

# Relativistic Configuration Interaction Calculations for Mg-Like Ions

Feng Hu

School of Mathematic and Physical Science, Xuzhou Institute of Technology, Xuzhou  
Email: [hufengscu@139.com](mailto:hufengscu@139.com)

Received: Mar. 26<sup>th</sup>, 2014; revised: Apr. 25<sup>th</sup>, 2014; accepted: May 2<sup>nd</sup>, 2014

Copyright © 2014 by author and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

---

## Abstract

Relativistic configuration interaction methods including Breit interaction, quantum electrodynamics and finite nuclear mass corrections have been carried out with the combination of the energy level optimization method of multi-configuration Dirac-Fock to calculate the wavelengths, electric dipole transition rates and oscillator strengths of Mg-like ions. Through the use of the active space expanding method, the calculated experimental data are compared with the other available data on Mg-like ions and are found in good agreement with them. In this paper we give accurate transition properties of four Mg-like ions. These data provide reference for level lifetime, charge state distribution and average charge of Mg-like plasmas.

## Keywords

Configuration Interaction, Wavelength, Energy Level, Oscillator Strength

---

# 类镁离子的组态互相作用计算

胡 峰

徐州工程学院数学与物理科学学院, 徐州  
Email: [hufengscu@139.com](mailto:hufengscu@139.com)

收稿日期: 2014年3月26日; 修回日期: 2014年4月25日; 录用日期: 2014年5月2日

## 摘 要

采用结合包含Breit相互作用、量子动力学效应和有限核质量修正的相对论的组态相互作用的方法以及多组态Dirac-Fock方法的能级优化法来计算类镁离子的波长、电偶极跃迁速率以及振子强度。利用活动空间扩大法, 计算出的类镁数据与实验符合很好。在此基础上本文给出了4个类镁离子跃迁特性。这些数据可以给类镁等离子体的能级寿命、布居分布以及平均电荷提供参考。

## 关键词

组态相互作用, 波长, 能级, 振子强度

## 1. 引言

在天体物理、惯性约束聚变(ICF)和高能量密度物理以及激光等离子体软 X 射线激光物理等许多研究领域, 高剥离态离子的辐射和碰撞过程一直处于非常重要的地位。近年来, 随着激光技术的迅猛发展和惯性约束热核聚变研究的迫切需要, 高离化态重离子发射光谱已成为人们关心的中心课题之一。类镁光谱在近几年中得到了很广泛的研究, 特别是随着各种先进的离子源、高功率激光器、托卡马克等实验技术的发展, 高 Z 元素高剥离态的研究越来越引起人们的关注。对高剥离元素的跃迁波长、跃迁能量和振子强度等原子跃迁参数的准确计算就显得尤其重要, 进而类镁离子的高剥离态离子成为等离子体体系中研究的重要对象[1]。

早期类镁电子的研究内容主要包括实验和理论的能级、振子强度, 跃迁几率和能级寿命。早期关于类镁等电子序列的研究主要有两个局限, 一是缺乏部分离子的相关数据; 二是部分数据以图片形式出现, 不够准确, 或者计算精度不够; 本文所研究的对象也存在上述两个问题。

本文正是这样的基础上, 利用多组态 Dirac-Fock 方法, 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。所谓关联效应最初定义为能级的实验值和考虑了相对论效应修正后的 Dirac-Fock 解的差。而电子关联效应, 就是指价电子与原子实内的电子之间的相互作用。国外已经有大量的文献报道, 我们小组也做了相应的工作[2]-[4]。研究表明电子关联效应对于原子的能级结构和跃迁特性有很大的影响, 考虑了电子关联效应后能够获得更加精确的数据。本文主要研究了研究类 Mg 离子的特性。这些离子闭壳层外有两个价电子, 是典型电子关联效应研究的对象。和先前工作一样, 我们选取基于多组态 Dirac-Fock 方法的 GRASPVU 程序包来进行计算。

## 2. 方法

### 2.1. 理论

本文所用的多组态 Dirac-Fock 理论(MCDF)方法在文献[5]中已有详细描述, 这里仅作扼要的介绍。在多组态 Dirac-Fock 理论中, 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)。

$$\hat{H}^{DC} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_D(i) + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \left| \hat{r}_i - \hat{r}_j \right|^{-1} \quad (1)$$

这里的  $\hat{H}_i$  是第 i 个电子的 Dirac 哈密顿量, 可表示为

$$\widehat{H}_i = c\hat{\alpha} \cdot \hat{p}_i + (\beta - 1)c^2 + V_{nuc}(\hat{r}_i) \quad (2)$$

其中  $V_{nuc}(\hat{r}_i)$  是核势场,  $\hat{\alpha}$  和  $\beta$  分别是 Dirac 矢量和标量矩阵,  $\hat{p}_i$  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可表示为

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

式中  $k$  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

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

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

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

式中  $n_c$  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 QED 效应, 可作为微扰处理。

## 2.2. 过程

本小节主要介绍我们所用的计算方法。简单而言主要是通过逐次增加基矢数目来尽可能多的考虑组态相互作用, 直至得到收敛的结果。应用的具体计算方法如下:

1) 采用限制电子活动空间的方法(Restrictive active space methods)产生组态状态波函数(Configuration state function)列表。本工作采用的限制电子活动空间方法是指电子被限制在某些特定的活动轨道之间进行跃迁。自洽场迭代收敛能量最小值往往与主量子数相同的组态能量较为接近, 因此逐次增大主量子数  $n$ , 产生组态状态波函数基组列表。同时在计算中引入轨道层(orbital layer)的概念, 将主量子数( $l$ ), 相同而轨道角动量( $m$ ), 量子数( $n$ )不同的组态划分为同一个轨道层。例如: 把  $\{1s, 2s, 2p\}$  的轨道基组叫做  $n = 2$  轨道层, 把  $\{1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d\}$  的轨道基组叫做  $n = 3$  轨道层, 依次类推。但是考虑到计算量和计算时间, 组态状态波函数基组不易过大, 且有些电子不真实存在某些轨道上, 因此在计算当中有必要适当的限制电子活动轨道。对于不同的模型, 主量子数( $n$ )的限制要作相应的调整。由于类 Mg 离子最外层有两个电子, 因此要考虑双激发对跃迁参数的贡献, 同时为了最大限度接近实验值, 在本文的计算当中我们都考虑了双激发。

2) 在组态状态波函数基组生成以后, 需要对多电子 Dirac-Coulomb 哈密顿量矩阵元进行角积分。在这一步里, 初始波函数是由 Thomas-Fermi 模型势给出的。同时在初次进行自洽场计算的时候, 需要对所有的轨道都进行优化。当逐次增加主量子数  $n$  的时候, 对轨道的优化也是一层一层进行的。在这个方案下, 首先我们优化  $n$  轨道同时保持  $n - 1$  轨道不变。然后我们分别优化  $n + 1$  轨道同时保持前面已经优化的轨道不变。同时, 我们注意到在计算当中涉及了多条能级, 因此采用文献[6]给出的开展能级优化计算 EOL 模型(Extended Optimal Level calculation), 对应于同一 LS 谱项的精细结构能级的平均的优化权重为  $(2J + 1)$ ,

$$E_{op} = \frac{\sum_i E(\gamma_i J_i)(2J_i + 1)}{\sum_i (2J_i + 1)} \quad (6)$$

同时，我们在计算中，将自洽场收敛的标准设为  $10^{-8}$ 。

3) 得到基组的径向波函数以后，加入第二章提到的 Breit 修正、量子电动力学修正已得到对角化包括 Breit 修正项、真空极化和自能修正项的哈密顿量得到组态状态波函数扩展系数。在这个相对论组态相互作用的计算过程中，程序运用了文献[6]中的迭代 Davidson 方法和稀疏矩阵表示方法。

4) 在获得跃迁波长、阵子强度、线强度和跃迁几率之前，我们要将组态混合系数由块模式转化为非块模式，使得初态和末态组态基组变得正交，得出想要的结果。

### 3. 结果与讨论

#### 3.1. 能级

为了更好的说明问题，当前的计算结果分成两部分，一部分是考虑电子关联效应中的 Valence-Valence (VV)效应，一部分是考虑电子关联效应中的 Core-Valence (CV)效应。表 1 给出了基于 MCDF 方法的 VV 和 CV 两种模型下类 Mg 的离子  $3s3p(^3P_{0,1,2}, ^1P_1)$  的能级，结果包含了量子电动力学效应和特殊质量位移，其中量子电动力学效应考虑了两种修正：自能和真空极化。表 1 的实验结果是来自于 NIST[7]。需要说明的是，NIST 并没有给出 Br 类 Mg 的  $^1P_1$  能级，因此我们用 Zeng 等人的结果[8]来代替。考虑电子关联效应后，导致组态波函数急剧增加，这对于计算的收敛性和程序本身的计算能力、计算时间要求相对提高很多，因此在保证计算精度的条件下，有必要对扩展的主量子数进行限制。正如表 1 列出的，对于 VV 模型，主量子数限定在  $n \leq 7$ ，其对应的最大波函数数目为 698；CV 模型  $n \leq 6$ ，其波函数数为 13,069。尽管对主量子数进行了限制，计算的结果仍然可信，这是因为本文的结果正是建立在增加波函数基矢数目的基础上来考虑电子关联效应的。

从表 1 可以看出，考虑电子关联效应，CV 的结果要更加接近与实验值。VV 的计算值与实验值的偏差在 0.006%~0.412%之间，而 CV 的值而言，若不考虑  $^1P_1$  能级，偏差在 0.001%~0.064%之间。CV 模型下的  $^1P_1$  能级与实验值的偏差则在 0.177%~0.686%之间，但是如果考虑电子关联效应， $^1P_1$  的能级与实验值偏差在 0.447%~1.034%之间，因此可认为，考虑电子关联效应后，CV 计算的能级与实验符合很好。为了更好说明电子关联效应对  $^1P_1$  能级的影响，我们在图 1 给出了随扩展主量子数变化的 VV、CV 与实验值的偏差。

对于两种模型来说，随着主量子数的扩大，两种模型的结果与实验结果更加接近，但是对于 VV 模型来说， $n=6$  与  $n=7$  的结果最大偏差不到  $1 \text{ cm}^{-1}$ ，也就是说  $n=7$  的轨道对于  $3s^2$  和  $3s3p$  能级的影响相当小，也从一个侧面说明了当前计算对于主量子数的限制是可行的。同时我们可以发现，高  $n$  层的旁观电子对于计算的结果有很大的影响，CV 模型更为明显，这点在我们先前的文章也有类似的结论[3] [4]。

同时为了说明当前计算结果是可信的，我们在表 2 中比较了不同方法的计算出的类 Mg 的 Cu XVIII 能级值。其中的 CIV3 的计算结果是由 Tayal[9]等人理由基于组态相互作用的 CIV3 程序给出的，MCHF 的结果则是由 Tachieve 等人[10]给出的。从表 2 可以看出，当前 CV 的计算值要优于 CIV3 MCHF 的计算值。同时我们注意到，对于  $^1P_1$  能级而言，除了 CIV3 修正后的结果，其它理论结果与实验值偏差都有点大。考虑电子关联效应之后，CV 值要优于其它理论计算值。

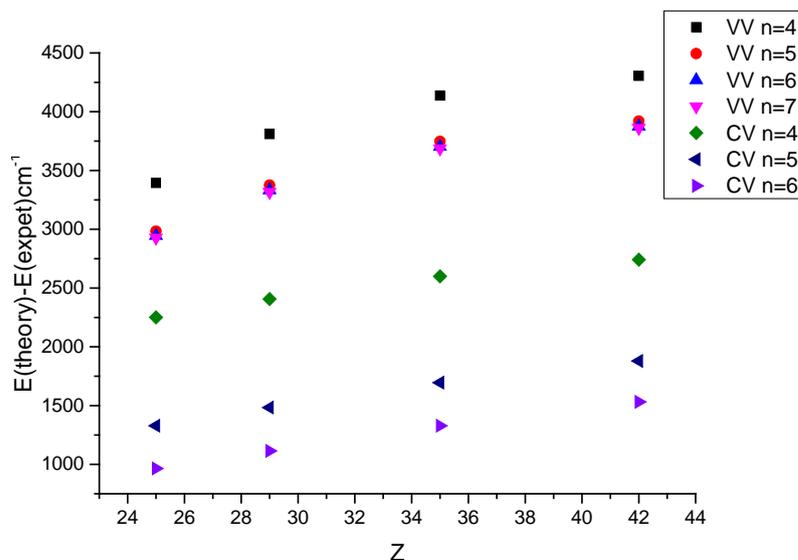
#### 3.2. 波长

低密度等离子体中发射的自旋禁戒的谱线可以被认为是很好的诊断手段。因此准确的波长对于研究

**Table 1.** The energies of Mg-like 3s3p levels  
**表1.** 类Mg的离子的3s3p能级( $\text{cm}^{-1}$ )

Z	Level	VV				CV			Exp
		4	5	6	7	4	5	6	
Mn XIV	$^3P_0$	217,703	217,852	217,874	217,880	218,464	218,539	218,602	218,604
	$^3P_1$	222,561	222,695	222,716	222,722	223,310	223,381	223,480	223,438
	$^3P_2$	233,984	234,082	234,102	234,108	234,751	234,822	234,999	234,822
Cu VIII	$^1P_1$	331,435	331,026	330,986	330,970	330,293	329,371	329,007	328,042
	$^3P_0$	278,944	279,127	279,150	279,157	279,745	279,813	279,834	279,816
	$^3P_1$	288,605	288,765	288,787	288,793	289,364	289,425	289,488	289,401
Br XXIV	$^3P_2$	313,887	314,002	314,024	314,031	314,701	314,766	314,905	314,753
	$^1P_1$	430,797	430,363	430,320	430,304	429,393	428,470	428,101	426,987
	$^3P_0$	372,850	373,094	373,121	373,128	373,731	373,797	373,761	373,577
Mo XXXI	$^3P_1$	393,528	393,740	393,764	393,771	394,274	394,321	394,355	394,255
	$^3P_2$	461,006	461,248	461,275	461,284	462,014	462,079	462,160	462,216
	$^1P_1$	603,612	603,222	603,177	603,161	602,074	601,169	600,803	599,474 <sup>a</sup>
Mo XXXI	$^3P_0$	486,809	487,048	487,075	487,084	487,709	487,778	487,689	487,560
	$^3P_1$	524,809	524,976	524,996	525,003	525,353	525,378	525,421	525,030
	$^3P_2$	697,230	697,468	697,499	697,509	698,335	698,406	698,424	698,160
	$^1P_1$	866,365	865,980	865,935	865,921	864,801	863,940	863,592	862,060

a: 文献[8]。



**Figure 1.** The electron correlation on  $^1P_1$  energy level

**图 1.** 电子关联效应对  $^1P_1$  能级的影响

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，我们在表 3 给出了  $Z = 25 \sim 42$  的类 Mg 离子的理论计算值和实验值。同时在表三也列出了 Tachieve 等人[9]的 MCHF 计算值。表 3 中的实验值是

**Table 2.** The experimental and theoretical results of Cu XVIII  
**表2.** Cu XVIII能级( $\text{cm}^{-1}$ )的实验值和理论计算值

Level	MCHF	CIV3 <sup>a</sup>	CIV3 <sup>b</sup>	VV	CV	Expt
<sup>3</sup> P <sub>0</sub>	277,575	218,215	279,899	279,157	279,834	279,816
<sup>3</sup> P <sub>1</sub>	287,358	290,158	289,455	288,793	289,488	289,401
<sup>3</sup> P <sub>2</sub>	312,938	313,039	314,031	314,031	314,905	314,753
<sup>1</sup> P <sub>1</sub>	422,773	430,655	427,065	430,304	428,101	426,987

a: CIV3原始计算值; b: CIV3修正值。

**Table 3.** The wavelengths of Mg-like ions (Å) (Mn XIV-Mo XXXI)  
**表3.** 类Mg离子的波长(Å) (Mn XIV-Mo XXXI)

元素	跃迁	实验值	VV	CV	MCHF
25	<sup>1</sup> S <sub>0</sub> - <sup>3</sup> P <sub>1</sub>	447.551	448.989	447.663	449.36
	<sup>1</sup> S <sub>0</sub> - <sup>1</sup> P <sub>1</sub>	304.84	302.14	304.94	306.29
29	<sup>1</sup> S <sub>0</sub> - <sup>3</sup> P <sub>1</sub>	345.557	346.267	345.612	348.00
	<sup>1</sup> S <sub>0</sub> - <sup>1</sup> P <sub>1</sub>	234.16	232.39	234.589	236.53
35	<sup>1</sup> S <sub>0</sub> - <sup>3</sup> P <sub>1</sub>	253.73	253.954	253.654	252.36
	<sup>1</sup> S <sub>0</sub> - <sup>1</sup> P <sub>1</sub>	166.77	165.793	166.44	166.12
42	<sup>1</sup> S <sub>0</sub> - <sup>3</sup> P <sub>1</sub>	190.466	190.475	190.338	188.85
	<sup>1</sup> S <sub>0</sub> - <sup>1</sup> P <sub>1</sub>	115.988	115.484	115.795	115.36

由 Seely 等人[11], Sugar 等人[12]以及 NIST 给出的。从表 3 可以看出, 两种模型和 MCHF 方法给出的 Mn XIV-Mo XXXI 离子 <sup>1</sup>S<sub>0</sub>-<sup>3</sup>P<sub>1</sub> 跃迁波长都与实验值存在偏差, 其中 VV 偏差在 0.71~2.70 Å, CV 偏差在 0.001~0.229 Å, 而 MCHF 偏高在 0.65~2.244 Å; 对于 Mo XXXI 而言, 我们注意到 <sup>1</sup>S<sub>0</sub>-<sup>1</sup>P<sub>1</sub> 当前计算的 CV 与实验值的偏差最大为 0.229 Å, 这要明显好于 MCHF 和 VV 的计算值, 因此我们认为考虑电子关联效应对精确的波长有重要的影响。

### 3.3. 振子强度

对于从*i*态到*j*态跃迁的振子强度和跃迁几率的关系可以用下面的公式来定义:

$$f_{ij} = \frac{mc}{8\pi^2 e^2} \lambda_{ji}^2 \frac{\omega_j}{\omega_i} A_{ji} = 1.49 \times 10^{-16} \lambda_{ji}^2 \frac{\omega_j}{\omega_i} A_{ji} \quad (7)$$

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(Å),  $\omega_i$ 和 $\omega_j$ 分别是下能级*i*和上能级*j*的权重(简并度)。对于电偶极跃迁(E1)来说, 跃迁几率和振子强度可以给出如下的形式:

$$A_{ji} = \frac{2.0261 \times 10^{18}}{\omega_j \lambda_{ji}^3} \text{S} \quad \text{and} \quad f_{ji} = \frac{303.75}{\lambda_{ji} \omega_i} \text{S} \quad (8)$$

其中的S是线强度, 单位为原子单位(au),  $1\text{au} = 6.460 \times 10^{-36} \text{cm}^2 \text{esu}^2$ 。

表 4 给出了类 Mg 离子的 3s<sup>2</sup>-3s3p(<sup>3</sup>P<sub>1</sub>, <sup>1</sup>P<sub>1</sub>)跃迁的振子强度, 同时也给出了来自 MCHF 的结果[10], Safronova 等人的结果[12], 以及 Huang 等人的结果[13]。可以看出, 类 Mg 离子的振子强度随元素序数的增加而减少。MBPT 的计算值要低于其它所有理论的计算值, 但是随着元素序数的增加, 偏差也在逐渐缩小。VV、CV、MCHF 以及 Huang 的结果大体在一个数量级, 彼此之间的偏差不超过 10%。Huang

等人的结果被证明与 NIST 给出的结果相差小于 1%，因此我们可以比较 CV 与 Huang 等人的结果来确保当前计算的可信性。可以看出，CV 的计算值与 Huang 等人的结果数值上很接近，因此我们认为当前的计算是可信而且准确的。同时我们发现 VV 的计算值不总是差于 CV 的计算值，对于 Cu XVIII 的  $^1S_0-^1P_1$  跃迁的振子强度，VV 的计算值为 0.733，要比 CV 的计算值 0.761，更接近 Huang 等人给出的 0.741。由于目前尚无实验值，所以暂时无法解释这一现象。

### 3.4. 能级寿命

能级  $j$  的能级寿命  $\tau$  可以表示为：

$$\tau_j = \frac{1}{\sum_i A_{ji}} \quad (9)$$

能级寿命作为一个可以被测量的量，可以用来检验理论计算的准确性。因此在表 5 和表 6 分别给出

**Table 4.** The oscillator strengths of  $3s^2-3s3p(^3P_1, ^1P_1)$  transitions of Mg-like ions

**表4.** 类Mg离子 $3s^2-3s3p(^3P_1, ^1P_1)$ 跃迁的振子强度

元素	跃迁	VV	CV	MCHF	MBPT	Huang
25	$^1S_0-^3P_1$	2.716(-3)	2.889(-3)	2.808(-3)	2.22(-3)	2.63(-3)
	$^1S_0-^1P_1$	0.847	0.870	0.806	0.802	0.862
29	$^1S_0-^3P_1$	6.497(-3)	6.844(-3)	6.856(-3)	4.43(-3)	6.24(-3)
	$^1S_0-^1P_1$	0.733	0.761	0.691	0.694	0.741
35	$^1S_0-^3P_1$	1.663(-2)	1.731(-2)	1.575(-2)	1.42(-2)	1.58(-2)
	$^1S_0-^1P_1$	0.634	0.623	0.595	0.591	0.624
42	$^1S_0-^3P_1$	3.261(-2)	3.362(-2)	3.033(-2)	2.83(-2)	
	$^1S_0-^1P_1$	0.565	0.548	0.524	0.521	

**Table 5.** The lifetimes of Mg-like ions  $^3P_1$  energy level ( $S^{-1}$ )

**表5.** 类Mg离子 $^3P_1$ 的能级寿命( $S^{-1}$ )

Z	VV	CV	MCHF	MBPT	拟合值	其它
25	3.33(-8)	3.46(-8)	3.23(-9)	4.05(-8)	3.64(-8)	3.70(-8) <sup>a</sup>
29	8.82(-9)	9.01(-9)	7.94(-9)	9.90(-9)	9.08(-9)	1.01(-8) <sup>a</sup>
35	1.67(-9)	1.85(-9)	1.82(-9)	2.02(-9)	1.91(-9)	
42	5.05(-10)	5.32(-10)	5.28(-10)	5.75(-10)	5.49(-10)	

a: 文献[15]。

**Table 6.** The lifetime of Mg-like ions  $^1P_1$  energy levels ( $10^{11} S^{-1}$ )

**表6.** 类Mg离子 $^1P_1$ 的能级寿命( $10^{11} S^{-1}$ )

Z	VV	CV	MCHF	MBPT	拟合值	其它
25	4.51	4.90	5.23	5.21	4.76	4.85 <sup>a</sup>
29	3.13	3.24	3.63	3.55	3.21	3.41 <sup>b</sup>
35	1.77	1.99	2.08	2.11	1.89	
42	1.01	1.05	1.14	1.16	1.03	

a: 文献[7]; b: 文献[16]。

了  $3s3p(^3P_1$  和  $^1P_1)$  的能级寿命, 其中, 表格中的拟合值为 Curtis 在 1991 年根据当时的实验值和一些理论结果拟合产生的[14]。对于  $3P1$ ,  $VV$  的计算结果与拟合值偏差在 1.89%~12.5%,  $CV$  与拟合值的偏差为 0.77%~4.94%,  $MCHF$  与拟合值的偏差为 3.83%~12.6%, 而  $MBPT$  与拟合值的偏差为 4.73%~11.26%。可以看出考虑电子关联效应后,  $CV$  的计算值与拟合值更加接近。

对于类 Mg 离子  $^1P_1$  的能级寿命而言, 我们发现理论值与拟合值的符合要比  $^3P_1$  的情况要好,  $VV$  的计算结果与拟合值偏差在 1.94%~6.34%,  $CV$  与拟合值的偏差为 0.93%~5.39%,  $MBPT$  与拟合值的偏差为 9.87%~13.08%。如果不考虑 Br XXIV 和 Mo XXXI, 则  $MCHF$  与拟合值的偏差为 9.45%~12.62%。同时我们注意到表 5 和表 6 中 NIST 给出的实验值与拟合值有 0.29%~6.94% 的偏差, 我们认为有两个原因, 一是 NIST 给出的实验值, 其自身的不确定度就在 20%; 二是当时拟合时, 实验数据较少, 因而拟合点少造成拟合公式不是很精确。如果考虑这两个因素, 我们认为考虑电子关联效应后,  $CV$  的值是可信的。但是由于类 Mg 的实验大多是在上世纪 80 年代完成的, 受制于当时条件, 造成实验精度不是很高, 因此能级寿命的测量需要更加精确的实验来完成。

#### 4. 结论

本文运用多组态 Dirac-Fock 方法, 考虑电子关联效应, 详细计算了类 Mg 离子的能级, 波长, 振子强度和能级寿命, 结果表明考虑电子关联效应后, 当前  $CV$  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 Mg 离子的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。

#### 项目基金

国家自然科学基金(11304266, 11105129)的资助。

#### 参考文献 (References)

- [1] 邹亚明 (2003) 电子束离子阱及高电荷态离子相关物理. *物理*, **32**, 98-104.
- [2] Hu, F., Jiang, G., Yang, J.M., Wang, C.K., Zhao, X.F. and Zang, H.P. (2011) Multiconfiguration Dirac-Hartree-Fock (MCDHF) calculations for Zn-like sequence from  $Z = 48$  to 54. *Chinese Physics B*, **20**, Article ID: 063103.
- [3] Hu, F., Yang, J.M., Wang, C.K., Jing, L.F., Chen, S.B., Jiang, G., Liu, H. and Hao, L.H. (2011) Multiconfiguration Dirac-Fock calculations in multi-valence-electron systems: Benchmarks on Ga-like ions. *Physical Review A*, **84**, Article ID: 042506.
- [4] 胡峰, 杨家敏, 王传珂, 张继彦, 蒋刚, 朱正和 (2011) 电子关联效应对金离子的影响. *物理学报*, **10**, A197-202.
- [5] Song, S.Q., Peng, F. and Jiang, G. (2006) Properties of K-alpha and K-beta X-ray transitions in Cu XX through Cu XXVIII. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, **39**, 2087-2093.
- [6] Grant, I.P., McKenzie, B.J., Norrington, P.H., Mayers, D.F. and Pyper, N.C. (1980) An atomic multiconfigurational Dirac-Fock package. *Computer Physics Communications*, **21**, 207-231
- [7] NIST Atomic Spectra Database. <http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD>
- [8] Zeng, X.T., Du, S.B., Jiang, L.Y., Yao, S.D., Chen, H.Z., Liu, H.P., Ma, X.W., Wang, Y.D., Jupén, C. and Martinson, I. (2000) Spectrum and energy levels of Mg-like Br XXIV. *Physica Scripta*, **61**, 464-467.
- [9] Tayval, V. and Gupta, G.P. (2009) Fine-structure energy levels, oscillator strengths and lifetimes in Cu XVIII. *Physica Scripta*, **80**, Article ID: 055301.
- [10] Tachieve, G. and Froese Fischer, C. (2002). <http://nlte.nist.gov/MCHF/view.html>
- [11] Sugar, J., Kaufman, V., Indelicato, P. and Rowan, W.L. (1989) Analysis of magnesium like spectra from Cu XVIII to Mo XXXI. *Journal of the Optical Society of America B*, **6**, 1437-1443.
- [12] Safronova, U.I., Johnson, W.R. and Berry, H.G. (2000) Excitation energies and transition rates in magnesiumlike ions. *Physical Review A*, **61**, Article ID: 052503.
- [13] Huang, K.N. and Johnson, W.R. (1985) Resonance transition of Mg- and Zn-like ions from multiconfiguration relati-

- vistic random-phase approximation. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B*, **9**, 502-504.
- [14] Curtis, L.J. (1991) Isoelectronic smoothing of line strengths in intermediate coupling. *Physica Scripta*, **43**, 137-143.
- [15] Tayval, V. and Gupta, G.P. (2007) Fine-structure energy levels, oscillator strengths and lifetimes in Mg-like chromium *The European Physical Journal D*, **44**, 449-457.
- [16] Tayval, V. and Gupta, G.P. (2009) Fine-structure energy levels, oscillator strengths and lifetimes in Cu XVIII. *Physica Scripta*, **80**, Article ID: 055301.