

Cu XVIII 离子谱线波长和跃迁概率的理论计算^{*}

牟致栋[†] 魏琦瑛

(中国矿业大学理学院, 徐州 221008)

(2003 年 12 月 19 日收到, 2004 年 9 月 18 日收到修改稿)

用多组态 HFR 方法对 Cu XVIII 离子 $n = 3$ complex 组态能级结构进行了综合的分析与计算. 在已有实验工作的基础上, 运用参数拟合方法获得了能级结构参数的最佳计算值, 由这些参数值预测计算了 Cu XVIII 离子 $n = 3$ complex 组态能级以及 $3s^2-3s3p$, $3s3p-3p^2$, $3p^2-3p3d$, $3s3d-3p3d$, $3p3d-3d^2$ 组态能级跃迁的谱线波长, 振子强度和跃迁概率.

关键词: Cu XVIII 离子, 原子能级, 跃迁谱线波长, 振子强度和跃迁概率

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

1. 引 言

Cu XVIII 离子属于 Mg I 等电子序列, 基组态为 $3s^2$. 较低激发组态为 $3s3p$, $3p^2$, $3s3d$, $3p3d$, $3d^2$, 较高激发组态为 $3s4s$, $3s4p$, $3s4f$ 等组态. 1982 年和 1988 年, Finkenthal 等人^[1]和 Seely 等人^[2]分别报道了 Cu XVIII 离子 $3s3p^3$ $^1P_1-3s^2$ 1S_0 的两条自旋禁戒跃迁和共振跃迁的实验观测谱线波长, 同时根据能级沿等电子序列变化的规则性对这两条跃迁谱线进行了系统的理论预测计算. 1986 年, Sugar 等人^[3,4]报道了激光等离子体产生的 Cu XVIII 离子 $n = 3$ complex 组态能级跃迁谱线的实验观测结果. Litzen 等人^[5]于 1987 年根据相关实验结果分析了 Ca IX-Ge XXI 离子 $3s^2$, $3s3p$, $3p^2$, $3s3d$, $3p3d$ 组态有关能级结构参数沿等电子序列变化的规律, 分析计算了 Cu XVIII 离子上述组态有关能级, 指出了文献 3 和文献 4 中个别指认错误的结果. Sugar 等^[6,7]在分析了最新观测到的 6 条谱线的基础上, 对 Cu XVIII 离子 $3p3d$ 1F_3 跃迁能级作了重新的指认, 并认为文献 5 分析计算的结果是正确的. Redfors^[8]于 1988 年报道了两条与 $3d^2$ 组态能级 $3d^2$ 3F_4 和 $3d^2$ 1G_4 有关的 Cu XVIII 离子的实验观测能谱. 从上述文献可以看出, 对于 Cu XVIII 离子 $3s^2$, $3s3p$, $3p^2$, $3s3d$, $3p3d$ 组态的部分能级有较多实验观测结果的报道, 但是, 对 Cu XVIII 离子全面综合的理论

计算报道很少, 尤其是与 $3d^2$ 组态能级有关的实验数据, 除了文献 8] 报道的两条实验观测能谱外, 到目前为止再没有发现相关研究结果的报道. 一般来说, 在组态相互作用理论对等电子序列离子结构的研究中, 下面两种方法都需要有关的准确的离子结构数据^[9-11], 一是根据等电子序列中已有的离子能级结构参数, 外推预测计算未知离子能级; 二是通过分析能级沿等电子序列变化的规则性来进行理论预测计算. 因而 Cu XVIII 离子的准确的有关参数对于理论和实验上研究进一步研究 Cu XVIII 离子以及该序列的其他离子的能级结构十分重要. 本文在已有研究工作的基础上, 运用多组态 HFR 方法对 Cu XVIII 离子 $n = 3$ complex 中所有组态能级结构进行了综合的分析与计算. 运用参数拟合方法获得了能级结构参数的最佳计算值, 由这些参数值预测计算了 Cu XVIII 离子 $n = 3$ complex 组态能级以及 $3s^2-3s3p$, $3s3p-3p^2$, $3p^2-3p3d$, $3s3d-3p3d$, $3p3d-3d^2$ 组态能级跃迁的谱线波长, 振子强度和跃迁概率.

2. 理论与方法

2.1. 多组态 HFR 方法概述

原子(离子)体系的相对论单电子径向波函数通过自洽场方法求解 HFR 方程^[12]获得. 在构造整个原

^{*} 中国矿业大学科技基金(批准号: OK4522)资助的课题.

[†] E-mail: muzhidong@126.com

子体系的多组态强相互作用波函数时,体系波函数在所有可能的组态基矢空间展开,即

$$\psi = \sum_b \sum_{\gamma} y_{b\gamma} \phi_{b\gamma}, \quad (1)$$

式中 $\phi_{b\gamma}$ 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.体系的哈密顿能量为在(1)式表示的波函数之间构成的能量矩阵的本征值,其形式如下

$$h_{ij} = \sum_k C_{ijk} X_k, \quad (2)$$

(2)式中的 X_k 表示各种可能的径向项积分参数.这些径向积分参数主要是组态平均能 E_{av} ,库仑直接积分和交换积分 F^k 和 G^k ,自旋-轨道相互作用积分 ζ_i ,组态相互作用积分 R^k 等.径向积分参数可以通过组态相互作用理论 HFR 方法计算得到.相应的各径向积分系数 C_{ijk} 可由解析运算得到.如何获得(1)式所表示的最佳的体系波函数 ψ ,来保证计算结果的准确性是具体计算时需要认真考虑的问题.一般来说,在同一宇称中,强相互作用组态主要存在于^[12] 1)组态平均能较为接近或相互作用矩阵元较大的两个组态 2)主量子数相同的两个组态,即属同一 complex 的两个组态 3)外层主量子依次变化的某些 Rydberg 系的组态之间 4)在纯耦合表象中,具有同一总角动量 J 的基矢空间,可以耦合出较多的相同的能量本征矢.由于不同等电子序列离子组态的复杂性,具体计算时,还需要根据多组态相互作用理论计算得到的组态相互作用矩阵元的数值和本征矢的混合情况来确定.对于弱相互作用组态,一般来说单个弱组态对整个能级结构的影响并不大,但是所有弱组态的微扰所导致的微扰累积效应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.由于对包括上述弱组态微扰累积效应在内的各种效应对能级结构的影响很难从理论上直接准确求出,因此,计算过程中,利用有关的实验观测结果,对上述各种效应可能对能级结构的影响通过最小二乘拟合方法对能级结构参数的进一步的优化计算来予以考虑.

2.2. 跃迁谱线的振子强度和跃迁概率

对于从初能态 i 到末能态 j 的电偶极跃迁加权振子强度可由下式计算(文献[12]):

$$gf_{ij} = 3.0376 \times 10^{-6} \sigma S_{ij}, \quad (3)$$

(3)式中 g_i 为初能态的统计权重, σ 为跃迁谱线波

数,单位为 cm^{-1} . S_{ij} 是电偶极跃迁的线强度,单位是 $e^2 a_0^2$. 跃迁谱线的跃迁概率与振子强度的关系是

$$g_i A_{ij} = 0.66702 \sigma^2 g f_{ij} (\text{s}^{-1}).$$

2.3. 计算方法

为了得到 Cu XVIII 离子准确的各组态能级结构参数,根据本文 2.1 中描述的理论方法,首先计算了包括了 $n = 3\text{complex}$ 中全部组态在内的共 19 个相关组态的组态平均能 E_{av} 和有相互作用的组态之间的组态相互作用矩阵元 R^k . 从组态平均能的计算结果可以看出对于本文所涉及的有关组态其组态平均能的由小到大的次序依次 $3s^2, 3s3p, 3p^2, 3s3d, 3p3d, 3d^2, 3s4s, 3s4p$ 和 $3s4f$ 组态. 从对 R^k 的计算结果和本征矢的混合情况分析,对于上述组态 $3s^2$ 与 $3p^2, 3p^2$ 与 $3s3d, 3p^2$ 与 $3d^2$ 之间以及 $3s3p$ 与 $3p3d$ 之间都有程度不同的相互作用,其中 $3s3d$ 与 $3p^2$ 之间的相互作用最强. 对于 $3s_n s (n = 4-7), 3s_n p (n = 4-6), 3s_n f (n = 4-5), 3s_4 d$ 等分别属于四个 Rydberg 系的组态的上述计算结果分析,除 $3s_4 s, 3s_4 p, 3s_4 f$ 对 $n = 3\text{complex}$ 中的属于各自 Rydberg 系的组态有一定作用外,其他组态的作用并不大,所以在体系的波函数空间除了 $3s_4 s, 3s_4 p, 3s_4 f$ 外,并不明显包含这些组态. 综合上述的计算分析,最后确定了体系的波函数在偶宇称组态 $3s^2, 3p^2, 3d^2, 3s3d, 3s_4 s$ 和奇宇称组态 $3s3p, 3p3d, 3s_4 p, 3s_4 f$ 等组态之间展开. 在参数拟合计算过程中,各组态能级的径向积分参数的初始值对拟合计算的收敛性和计算结果的准确性有重要影响. 本文计算时各拟合参数的初始值是这样确定的:自旋与轨道相互作用径向积分 ζ_i 按组态相互作用理论 HFR 方法计算结果的 85% 确定;其他的径向积分参数包括组态平均能 E_{av} ,库仑直接积分和交换积分 F^k 和 G^k ,组态相互作用积分 R^k 等均以组态相互作用理论 HFR 方法计算值的 80% 确定.

3. 结果与讨论

表 1 的第三列为本文用组态相互作用理论和参数拟合计算得到的 Cu XVIII 离子 $n = 3\text{complex}$ 组态 $3s^2, 3s3p, 3p^2, 3s3d, 3d^2, 3p3d$ 等组态的所有能级值,第四列给出了相关文献所确定的实验观测能级,没有给出的实验数据的均为没有相关实验值. 第五列为相应能级的有较强混合的前三个本征矢分量平方的构成情况,本征矢分量小于 1% 的表中没有列出.

表 1 Cu^{XVIII} 离子 $n = 3$ complex 组态的能级

组态	谱项	J	$E_{\text{LSF}}/1000\text{cm}^{-1}$	$E_{\text{obs}}/1000\text{cm}^{-1}$	本征矢构成的百分比(LS)
$3s^2$	1S_0	0	0.000	0.0000	98% 1S_0 + 2% $3p^2^1S$
$3p^2$	3P_0	0	664.931	664.947 ^a	94% 3P_0 + 5% $3p^2^1S$
	1S_0	0	804.140	804.139 ^b	90% 1S_0 + 6% $3p^2^3P_0$ + 2% $3d^2^1S_0$
	3P_1	1	684.712	684.681 ^b	99% 3P_1
	1D_2	2	679.693	679.684 ^a	63% 1D_2 + 21% $3p^2^3P_2$ + 15% $3s3d^1D_2$
	3P_2	2	715.591	715.594 ^b	78% 3P_2 + 16% $3p^2^1D_2$ + 6% $3s3d^1D_2$
$3d^2$	3P_0	0	1693.856		99% 3P_0
	1S_0	0	1796.207		97% 1S_0 + 2% $3p^2^1S_0$
	3P_1	1	1695.482		99% 3P_1
	3F_2	2	1652.371		99% 3F_2
	1D_2	2	1693.438		54% 1D_2 + 44% $3d^2^3P_2$
	3P_2	2	1700.796		55% 3P_2 + 44% $3d^2^1D_2$
	3F_3	3	1656.364		100% 3F_3
	3F_4	4	1661.115	1661.304 ^c	99% 3F_4
	1G_4	4	1705.211	1701.114 ^c	99% 1G_4
$3s3d$	3D_1	1	818.684	818.619 ^b	100% 3D_1
	3D_2	2	820.720	820.693 ^b	100% 3D_2
	1D_2	2	917.010	917.010 ^b	78% 1D_2 + 20% $3p^2^1D_2$
	3D_3	3	823.878	823.970 ^b	100% 3D_3
$3s3p$	3P_0	0	279.779	279.808 ^b	99% 3P_0
	3P_1	1	289.427	289.400 ^b	98% 3P_1 + 1% 1P_1
	1P_1	1	426.986	426.987 ^b	96% 1P_1 + 2% $3p3d^1P_1$ + 1% $3s3p^3P_1$
	3P_2	2	314.742	314.751 ^b	99% 3P_2
$3p3d$	3P_0	0	1207.820	1207.949 ^a	99% 3P_0
	3D_1	1	1182.471		77% 3D_1 + 20% $3p3d^3P_1$ + 2% $3p3d^1P_1$
	3P_1	1	1208.247	1208.250 ^b	78% 3P_1 + 21% $3p3d^3D_1$
	1P_1	1	1298.965	1298.965 ^b	95% 1P_1 + 2% $3p3d^1P_1$ + 2% $3p3d^3D_1$
	3F_2	2	1117.864		84% 3F_2 + 15% $3p3d^1D_2$
	1D_2	2	1149.308	1149.258 ^a	75% 1D_2 + 13% $3p3d^3F_2$ + 7% $3p3d^3P_2$
	3D_2	2	1187.924	1187.908 ^b	51% 3D_2 + 39% $3p3d^3P_2$ + 7% $3p3d^1D_2$
	3P_2	2	1209.194	1209.120 ^b	53% 3P_2 + 45% $3p3d^3D_2$ + 1% $3p3d^1D_2$
	3F_3	3	1135.619	1135.591 ^b	97% 3F_3 + 2% $3p3d^3D_3$
	3D_3	3	1205.327	1205.460 ^a	96% 3D_3 + 2% $3p3d^3F_3$ + 1% $3p3d^1F_3$
	1F_3	3	1288.593	1288.589 ^a	98% 1F_3 + 1% $3p3d^3D_3$
	3F_4	4	1156.800	1156.841 ^b	100% 3F_4

注: a 文献 3] b 文献 6] c 文献 8].

表 2 和表 3 的第二列分别列出了最小二乘拟合 (LSF) 得到的偶宇称组态和宇称组态的能级结构参数值. 第三列为组态相互作用理论 HFR 方法计算的参数值. 第四列为最小二乘拟合后的计算结果与组态相互作用理论 HFR 方法计算结果的比. 表 3 和表 4 的最后一行分别为偶宇称组态和宇称组态能级结构参数拟合计算的标准偏差 (stdev), 对偶宇称组态和宇称组态能级结构参数的标准偏差分别为 77cm^{-1} 和 101cm^{-1} , 说明本文的计算是相当准确的.

表 2 Cu XVIII 离子偶宇称组态参数

参数	LSF/1000cm ⁻¹	HFR/1000cm ⁻¹	LSF/HFR
E _{av} (3s ²)	18.966	0	
E _{av} (3p ²)	719.362	702.430	1.024
F ² (3p3p)	163.931	172.659	0.950
ζ _{3p}	23.493	22.620	1.039
E _{av} (3s3d)	834.516	820.032	1.017
ζ _{3d}	2.078	2.444	0.850
G ² (3s3d)	127.157	145.188	0.876
E _{av} (3d ²)	1680.307	1668.625	1.007
F ² (3d3d)	182.960	192.974	0.948
F ⁴ (3d3d)	118.317	124.793	0.948
ζ _{3d}	2.444	2.425	1.007
E _{av} (3s4s)	2423.597	2409.375	1.006
G ⁰ (3s4s)	13.685	17.106	0.800
R ¹ (3s ² 3p ²)	207.053	221.417	0.935
R ² (3s ² 3d ²)	136.265	171.067	0.738
R ⁰ (3s ² 3s4s)	10.728	11.472	0.935
R ¹ (3p ² 3s3d)	186.949	199.918	0.935
R ¹ (3p ² 3d ²)	178.157	190.518	0.935
R ³ (3p ² 3d ²)	117.981	126.166	0.935
R ¹ (3p ² 3s4s)	28.730	30.722	0.935
R ² (3s3d 3d ²)	143.774	153.748	0.935
R ² (3d ² 3s4s)	27.763	29.689	0.935
stdev	0.077		

表 4 的第二列和第三列分别为本文用拟合得到的能级结构参数计算得到的 $3s^2-3s3p, 3s3p-3p^2, 3p^2-3p3d, 3s3d-3p3d, 3p3d-3d^2$ 跃迁的谱线波长和相应的实验观测谱线波长, 没有列出的实验数据的均为到目前为止还没见到有相关实验值的报道. 第三和第四列分别为相应跃迁谱线的振子强度和跃迁概率. 从表 1 可以看出大部分计算结果与有关文

表 3 Cu XVIII 离子奇宇称组态参数

参数	LSF/1000cm ⁻¹	HFR/1000cm ⁻¹	LSF/HFR
E _{av} (3s3p)	340.728	320.970	1.062
ζ _{3p}	23.454	22.639	1.036
G ¹ (3s3p)	200.636	221.595	0.905
E _{av} (3p3d)	1188.902	1175.023	1.012
ζ _{3p}	23.239	22.560	1.030
ζ _{3d}	2.510	2.436	1.030
F ² (3p3d)	160.603	172.606	0.930
G ¹ (3p3d)	176.836	190.054	0.930
G ² (3p3d)	117.155	125.912	0.930
E _{av} (3s4p)	2571.019	2559.121	1.005
ζ _{4p}	7.372	8.673	0.850
G ¹ (3s4p)	16.418	20.127	0.815
E _{av} (3s4f)	2843.141	2828.204	1.005
ζ _{4f}	0.212	0.247	0.858
G ¹ (3s4f)	61.206	68.884	0.888
R ¹ (3s3p 3p3d)	189.129	200.147	0.950
R ² (3s3p 3p3d)	98.796	151.786	0.651
R ⁰ (3s3p 3s4p)	4.434	4.692	0.950
R ¹ (3s3p 3s4p)	8.558	27.561	0.310
R ¹ (3p3d 3s4p)	10.768	34.678	0.310
R ² (3p3d 3s4p)	6.813	21.942	0.310
R ¹ (3p3d 3s4f)	-43.656	-140.596	0.310
R ² (3p3d 3s4f)	-32.402	-104.354	0.310
stdev	0.101		

献确定的实验结果的最大不确定度估计都在 100cm^{-1} 以内, 而 $3d^2$ 组态的 1G_4 的能级值本文的计算结果为 1705211cm^{-1} , 而文献 [8] 所给出的结果为 1701114cm^{-1} , 与本文的计算结果相差 4097cm^{-1} . 对此本文作如下的分析: (1) 从文献 [8] 给出的与 $3d^2$ 组态能级跃迁有关的实验谱线 (即 21.9410nm) 分析, 本文计算得到的 $3p3d\ ^1D_3-3d^2\ ^1G_4$ 的跃迁谱线的波长与文献 [8] 给出的实验结果十分吻合, 说明与这条跃迁谱线相关的谱项能级的计算结果是准确的. (2) 与 $3d^2\ ^1G_4$ 谱项能级有关的实验能谱除了 $3p3d\ ^1D_3-3d^2\ ^1G_4$ 外, 目前还没有任何与其有关的实验能谱的报道, 而与 $3p3d\ ^1D_3$ 有关的跃迁谱线波长值与已有的实验观测结果进行了比较可以看出, 所有与该谱项能级有关的谱线波长值与已有的实验观测结果完全一致, 说明本文关于 $3p3d\ ^1D_3$ 的谱项能

表 4 Cu XVIII 离子谱线波长、振子强度和跃迁概率

跃迁	λ_p/nm	$\lambda_{\text{obs.}}/\text{nm}$	$\log(gf)$	gA/s^{-1}
$3s^2-3s3p$				
$^1S_0-^3P_1$	34. 55109	34. 5560 ^a	-2. 166	$3. 810 \times 10^8$
$^1S_0-^1P_1$	23. 41995	23. 4219 ^b	-0. 136	$8. 887 \times 10^{10}$
$3s3p-3p^2$				
$^3P_1-^3P_2$	23. 46514	23. 4630 ^b	-0. 640	$2. 777 \times 10^{10}$
$^3P_0-^3P_1$	24. 69541	24. 7011 ^b	-0. 591	$2. 803 \times 10^{10}$
$^3P_1-^3P_1$	25. 29815	25. 3001 ^b	-0. 733	$1. 928 \times 10^{10}$
$^3P_1-^1D_2$	25. 62355	25. 6222 ^c	-0. 973	$1. 081 \times 10^{10}$
$^1P_1-^1S_0$	26. 51436	26. 5145 ^c	-0. 540	$2. 739 \times 10^{10}$
$^3P_2-^1D_2$	27. 40098		-0. 728	$1. 662 \times 10^{10}$
$^1P_1-^3P_2$	34. 64952		-1. 075	$4. 670 \times 10^9$
$^1P_1-^1D_2$	39. 57166		-0. 650	$9. 542 \times 10^9$
$3p^2-3p3d$				
$^1D_2-^1F_3$	16. 42303	16. 4246 ^d	-0. 222	$1. 483 \times 10^{11}$
$^1D_2-^3P_1$	18. 91953		-1. 375	$7. 857 \times 10^9$
$^3P_2-^1F_3$	17. 45193	17. 4525 ^d	-0. 594	$5. 574 \times 10^{10}$
$^1D_2-^3P_2$	18. 88568		-0. 936	$2. 167 \times 10^{10}$
$^1D_2-^3D_3$	19. 02464	19. 0194 ^d	-0. 334	$8. 539 \times 10^{10}$
$^1D_2-^3D_2$	19. 67609		-1. 387	$7. 060 \times 10^9$
$^3P_1-^3D_2$	19. 87237	19. 8738 ^d	-0. 050	$1. 504 \times 10^{11}$
$^3P_1-^3D_1$	20. 09006		-0. 970	$1. 772 \times 10^{10}$
$^3P_2-^3D_3$	20. 41917	20. 4130 ^d	0. 060	$1. 836 \times 10^{11}$
$^1D_2-^1D_2$	21. 29401	21. 2959 ^d	-0. 236	$8. 543 \times 10^{10}$
$^3P_1-^1D_2$	21. 52409		-1. 132	$1. 062 \times 10^{10}$
$^1D_2-^3F_3$	21. 93334		-1. 641	$3. 170 \times 10^9$
$^3P_2-^3D_2$	21. 17151		-1. 431	$5. 518 \times 10^9$
$^1D_2-^3F_2$	22. 82214		-0. 924	$1. 524 \times 10^{10}$
$3s3d-3p3d$				
$^3D_2-^1F_3$	21. 37328		-2. 388	$5. 970 \times 10^8$
$^3D_1-^3P_1$	25. 66983	25. 6632 ^d	-0. 505	$3. 166 \times 10^{10}$
$^3D_1-^3P_0$	25. 69797		-0. 801	$1. 595 \times 10^{10}$
$^3D_2-^3P_2$	25. 74170	25. 7484 ^d	-0. 313	$4. 898 \times 10^{10}$
$^3D_2-^3P_1$	25. 80464		-0. 836	$1. 461 \times 10^{10}$
$^3D_2-^3D_3$	26. 00056	25. 9877 ^d	-0. 672	$2. 099 \times 10^{10}$
$^3D_3-^3P_2$	25. 95271		-0. 843	$1. 423 \times 10^{10}$
$^1D_2-^1P_1$	26. 18112	26. 1820 ^d	-0. 288	$5. 012 \times 10^{10}$
$^3D_3-^3D_3$	26. 21586	26. 2107 ^d	-0. 152	$6. 843 \times 10^{10}$
$^1D_2-^1F_3$	26. 91188	26. 9053 ^d	0. 286	$1. 778 \times 10^{11}$
$^1D_2-^3D_2$	36. 91219		-1. 835	$7. 150 \times 10^8$
$^3D_3-^1D_2$	30. 72858		-1. 125	$5. 298 \times 10^9$
$3p3d-3d^2$				
$^1D_2-^1D_2$	18. 37798		-0. 133	$1. 453 \times 10^{11}$
$^3F_4-^3F_4$	19. 82887		-0. 024	$1. 605 \times 10^{11}$
$^3P_1-^3P_2$	20. 30255		-0. 805	$2. 537 \times 10^{10}$
$^3P_0-^3P_1$	20. 50602		-0. 575	$4. 219 \times 10^{10}$
$^3P_1-^3P_1$	20. 52398		-0. 561	$4. 349 \times 10^{10}$
$^3D_3-^1D_2$	20. 48714		-0. 708	$3. 115 \times 10^{10}$
$^3D_2-^3F_3$	21. 34743		-0. 141	$1. 057 \times 10^{11}$
$^3P_2-^1D_2$	20. 65078		-0. 671	$3. 339 \times 10^{10}$
$^3D_3-^3F_4$	21. 94000	21. 9410 ^e	0. 276	$2. 614 \times 10^{11}$
$^3P_2-^3F_3$	22. 36288		-0. 238	$7. 717 \times 10^{10}$
$^1F_3-^1G_4$	24. 00283	24. 0028 ^e	0. 395	$2. 872 \times 10^{11}$
$^1P_1-^3P_2$	24. 88609		-0. 612	$2. 629 \times 10^{10}$
$^1P_1-^1D_2$	25. 5030		-0. 512	$3. 191 \times 10^{10}$

注 a 文献 [1] b 文献 [3] c 文献 [6] d 文献 [4] e 文献 [8].

级值的计算结果也是准确的。(3)如果按文献 [8] 确定的 $3d^2 1G_4$ 谱项能级值来计算 $3p3d 1D_3-3d^2 1G_4$ 的跃迁谱线波长则计算结果将与其报道的实验结果相差 $0.2366\text{nm}(2.366\text{\AA})$ 之多,表明 $3d^2 1G_4$ 谱项值还需要今后在实验和理论上作进一步的研究。从表 5 可以看出,本文计算的谱线波长与相应的实验观测值最大不确定度估计一般不超过 0.005nm ,说明本文

关于各跃迁谱线波长和能级数值的全面综合的分析计算结果是准确的。此外,本文计算得到的振子强度和有关文献提供的谱线的实验相对强度完全一致,说明计算的振子强度和跃迁概率是可靠的。本文提供的数据可供实验和理论上进一步研究 Cu XVIII 和该序列其他离子结构时的参考。

- [1] Finkenthal M , Hinnov E and Cohen S 1982 *Phys. Lett.* **91** 284
 [2] Seely J F , Ekberg J O and Feldman U 1988 *J. Opt. Soc. Am. B* **5** 602
 [3] Sugar J and Kaufman V 1986 *J. Opt. Soc. Am. B* **3** 704
 [4] Sugar J and Kaufman V 1986 *J. Opt. Soc. Am. B* **3** 1612
 [5] Litzen U and Redfors A 1987 *Phys. Scr.* **36** 895
 [6] Sugar J and Kaufman V 1987 *J. Opt. Soc. Am. B* **5** 2011
 [7] Sugar J and Kaufman V and Indelicato J 1989 *J. Opt. Soc. Am. B* **6** 1437
 [8] Redfors A 1988 *Phys. Scr.* **38** 702
 [9] Dong C Z 1991 *Acta Phys. Sin.* **44** 1253 (in Chinese) [董晨钟 1991 物理学报 **44** 1253]
 [10] Mu Z D and Wei Q Y 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1742 (in Chinese) [牟致栋、魏琦瑛 2004 物理学报 **53** 1742]
 [11] Mu Z D and Zeng Y 1996 *High Power Laser and Particle Beams* **8** 259 (in Chinese) [牟致栋、曾 勇 1996 强激光与粒子束 **8** 259]
 [12] Cowan R D 1981 *Theory of Atomic Structure and Spectra* (Berkeley : University of California Press)

Theoretical calculation of wavelengths and transition probabilities for magnesium-like Cu XVIII *

Mu Zhi-Dong[†] Wei Qi-Ying

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

(Received 19 December 2003 ; revised manuscript received 18 September 2004)

Abstract

The energy levels of magnesium-like ion Cu XVIII in $n = 3$ complex configurations are computed by multi-configuration Hartree-Fock with relativistic corrections (HFR) method. The Slater parameters are optimized with the least-square-fit (LSF) technique based on the available experimental data. With these new parameters , the wavelengths , oscillator strengths and transition probabilities for transitions $3s^2-3s3p$, $3s3p-3p^2$, $3p^2-3p3d$, $3s3d-3p3d$, $3p3d-3d^2$ in $n = 3$ complex configurations for magnesium-like Cu XVIII are predicted.

Keywords : magnesium-like Cu XVIII , atomic energy levels , wavelengths , oscillator strengths and transition probabilities

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

* Project supported by Sci-Tech Foundation of China University of Mining & Technology (Grant No. OK4522).

[†] E-mail : muzhidong@126.com