

文章编号:1000-582X(2004)02-0040-04

## 类镍离子精细结构能级和辐射寿命\*

姜仁滨<sup>1,2</sup>, 王晓东<sup>3</sup>, 王宛珏<sup>1,2</sup>, 张军<sup>1</sup>, 沈异凡<sup>1</sup>, 姜晓凤<sup>2</sup>

(1. 新疆大学物理系, 乌鲁木齐 830046; 2. 兰州交通大学, 兰州 730070;

3. 西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070)

**摘要:** 高离化和高激发原子结构参数和跃迁参数的精确计算, 对天体物理、热核聚变实验、等离子体诊断和束箔光谱的识别, 特别是对真空紫外激光器的研究都有重要的意义。用加 Breit 修正和 QED 修正的全相对论多组态自洽场方法, 计算了类镍钼离子 Mo XV 的  $1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d, 4s, 4p, 4d, 4f, 5s, 5p, 5d, 5f, 5g, 6s, 6p, 6d, 6f, 6g$  轨道的 1772 个精细结构能级和辐射寿命以及各能级间的电偶极、磁偶极、电四极和磁四极跃迁的跃迁波长、跃迁几率和振子强度, 能级的计算值和已知实验值之间的相对误差小于 0.38%。从计算结果中发现了一些寿命较长的亚稳态能级。

**关键词:** 类镍离子; 精细结构能级; 辐射寿命

**中图分类号:** O562.3

**文献标识码:** A

类镍离子的各种性质对天体辐射光谱和束箔光谱的识别, 冷却储存环中高离化多电子原子的谱学研究, 电子束离子阱中激发和辐射过程的分析以及高能激光材料的选取都有着重要的意义。一般对多电子原子和离子的低激发态的研究常用非相对论加最小二乘拟合的方法。1988 年, Goldstein W H 等人<sup>[1]</sup>预言并观测到有若干类镍离子都能产生激光, 随后对类镍离子各种性质的研究被广泛地关注。同年, Suger J 等人<sup>[2]</sup>对类镍钼离子辐射光谱进行了分析, 并用非相对论多组态自洽场 (MCHF) 方法识别出了 23 个能级。但对类镍离子各种原子参数进行全面准确的计算, 特别是对高离化态和高激发态原子参数的计算, 则须依据全相对论的方法。1991 年, Zhang H L 等人<sup>[3]</sup>用 Dirac - Fock - Slater (DFS) 方法对类镍离子 ( $60 \leq Z \leq 92$ ) 基态到 249 个能级跃迁的振子强度进行了计算。2000 年, Aggarwal K M 等人<sup>[4]</sup>用全相对论多组态自洽场方法计算了类镍钨、钐、铈、钽、钨离子的 107 个精细结构能级和这些能级间跃迁的自发辐射跃迁几率和振子强度。本文用加 Breit 修正和 QED 修正的全相对论多组态自洽场方法对类镍钼离子 Mo XV 的 1772 个精细结构能级和这些能级的辐射寿命, 以及各能级间的 E1、E2、M1、M2 跃迁的波长、自发辐射几率、受激辐射几率和振子强度进行了计算。能级的计算值和已知实验值<sup>[2]</sup>符合得较好。另外, 从计算结果中还发现了一些

可能辐射激光的亚稳态能级和“自激发”辐射过程, 并对这些亚稳态向一些低能态的跃迁属性和“自激发”辐射过程的物理机制进行了分析。2002 年以来, 王晓东等人还对类铍<sup>[5]</sup>、类铜<sup>[6]</sup>、类钴<sup>[7]</sup>、类锌<sup>[8]</sup>和类镁<sup>[9]</sup>离子的上述原子参数进行了计算。

### 1 计算方法

在相对论量子力学<sup>[10-11]</sup>中单电子的 Dirac 轨道  $|n\kappa m\rangle$  在坐标表象中的表示是:

$$\langle r | n\kappa m \rangle = \frac{1}{r} \begin{pmatrix} P_{n\kappa}(r) & X_{n\kappa}(r/r) \\ iQ_{n\kappa}(r) & X_{-n\kappa}(r/r) \end{pmatrix} \quad (1)$$

其中,  $P_{n\kappa}(r)$  和  $Q_{n\kappa}(r)$  是束缚态径向波函数的大、小分量,  $X_{n\kappa}(r/r)$  是旋量球谐函数。

$N$  电子系统的组态波函数  $|\gamma P J M\rangle$  是 Dirac 轨道的  $N$  阶 Slater 行列式的线性组合。

原子态波函数  $|\Gamma P J M\rangle$  是  $P, J$  和  $M$  相同的组态波函数的线性叠加:

$$|\Gamma P J M\rangle = \sum_{\gamma} C_{\gamma} |\gamma, P J M\rangle \quad (2)$$

其中,  $C_{\gamma}$  是混合系数,  $\gamma$  和  $\Gamma$  代表除  $P, J, M$  外的所有信息, 如轨道占据数、耦合、高位数等。

$N$  电子离子的主要相互作用包含在 Dirac - Cou-

\* 收稿日期: 2003-09-25

基金项目: 国家自然科学基金 (69968001) 资助; 西北师范大学青年教师科研基金

作者简介: 姜仁滨 (1937-), 男, 重庆大足人, 兰州交通大学教授, 主要从事原子结构和原子光谱的研究。

omb 哈密顿中：

$$H^{DC} = \sum_{i=1}^N H_i + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N |r_i - r_j|^{-1} \quad (3)$$

其中,  $H_i = c \sum_{r=1}^3 \alpha_r p_{ri} + (\beta - 1)c^2 + V_{nuc}(r_i)$ ,  $\alpha_r$  和  $\beta$  是 Dirac 矩阵,  $V_{nuc}(r_i)$  是核势场,  $p$  是动量算符。束缚态径向波函数的大、小分量  $P_{nk}(r)$  和  $Q_{nk}(r)$  可以用自洽场方法从径向 Dirac 方程解出, 进一步可以求出原子态波函数。然后用 Briet 修正和包括电子自能、真空极化在内的量子电动力学 (QED) 修正作微扰, 可得波函数和能量的高阶近似值。

单位时间内  $\beta - \alpha$  跃迁的自发辐射几率是：

$$A_{\beta-\alpha} = 2\alpha\omega \frac{[j_\alpha]}{[L]} \begin{pmatrix} j_\beta & L & j_\alpha \\ 1/2 & 0 & -1/2 \end{pmatrix} |\overline{M}_{\alpha\beta}|^2 \quad (4)$$

其中,  $\alpha = e^2/\hbar c$ , 是精细结构常数,  $[L] = 2L + 1$ ,  $L$  是不可约张量的秩,  $\omega = E_\beta - E_\alpha$ , 是能级差。

$$\overline{M}_{\alpha\beta} = \begin{cases} \overline{M}_{\alpha\beta}^e + G\overline{M}_{\alpha\beta}^m & \text{对于电多极跃迁,} \\ \overline{M}_{\alpha\beta}^m & \text{对于磁多极跃迁,} \end{cases}$$

这里的  $G$  是规范参量, 在 Coulomb 规范中  $G = 0$ , 在 Babushkin 规范中  $G = [(L + 1)/L]^{1/2}$ 。在非相对论极限下,  $G = 0$  给出辐射矩阵元的速度形式, 而  $G = [(L + 1)/L]^{1/2}$  给出辐射矩阵元的长度形式。  $\overline{M}_{\alpha\beta}^e$ 、 $\overline{M}_{\alpha\beta}^m$

和  $\overline{M}_{\alpha\beta}^l$  决定于 Dirac 轨道的大、小分量和能量。

由自发辐射几率可以算出  $\beta - \alpha$  跃迁的振子强度<sup>[10]</sup>：

$$f_{\beta-\alpha} = \frac{[j_\beta]}{[j_\alpha]} \frac{A_{\beta-\alpha}}{2\alpha\omega^2} \quad (5)$$

由自发辐射几率还可以算出  $\beta$  原子态的辐射寿命<sup>[10]</sup>：

$$T_\beta = \frac{1}{\sum_\alpha A_{\beta-\alpha}} \quad (6)$$

## 2 结果分析

根据上述全相对论多组态自洽场方法, 选用两参数 Fermi 球对称核电荷分布和扩展平均能级模型对若干类镍离子的  $1s, 2s, 2p_-, 2p_+, 3s, 3p_-, 3p_+, 3d_-, 3d_+, 4s, 4p_-, 4p_+, 4d_-, 4d_+, 4f_-, 4f_+, 5s, 5p_-, 5p_+, 5d_-, 5d_+, 5f_-, 5f_+, 5g_-, 5g_+, 6p_-, 6p_+, 6d_-, 6d_+, 6f_-, 6f_+, 6g_-, 6g_+$  轨道的 1 772 个原子态的各种结构参数和跃迁参数进行了计算。由于篇幅所限, 表 1 中只列出了类镍钼离子 Mo XV 的 32 个精细结构能级  $E_c$ 、辐射寿命  $T$  和 Sugar J 等人<sup>[2]</sup> 的能级实验值  $E_e$  以及  $E_e$ 、 $E_c$  间的相对误差  $e$ 。

表 1 类镍钼离子的精细结构能级的实验值  $E_e$ 、计算值  $E_c$ <sup>[2]</sup> 及其间的相对误差  $e$  和辐射寿命  $T$

No.	CONFIG.	J.	$E_c/\text{cm}^{-1}$	$E_e/\text{cm}^{-1}$	$e$	$T/\text{s}$	No.	CONFIG.	J.	$E_c/\text{cm}^{-1}$	$E_e/\text{cm}^{-1}$	$e$	$T/\text{s}$
1	$3d_-, ^4 3d^6$	0	0	0			17	$3d_-, ^4 3d^5 4p$	2	2014873	2008190	0.33%	5.97 - 11
2	$3d_-, ^4 3d^5 4s$	3	1689376	1694910	0.33%		19	$3d_-, ^4 3d^5 4d_+$	4	2367030	2364270	0.12%	1.94 - 11
3	$3d_-, ^4 3d^5 4s$	2	1694469	1699860	0.32%	1.30 - 07 20		$3d_-, ^3 3d^6 4d_+$	2	2368805			2.16 - 11
4	$3d_-, ^3 3d^6 4s$	1	1715720	1721770	0.35%	4.35 - 03 21		$3d_-, ^3 3d^6 4d$	5	2369665			2.22 - 11
5	$3d_-, ^3 3d^6 4s$	2	1720643	1726410	0.33%	8.81 - 08 37		$3d_-, ^4 3d^5 4f$	1	2750273	2749060	0.04%	1.47 - 11
6	$3d_-, ^3 3d^6 4p_+$	2	1939280	1932860	0.33%	1.10 - 10 46		$3d_-, ^3 3d^6 4f_+$	3	2773635	2773230	0.01%	1.74 - 11
7	$3d_-, ^3 3d^6 4p_+$	3	1946814	1939450	0.38%	8.45 - 11 55		$3d_-, ^3 3d^6 4f_+$	1	2837861	2827410	0.37%	1.53 - 13
8	$3d_-, ^3 3d^6 4p_+$	2	1968656	1962160	0.33%	8.26 - 11 108		$3d_-, ^4 3d^5 5f$	5	3346460			1.64 - 11
9	$3d_-, ^3 3d^6 4p_+$	1	1969254	1963620	0.29%	9.15 - 11 110		$3d_-, ^4 3d^5 5f_+$	1	3352926	3358600	0.17%	1.91 - 12
10	$3d_-, ^4 3d^5 4p$	4	1974622	1968200	0.33%	5.97 - 11 131		$3p_-, ^2 3p^3 3d_-, ^4 3d^6 4p$	1	3393831	3394700	0.03%	2.44 - 13
11	$3d_-, ^3 3d^6 4p$	2	1985499	1978020	0.38%	6.60 - 11 148		$3d_-, ^3 3d^6 6p$	2	3475529			1.40 - 11
12	$3d_-, ^3 3d^6 4p$	1	1989231	1982270	0.35%	2.59 - 12 149		$3d_-, ^3 3d^6 6p$	3	3477143			2.69 - 11
13	$3d_-, ^3 3d^6 4p$	0	1989552	1982810	0.34%	8.39 - 11 153		$3d_-, ^4 3d^4 4s^2$	4	3485772			2.21 - 08
14	$3d_-, ^4 3d^5 4p$	3	1990029	1984950	0.26%	5.87 - 11 161		$3d_-, ^3 3d^5 4s^2$	3	3509417			2.07 - 08
15	$3d_-, ^3 3d^6 4p$	3	2005807	1999880	0.30%	5.99 - 11 162		$3d_-, ^4 3d^4 4s^2$	2	3514362			1.36 - 08
16	$3d_-, ^4 3d^5 4p$	1	2009844	2003420	0.32%	1.08 - 11 163		$3d_-, ^3 3d^5 4s^2$	2	3539079			1.04 - 08

从表 1 中可以看到: 1) Mo XV 离子精细结构能级的最大相对误差是 0.38%, 最小相对误差是 0.01%, 平均相对误差是 0.27%, 且前 17 个能级的计算值与实验值的个数相同, 而以后的计算能级比实验能级要密集的多。2) Mo XV 离子第 2 能级的辐射寿命为  $\infty$ , 因为第 2 能级到基态的跃迁是被严格禁止的, 这和汞、镉、锌、镁、铍的最低能级的亚稳性质相似。3) 第 3、4、5 能级只能通过磁偶极跃迁和电四极跃迁到低能级, 寿命较长:  $T_3 = 1.30 \times 10^{-7} \text{s}$ ;  $T_4 = 4.35 \times 10^{-3} \text{s}$ ;  $T_5 =$

$8.81 \times 10^{-8} \text{s}$ 。4) Mo XV 离子第 153、161、162、163 能级的辐射寿命也较长, 其中,  $T_{153} = 2.21 \times 10^{-8} \text{s}$ ,  $T_{161} = 2.07 \times 10^{-8} \text{s}$ ... 但它们可通过电偶极跃迁到低能态。上述能级都是亚稳态能级。5) 从第 153 能级到第 108、149 能级、从第 162、163 能级到第 148、149 等能级的跃迁其上能级的辐射寿命比下能级的辐射寿命大两个数量级以上。在选择性激发时, 这些亚稳态向低能态的跃迁都是很有可能实现粒子数反转而辐射激发的跃迁。

在图1中给出了这些亚稳态向低能态跃迁的网图。网图中每条横线表示能级,横线侧面的数字为能级序号,上面的数字为该能级的辐射寿命;每条竖线表示跃迁,竖线右面的数字是该跃迁的波长(单位:nm),左面的数字是该跃迁的振子强度。

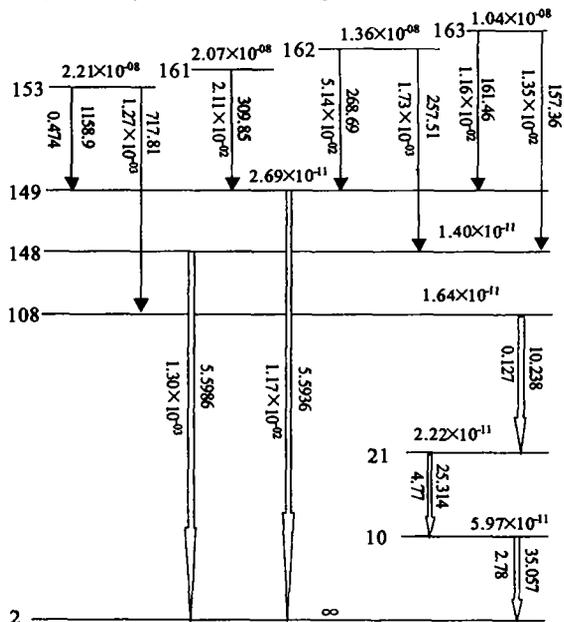


图1 类镍钼离子电偶极跃迁的辐射寿命、波长和振子强度

从图2和图3中可以看到:当Mo XV离子在基态受到外界光激发、电子激发或离子碰撞激发使2个3d电子激发到4s轨道后,在这个激发态中的2个4s电子同时回到3d轨道的跃迁和1个4s电子向3d轨道单独跃迁都是被禁戒的。但2个4s电子由于辐射场的影响和电子间的关联作用,其中的一个4s电子向另一个4s电子传递了一定的能量向3d轨道跃迁的同时,另一个4s电子获得此能量被激发到5f或6p等轨道并放出一个光子,这个过程却是允许跃迁。因为这种能量的传递过程有一定的偶然性,所以这个激发态的寿命较长。

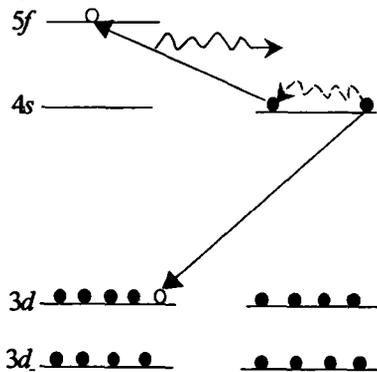


图2 153-108的跃迁

像这样一个电子向低能级跃迁时放出的能量被另一个电子吸收后跃迁到较高能级的过程普遍存在于多

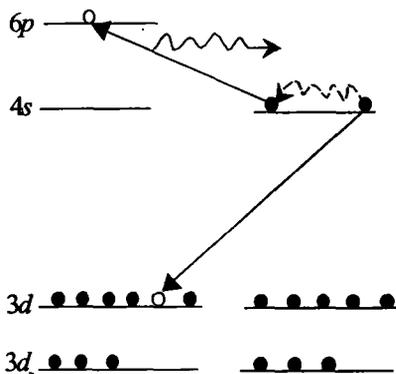


图3 163-149的跃迁

种原子和离子的激发态之中。称这种过程为“自激发”辐射过程。

从图4中可以看到:一个4s电子向另一个4s电子传递了一定的能量使其刚能被激发到5f或更高轨道的同时向3d轨道跃迁并放出一个光子,这个过程也是允许跃迁。这也是“自激发”辐射过程的一种可能形式。

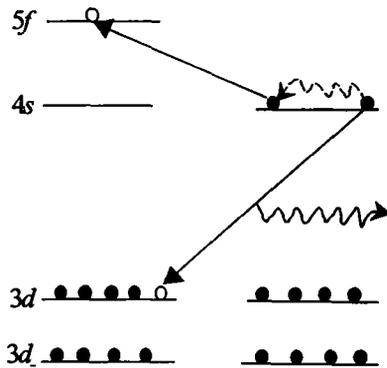


图4 153-108的跃迁

从图5中可以看到:一个4s电子向3d轨道跃迁时放出的能量,一部分被一个3d电子吸收后跃迁到3d轨道,另一部分被另一个4s电子吸收后跃迁到6p轨道,并放出一个光子,像这样的过程称为“双电子自激发”辐射过程。

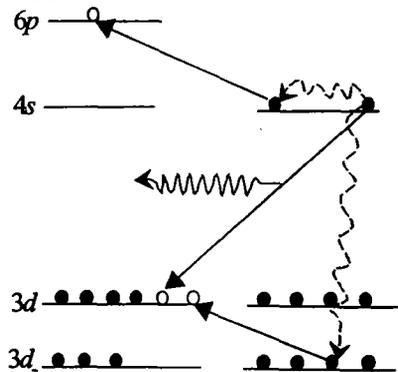


图5 163-148的跃迁

图6中可以看到:一个4s电子向3d轨道跃迁时放出的能量,一部分被一个3d电子吸收后跃迁到3d

