

类钾离子 $4s^2S_{1/2}—3d^2D_{3/2}$ 电四极矩 E2 光谱跃迁的理论研究*

杨富利^{1)†} 易有根²⁾

1) 西藏大学农牧学院, 西藏 860000)

2) 中南大学物理科学与技术学院, 长沙 410083)

(2007 年 4 月 29 日收到, 2007 年 7 月 4 日收到修改稿)

采用全相对论量子力学 GRASP² 程序, 广义平均能级 EAL 模型, 在核的有限体积效应, Breit 和 QED 效应的高阶扰动基础上, 考虑到原子实的极化, 系统地计算了高剥离类钾离子 $4s^2S_{1/2}—3d^2D_{3/2}$ 电四极矩 E2 光谱跃迁的能级间隔, 跃迁概率和振子强度. 结果表明, 考虑原子实极化效应后, 计算的精细能级结构间隔与实验数据之间的系统误差基本消除, 其跃迁概率和振子强度属首次报道.

关键词: 高剥离态, 能级间隔, 振子强度

PACC: 3320, 3207, 3200, 3000

1. 引 言

高剥离态离子谱学是研究原子结构、高温等离子体中的原子过程及等离子体诊断技术的基础, 其离子的发射光谱特性可用来推断高温等离子体的电子温度、电子密度和电离度, 故而在惯性约束聚变 ICF, 磁约束聚变 MCF, X 射线激光和天体物理领域有很重要的应用价值^[1, 2]. 同时等离子体的模拟需要提供高精度的原子结构参数, 因此, 很有必要从理论上给出十分准确的光谱的能级间隔, 跃迁概率和振子强度.

电四偶极矩 E2 跃迁是高剥离态离子谱学一类特别重要的禁戒跃迁, 曾一直引起天体物理学家和实验物理学家的广泛关注. 由于电四偶极矩 E2 跃迁的探测难度极高, 故对此种禁戒跃迁的报道是极其有限的, 但这些跃迁经常被用来分析太阳冕区的 X 射线光谱分析和原子的束箔光谱学处理, Shirai 等^[3]曾在托卡马克装置的等离子体中观察到了中等 Z 类钾锰离子光谱, Sugar 等^[4]曾用激光打靶的方法在高温激光等离子体中测量到了类钾锌离子 $4s—3d$ 跃迁. 最近, Godefroid^[2]在托卡马克装置中观察到

了高剥离类钾离子的电四偶极矩 E2 光谱跃迁, Kaufman 采用 Hartree-Fock 方法对类钾离子光谱进行过理论计算, 计算结果和实验之间符合得较好, 但文献中并未给出相应的跃迁概率和振子强度.

本文采用原子结构的相对论多组态方法, 考虑原子实的极化, 对类钾离子 $4s^2S_{1/2}—3d^2D_{3/2}$ 电四极矩 E2 光谱跃迁的能级间隔、跃迁概率和振子强度进行了较为系统的理论计算, 计算得到的能级间隔与实验观察值符合得很好, 优于用 HF 方法^[2]的计算结果, 同时还首次较为系统地给出了与之相对应的跃迁概率和振子强度.

2. 理论方法

在相对论多组态 Dirac-Fock 理论中^[5-11], N 电子原子或离子体系的 Hamiltonian 量为

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

第 i 个电子的 Dirac-Coulomb Hamiltonian 量, 它由下式给出:

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

式中 $V_{\text{nucl}}(r)$ 是核势场, $\hat{\alpha}$ 和 $\hat{\beta}$ 分别是 Dirac-Fock 矢

* 国家自然科学基金(批准号: 10275056), 湖南省自然科学基金(批准号: 03JJY6003)和湖南省首批新世纪 121 人才工程基金资助的课题.

† E-mail: yf0093@sina.com

量和标量矩阵, \hat{P}_i 是相对论宇称算符, c 是真空中光速。

多组态 Dirac-Fock 方法(GRASP² 1992 程序)是常用的计算原子结构的相对论量子力学方法,它能以完全相对论的手段来处理静电和旋轨相互作用, Laughlin 等^[5]采用库仑近似和实极化的模型势方法首次引入原子实极化势计算了类碱等电子系列的高精度原子跃迁概率, Stanek 等^[6]采用 MCDF + CP 或 CIDF + CP 计算了类镁等电子序列 $3s^2\ ^1S_0-3s3p\ ^1P_1, ^3P_1$ 光谱跃迁的精确的跃迁概率和振子强度。作为一种重要的物理效应,外层电子引起的原子实电子轨道的极化,对价电子产生一种附加的光学势,从而导致能级的移动,在标准的哈密顿方程中(GRASP² 1992 程序包)通常被人们忽视了。本文引入一种新的光学势到 Dirac-Coulomb Hamiltonian 量中,

$$V_{\text{pol}} = -\frac{\alpha_1}{r^4} \left(1 - e^{-\left(\frac{r}{r_{\text{cut}}}\right)^6} \right), \quad (3)$$

α_1 是半经验偶极极化率参数, r_{cut} 是半经验电子截断半径参数,它们分别与相应光谱跃迁的能级间隔和与之相关波函数有关。

考虑到能量函数和径向波函数有关,得到了相对论自洽场方程如下:

$$\frac{dP_a}{dr} + \kappa_a \frac{P_a}{r} - \left(2c - \frac{\epsilon_a}{c} + \frac{Y_a}{cr} \right) Q_a = -\frac{\chi_a^{(P)}}{r},$$

$$\frac{dQ_a}{dr} - \kappa_a \frac{Q_a}{r} + \left(-\frac{\epsilon_a}{c} + \frac{Y_a}{cr} \right) P_a = -\frac{\chi_a^{(Q)}}{r}. \quad (4)$$

径向波函数 $P_{\text{nk}}(r)$ 和 $Q_{\text{nk}}(r)$ 可以用自洽场迭代方法通过求解径向 Dirac 方程得到,以 Breit 修正和量子电动力学效应修正(包含自能和真空极化能)作为微扰,可得到能量和波函数的高阶近似。

对具体的平均能级 EAL 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 $b | \gamma' J' M'$ 到所有低能态 $a | \gamma J$ 的爱因斯坦自发辐射的跃迁概率是

$$A_{b \rightarrow a} = 2\alpha\omega \left[\frac{j_a}{L} \right] \left(\frac{j_a}{2} \quad L \quad j_b \right) \left(\frac{1}{2} \quad 0 \quad -\frac{1}{2} \right) | \bar{M}_{ab} |^2. \quad (6)$$

单位时间内从原子态 Γ_i 到 Γ_j 原子态的光谱线跃迁的振子强度是

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

这里 $\alpha = 4\pi^2 e^2/mc$, ω 是能级差 $[L] = 2L + 1$, $\left(\begin{matrix} L \\ j_a \quad j_b \end{matrix} \right)$ 是 $3-j$ 符号, L 是不可约张量的阶, $\hat{O}^{(L)}$ 是多级辐射场 L 阶算符, \bar{M}_{ab} 是由 Grant 定义的径向积分^[12], 对电四极矩 E2 光谱跃迁,取 $L = 2$ 。

3. 计算结果与讨论

本文根据上述相对论多组态理论,考虑到原子实的极化,采用相对论原子结构程序 GRASP2 (General-purpose Relativistic Atomic Structure Program 2) 并选取 Fermi 有限核电荷分布模型和扩展平均能级 EAL 近似进行了计算。计算中除根据宇称、角动量、能量等判据外,还以 Breit 修正,自能修正和真空极化修正为微扰,得到了波函数和能级的高阶近似。表 1 中列出了类钾离子 $4s^2S_{1/2}-3d^2D_{3/2}$ 电四极矩 E2 光谱跃迁的能级间隔 ω , 跃迁概率值 A , 振子强度 gf 值,偶极极化率 α_1 和半经验电子截断半径 r_{cut} 等计算参数值。

表 1 类钾离子电四极矩 E2 $4s^2S_{1/2}-3d^2D_{3/2}$ 跃迁的能级间隔, 跃迁概率和振子强度值(表中圆括号(n)表示 10^n)

Z	ω/cm^{-1}	A/s^{-1}	gf	α_1	r_{cut}
22	384	6.101(-4)	3.724(-8)	0.6680	0.5
23	602	2.353(-3)	5.841(-8)	0.7258	0.5
24	940	8.969(-3)	9.122(-8)	4.49	1.4
25	1338	2.582(-2)	1.297(-7)	0.4	0.6705
26	1836	6.669(-2)	1.780(-7)	0.3626	0.5654
29	4060	7.215(-1)	3.936(-7)	0.4356	0.5
30	5095	1.4255	4.939(-7)	0.4479	0.5
31	6308	2.7044	6.114(-7)	0.4548	0.5
32	7714	4.9463	7.476(-7)	0.4591	0.5
33	9337	8.7700	9.048(-7)	0.4614	0.5
34	11193	1.510(1)	1.084(-6)	0.4627	0.5
35	13306	2.537(1)	1.289(-6)	0.4627	0.5
36	15694	4.162(1)	1.520(-6)	0.4621	0.5
37	18384	6.689(1)	1.780(-6)	0.4604	0.5
38	21399	1.054(2)	2.072(-6)	0.4575	0.5
39	24765	1.634(2)	2.397(-6)	0.4529	0.5
40	28505	2.492(2)	2.759(-6)	0.4470	0.5
41	32645	3.742(2)	3.159(-6)	0.4396	0.5
42	37213	5.543(2)	3.600(-6)	0.4305	0.5

为便于比较,表2中列出了类钾离子 $4s^2S_{1/2}-$

表 2 类钾离子电四极矩 $E2\ 4s\ ^2S_{1/2} - 3d\ ^2D_{3/2}$ 跃迁能级间隔和实验数据及其他理论值的比较/nm

离子	Z	计算值		实验值 ^[2]
		本工作	文献 [2]	
Ti ³⁺	22	384		384(±10)
V ⁴⁺	23	602		602(±10)
Cu ⁵⁺	24	940		940(±10) ^[16]
Mn ⁶⁺	25	1338		1338(±10) ^[3]
Fe ⁷⁺	26	1836		1836(±10) ^[14]
Cu ¹⁰⁺	29	4060	4028(32)	4060(±5) ^[15]
Zn ¹¹⁺	30	5095	5061(34)	5095(±5) ^[4]
Ga ¹²⁺	31	6308	6270(38)	6308(±10)
Ge ¹³⁺	32	7714	7674(40)	7714(±5)
As ¹⁴⁺	33	9337	9298(39)	9337(±10)
Se ¹⁵⁺	34	11193	11153(40)	11193(±10)
Br ¹⁶⁺	35	13306	13267(39)	13306(±10)
Kr ¹⁷⁺	36	15694	15658(36)	15694(±10) ^[17]
Rh ¹⁸⁺	37	18384	18361(23)	18384(±10)
Sr ¹⁹⁺	38	21399	21376(23)	21399(±10)
Y ²⁰⁺	39	24765	24751(5)	24765(±10)
Zr ²¹⁺	40	28505	28505(0)	28505(±4)
Nb ²²⁺	41	32645	32688(-43)	32645(±10)
Mo ²³⁺	42	37212	37260(-48)	37212(±4) ^[18]

$3d\ ^2D_{3/2}$ 电四极矩 $E2\ (Z = 22-42)$ 光谱跃迁的能级间隔的理论计算值和一些有关的实验值和参考数据, 表中文献计算值为 Godefroid 等^[2]用多组态 Hartree-Fock 程序方法的计算结果, 实验能级间隔取自文献 [2, 13-18], 能级间隔计算值右侧圆括号内的数值表示该实验值与计算值之差, 单位为 cm^{-1} , 本文采用 GRASP2 对跃迁能级间隔进行了计算, 由于

GRASP2 更全面地考虑了量子电动力学修正, 使得其计算结果更接近实验值, 比 Godefroid 等的计算结果有了很大改善. 从表 2 中可以看出对中等 Z 和高 Z 值 ($Z < 42$) 元素的原子离子, 由于计算结果考虑到了原子实的极化, 量子电动力学 QED 高阶修正, 使得其计算结果比 MCHF 的计算结果^[2]要好, 和实验值及参考数据更加接近, 显然, 考虑到原子实极化后, 计算结果在一定程度上得到了很大程度地改善. 目前的计算结果而对于所有实验数据高荷电原子离子而言, 理论和实验之间的误差已基本消除.

4. 结 论

我们用全相对论多组态 Dirac-Fock 广义平均能级 (MCDF-EAL) 方法, 考虑了原子实的极化, 核的有限体积效应, Breit 和 QED 效应的高阶扰动, 系统地计算了高剥离类钾离子 $4s\ ^2S - 3d\ ^2D\ (Z = 22-42)$ 等电子序列电四极矩 E2 光谱跃迁的能级间隔, 跃迁概率和振子强度. 计算结果表明: 一般情况下, 偶极极化率随原子系数的增加而减小, 当原子系数增大时, 原子实的结合力变大, 在外场作用下, 较重原子的原子实很难扭曲, 因此, 偶极极化率有减小的趋势. 考虑到原子实极化效应后, 计算的精细能级结构间隔与实验数据之间的误差已基本消除, 计算结果和最近文献的实验值及理论计算值符合得很好, 首次精确报道了类钾离子 $4s\ ^2S - 3d\ ^2D\ (Z = 22-42)$ 磁偶极矩 M_1 光谱跃迁的跃迁概率和振子强度. 从计算精细结构的能级间隔来看, 我们推求的计算结果应该是精确可靠的. 同时也说明考虑原子实的极化效应后, 对精确计算原子结构能级和光谱参数是一种行之有效的途径.

- [1] Martinson I 1989 *Rep. Prog. Phys.* **52** 157
 [2] Godefroid M 1985 *Physica Scripta* **32** 125
 [3] Shirai T, Nakagaki T 1994 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **23** 179
 [4] Sugar J, Musgrove A 1995 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **24** 1803
 [5] Laughlin C 1992 *Physica Scripta* **45** 238
 [6] Stanek M, Glowacki L, Migdalek J *et al* 1996 *J. Phys. B* **29** 2985
 [7] Cheng K, Zhu Z Y, Zhu Z H 2005 *Journal of Optical Physics Sinica* **25** 1585 (in Chinese) [程科, 朱志艳, 朱正和 2005 光学学报 **25** 1585]
 [8] Zhu Z H, Murrell J N 1996 *Journal of Atomic and Molecular Physics* **13** 119 (in Chinese) [朱正和, 卞 J N 1996 原子与分子物理学报 **13** 119]

- [9] Grant I P, Mckerzie B J, Norrington P H, Mayers D F, Pyper N C 1980 *Comput. Phys. Commun.* **21** 207
 [10] Mckenzie B J, Grant I P, Norrington P H 1980 *Comput. Phys. Commun.* **21** 233
 [11] Dyall K G, Grant I P, Johnson C T, Parpia F A, Plummer E P 1989 *Comput. Phys. Commun.* **55** 425
 [12] Grant I P 1974 *J. Phys. B* **7** 1458
 [13] Kaufman V, Martin W C 1993 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **22** 279
 [14] Shirai T, Funatake Y 1990 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **19** 127
 [15] Sugar J, Kaufman V, Indelicato P 1989 *J. Opt. Soc. Am.* **6** 1437

- [16] Sugar J , Musgrove A 1993 *J. Phys. Chem. Ref. Data* . **22** 1279 [18] Denne B , Magyar G , Jacquinot J 1989 *Phys. Rev. A* **40** 3702
 [17] Denne B , Hinnov E 1989 *Phys. Rev.* **40** 1488

Electric quadrupole transitions of K-like ions ($Z = 22—42$)^{*}

Yang Fu-Li^{1)†} Yi You-Gen²⁾

¹⁾ *Tibet Agriculture and Animal Husbandry College , Tibet 860000 , China*)

²⁾ *Physics School of Science and Technology , Central South University , Changsha 410083 , China*)

(Received 29 April 2007 ; revised manuscript received 4 July 2007)

Abstract

A fully relativistic multiconfiguration Dirac-Fock method with Breit and QED corrections is used to calculate the $4s^2S - 3d^2D$ ($Z = 22—42$) transition energy level separations , transition probabilities and oscillator strengths for the K-like ions. In the calculation , we have considered the significant Breit and QED corrections. The results are in good agreements with recent experimental data and other theoretical values. The results show that the electric quadrupole transition probabilities are in correspondence with these of E1 transitions and can not be ignored in the laser plasma of high temperature in ICF and MCF Fusion.

Keywords : highly stripped ion , transition probability , oscillator strength

PACC : 3320 , 3207 , 3200 , 3000

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10275056) , the Natural Science Foundation of Hunan Province of China (Grant No. 03JJY6003) , and the New Century Trained Personnel Engineering of Hunan Province of China.

[†] E-mail : yfl0093@sina.com