[14,15].对于强相互作用,则根据组态选取规则,选取有强相互作用的重要组态,体系波函数在这些组态的基矢波函数空间展开.而对于弱相互作用组态,一般来说,由于其单个弱组态对整个能级结构的影响并不大,可是所有弱组态的累积所导致的微扰可能直接影响对能级结构产生重要影响的 F^k, G^k 等的计算结果.此外,远组态微扰的累积效应对自旋-轨道相互作用积分 ξ 也有少许影响.对于上述弱组态微扰的影响将在对能级的系统拟合计算中一并予以处理.

2.2. 能级沿等电子序列规律性的分析与计算

计算的基本方法:沿等电子序列能级的实验可观测量为 E_{exp} ,其相应的多组态强相互作用 HXR 方法计算结果为 E_{HXR} ,则 $\Delta E = E_{\text{exp}} - E_{\text{HXR}}$ 为实验可观测量与理论计算结果之差.因此,沿等电子序列随核电荷数 Z 的变化, ΔE 的数值反映了理论计算过程中各种效应对能级影响的准确性的考虑情况.对此我们作如下分析.

从 2.1 的概述中可以看到,由于单电子波函数计算中[(1)式]已包含了相对论二级修正项(即质速和达尔文两项),所以理论计算中所获得能量矩阵元已经部分考虑了相对论效应的影响,因而对 ΔE 沿等电子序列规律的影响主要包含以下几个部分:

1) 电子关联效应的影响.从传统理论上讲,电子关联能的定义是准确的非相对论多电子体系能级与相应的非相对论 HF 波函数计算所得到的能级之差^[16].正如前面所述本文计算中按(1)式已包含了相对论二级修正,因此这里关联能的定义应该是能

级的相对论总能量与相应的 HXR 方法计算的能量之差,而两者均不包含量子电动力学(QED)能量修正.根据 Edler^[17]的定性分析和我们的计算经验这部分能量与核电荷数 Z^{-1} 或更低次幂成正比.其影响随核电荷数 Z 的减小而增加,随 Z 的增大而减小.

2) QED 效应的影响. QED 效应主要包括电子自有能和真空极化效应两部分,对核外电子数目较大的中高 Z 值离子电子自有能的影响占主导地位.对高剥离态离子而言, QED 效应对能级的影响随核电荷数的增加而增加,因而对核外有 29 个电子的 Cu I 等电子序列离子能级其影响更加显著.随着核电荷数 Z 的增加,电子关联效应的影响将不明显,而 QED 效应对能级的影响随 $Z^2 - Z^4$ 次幂变化.

3) 其他效应的影响.主要有 Breit 效应和前述远组态累积效应所导致的微扰修正. Breit 算符主要由 3 个单电子算符和 5 个二电子算符构成.其中对能级漂移产生影响的主要是 3 个单电子算符中的两个,其对等电子序列离子能级变化规律与 Z^4 成正比^[18].至于远组态累积的微扰修正在我们的计算中发现主要由两部分组成,一部分是这种影响对整个等电子序列能级影响大致相同的部分,这部分影响只对所有能级的整体产生影响,而不影响能级结构.另一部分是这种累积效应对不同的局部离子能级影响不同,属于弱相互作用局部效应,由于从理论很难严格确定其与 Z 的关系,根据文献 16 和我们的计算经验^[19,20]唯象地确定为与 $(Z - s)^y$ 成正比,这里 s 为一经验常数, y 为拟合参数.

综合上述 1), 2), 3) 的分析,对一等电子序列 ΔE 的变化有

$$\begin{aligned} \Delta E = & \alpha_x (Z_c + 1)^{-x} + \alpha_{-4} Z_c^{-4} + \alpha_{-3} Z_c^{-3} \\ & + \alpha_{-2} Z_c^{-2} + \alpha_{-1} Z_c^{-1} + \alpha_0 + \alpha_1 Z_c + \alpha_2 Z_c^2 \\ & + \alpha_3 Z_c^3 + \alpha_4 Z_c^4 + \alpha_y (Z_c - 7)^y, \end{aligned}$$

其中 $Z_c = Z - N + 1$, 式中使用 Z_c 而不是核电荷数 Z 是因为对于核外电子数较大的等电子序列,较大的 Z 值会使外推计算变得十分困难. $\alpha_x, \alpha_{-4}, \alpha_{-3}, \dots, \alpha_4, x, y$ 均为可调拟合参数,其数值由各具有实验观测结果的相应能级的 ΔE 确定.而未知离子能级的预测计算结果 E_p 就等于其相应计算的 ΔE 加上多组态强相互作用理论 HXR 方法计算结果得到.

2.3. 跃迁谱线的振子强度和跃迁概率

对于电偶极跃迁的振子强度可由下式计算(文

献 14]):

$$gf = 3.0376 \times 10^6 \sigma S,$$

跃迁谱线的跃迁概率与振子强度的关系是

$$gA = 0.66702 \sigma^2 gf (s^{-1}),$$

σ 为谱线波数,单位为 cm^{-1} , S 是电偶极跃迁的线强度,单位是 $e^2 a_0^2$.

3. 计算过程与分析

为了研究类铜等电子序列 Ge IV—Ru XVI 离子 $3d^6 4s 4p$ 组态能级结构,在计算中我们研究了其双电子激发组态 $3d^9 4l 4l' (l = s, p, d, l' = s, p, d, f)$ 的组态平均能沿等电子序列的变化情况,计算发现 $3s^9 4s^2, 3d^9 4s 4p, 3d^9 4s 4d, 3d^9 4p 4d, 3d^8 4s^2 4p$ 组态平均能沿等电子序列随着核电荷数的增加几乎同步增加,而 $3d^8 4s^2 4p$ 随着核电荷数 Z 的增加其增幅略有下降.从组态相互作用理论和计算结果分析,对于 $3d^9 4s 4p$ 组态的强相互作用主要来自于 $3d^9 4p 4d$ 和 $3d^8 4s^2 4p$.而单电子激发组态 $3d^{10} n l (n = 4-7)$ 是一 Rydberg 系对低 Z 离子有重要影响,但是随着 Z 的增加除 $3d^{10} 7p$ 还有少许影响外,其他组态对 $3d^9 4s 4p$ 组态能级的影响很小.而 $3d^{10} 7p$ 组态又对高 Z 离子能级的影响几乎相同,故在计算时并不包括 $3d^{10} n l (n = 5, 6, 7)$ 三个组态.特别要说明的是 $3d^8 4s^2 4p$ 对整个等电子序列离子能级结构的影响很大,是强相互作用组态,尽管随 Z 的增加 $3d^8 4s^2 4p$ 的影响似乎在减小,可是对 $3d^9 4s 4p$ 的交换积分的影响减小的幅度并不大.事实上包括该组态后, HXR 计算结果明显地更接近于相应的实验观测结果.因此在波函数基矢空间中明显地包含了该组态.综合上述分析,体系的波函数在奇宇称波函数基矢空间 $3d^{10} 4p + 3d^{10} 5p + 3d^{10} 4f + 3d^9 4s 4p + 3d^9 4p 4d + 3d^9 4s 4f + 3d^8 4s^2 4p$ 和偶宇称波函数基矢空间 $3d^{10} 4s + 3d^{10} 5s + 3d^{10} 4d + 3d^9 4s^2 + 3d^9 4p^2$ 中展开.

进一步考察了类铜等电子序列 Ge IV—Ru XVI 离子 $3d^9 4s 4p (J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ 共 11 条能级的实验观测结果 E_{exp} 与多组态强相互作用理论 HXR 方法计算结果 E_{HXR} 之差沿等电子序列变化情况.从图 1(a) 及 1(b) 及 1(c) 可以看出 $\Delta E = E_{\text{exp}} - E_{\text{HXR}}$ 沿等电子序列变化随 Z_c 的变化十分光滑,而且变化规律也十分相似,完全可以按前述方式进行系统的外推拟合计算.对 Mo XIV 离子的已有实验结果的各能级来看,除了图 1(a) 的

(³D)_{4f}(²p)²P_{3/2} 图 1(b) 的 (³D)_{4f}(²p)²D_{3/2} 和图 1(c) 的 (³D)_{4f}(²p)²P_{1/2} 三条能级的 ΔE 较大外, 其他能级的多组态强相互作用理论 HXR 方法计算结果与实验结果都十分接近, 最大不确定度估计不超过 150cm⁻¹.

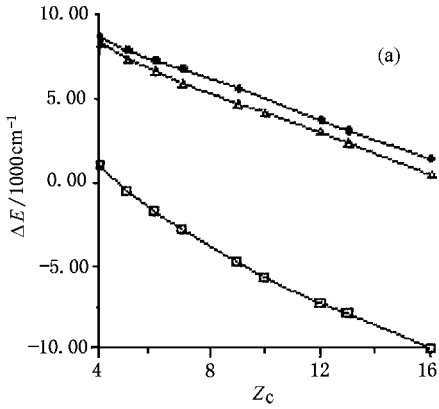


图 1(a) ΔE 随 Z_c 的变化情况 ●为(³D)_{4f}(²p)²D_{1/2}; □为(³D)_{4f}(²p)²P_{3/2}; △为(¹D)_{4f}(²p)²P_{3/2}

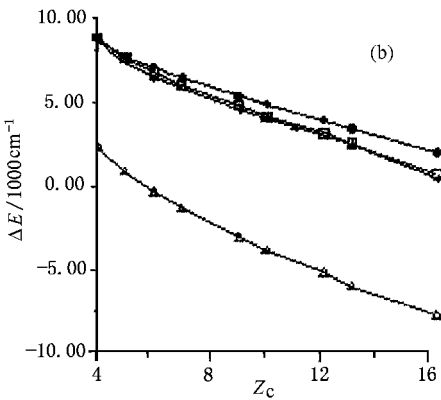


图 1(b) ΔE 随 Z_c 的变化情况 + 为(¹D)_{4f}(²p)²P_{1/2}; ●为(³D)_{4f}(²p)²D_{3/2}; □为(¹D)_{4f}(²p)²D_{3/2}; △为(³D)_{4f}(²p)²D_{3/2}

4. 结果与讨论

表 1 给出了 Mo XIV ,Tc XV ,Ru XVI 离子 3d⁹4s4p ($J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$) 组态能级在 L-S 偶合表象中谱项本征矢的混合情况. 从表中可以看出, 除基态能级外, 其他谱项均有程度不同的混合情况. 其中(¹D)_{4p}(²p)²D_{3/2}与(³D)_{4f}(²p)²D_{3/2}, ⁴D_{3/2}, ⁴P_{3/2} 都有较强的混合, 而与(³D)_{4f}(²p)²D_{3/2} 的混合达到了 50% 之多. 此

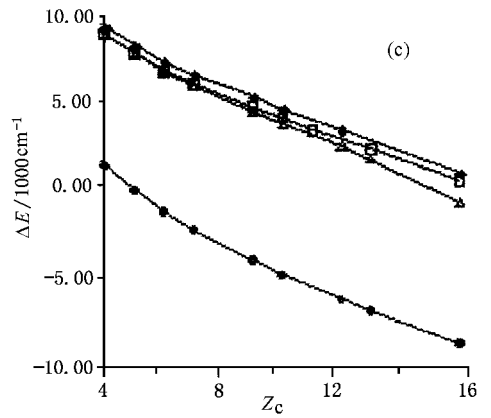


图 1(c) ΔE 随 Z_c 的变化情况 ●为(³D)_{4f}(²p)²P_{1/2}; △为(³D)_{4f}(²p)²F_{3/2}; ◆为(³D)_{4f}(²p)²P_{3/2}; □为(³D)_{4f}(²p)²P_{1/2}

外 (³D)_{4p}(²p)²P_{3/2} 与(¹D)_{4p}(²p)²D_{3/2} 和(³D)_{4p}(²p)²D_{3/2} 也有很强的混合, 前者的混合程度已超过了 50%. 这些情况表明, 对于 3d⁹4s4p ($J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$) 组态能级本征矢的构成是相当复杂的, 进一步的研究表明, 沿等电子序列随着核电荷数的增加, 这种混合将进一步加剧, 很难按 L-S 偶合表象来指认它们, 这时必须按等电子序列的变化特性来指认, 一般的做法是, 除了按不同偶合表象中波函数的最大分量来指认外, 采用 JN_{th} 标注办法即对同一 J 值能量按由低到高的次序来进行标注.

表 2 给出了 Mo XIV ,Tc XV ,Ru XVI 离子 3d⁹4s4p ($J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$) 组态能级的多组态强相互作用理论 HXR 方法计算结果 E_{HXR}, 预测外推计算结果 E_p, 实验观测结果 E_{exp}. 其中 Tc XV ,Ru XVI 离子 3d⁹4s4p ($J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$) 所有能级未见有实验观测结果的报道, 本文给出了其预测计算结果. 从计算结果来看, 对 Mo XIV ,Tc XV ,Ru XVI 离子 3d⁹4s4p ($J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$) 组态能级的多组态强相互作用理论 HXR 方法计算结果 E_{HXR} 与预测外推计算结果 E_p 十分接近, 表明多组态强相互作用理论分析与计算过程是正确的. 其次, 从 Mo XIV 离子的预测计算结果与已有的实验结果比较¹⁰¹ 相对不确定度最大不超过 0.15%, 说明预测计算结果是准确的.

表 3 给出了 Mo XIV ,Tc XV ,Ru XVI 离子 3d¹⁰4s—3d⁹4s4p ($J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}$) 组态各能级跃迁谱线波长

(nm), HXR 方法计算的振子强度和跃迁概率. 与文献[10]比较可以看出波长的绝对误差小于 0.001nm. 由于在跃迁的高能组态和低能组态都不存在对振子强度和跃迁概率产生重要影响的组态, 因此这里给出的振子强度和跃迁概率的性质应该说是比较好的. 例如从对 Ge IV—Ru XVI 离子能级的计算

中较大振子强度的谱线都是实验上已经观察到的能谱. 因此本文给出的 Tc XV, Ru XVI 离子 $3d^{10}4s-3d^94s4p(J = \frac{1}{2}, \frac{3}{2})$ 组态各能级跃迁谱线中具有较大振子强度的应该是实验中均可观测的实验能谱.

表 1 类铜等电子序列 Mo XIV, Tc XV, Ru XVI 离子组态 $3d^{10}4s, 3d^94s4p(J = 1/2, 3/2, N_{th} = 1-4; l=1-7)$ 的本征矢的构成

| 谱项 | J | N _{th} | Mo XIV, Tc XV, Ru XVI 离子本征矢的构成 (LS) |
|------------------------|-----|-----------------|---|
| $4s^2S_{1/2}$ | 1/2 | 1 | (0.99 0.99 0.99) |
| $(^3D)4f(2p)^2P_{1/2}$ | 1/2 | 1 | (0.83 0.80 0.79)+(0.56 0.60 0.64)* ⁴ D _{1/2} |
| $(^1D)4f(2p)^2P_{1/2}$ | 1/2 | 2 | (0.73 0.73 0.72)+(-0.47, -0.48, -0.49)* ² P _{1/2} +(-0.41, -0.40, -0.39)* ⁴ D _{1/2} +(0.28 0.30 0.30)* ⁴ P _{3/2} |
| $(^3D)4f(2p)^2D_{1/2}$ | 1/2 | 3 | (0.71 0.78 0.65)+(-0.48, -0.53, -0.56)* ⁴ P _{1/2} +(0.48 0.47 0.46)* ² P _{1/2} +(-0.17, -0.18, -0.20)* ² P _{1/2} |
| $(^3D)4f(2p)^2P_{1/2}$ | 1/2 | 4 | (0.87 0.86 0.85)+(0.49 0.50 0.51)* ² P _{1/2} +(-0.11, -0.10 - 0.10)* ⁴ D _{1/2} |
| $(^3D)4f(2p)^2P_{3/2}$ | 3/2 | 1 | (0.68 0.64 0.61)+(0.53 0.57 0.60)* ² D _{3/2} +(0.35 0.37 0.39)* ⁴ D _{3/2} +(-0.35, -0.32, -0.29)* ⁴ F _{3/2} +(0.11 0.12 0.14)* ² P _{3/2} |
| $(^3D)4f(2p)^2F_{3/2}$ | 3/2 | 2 | (0.91 0.91 0.91)+(0.31 0.32 0.31)* ⁴ P _{3/2} +(0.18 0.19 0.19)* ⁴ D _{3/2} +(0.16 0.16 0.16)* ² P _{3/2} |
| $(^1D)4f(2p)^2F_{3/2}$ | 2/3 | 3 | (0.65 0.64 0.63)+(-0.51, -0.50, -0.50)* ² D _{3/2} +(-0.42, -0.40, -0.39)* ⁴ D _{3/2} +(-0.28, -0.30, -0.33)* ⁴ P _{3/2} +(0.26 0.26 0.26)* ² P _{3/2} |
| $(^1D)4f(2p)^2P_{3/2}$ | 3/2 | 4 | (0.67 0.66 0.66)+(-0.43, -0.42, -0.41)* ² D _{3/2} +(0.34 0.36 0.38)* ⁴ P _{3/2} +(-0.32, -0.31, -0.30)* ² P _{3/2} +(-0.31, -0.31, -0.31)* ⁴ D _{3/2} +(-0.16, -0.17, -0.18)* ² D _{3/2} |
| $(^3D)4f(2p)^2D_{3/2}$ | 3/2 | 5 | (0.71 0.71 0.70)+(0.50 0.50 0.50)* ² P _{3/2} +(-0.48, -0.49, -0.50)* ⁴ P _{3/2} +(-0.12, -0.13, -0.15)* ² P _{3/2} |
| $(^3D)4f(2p)^2P_{3/2}$ | 3/2 | 6 | (0.92 0.92 0.92)+(0.35 0.35 0.35)* ² P _{3/2} +(0.12 0.12 0.12)* ² D _{3/2} +(-0.11, -0.11, -0.11)* ² D _{3/2} |
| $(^3D)4f(2p)^2D_{3/2}$ | 3/2 | 7 | (0.83 0.83 0.83)+(0.31 0.28 0.24)* ² D _{3/2} +(0.28 0.29 0.31)* ² P _{3/2} +(-0.26, -0.25, -0.24)* ⁴ D _{3/2} +(-0.20, -0.20, -0.21)* ² P _{3/2} +(-0.13, -0.14, -0.15)* ⁴ P _{3/2} |

注 (1) * * 表示 $3d^94f(^3D)4f(2p)$; * 表示 $3d^94f(^1D)4f(2p)$. (2) 小于 0.1 的本征矢分量表中未列出.

表 2 类铜等电子序列 Mo XIV, Tc XV, Ru XVI 离子组态 $3d^{10}4s, 3d^94s4p(J = 1/2, 3/2, N_{th} = 1-4; l=1-7)$ 的能级 (单位 :1000cm⁻¹)

| 离子 | | | Mo XIV | | | Tc XV | | | Ru XVI | | |
|------------------------|-----|-----------------|------------------|----------------|------------------|------------------|----------------|------------------|------------------|----------------|------------------|
| 谱项 | J | N _{th} | E _{HXR} | E _p | E _{exp} | E _{HXR} | E _p | E _{exp} | E _{HXR} | E _p | E _{exp} |
| $4s^2S_{1/2}$ | 1/2 | 1 | 0 | 0 | | 0 | 0 | | 0 | 0 | |
| $(^3D)4f(2p)^2P_{1/2}$ | 1/2 | 1 | 1881.542 | 1883.261 | 1883.261 | 2101.918 | 2103.123 | | 2332.280 | 2333.406 | |
| $(^1D)4f(2p)^2P_{1/2}$ | 1/2 | 2 | 1895.728 | 1897.854 | 1897.854 | 2116.259 | 2117.748 | | 2347.336 | 2348.216 | |
| $(^3D)4f(2p)^2D_{1/2}$ | 1/2 | 3 | 1902.748 | 1905.553 | 1905.553 | 2125.657 | 2127.856 | | 2359.594 | 2361.362 | |
| $(^3D)4f(2p)^2P_{1/2}$ | 1/2 | 4 | 1976.259 | 1968.941 | 1968.941 | 2202.378 | 2194.500 | | 2439.427 | 2431.037 | |
| $(^3D)4f(2p)^2P_{3/2}$ | 3/2 | 1 | 1860.119 | 1861.191 | 1861.190 | 2076.480 | 2076.775 | | 2302.860 | 2302.347 | |
| $(^3D)4f(2p)^2F_{3/2}$ | 3/2 | 2 | 1872.537 | 1874.759 | 1874.730 | 2091.125 | 2029.924 | | 2320.371 | 2321.502 | |
| $(^1D)4f(2p)^2F_{3/2}$ | 2/3 | 3 | 1882.897 | 1885.120 | 1885.090 | 2102.201 | 2103.789 | | 2331.674 | 2332.903 | |
| $(^1D)4f(2p)^2P_{3/2}$ | 3/2 | 4 | 1893.534 | 1895.633 | 1895.630 | 2113.895 | 2115.410 | | 2344.816 | 2345.755 | |
| $(^3D)4f(2p)^2D_{3/2}$ | 3/2 | 5 | 1911.508 | 1914.675 | 1914.680 | 2135.199 | 2179.932 | | 2369.885 | 2372.362 | |
| $(^3D)4f(2p)^2P_{3/2}$ | 3/2 | 6 | 1954.195 | 1945.601 | 1945.600 | 2176.965 | 2209.950 | | 2410.288 | 2400.458 | |
| $(^3D)4f(2p)^2D_{3/2}$ | 3/2 | 7 | 1992.293 | 1986.141 | | 2219.239 | 2128.669 | | 2457.088 | 2450.034 | |

注 (1) E_{HXR} 表示 HXR 计算结果; E_p 表示预测计算结果; E_{exp} 为文献 [10] 的实验结果.

表 3 类铜等电子序列 Mo XIV, Tc XV, Ru XVI 离子组态 $3d^{10}4s-3d^94s4p$ ($J = 1/2, 3/2, N_{th} = 1-4, l=7$) 跃迁的波长 (nm), 振子强度和跃迁概率

| 离子 跃迁 | Mo XIV | | | Tc XV | | | Ru XVI | | |
|--|---------------------|-----------|----------------------------|---------------------|-----------|----------------------------|---------------------|-----------|----------------------------|
| | λ/nm | $\log gf$ | $gA/10^{11} \text{s}^{-1}$ | λ/nm | $\log gf$ | $gA/10^{11} \text{s}^{-1}$ | λ/nm | $\log gf$ | $gA/10^{11} \text{s}^{-1}$ |
| $4s^2S_{1/2} \leftarrow ({}^3D)({}^2P)P_{1/2}$ | 5.3799 | -1.957 | 0.261 | 4.7548 | -1.984 | 0.306 | 4.2854 | -2.044 | 0.328 |
| $\leftarrow ({}^1D)({}^2P)P_{1/2}$ | 5.2691 | -0.620 | 5.746 | 4.7219 | -0.620 | 7.160 | 4.2585 | -0.618 | 8.862 |
| $\leftarrow ({}^3D)({}^2P)D_{1/2}$ | 5.2478 | -1.457 | 0.842 | 4.6995 | -1.490 | 0.976 | 4.2348 | -1.527 | 1.104 |
| $\leftarrow ({}^3D)({}^2P)P_{1/2}$ | 5.0788 | -0.992 | 2.654 | 4.5568 | -0.504 | 3.121 | 4.1134 | -1.039 | 3.625 |
| $\leftarrow ({}^3D)({}^2P)P_{3/2}$ | 5.3729 | -1.665 | 0.498 | 4.8151 | -1.666 | 0.621 | 4.3433 | -1.672 | 0.753 |
| $\leftarrow ({}^3D)({}^2P)F_{3/2}$ | 5.3340 | -2.010 | 0.228 | 4.7780 | -1.920 | 0.350 | 4.3075 | -1.849 | 0.508 |
| $\leftarrow ({}^1D)({}^2P)D_{3/2}$ | 5.3047 | -1.133 | 1.742 | 4.7533 | -1.164 | 2.021 | 4.2865 | -1.191 | 2.236 |
| $\leftarrow ({}^1D)({}^2P)P_{3/2}$ | 5.2752 | -0.506 | 7.465 | 4.7272 | -0.516 | 9.085 | 4.2630 | -0.526 | 10.93 |
| $\leftarrow ({}^3D)({}^2P)D_{3/2}$ | 5.2228 | -1.385 | 1.004 | 4.5872 | -1.427 | 1.136 | 4.2153 | -1.473 | 1.260 |
| $\leftarrow ({}^3D)({}^2P)P_{3/2}$ | 5.1399 | -0.500 | 8.057 | 4.5249 | -0.504 | 9.903 | 4.1658 | -0.508 | 12.04 |
| $\leftarrow ({}^3D)({}^2P)D_{3/2}$ | 5.0348 | -3.384 | 0.011 | 3.1962 | -3.549 | 0.009 | 4.0815 | -3.762 | 0.007 |

注: λ 表示谱线波长 (nm); $\log gf$ 表示振子强度; gA 为跃迁概率 (10^{11}s^{-1}).

- [1] Moore C E 1952 *Atomic energy levels* Vol. II (US Government Printing Office , Washington , D.C.)
- [2] Reader J and Acquista N 1979 *J. Opt. Soc. Am.* **69** 1285
- [3] Reader J and Acquista N 1979 *J. Opt. Soc. Am.* **69** 1659
- [4] Reader J and Acquista N 1980 *J. Opt. Soc. Am.* **70** 317
- [5] Reader J and Acquista N 1979 *J. Opt. Soc. Am.* **69** 144
- [6] Sugar J, Musgrove A 1991 *Phys. Chem. Ref. Data* **20** 998
- [7] Martinson I 1989 *J. Rep. Prog. Phys.* **52** 157
- [8] Reader J and Acquista N 1983 *J. Opt. Soc. Am.* **73** 1765
- [9] Acquista N and Reader J 1981 *J. Opt. Soc. Am.* **71** 569
- [10] Wyart J F *et al* 1984 *Phys. Scr.* **29** 319
- [11] Sugar J *et al* 1991 *Phys. Scr.* **43** 484
- [12] Moller G *et al* 1992 *Phys. Scr.* **46** 36
- [13] Cowan R D 1981 *Theory of Atomic Structure and Spectra* (University of California Press , Berkeley)
- [14] Dong C Z 1995 *Acta Phys. Sin.* **44** 524 (in Chinese) [董晨钟 1995 物理学报 **44** 524]
- [15] Xie L Y *et al* 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 1965 (in Chinese) [頔录有等 2002 物理学报 **51** 1965]
- [16] Silver J D 1988 *Phys. Scr.* **37** 720
- [17] Edlen B 1983 *Phys. Scr.* **28** 51
- [18] Safronova U I *et al* 1993 *Phys. Scr.* **47** 364
- [19] Mu Z D and Zeng Y 1996 *High Power Laser and Particle Beams* **8** 529
- [20] Mu Z D and Wei Q Y 2001 *Chinese Journal of Atomic and Molecular Physics* **18** 340

Calculation of wavelengths and oscillator strengths of transition $3d^{10}4s-3d^94s4p$ for ions from Mo XIV—Ru XVI *

Mu Zhi-Dong Wei Qi-Ying

(College of Sciences , China University of Mining and Technology , Xuzhou 221008 ,China)

(Received 24 July 2003 ; revised manuscript received 13 October 2003)

Abstract

In this paper , we calculate the energy levels of configuration $3d^94s4p$ ($J = 1/2 ; 3/2 , N_{th} = 1-4 ; 1-7$) for copper-like sequence ions from Ge IV—Ru XVI by HXR method. With the important effects , such as correlation effect , quantum electrodynamics (QED) effects and the other effects taken into account , we have made a systematic fit calculation for energy levels of ions mentioned above. We predict here the energy levels of configuration $3d^94s4p$ ($J = 1/2 ; 3/2 , N_{th} = 1-4 ; 1-7$) for ions Mo XIV—Ru XVI . The wavelengths , oscillator strengths and probabilities of transition $3d^{10}4s-3d^94s4p$ ($J = 1/2 ; 3/2 , N_{th} = 1-4 ; 1-7$) are computed too.

Keywords : copper-like ions Mo XIV—Ru XVI ,wavelengths , oscillator strengths , probabilities

PACC : 3120 , 3220R , 3270C , 3270F

* Project supported by the Sci-Tech Foundation of China University of Mining and Technology (Grant No. OK1058).