

文章编号: 1000-0364(2008) 03-0477-07

高离化态类 Ne 离子的与 X 射线激光有关的 $3p-3s$ 跃迁的理论研究

蒋 军, 颌录有, 董晨钟, 万建杰

(西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070)

摘 要: 利用多组态 Dirac-Fock(MCDF) 理论方法, 系统研究了与 X 射线激光有关的类 Ne 等电子系列离子 ($Z=50\sim 57$) 的 $2s^2 2p^6$ 、 $2s^2 2p^5 3\ell$ 和 $2s 2p^6 3\ell$ ($\ell=s, p, d$) 激发态的能级以及跃迁几率、波长和振子强度. 详细讨论了关联效应对与 X 射线激光有关的能级寿命以及跃迁几率的影响, 给出并分析了与 X 射线激光有关的 $3p-3s$ 跃迁的波长, 几率和振子强度的变化规律, 部分计算结果与已有的理论和实验结果作了比较.

关键词: 高离化态; 跃迁几率; 能级寿命; 关联效应

中图分类号: O562.1 文献标识码: A

Theoretical study on $3p-3s$ transition related with X-ray laser of highly charged Ne-like ions

JIANG Jun, XIE Lu-You, DONG Chen-Zhong, WAN Jian-Jie

(College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China)

Abstract: By using the Multi-configuration Dirac-Fock method(MCDF), the energy levels, transition probabilities, transition wavelengths and oscillator strengths of the excitation configurations $2s^2 2p^5 3\ell$ and $2s 2p^6 3\ell$ ($\ell=s, p, d$) of Ne-like ions ($Z=50\sim 57$) related with X-ray laser have been systematically calculated. The effect of correlation and relaxation on the level lifetimes, transition probabilities and oscillator strengths of the ions were discussed. Some calculated results were compared with the available experimental and other theoretical results.

Key words: highly charged state, level lifetime, transition probability, correlation effects

1 引 言

类 Ne 离子的基组态为 $2s^2 2p^6$, 由于其具有稳定闭壳层结构, 是高温等离子体中最为稳定的离化态之一. 在过去的几十年中, 有关类 Ne 等电子系列离子的实验和理论研究已经有了大量的工作.

1977 年 Vinogradov 等人^[1] 首次提出了利用电子碰撞激发, 类 Ne 离子的 $2p^5 3p$ 和 $2p^5 3s$ 能级能够产生软 x 射线激光机制. 1985 年 Matthews 等人^[2] 首次从实验上成功地得到了类 Ne 离子 Se^{24+} 的两个 $J=2-1(2p^5 3p^1 D_2-2p^5 3s^3 P_1$ 和 $2p^5 3p^3 P_2-2p^5 3s^1 P_1)$ 跃迁的强的增益. 此后, 大量的实验以

收稿日期: 2006-12-10

基金项目: 国家自然科学基金(10434100, 10774122); 高等学校博士学科点专项科研基金(20070736001); 兰州重离子加速器国家实验室原子核理论中心基金; 西北师范大学科技创新工程(NWNU-KJCXGC-03-21)

作者简介: 蒋军(1982-), 男, 甘肃甘谷人, 博士研究生, 主要从事原子结构和电子与离子碰撞方面的研究.

通讯作者: 董晨钟, E-mail: dongcz@nwnu.edu.cn

及各种理论方法都对这种类型的跃迁谱线进行了研究. 例如, 在实验方面, 人们成功地观测到了类 Ne 等电子系列离子从 Si^{4+} ($Z=14$) 到 Ag^{37+} ($Z=47$) 的 $J=0-1(2p^5 3p^1 S_0-2p^5 3s^1 P_1)$ 跃迁产生的 X 射线激光^[3-10], 在 5 nm ~ 24 nm 波长范围内得到了 Zn^{4+} ^[5]、 Ge^{22+} ^[6-8]、 Se^{24+} ^[9]、和 Y^{29+} ^[10] 的 $J=0-1$ 跃迁的饱和(或接近饱和)软 X 射线激光放大; 在理论方面, 许多不同的理论方法如: Z 扩展^[11], 模型势^[12], 组态相互作用(CI)^[13], 多组态 Hartree-Fock (MCHF)^[14], R 矩阵(R-Matrix)^[15], 多组态 Dirac-Fock(MCDF)^[16-17] 以及多体微扰理论(MBPT)^[18, 19] 等方法都被用来研究了类 Ne 离子的跃迁特性. 通过理论计算, 人们预言了更多的类 Ne 等电子系列离子 $J=0-1$ 跃迁以及内层 $2p-2s$ 跃迁可以产生 X 射线激光^[20].

尽管, 在类 Ne 等电子系列离子的能级和跃迁特性的理论和实验方面人们已做了许多工作, 但对于高离化态类 Ne 离子目前还有大量的有趣现象需要去研究. 例如, 1991 年 Kagawa 等人^[13] 在理论计算中发现: 随原子序数的增大, 在 $Z \sim 55(\text{Cs}^{45+})$ 附近, 类 Ne 离子的 $2p^5 3s^1 P_1$ 与 $2p^5 3d^3 D_1$ 能级发生交叉, 相应的这些态的波函数发生强烈的混合; 2000 年, Nakamura 等人^[21] 在 EBIT 实验中证实以上理论预言, 与此同时, 他们还进一步观测到类 Ne 离子在 $Z \sim 51(\text{Sb}^{41+})$ 附近, $2p^5 3s^1 P_1$ 与 $2p^5 3d^3 P_1$ 能级发生交叉. 我们知道, 发生能级交叉的能级之间存在着强的关联效应, 这种强的关联效应往往导致跃迁几率或振子强度发生突变, 甚至引起两电子-光子跃迁^[16]. 考虑到以上发生交叉的能级是涉及 X 射线激光的 $J=1$ 的低能级, 系统地研究这一特定范围内的类 Ne 离子的能级结构、能级寿命以及辐射跃迁特性是非常有必要的.

本文利用基于多组态 Dirac-Fock(MCDF) 理论方法发展的能够系统处理关联效应以及迟豫效应的程序包 GRASP92^[22] 和 REOS99^[23], 系统地计算了类 Ne 等电子系列离子 ($Z=50 \sim 57$) 涉及 X 射线激光的 $2s^2 2p^5 3 \ell$ 和 $2s 2p^6 3 \ell$ ($\ell=s, p, d$) 的能级以及跃迁几率、波长和振子强度. 在此基础上, 我们进一步研究了该区域内的强关联效应及其对 X 射线激光有关的能级寿命和跃迁几率的影响, 最后给出并分析了与 X 射线激光有关的 $2p^5 3p(1P_1, 1S_0, 3P_1, 1D_2) - 2p^5 3s(1P_1)$ 的电偶极 ($E1$) 跃迁的波长、几率和振子强度的变化规律, 并与以往的

实验结果和其它理论结果进行了比较.

2 理论方法

2.1 原子态波函数的计算

有关多组态 Dirac-Fock(MCDF) 理论方法, 文献[22, 23] 中已有详细地描述, 这里仅做扼要介绍. 在相对论框架下, 一个核电荷数为 Z 、具有 N 个电子的原子(或离子)体系的 Dirac-Coulomb Hamiltonian 量为(原子单位)

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

式中第一项表示所有电子的动能以及电子与核之间的库仑相互作用势能, 第二项表示电子与电子间的相互作用. 其中, \hat{H}_i 可进一步表示为

$$\hat{H}_i = c \sum_{j=1}^3 \alpha_j p_{ij} + (\beta - 1) c^2 + V_{nuc}(r_i), \quad (2)$$

上式中, c 为光速; p_{ij} 为动量算符; $V_{nuc}(r)$ 为核势场, 当忽略核的有限体积效应时, 其可以近似表示为 $V_{nuc}(r_i) = -\frac{Z}{r_i}$; α_j ($j=1, 2, 3$), β 为 4×4 的 Dirac 矩阵.

相对论下单电子的自旋轨道波函数可以表示为

$$\psi_{nk m} = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} P_{nk}(r) \chi_{k m}(\theta, \varphi) \\ i Q_{nk}(r) \chi_{-k m}(\theta, \varphi) \end{bmatrix}, \quad (3)$$

其中, $P_{nk}(r)$ 和 $Q_{nk}(r)$ 分别为径向波函数的大小分量, 可以通过自洽场迭代方法求解相对论下的自洽场径向 Dirac 方程而得到; $\chi_{k m}(\theta, \varphi)$ 为自旋球谐波函数.

在 MCDF 方法中, 任一原子态 α 的波函数 $|\alpha(PJM)\rangle$ 由具有相同宇称 P 、总角动量 J 和总角动量分量 M 的组态波函数 $|\Gamma_r(PJM)\rangle$ 线性组合而成, 即

$$|\alpha(PJM)\rangle = \sum_{r=1}^{n_c} C_r(\alpha) |\Gamma_r(PJM)\rangle, \quad (4)$$

$|\Gamma_r(PJM)\rangle$ 为 N 个电子体系的组态波函数(CSF), 由所有单电子自旋轨道波函数(3)式构成的 N 阶 Slater 行列式波函数线性组合而成. P, J, M 分别表示体系的宇称, 总角动量及其 Z 方向的分量. $C_r(\alpha)$ 为组态混合系数. n_c 是组态波函数的个数, 具体计算中, 电子与电子间的相关效应可以通过系统地选择 CSFs 的多少而予以考虑.

2.2 跃迁几率的计算

根据 Fermi 黄金定则, 单位时间量子体系从激发初态 i 到末态 f 的爱因斯坦自发辐射跃迁几率为

$$A_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{2j_i + 1} \sum_{M_i} \sum_{M_f} |M_{fi}^{(L)}|^2 \quad (5)$$

其中, j_i 是激发态 i 的总角动量, M_{fi} 是从激发态 i 到较低的 f 态的跃迁矩阵元, 可表示为

$$\begin{aligned} M_{fi}^{(L)} &= \langle \Psi_f(P_f J_f M_f) | O^{(L)} | \Psi_i(P_i J_i M_i) \rangle \\ &= \sum_{r,s} C_r(f) C_s(i) \langle \Gamma_r(P_f J_f M_f) | \\ &\quad O^{(L)} | \Gamma_s(P_i J_i M_i) \rangle \end{aligned} \quad (6)$$

式中 $O^{(L)}$ 是辐射电磁场阶数为 L 的张量算符。

3 计算结果与讨论

3.1 类 Ne 离子的能级结构及相关能级间的交叉

离子能级的计算精度, 在一定程度上反映了波函数的计算精度, 而且影响辐射跃迁几率、振子强度以及能级寿命的计算精度. 类 Ne 离子的基组态

为 $2s^2 2p^6$, 激发一个电子到 3 ℓ 壳层, 其可形成的激发组态为 $2s^2 2p^5 3\ell$ 和 $2s 2p^6 3\ell$ ($\ell = s, p, d$), 共有 36 个能级. 为了说明目前的计算精度, 表 1 详细列出了 ($Z = 50 \sim 57$) $J^P = 1^-$ 的 7 个激发态 $2p^5 3s^3 1P_1$, $2p^5 3d^3 1P_1$, $3D_1$ 和 $2s 3p^3 1P_1$ 相对于基态的能级值. 作为比较, 表 1 也列出了目前已有的一些理论和实验结果. 从表中可以看出, 目前的计算结果与 Safronova 等人^[18] 利用 MBPT 方法计算的结果以及 Aglitsli 等人^[24] 和 Nakamura 等人^[21] 的实验结果都符合的相当好, 我们的计算结果和实验结果的最大相对误差为 0.4%. 为了与 Nakamura 等人^[21] 和 Ohtani 等人^[25] 的实验结果做详细比较, 图 1 给出了 $2p^5 3s^3 1P_1$, $2p^5 3d^3 1P_1$ 和 $2p^5 3d^3 3D_1$ 能级值随原子序数的变化. 由图 1 我们可以看出, 随原子序数的增大, 当 $Z \sim 51$ 时, $2p^5 3s^3 1P_1$ 和 $2p^5 3d^3 1P_1$ 发生能级交叉, $Z \sim 55$ 时, $2p^5 3s^3 1P_1$ 和 $2p^5 3d^3 3D_1$ 发生能级交叉, 该结果与实验结果完全吻合.

表 1 类 Ne 等电子系列离子 ($Z = 50 \sim 57$) $J^P = 1^-$ 态的能级值及其与已有的理论和实验结果的比较 (a u)

Table 1 Comparison of energy levels for the $J^P = 1^-$ levels in Ne-like ions ($Z = 50 \sim 57$) given related to the ground state with the other theoretical (MBPT) and experimental results

Z	Method	$2p^5 3s^3 1P_1$	$2p^5 3s^3 1P_1$	$2p^5 3d^3 1P_1$	$2p^5 3d^3 3D_1$	$2p^5 3d^3 1P_1$	$2s 2p^6 3p^3 1P_1$	$2s 2p^6 3p^3 1P_1$
50	This work	130.369	138.950	139.312	140.919	148.720	152.633	154.987
	MBPT ^a	130.422	139.015	139.303	140.917	148.726	152.382	154.741
	Expt.						152.376 ^d	
51	This work	136.302	145.712	145.608	147.332	155.861	159.739	162.311
	MBPT ^a	136.358	145.774	145.610	147.329	155.866	159.473	162.05
	Expt.						159.457 ^d	
52	This work	142.367	152.595	152.108	153.894	163.198	167.003	169.810
	MBPT ^a	142.417	152.667	152.093	153.891	163.204	166.749	169.56
	Expt.						166.782 ^d	
53	This work	148.540	159.662	158.725	160.608	170.737	174.509	177.566
	MBPT ^a	148.600	159.743	158.708	160.607	170.742	174.212	177.274
	Expt.		159.787 ^e		160.654 ^e		174.185 ^d	
54	This work	154.843	166.895	165.482	167.495	178.479	182.179	185.504
	MBPT ^a	154.906	166.971	165.463	167.502	178.483	181.863	185.194
	Expt.	154.856 ^d	166.929 ^d	165.426 ^d	167.365 ^d	178.400 ^d	181.824 ^d	
55	This work	161.267	174.650	172.381	174.194	186.427	190.0411	193.652
	MBPT ^a	161.333	174.232	172.359	174.698	186.432	189.707	193.325
	Expt.		174.793 ^e	172.504 ^e	174.318 ^e		189.65 ^d	
56	This work	167.813	182.190	179.422	181.443	194.587	198.099	202.015
	MBPT ^a	167.882	182.274	179.397	181.449	194.590	197.746	201.669
	Expt.	167.895 ^d	182.366 ^e	179.487 ^e	181.531 ^e		197.672 ^d	
57	This work	174.478	190.004	186.606	188.758	202.960	206.355	210.597
	MBPT ^a	174.551	190.099	186.577	188.756	202.963	205.982	210.231
	Expt.	174.527 ^d	190.125 ^d		188.745 ^d			

a. Ref. [18]; d. Ref. [24]; e. Ref. [21]

3.2 强关联效应对能级寿命的影响

类 Ne 离子的能级寿命数据, 不仅对与类 Ne 离子有关的 X 射线激光的研究是重要的, 而且对天体物理、激光等离子体等相关领域的光谱诊断也是非常有用的. 基于以上对能级的计算精度, 通过系统考虑关联效应和迟豫效应, 本文计算了与 X 射线激光有关的 $2p^53p^1P_1, ^1S_0, ^3P_1, ^1D_2$ 和 $2p^53s^1P_1$ 能级的寿命. 在能级寿命的计算中, 我们包含了高激发态到低激发态以及基态的所有可能的电偶极跃迁 (E1) 和禁戒跃迁 (E2, M1, M2). 由于涉及的是高离化态离子, 禁戒跃迁也变得非常重要. 表 2 以 Xe^{44+} ($Z=54$) 为例比较了考虑和未考虑禁戒跃迁对能级寿命的影响, 表中也列出了 Safronova 等人^[19] 利用 MBPT 方法计算的最新结果. 其中, Safronova 的计算只考虑了高激发态到低激发态的所有可能的电偶极跃迁, 忽略了禁戒跃迁. 从表 2 中可以看出, 当未考虑禁戒跃迁时, 我们

的计算结果与 Safronova 的计算结果符合的比较, 最大相对误差 7.8%. 当考虑禁戒跃迁后, 由于 $2p^53p^1P_1, 2p^53p^3P_1$ 到基态的 M1 跃迁几率相对较小, 考虑禁戒跃迁后对能级寿命的影响较小, 但由于 $2p^53p^1D_2$ 到基态的 E2 跃迁几率比较大, 考虑禁戒跃迁后能级 $2p^53p^1D_2$ 的寿命基本上降低了一半.

图 2 给出了考虑禁戒跃迁后 $2p^53p^1P_1, ^1S_0, ^3P_1, ^1D_2$ 和 $2p^53s^1P_1$ 的能级寿命随原子序数的变化. 由图 2 可以看出, $2p^53p^1P_1, ^1S_0, ^3P_1, ^1D_2$ 的寿命都比较长, 数量级约为 10^{-11} s, 其中, 1P_1 的寿命最长, 1S_0 次之, 1D_2 的寿命最短. 随着原子序数的增大, 这些能级的寿命光滑地减小. 但是由于强关联效应的影响, $2p^53s^1P_1$ 的寿命发生了戏剧性的变化, 当 $Z < 55$ 时能级寿命急剧减小, $Z = 55$ 时达最小值, $Z > 55$ 时, 该能级的寿命又急剧增大. 这种能级寿命突变的主要原因是: 激发态 $2p^53s$

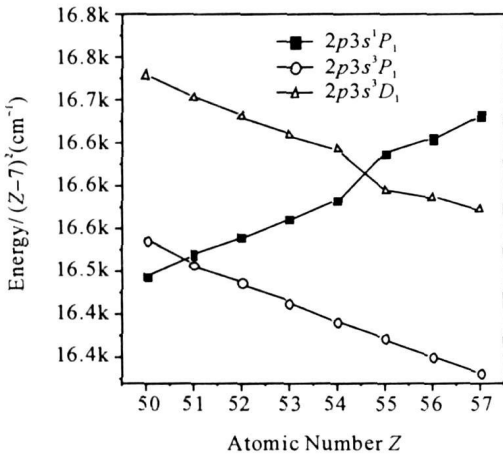


图 1 $2p^53s^1P_1, 2p^53d^3P_1$ 和 $2p^53d^3D_1$ 的能级值随原子序数的变化. 横轴为原子序数 Z, 纵轴为能级与 $(Z-7)^2$ 的比值

Fig. 1 Energies [$E/(Z-7)^2$ in cm^{-1}] of $2p^53s^1P_1, 2p^53d^3P_1$ and $2p^53d^3D_1$ as functions of atomic number Z

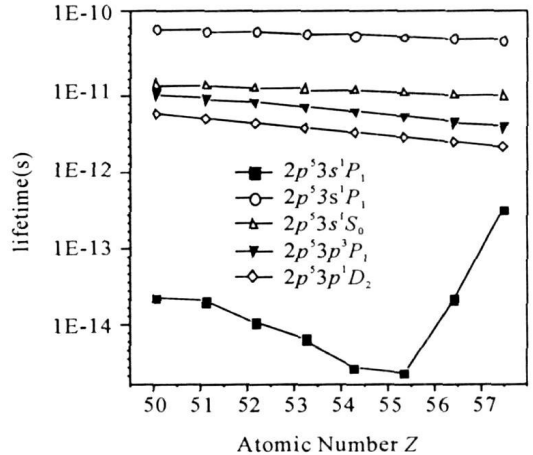


图 2 类 Ne 离子与 X 射线激光有关的能级 $2p^53p^1P_1, ^1S_0, ^3P_1, ^1D_2$ 和 $2p^53s^1P_1$ 的寿命随 Z 的变化

Fig. 2 Lifetimes of $2p^53p^1P_1, ^1S_0, ^3P_1, ^1D_2$ and $2p^53s^1P_1$ related with the X-ray laser as functions of atomic number Z

表 2 高离化态类 Ne 离子考虑和未考虑禁戒跃迁的能级寿命的比较 ($Z=54$)

Table 2 Comparison of lifetimes of considered the forbidden transitions and the without considered forbidden transitions ($Z=54$)

Up Level	Forbidden transition	Transition probability (s^{-1})	Lifetime (s) without considered the forbidden transitions	Lifetime (s) considered the forbidden transitions	Ref[19]
$2p^53p^1P_1$	M1	3.46E+7	5.35E-11	5.25E-11	5.77E-11
$2p^53p^3P_1$	M1	5.83E+8	6.37E-12	6.33E-12	6.59E-12
$2p^53p^1D_2$	E2	1.31E+11	6.84E-12	3.61E-12	7.11E-12

表 3 与 X 射线激光有关的类 Ne 等电子系列离子 ($Z=50\sim 57$) 的 $2p^5 3p-2p^5 3s\ ^1P_1$ 的跃迁的波长, 几率和振子强度

Table 3 Transition wavelength, probabilities and oscillator strengths related with X-ray laser of $2p^5 3p\ ^1P_1, ^1S_0, ^3P_1, ^1D_2-2p^5 3s\ ^1P_1$ of Ne-like ions ($Z=50\sim 57$)

Z	$2p^5 3p\ ^1P_1-2p^5 3s\ ^1P_1$			$2p^5 3p\ ^1S_0-2p^5 3s\ ^1P_1$			
	λB (nm)	A (s^{-1})	gf	λ (nm)	Expt	A (s^{-1})	gf
50	14.97	9.87E+09	0.0994	11.08		4.01E+10	0.0739
51	14.71	7.29E+09	0.0709	10.88		2.99E+10	0.0531
52	14.18	1.06E+10	0.0956	10.54		4.29E+10	0.0714
53	13.69	1.10E+10	0.0926	10.21		4.43E+10	0.0693
54	13.16	1.06E+10	0.0827	9.86		4.28E+10	0.0625
55	13.97	5.41E+09	0.0475	10.25		2.11E+10	0.0333
56	13.14	9.96E+09	0.0773	9.74		3.92E+10	0.0559
57	12.68	1.15E+10	0.0834	9.44		4.55E+10	0.0607
Z	$2p^5 3p\ ^1P_1-2p^5 3s\ ^1P_1$			$2p^5 3p\ ^1D_2-2p^5 3s\ ^1P_1$			
	λB (nm)	A (s^{-1})	gf	λ (nm)	Expt	A (s^{-1})	gf
50	8.54	2.54E+10	0.0834	8.40		8.83E+10	0.467
51	8.13	2.08E+10	0.0619	8.00		7.15E+10	0.343
52	7.65	3.21E+10	0.0846	7.53		1.11E+11	0.473
53	7.21	3.58E+10	0.0838	7.10		1.24E+11	0.468
54	6.78	3.69E+10	0.0762	6.68	6.70 ^[a] 6.65 ^[b]	1.26E+11	0.421
55	6.69	2.34E+10	0.0471	6.59		8.93E+10	0.291
56	6.23	4.42E+10	0.0770	6.13		1.62E+11	0.458
57	5.87	5.47E+10	0.0846	5.78	5.82 ^[a]	2.00E+11	0.5011

λ is wavelength; A is transition probability; gf is oscillator strengths; a. Ref. [26]; b. Ref. [27]

1P_1 的寿命主要由该态到基态的电偶极跃迁 ($^1P_1-^1S_0$) 决定, 其它禁戒跃迁的影响可以忽略, 由于强关联效应的影响, $2p^5 3s\ ^1P_1-^1S_0$ 电偶极跃迁几率在 $Z\sim 55$ 附近发生了剧烈的不规则的变化^[16, 18, 20], 从而导致了 $2p^5 3s\ ^1P_1$ 的寿命发生了戏剧性的变化. 从上面的分析可以看出, 强关联效应对能级寿命的影响非常大, 尤其是 $2p^5 3s\ ^1P_1$ 的寿命发生了数量级的降低. 由于 $2p^5 3s\ ^1P_1$ 能级是涉及 $3p-3s$ X 射线激光的下能级, 该能级寿命的降低可以将极大地增大下能级粒子数的排空, 这对 X 射线激光的放大是极其有利的.

3.3 $3p-3s$ 跃迁的几率、波长和振子强度

表 3 列出了高离化态类 Ne 离子 ($Z=50\sim 57$) 的 $2p^5 3p(^1P_1, ^1S_0, ^3P_1, ^1D_2)-2p^5 3s(^1P_1)$ 的四组跃迁的几率、波长和振子强度以及目前已有的几个实验结果. 由于这些元素的离化度较高, 从表 3 中可以看出, 其 X 射线波长比较短, 大约在 $5\sim 15$ (nm) 范围内, 而且跃迁几率都比较大, 数量级都大

于 $10^9\ s^{-1}$. 在这四组跃迁中, $2p^5 3p\ ^1D_2-2p^5 3s\ ^1P_1$ 跃迁的振子强度最大. 最后, 值得注意的是, 比较跃迁几率或振子强度随 Z 的变化, 我们发现, 当 Z 分别为 51、55 时, 这四组跃迁的几率或振子强度都出现最小值, 甚至它们的跃迁几率或振子强度几乎是相邻元素的一半, 这个现象的发生正是由于在 $Z=51$ 和 55 时能级 $2p^5 3s\ ^1P_1$ 与 $2p^5 3d\ ^3P_1, 2p^5 3d\ ^3D_1$ 之间的强关联效应引起的.

4 结 语

本文利用 MCDF 理论方法, 系统的讨论了强关联效应对高离化态类氖离子 ($Z=50\sim 57$) 激发组态 $2s^2 2p^5 3\ \ell$ 和 $2s 2p^6 3\ \ell$ ($\ell=s, p, d$) 的能级以及能级寿命的影响, 给出并分析了与 X 射线激光有关的 $2p^5 3p(^1P_1, ^1S_0, ^3P_1, ^1D_2)-2p^5 3s(^1P_1)$ 的跃迁波长、几率和振子强度的变化规律. 根据本文的计算我们可以得出两点结论: 1) 能级之间的强关联效应对与 X 射线激光有关的能级 $2p^5 3s\ ^1P_1$

的寿命的影响比较大, 它的能级寿命在 $Z=55$ 附近发生了数量级的降低, 该能级寿命的降低将有利于 X 射线激光的放大; 2) 强关联效应对跃迁几率以及振子强度的影响都比较大, 在本文给出的四组跃迁中, 当 $Z=51$ 和 55 时, 跃迁几率以及振子强度都出现最小值. 另外, 我们计算的能级结果与已有的理论和实验值相比, 相对误差基本上在 0.4% 以内, 这从一个侧面反映了我们的计算精度. 我们希望本文提出的结果有助于将来对类 Ne 离子 X 射线激光的进一步研究.

参考文献:

- [1] Vinogradov A V, Sobelman I I, Yukov E A, *et al.* Population inversion of transition in neon-like ions[J]. *Sov. J. Quantum Electron*, 1977, 7: 32
- [2] Matthews D L, Hagelstein P L, Rosen M D, *et al.* Demonstration of a soft X-Ray amplifier[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1985, 54: 110
- [3] Li Y, Lu P, Pretzler G, *et al.* Lasing in neonlike sulfur and silicon[J]. *Opt. Commun.*, 1997, 133: 196
- [4] Fields D J, Shimkaveg G M. Observation of high gain in Ne-like Ag lasers[J]. *Phys. Rev. A*, 1992, 46: 1606
- [5] Rus B, Carillon A, Dhez P, *et al.* An efficient high-brightness soft X-ray laser at 21.2 nm[J]. *Phys. Rev. A*, 1997, 55: 3853
- [6] Carillon A, Chen H Z, Dhez P, *et al.* Saturated and near-diffraction limited operation of an XUV laser at 23.6 nm[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1992, 68: 2917
- [7] Kodama R, Neely D, Kato Y, *et al.* Generation of small divergence soft X-ray laser by plasma wave-guiding with a curval target[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1994, 73: 3215
- [8] Daido H, Kodama R, Murai K, *et al.* Significant improvement in the efficiency and brightness of the $J=0 \sim 119.6$ nm line of the germanium laser by use of double pulse pumping[J]. *Opt. Lett.*, 1995, 20: 61
- [9] MacGowan B J, Da Silva L B, Field D J, *et al.* Short wavelength X-ray laser research at the Lawrence Livermore National Laboratory[J]. *Phys. Fluids. B*, 1992, 4: 2326
- [10] Da Silva L B, MacGowan B J, Mrowka S, *et al.* Power measurements of a saturated yttrium X-ray laser[J]. *Opt. Lett.*, 1993, 18: 1174
- [11] Safronova U I, Safronova M S, Bruch R. Correlation, relativistic and radiative effects for the energy levels of $1s^2 2s^2 2p^5 nl$, $1s^2 2s^2 p^5 nl$ ($n=3 \sim 6$, $l=s, p, d$, f) configurations of Ne-Like ions with $Z=20 \sim 60$ [J]. *Phys. Scr.*, 1994, 49: 449
- [12] Ivanova E P, Gulov A V. Theoretical investigation of the neon isoelectronic sequence[J]. *At. Data. Uncl. Data Tables.*, 1991, 49: 1
- [13] Kagawa T, Honda Y, Kiyokawa S. Relativistic configuration-interaction theory for atomic systems[J]. *Phys. Rev. A*, 1991, 44: 7092
- [14] Chen H S, Dong C Z, Zhou X X. Strong local configuration interaction and their influence on the level structure and transitions of $2s^2 2p^6 3l$ configurations in AlIV-MnXVI[J]. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.*, 1999, 61: 143
- [15] Hibbert A, Scott M P. Atomic data for opacity calculations. XXI. The neon sequence[J]. *J. Phys. B*, 1994, 27: 1315
- [16] Dong C Z, Xie L Y, Wan J J, *et al.* Energy-crossings and their effects on the spectra of the neon-like ions [J]. *Chin. Phys.*, 2005, 14: 1108
- [17] Xie L Y, Dong C Z, Ma X W, *et al.* Multi-configuration Dirac-Fock calculations of energy levels and transition probabilities in the $2p^5 3s-2p^6$ spectra of neon-like ions ($Z=11, \dots, 18$) [J]. *Acta. Phys. Sin.*, 2002, 51: 1965. (in Chinese)[收录有, 董晨钟, 马新文, 等. 类 Ne 等电子系列离子 ($Z=11, \dots, 18$) $2p^5 3s-2p^6$ 辐射跃迁的多组态相对论理论计算[J]. *物理学报*, 2002, 51: 1965]
- [18] Safronova U I, Namba C, Murakami I, *et al.* Electric dipole, electric quadrupole, magnetic dipole, and magnetic quadrupole transitions in the neon isoelectronic sequence[J]. *Phys. Rev. A*, 2001, 64: 012507
- [19] Safronova U I, Cowan T E, Safronova M S. Relativistic many-body calculations of electric-dipole lifetimes, transition rates and oscillator strengths for $2l^{-1} 3l'$ states in Ne-like ions[J]. *J. Phys. B*, 2005, 38: 2741
- [20] Ivanova E P, Zinoviev A N. The possibility of X-ray lasers based on the inner-shell transitions of Ne-like ions[J]. *Physics Letters A*, 2000, 274: 239
- [21] Nobuyuki Nakamura, Daiji Kato, Shunsuke Ohtani. Evidence for strong configuration mixing in $n=3$ excited levels in neonlike ions[J]. *Phys. Rev. A*, 2000, 61: 052510
- [22] Parpia F A, Fischer C F. GRASP92: a package for large-scale relativistic atomic structure calculations[J]. *Comput. Phys. Commun.*, 1996, 94: 249
- [23] Fritzsche S, Fischer C F, Dong C Z. REOS99: A re-

- vised program for transition probability calculations including relativistic, correlation, and relaxation effects [J]. *Compt. Phys. Commun.*, 2000, 124: 340
- [24] Aglitslii E V, Ivanova E P, Panin S A. Investigation of the spectra of dipole 2-3 transitions in Ne-like ions ($Z=36\sim 92$) [J]. *Phys. Scr.*, 1989, 40: 601
- [25] Ohtani S. Recent results from the ToKyo-EBIT [J]. *Chin. Chem. Soc.*, 2001, 48: 275
- [26] Beiersdorfer P, Goeler S, Bitter M, *et al.* X-ray transitions in highly charged neonlike ions [J]. *Phys. Rev. A*, 1988, 37: 4153
- [27] Dietrich D D, Chandler G A, Fortner R J, *et al.* Observation of electric quadrupole decay in Xe^{45+} and Xe^{44+} [J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1985, 54: 1008