

硼原(离)子内壳激发高自旋态能级和辐射跃迁

钱新宇 孙言 刘冬冬 胡峰 樊秋波 苟秉聪

Energy levels and radiative transitions of the core-excited high-spin states in boron atom (ion)

Qian Xin-Yu Sun Yan Liu Dong-Dong Hu Feng Fan Qiu-Bo Gou Bing-Cong

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, **66**, 123101 (2017) DOI: 10.7498/aps.66.123101

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.123101>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2017/V66/I12>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

O₂ 分子 B³Σ_g⁻-态势能曲线的从头计算

Ab initio calculation of the potential curve of B³Σ_g⁻ state of O₂

物理学报.2017, 66(10): 103101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.103101>

基于 ab initio 计算的 CF-离子低激发态光谱性质研究

Spectroscopic properties of low-lying excited electronic states for CF anion based on ab initio calculation

物理学报.2017, 66(2): 023101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.023101>

SO 分子最低两个电子态振-转谱的显关联多参考组态相互作用计算

Calculations on rovibrational spectra of two lowest electronic states in sulfur monoxide molecule by explicitly correlated approach

物理学报.2016, 65(16): 163101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.163101>

β 石墨炔衍生物结构稳定性及电子结构的密度泛函理论研究

Density functional theory study of structure stability and electronic structures of β graphyne derivatives

物理学报.2016, 65(13): 133101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.133101>

高温条件下 Ga₃PO₇ 晶体热学及声表面波性质的理论研究

Theoretical study on thermal and acoustic surface wave properties of Ga₃PO₇ crystal at high temperature

物理学报.2016, 65(11): 113101 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.65.113101>

硼原(离)子内壳激发高自旋态能级和辐射跃迁*

钱新宇¹⁾ 孙言^{1)†} 刘冬冬¹⁾ 胡峰¹⁾ 樊秋波¹⁾ 苟秉聪²⁾

1)(徐州工程学院数学与物理科学学院, 徐州 221018)

2)(北京理工大学物理学院, 北京 100081)

(2016年11月25日收到; 2017年4月18日收到修改稿)

采用Rayleigh-Ritz变分方法计算了B原子(离子)内壳层激发高自旋态($^{4,5,6}L, L = S, P$)里德伯系列的能量和精细结构劈裂, 利用截断变分方法改进非相对论能量, 并利用一阶微扰理论计算了相对论能量修正和质量极化效应修正, 利用屏蔽的类氢公式计算了量子电动力学效应和高阶相对论效应, 从而得到了高精度的组态能量. 利用精确计算的波函数, 计算了这些高自旋态的电偶极辐射跃迁波长、振子强度和辐射跃迁概率. 通过长度规范和速度规范计算的振子强度的一致性证明了本文计算的波函数是精确的. 相比其他理论计算结果, 本文计算的高自旋态的能级及跃迁波长数据与实验数据符合得更好. 对于一些高位的内壳层激发高自旋态, 相关的能级和跃迁数据为首次报道, 本文的计算结果对相关实验光谱谱线标定具有重要意义.

关键词: 高自旋态, 精细结构, 辐射跃迁, 振子强度

PACS: 31.15.A-, 31.15.ac, 31.10.+z, 32.30.-r

DOI: 10.7498/aps.66.123101

1 引言

硼原子(离子)内壳层激发高自旋态位于多重电离阈之上, 在狭窄的区间内具有多个能级分布, 能级态密度高, 电子关联效应复杂, 且硼原子核外电子数相对较少, 是研究原子内壳激发态的理想体系, 对其内壳层激发态的研究对原子分子相关理论发展具有重要学术意义. 此外, 硼原子(离子)高自旋态具有较长的能级寿命, 其光谱对高温等离子体诊断、天体物理谱线鉴定、软X射线激光^[1-3]等领域都具有较高的应用价值. 对于B原子(离子)内壳层激发高自旋态, 由于不能满足俄歇跃迁的自旋和角动量守恒定则, 其自电离化跃迁过程是禁戒的. 这些高自旋态通常具有较长的寿命, 在实验中能够充分积累, 能够很容易地观测到其辐射跃迁光谱线. 最早的测量实验是Martinson等^[4]利用束箔实验技术标定了位于1701 Å, 其来源的谱线来源于B²⁺离子四重态

1s2s2p ⁴P^o—1s2p² ⁴P^e的辐射跃迁. 随着束箔实验分辨率的提高, 陆续报道了一些相关的实验数据. 1984年, Agentoft等^[5,6]和Chung等^[7]测量了类锂B²⁺离子高自旋态2p³ ⁴S^o和1s2lnl (⁴L, ²L)的辐射跃迁光谱线. Baudinet-Robinet等^[8,9]测量了B²⁺离子287—2000 Å范围内的光谱线, 并标定了其中的22条谱线来自于B²⁺离子内壳层激发四重态, 5条谱线来自于B²⁺离子内壳层激发二重态. 1986年, Mannervik等^[10]进一步测量并标定B²⁺离子四重态1s2s2p ⁴P^o—1s2p² ⁴P^e的跃迁光谱线位于1702.1 Å, 并首次报道了1s2s3s ⁴S—1s2s3p ⁴P^o跃迁的波长. 之后, Mannervik等^[11]进一步报道了B⁺离子五重态1s2s2p² ⁵P^o—1s2p³ ⁵S^o跃迁波长((1323.92 ± 0.07) Å)和跃迁寿命, 精确度与Martinson等^[4]的实验数据精度相比大大提高. 利用双激光产生等离子体技术, Jannitti等^[12]和Lynam等^[13]分别测量了B²⁺离子和B⁺离子内壳层激发二重态的吸收光谱线. 最近, Ryabtsev等^[14]

* 国家自然科学基金青年基金(批准号: 11604284)和国家自然科学基金(批准号: 11474020)资助的课题.

† 通信作者. E-mail: suenyangu@163.com

和 Kramida 等 [15,16] 利用高分辨率的束箔实验技术测量了 B 原子 (离子) 的辐射跃迁光谱, 并报道了 50 条新观测的光谱线. Fuhr 和 Wiese [17] 综合整理并分类了 B 原子 (离子) 的辐射光谱跃迁数据, 涵盖了 1400 多个允许跃迁和禁戒跃迁. NIST (National Institute of Standards and Technology) 数据库的 B²⁺ 离子内壳层激发态的相关参考数据多数来自文献 [16, 17]. 2014 年, Müller 等 [18] 利用合并光子-离子束技术测量了 B⁺ 离子的 K 壳层光电离截面, 对应的内壳层激发态包括 1s2s2p² 3L (L = P, D), 1s2p³ 1P^o, 1s2s²np (n = 2—4) 1P^o 和 1s2s3p² 3D.

理论方面, Beck 和 Nicolaides [19] 最早使用 FOTOS (first-order theory of oscillator strengths) 方法计算了 B⁺ 离子内壳层激发五重态的组态能级和 1s2s2p² 5P—1s2p³ 5S^o 跃迁概率. Chung 等 [7] 及 Gou 和 Deng [20] 利用多组态的 Rayleigh-Ritz 变分方法计算了 B²⁺ 离子内壳层激发四重态的能级和辐射跃迁波长, 并对实验中的光谱线进行标定. 利用同样的理论方法, Yang 和 Chung [21] 及 Gou 和 Wang [22] 计算了 B⁺ 离子内壳层激发五重态 1s2s2pnp 5P^e 和 1s2p²np 5S^o 的能级、精细结构和辐射跃迁数据. 之后, 一些理论工作者采用全实加关联 (FCPC) 方法 [23,24]、鞍点变分方法 [25]、多组态 Hartree-Fock (MCHF) 方法 [11]、多组态 Dirac-Fock 方法 [26] 和 Hylleraas 方法 [27] 对 B 原子 (离子) 内壳层激发高自旋态能级、精细结构、辐射跃迁概率、辐射跃迁寿命等进行了计算, 得到了与实验符合较好的结果. 目前, 虽然人们对硼原子 (离子) 的内壳层激发态开展了相关研究, 得到了一些比较精确的理论和实验数据. 然而, 研究主要集中在 B²⁺ 离子四重态体系. 由于复杂的电子关联效应和计算过程的不稳定性, B 原子 (离子) 内壳层激发五重态和六重态的相关理论数据还很少. 由于缺乏精确的理论计算数据, 也限制了相关实验的开展和实验光谱线的标定.

本文采用多组态相互作用 Rayleigh-Ritz 变分方法, 利用截断变分方法饱和波函数空间, 在考虑了相对论修正、质量极化效应、量子电动力学 (QED) 效应和高阶相对论效应的基础上, 计算了硼原子 (离子) 内壳层激发高自旋态里德伯系列激发态的能级、精细结构劈裂、辐射跃迁振子强度、辐射跃迁概率、辐射跃迁波长. 相比文献中的理论数据,

本文的计算结果与实验符合得更好. 本文的理论计算结果对相关的光谱实验研究是有意义的.

2 理论方法

在 LS 表象下, 具有 N 个电子的原子体系的非相对论哈密顿算符为

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{\substack{i,j=1, \\ i < j}}^N \frac{1}{r_{ij}}, \quad (1)$$

其中, r_i 表示第 i 个电子与原子核之间的距离, r_{ij} 表示第 i 个电子和第 j 个电子之间的距离, Z 为核电荷数.

闭通道的波函数可利用径向波函数与轨道的角动量和自旋波函数乘积作为基函数展开, 波函数形式如下:

$$\begin{aligned} \psi_b(1, 2, \dots, N) \\ = A \sum_i^N C_i \varphi_{n(i), l(i)}(R) Y_{l(i)}^{LM}(\Omega) \chi_{ss_z}, \end{aligned} \quad (2)$$

其中, A 为反对称算符, C_i 为线性参数, $\varphi_{n(i), l(i)}$ 代表径向波函数, $Y_{l(i)}^{LM}$ 代表轨道角动量波函数, R 代表径向部分, Ω 代表轨道角动量部分, χ_{ss_z} 为自旋波函数. 径向部分采用 Slater 基函数进行展开,

$$\varphi_{n(i), l(i)} = \prod_{j=1}^N r_j^{n_j} \exp(-\alpha_j r_j), \quad (3)$$

其中, α_j 为每个电子对应的非线性参数.

在计算中, 基于 Rayleigh-Ritz 变分方法 [28,29], 利用 (2) 式的波函数对 (1) 式哈密顿算符求期望值的极小值, 得到组态非相对论能量的计算公式如下:

$$\delta E_b = \delta \langle H_0 \rangle = \delta \frac{\langle \psi_b | H_0 | \psi_b \rangle}{\langle \psi_b | \psi_b \rangle}. \quad (4)$$

在 (4) 式中, 利用 Rayleigh-Ritz 变分对非线性参数集 $\{\alpha_j\}$ 及线性参数 C_i 优化能量极小, 从而得到组态的非相对论能量 E_b .

为了进一步饱和束缚空间, 获得高精度的非相对论能量, 本文采用截断变分 [18] 方法对非相对论能量进行修正. 经过截断变分修正后得到的总波函数为

$$\psi = D_0 \psi_b(1, 2, \dots, N) + \psi_2(1, 2, \dots, N), \quad (5)$$

其中,

$$\psi_2(1, 2, \dots, N) = \sum_{i=1}^I D_i \varphi_{n(i), l(i)}(1, 2, \dots, N), \quad (6)$$

其中, D_0, D_i 为线性参数; I 为所添加的进行截断变分的角动量-自旋分波数目. 在截断变分的计算过程中, ψ_b 的非线性参数保持不变, 对 ψ_2 中的每个非线性参数进行优化.

为了进一步获得更高精度的能量, 还需要考虑相对论修正和质量极化效应的影响. 在本文中, 利用一阶微扰理论对相对论修正和质量极化效应进行计算. 质量极化算符为 H_{mp} . 相对论修正算符包括动能修正项 H_k 、达尔文项 H_D 、电子和电子相互作用项 H_{ee} 以及轨道和轨道相互作用项 H_{oo} . 这些算符在文献 [30] 中有详细描述, 这里不再赘述.

于是, 相对论能量修正为

$$\Delta E_{rel} = \langle \psi_b | H_k + H_D + H_{ee} + H_{oo} | \psi_b \rangle, \quad (7)$$

质量极化修正为

$$\Delta E_{mp} = \langle \psi_b | H_{mp} | \psi_b \rangle. \quad (8)$$

利用屏蔽的类氢公式 [31], 本文还考虑 QED 效应和高阶相对论效应对组态能量的修正 ΔE_{Q+H} . 对于 QED 效应和高阶相对论效应的修正在文献 [32] 中有详细讨论, 这里不再展开.

通过对非相对论能量、截断变分能量、相对论修正、质量极化效应、QED 和高阶相对论效应修正求和, 得到组态总能量为

$$E_{total} = E_b + \Delta E_{RV} + \Delta E_{mp} + \Delta E_{rel} + \Delta E_{Q+H}. \quad (9)$$

在 Pauli-Breit 相对论近似下, 精细结构的能量微扰算符为 [33]

$$H_{FS} = H_{SO} + H_{SOO} + H_{SS},$$

其中

$$H_{SO} = \frac{Z}{2c^2} \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{l}_i \cdot \mathbf{s}_i}{r_i^3} \quad (10)$$

(自旋与轨道相互作用),

$$H_{SOO} = -\frac{1}{2c^2} \sum_{\substack{i,j=1, \\ i \neq j}}^N \left[\frac{1}{r_{ij}^3} (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \times \mathbf{p}_i \right] \cdot (\mathbf{s}_i + 2\mathbf{s}_j) \quad (11)$$

(自旋与其他轨道相互作用),

$$H_{SS} = -\frac{1}{c^2} \sum_{\substack{i,j=1, \\ i \neq j}}^N \frac{1}{r_{ij}^3} \left[\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - \frac{3(\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{r}_{ij})(\mathbf{s}_j \cdot \mathbf{r}_{ij})}{r_{ij}^2} \right]$$

$$(自旋与自旋相互作用), \quad (12)$$

式中 $\mathbf{l}_i, \mathbf{s}_i$ 分别为第 i 个电子的轨道和自旋角动量; \mathbf{p}_i 为第 i 个电子的动量; c 为光速.

3 结果与讨论

本文采用多组态 Rayleigh-Ritz 变分方法计算了硼原子(离子)内壳层激发高自旋态的能级和精细结构劈裂. 硼原子(离子)内壳高位激发态是一个复杂的多电子系统, 电子关联效应十分复杂, 要获得精确的理论计算数据, 如何选取高精度的波函数是关键. 本文计算中采用多组态相互作用的基函数来考虑电子关联效应, 其中每个基函数采用 Slater 型径向波函数与轨道角动量和自旋角动量波函数的乘积构成. 轨道角动量和自旋角动量关联效应通过在试探波函数里添加适当的轨道角动量和自旋角动量分波来考虑. 描述电子径向波函数的 Slater 型函数的非线性参数在变分过程中通过优化能量极小获得. 为了保证重要的角动量-自旋分波不被遗漏, 并且能够充分考虑组态相互作用, 本文根据能量相近、宇称相同、具有相同的 L 和 S 量子数的组态相互作用定则来选取轨道-自旋角动量组态分波. 例如, 对于 $1s2s3s \ ^4S$ 内壳层激发四重态, 重要的轨道角动量分波 $[l_1, l_2, l_3]$ 为 $[0, l, l]$ ($l = 1-7$), $[1, l, l+1]$ ($l = 1-3$), $[2, 2, 2]$, $[2, 2, 4]$ 等. 每个分波电子主量子数 n 的大小根据增大 n 所引起的总能量变化来确定, 当增大 n 时, 若对总能量的贡献小于 1×10^{-7} a.u. 则停止增加, 从而保证重要的轨道-自旋角动量组态分波的组态相互作用能够被充分考虑. 表 1 列出了本文计算的 B 原子(离子)各内壳层激发高自旋态重要的角动量系列分波. 高自旋态的自旋角动量波函数, 只有一种耦合方式, 而轨道角动量的耦合方式则有多种, 在计算过程中, 需要考虑到每一种可能的耦合方式, 将轨道角动量波函数和自旋波函数相乘组成各分波的轨道-自旋角动量波函数. 为了尽可能的提高精确度, 波函数构建时选取大的基函数, 对于某些组态, 轨道-自旋角动量组态分波的数目达到 78, 其 Slater 基函数的数目超过 2500 项. 在表 1 中, l 的取值范围为 0 到 7, $l > 7$ 时的组态分波对总能量贡献很小, 利用截断变分方法进行计算. 构建的试探波函数经过变分优化, 从而得到最佳的波函数和对应的非相对论能量 E_b .

表1 B原子(离子)高自旋态波函数重要的轨道角动量分波
Table 1. The important orbital angular momentum partial wave for the high-spin state of B atomic (ion).

组态结构	1s2sns, 1s2pnp	1s2snp, 2p ² np, 1s2pns, 1s2pnd	1s2s2pnp	1s2p ² np, 1s2s2pns, 1s2s2pnd	1s2s2p3snp, 1s2s2p ² ns	1s2s2p ² np, 1s2s2p ² nd
轨道角动量分波	[0, l, l]	[0, l, l + 1]	[0, 0, l, l]	[0, 0, l, l + 1]	[0, 0, 0, l, l]	[0, 0, 1, l + 1, l + 1]
	[1, l + 1, l + 2]	[1, l, l]	[0, 1, l, l + 1]	[0, 1, l, l]	[0, 0, 1, l, l + 1]	[0, 0, 1, l + 1, l + 3]
	[2, l + 2, l + 2]	[2, l + 2, l + 3]	[0, 2, l, l]	[0, 2, l, l + 1]	[0, 0, 2, l, l + 2]	[0, 1, 1, l + 1, l + 2]
			[1, 1, l, l]	[1, 1, l, l + 1]	[0, 1, 1, l, l + 2]	[0, 1, 1, l + 1, l + 4]
			[1, 1, l, l + 2]	[1, 2, l, l + 1]	[0, 1, 2, l, l + 1]	[1, 1, 1, l + 1, l + 1]
					[1, 1, 1, l, l + 1]	[1, 1, 2, l + 1, l + 2]

表2 B⁺离子五重态1s2s2p² 5P^e的非相对论能量计算值及各轨道角动量分波的能量贡献ΔE(单位a.u.)
Table 2. The non-relativistic energy and the energy contributions of each angular momentum partial wave for the quintuplet state 1s2s2p² 5P^e in B⁺ ion (unit a.u.).

[0, 0, l, l] 项数	ΔE	[0, 1, l, (l + 1)] 项数	ΔE	[1, 1, l, l] 项数	ΔE	[0, 2, l, l], [1, 1, l, (l + 2)] 项数	ΔE
[0,0,1,1] 291	-17.203991	[0,1,1,2] 239	-0.007900	[1,1,1,1] 130	-0.000643	[0,2,2,2] 59	-0.000022
[0,0,2,2] 115	-0.005601	[0,1,2,3] 147	-0.000953	[1,1,2,2] 100	-0.000072	[0,2,3,3] 33	-0.000001
[0,0,3,3] 84	-0.000425	[0,1,3,4] 93	-0.000127	[1,1,3,3] 42	-0.000005	[1,1,1,3] 47	-0.000002
[0,0,4,4] 42	-0.000077	[0,1,4,5] 50	-0.000027				
[0,0,5,5] 22	-0.000020	[0,1,5,6] 46	-0.000008				
[0,0,6,6] 14	-0.000006						
[0,0,7,7] 14	-0.000003						
求和 582	-17.210123	575	-0.009015	272	-0.00072	139	-0.000025

总非相对论能量: (-17.210123) + (-0.009015) + (-0.00072) + (-0.000025) = -17.219883 a.u.
总项数 582 + 575 + 272 + 139 = 1568

为了验证计算的能量收敛性,表2列出了B⁺离子激发态1s2s2p² 5P^e非相对论能量计算过程中所添加的轨道角动量分波、各分波项数及各分波的能量贡献.从表2可以看出,随着电子轨道角动量l的增加,轨道角动量分波的能量贡献越来越小,计算的非相对论能量呈现收敛趋势.如表2中所列的[0, 0, l, l]系列, [0, 0, 1, 1]分波的能量贡献为-17.203991 a.u., [0, 0, 7, 7]分波的能量贡献仅为-0.000003 a.u..通过收敛性判断,可以保证所有重要的轨道-自旋角动量组态分波均被加入到波函数中.在计算过程中,为了饱和波函数空间,考虑高l的分波对能量的贡献,利用截断变分方法来计算非相对论能量改进ΔE_{RV},本文计算的ΔE_{RV}值约为100 μa.u..利用一阶微扰理论,计算组态的质量极化修正能量ΔE_{mp}和相对论修正能量ΔE_{rel}.进一步利用屏蔽的类氢公式计算各组态的QED和高阶相对论修正ΔE_{Q+H},最后求和得到组态的相对论能量.

表3列出了本文计算的B原子(离子)高自旋态1s2lnl (l = s, p) 4S^e, 2p²np 4S^o; 1s2s2pnp 5S^e, 1s2p²np 5S^o; 1s2s2p3snp 6S^e, 1s2s2p²np 6S^o的能量.表4列出了B原子(离子)高自旋态1s2pnp 4P^e, 1s2snp 4P^o; 1s2s2pnp 5P^e, 1s2s2pnl (l = s, d) 5P^o; 1s2s2p²nl (l = s, d) 6P^e, 1s2s2p²np 6P^o的能量及精细结构劈裂.表3和表4中还列出了高分辨率束箔碰撞实验^[16]的数据、Rayleigh-Ritz变分方法^[5,7,21,22]、FCPC^[23]方法、MCHF方法^[11]的理论计算值.为了便于比较,图1给出了B原子(离子)内壳层激发高自旋态能量的理论计算值与实验值^[16]的偏差.从图1可以看出,本文的理论计算值与实验值的平均偏差约为6 × 10⁻⁴ a.u.,小于文献中Rayleigh-Ritz^[5,7,21,22]和FCPC^[23]方法与实验的偏差.这主要是因为相比文献中的理论方法,本文计算过程中考虑了QED效应和高阶相对论效应修正ΔE_{Q+H}.本文计算的B原子(离子)的内壳层激发高自旋态,ΔE_{Q+H}主要来自

于1s和2s电子. 对于本文计算的1s2snl系列激发态, ΔE_{Q+H} 大小约为500 $\mu\text{a.u.}$; 对于2p²np系列激发态, ΔE_{Q+H} 很小, 约为20 $\mu\text{a.u.}$. 总体上看, FCPC方法^[23]的理论计算值要略差于Rayleigh-Ritz变分方法^[5,7,21,22]的理论计算值, 这主要是由于FCPC方法没有充分考虑原子实内电子和原子实外电子的关联效应. 这里需要指出的是, 在图1中, 本文没有给出高自旋态2p³ 4S^o能量的理论计算值和实验值的对比. 对于高自旋态2p³ 4S^o, 本文的理论计算值为-7.12042 a.u., 比文献^[16]的实验数据-7.11158 a.u.低0.00884 a.u.. 在文献^[16]中, 该高自旋态的实验测量误差为1500 cm⁻¹(约为0.00683 a.u.), 实验误差较大. 本文计算的2p³ 4S^o能量的略超出实验误差约0.002 a.u.. 然而, 本文的理论计算值与文献^[5]的理论计算值-7.12023 a.u.符合得非常好. 对于该激发态, 目前还尚未有其他的实验数据可对比, 因此还需要进一步的实验去验证. 在表3和表4中, 本文的计算数据比Mannervik

等^[11]利用MCHF的计算数据略低, 这主要是由于本文采用了更大的基函数, 考虑了更多的组态相互作用.

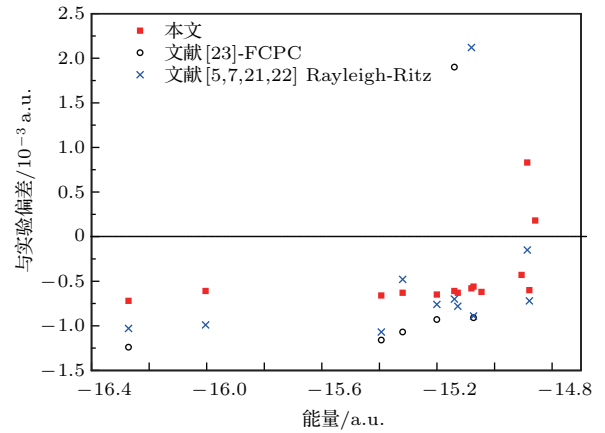


图1 (网刊彩色) B原子(离子)内壳层激发高自旋态能量理论值与实验数据^[16]的偏差

Fig. 1. (color online) The deviation of theoretical and experimental energy data^[16] for the core-excited states of B atomic (ion).

表3 B原子(离子)高自旋态1s2lnl (l = s, p) 4S^e, 2p²np 4S^o; 1s2s2pnp 5S^e, 1s2p²np 5S^o; 1s2s2p3snp 6S^e, 1s2s2p²np 6S^o的能量(单位a.u.)

Table 3. Energies (a.u.) of high-spin states 1s2lnl (l = s, p) 4S^e, 2p²np 4S^o; 1s2s2pnp 5S^e, 1s2p²np 5S^o; 1s2s2p3snp 6S^e, 1s2s2p²np 6S^o of B atomic (ion).

组态	$E_b + \Delta E_{RV}$	ΔE_{mp}	ΔE_{rel}	ΔE_{Q+H}	E_{total}	
					本文	文献
1s2s3s 4S ^e	-15.38944	0.00000	-0.00514	0.00050	-15.39408	-15.39342 ^a , -15.39458 ^b -15.39449 ^c
1s2s4s 4S ^e	-15.06893	-0.00001	-0.00501	0.00050	-15.07345	-15.07289 ^a , -15.07380 ^b , -15.07378 ^c
1s2p3p 4S ^e	-15.13602	-0.00007	-0.00443	0.00047	-15.14005	-15.13944 ^a , -15.13754 ^b , -15.14014 ^c
1s2p4p 4S ^e	-14.88128	-0.00005	-0.00453	0.00047	-14.88539	-14.88622 ^a , -14.88637 ^c
2p ³ 4S ^o	-7.11932	0.00002	-0.00114	0.00002	-7.12042	-7.11158 ^a , -7.12023 ^d
2p ² 3p 4S ^o	-6.04495	0.00001	-0.00101	0.00002	-6.04593	
2p ² 4p 4S ^o	-5.77990	0.00001	-0.00098	0.00002	-5.78085	
1s2s2p3p 5S ^e	-16.56187	-0.00006	-0.00500	0.00050	-16.56643	
1s2s2p4p 5S ^e	-16.41955	-0.00006	-0.00499	0.00050	-16.42410	
1s2p ³ 5S ^o	-16.87642	-0.00012	-0.00438	0.00047	-16.88045	-16.88098 ^b , -16.88097 ^e , -16.87076 ^f
1s2p ² 3p 5S ^o	-16.27476	-0.00011	-0.00437	0.00047	-16.27877	-16.27928 ^g
1s2p ² 4p 5S ^o	-16.14531	-0.00011	-0.00436	0.00047	-16.14931	-16.14988 ^g
1s2s2p3s3p 6S ^e	-16.77774	-0.00006	-0.00506	0.00050	-16.78236	
1s2s2p3s4p 6S ^e	-16.67889	-0.00006	-0.00506	0.00050	-16.68351	
1s2s2p ² 3d 6S ^e	-16.64745	-0.00006	-0.00499	0.00050	-16.65200	
1s2s2p ³ 6S ^o	-17.68730	-0.00010	-0.00483	0.00050	-17.69173	
1s2s2p ² 3p 6S ^o	-17.30685	-0.00008	-0.00492	0.00050	-17.31135	
1s2s2p ² 4p 6S ^o	-17.25450	-0.00009	-0.00492	0.00050	-17.25901	

a, 文献^[16]实验; b, 文献^[23] FCPC; c, 文献^[7] Rayleigh-Ritz变分; d, 文献^[5] Rayleigh-Ritz变分; e, 文献^[21] Rayleigh-Ritz变分; f, 文献^[11] MCHF; g, 文献^[22] Rayleigh-Ritz变分.

表4 B原子(离子)高自旋态 $1s2pnp$ $^4P^e$, $1s2snp$ $^4P^o$; $1s2s2pnp$ $^5P^e$, $1s2s2pnl$ ($l = s, d$) $^5P^o$; $1s2s2p^2nl$ ($l = s, d$) $^6P^e$, $1s2s2p^2np$ $^6P^o$ 的能量(单位 a.u.) 及精细结构劈裂(单位 cm^{-1}), 其中, $\nu_{J-(J-1)}$ 和 $\nu_{(J+1)-J}$ 为对应组态的精细结构劈裂值(单位 cm^{-1}), B^{2+} 离子四重态 $J = 1.5$, B^+ 离子五重态 $J = 2$, B原子六重态 $J = 2.5$, 括号中的数代表实验误差(单位 cm^{-1})
 Table 4. Energies (a.u.) and fine structure splittings (cm^{-1}) of high-spin states $1s2pnp$ $^4P^e$, $1s2snp$ $^4P^o$; $1s2s2pnp$ $^5P^e$, $1s2s2pnl$ ($l = s, d$) $^5P^o$; $1s2s2p^2nl$ ($l = s, d$) $^6P^e$, $1s2s2p^2np$ $^6P^o$ of B atomic (ion). $\nu_{J-(J-1)}$ and $\nu_{(J+1)-J}$ are the corresponding fine structure splitting values. For the quartet state, the quintuplet state, and the sextet state, J values are equal to 1.5, 2, and 2.5, respectively. The data in parentheses represents the experimental errors (unit cm^{-1}).

组态	$E_b + \Delta E_{RV}$	ΔE_{mp}	ΔE_{rel}	ΔE_{Q+H}	E_{total}		$\nu_{J-(J-1)}$		$\nu_{(J+1)-J}$	
					本文	文献	本文	文献	本文	文献
$1s2p^2$ $^4P^e$	-16.00032	-0.00010	-0.00436	0.00047	-16.00431	-16.00370 ^a -16.00469 ^b	31.1	31.0(2.0) ^a	7.8	8.7(2.0) ^a
$1s2p3p$ $^4P^e$	-15.12445	-0.00007	-0.00434	0.00047	-15.12839	-15.12776 ^a -15.12854 ^b	22.5		9.0	
$1s2p4p$ $^4P^e$	-14.87551	-0.00007	-0.00432	0.00047	-14.87943	-14.87883 ^a -14.87955 ^b	21.1		9.7	
$1s2s2p$ $^4P^o$	-16.26759 -16.26739 ^c	-0.00005	-0.00499	0.00050	-16.27213	-16.27141 ^a -16.27244 ^b -16.27259 ^d -16.27265 ^e	-6.2	-6.3(2.0) ^a -6.31 ^c	34.9	34.8(2.0) ^a 34.78 ^c
$1s2s3p$ $^4P^o$	-15.31518 -15.31493 ^c	-0.00002	-0.00500	0.00049	-15.31970	-15.31907 ^a -15.31955 ^b -15.32014 ^e	-1.1	-1.2(2.0) ^a	8.4	7.7(2.0) ^a
$1s2s4p$ $^4P^o$	-15.04144	-0.00001	-0.00493	0.00049	-15.04588	-15.04526 ^a	-2.2		11.3	
$1s2p3s$ $^4P^o$	-15.19709	-0.00006	-0.00448	0.00047	-15.20116	-15.20051 ^a -15.20127 ^b -15.20144 ^e	-2.8		40.6	37.8(1.3) ^a
$1s2p4s$ $^4P^o$	-14.90239	-0.00006	-0.00438	0.00047	-14.90636	-14.90593 ^a	-2.5		41.7	
$1s2p3d$ $^4P^o$	-15.07688	-0.00005	-0.00443	0.00047	-15.08089	-15.08031 ^a -15.07819 ^b	-11.4		-10.9	
$1s2p4d$ $^4P^o$	-14.85437	-0.00006	-0.00436	0.00047	-14.85832	-14.85850 ^a	-10.0		-11.9	
$1s2s2p^2$ $^5P^e$	-17.22001	-0.00009	-0.00496	0.00050	-17.22456	-17.22517 ^e -17.22514 ^g 17.21861 ^h	22.2	22.20 ^e 22.40 ^g	2.4	2.42 ^e 2.30 ^g
$1s2s2p3p$ $^5P^e$	-16.55480	-0.00006	-0.00498	0.00050	-16.55934	-16.55999 ^f	16.0	15.99 ^f	4.7	4.71 ^f
$1s2s2p4p$ $^5P^e$	-16.41696	-0.00005	-0.00498	0.00050	-16.42149	-16.42226 ^f	15.3	15.36 ^f	5.1	5.18 ^f
$1s2s2p3s$ $^5P^o$	-16.62800	-0.00006	-0.00507	0.00050	-16.63263		-2.3		30.0	
$1s2s2p4s$ $^5P^o$	-16.44241	-0.00006	-0.00502	0.00050	-16.44699		-2.1		30.6	
$1s2s2p3d$ $^5P^o$	-16.49713	-0.00006	-0.00499	0.00050	-16.50168		-9.3		-9.1	
$1s2s2p4d$ $^5P^o$	-16.39520	-0.00006	-0.00499	0.00050	-16.39975		-8.8		-8.8	
$1s2s2p^23s$ $^6P^e$	-17.35154	-0.00008	-0.00496	0.00050	-17.35608		19.7		2.0	
$1s2s2p^24s$ $^6P^e$	-17.27379	-0.00009	-0.00493	0.00050	-17.27831		17.1		0.6	
$1s2s2p^23d$ $^6P^e$	-17.27692	-0.00009	-0.00492	0.00050	-17.28143		-2.2		-6.1	
$1s2s2p^24d$ $^6P^e$	-17.25041	-0.00009	-0.00492	0.00050	-17.25492		-2.5		-6.1	
$1s2s2p^23p$ $^6P^o$	-17.31296	-0.00008	-0.00493	0.00050	-17.31747		-1.8		9.6	
$1s2s2p^24p$ $^6P^o$	-17.26392	-0.00008	-0.00491	0.00050	-17.26841		-2.5		9.9	

a, 文献 [16] 实验; b, 文献 [7] Rayleigh-Ritz 变分; c, 文献 [34] Rayleigh-Ritz 变分; d, 文献 [20] Rayleigh-Ritz 变分; e, 文献 [24] FCPC; f, 文献 [22] Rayleigh-Ritz 变分; g, 文献 [21] Rayleigh-Ritz 变分; h, 文献 [11] MCHF.

考虑自旋与轨道、自旋与其他轨道和自旋与自旋的相互作用,表4还列出了B原子(离子)高自旋里德伯系列激发态 $2^{S+1}P_J$ ($S = 1.5, 2.0, 2.5$)的精细结构劈裂. 对比的参考文献数据主要来自于束箔实验^[16]、Rayleigh-Ritz变分的理论计算值^[20-22,24,33]和FCPC的理论计算值^[24]. 通过对比发现,除 $1s2p3s$ $4P^\circ$ 高自旋态的 $\nu_{2.5-1.5}$ 的精细结构劈裂值 40.6 cm^{-1} 略超出实验的误差范围(37.8 ± 1.3) cm^{-1} ,其余的计算值均在误差范围之内. 本文计算的精细结构劈裂数据与文献^{[21,}

22, 24]的理论计算值符合得很好,最大偏差约4%. 分析表4中精细结构劈裂值,可以发现 $1s2pnd$ $4P^\circ$, $1s2s2pnd$ $5P^\circ$, $1s2s2p^2nd$ $6P^\circ$ (组态结构分别为spd, sspd, ssppd)的精细结构劈裂值均为负, $1s2pnp$ $4P^\circ$, $1s2s2pnp$ $5P^\circ$, $1s2s2p^2ns$ $6P^\circ$ (组态结构分别为spp, sspp, ssspp)的精细结构劈裂值均为正. 对于里德伯系列激发态一般具有均匀变化的精细结构劈裂值,因此,通过精细结构劈裂的变化能够验证里德伯系列激发态标定的组态结构.

表5 B^{2+} 离子四重态 $1s2sns$ $4S^\circ-1s2sn'p$ $4P^\circ$, $1s2sns$ $4S^\circ-1s2pn'l$ $4P^\circ$, $1s2pnp$ $4S^\circ-1s2sn'p$ $4P^\circ$, $2p^2np$ $4S^\circ-1s2pn'p$ $4P^\circ$; B^+ 离子五重态 $1s2s2pnp$ $5S^\circ-1s2s2pn'l$ $5P^\circ$, $1s2p^2np$ $5S^\circ-1s2s2pn'p$ $5P^\circ$; B原子六重态 $1s2s2p3snp$ $6S^\circ-1s2s2p^2n'p$ $6P^\circ$, $1s2s2p3p3d$ $6S^\circ-1s2s2p^2n'p$ $6P^\circ$, $1s2s2p^2np$ $6S^\circ-1s2s2p^2n'l$ $6P^\circ$ ($n \leq 4$; $n' \leq 4$; $l = s, d$)的辐射跃迁振子强度 $f_{i \rightarrow k}$ 、辐射跃迁概率 $A_{i \rightarrow k}$ (s^{-1})、吸收振子强度 $f_{k \rightarrow i}$ 、吸收跃迁概率 $A_{k \rightarrow i}$ (s^{-1})和跃迁波长 λ (nm); 方括号中的数代表10的幂指数
Table 5. The radiative transition oscillator strength $f_{i \rightarrow k}$, radiative transition rate $A_{i \rightarrow k}$ (s^{-1}), absorb oscillator strength $f_{k \rightarrow i}$, absorption transition rate $A_{k \rightarrow i}$ (s^{-1}), and transition wavelength λ (nm) of the $1s2sns$ $4S^\circ-1s2sn'p$ $4P^\circ$, $1s2sns$ $4S^\circ-1s2pn'l$ $4P^\circ$, $1s2pnp$ $4S^\circ-1s2sn'p$ $4P^\circ$, $2p^2np$ $4S^\circ-1s2pn'p$ $4P^\circ$ transitions in B^{2+} ion; the $1s2s2pnp$ $5S^\circ-1s2s2pn'l$ $5P^\circ$, $1s2p^2np$ $5S^\circ-1s2s2pn'p$ $5P^\circ$ transitions in B^+ ion, and the $1s2s2p3snp$ $6S^\circ-1s2s2p^2n'p$ $6P^\circ$, $1s2s2p3p3d$ $6S^\circ-1s2s2p^2n'p$ $6P^\circ$, $1s2s2p^2np$ $6S^\circ-1s2s2p^2n'l$ $6P^\circ$ ($n \leq 4$; $n' \leq 4$; $l = s, d$) transitions in B atom. The number in square brackets represents the power of 10.

上能级	下能级	$f_{i \rightarrow k}$ f_i/f_v	$A_{i \rightarrow k}$ A_i/A_v	$f_{k \rightarrow i}$ f_i/f_v	$A_{k \rightarrow i}$ A_i/A_v	λ
$1s2s3s$ $4S^\circ$	$1s2s2p$ $4P^\circ$	1.37[-1]/1.37[-1]	3.41[9]/3.41[9]	4.58[-2]/4.59[-2]	1.14[9]/1.14[9]	51.892 51.8955±0.005 ^a , 51.895 ^c 51.895±0.005 ^b , 51.90 ^d 51.87 ^e
$1s2s3p$ $4P^\circ$	$1s2s3s$ $4S^\circ$	1.69[-1]/1.69[-1]	3.00[7]/3.00[7]	5.08[-1]/5.08[-1]	9.01[7]/9.01[7]	612.575 612.646 ^a , 612.645 ^c 611.09 ^d , 612.68±0.01 ^f
$1s2s4p$ $4P^\circ$	$1s2s3s$ $4S^\circ$	3.83[-2]/3.85[-2]	1.49[8]/1.50[8]	1.15[-1]/1.16[-1]	4.47[8]/4.50[8]	130.854 130.866 ^a , 130.868 ^c
$1s2p3s$ $4P^\circ$	$1s2s3s$ $4S^\circ$	5.31[-2]/5.31[-2]	6.31[7]/6.32[7]	1.59[-1]/1.59[-1]	1.89[8]/1.89[8]	236.177 236.111±0.005 ^a 236.155 ^c , 235.81 ^d
$1s2p3d$ $4P^\circ$	$1s2s3s$ $4S^\circ$	1.12[-2]/1.13[-2]	3.53[7]/3.54[7]	3.37[-2]/3.38[-2]	1.06[8]/1.06[8]	145.482
$1s2s4s$ $4S^\circ$	$1s2s2p$ $4P^\circ$	9.30[-3]/9.17[-3]	4.29[8]/4.23[8]	3.10[-3]/3.06[-3]	1.43[8]/1.41[8]	38.011 38.014 ± 0.005 ^a 38.014 ± 0.005 ^e 38.0166 ^c , 38.014 ^d , 38.00 ^e
$1s2s4s$ $4S^\circ$	$1s2s3p$ $4P^\circ$	1.79[-1]/1.79[-1]	3.49[8]/3.50[8]	5.97[-2]/5.99[-2]	1.16[8]/1.16[8]	185.029 185.082 ± 0.005 ^a 185.08 ± 0.02 ^b 185.084 ^c , 185.09 ^d
$1s2s4p$ $4P^\circ$	$1s2s4s$ $4S^\circ$	2.41[-1]/2.41[-1]	5.85[6]/5.83[6]	7.23[-1]/7.22[-1]	1.75[7]/1.75[7]	1652.643
$1s2s4s$ $4S^\circ$	$1s2p3s$ $4P^\circ$	1.90[-2]/1.85[-2]	1.00[7]/9.72[6]	6.33[-3]/6.14[-3]	3.34[6]/3.24[6]	356.772
$1s2p4s$ $4P^\circ$	$1s2s4s$ $4S^\circ$	4.58[-2]/4.37[-2]	4.08[7]/3.89[7]	1.37[-1]/1.61[-1]	1.22[8]/1.17[8]	272.688
$1s2p4d$ $4P^\circ$	$1s2s4s$ $4S^\circ$	2.67[-3]/2.54[-3]	3.94[6]/3.76[6]	8.00[-3]/7.62[-3]	1.18[7]/1.13[7]	211.795
$1s2p3p$ $4S^\circ$	$1s2s2p$ $4P^\circ$	6.26[-2]/6.27[-2]	2.57[9]/2.58[9]	2.09[-2]/2.09[-2]	8.58[8]/8.61[8]	40.247 40.24 ^d , 40.253 ± 0.003 ^e
$1s2p3p$ $4S^\circ$	$1s2s3p$ $4P^\circ$	1.64[-1]/1.62[-1]	1.69[8]/1.67[8]	5.46[-2]/5.41[-2]	5.63[7]/5.58[7]	253.623 253.580 ± 0.005 ^a , 253.580 ^c

表 5 (续)

上能级	下能级	$f_{i \rightarrow k}$	$A_{i \rightarrow k}$	$f_{k \rightarrow i}$	$A_{k \rightarrow i}$	λ
		f_i/f_v	A_i/A_v	f_i/f_v	A_i/A_v	
1s2p3p ⁴ S ^e	1s2p3s ⁴ P ^o	1.56[-1]/1.56[-1]	1.87[7]/1.87[7]	5.20[-2]/5.19[-2]	6.23[6]/6.21[6]	745.596
1s2p4s ⁴ P ^o	1s2p3p ⁴ S ^e	2.37[-2]/2.27[-2]	4.16[7]/3.99[7]	7.11[-2]/6.81[-2]	1.25[8]/1.20[8]	194.974
1s2p3d ⁴ P ^o	1s2p3p ⁴ S ^e	1.59[-1]/1.60[-1]	1.79[7]/1.79[7]	4.78[-1]/4.79[-1]	5.37[7]/5.38[7]	770.172
1s2p4d ⁴ P ^o	1s2p3p ⁴ S ^e	1.02[-1]/1.04[-1]	2.61[8]/2.65[8]	3.07[-1]/3.12[-1]	7.83[8]/7.95[8]	162.274
1s2p4p ⁴ S ^e	1s2s2p ⁴ P ^o	1.94[-2]/1.93[-2]	1.20[9]/1.19[9]	6.47[-3]/6.42[-3]	3.99[8]/3.97[8]	32.856
						32.895±0.005 ^a , 32.8934 ^c
						32.87 ^d , 32.895±0.006 ^g
						32.84±0.02 ^h
1s2p4p ⁴ S ^e	1s2s3p ⁴ P ^o	8.94[-3]/9.44[-3]	5.41[7]/5.71[7]	2.98[-3]/3.15[-3]	1.80[7]/1.90[7]	104.91
1s2p4p ⁴ S ^e	1s2s4p ⁴ P ^o	3.64[-2]/3.17[-2]	3.00[8]/2.61[8]	1.21[-2]/1.06[-2]	1.00[7]/8.70[6]	283.902
1s2p4p ⁴ S ^e	1s2p3s ⁴ P ^o	3.29[-2]/3.23[-2]	1.05[8]/1.05[8]	1.10[-2]/1.08[-2]	3.51[7]/3.45[7]	144.293
1s2p4p ⁴ S ^e	1s2p3d ⁴ P ^o	1.57[-1]/1.56[-1]	1.93[8]/1.92[8]	5.24[-2]/5.19[-2]	6.44[7]/6.38[7]	233.061
						234.689±0.005 ^a , 234.688 ^c
2p ³ ⁴ S ^o	1s2p ² ⁴ P ^e	3.24[-1]/3.24[-1]	8.21[11]/8.22[11]	1.08[-1]/1.08[-1]	2.74[11]/2.74[11]	5.129
		3.24[-1] ⁱ	8.21[11] ⁱ			5.124 ± 0.004 ^a
						5.124 ^c , 5.1287 ⁱ
2p ³ ⁴ S ^o	1s2p3p ⁴ P ^e	3.29[-3]/3.28[-3]	6.76[9]/6.76[9]	1.09[-3]/1.09[-3]	2.25[9]/2.25[9]	5.69
2p ³ ⁴ S ^o	1s2p4p ⁴ P ^e	8.37[-4]/8.48[-4]	1.62[9]/1.64[9]	2.79[-4]/2.83[-4]	5.40[8]/5.46[8]	5.872
2p ² 3p ⁴ S ^o	1s2p ² ⁴ P ^e	2.29[-3]/2.28[-3]	7.28[9]/7.22[9]	7.62[-4]/7.56[-4]	2.43[9]/2.41[9]	4.575
2p ² 3p ⁴ S ^o	1s2p3p ⁴ P ^e	2.55[-1]/2.55[-1]	6.76[9]/6.76[9]	8.51[-2]/8.50[-2]	2.25[11]/2.25[11]	5.017
2p ² 3p ⁴ S ^o	1s2p4p ⁴ P ^e	9.79[-4]/9.42[-4]	2.45[9]/2.36[9]	3.26[-4]/3.14[-4]	8.18[8]/7.87[8]	5.158
2p ² 4p ⁴ S ^o	1s2p ² ⁴ P ^e	1.68[-3]/1.67[-3]	5.63[9]/5.62[9]	5.59[-4]/5.58[-4]	1.88[9]/1.87[9]	4.457
2p ² 4p ⁴ S ^o	1s2p3p ⁴ P ^e	4.53[-4]/4.59[-4]	1.27[9]/1.29[9]	1.51[-4]/1.53[-4]	4.24[8]/4.29[8]	4.874
2p ² 4p ⁴ S ^o	1s2p4p ⁴ P ^e	2.49[-1]/2.48[-1]	6.61[11]/6.60[11]	8.29[-2]/8.27[-2]	2.20[11]/2.20[11]	5.008
1s2s2p3p ⁵ S ^e	1s2s2p3s ⁵ P ^o	2.36[-1]/2.31[-1]	3.35[7]/3.28[7]	7.87[-2]/7.70[-2]	1.12[7]/1.09[7]	688.268
1s2s2p4s ⁵ P ^o	1s2s2p3p ⁵ S ^e	1.24[-2]/1.39[-2]	5.67[6]/6.38[6]	3.71[-2]/4.17[-2]	1.70[7]/1.91[7]	381.475
1s2s2p3d ⁵ P ^o	1s2s2p3p ⁵ S ^e	2.30[-1]/2.24[-1]	3.10[7]/3.02[7]	6.91[-1]/6.73[-1]	9.31[7]/9.06[7]	703.681
1s2s2p4d ⁵ P ^o	1s2s2p3p ⁵ S ^e	2.92[-2]/2.71[-2]	2.61[7]/2.42[7]	8.77[-2]/8.13[-2]	7.83[7]/7.25[7]	273.358
1s2s2p4p ⁵ S ^e	1s2s2p3s ⁵ P ^o	1.33[-2]/1.27[-2]	1.86[7]/1.78[7]	4.43[-3]/4.24[-3]	6.21[6]/5.93[6]	218.498
1s2s2p4p ⁵ S ^e	1s2s2p4s ⁵ P ^o	3.83[-1]/3.29[-1]	5.91[6]/5.52[6]	1.28[-1]/1.09[-2]	1.97[6]/1.84[6]	1990.536
1s2s2p4p ⁵ S ^e	1s2s2p3d ⁵ P ^o	2.26[-1]/2.34[-1]	4.38[7]/4.54[7]	7.53[-2]/7.80[-2]	1.46[7]/1.51[7]	587.308
1s2s2p4d ⁵ P ^o	1s2s2p4p ⁵ S ^e	3.28[-1]/3.26[-1]	7.13[6]/6.14[6]	1.13[0]/9.77[-1]	2.14[7]/1.84[7]	1871.185
1s2p ³ ⁵ S ^o	1s2s2p ² ⁵ P ^e	4.21[-1]/4.22[-1]	1.59[9]/1.59[9]	1.40[-1]/1.41[-1]	5.30[8]/5.31[8]	132.409
			1.60[9]/1.60[9] ^j	1.41[-1]/1.41[-1] ^j		132.392±0.007 ^g , 132.386 ^j
1s2p ² 3p ⁵ S ^o	1s2s2p ² ⁵ P ^e	8.43[-3]/8.36[-3]	2.42[8]/2.48[8]	2.81[-3]/2.88[-3]	8.06[7]/8.25[7]	48.175
1s2p ² 3p ⁵ S ^o	1s2s2p3p ⁵ P ^e	2.24[-1]/2.17[-1]	5.60[8]/5.42[8]	7.46[-2]/7.22[-2]	1.87[8]/1.81[8]	162.396
1s2p ² 4p ⁵ S ^o	1s2s2p ² ⁵ P ^e	4.35[-3]/4.40[-3]	1.61[8]/1.63[8]	1.45[-3]/1.47[-3]	5.38[7]/5.44[7]	42.375
1s2p ² 4p ⁵ S ^o	1s2s2p4p ⁵ P ^e	2.40[-1]/2.39[-1]	5.68[8]/5.67[8]	8.00[-2]/7.97[-2]	1.90[8]/1.89[8]	167.402
1s2s2p3s3p ⁶ S ^e	1s2s2p ² 3p ⁶ P ^o	6.36[-2]/6.43[-2]	5.86[8]/5.91[8]	2.12[-2]/2.14[-2]	1.95[8]/1.97[8]	85.148
1s2s2p3s3p ⁶ S ^e	1s2s2p ² 4p ⁶ P ^o	5.19[-3]/5.36[-3]	3.93[7]/4.05[7]	1.73[-3]/1.79[-3]	1.31[7]/1.35[7]	93.742
1s2s2p3s4p ⁶ S ^e	1s2s2p ² 3p ⁶ P ^o	1.68[-2]/1.67[-2]	2.18[8]/2.15[8]	5.61[-3]/5.56[-3]	7.25[7]/7.18[7]	71.871
1s2s2p3s4p ⁶ S ^e	1s2s2p ² 4p ⁶ P ^o	7.12[-2]/7.21[-2]	7.81[8]/7.90[8]	2.37[-2]/2.40[-2]	2.60[8]/2.63[8]	77.899
1s2s2p ² 3d ⁶ S ^e	1s2s2p ² 3p ⁶ P ^o	9.71[-2]/9.39[-2]	1.38[9]/1.34[9]	3.24[-2]/3.13[-2]	4.61[8]/4.45[8]	68.468

表5 (续)

上能级	下能级	$f_{i \rightarrow k}$	$A_{i \rightarrow k}$	$f_{k \rightarrow i}$	$A_{k \rightarrow i}$	λ
		f_l/f_v	A_l/A_v	f_l/f_v	A_l/A_v	
1s2s2p ² 4p ⁶ P ^o	1s2s2p ² 3d ⁶ S ^e	3.80[-3]/3.43[-3]	4.63[7]/4.17[7]	1.27[-3]/1.14[-3]	1.54[7]/1.39[7]	73.917
1s2s2p ² 3s ⁶ P ^e	1s2s2p ³ ⁶ S ^o	5.00[-2]/5.07[-2]	1.81[8]/1.84[8]	1.50[-1]/1.52[-1]	5.44[8]/5.51[8]	135.747
1s2s2p ² 4s ⁶ P ^e	1s2s2p ³ ⁶ S ^o	1.09[-3]/1.08[-3]	5.99[6]/5.95[6]	3.27[-3]/3.25[-3]	1.80[7]/1.79[7]	110.211
1s2s2p ² 3d ⁶ P ^e	1s2s2p ³ ⁶ S ^o	5.45[-2]/5.48[-2]	2.95[8]/2.96[8]	1.64[-1]/1.64[-1]	8.85[8]/8.89[8]	111.049
1s2s2p ² 4d ⁶ P ^e	1s2s2p ³ ⁶ S ^o	2.28[-2]/2.26[-2]	1.40[8]/1.39[8]	6.84[-2]/6.78[-2]	4.19[8]/4.16[8]	104.309
1s2s2p ² 3p ⁶ S ^o	1s2s2p ² 3s ⁶ P ^e	4.06[-1]/5.01[-1]	2.61[7]/3.21[7]	1.35[-1]/1.67[-1]	8.69[6]/1.07[7]	1018.631
1s2s2p ² 4s ⁶ P ^e	1s2s2p ² 3p ⁶ S ^o	1.99[-1]/1.93[-1]	7.00[6]/6.77[6]	5.98[-1]/5.79[-1]	2.10[7]/2.03[7]	1379.036
1s2s2p ² 3d ⁶ P ^e	1s2s2p ² 3p ⁶ S ^o	2.05[-1]/2.09 [-1]	5.90[6]/6.03[6]	6.15[-1]/6.28[-1]	1.77[7]/1.81[7]	1522.840

a, 文献 [16] 实验; b, 文献 [8] 实验; c, 文献 [16] 理论; d, 文献 [7] Rayleigh-Ritz 变分; e, 文献 [27] Hylleraas 方法; f, 文献 [10] 实验; g, 文献 [9] 实验; h, 文献 [6] 实验; i, 文献 [5] Rayleigh-Ritz 变分; j, 文献 [22] Rayleigh-Ritz 变分.

表5列出了硼原子(离子)内壳层激发高自旋态 1s2sns ⁴S^e—1s2sn'p ⁴P^o, 1s2sns ⁴S^e — 1s2pn'l ⁴P^o, 1s2pnp ⁴S^e — 1s2sn'p ⁴P^o, 2p²np ⁴S^o — 1s2pn'p ⁴P^e; 1s2s2pnp ⁵S^e — 1s2s2pn'l ⁵P^o, 1s2p²np ⁵S^o — 1s2s2pn'p ⁵P^e; 1s2s2p3snp ⁶S^e — 1s2s2p²n'p ⁶P^o, 1s2s2p3p3d ⁶S^e— 1s2s2p²n'p ⁶P^o, 1s2s2p²np ⁶S^o — 1s2s2p²n'l ⁶P^e ($n \leq 4; n' \leq 4; l = s, d$) 的电偶辐射跃迁振子强度、辐射跃迁概率、吸收振子强度、吸收跃迁概率和跃迁波长. 表6列出了硼原子(离子)内壳层激发高自旋态 1s2pnp ⁴P^e — 1s2sn'p ⁴P^o, 1s2pnp ⁴P^e — 1s2pn'l ⁴P^o; 1s2s2pnp ⁵P^e — 1s2s2pn'l ⁵P^o; 1s2s2p²nl ⁶P^e — 1s2s2p²n'p ⁶P^o ($n \leq 4; n' \leq 4; l = s, d$) 的电偶极辐射跃迁振子强度、辐射跃迁概率和跃迁波长. 在表5和表6中, 本文给出了利用长度规范和速度规范计算的跃迁振子强度和跃迁概率. 根据两种规范计算结果的一致性程度, 可判断计算的波函数的精确程度. 为了便于比较两种规范计算结果的一致性, 图2给出了硼原子(离子)高自旋态电偶极辐射跃迁振子强度的两种规范 f_l 和 f_v 的对比情况. 从图2可以看出, 两者比值的对数取值 ($\log_{10}(f_l/f_v)$) 均位于 $[-0.1, 0.1]$ 范围. 在振子强度 f_l 小于0.3的范围, 两种规范符合得非常好, 大多数位于 $[-0.05, 0.05]$ 范围. 在 f_l 大于0.3的范围, 两种规范一致性略差. 总体上, 本文计算的辐射跃迁振子强度的两种规范的计算结果显示良好的一致性, 从而证明了计算的波函数是比较精确的. 表5和表6还列出了文献 [5, 7, 22] 计算的B离子高自旋态电偶极辐射跃迁振子强度和跃迁概率, 本文的计算结果和文献 [5, 7, 22] 的理论计算结果符合得很好. 如对于 B²⁺ 离子高自旋态 2p³ ⁴S^o—1s2p² ⁴P^e 的跃迁, 本文的计算振子强度和跃迁概率值分别为

0.324 和 $8.21 \times 10^{11} \text{ s}^{-1}$, 和文献 [5] 的理论值完全一致. 表5和表6的最后一列给出了本文计算的B原子(离子)高自旋态电偶极辐射跃迁波长和相关实验数据 [6,8-10,16] 及其他理论计算值 [5,7,16,22,27]. 图3给出了本文计算的B原子(离子)高自旋态辐射跃迁波长和实验数据 [6,8-10,16] 的相对偏差. 从图3可以看出, 1s2p4p ⁴S^e—1s2p3d ⁴P^o 和 1s2p4d ⁴P^o—1s2p3p ⁴P^e 两个跃迁波长值与实验的相对偏差较大(约为0.7%和0.3%), 其余跃迁波长的相对偏差均小于0.15%. 对比本文计算的波长与其他理论计算值 [5,7,16,22,27], 相对偏差均小于0.7%. 因此, 整体上本文计算的B原子(离子)高自旋态电偶极辐射跃迁的波长与实验和其他理论结果符合得较好. 对于B原子(离子)内壳层激发五重态和六重态, 尤其是高n的里德伯系列激发态, 相关的实验和理论的辐射跃迁数据还很少, 需要进一步研究. 本文的理论计算结果可为将来的实验和光谱谱线标定提供有价值的理论参考数据.

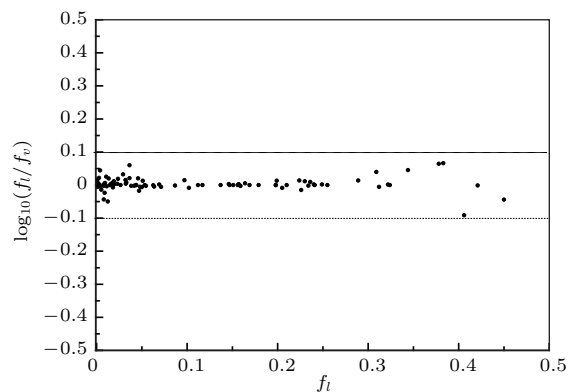


图2 本文计算的B原子(离子)电偶极跃迁的振子强度的长度规范 f_l 和速度规范 f_v 的比较

Fig. 2. Comparison of the calculated oscillator strengths in length gauge f_l and velocity gauge f_v in this work.

表6 B²⁺ 离子四重态 1s2pnp ⁴P^e—1s2sn'p ⁴P^o, 1s2pnp ⁴P^e—1s2pn'l ⁴P^o; B⁺ 离子五重态 1s2s2pnp ⁵P^e—1s2s2pn'l ⁵P^o; B 原子六重态 1s2s2p²nl ⁶P^e—1s2s2p²n'p ⁶P^o ($n \leq 4$; $n' \leq 4$; $l = s, d$) 的电偶极跃迁振子强度 f_i/f_v , 跃迁概率 A_i/A_v (s⁻¹) 和跃迁波长 λ (nm); 方括号中的数代表 10 的幂指数

Table 6. The electric dipole transition oscillator strength f_i/f_v , transition rate A_i/A_v (s⁻¹), and transition wavelength λ (nm) of the 1s2pnp ⁴P^e—1s2sn'p ⁴P^o, 1s2pnp ⁴P^e—1s2pn'l ⁴P^o transitions in B²⁺ ion, the 1s2s2pnp ⁵P^e—1s2s2pn'l ⁵P^o transitions in B⁺ ion, and the 1s2s2p²nl ⁶P^e—1s2s2p²n'p ⁶P^o transitions in B atom ($n \leq 4$; $n' \leq 4$; $l = s, d$). The number in square brackets represents the power of 10.

上能级	下能级	振子强度		λ
		f_i/f_v	A_i/A_v	
1s2p ² ⁴ P ^e	1s2s2p ⁴ P ^o	1.98[-1]/1.98[-1]	4.54[8]/4.54[8]	170.127 170.199 ± 0.005 ^a , 170.217 ± 0.005 ^b 170.199 ^c , 170.18 ^d
1s2s3p ⁴ P ^o	1s2p ² ⁴ P ^e	1.08[-3]/1.06[-3]	1.63[7]/1.60[7]	66.554 66.552 ± 0.005 ^a , 66.554 ^c , 66.54 ^d
1s2s4p ⁴ P ^o	1s2p ² ⁴ P ^e	2.64[-2]/2.64[-2]	7.80[8]/7.79[8]	47.540 47.542 ± 0.004 ^a , 47.539 ^c
1s2p3s ⁴ P ^o	1s2p ² ⁴ P ^e	1.12[-1]/1.12[-1]	2.33[9]/2.33[9]	56.731 56.730 ± 0.005 ^b , 56.71 ^d
1s2p4s ⁴ P ^o	1s2p ² ⁴ P ^e	1.69[-2]/1.67[-2]	6.53[8]/6.46[8]	41.499 41.50 ± 0.01 ^b
1s2p3d ⁴ P ^o	1s2p ² ⁴ P ^e	1.98[-1]/1.98[-1]	5.42[9]/5.42[9]	49.342 49.340 ± 0.003 ^a , 49.342 ± 0.05 ^b 49.343 ^c
1s2p4d ⁴ P ^o	1s2p ² ⁴ P ^e	4.80[-2]/4.86[-2]	2.02[9]/2.05[9]	39.759 39.791 ± 0.004 ^a , 39.786 ^c
1s2p3p ⁴ P ^e	1s2s2p ⁴ P ^o	4.36[-2]/4.36[-2]	1.83[9]/1.83[9]	39.837 39.841 ± 0.003 ^a , 39.840 ^c 39.841 ± 0.003 ^e
1s2p3p ⁴ P ^e	1s2s3p ⁴ P ^o	6.92[-2]/6.89[-2]	8.09[7]/8.05[7]	238.165 238.086 ± 0.005 ^a , 238.086 ^c 238.14 ± 0.02 ^f , 238.2 ± 0.1 ^g
1s2s4p ⁴ P ^o	1s2p3p ⁴ P ^e	7.93[-3]/7.97[-3]	1.75[6]/1.75[6]	552.216
1s2p3p ⁴ P ^e	1s2p3s ⁴ P ^o	2.34[-1]/2.35[-1]	3.97[7]/3.98[7]	626.128
1s2p4s ⁴ P ^o	1s2p3p ⁴ P ^e	1.51[-1]/1.51[-1]	2.40[8]/2.39[8]	205.213 205.351 ± 0.006 ^a , 205.340 ^c
1s2p3d ⁴ P ^o	1s2p3p ⁴ P ^e	3.23[-2]/3.20[-2]	2.35[6]/2.33[6]	959.229
1s2p4d ⁴ P ^o	1s2p3p ⁴ P ^e	4.69[-2]/4.88[-2]	1.10[8]/1.14[8]	168.709 169.221 ± 0.005 ^a , 169.221 ^c
1s2p4p ⁴ P ^e	1s2s2p ⁴ P ^o	1.57[-2]/1.56[-2] 1.545[-2] ^d	9.79[8]/9.75[8]	32.716 32.721 ± 0.004 ^a , 32.7187 ^c 32.71 ^d , 32.721 ± 0.004 ^e 32.71 ± 0.02 ^g
1s2p4p ⁴ P ^e	1s2s4p ⁴ P ^o	4.38[-2]/4.38[-2]	3.87[7]/3.87[7]	273.736
1s2p4p ⁴ P ^e	1s2p3s ⁴ P ^o	4.15[-2]/4.17[-2]	1.38[8]/1.39[8]	141.620 141.640 ± 0.009 ^a , 141.64 ± 0.02 ^b , 141.598 ^c , 141.63 ^d
1s2p4p ⁴ P ^e	1s2p4s ⁴ P ^o	3.22[-1]/3.21[-1]	7.38[6]/7.36[6]	1691.918
1s2p4p ⁴ P ^e	1s2p3d ⁴ P ^o	1.81[-2]/1.84[-2]	2.36[7]/2.38[7]	226.166
1s2s2p3s ⁵ P ^o	1s2s2p ² ⁵ P ^e	1.17[-1]/1.17[-1]	1.31[9]/1.31[9]	76.974
1s2s2p3p ⁵ P ^e	1s2s2p3s ⁵ P ^o	3.12[-1]/3.16[-1]	5.42[7]/5.51[7]	621.686
1s2s2p4p ⁵ P ^e	1s2s2p3s ⁵ P ^o	7.98[-3]/8.82[-3]	1.15[7]/1.26[7]	215.797
1s2s2p4s ⁵ P ^o	1s2s2p ² ⁵ P ^e	1.48[-2]/1.48[-2]	2.87[8]/2.88[8]	58.597
1s2s2p4s ⁵ P ^o	1s2s2p3p ⁵ P ^e	2.10[-1]/2.10[-1]	8.53[7]/8.52[7]	405.548
1s2s2p4p ⁵ P ^e	1s2s2p4s ⁵ P ^o	4.50[-1]/4.98[-1]	9.37[6]/1.04[7]	1786.798
1s2s2p3d ⁵ P ^o	1s2s2p ² ⁵ P ^e	1.46[-1]/1.45[-1]	2.45[9]/2.44[9]	63.030

表 6 (续)

上能级	下能级	振子强度	跃迁概率	λ
		f_i/f_v	A_i/A_v	
1s2s2p3d $^5P^o$	1s2s2p3p $^5P^e$	8.66[-2]/8.69[-2]	9.25[6]/9.29[6]	790.207
1s2s2p4p $^5P^e$	1s2s2p3d $^5P^o$	1.06[-2]/1.00[-2]	2.18[6]/2.07[6]	568.193
1s2s2p4d $^5P^o$	1s2s2p $^2^5P^e$	5.10[-2]/4.95[-2]	1.11[9]/1.08[9]	55.241
1s2s2p4d $^5P^o$	1s2s2p3p $^5P^e$	3.19[-2]/3.08[-2]	2.61[7]/2.52[7]	285.503
1s2s2p4d $^5P^o$	1s2s2p4p $^5P^e$	1.47[-1]/1.47[-1]	2.23[6]/2.23[6]	2095.831
1s2s2p $^2^3p^6P^o$	1s2s2p $^2^3s^6P^e$	3.09[-1]/2.82[-1]	1.46[7]/1.33[7]	1180.092
1s2s2p $^2^4s^6P^e$	1s2s2p $^2^3p^6P^o$	3.64[-2]/3.47[-2]	1.79[6]/1.72[6]	1163.518
1s2s2p $^2^4p^6P^o$	1s2s2p $^2^4s^6P^e$	2.89[-1]/2.80[-1]	1.07[6]/1.03[6]	4602.359
1s2s2p $^2^3d^6P^e$	1s2s2p $^2^3p^6P^o$	3.44[-1]/3.10[-1]	1.43[7]/1.29[7]	1264.244

a, 文献 [16] 实验; b, 文献 [8] 实验; c, 文献 [16] 理论; d, 文献 [7] Rayleigh-Ritz 变分; e, 文献 [9] 实验; f, 文献 [10] 实验; g, 文献 [6] 实验.

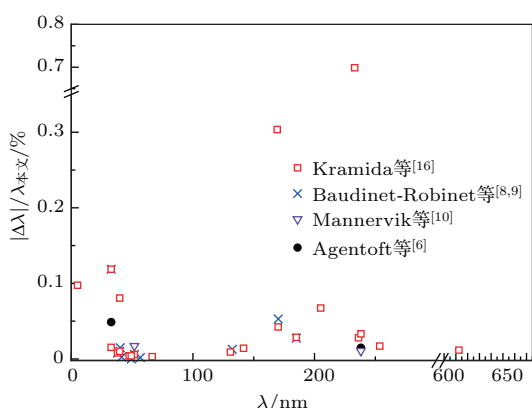


图 3 (网刊彩色) 本文的计算 B 离子内壳层激发高自旋态电偶极跃迁波长和实验数据 [6,8-10,16] 对比的相对偏差
Fig. 3. (color online) Relative deviation of the calculated electric dipole transition wavelength and the experimental data [6,8-10,16] for the core-excited high-spin states of B ion.

4 结 论

本文采用多组态相互作用 Rayleigh-Ritz 变分方法, 计算了 B 原子 (离子) 内壳层激发高自旋态里德伯系列的非相对论能量和精细结构劈裂, 并利用截断变分方法计算了高 l 系列分波的非相对论能量修正. 考虑了相对论修正、质量极化效应、QED 效应和高阶相对论效应, 得到了精确的相对论能量. 利用精确计算的波函数, 对 B 原子 (离子) 高自旋态系列电偶极辐射跃迁振子强度、跃迁概率、跃迁波长展开计算. 跃迁振子强度的长度规范和速度规范结果总体上显示出良好的一致性, 从而证明本文计算的波函数是比较精确的. 相比文献中的理论数据, 本文计算的 B 原子 (离子) 内壳层激发高自旋态的能级和辐射跃迁数据与实验数据符合得更好. 对

于一些 B 原子和 B⁺ 离子的高自旋激发态, 相关的能级和跃迁数据为首次报道. 本文的理论计算结果可为相关的实验光谱线的标定提供有价值的理论参考数据.

参考文献

- [1] Johansson S G, Litzén U, Kasten J, Kock M 1993 *Astrophys. J.* **403** L25
- [2] Lin B, Berry H G, Shibata T, Livingston A E, Garnir H, Bastin T, Désesquelles J 2004 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **37** 2797
- [3] Gu M F, Beiersdorfer P, Lepson J K 2011 *Astrophys. J.* **732** 91
- [4] Martinson I, Bickel W S, Olrne A 1970 *J. Opt. Soc. Am.* **60** 1213
- [5] Agentoft M, Andersen T, Chung K T 1984 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **17** L433
- [6] Agentoft M, Andersen T, Chung K T, Davis B F 1985 *Phys. Scr.* **31** 74
- [7] Chung K T, Bruch R, Träbert E, Heckmann P H 1984 *Phys. Scr.* **29** 108
- [8] Baudinet-Robinet Y, Garnir H P, Dumont P D 1986 *Phys. Rev. A* **34** 4722
- [9] Baudinet-Robinet Y, Dumont P D, Garnir H P, Träbert E, Heckmann P 1987 *Z. Phys. D: Atoms, Molecules and Clusters* **7** 47
- [10] Mannervik S, Cederquist H, Martinson I 1986 *Phys. Rev. A* **34** 231
- [11] Mannervik S, Cederquist H, Martinson I, Brage T, Fischer C F 1987 *Phys. Rev. A* **35** 3136
- [12] Jannitti E, Nicolosi P, Tondello G 1984 *Physica C* **124** 139
- [13] Lynam W G, Carroll P K, Costello J T, Evans D, O’Sullivant G 1992 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **25** 3963
- [14] Ryabtsev A N, Kink I, Awaya Y, Ekberg J O, Mannervik S, Ölme A, Martinson I 2005 *Phys. Scr.* **71** 489

- [15] Kramida A E, Ryabtsev A N 2007 *Phys. Scr.* **76** 544
- [16] Kramida A E, Ryabtsev A N, Ekberg J O, Kink I, Mannervik S, Martinson I 2008 *Phys. Scr.* **78** 025301
- [17] Fuhr J R, Wiese W L 2010 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **39** 013101
- [18] Müller A, Schippers S, Phaneuf R A, Scully S W J, Aguilar A, Cisneros C, Gharaibeh M F, Schlachter A S, McLaughlin B M 2014 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **47** 135201
- [19] Beck D R, Nicolaidis C A 1977 *Phys. Lett. A* **61** 227
- [20] Gou B C, Deng W S 2000 *Phys. Rev. A* **62** 032705
- [21] Yang H Y, Chung K T 1995 *Phys. Rev. A* **51** 3621
- [22] Gou B C, Wang F 2004 *Phys. Rev. A* **69** 042513
- [23] Qu L H, Wang Z W, Li B W 1998 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **31** 2469
- [24] Qu L H, Wang Z W, Li B W 1998 *Chin. Phys. Lett.* **15** 329
- [25] Sun Y, Liu D D, Mei M F, Zhang C M, Han C, Hu F, Gou B C 2015 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* **167** 145
- [26] Brooks R L, Hardis J E, Berry H G, Curtis L J, Cheng K T, Ray W 1980 *Phys. Rev. Lett.* **45** 1318
- [27] Larsson S, Crossley R 1982 *Int. J. Quantum Chem.* **22** 837
- [28] Ritz W, Reine J 1908 *Agnew. Math.* **35** 1
- [29] Chung K T 1979 *Phys. Rev. A* **20** 1743
- [30] Davis B F, Chung K T 1984 *Phys. Rev. A* **29** 1878
- [31] Drake G W F 1982 *Adv. Mol. Phys.* **18** 399
- [32] Lin B, Berry H G, Shibata T, Livingston A E, Garnir H P, Bastin T, Désevelles J, Savukov I 2003 *Phys. Rev. A* **67** 062507
- [33] Sun Y, Gou B C, Zhu J J 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 3878 (in Chinese) [孙言, 苟秉聪, 朱婧晶 2010 物理学报 **59** 3878]
- [34] Chung K T, Bruch R 1983 *Phys. Rev. A* **28** 1418

Energy levels and radiative transitions of the core-excited high-spin states in boron atom (ion)*

Qian Xin-Yu¹⁾ Sun Yan^{1)†} Liu Dong-Dong¹⁾ Hu Feng¹⁾
Fan Qiu-Bo¹⁾ Gou Bing-Cong²⁾

1) (School of Mathematic and Physical Science, Xuzhou University of Technology, Xuzhou 221018, China)

2) (School of Physics, Beijing Institute of Technology, Beijing 100081, China)

(Received 25 November 2016; revised manuscript received 18 April 2017)

Abstract

Energy levels of the core-excited high-spin Rydberg states ($^{4,5,6}L$, $L = S, P$) in boron atom (ion) are calculated by the Rayleigh-Ritz variation method with using large-scale multi-configuration wave functions. The important orbital-spin angular momentum partial waves are selected based on the rule of configuration interaction. The computational convergence is discussed by the example of the contribution from each partial wave in the non-relativistic energy calculations of the high-spin state $1s2s2p^2\ ^5P^e$ in B^+ ion. To saturate the wave functional space and improve the non-relativistic energy, the restricted variational method is used to calculate the restricted variational energy. Furthermore, the mass polarization effect and relativistic energy correction are included by using a first-order perturbation theory. The quantum electrodynamic effects and higher-order relativistic contributions to the energy levels are also calculated by the screened hydrogenic formula. Then, the accurate relativistic energy levels of these high-spin states of B atom (ion) are obtained by adding the non-relativistic energy and all corrections. The fine structure splitting of these high-spin states is also calculated by the Breit-Pauli operators in the first-order perturbation theory. Compared with other theoretical results, our calculation results are in good accordance with the experimental data.

The absorption oscillator strengths, emission oscillator strengths, absorption rates, emission rates, and transition wavelengths of the electric-dipole transitions between these high-spin states of B atom (ions) are systematically calculated by using the optimized wave functions. The oscillator strengths and transition rates are obtained in both the length and velocity gauges. By comparing the two gauge results of oscillator strength, we find that there is a good consistency between them when $f_l < 0.3$, and a reasonable consistency is obtained when $f_l > 0.3$. The accordance between the length and the velocity gauge results reflects that the calculated wave functions in this work are reasonably accurate. The calculated transition data are also compared with the corresponding experimental and other theoretical data. Good agreement is obtained except the wavelengths for two transitions: $1s2p4p\ ^4S^e-1s2p3d\ ^4P^o$ and $1s2p4d\ ^4P^o-1s2p3p\ ^4P^e$. The relative differences between our theoretical results and experimental data are 0.7% and 0.3%, respectively. They need to be verified by further theoretical and experimental studies. For some core-excited high-spin states, the related energy levels and transition data are reported for the first time. Our calculation results will provide valuable data for calculating the spectral lines in the relevant experiments.

Keywords: high-spin state, fine structure splitting, radiative transition, oscillator strength

PACS: 31.15.A-, 31.15.ac, 31.10.+z, 32.30.-r

DOI: 10.7498/aps.66.123101

* Project supported by the Young Scientists Fund of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11604284) and the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11474020).

† Corresponding author. E-mail: suenyangu@163.com