

doi: 10.3969/j.issn.0490-6756.2019.01.020

Al VIII的能级和跃迁参数的研究

王慧文¹, 张莉¹, 蒋刚^{1,2}

(1. 四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065; 2. 高能密度物理与技术重点实验室, 成都 610065)

摘要: 基于多组态 Dirac-Fock 方法对类 C 离子 Al VIII 的能级结构以及跃迁参数进行计算. Breit 修正和 QED 修正以及核的有效体积效应和核的质量修正等效效应加入到体系的哈密顿量, 作为能级和波函数的高阶修正. 与实验值和其他计算的理论值做了比较. 分析计算结果, 计算基态和激发态的能级等数据与实验值和其他理论值符合得比较好. 计算的数据弥补了光谱数据的不足, 为以后研究 Al VIII 的实验奠定了理论基础.

关键词: 多组态 Dirac-Hartree-Fock; 能级; 跃迁几率; 振子强度

中图分类号: O562.1 **文献标识码:** A **文章编号:** 0490-6756(2019)01-0109-05

Energy levels and transition parameters of Al VIII

WANG Hui-Wen¹, ZHANG Li¹, JIANG Gang^{1,2}

(1. Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610065, China;

2. The key Laboratory of High Energy Density Physics and Technology, Ministry of Education, Chengdu 610065, China)

Abstract: Based on the multi-configuration Dirac-Fock method, the energy and transition parameters of C-like Al were calculated. Breit and QED correction as well as the effective volume effect of the nucleus and the nuclear mass correction effects were added to the Hamiltonian. The calculated data are in good agreement with the experimental values and other theoretical values. The calculated data compensate for the lack of spectral data and provide a theoretical basis for future researchers' experiments on Al VIII.

Keywords: Multi-configuration Dirac-Hartree-Fock; Energy level; Transition probability; Oscillator strength

1 引言

类 C 离子的光谱线在紫外线 (UV 光谱线; 2000~4000 Å), 远紫外线 (FUV; 1220~2000 Å), 极紫外线 (EUV; 100~1220 Å) 和 X 射线 (<100 Å) 区域经常从太阳大气层中获得^[1], 这些谱线的能级和跃迁几率在天体物理、聚变等离子体、X 射线激光和原子碰撞的研究方面有着非常重要的光谱应用^[2-5]. Al VIII 对于研究 K α x-ray 跃迁有着重要的地位, 因为它是最丰富的元素之一, 是恒星和气态星云演化的重要组成部分, 这些星体大都处于

高温等离子体状态^[6]. 许多的研究员进行了能级和跃迁参数的计算^[7-12]. 目前基于多组态 Dirac-Fock 理论^[13-18]对 Al VIII 离子的计算数据比较零散, 没有得到一个完整的体系, 因此系统地研究 Al VIII 是很有必要的. 近期在 2014 年 Wang 等人^[19]基于多体微扰理论 (MBPT) 对类 C 离子 ($13 \leq Z \leq 36$) 的能级和跃迁参数进行计算. 因此系统地计算类 C 离子 Al VIII 是很有必要的, 同时也为实验测量提供理论依据.

在本文中, 基于多组态 Dirac-Fock 方法, 讨论了 Al VIII 离子的能级, 电偶极跃迁几率 (E1) 和振子

收稿日期: 2017-05-17

基金项目: 国家自然科学基金(11474208)

作者简介: 王慧文(1990-), 男, 汉族, 山西吕梁人, 硕士生, 主要研究等离子体中的原子与分子物理过程. E-mail: 990093255@qq.com

通讯作者: 张莉. E-mail: lizhang@scu.edu.cn, 蒋刚. E-mail: gjiang@scu.edu.cn

强度,组态相互作用包括 Breit 相互作用.

2 组态相互作用的产生

基于多组态 Dirac-Hartree-Fock(MCDHF)方法计算原子的光谱参数. 在计算过程中,采用优化能级(EOL)的方法对能级的轨道进行优化,考虑了组态相互作用,Breit 修正和 QED 效应等多种修正. 选取了 Al VIII 的组态 $2s^2 2p^2$, $2s 2p^3$, $2p^4$ 原子态,并且计算了其能级. 为了观察其自洽场迭代随着主量子数 n 值增加的收敛性,采用逐步增大主量子数 n 的方法. 本次计算采用限制不同数目的电子激发到未占据轨道,得到了在不同情况下的扩展组态波函数.

首先采用 Thomas-Fermi 模型得到初始径向波函数,优化电子占据的轨道,在只考虑价电子关联前提下进行组态扩展. 考虑到组态关联需要满足几点:(1)相同的宇称,(2)相同的总角动量 J 值,(3)组态间能级相近,对于能级差值较大的组态相互作用小. 可以通过增加参考组态,偶宇称 $2s^2 2p^2$, $2p^4$, $2s 2p^2 3d$, $2s^2 3d^2$ 和奇宇称 $2s 2p^3$ 组态作为参考组态,单双(SD)激发到活动轨道上,采用价电子关联效应(VV),其活动轨道(AS)按照上面形式增加. 计算过程中,固定先前优化的能级按照

上面的活跃集方法单双激发电子,逐步增加电子壳层,最后达到收敛的结果. 我们优化参考组态 $2s^2 2p^2$ 和 $2p^4$ 的 $n=2$ 轨道,然后优化 $n=3$ 轨道,同时保持 $n=2$ 轨道固定,以此类推,分别优化 $n=4$, 5 , 6 , 7 轨道,优化所有精细结构能级是 $(2J+1)$ 加权平均最后考虑的扩展组态活跃集(AS)可以表示为:

$$AS1 = \{2s, 2p\}$$

$$AS2 = AS1 + \{3s, 3p, 3d\}$$

$$AS3 = AS2 + \{4s, 4p, 4d, 4f\}$$

$$AS4 = AS3 + \{5s, 5p, 5d, 5f, 5g\}$$

$$AS5 = AS4 + \{6s, 6p, 6d, 6f, 6g, 6h\}$$

$$AS6 = AS5 + \{7s, 7p, 7d, 7f, 7g, 7h\}$$

产生组态的初始状态波函数基组列表后,开始对多电子体系的哈密顿量的矩阵元进行角积分,最后加入修正效应.

3 结果与讨论

3.1 能级

Al VIII 离子的基态以及激发态能级的计算值以及 NIST 值^[19]列在表 1 中. 在表 1 中列出 Al XIII 偶宇称组态 $2s^2 2p^2$ 和 $2p^4$ 随着扩展活跃轨道的增加得到的能级结果,其中包含 Breit 修正和 QED 修正.

表 1 态 $2s^2 2p^2$ 和态 $2s 2p^3$ 能级(cm^{-1})

Tab. 1 The energy levels (in cm^{-1}) of states $2s^2 2p^2$ and $2s 2p^3$

Teams	AS4	AS5	AS6	AS7	AS8	NIST	
$2s^2 2p^2$	3P_0		0	0	0	0	
	3P_1	1641.93	1647.46	1648.54	1649.7	1650.06	1710
	3P_2	4348.32	4359.53	4361.27	4364.34	4365.04	4420
	1D_2	47 080.64	46 869.79	46 794.32	46 757.06	46 746.29	46 720
	1S_0	96 755.56	96 347.25	96 195.91	96 117.39	96 095.88	96 260
	$2s 2p^3$	5S_2	133 447.25	133 773.48	133 946.78	134 022.87	134 053.51
3D_3		262 900.73	262 796.86	262 773.04	262 778.34	262 857.71	262 180
3D_2		263 004.5	262 903.5	262 879.87	262 885.21	262 964.31	262 270
3D_1		263 098.38	263 000.53	262 977.59	262 983.21	263 062.16	262 330
3P_1		309 965.64	309 715.57	309 622.61	309 600.89	309 685.73	309 110
3P_2		310 008.92	309 752.06	309 657.93	309 635.64	309 720.55	309 110
3P_0		310 026.23	309 779.08	309 686.5	309 664.96	309 749.73	309 110

从表 1 中可以得到随着活跃集(AS)的增加,计算结果与 NIST 值逐渐靠近,尤其对于高激发态,如态 $2s 2p^3 \text{ } ^3D_1$ 扩展活跃集到 AS7 使得能级改变了 1267.78 cm^{-1} ,更加接近 NIST 值. 表中也可以看到活跃集 AS7 到 AS8 过程,能级值的变化

较小,基本稳定,得到收敛的计算结果. 基于计算时间的考虑我们最后选取活跃轨道 AS7.

表 2 中给出计算结果, a 表示计算值与 NIST^[19]值的相对百分比,可以看到基态的相对值较大为 3.53%,其主要原因可能是由于忽略的关

联效应,使得能级值偏低. 其他计算结果符合较好 (低于 1%).

表 2 Al VIII 的能级值 (cm⁻¹)

Tab. 2 The energy levels (in cm⁻¹) of Al VIII

Config.	Term	Cal.	NIST	a(%)
2s ² 2p ²	³ P ₀	0	0	0
	³ P ₁	1649.7	1710	3.53
	³ P ₂	4364.34	4420	1.26
	¹ D ₂	46 757.06	46 720	0.08
	¹ S ₀	96 117.39	96 260	0.15
2s2p ³	⁵ S ₂	134 022.87	133 840	0.14
	³ D ₃	262 778.34	262 180	0.23
	³ D ₂	262 885.21	262 270	0.24
	³ D ₁	262 983.21	262 330	0.25
	³ P ₁	309 600.89	309 110	0.16
	³ P ₂	309 635.64	309 110	0.17
	³ P ₀	309 664.96	309 110	0.18
	¹ D ₂	398 749.44	397 020	0.44
	³ S ₁	406 581.54	404 200	0.59
	¹ P ₁	446 241.24	444 570	0.38
2p ⁴	³ P ₂	610 375.21	608 100	0.37
	³ P ₁	613 482.06	611 180	0.38
	³ P ₀	614 813.4	612 510	0.38
	¹ D ₂	649 451.55	647 310	0.33
	¹ S ₀	740 635.92	738 490	0.29

3.2 Al VIII 的跃迁几率

表 3 中给出了随着活跃集扩展, 2s2p³ ³D₁ 与 2s²2p² ³P₀ 间的线强度的值以及跃迁能级值, 最后达到收敛的结果. 进一步可得到对于同一活跃集的长度规范 (S_l) 和速度规范 (S_v) 几乎相同, 有很好的一致性. 并且随着活跃集的增加, 两种规范趋于一致, 比起速度规范长度规范是更加稳定, 这也说明波函数的近似计算对速度规范更加敏感, 因此选取长度规范.

表 3 跃迁线强度随活跃集变化, 括号内表示 10 的次方

Tab. 3 The line strength variety as the active set. The brackets represent the power of 10

活跃集 (AS)	线强度 (a. u.)		ΔE (cm ⁻¹)
	S _l	S _v	
AS1	1.20 [-01]	1.95 [-01]	264 329.95
AS2	1.10 [-01]	1.50 [-01]	264 927.93
AS3	1.02 [-01]	1.04 [-01]	263 181.61
AS4	1.03 [-01]	1.04 [-01]	263 098.38
AS5	1.03 [-01]	1.04 [-01]	263 000.53
AS6	1.03 [-01]	1.04 [-01]	262 977.59
AS7	1.03 [-01]	1.05 [-01]	262 983.21

表 4 Al VIII 的跃迁参数, 括号表示 10 的指数

Tab. 4 The transition parameters of Al VIII. The brackets represent the power of 10

组态 1	组态 2	跃迁能级 (cm ⁻¹)	跃迁几率长度规范 (s ⁻¹)	跃迁几率速度规范 (s ⁻¹)	权重振子强度 (gf)
2s2p ³ ³ D ₁	2s ² 2p ² ³ P ₀	262 983.21	1.263[09]	1.283[09]	8.212[-02]
2s2p ³ ³ P ₁	2s ² 2p ² ³ P ₀	309 600.89	1.706 [09]	1.793[09]	8.005 [-02]
2s2p ³ ³ S ₁	2s ² 2p ² ³ P ₀	406 581.55	3.687 [09]	3.945[09]	1.003 [-01]
2s2p ³ ¹ P ₁	2s ² 2p ² ³ P ₀	446 241.24	3.593[05]	4.491[05]	8.114 [-06]
2s2p ³ ³ D ₁	2s ² 2p ² ¹ S ₀	166 865.82	2.141 [05]	2.144[05]	3.459[-05]
2s2p ³ ³ P ₁	2s ² 2p ² ¹ S ₀	213 483.5	1.076 [06]	1.250[06]	1.062[-04]
2s2p ³ ³ S ₁	2s ² 2p ² ¹ S ₀	310 464.16	3.565[06]	3.648[06]	1.663 [-04]
2s2p ³ ¹ P ₁	2s ² 2p ² ¹ S ₀	350 123.86	5.217[09]	5.457[09]	1.914[-01]
2p ⁴ ³ P ₀	2s2p ³ ³ D ₁	351 830.2	1.291 [10]	1.381[10]	1.564[-01]
2p ⁴ ³ P ₀	2s2p ³ ³ P ₁	305 212.51	3.584 [09]	3.762[09]	5.768 [-02]
2p ⁴ ¹ S ₀	2s2p ³ ³ D ₁	477 652.71	1.991[06]	2.326[06]	1.309[-05]
2p ⁴ ¹ S ₀	2s2p ³ ³ P ₁	431 035.03	1.081[07]	1.076[07]	8.724[-05]
2p ⁴ ¹ S ₀	2s2p ³ ³ S ₁	334 054.37	6.068[07]	6.374[07]	8.152[-04]
2p ⁴ ¹ S ₀	2s2p ³ ¹ P ₁	294 394.67	2.112[10]	2.192[10]	3.654[-01]
2s2p ³ ³ P ₀	2s ² 2p ² ³ P ₁	310 109.85	5.344[09]	5.596[09]	9.300[-02]
2p ⁴ ³ P ₁	2s2p ³ ³ P ₀	303 817.10	1.088[09]	1.136[09]	5.301[-02]
2s2p ³ ³ D ₁	2s ² 2p ² ³ P ₁	261 333.50	7.867[08]	7.955[08]	5.181[-02]
2s2p ³ ³ P ₁	2s ² 2p ² ³ P ₁	307 951.19	1.545[09]	1.617[09]	7.320[-02]
2s2p ³ ³ S ₁	2s ² 2p ² ³ P ₁	404 931.84	1.107[10]	1.185[10]	3.037[-01]
2s2p ³ ¹ P ₁	2s ² 2p ² ³ P ₁	444 591.54	4.338[07]	4.640[07]	9.870[-04]

(续表 4)

组态 1	组态 2	跃迁能级(cm^{-1})	跃迁几率长度规范(s^{-1})	跃迁几率速度规范(s^{-1})	权重振子强度(gf)
$2p^4\text{-}^3P_1$	$2s2p^3\text{-}^3D_1$	350 498.85	3.523[09]	3.763[09]	1.290[-01]
$2p^4\text{-}^3P_1$	$2s2p^3\text{-}^3P_1$	303 881.17	6.330[08]	6.621[08]	3.083[-02]
$2p^4\text{-}^3P_1$	$2s2p^3\text{-}^3S_1$	206 900.52	2.061[09]	2.052[09]	2.166[-01]
$2p^4\text{-}^3P_2$	$2s2p^3\text{-}^1P_1$	167 240.82	3.052[06]	3.034[06]	4.908[-04]
$2p^4\text{-}^3P_1$	$2s2p^3\text{-}^3D_2$	350 596.85	9.552[09]	1.023[10]	3.495[-01]
$2p^4\text{-}^3P_1$	$2s2p^3\text{-}^3P_2$	303 846.42	1.701[09]	1.788[09]	8.287[-02]
$2p^4\text{-}^3P_1$	$2s2p^3\text{-}^1D_2$	214 732.62	2.941[05]	3.370[05]	2.868[-05]
$2p^4\text{-}^3P_2$	$2s2p^3\text{-}^3D_1$	347 392.01	1.698[08]	1.807[08]	1.054[-02]
$2p^4\text{-}^3P_2$	$2s2p^3\text{-}^3P_1$	300 774	8.454[08]	8.801[08]	7.005[-02]
$2p^4\text{-}^3P_2$	$2s2p^3\text{-}^3S_1$	203 793.67	1.923[09]	1.915[09]	3.471[-01]

表 4 列出跃迁能级值、长度规范和速度规范的跃迁参数值和长度规范下的振子强度。基态的混合度较低,得到较好的计算结果,因此,我们只给出 $n=2$ 组态间的电偶极跃迁参数值。两种规范符合较好,这说明得到好的波函数,我们得到的计算结果合理。且这些谱线间有较强的跃迁几率,最弱的跃迁几率为 $3.593 \times 10^5 \text{ s}^{-1}$,这些数据可以为实验的预测以及天体等离子体的研究提供指导。

4 结 论

本文是基于相对论的多组态 Dirac-Fock (MCDHF)方法,利用限制电子活动空间的方法研究了 Al VIII 态 $2s^2 2p^2$, $2s2p^3$, $2p^4$ 能级以及跃迁参数,同时考虑加入电动力学效应(QED)修正, Breit 相互作用,核的有限质量修正以及核的有限体积修正对能级的贡献。发现多参考组态能够更好地描述离子的结构,尤其对高激发态能级。因此选取多参考集得到能级值。计算结果与 NIST 值对比,符合较好。一旦获得波函数,就可以得到跃迁参数。扩展活跃集,对比线强度的长度规范与速度规范值的变化,结果表明速度规范较敏感。因此选择长度规范获得跃迁几率、线强度、权重振子强度和跃迁能级值。这些结果可以为实验预测提供依据。

参考文献:

[1] Wang K, Li D F, Liu H T, *et al.* Systematic calculations of energy levels and transition rates of C-like ions with $Z = 13 - 36$ [J]. *Astrophys J Suppl S*, 2014, 215: 26.

[2] Eidelsberg M, Crifo-Magnant F, Zeippen C J. Forbidden lines in hot astronomical sources [J]. *Astron Astrophys Suppl S*, 1981, 43: 455.

[3] Dalgarno A. Atomic physics from atmospheric and astrophysical studies [J]. *Adv At Mol Phys*, 1979, 15: 37.

[4] Kallman T R, Palmeri P. Atomic data for x-ray astrophysics [J]. *Rev Mod Phys*, 2007, 79: 79.

[5] Brickhouse N S. Atomic data in X-ray astrophysics: the Chandra emission line project [J]. *AIP Conf Proc*, 2000, 543: 142.

[6] Drake G W F. Energy level calculations and E1M1 two photon transition rates in two electron U^{90+} [J]. *Nucl Instrum Meth B*, 1985, 9: 465.

[7] Verdebout S, Nazé C, Jönsson P, *et al.* Hyperfine structures and Landé gJ -factors for $n=2$ states in beryllium-, boron-, carbon-, and nitrogen-like ions from relativistic configuration interaction calculations [J]. *Atom Data Nucl Data*, 2014, 100: 1111.

[8] Liu H, Jiang G, Hu F, *et al.* Intercombination transitions of the carbon-like isoelectronic sequence [J]. *Chin Phys B*, 2013, 22: 073202.

[9] Fischer C F, Tachiev G. Breit-Pauli energy levels, lifetimes, and transition probabilities for the beryllium-like to neon-like sequences [J]. *Atom Data Nucl Data*, 2004, 87: 1.

[10] Huang J, Zhao Q, Jiang G. Systematical study on ground-state ionization potentials for boron and carbon isoelectronic sequences with $Z = 6 - 42$ [J]. *Commun Theor Phys*, 2010, 54: 871.

[11] Peng F, Song S, Jiang G. Transition properties of the $K\alpha$ x-ray from Al through AlXII [J]. *Physica Scripta*, 2007, 76: 501.

[12] Stathopoulos A, Fischer C F. A Davidson program for finding a few selected extreme eigenpairs of a large, sparse, real, symmetric matrix [J]. *Comput Phys Commun*, 1994, 79: 268.

[13] Grant I P, McKenzie B J, Norrington P H, *et al.*

- An atomic multiconfigurational Dirac-Fock package [J]. *Comput Phys Commun*, 1980, 21: 207.
- [14] Grant I P, McKenzie B J, Norrington P H, *et al.* An atomic multiconfigurational Dirac-Fock package [J]. *Comput Phys Commun*, 1984, 35: C-661.
- [15] Kondo T. GFACTOR2001: A program for relativistic atomic g-factor calculations [J]. *Comput Phys Commun*, 2002, 146: 261.
- [16] Bogdanovich P, Karpuškieñė R, Momkauskaitė A. A program of generation and selection of configurations for the configuration interaction method in atomic calculations SELECTCONF [J]. *Comput Phys Commun*, 2005, 172: 133.
- [17] Szasz L. Pair correlations in the Be atom [J]. *Phys Lett*, 1963, 3: 263.
- [18] 朱志艳, 朱正和, 蒋刚. 激光金等离子体中 A_{u}^{50+} 的光谱跃迁和能级寿命的相对论多组态计算 [J]. *四川大学学报: 自然科学版*, 2002, 39: 709.
- [19] Kramida A, Ralchenko Y, Reader J, *et al.* NIST atomic spectra database (Ver. 5. 3) [DB/OL]. Gaithersburg: National Institute of Standards and Technology, 2015 [2016-07-29]. <http://physics.nist.gov/asd>.

引用本文格式:

- 中文: 王慧文, 张莉, 蒋刚. Al VIII 的能级和跃迁参数的研究 [J]. *四川大学学报: 自然科学版*, 2019, 56: 109.
- 英文: Wang H W, Zhang L, Jiang G. Energy levels and transition parameters of Al VIII [J]. *J Sichuan Univ: Nat Sci Ed*, 2019, 56: 109.