

# 类铝钛离子的能级与跃迁特性计算

胡峰<sup>1,3</sup>, 孙言<sup>1</sup>, 梅茂飞<sup>1</sup>, 桑萃萃<sup>2</sup>, 杨家敏<sup>3</sup>

(1. 徐州工程学院 数学与物理科学学院, 江苏 徐州 221018; 2. 兰州理工大学 理学院, 甘肃 兰州 730050;  
3. 中国工程物理研究院 激光聚变研究中心, 四川 绵阳 621900)

摘要: 利用基于多组态 Dirac-Hartree-Fock 方法的程序包 GRASP2K, 考虑电子关联作用, 详细计算 Ti 的类 Al 离子  $3s^2 3p$  和  $3s 3p^2$  的能级、波长以及跃迁特性. 研究表明, 考虑电子关联作用之后, 所得的计算结果与实验值符合得更好. 计算结果对于分析现有的实验结果和帮助标定未来实验产生的谱线有重要的意义.

关键词: 电子关联效应; 能级; 波长; 跃迁几率

中图分类号: O562.1F062.2 文献标志码: A 文章编号: 1001-8395(2019)04-0528-07

doi: 10.3969/j.issn.1001-8395.2019.04.015

高电离态离子性质的研究在高电离态原子、X 射线、惯性约束聚变、磁约束聚变、天体和等离子体物理研究中有着重要的意义和广泛的应用价值. 等离子体中高电离态离子光谱一直作为等离子体状态诊断的重要工具被广泛应用, 因此提供精确的光谱数据显得尤为重要. Ti 元素目前作为示踪元素在激光等离子体中有重要的应用, 可以将 Ti 和 Cr 合金片埋于黑腔内壁上, 通过测量 2 种元素离子的谱线强度, 推导出等离子体的温度和密度关系<sup>[1]</sup>. 类铝 Ti 离子光谱的实验与理论研究较少, Froese 等<sup>[2]</sup>用多组态 Hartree-Fock 方法 (MCHF) 计算了 Ti X 离子的能级、能级寿命与跃迁几率; Santana 等<sup>[3]</sup>用 Multireference Mller-Plesset perturbation (MPPT) 方法研究了 Ti X 离子的特性; 随后, Singh 等<sup>[4]</sup>用同样的方法研究了 Ti X (增加了相关组态); Aggarwal 等<sup>[5]</sup>用基于多组态 Dirac-Fock 方法 (MCDF) 的程序包 GRASP 和组态相互作用方法的程序包 Flexible Atomic code (FAC)<sup>[6]</sup>研究了 Ti X 相关能级、波长等相关数据. 实验只有 Träbert 等<sup>[7]</sup>用重离子存储环研究了 Ti X 的能级寿命.

上述提到理论计算结果与实验结果存在一定的差距, 并不能够获取较为精确的实验结果. 因此本文利用多组态 Dirac-Hartree-Fock 方法 (MC-DHF) 的程序包 GRASP2K<sup>[8-9]</sup>, 通过考虑电子关联

效应, 去获得更加精确的数据和理解差距产生的原因.

## 1 计算方法

1.1 波函数和能级 本文所用的 MCDHF 方法在文献 [10-12] 中已有详细描述, 在该方法中, 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 哈密顿量为 (原子单位)

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

用  $H_i$  表示第  $i$  个电子的 Dirac 哈密顿量

$$H_i = c\alpha \cdot p_i + (\beta - 1)c^2 + V_{nuc}(\hat{r}_i), \quad (2)$$

其中  $V_{nuc}(\hat{r}_i)$  是核势场,  $\alpha$  和  $\beta$  分别是 Dirac 矢量和标量矩阵,  $p_i$  是第  $i$  个电子的动量算符,  $c$  是真空中光速. 在中心场近似下单电子的旋轨波函数为

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

其中  $n$  是主量子数,  $m$  是磁量子数,  $k$  为 Dirac 量子数,  $P_{nk}(r)$  和  $Q_{nk}(r)$  分别为相对论径向波函数的大小分量,  $\chi_{km}$  为自旋函数.

$N$  电子体系的组态波函数  $| \Gamma_r (PJM) \rangle$  是所有单电子旋-轨波函数组成的  $N$  阶 Slater 行列式波函数  $| \Psi_p \rangle$  的线性组合, 即

收稿日期: 2017-07-30 接受日期: 2018-05-28

基金项目: 国家自然科学基金 (51506184、11604284) 和江苏省高等学校自然科学研究面上项目 (17KJB140025)

第一作者简介: 胡峰 (1983-) 男, 副教授, 主要从事原子结构与光谱研究. E-mail: hufeng@szit.edu.cn

$$| \Gamma_r(PJM) \rangle = \sum_p B_{rp} | \Psi_p \rangle. \quad (4)$$

在 MCDF 方法中,任一原子态  $\alpha$  的波函数  $|\alpha(PJM)\rangle$  由具有相同  $P, J$  和  $M$  量子数的组态波函数  $|\Gamma_r(PJM)\rangle$  线性组合而成,即

$$|\alpha(PJM)\rangle = \sum_{r=1}^{n_c} C_r(\alpha) \Gamma_r(PJM), \quad (5)$$

其中  $n_c$  是组态波函数的个数,  $C_r(\alpha)$  为组态混合系数.

对角化由原子波函数 (5) 式构造的哈密顿矩阵, 则可得到相关原子态的能量和组态混合系数. 对于其他高阶效应, 如 Breit 修正和主要的量子电动力学效应, 可作为微扰处理.

**1.2 电子关联效应** 在具体计算过程中, 主要是通过逐渐增加基矢数目来考虑更多的组态相互作用, 直至得到收敛的结果. 可以把组态相互作用分为 2 类: 价电子之间的相互作用 (Valence-Valence Correlation) 称为 VV 关联效应, 原子实内的电子与价电子之间的相互作用 (Core-Valence Correlation) 称为 CV 关联效应. 一般来说, 只考虑 VV 关联效应就能得到比较精确的结果, 但是对于电子数目比较多的体系, 如果要得到比较精确的结果, CV 关联效应是必须考虑的<sup>[13]</sup>, 在本文计算中为了得到比较精确的结果, 对这 2 种关联效应都进行了考虑.

**1.3 计算步骤** 文献 [8-9] 已经详细介绍了电子关联作用, 这里只简单地介绍主要部分. 为了更好地解释如何考虑电子关联效应, 考虑以下 2 个步骤:

1) 运行 Dirac-Fock 初步得到  $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$  的径向波函数. 在这一步里, 选用 Thomas-Fermi 模型势作为计算的初始波函数. 在自洽场计算中, 对所有的轨道都进行了优化.

2) 设置  $n=1-2$  为闭壳层, 也就是说主量子数为 1 和 2 的轨道上的电子是封闭的, 既不允许这些电子向其他轨道跃迁也不允许其他轨道的电子跃迁到这 2 个轨道. 允许  $n=3$  的轨道一个电子可以跃迁到  $n=4, 5, 6, 7$  轨道上, 且任意分布, 这样就考虑了 VV 关联效应, 其扩展的轨道形式为

$$1s^2 2s^2 2p^6 n l n' l'.$$

而对于 CV 关联效应来说, 此时考虑 2 种情况, 一种是 2p 轨道上一个电子不受限制, 或者另一种是 2s 上一个电子不受限制. 要求对于一个双激发, 一个电子必须来自原子实中的 2p (2s) 轨道, 另一个电子必须来自价电子. 这样原子实  $n=2$  轨道电子和价

电子之间的 CV 关联效应就考虑进去了, 其扩展的轨道形式为:

$$1s^2 2s n l 2p^6 n' l' n'' l'', \quad 1s^2 2s^2 2p^5 n l n' l' n'' l''.$$

## 2 结果与讨论

为了更好的解释 VV 和 CV 电子关联效应的影响, 在表 1 中列出了 2 种方法计算出的  $3s^2 3p$  和  $3s 3p^2$  的能级, 结果包含了量子电动力学效应和 Breit 修正, 其中量子电动力学效应考虑自能和真空极化 2 种修正. 实验值采用美国国家标准局原子与分子数据库的数据作为参考<sup>[14]</sup>. 从表 1 可以看出, 考虑了电子关联效应之后, 当前计算精度有了较大的提高, 与实验值更加符合. 例如能级 9 和 10, 在只考虑 VV 关联效应时, 与实验值的偏差在 1.207% 和 1.228%; 而考虑 CV 关联效应后, 偏差缩小到了 0.095% 和 0.084%. 为了进一步展示考虑 CV 关联效应带来的影响, 在图 1 中对比了不同理论值与实验值的差异.

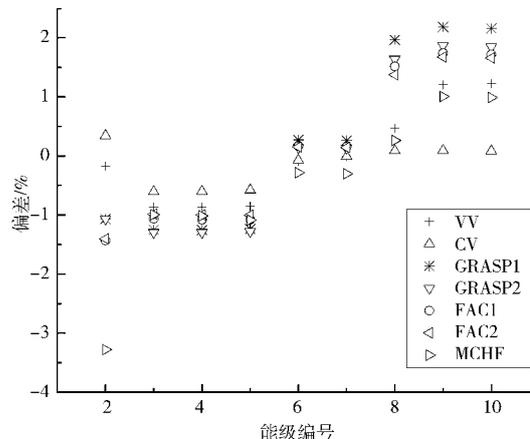


图 1 理论计算值与实验值的比较

Fig. 1 The comparison between the theoretical and experimental results

其中 GRASP1 和 GRASP2 的数据是来自文献 [5] 基于 MCDF 方法分别考虑 530 个能级和 1 387 个能级给出的计算结果, FAC1 和 FAC2 同样来自文献 [5], 是基于组态相互作用分别考虑 1 387 个能级和 12 139 个能级给出的计算结果. MCHF 的计算结果来自文献 [2]. 从图 1 可以看出, 当前计算结果与实验值的最大偏差只有 0.603%, 而 GRASP 和 FAC 的偏差达到了 2.180% 和 1.751%. 结果表明, 考虑电子关联效应, 尤其是内壳层的电子, 对于计算结果影响是比较大的.

表 1 类铝钛离子  $3s^23p$  和  $3s3p^2$  能级  
Tab. 1 The energy levels of  $3s^23p$  and  $3s3p^2$  for Al-like Ti ions

能级编号	组态	谱项	VV 值/cm <sup>-1</sup>	CV 值/cm <sup>-1</sup>	实验值 <sup>[14]</sup> /cm <sup>-1</sup>	偏差 <sup>a</sup>	偏差 <sup>b</sup>
1	$3s^23p$	$^2P_{1/2}$	0	0	0	0	0
2	$3s^23p$	$^2P_{3/2}$	7 531	7 570	7 544	0.172	0.344
3	$3s3p^2$	$^4P_{1/2}$	159 023	159 441	160 409	0.864	0.603
4	$3s3p^2$	$^4P_{3/2}$	161 848	162 280	163 257	0.863	0.598
5	$3s3p^2$	$^4P_{5/2}$	165 890	166 346	167 309	0.848	0.575
6	$3s3p^2$	$^2D_{3/2}$	211 861	211 899	212 053	0.090	0.072
7	$3s3p^2$	$^2D_{5/2}$	212 588	212 597	212 608	0.009	0.005
8	$3s3p^2$	$^2S_{1/2}$	265 698	264 688	264 456	0.469	0.087
9	$3s3p^2$	$^2P_{1/2}$	284 446	281 319	281 051	1.207	0.095
10	$3s3p^2$	$^2P_{3/2}$	288 725	285 461	285 220	1.228	0.084

注:a 偏差=|VV 值-实验值|/实验值\* 100;b 偏差=|CV 值-实验值|/实验值\* 100.

同时可以看出随着考虑能级数量的增加,计算结果越接近实验值,但是通过对比发现理论计算的  $3s^23p^2P_{3/2}$  的值与实验值都有较大的差距,当前计算结果和文献[4]的结果都显示  $3s^23p^2P_{3/2}$  组态混合贡献为 0.98,按照组态混合的贡献应该得到很好的结果,之所以出现差距原因可能是由于早期计算结果没有考虑能级混合的影响.

等离子体中发射的谱线可以用来诊断电子温度和密度<sup>[1]</sup>,因此准确的波长对于研究等离子体的状态是必不可少的.同时为了验证当前计算的可信性,在表 2 中给出了类铝钛离子跃迁波长的理论计算值和实验值,其中表 2 中的本文计算结果是考虑电子关联也即 CV 关联效应的结果.同时表 2 也列出了文献[2]的 MCHF 计算结果和文献[4]的组态相互作用计算结果,实验值同样选取 NIST 给出的参考值<sup>[14]</sup>.从表 2 可以看出,当前本文计算值与文献[14]实验值符合较好,比值在 0.995~1.007,这样的不确定度与实验可能产生的偏差相一致,从而验证了当前计算的精确性.同时看出当前计算值与实验值的偏差在-0.035~0.467 nm,要好于文献[2]的-0.422~0.607 nm.文献[4]的计算结果部分优于本文,但是计算结果不够完整,考虑跃迁数量明显偏少.

对于从能级  $i$  态到  $j$  态跃迁的电偶极振子强度 ( $f_{ij}$ ) 和跃迁几率 ( $A_{ji}$ ) 的关系可以用下面的公式来定义<sup>[15]</sup>:

$$f_{ij} = \frac{mc}{8\pi^2 e^2} \lambda_{ji}^2 \frac{\omega_j}{\omega_i} A_{ji} = 1.49 \times 10^{-18} \lambda_{ji}^2 \frac{\omega_j}{\omega_i} A_{ji}, \quad (6)$$

其中  $m$  和  $e$  分别是电子质量和电荷,  $c$  是光速,  $\lambda_{ji}$  是跃迁波长 (nm),  $\omega_i$  和  $\omega_j$  分别是下能级  $i$  和上能级  $j$  的权重.对于电偶极跃迁来说,跃迁几率和振子强度可以给出如下的形式:

$$A_{ji} = \frac{2.026 \times 10^{20}}{\omega_j \lambda_{ji}^3} S, \quad f_{ij} = \frac{3 \ 037.5}{\lambda_{ji} \omega_i} S, \quad (7)$$

其中  $S$  是线强度,单位为原子单位 a.u..

表 3 给出了类铝钛离子  $3s^23p-3s3p^2$  跃迁几率,同时也给出了来自文献[2, 4-5]不同计算方法计算结果.其中文献[2, 4]都采用了 2 种不同方法计算了跃迁几率,可以看出其计算值与本文计算值、实验值符合很好.需要说明的是文献[4]报道的

$3s^23p^2P_{3/2}-3s3p^2P_{1/2}$  跃迁几率为  $8.3 \times 10^9 \text{ s}^{-1}$ ,该值明显偏小.本文计算的  $3s^23p^2P_{3/2}-3s3p^2D_{3/2}$  跃迁几率为  $1.2 \times 10^8 \text{ s}^{-1}$ ,与实验值的偏差达到了 26%,但是与文献[2, 4]的计算值相当,说明该跃迁几率的实验值是有争议的,需要在今后的实验中做进一步的测量.

表 2 类铝钛离子的波长  
Tab. 2 The wavelengths of Al-like Ti ions

跃迁	本文值/nm	实验值 <sup>[14]</sup> /nm	文献值 <sup>[2]</sup> /nm	文献值 <sup>[4]</sup> /nm	比值*
$3s^23p^2P_{1/2} - 3s3p^2P_{1/2}$	35.547	35.582	35.212	35.597	0.999
$3s^23p^2P_{3/2} - 3s3p^2P_{3/2}$	35.985	36.013	35.605	35.911	0.999
$3s^23p^2P_{3/2} - 3s3p^2P_{1/2}$	36.530	36.563	36.141	36.580	0.999
$3s^23p^2P_{1/2} - 3s3p^2S_{1/2}$	37.792	37.814	37.699	37.843	1.000
$3s^23p^2P_{3/2} - 3s3p^2S_{1/2}$	38.905	38.924	38.766	38.956	0.995
$3s^23p^2P_{1/2} - 3s3p^2D_{3/2}$	46.963	47.158	47.272	47.123	0.995
$3s^23p^2P_{3/2} - 3s3p^2D_{5/2}$	48.516	48.765	48.839	48.798	0.995
$3s^23p^2P_{3/2} - 3s3p^2D_{3/2}$	48.695	48.897	48.962	48.861	0.996
$3s^23p^2P_{1/2} - 3s3p^2P_{3/2}$	61.622	61.280	61.855		1.005
$3s^23p^2P_{1/2} - 3s3p^2P_{1/2}$	62.719	62.360	62.941		1.005
$3s^23p^2P_{1/2} - 3s3p^2P_{1/2}$	62.982	62.580	63.187		1.006
$3s^23p^2P_{3/2} - 3s3p^2P_{3/2}$	64.637	64.170	64.780		1.007
$3s^23p^2P_{3/2} - 3s3p^2P_{1/2}$	65.846	65.420	65.972		1.006

注: \* 比值 = 本文值 / 实验值<sup>[14]</sup>.

表 3 类铝钛离子  $3s^23p-3s3p^2$  跃迁几率  
Tab. 3 The transition probabilities of  $3s^23p-3s3p^2$  for Al-like Ti ions

跃迁	本文值	文献值 <sup>[5]</sup>	文献值 <sup>[2]</sup>	文献值 <sup>[4]</sup>	实验值 <sup>[14]</sup>		
$3s^23p^2P_{1/2} - 3s3p^2P_{1/2}$	1.3E10	1.4E10	1.4E10	1.4E10	1.4E10	1.8E10	1.3E10
$3s^23p^2P_{3/2} - 3s3p^2P_{3/2}$	2.2E10	2.3E10	2.3E10	2.3E10	2.3E10	2.1E10	2.2E10
$3s^23p^2P_{3/2} - 3s3p^2P_{1/2}$	1.2E10	1.2E10	1.2E10	1.2E10	1.2E10	8.3E9	1.2E10
$3s^23p^2P_{1/2} - 3s3p^2S_{1/2}$	6.9E9	7.3E9	7.3E9	7.2E9	6.6E9	3.1E9	6.9E9
$3s^23p^2P_{3/2} - 3s3p^2S_{1/2}$	2.6E9	3.2E9	3.2E9	3.2E9	3.3E9	5.6E9	2.7E9
$3s^23p^2P_{1/2} - 3s3p^2D_{3/2}$	1.4E9	1.1E9	1.2E9	1.2E9	1.2E9	9.0E8	1.1E9
$3s^23p^2P_{3/2} - 3s3p^2D_{5/2}$	1.4E9	1.1E9	1.1E9	1.1E9	1.2E9	9.7E8	1.1E9
$3s^23p^2P_{3/2} - 3s3p^2D_{3/2}$	1.2E8	1.0E8	9.9E7	9.9E7	1.1E8	1.6E8	9.5E7

表 4 给出了类铝钛离子  $3s^23p-3s3p^2$  振子强度,同时也给出了来自文献[2,5]不同计算方法计算结果.需要说明的是,振子强度不是一个可以直接测量值,可以通过(6)式进行换算.因此为了验证当前振子强度计算的精确度,引入一个代表原子结构计算中总的长度规范下的振子强度( $f_{gl}$ )与速度规范下的振子强度( $f_{gp}$ )的比值,即  $f_{gl}/f_{gp}$ .该比值代表的是原子结构计算中的 2 种不同规范(长度规范和速度规范),一般认为 2 种规范的比值越接近于

1,表明计算结果越精确<sup>[16]</sup>.从表 4 可以看出当前计算的比值在 0.97~1.07 区间,明显好于文献[4]的 0.88~1.66,表明当前振子强度的计算是真实可信的.为了丰富类铝钛离子  $3s^23p-3s3p^2$  的跃迁数据,在表 5 和 6 中分别给出了电四极、磁偶极与磁四极的跃迁数据,因为当前并没有实验数据作为比对,因此本文的计算结果可以作为辨识这些谱线的参考.

表 4 类铝钛离子  $3s^23p-3s3p^2$  振子强度Tab. 4 The oscillator strengths of  $3s^23p-3s3p^2$  for Al-like Ti ions

跃迁	本文值	实验值	文献值 <sup>[5]</sup>		文献值 <sup>[2]</sup>	比值 <sup>a</sup>	比值 <sup>b</sup>
$3s^23p^2P_{1/2}-3s3p^2P_{1/2}$	2.5E-1	2.5E-1	2.6E-1	3.3E-1	2.7E-1	1.01	1.00
$3s^23p^2P_{3/2}-3s3p^2P_{3/2}$	4.3E-1	4.3E-1	4.3E-1	4.3E-1	4.3E-1	0.88	0.97
$3s^23p^2P_{3/2}-3s3p^2P_{1/2}$	1.2E-1	1.2E-1	1.2E-1	8.7E-2	1.2E-1	0.96	0.98
$3s^23p^2P_{1/2}-3s3p^2S_{1/2}$	1.8E-1	1.5E-1	1.5E-1	6.7E-2	3.6E-2	1.66	1.02
$3s^23p^2P_{3/2}-3s3p^2S_{1/2}$	3.4E-2	3.1E-2	3.5E-2	6.9E-2	3.7E-2	0.93	0.99
$3s^23p^2P_{1/2}-3s3p^2D_{3/2}$	7.4E-2	7.3E-2	7.6E-2	3.6E-2	8.1E-2	0.98	1.00
$3s^23p^2P_{3/2}-3s3p^2D_{3/2}$	6.1E-2	5.9E-2	5.9E-2	3.4E-2	6.3E-2	1.52	1.07
$3s^23p^2P_{3/2}-3s3p^2D_{5/2}$	3.8E-3	3.4E-3	3.5E-3	3.9E-3	3.9E-3	1.49	1.02

注:a 比值为文献值[4]中的  $f_{gl}/f_{gp}$ ; b 比值为本文值  $f_{gl}/f_{gp}$ .

表 5 类铝钛离子  $3s^23p-3s3p^2$  磁偶极与电四极跃迁的能量、跃迁几率与振子强度Tab. 5 The energy levels transition probabilities and oscillator strengths in magnetic dipole and electric quadrupole  $3s^23p-3s3p^2$  transitions for Al-like Ti ions

跃迁	能量/eV	跃迁几率/ $s^{-1}$		振子强度	
		磁偶极	电四极	磁偶极	电四极
$3s3p^2P_{3/2}-3s3p^2P_{1/2}$	0.29	5.12E-1	5.12E-1	3.80E-7	3.81E-7
$3s3p^2P_{5/2}-3s3p^2P_{3/2}$	0.42	1.08E0	1.95E-5	5.89E-7	1.06E-11
$3s3p^2P_{3/2}-3s3p^2P_{1/2}$	0.43	5.97E-1	1.63E-5	2.08E-7	5.69E-12
$3s^23p^2P_{3/2}-3s^23p^2P_{1/2}$	0.78	3.89E0	4.27E-4	4.07E-7	4.47E-11
$3s3p^2P_{3/2}-3s3p^2S_{1/2}$	2.16	5.09E0	2.08E-3	7.01E-8	2.87E-11
$3s3p^2D_{3/2}-3s3p^2P_{5/2}$	4.82	2.79E0	3.95E-2	7.69E-9	1.09E-10
$3s3p^2D_{5/2}-3s3p^2P_{3/2}$	5.32	5.74E0	4.67E-2	1.95E-8	5.28E-12
$3s3p^2S_{1/2}-3s3p^2D_{3/2}$	5.34	1.91E-1	1.64E1	2.15E-10	1.85E-8
$3s3p^2D_{3/2}-3s3p^2P_{1/2}$	5.54	2.33E0	2.34E0	4.89E-9	4.89E-9
$3s3p^2P_{1/2}-3s3p^2D_{3/2}$	7.08	1.08E1	7.243E0	6.94E-9	4.64E-9
$3s3p^2P_{3/2}-3s3p^2D_{5/2}$	7.43	1.23E1	7.40E-1	1.43E-8	8.62E-10
$3s3p^2S_{3/2}-3s3p^2P_{3/2}$	10.59	1.44E2	1.57E-2	4.12E-8	4.50E-12
$3s3p^2P_{1/2}-3s3p^2P_{3/2}$	12.31	4.75E-1	9.91E0	2.09E-9	1.01E-10
$3s3p^2P_{3/2}-3s3p^2P_{5/2}$	12.32	7.22E0	1.61E-2	3.05E-9	6.82E-12
$3s3p^2P_{3/2}-3s3p^2P_{1/2}$	13.04	3.21E0	1.08E-1	1.21E-9	4.10E-11

表6 类铝钛离子  $3s^23p-3s3p^2$  磁四极跃迁的能量、跃迁几率与振子强度  
 Tab. 6 The energy levels, transition probabilities and oscillator strengths in magnetic quadrupole  $3s^23p-3s3p^2$  transitions for Al-like Ti ions

跃迁	能量/eV	振子强度		跃迁几率/ $s^{-1}$
		本文值	文献值 <sup>[5]</sup>	
$3s3p^24P_{1/2}-3s^23p^2P_{3/2}$	15.71	1.14E-1	1.14E-1	1.49E-11
$3s3p^24P_{3/2}-3s^23p^2P_{3/2}$	16.01	2.48E-2	2.46E-2	6.21E-12
$3s3p^24P_{5/2}-3s^23p^2P_{3/2}$	16.43	5.88E-1	5.77E-1	2.10E-10
$3s3p^24P_{3/2}-3s^23p^2P_{1/2}$	16.79	5.89E-1	5.78E-1	1.34E-10
$3s3p^24P_{5/2}-3s^23p^2P_{1/2}$	17.21	3.03E-1	2.96E-1	9.87E-11
$3s3p^22D_{3/2}-3s^23p^2P_{3/2}$	21.25	2.57E-1	2.54E-1	3.66E-11
$3s3p^22D_{5/2}-3s^23p^2P_{3/2}$	21.33	3.04E0	3.24E0	6.44E-10
$3s3p^22D_{3/2}-3s^23p^2P_{1/2}$	22.03	1.44E-2	1.14E-2	1.91E-12
$3s3p^22D_{5/2}-3s^23p^2P_{1/2}$	22.11	1.93E0	1.98E0	3.81E-10
$3s3p^22S_{1/2}-3s^23p^2P_{3/2}$	26.60	2.56E0	2.71E0	1.16E-10
$3s3p^22P_{1/2}-3s^23p^2P_{3/2}$	28.32	2.33E0	2.44E0	9.29E-11
$3s3p^22P_{3/2}-3s^23p^2P_{3/2}$	28.76	1.85E0	1.96E0	1.43E-10
$3s3p^22P_{3/2}-3s^23p^2P_{1/2}$	29.54	5.74E-1	6.28E-1	4.22E-11

### 3 结论

利用多组态 Dirac-Hartree-Fock 方法详细计算了类铝钛离子的  $3s^23p$  和  $3s3p^2$  组态, 以及两能级之间的电偶极、电四极、磁偶极与磁四极跃迁的波长、跃迁几率和振子强度. 结果表明考虑电子关联效应后, 当前 CV 关联效应的结果与已有的实验结果及

理论结果符合很好. 这些结果对于理解类铝钛离子不同效应有重要的意义, 同时对于分析已有的实验结果和指导未来的实验也有重要的意义. 需要指出的是当前计算结果是在重点考虑  $3s^23p$  和  $3s3p^2$  组态基础上给出的, 因此可以看出本文的一些计算结果与实验值仍有一定的差距, 因此在今后的计算中, 需要考虑更多的组态以获得更好的结果.

### 参考文献

- [1] 杨国洪, 张继彦, 吴泽清, 等. 神光 II 黑腔等离子体时间分辨的电子温度诊断[J]. 强激光与粒子束, 2010, 22(11): 2613-2616.
- [2] FROESE F C, TACHIEV G, IRIMIA A. Relativistic energy levels, lifetimes, and transition probabilities for the sodium-like to argon-like sequences[J]. Atomic Data and Nuclear Data Tables, 2006, 92(5): 607-812.
- [3] SANTANA J A, ISHIKAWA Y, TRÄBERT E. Multireference Møller-Plesset perturbation theory results on levels and transition rates in Al-like ions of iron group elements[J]. Physical Scripta, 2009, 79(6): 065301.
- [4] SINGH J, JHA A K S, VERMA N, et al. New atomic data for Ti X[J]. Atomic Data and Nuclear Data Tables, 2010, 96(5): 759-816.
- [5] AGGARWAL K M, KEENAN F P. Energy levels and radiative rates for transitions in Ti X[J]. Physical Scripta, 2013, 88(6): 025303.
- [6] GU M F. The flexible atomic code[J]. Canadian J Physics, 2008, 86(5): 675-689.
- [7] TRÄBERT E, GRIESER M, KRANTZ C, et al. Isoelectronic trends of the E1-forbidden decay rates of Al-, Si-, P-, and S-like ions of Cl, Ti, Mn, Cu, and Ge[J]. J Physics: Atomic, Molecular and Optical Physics, 2012, B45(21): 215003.
- [8] JÖNSSON P, HE X, FROESE FISCHER C, et al. The GRASP2K relativistic atomic structure package[J]. Computer Physics Communications, 2007, 177(7): 597-622.
- [9] JÖNSSON P, GAIGALAS G, BIERON J, et al. New version: GRASP2k relativistic atomic structure package[J]. Computer Phys-

- ics Communications 2013 ,184(9) :2197–2203.
- [10] 胡峰 孙言 梅茂飞 等. 类铍铝离子的  $K\alpha$  跃迁特性研究[J]. 原子与分子物理学报 2017 ,34(3) :413–418.
- [11] 胡峰 杨家敏 王传珂 等. 电子关联效应对金离子的影响[J]. 物理学报 2011 ,60(10) :103104.
- [12] 杨能勋 金佛荣. 用 Dirac-Fock 方法计算对类镁离子价电子体系的研究[J]. 四川师范大学学报(自然科学版) 2011 ,34(5) :690–696
- [13] HU F , YANG J M , WANG C K , et al. Multiconfiguration Dirac-Fock calculations in multi-valence-electron systems: Benchmarks on Ga-like ions[J]. Physical Review 2011 ,A84(4) :042506
- [14] KRAMDIA A , RAKCHENKO Y , READER J , et al. NIST atomic spectra database [EB/OL]. [2017-07-30]. <http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD>.
- [15] AGGARWAL K M , KEENAN F P. Energy levels , radiative rates and electron impact excitation rates for transitions in He-like Fe XXV , CO XXVI , Ni XXVII , Cu XXVII and Zn XXIX[J]. Physical Scripta 2013 87(5) :055302.
- [16] EKAMN J , GODEFROID M R , HARTMAN H. Validation and implementation of uncertainty estimate of calculated transition rates[J]. Atoms 2014 2(2) :215–224

## The Calculation of Energy Levels and Transition Probabilities for Aluminum-like Titanium Ions

HU Feng<sup>1,3</sup> , SUN Yan<sup>1</sup> , MEI Maofei<sup>1</sup> , SANG Cuicui<sup>2</sup> , YANG Jiamin<sup>3</sup>

(1. School of Mathematic and Physical Science , Xuzhou University of Technology , Xuzhou 221018 , Jiangsu ;

2. College of Science , Lanzhou University of Technology , Lanzhou 730050 , Gansu ;

3. Research Center of Laser Fusion , China Academy of Engineering Physics , Mianyang 621900 , Sichuan)

**Abstract:** We present a comprehensive theoretical study of atomic characteristic of Ti X in a broad range of wavelengths , energy levels and transition probabilities. The results calculated by multiconfiguration Dirac-Fock (MCDF) and relativistic configuration interaction calculations (RCI) including the Breit interaction are presented. The valence-valence and core-valence correlations are also considered. The calculated values including core-valence correlation are found to be similar and to compare very well with other theoretical and experimental values. We believe that our extensive calculated values can guide experimentalists in identifying the fine structure levels in their future work.

**Keywords:** correlation; energy level; wavelength; transition probabilities

(编辑 陶志宁)