

# 类铍离子磁四极 $M2\ 2s^2\ ^1S_0-2s2p\ ^3P_2$ ( $Z = 10-103$ ) 禁戒跃迁\*

欧阳永中<sup>1)†</sup> 易有根<sup>1)2)B)</sup> 朱正和<sup>2)</sup> 郑志坚<sup>3)</sup>

1) 中南大学物理科学与技术学院, 长沙 410083)

2) 四川大学原子与分子工程研究所, 成都 610065)

3) 中国工程物理研究院激光聚变研究中心, 绵阳 621900)

(2006 年 11 月 2 日收到, 2006 年 11 月 9 日收到修改稿)

利用全相对论多组态 Dirac-Fock 方法系统地计算了高离化类铍离子的磁四极  $M2\ 2s^2\ ^1S_0-2s2p\ ^3P_2$  ( $Z = 10-103$ ) 自旋禁戒跃迁的能级间隔、跃迁概率和振子强度, 计算中考虑了重要核的有限体积效应, Breit 修正和 QED 修正, 所得结果和最近的实验数据以及理论值进行了比较, 结果表明: 高原子序数的高电荷离子 ( $Z \geq 70$ ) 磁四极  $M2$  自旋禁戒跃迁几乎可以和中性原子的光学允许跃迁相比拟, 不仅在天体等离子体中, 在 ICF 和 MCF 高温激光等离子体中, 磁四极自旋禁戒跃迁和其他自旋禁戒跃迁(磁偶极、电四极)一样不容忽视, 在双电子复合、不透明度、自由程等理论计算中应该考虑其影响.

关键词: 磁四极  $M2$ , 能级间隔, 跃迁概率, 振子强度

PACC: 3130, 3270C, 3270F

## 1. 引 言

类铍离子的磁四极矩  $M2$  光谱跃迁是一种很重要的自旋禁戒跃迁. 这种从低激发态到基态的禁戒跃迁光谱参数在天体物理、X 射线激光、惯性约束 ICF 聚变和磁约束 MCF 聚变等领域有着重要的应用价值. 目前已在太阳日冕、行星状星云等天体物质中发现大量这类禁戒跃迁谱线, 所以, 磁四极禁戒跃迁光谱参数对天体等离子体的诊断有着更为特殊的物理意义.

近年来, 对类铍离子等电子序列的磁四极  $M2\ 2s^2\ ^1S_0-2s2p\ ^3P_2$  禁戒跃迁已经有了一些实验和理论报道. Litzen 等人<sup>[1]</sup>精确测量了 B II 离子  $M2\ 2s^2\ ^1S_0-2s2p\ ^3P_2$  之间的波长和振子强度, 并从理论上进行了计算和分析. Safronova 等人<sup>[2]</sup>用相对论多体微扰(RMBPT)方法计算了类铍离子从  $n = 2$  到基态跃迁的能级间隔, Froese Fischer 等人<sup>[3]</sup>用(MCHF + BP)方法对类铍离子等电子序列( $Z = 4-12$ )的低激

发态跃迁光谱进行了分析, Kingston 等<sup>[4]</sup>应用多组态相互作用法和变分法(CIV)计算了类铍离子( $Z = 10-36$ )  $2s^2\ 2s2p$  和  $2p^2$  组态的部分能级间隔和能级寿命.

但是, 以前的工作<sup>[5]</sup>大多集中在能级间隔的测量和理论计算方面, 而对光谱的跃迁概率、振子强度等重要跃迁参数很少涉及, 况且绝大多数研究<sup>[6,7]</sup>都是针对低中等  $Z$  ( $Z \leq 29$ ) 元素, 而对高荷重离子的光谱跃迁缺乏实验和理论研究, 因此, 从理论上获得高离化类铍离子的禁戒跃迁的能级间隔、跃迁概率和振子强度等光谱参数就显得尤为重要.

本文根据相对论多组态(multi-configuration-Dirac-Fock)理论的程序 GRASP2, 系统地计算了类铍离子等电子序列的磁四极  $M2\ 2s^2\ ^1S_0-2s2p\ ^3P_2$  ( $Z = 10-103$ ) 跃迁的能级间隔、跃迁概率和振子强度, 并与最近实验结果以及其他理论值进行了比较. 结果表明: 对于低原子序数  $Z$ , 类铍离子的磁四极跃迁能级间隔接近短波紫外线区域, 跃迁概率相对较小, 而对于重离子, 类铍离子的磁四极能级间隔在真空紫

\* 国家自然科学基金(批准号: 10275056)和中国工程物理研究院基金(批准号: 20020210)资助的课题.

† E-mail: ouyang19803656@sina.com

外线区域, 跃迁概率达到  $1.064 \times 10^{10}\ s^{-1}$ , 甚至超过中性原子的电偶极  $E1$ , 很容易探测得到. 同时, 希望我们的计算结果能弥补现阶段实验和理论数据的不足.

## 2. 计算方法

有关全相对论的多组态 MCDF 方法, 在文献 [8] 中已有详细的描述, 这里仅作扼要的介绍. 在多组态 Dirac-Fock 理论中, 一个核电荷数为  $Z$ 、具有  $N$  个电子的原子或者离子体系的 Dirac-Coulomb Hamiltonian 量为(原子单位)

$$\hat{H}_i = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i + \sum_{i<j}^N |\hat{r}_i - \hat{r}_j|^{-1}, \quad (1)$$

$\hat{H}_i$  是第  $i$  电子的 Dirac-Coulomb 哈密顿量, 可表示为

$$\hat{H}_i = c\hat{\alpha} \cdot \hat{P}_i + (\beta - 1)c^2 + V_{\text{mc}}(r), \quad (2)$$

其中  $V_{\text{mc}}(r)$  为核势场,  $\hat{\alpha}$  和  $\beta$  分别为 Dirac-Fock 矢量矩阵和标量矩阵;  $\hat{P}$  是第  $i$  个电子的动量算符,  $c$  是真空中光速. 在中心力场近似下单电子的旋轨波函数可表示为

$$r|nk m\rangle = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} P_{nk}(r) \chi_{kn}(r/r) \\ iQ_{nk}(r) \chi_{-kn}(r/r) \end{bmatrix}, \quad (3)$$

式中  $k$  为 Dirac 量子数,  $P_{nk}(r)$  和  $Q_{nk}(r)$  分别为径向波函数的大小分量,  $\chi_{kn}$  为自旋波函数.  $N$  个电子体系的组态状态波函数  $|\gamma P J M\rangle$  是由上述单电子 Dirac 轨道组成的  $N$  阶 Slater 行列式的线性组合. 由于组态相互作用, 原子态波函数  $|\Gamma P J M\rangle$  是  $P, J, M$  相同的组态波函数  $|\gamma P J M\rangle$  的线性叠加, 即

$$|\Gamma P J M\rangle = \sum_{r=1}^{n_c} C_{r\Gamma} |\gamma P J M\rangle, \quad (4)$$

式中  $C_{r\Gamma}$  为组态混合系数,  $n_c$  是组态状态函数的数目, 其集合  $|\gamma P J M\rangle$  的大小,  $P, J$  和  $M$  分别表示原子的电子态的宇称、总角动量量子数和总磁量子数. 径向波函数  $P_{nk}(r), Q_{nk}(r)$  可以用自洽场方法从径向 Dirac 方程解出, 再以 Breit 修正和 QED 修正作为微扰, 即可得波函数和能量的高阶近似.

对具体的广义扩展平均能级方法, 优化加权对角哈密顿矩阵元得到能量函数

$$E_{\text{opt}} = \sum_i (2J_i + 1) H_{ii} \left[ \sum_i (2J_i + 1) \right]^{-1}, \quad (5)$$

根据含时微扰理论, 单位时间内 ( $\tau_0 = h^3/me^4$ ) 从上能态  $\beta | \gamma' J' M' \rangle$  到所有低能态  $\alpha | \gamma J \rangle$  的爱因斯坦

的跃迁概率是

$$A_{\beta \rightarrow \alpha} = 2\alpha\omega \left[ \frac{j_\alpha}{L} \right] \begin{bmatrix} j_\alpha & L & j_\beta \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{2} \end{bmatrix} |\bar{M}_{\alpha\beta}|^2, \quad (6)$$

其中  $\alpha = 4\pi^2 e^2/mc$ ;  $\omega$  为能级差  $[L] = 2L + 1$  [ ] 为  $3-j$  符号;  $L$  为不可约张量的阶.  $\bar{M}_{\alpha\beta}$  为由定义的径向积分. 从原子态  $\Gamma_i$  到  $\Gamma_j$  原子态的光谱跃迁的振子强度为

$$f_{i \rightarrow j} = \frac{\pi\epsilon}{(2L + 1)} |\langle \Gamma_i P_i J_i || \Gamma_j P_j J_j \rangle|^2, \quad (7)$$

这里  $G_L$  为规范参数. 取库仑规范  $G_L = 0$ , 对磁偶极矩  $M2$  光谱跃迁  $L = 2$ .

## 3. 计算结果和讨论

我们用带有 Breit 和 QED 修正的多组态 Dirac-Fock 平均能级 (EAL) 方法系统地计算了高离化类铍离子磁四极  $M2\ 2s^2\ 1S_0-2s2p\ 3P_2\ (Z=10-103)$  禁戒跃迁的能级间隔、跃迁概率和振子强度. 计算中, 根据组态间产生相互作用的条件:

- 1) 组态宇称相同;
- 2) 不同组态之间, 最多只能有两个电子在不同的轨道上;
- 3) 不同组态之间必须有相同的  $J$  值;
- 4) 两个组态函数间的能级间隔越大, 其组态相互作用越小.

分别选取偶宇称组态  $1s^2 2s^2, 1s^2 2p^2$  和奇宇称组态  $1s^1 2s^2 2p^1, 1s^2 2s 2p$ , 一并输入程序耦合出 14 个组态状态波函数 CSF, 进而构造原子的状态函数 ASF, 尽管  $1s^2 2s^2$  和  $1s^2 2p^2$  耦合得到的偶态 CSF, 与  $1s^1 2s^2 2p^1$  和  $1s^2 2s 2p$  耦合得到的奇态 CSF 没有非动力学组态相关, 但却存在动力学组态相关.

表 1 列出了类铍离子磁四极  $M2\ 2s^2\ 1S_0-2s2p\ 3P_2\ (Z=10-103)$  光谱跃迁 Coulomb 相互作用能, Breit 修正和 QED 修正对跃迁能级间隔  $\omega$  贡献的理论计算值以及谱线的跃迁概率  $A$  的理论计算值和其他文献的数据. Breit 修正和量子电动力学 QED 修正对总能级间隔的贡献如图 1 所示, 纵坐标表示跃迁能级的理论值的相对误差, 横坐标为核电荷数  $Z$ , 由图 1 可以看出如果只考虑 Coulomb 相互作用能时, 理论值的相对误差很大, 而且随着核电荷数的增加而逐步变大, 从类铍氦离子的 0.143% 变到锗离子的 1.12%, 考虑 Breit 修正时, 理论值的相对误差几

乎降低了 0.1 个百分点,而当全面考虑 Breit 修正和 QED 修正对能级的贡献时,理论值的相对误差降低到大约为 0.03%,这说明, Breit 相互作用能和量子电动力学效应 QED 不仅随着核电荷数的增加而增加,其对总能级间隔贡献的百分比也随着核电荷数的增加而增大.因此,对高  $Z$  元素重原子离子, Breit 修正和量子电动力学 QED 修正对原子离子的总能级间隔的贡献不能被忽略.

表 2 中,第二列至第七列给出了类铍离子磁四极  $M2\ 2s^2\ ^1S_0-2s2p\ ^3P_2$  ( $Z = 10-103$ ) 光谱跃迁的能

级间隔的理论计算值、其他文献参考值和实验数据,最后一列为振子强度,从表 2 可以看出对低中等  $Z$  ( $Z \leq 26$ ) 元素的原子离子,目前的计算结果和 FCPC<sup>[5]</sup> 以及实验结果一致,比 RMBPT<sup>[2]</sup>, MCHF + BP<sup>[3]</sup> 和 MCDF + MZ<sup>[3]</sup> 方法的计算值与实验结果都要符合好,特别是对  $Z = 10-23$  原子离子的计算,能级的计算值的相对误差均小于 0.044%;尤其是我们对类铍氦离子和氦离子的理论计算值的相对误差分别只有 0.007%, 0.0088%, 比其他的理论值(包括 FCPC 方法)都更加接近实验值;对于高电荷原子离

表 1 类铍离子磁四极  $M2\ 2s^2\ ^1S_0-2s2p\ ^3P_2$  跃迁能级间隔  $\omega$  (单位 a.u.) 和跃迁概率  $A$  的计算值(库仑规范)与其他理论值的比较(单位  $s^{-1}$ )

$Z$	库仑能	Breit	QED	$\omega$	跃迁概率 $A$		其他文献
					理论计算值	MCDF <sup>[9]</sup>	
10	0.51427	-2.9346(-4)	-3.9571(-4)	0.51358	5.72(-2)	5.745(-2)	5.76(-2) <sup>[4]</sup>
11	0.58537	-3.8045(-4)	-5.7746(-4)	0.58441	7.78(-2)		7.997(-2) <sup>[2]</sup>
12	0.65812	-4.8270(-4)	-8.1162(-4)	0.65683	1.231(-1)	1.247(-1)	1.253(-1) <sup>[4]</sup>
13	0.73298	-6.0179(-4)	-1.1065(-3)	0.73127	1.741(-1)	1.745(-1)	1.757(-1) <sup>[1]</sup>
14	0.81041	-7.3951(-4)	-1.4729(-3)	0.80819	2.413(-1)	2.427(-1)	2.410(-1) <sup>[4]</sup>
15	0.89094	-8.978(-4)	-1.9260(-3)	0.88811	3.294(-1)	3.302(-1)	
16	0.97510	-1.0789(-3)	-2.4330(-3)	0.97159	4.498(-1)	4.446(-1)	4.455(-1) <sup>[2]</sup>
17	1.06341	-1.2853(-3)	-3.0681(-3)	1.05910	5.966(-1)	5.942(-1)	
18	1.15673	-1.5195(-3)	-3.8054(-3)	1.15140	7.959(-1)	7.904(-1)	7.993(-1) <sup>[8]</sup>
19	1.25549	-1.7846(-3)	-4.6490(-3)	1.24910	1.0586	1.048	
20	1.36050	-2.0839(-3)	-5.6350(-3)	1.35280	1.4061	1.389	1.41 <sup>[2]</sup>
22	1.59235	-2.7993(-3)	-7.9859(-3)	1.58156	2.482	2.439	
23	1.72087	-3.2237(-3)	-9.4974(-3)	1.70815	3.306	3.239	
24	1.85900	-3.6983(-3)	-1.1058(-2)	1.84424	4.411	4.309	
25	2.00771	-4.2282(-3)	-1.2904(-2)	1.99058	5.903	5.751	
26	2.16803	-4.8185(-3)	-1.4821(-2)	2.14839	7.922	7.697	7.58 <sup>[2]</sup>
28	2.52279	-6.2033(-3)	-1.9377(-2)	2.50229	1.439(1)	1.392(1)	
30	2.94787	-7.9013(-3)	-2.4693(-2)	2.91528	2.651(1)	2.551(1)	
36	4.67679	-1.5446(-2)	-4.7389(-2)	4.61395	1.742(2)	1.660(2)	1.51(2) <sup>[2]</sup>
40	6.34615	-2.3184(-2)	-6.8427(-2)	6.25454	6.258(2)		
45	9.22477	-3.7023(-2)	-1.0367(-1)	9.08398	3.078(3)		
50	13.24753	-5.6913(-2)	1.5013(-1)	13.04048	1.466(4)		
54	17.51543	-7.8425(-2)	1.9663(-1)	17.24038	4.939(4)		
60	26.15391	-1.2280(-1)	-2.8457(-1)	25.74653	2.855(5)		
63	31.70439	-1.5176(-1)	-3.3779(-1)	31.21485	6.654(5)		
70	48.71962	-2.4217(-1)	-4.9928(-1)	47.97816	4.426(6)		
74	61.58290	-3.1183(-1)	-6.0875(-1)	60.66233	1.247(7)		
79	81.70564	-4.2259(-1)	-7.7371(-1)	80.50934	4.361(7)		
80	86.35135	-4.4843(-1)	-8.1079(-1)	85.09212	5.5707(7)		
83	101.70522	-5.3446(-1)	-9.3953(-1)	100.23123	1.15(8)		
90	147.25214	-7.8613(-1)	-1.28718	145.17884	5.927(8)		
92	163.24440	-8.7807(-1)	-1.4075	160.95877	9.352(8)		
100	244.34590	-1.3661	-2.0246	240.95525	5.54(9)		
103	283.43168	-1.6013	-2.3048	279.52560	1.064(10)		

符号  $\alpha(\beta)$  表示  $\alpha \times 10^\beta$ .

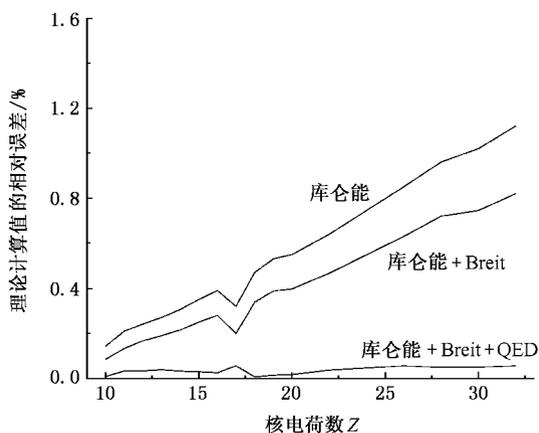


图 1 Breit 修正和 QED 修正对总能级间隔的贡献

子结果与 RMBPT 的计算值也基本一致. 对已有实验数据的离子而言, 我们的计算值的相对误差均不超过 0.06% .

理论计算值与实验值的偏差主要有以下两个方面的原因 : 1) 对于低  $Z$  元素的离子的理论与实验的较小偏差主要是由于电子关联能的影响, RMBPT 方法采用“Frozen-Core”Dirac-Fock 基计算电子组态的能量, 没有充分考虑原子实内电子产生的关联能的影响, 所以对于低  $Z$  元素的结果不如 FCPC 的计算结果精确, FCPC 方法, 是一种非相对论多组态相互作用方法, 其相对论效应用以 Breit-Pauli 算符作为一阶微扰, 相对来说, 对低  $Z$  元素能够产生更为精确的关联能, 但由于其相对论扰动处理, 对重离子的处理不是很理想. 2) 而对于高  $Z$  元素, 由于电子间的“屏蔽效应”, 不同的模型势会引起不同的 QED 关联能修正结果, MCHF + BP<sup>[3]</sup> 由于没有考虑 QED 关联能的修正, 所以与实验值符合得不是很好, 而二阶关联的 RMBPT 方法应用“Core-Hartree”势能够对量子电动力学关联进行更为完善的修正, 所以对高  $Z$  元素, RMBPT 方法与实验值更加接近.

表 2 类铍离子磁四极  $M2\ 2s^2\ ^1S_0-2s2p\ ^3P_2$  跃迁的振子强度  $g$ (库仑规范) 和能级间隔  $\omega$  与实验数据及其他理论值的比较 (单位:  $Z \leq 46$  :  $\text{cm}^{-1}$ ,  $Z \geq 47$  :  $\text{eV}$ )

$Z$	理论计算值	MCHF + BP <sup>[2]</sup>	MCDF + MZ <sup>[3]</sup>	FCPC <sup>[6]</sup>	RMBPT <sup>[2]</sup>	实验值	$g^f$
10	112714.0	112895.6		112689	112578	112704 <sup>[10]</sup>	3.30(-11)
11	128261.1	128598.8	128318		128128	128218 <sup>[11]</sup>	3.84(-11)
12	144154.2	144753.8	144306	144092	144030	144091 <sup>[12]</sup>	4.42(-11)
13	160491.7		160683		160381	160429 <sup>[13]</sup>	5.04(-11)
14	177375.8		177617	177309	177281	177318 <sup>[14]</sup>	5.71(-11)
15	194915.1		195211		194841	194856 <sup>[15]</sup>	6.45(-11)
16	213236.1		213585		213157	213182 <sup>[16]</sup>	7.28(-11)
18	252701.0				252683	252675 <sup>[17]</sup>	9.25(-11)
20	296897.6				296932	296950 <sup>[18]</sup>	1.18(-10)
22	347108.8				347198	347240 <sup>[18]</sup>	1.52(-10)
26	471512.9				471748	471780 <sup>[19]</sup>	2.62(-10)
28	549184.8					549500 <sup>[18]</sup>	3.50(-10)
30	639923.8				640207	640470 <sup>[17]</sup>	4.74(-10)
32	745593.1				746084	746280 <sup>[20]</sup>	6.48(-10)
40	1372704				1373632		2.41(-9)
42	1595504.2				1596618		3.39(-9)
47	286.092				286.279		7.882(-9)
50	354.848				355.062		1.30(-8)
54	469.13				469.386		2.505(-8)
60	700.596				700.926		6.50(-8)
63	849.396				849.736		1.03(-7)
70	1305.549				1306.155		2.902(-7)
74	1650.702				1651.298		5.118(-7)
80	2315.469				2316.178		1.163(-6)
83	2727.425				2728.459		1.73(-6)
90	3950.509				3950.874		4.25(-6)
92	4379.903				4380.198		5.46(-6)
100	6556.715				6560.257		1.444(-5)

符号  $\alpha(\beta)$  表示  $\alpha \times 10^\beta$ .



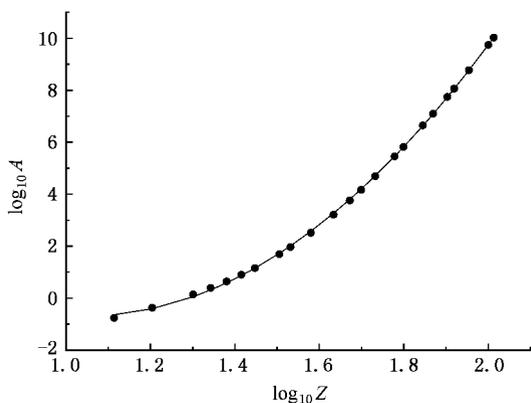


图2 类铍离子磁四极  $M2\ 2s^2\ ^1S_0-2s2p\ ^3P_2$  ( $Z = 10-103$ ) 跃迁概率  $A$  的对数  $\log_{10} A$  随核电荷数  $Z$  的对数  $\log_{10} Z$  的变化关系图 (其中对  $A$  和  $Z$  分别取常用对数)

表1同时给出了类铍离子磁四极  $M2\ 2s^2\ ^1S_0-2s2p\ ^3P_2$  跃迁的跃迁概率理论计算值和其他参考数据,从表1中可以看出目前的计算值与MCDF的结果以及其他理论数据都符合得很好,相对误差不到0.05%,另外,我们分别对类铍离子的核电荷  $Z$  和跃迁概率  $A$  取以10为底的常用对数,可以得到类铍离子磁四极  $M2\ 2s^2\ ^1S_0-2s2p\ ^3P_2$  ( $Z = 10-103$ ) 禁戒跃迁概率  $A$  的对数  $\log_{10} A$  随核电荷数  $Z$  的对数  $\log_{10} Z$  的变化关系如图2,用正交多项式方法拟合,我们可以得到如下的关系式:

$$\log_{10} A = 11.4702(\log_{10} Z)^2 - 24.0005(\log_{10} Z) + 11.8632. \quad (8)$$

图2中黑点表示类铍离子跃迁概率  $A$  的理论计算值的对数  $\log_{10} A$  随核电荷数  $Z$  的对数  $\log_{10} Z$  的变化关系,曲线表示其正交多项式的拟合曲线,由关系式(8)可知,  $\log_{10} A$  近似为  $\log_{10} Z$  的二次曲线函数.从图2和关系式(8)都可以看出类铍离子磁四极  $M2\ 2s^2\ ^1S_0-2s2p\ ^3P_2$  ( $Z = 10-103$ ) 禁戒跃迁的跃迁概率  $A$  的对数  $\log_{10} A$  随核电荷数  $Z$  的对数  $\log_{10} Z$  的增加而增加,即跃迁概率  $A$  随核电荷数  $Z$  的逐步变大而增加.

一般而言,对大多数中性原子而言,电偶极矩的跃迁概率在  $10^7-10^9\ s^{-1}$  范围内,禁戒跃迁的概率要小5个量级,即为  $10^2-10^4\ s^{-1}$ ;而且相对强度也很小,在通常实验室条件下,禁线不可能出现,只有在辐射密度和物质密度都足够小的条件下(如在气体星云和日冕的物理状态下)禁线才可能有较大的相对强度,才能观测得到;然而,对高原子序数的高荷

电离子情形则有所不同,目前的计算表明,对类铍离子磁四极  $M2$  自旋禁戒跃迁,当原子序数从10—103变化,跃迁概率从类铍氦离子的  $5.72 \times 10^{-2}\ s^{-1}$  变到类铍铪离子的  $1.064 \times 10^{10}\ s^{-1}$ ,增加至少  $10^{12}$ ,特别是类铍铪离子的跃迁概率为  $1.064 \times 10^{10}\ s^{-1}$ ,几乎和中性原子的电偶极相当.表2还给出了类铍离子磁四极  $M2$  跃迁的振子强度,令人感兴趣的是,我们对类铍离子的核电荷  $Z$  和振子强度  $gf$  也分别取以10为底的常用对数,以核电荷数  $Z$  的对数  $\log_{10} Z$  为横坐标,振子强度  $gf$  的对数  $\log_{10} gf$  为纵坐标时,可以得到与图2类似的图像如图3,同样经过拟合可以得到振子强度  $gf$  和核电荷数  $Z$  满足以下的关系式:

$$\log_{10}(gf) = 6.3371(\log_{10} Z)^2 - 13.5634(\log_{10} Z) - 3.1469. \quad (9)$$

从图3和关系式(9),我们不难发现类铍离子磁四极  $M2\ 2s^2\ ^1S_0-2s2p\ ^3P_2$  ( $Z = 10-103$ ) 禁戒跃迁的振子强度也随核电荷数的增加而增加,从类铍氦离子的  $3.306 \times 10^{-11}$  变到类铍铪离子  $1.444 \times 10^{-5}$ .

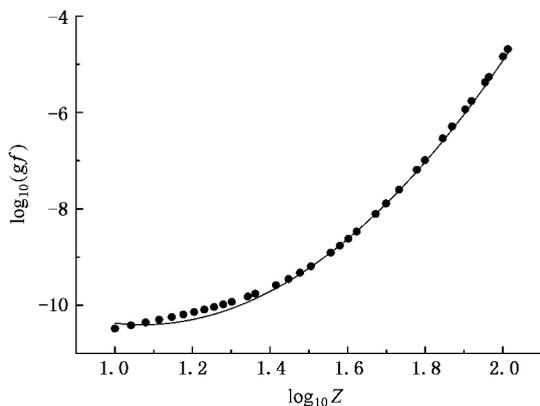


图3 类铍离子磁四极  $M2\ 2s^2\ ^1S_0-2s2p\ ^3P_2$  ( $Z = 10-103$ ) 跃迁的振子强度的对数  $\log_{10}(gf)$  随核电荷数  $Z$  的对数  $\log_{10} Z$  的变化关系图 (其中对  $gf$  和  $Z$  分别取常用对数)

## 4. 结 论

我们利用全相对论性多组态 Dirac-Fock 平均能级(EAL)方法系统地计算了高离化类铍离子的磁四极  $M2\ 2s^2\ ^1S_0-2s2p\ ^3P_2$  ( $Z = 10-103$ ) 自旋禁戒跃迁的能级间隔、跃迁概率和振子强度,并与最近实验结果以及其他理论值进行了比较,能级间隔的相对误差均不超过0.06%,跃迁概率和其他文献值也符合得很好,说明我们对组态的选取是完备和合理的,计

算结果表明 : 类铍离子的磁四极矩  $M2$  的跃迁概率和振子强度都随核电荷数的增加而增加 , 高原子序数高剥离离子的跃迁概率甚至可以和中性原子的光学允许跃迁相比拟 . 因此 , 不仅在天体等离子体中 ,

在 ICF 和 MCF 高温激光等离子体中 , 高电荷离子的磁四极  $M2$  跃迁和其他自旋禁戒跃迁( 磁偶极、电四极 ) 一样不容忽视 , 在双电子复合、不透明度、自由程等理论计算中应该考虑其影响 .

- [ 1 ] Litzen U , Ethnos T 1998 *Phys. Rev. A* **57** 2477
- [ 2 ] Safronova M S , Johnson W R , Safronova U I 1996 *Phys. Rev. A* **53** 4036
- [ 3 ] Tachiev G , Froese Fischer C 1999 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **32** 5805
- [ 4 ] Kingston A E , Hibbert A 2001 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **34** 81
- [ 5 ] Yi Y G , Zhu Z H , Tang Y J , Fu Y B 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 37 ( in Chinese ) [ 易有根、朱正和、唐永建、傅依备 2001 物理学报 **50** 47 ]
- [ 6 ] Zhu Y X , He L M , Cao W , Ge Z M 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5082 ( in Chinese ) [ 朱云霞、贺黎明、曹伟、葛自明 2005 物理学报 **54** 5082 ]
- [ 7 ] Li Q , Zhu Z H 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 102 ( in Chinese ) [ 李权、朱正和 2006 物理学报 **55** 102 ]
- [ 8 ] Grant I P 1998 *Methods in Computational Chemistry* **2** 22
- [ 9 ] Johnson P , Froese Fischer C , Trabert E 1998 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **31** 3497
- [ 10 ] Kelly R L 1987 *J. Phys. Chem. Ref. Data* ( Suppl ) **1**
- [ 11 ] Martin W C , Zalubas R 1981 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **10** 153
- [ 12 ] Martin W C , Zalubas R 1980 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **9** 1
- [ 13 ] Martin W C , Zalubas R 1979 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **8** 817
- [ 14 ] Martin W C , Zalubas R 1983 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **12** 323
- [ 15 ] Martin W C , Zalubas R , Musgrove A 1985 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **14** 751
- [ 16 ] Martin W C , Zalubas R , Musgrove A 1990 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **19** 821
- [ 17 ] Edlen B 1983 *Physica. Scripta* **28** 51
- [ 18 ] Sugar J , Corliss C 1985 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **14** ( Suppl ) 2
- [ 19 ] Shirai T , Funatake Y , Mori K , Sugar J , Wiese W L , Nakai Y 1990 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **19** 127
- [ 20 ] Sugar J , Musgrove A 1993 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **22** 1213

# Magnetic quadrupole $M2\ 2s^2\ ^1S_0 \rightarrow 2s2p\ ^3P_2$ ( $Z = 10\text{—}103$ ) transitions for Be-like ions<sup>\*</sup>

Ouyang Yong-Zhong<sup>1)†</sup> Yi You-Gen<sup>1)‡</sup> Zhu Zheng-He<sup>2)</sup> Zheng Zhi-Jian<sup>3)</sup>

<sup>1)</sup> *Institute of Physical Science and Technology, Central South University, Changsha 410083, China*

<sup>2)</sup> *Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610065, China*

<sup>3)</sup> *National Key Laboratory of Laser Fusion, CAEP, Mianyang 621900, China*

(Received 2 November 2006; revised manuscript received 9 November 2006)

## Abstract

A full relativistic multi-configuration Dirac-Fock theory with quantum electrodynamical (QED) effect and Breit corrections is used to calculate the magnetic quadrupole  $M2\ 2s^2\ ^1S_0 \rightarrow 2s2p\ ^3P_2$  ( $Z = 10\text{—}103$ ) transition energy level, transition probabilities and oscillator strengths for Be-like ions for the first time. The results with Breit and QED corrections included are in good agreements with current experimental data and other theoretical values. The results show that the magnetic quadrupole transition probabilities of highly ionized atoms are comparable with those of neutral atomic allowed transitions and cannot be ignored in the laser plasma of high temperatures in ICF and MCF fusions. The effect of the magnetic quadrupole transition of highly ionized atoms should be considered in the calculation of dielectronic recombination process, opacity, free path and so on.

**Keywords:** magnetic quadrupole transition, transition energy level, transition probability, oscillator strength

**PACC:** 3130, 3270C, 3270F

<sup>\*</sup> Project supported by the Major Program of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10275056) and the Science Foundation of China Academy of Engineering Physics, China (Grant No. 20020210).

<sup>†</sup> E-mail: ouyang19803656@sina.com