

专题: 原子分子和材料物性数据

$Z = 6—51$ 间类锂离子等电子序列 激发能及辐射跃迁速率*

赵嘉勋 武晨晟[†] 宋庆和[‡]

(昆明理工大学理学院物理系, 昆明 650500)

(2025 年 5 月 8 日收到; 2025 年 7 月 14 日收到修改稿)

本文基于多组态 Dirac-Fock 方法 (multi-configuration Dirac-Fock, MCDF) 和组态相互作用方法 (configuration interaction, CI) 系统计算了类锂等电子序列 $Z = 6—51$ 间 C^{3+} , F^{6+} , Mg^{9+} , P^{12+} , Ar^{15+} , Sc^{18+} , Cr^{21+} , Co^{24+} , Zn^{27+} , As^{30+} , Kr^{33+} , Y^{36+} , Mo^{39+} , Rh^{42+} , Cd^{45+} , Sn^{37+} , Sb^{38+} 共 17 种离子 $1s^2nl$ ($n \leq 4$, $l \leq 3$) 对应的 15 个能级激发能以及能级间的所有电偶极 (E1)、磁偶极 (M1) 和电四极 (E2) 跃迁速率. 将所得计算结果与 NIST 数据库及先前的一些理论结果进行对比, 当前的绝大部分激发能计算结果与 NIST 数据的差异在 0.02% 以内, 且显著优于先前同样采用 MCDF+CI 方法得到的理论结果. 而大部分跃迁速率计算结果与 NIST 数据的差异亦在 5% 以内, 部分与 NIST 数据差异较大的激发能以及跃迁速率数据, 当前的结果与先前同样采用 MCDF+CI 方法得到的理论结果相符, 这一结果提示未来需对这些跃迁进行更加深入的理论和实验研究. 本研究可为未来天体和实验室等离子体的实验诊断和理论模拟提供了精确的数据支撑. 本文数据集可在 <https://www.doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00154> 中访问获取.

关键词: 类锂离子, 原子结构, 多组态 Dirac-Fock 方法, 辐射跃迁速率**PACS:** 31.15.ag, 31.15.am, 32.30.-r**DOI:** 10.7498/aps.74.20250611**CSTR:** 32037.14.aps.74.20250611

1 引言

类锂离子由于具有在多电子离子中较简单的电子结构, 方便进行高精度的理论计算, 并用于研究诸如 Breit 效应等阶相对论和量子电动力学 (quantum electrodynamics, QED) 修正的影响及标度规律^[1-3]. 此外, 类锂离子及其特征谱线广泛存在于诸如惯性约束聚变、太阳日冕、X 射线自由电子激光实验等各类天体和实验等离子体中^[4,5], 这些谱线可作为诊断诸如元素丰度、温度、密度等等等离子体参数的关键探针^[6,7]. 然而, 精确解读天体和

实验室等离子体光谱需要完备而准确的原子数据支持, 包括能级、辐射跃迁速率等. 其中, 电偶极 (E1) 跃迁主导大多数光谱, 但随着核电荷数增大, 电四极 (E2) 和磁偶极 (M1) 跃迁在特定场景下具有不可忽视的作用^[8].

数十年来, 理论和实验上已有很多关于类锂离子等电子序列能级和跃迁速率的工作^[3,9-23]. 在理论计算领域, 诸如多体微扰 (many-body perturbation-theory, MBPT)、全实加关联 (full-core plus correlation, FCPC)、多组态 Dirac-Fock (multi-configuration Dirac-Fock, MCDF) 和组态相互作用 (configuration interaction, CI) 等方法在以往均被

* 国家自然科学基金 (批准号: 12204057)、云南省基础研究计划 (批准号: 202401CF070090) 和计算物理全国重点实验室资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: 20220209@kust.edu.cn

[‡] 通信作者. E-mail: songqinghe@kust.edu.cn

用于类锂离子等电子序列计算. 例如早在 1988 年, Johnson 等^[3]即使用 MBPT 方法计算了核电荷数 $Z = 3$ —92 类锂离子基态 $[1s^2s]_{1/2}$ 以及最低两个激发态 $[1s^2p]_{1/2, 3/2}$ 的能量; 之后在 2005 年, Gu^[15]使用 MBPT 结合 CI 方法, 进一步计算了核电荷数 $Z \leq 60$ 的离子 (包括类锂离子等电子序列) $1s^22l^q$ ($q \leq 8$) 对应能级的能量; 2011 年, Sapirstein 和 Cheng^[16]使用 S 矩阵 (S-matrix) 方法进一步计算了 $Z = 10$ —100 间类锂离子的基态及最低两个激发态的能量, 并在计算中更为细致地考虑了 QED 修正的影响; 2017 年, Yerokhin 等^[17]使用 CI 方法研究了 $Z = 6$ —17 间类锂离子 $1s^22l$ 和 $1s^22l'$ 对应能级的能量. 而对于更高激发态的能量、能级间跃迁速率及振子强度, 1992—1993 年, Wang 等^[19,21,22]使用 FCPC 方法并考虑相对论微扰修正计算了类锂离子等电子序列 $Z = 3$ —10 之间 $1s^2nl$ ($n \leq 5$, $l \leq 3$) 对应能级的非相对论能级能量以及精细结构劈裂. 这一方法后来也被国内研究组广泛用于计算类锂离子等电子序列的计算, 并将核电荷数 Z 进一步拓展到了 11—30 之间^[18,20,24]. 2002 年, Nahar^[25]使用 Breit-Pauli R 矩阵 (Breit-Pauli R-matrix, BPRM) 方法系统计算了 $Z = 6$ —28 间 15 种离子 $1s^2nl$ ($n \leq 10$, $l \leq 9$) 对应能级的能量及能级间 E1 跃迁的跃迁速率及振子强度. 在 2010—2013 年间, Aggarwal 等^[9-11]基于 MCDF 和 CI 方法, 系统计算了 $Z = 7$ —28 间离子 $1s^2nl$ ($n \leq 5$, $l \leq 4$) 对应能级的能量以及能级间的 E1 跃迁的跃迁速率及振子强度, 并计算了能级间 E2, M1 和磁四极跃迁 (M2) 的跃迁速率. 而在 2017 年, 同样使用 MCDF 和 CI 方法, Khatri 等^[12]计算了 $Z = 32$ —56 间 7 种离子 $1s^2nl$ ($n \leq 3$, $l \leq 2$) 对应能级的能量及能级间的 E1 跃迁的跃迁速率和振子强度.

然而, 总结先前关于类锂离子结构计算的工作可以发现, 过去的工作多集中于对类锂离子基态 $[1s^2s]_{1/2}$ 以及最低两个激发态 $[1s^2p]_{1/2, 3/2}$ 能级能量及能级间 E1 跃迁速率和振子强度的精密计算^[3,14-17,23]; 对于更高激发态的能量以及能级间跃迁速率和振子强度的计算, 则主要集中于较低离化度离子 ($Z \leq 30$)^[9-11,18-22,24,25], 而对于更高离化度离子的计算较少, 关于跃迁的计算也集中于 E1 跃迁^[12,13], 且现有数据库 (如 NIST^[26] 等) 对高离化态类锂离子 ($Z \geq 30$) 跃迁速率的收录亦极为有限, 极少关于 E2/M1 等禁戒跃迁的数据收录^[26]. 因此当前类锂离子等

电子序列相关的数据难以满足高 Z 离子在天体与实验室等离子体中的光谱诊断和应用需求.

相比于先前使用的诸如 BPRM, FCPC 等方法, 在 MCDF 方法中, 由于直接基于 Dirac 方程, 相对论效应可被天然包含. 而相比于 MBPT 方法和 S 矩阵方法, MCDF 方法更擅于处理关联效应较强的体系. 同时, MCDF 方法又可以通过逐渐扩大基组规模以充分考虑电子间关联效应的影响, 提高计算精度. 因此, 当前 MCDF 方法已经成为多电子原子结构计算中最常用的方法之一, 亦被广泛用于类锂离子等电子序列原子结构及原子参数的计算^[9-14].

本研究使用当前广泛应用的原子结构计算程序包 GRASP2018^[27,28], 基于 MCDF 和 CI 方法^[29], 并充分考虑 Breit 效应与真空极化等高阶相对论和 QED 修正的影响, 系统计算了类锂离子等电子序列 $Z = 6$ —51 的 C^{3+} , F^{6+} , Mg^{9+} , P^{12+} , Ar^{15+} , Sc^{18+} , Cr^{21+} , Co^{24+} , Zn^{27+} , As^{30+} , Kr^{33+} , Y^{36+} , Mo^{39+} , Rh^{42+} , Cd^{45+} , Sn^{37+} , Sb^{38+} 共 17 种离子 $1s^2nl$ ($n \leq 4$, $l \leq 3$) 对应的 15 个能级的能量以及能级间的 E1, M1 和 E2 跃迁速率. 通过与 NIST 数据库数据和先前理论数据进行比较^[9-13,15,16,25,26], 与 NIST 数据的相对差异显著小于先前同样采用 MCDF+CI 方法的计算结果. 本工作可为未来天体和实验室等离子体的实验诊断和理论模拟提供精确数据支撑.

2 理论方法

N 电子-原子 (离子) 体系的径向 Dirac-Coulomb 哈密顿量表示为

$$\hat{H}^{DC} = \sum_{i=1}^N \left[c\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}_i + (\beta - 1)c^2 - \frac{Z}{r_i} \right] + \sum_{i < j}^N \frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}, \quad (1)$$

式中 $\mathbf{p}_i$ 是第 i 个电子的动量算符; c 是真空中光速; $\boldsymbol{\alpha}$ 和 β 是 4×4 的 Dirac 矩阵, $\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & 0 \end{pmatrix}$, $\boldsymbol{\sigma}$ 是泡利矩阵, $\beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix}$, I 是 2×2 的单位矩阵. 第 2 个求和项是电子间的相互作用项, $\mathbf{r}_i$ 和 $\mathbf{r}_j$ 是第 i 个电子和第 j 个电子的位置矢量. 基于 Dirac-Coulomb 哈密顿量需要求解的本征值问题为

$$\hat{H}^{DC}|\Gamma P J M\rangle = E_{\Gamma}^{DC}|\Gamma P J M\rangle, \quad (2)$$

其中, $|\Gamma P J M\rangle$ 代表原子的第 Γ 个态的原子态波

函数 (atomic state function, ASF), 其是一个 N -电子波函数, 具有特定的宇称 P 、总角动量 J 和磁量子数 M , 可以展开为如下具有相同 P, J, M 的组态波函数 (configuration states function, CSF) $|ΓPJM\rangle$ 的线性组合:

$$|ΓPJM\rangle = \sum_{i=1}^{n_c} C_i^Γ |\gamma PJM\rangle, \quad (3)$$

其中, $C_i^Γ$ 是展开系数, γ 表示其他所有使组态波函数唯一的信息, n_c 是 CSF 的数目, 组态波函数 $|\gamma PJM\rangle$ 是在一定的电子组态下, 由 N 个单电子轨道波函数 (atomic orbital wave function, AO) 的 Slater 行列式通过线性组合得到. $\hat{H}^{DC}$ 为哈密顿量以组态波函数为基展开得到的哈密顿矩阵. 对单电子轨道波函数变分就得到了关于径向波函数的多组态 Dirac-Fock 方程组, 然后通过多组态自洽场 (multi configuration self-consistent field, MCSCF) 方法求解就可得到单电子轨道波函数, 此即为 MCDF 方法. 在获得单电子轨道波函数后, 可根据单电子轨道波函数构建组态波函数, 然后选取适当的组态波函数构建 Hilbert 空间中的一组基矢, 充分考虑电子间关联效应的影响, 在这一组基矢下获得哈密顿矩阵并求解本征值问题 (2), 从而获得不同能级对应的原子态波函数以及本征能量, 此即为 CI 方法. 在构建哈密顿矩阵并对角化的过程中, 可将高阶相对论和 QED 修正, 如 Breit 效应、真空极化、自能修正等项加入哈密顿量中, 从而充分考虑其对波函数和能量的影响.

利用 MCDF+CI 方法获得原子态波函数后, 可以使用初末态的波函数计算两个态之间的跃迁速率, 具体计算式如下 [29]:

$$A_{\beta\alpha}^\gamma = \frac{2\omega}{c} \frac{(2J_\alpha+1)}{(2L+1)(2J_\beta+1)} |\langle \Gamma_\alpha P_\alpha J_\alpha \| O^L \| \Gamma_\beta P_\beta J_\beta \rangle|^2, \quad (4)$$

式中下标 α 和 β 分别表示较低能级和较高能级, ω 为跃迁能量, $\langle \Gamma_\alpha P_\alpha J_\alpha \| O^L \| \Gamma_\beta P_\beta J_\beta \rangle$ 为两能级间的约化跃迁矩阵元, O^L 为电磁跃迁多极矩算符, L 为跃迁阶数.

本文使用 GRASP2018 程序包进行相应 MCDF 和 CI 计算. 在具体计算时, 选取恰当的计算方案是 MCDF 和 CI 计算中最先需要仔细考量的问题. 通常而言, 我们称达到计算所需精度的一组由组态波函数构成的函数基为准完备基. 准完备基中, 构

成组态波函数的单电子轨道波函数同时包含了一系列锁节点的光谱轨道和不锁节点的臆轨道. 选取占据轨道及问题所涉及的激发轨道为锁节点的光谱轨道. 然后对这些光谱轨道使用 MCSCF 方法进行优化, 由这些优化后的单电子轨道波函数组合得到一组组态波函数. 之后逐层加入臆轨道及臆轨道涉及的组态以充分考虑电子间关联效应的影响, 进一步通过 MCSCF 方法优化目标能级及新增臆轨道. 臆轨道可看作其他束缚轨道及连续轨道的一组线性组合, 将其他束缚轨道及连续轨道的贡献用一个波包来代替. 臆轨道完全由 MCDF 方法变分并由 MCSCF 方法得到, 且不锁节点数. 随着更多的臆轨道和组态加入, 进一步扩展计算的基组规模, 当计算精度达到所需精度时, 称此时所用的基组为准完备基. 在准完备基确定后, 固定所有原子轨道波函数, 并基于由这些原子轨道波函数构成的组态波函数, 通过 CI 方法对角化哈密顿矩阵, 从而最终获得所需原子态波函数及能级能量. 使用准完备基方法可在使用有限的计算量的情况下得到尽可能可靠的结果, 且由于基组是逐步扩大的, 有利于对计算误差进行逐层分析.

3 计算结果

具体而言, 本文计算 $Z = 6-51$ 中共 17 个元素基态及最低 14 个激发态的能量及能级间的 E1, M1 和 E2 跃迁的跃迁速率. 在波函数准备阶段: 首先, 使用 MCSCF 方法, 选取 1s, 2s, 2p 轨道为光谱轨道, 利用 $1s^2 2s$, $1s^2 2p$ 两个参考组态对应的 3 个细致组态, 优化所有 3 个对应能级及 1s, 2s, 2p 轨道, 从而得到基组 ($n \leq 2$). 在此基础上固定 1s, 2s, 2p 轨道, 添加 3s, 3p, 3d 轨道作为光谱轨道, 增加 $1s^2 3s$, $1s^2 3p$, $1s^2 3d$ 三个参考组态对应的 5 个细致组态, 并优化所有 8 个能级及 3s, 3p, 3d 轨道, 进一步扩大基组规模得到基组 ($n \leq 3$). 之后, 进一步固定已优化轨道, 添加 4s, 4p, 4d, 4f 轨道作为光谱轨道, 增加 $1s^2 4s$, $1s^2 4p$, $1s^2 4d$, $1s^2 4f$ 四个参考组态对应的 7 个细致组态, 优化所有 15 个能级及 4s, 4p, 4d, 4f 轨道, 从而得到基组 ($n \leq 4$). 随后, 固定上述所有光谱轨道, 进一步加入 $n = 5$ 的轨道作为臆轨道, 以 $1s^2 2s$, $1s^2 2p$, $1s^2 3s$, $1s^2 3p$, $1s^2 3d$, $1s^2 4s$, $1s^2 4p$, $1s^2 4d$, $1s^2 4f$ 为参考组态, 允许电子通过单双激发到达更高轨道, 从而产生包含

$n = 5$ 轨道的新的组态列表, 优化能量最低的 15 个能级以及 $n = 5$ 的所有轨道, 从而得到基组 ($n \leq 5$). 最后, 重复上一步过程, 固定已优化的所有轨道, 并逐步加入 $n = 6$ 及更高的轨道作为赝轨道, 通过逐步扩大基组规模提高计算精度. 随着基组规模增大, 计算结果逐渐趋于收敛, 当计算结果达到所需精度时, 即认为获得所需准完备基. 本工作中准完备基的构筑方案如表 1 所列.

表 1 准完备基组的构建

Table 1. Construction of the quasi-complete basis.

	要优化的轨道 ^{a)}	参考组态选取 ^{b)}	优化的能级 ^{c)}
基组($n \leq 2$)	1s2s2p	[1s ² 2s, 1s ² 2p]	[1s ² 2s] _{1/2} , [1s ² 2p] _{1/2, 3/2}
基组($n \leq 3$)	3s3p3d	[1s ² 2s, 1s ² 2p, 1s ² 3s, 1s ² 3p, 1s ² 3d]	[1s ² 2s] _{1/2} , [1s ² 2p] _{1/2, 3/2} , [1s ² 3s] _{1/2} , [1s ² 3p] _{1/2, 3/2} , [1s ² 3d] _{3/2, 5/2}
基组($n \leq 4$)	4s4p4d4f	[1s ² 2s, 1s ² 2p, 1s ² 3s, 1s ² 3p, 1s ² 3d, 1s ² 4s, 1s ² 4p, 1s ² 4d, 1s ² 4f]	[1s ² 2s] _{1/2} , [1s ² 2p] _{1/2, 3/2} , [1s ² 3s] _{1/2} , [1s ² 3p] _{1/2, 3/2} , [1s ² 3d] _{3/2, 5/2} , [1s ² 4s] _{1/2} , [1s ² 4p] _{1/2, 3/2} , [1s ² 4d] _{3/2, 5/2} , [1s ² 4f] _{5/2, 7/2}
基组($n \leq 5$)	5s5p5d5f5g	[1s ² 2s, 1s ² 2p, 1s ² 3s, 1s ² 3p, 1s ² 3d, 1s ² 4s, 1s ² 4p, 1s ² 4d, 1s ² 4f $\rightarrow$ 5s5p5d5f5g] ^{S, D}	同上
基组($n \leq 6$)	6s6p6d6f6g6h	[1s ² 2s, 1s ² 2p, 1s ² 3s, 1s ² 3p, 1s ² 3d, 1s ² 4s, 1s ² 4p, 1s ² 4d, 1s ² 4f $\rightarrow$ 6s6p6d6f6g6h] ^{S, D}	同上
基组($n \leq 7$)	7s7p7d7f7g7h7i	[1s ² 2s, 1s ² 2p, 1s ² 3s, 1s ² 3p, 1s ² 3d, 1s ² 4s, 1s ² 4p, 1s ² 4d, 1s ² 4f $\rightarrow$ 7s7p7d7f7g7h7i] ^{S, D}	同上
基组($n \leq 8$)	8s8p8d8f8g8h8i8k	[1s ² 2s, 1s ² 2p, 1s ² 3s, 1s ² 3p, 1s ² 3d, 1s ² 4s, 1s ² 4p, 1s ² 4d, 1s ² 4f $\rightarrow$ 8s8p8d8f8g8h8i8k] ^{S, D}	同上
基组($n \leq 9$)	9s9p9d9f9g9h9i9k	[1s ² 2s, 1s ² 2p, 1s ² 3s, 1s ² 3p, 1s ² 3d, 1s ² 4s, 1s ² 4p, 1s ² 4d, 1s ² 4f $\rightarrow$ 9s9p9d9f9g9h9i9k] ^{S, D}	同上

注: ^{a)} $n = 1, 2, 3, 4$ 的轨道为光谱轨道, $n \geq 5$ 的轨道为赝轨道; ^{b)}1s²2s, 1s²2p 等为非相对论参考组态, “S”, “D” 分别表示单、双重激发产生组态; ^{c)}MCSCF 计算时优化的能级.

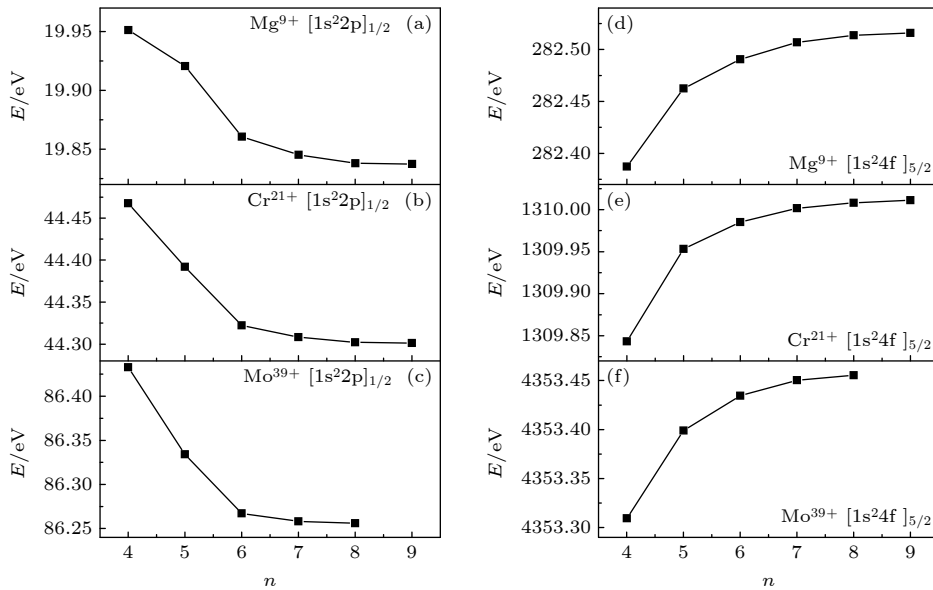
图 1 Mg^{9+} , Cr^{21+} , Mo^{39+} 三种离子两个激发态 $[1s^2 2p]_{1/2}$ 和 $[1s^2 4f]_{5/2}$ 的激发能随着基组扩大的收敛情况

Fig. 1. Convergence of the excitation energy for two excited states $[1s^2 2p]_{1/2}$ and $[1s^2 4f]_{5/2}$ of Mg^{9+} , Cr^{21+} and Mo^{39+} ions with basis set expansion.

入 $n \leq 9, l \leq 7$ 的所有轨道, 即使用基组 ($n \leq 9$) 以达成收敛. 而对于 Mo 之后的元素, 由于电子与核间库仑相互作用较强, 电子间关联效应相对较弱, 故只需加入 $n \leq 8, l \leq 7$ 的轨道, 即使用基组 ($n \leq 8$) 即可达成收敛.

在获得准完备基后, 使用 CI 方法, 计算所需原子态波函数以及对应的本征能量, 在进行 CI 计算的过程中, 加入 Breit 效应、自能修正、真空极化等阶相对论和 QED 修正以及一般和特殊质量修正以进一步提高计算精度. 不同离子激发能及与 NIST^[26] 数据和其他一些理论计算结果^[10–12,15,16] 的比较如表 2—表 4 所列. 这里我们同样选取 Mg^{9+} , Cr^{21+} , Mo^{39+} 三种离子作为代表, 本文所有离子的计算结果及与 NIST^[26] 数据和其他理论结果^[9–12,15,16,25,30] 的比较均以 csv 以及 xlsx 格式在补充材料 (online) 中给出.

如表 2—表 4 所列, 当前计算结果整体与 NIST^[26] 数据的差异在 0.02% 以内, 大部分激发能与 NIST^[26] 数据的差异甚至小于 0.01%. 得益于合理的基组构建方案以及更大的基组规模, 当前计算结果显著优于先前同样使用 MCDF+CI 方法得到的计算结果^[10–12]. 尤其对于 $[1s^2 2p]_{1/2, 3/2}$ 两个最低激发态,

由于电子间关联效应较强, 计算收敛较慢, 因此也获得了更多的关注, 被用不同理论方法进行了大量计算^[3,9–11,15–17,23]. 对于这两个最低激发态, 当前计算结果与 NIST^[26] 数据的相对差异比先前同样使用 MCDF+CI 方法得到的结果小 1—2 个量级, 甚至优于文献^[15] 中使用 MBPT 方法对基态及两个最低激发态进行的高精度计算, 而接近于文献^[16] 中使用 S 矩阵方法对基态及两个最低激发态进行的高精度计算. 考虑到使用 S 矩阵方法进行的计算中, 对 QED 效应进行了更加细致地考虑, 且只需优化基态及两个最低激发态, 而当前工作中需要同时优化基态及 14 个最低激发态, 当前计算结果已经达到了很高的计算精度. 对于少部分激发能与 NIST^[26] 数据差异较大的情况 (例如补充材料 (online) 中 Sc^{18+} 离子 $[1s^2 3s]_{1/2}$ 激发能, 与 NIST^[26] 数据差异达到 0.183%), 此时我们的计算结果与其他理论组的计算结果差异更小, 该结果提示我们需对这些能级进行更为细致的理论和实验研究.

在准备好准完备基和所需的原子态波函数后, 即可利用原子态波函数计算不同能级间的跃迁速率. 本工作计算了所有 15 个能级间共 116 个 E1, E2, M1 跃迁的跃迁速率, 并对计算结果进行相对不确

表 2 Mg^{9+} 激发能 (单位: eV) 计算结果及其与 NIST^[26] 和其他理论计算结果^[11, 15, 16] 的比较

Table 2. Excitation energy (in eV) data for Mg^{9+} and its comparison with NIST^[26] and other theoretical computational results^[11,15,16].

编号	能级	当前计算	NIST ^{a)}	其他理论结果			与 NIST 的相对差异/%			
				MCDF ^{b)}	MBPT ^{c)}	S-Matrix ^{d)}	当前计算	MCDF	MBPT	S-Matrix
1	$[1s^2 2s]_{1/2}$	0	0	0	—	—	—	—	—	—
2	$[1s^2 2p]_{1/2}$	19.8405	19.83922	19.9758	19.8297	19.8382	0.007	0.688	−0.048	−0.005
3	$[1s^2 2p]_{3/2}$	20.3343	20.33202	20.4655	20.3242	20.3315	0.011	0.656	−0.038	−0.003
4	$[1s^2 3s]_{1/2}$	208.6336	208.628	208.5291	—	—	0.003	−0.047	—	—
5	$[1s^2 3p]_{1/2}$	214.0728	214.061	214.0012	—	—	0.006	−0.028	—	—
6	$[1s^2 3p]_{3/2}$	214.2184	214.224	214.1457	—	—	−0.003	−0.037	—	—
7	$[1s^2 3d]_{3/2}$	216.1664	216.17	216.0475	—	—	−0.002	−0.057	—	—
8	$[1s^2 3d]_{5/2}$	216.2115	216.215	216.0921	—	—	−0.002	−0.057	—	—
9	$[1s^2 4s]_{1/2}$	279.2771	279.29	279.1520	—	—	−0.005	−0.049	—	—
10	$[1s^2 4p]_{1/2}$	281.5067	281.463	281.3948	—	—	0.016	−0.024	—	—
11	$[1s^2 4p]_{3/2}$	281.5680	281.463	281.4556	—	—	0.037	−0.003	—	—
12	$[1s^2 4d]_{3/2}$	282.3775	282.359	282.2479	—	—	0.007	−0.039	—	—
13	$[1s^2 4d]_{5/2}$	282.3965	282.40	282.2667	—	—	−0.001	−0.047	—	—
14	$[1s^2 4f]_{5/2}$	282.4407	282.443	282.3021	—	—	−0.001	−0.050	—	—
15	$[1s^2 4f]_{7/2}$	282.4510	282.453	282.3114	—	—	−0.001	−0.050	—	—

注: a) NIST^[26] 数据库收录数据; b) 文献^[11] 使用 MCDF+CI 方法的计算结果; c) 文献^[15] 使用 MBPT 方法的计算结果; d) 文献^[16] 使用 S 矩阵方法的计算结果.

表 3 Cr^{21+} 激发能 (单位: eV) 计算结果及其与 NIST^[26] 和其他理论计算结果^[10,15,16] 的比较Table 3. Excitation energy (in eV) data for Cr^{21+} and its comparison with NIST^[26] and other theoretical computational results^[10,15,16].

编号	能级	当前计算	NIST ^{a)}	其他理论结果			与NIST的相对差异/%			
				MCDF ^{b)}	MBPT ^{c)}	S-Matrix ^{d)}	当前计算	MCDF	MBPT	S-Matrix
1	$[1s^2s]_{1/2}$	0	0	0	—	—	—	—	—	—
2	$[1s^2p]_{1/2}$	44.3259	44.3322	44.4933	44.3417	44.3209	-0.014	0.363	0.021	-0.025
3	$[1s^2p]_{3/2}$	55.6001	55.5958	55.7466	55.6222	55.5918	0.008	0.271	0.047	-0.007
4	$[1s^2s]_{1/2}$	967.4110	967.40	967.2840	—	—	0.001	-0.012	—	—
5	$[1s^2p]_{1/2}$	979.7019	979.68	979.6261	—	—	0.002	-0.005	—	—
6	$[1s^2p]_{3/2}$	983.0371	983.02	982.9546	—	—	0.002	-0.007	—	—
7	$[1s^2d]_{3/2}$	987.7139	987.70	987.5784	—	—	0.001	-0.012	—	—
8	$[1s^2d]_{5/2}$	988.7666	988.75	988.6288	—	—	0.002	-0.012	—	—
9	$[1s^2s]_{1/2}$	1300.2631	1300.12	1300.1223	—	—	0.011	0.000	—	—
10	$[1s^2p]_{1/2}$	1305.3243	1305.28	1305.2034	—	—	0.003	-0.006	—	—
11	$[1s^2p]_{3/2}$	1306.7288	1306.69	1306.6053	—	—	0.003	-0.006	—	—
12	$[1s^2d]_{3/2}$	1308.6689	1308.66	1308.5255	—	—	0.001	-0.010	—	—
13	$[1s^2d]_{5/2}$	1309.1131	1309.10	1308.9686	—	—	0.001	-0.010	—	—
14	$[1s^2f]_{5/2}$	1309.2268	—	1309.0709	—	—	—	—	—	—
15	$[1s^2f]_{7/2}$	1309.4480	—	1309.2923	—	—	—	—	—	—

注: ^{a)} NIST^[26]数据库收录数据; ^{b)} 文献^[10]使用MCDF+CI方法的计算结果; ^{c)} 文献^[15]使用MBPT方法的计算结果; ^{d)} 文献^[16]使用S矩阵方法的计算结果.

表 4 Mo^{39+} 激发能 (单位 eV) 计算结果及其与 NIST^[26] 和其他理论计算结果^[12,15,16] 的比较Table 4. Excitation energy (in eV) data for Mo^{39+} and its comparison with NIST^[26] and other theoretical computational results^[12,15,16].

编号	能级	当前计算	NIST ^{a)}	其他理论结果			与NIST的相对差异/%			
				MCDF ^{b)}	MBPT ^{c)}	S-Matrix ^{d)}	当前计算	MCDF	MBPT	S-Matrix
1	$[1s^2s]_{1/2}$	0	0	—	—	—	—	—	—	—
2	$[1s^2p]_{1/2}$	86.1124	86.108	86.2085	86.1764	86.1041	0.005	0.117	0.079	-0.005
3	$[1s^2p]_{3/2}$	212.0023	211.9956	212.1476	212.1689	211.982	0.003	0.072	0.082	-0.006
4	$[1s^2s]_{1/2}$	3206.9762	3207.1	3206.7966	—	—	-0.004	-0.009	—	—
5	$[1s^2p]_{1/2}$	3230.8215	3230.8	3230.8328	—	—	0.001	0.001	—	—
6	$[1s^2p]_{3/2}$	3268.1729	3268.1	3268.1355	—	—	0.002	0.001	—	—
7	$[1s^2d]_{3/2}$	3276.6290	3276.5	3276.5429	—	—	0.004	0.001	—	—
8	$[1s^2d]_{5/2}$	3288.2659	3288.1	3288.1599	—	—	0.005	0.002	—	—
9	$[1s^2s]_{1/2}$	4314.1977	4313.9	—	—	—	0.007	—	—	—
10	$[1s^2p]_{1/2}$	4323.9937	4323.8	—	—	—	0.004	—	—	—
11	$[1s^2p]_{3/2}$	4339.7142	4339.5	—	—	—	0.005	—	—	—
12	$[1s^2d]_{3/2}$	4343.2364	4343.1	—	—	—	0.003	—	—	—
13	$[1s^2d]_{5/2}$	4348.1528	4348.0	—	—	—	0.004	—	—	—
14	$[1s^2f]_{5/2}$	4348.3516	—	—	—	—	—	—	—	—
15	$[1s^2f]_{7/2}$	4350.7885	—	—	—	—	—	—	—	—

注: ^{a)} NIST^[26]数据库收录数据; ^{b)} 文献^[12]使用MCDF+CI方法的计算结果; ^{c)} 文献^[15]使用MBPT方法的计算结果; ^{d)} 文献^[16]使用S矩阵方法的计算结果.

定度的分析. 对于 E1, E2 跃迁, 计算结果同时包含长度规范和速度规范的计算结果, 在波函数绝对精确的情况下, 两种规范是完全等价的, 而在波函数

无法绝对精确的情况下, 两者之间的差异大小可用于衡量原子态波函数的准确程度以及跃迁速率的计算精确度. 另一方面, 准完备基下的计算结果与

上一级基组的计算结果的差异也可以用于反映当前计算结果的收敛程度, 因此, 本工作同时考虑准完备基下长度规范和速度规范差异, 以及准完备基计算结果与上一级基组计算结果差异两方面因素对相对不确定度的影响, 给出当前相对不确定度的计算方式为

$$U_r = \frac{1}{A_{ij}} \sqrt{(A_{ij}^l - A_{ij}^v)^2 + (A_{ij} - A_{ij}^{\text{pre}})^2}, \quad (5)$$

式中 A_{ij}^l, A_{ij}^v 分别为长度规范和速度规范下的计算结果, A_{ij}^{pre} 为上一级基组的跃迁速率计算结果. 对于 Mo^{39+} 以前的元素, 基组 ($n \leq 9$) 为准完备基, 因此上一级基组即为基组 ($n \leq 8$). 而对于 Mo^{39+} 之后的元素, 由于在基组 ($n \leq 8$) 时计算结果已经趋于收敛, 即此时基组 ($n \leq 8$) 为准完备基, 因此 Mo^{39+} 之后的元素上一级基组为基组 ($n \leq 7$). 不同离子不同跃迁的跃迁速率与相对不确定度间的关系如图 2 所示. 这里同样选取 $\text{Mg}^{9+}, \text{Cr}^{21+}, \text{Mo}^{39+}$ 三种离子作为低离化度、中等离化度和高离化度离子的代表进行展示.

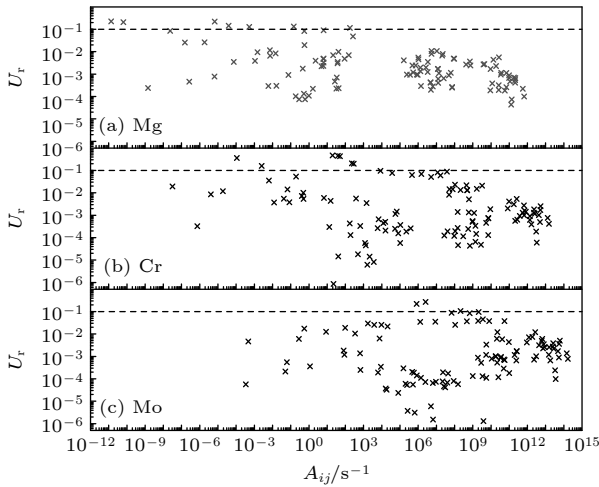


图 2 $\text{Mg}^{9+}, \text{Cr}^{21+}, \text{Mo}^{39+}$ 三种离子能级间 E1, M1, E2 跃迁的跃迁速率与相对不确定度之间的关系

Fig. 2. Relationship between the calculated transition rates (E1, M1, E2) and the relative uncertainties of the results for level transitions in the $\text{Mg}^{9+}, \text{Cr}^{21+}$ and Mo^{39+} ions.

如图 2 所示, 整体上跃迁速率与相对不确定性有一定相关性, 跃迁速率较大的跃迁相对不确定度会更小. 除了少数跃迁速率在 10^3 s^{-1} 以内的弱跃迁外, 大部分跃迁计算结果的相对不确定度都在 10% 以内; 同时对于跃迁速率在 10^8 s^{-1} 以上的强跃迁, 绝大部分的相对不确定度都小于 1%, 这一结果显示当前计算中跃迁速率在 10^8 s^{-1} 以上的强

跃迁计算结果是较为精确的. 而对于本工作中计算的少部分跃迁速率在 10^3 s^{-1} 以内的弱跃迁, 跃迁速率的相对不确定度甚至可能会超过 50%. 相比强跃迁, 弱跃迁对于波函数质量更加敏感, 从而对波函数质量提出了更高的要求, 计算时需要更大的基组规模, 因此弱跃迁的精确计算在当前的原子结构计算中是更为困难的.

表 5—表 7 列出了 $\text{Mg}^{9+}, \text{Cr}^{21+}, \text{Mo}^{39+}$ 三种离子 E1, E2, M1 跃迁的计算结果以及与其他理论计算结果和 NIST^[26] 数据的比较情况. 由于两套规范下计算结果与真实值之间都可能因为波函数精确程度问题存在差异, 而两套规范计算结果的平均值可能更为接近真实值, 故在本工作中取准完备基下同一跃迁长度规范和速度规范计算结果的均值作为理论推荐值在表 5—表 7 中展示, 并与 NIST^[26] 数据及其他理论计算结果^[10–12] 进行比较. 本文所有离子的计算结果及与 NIST^[26] 数据和其他理论结果^[9–12,30] 的比较均以 csv 以及 xlsx 格式在补充材料 (online) 中给出, 在补充材料中, 进一步给出了长度规范和速度规范的计算结果, 以方便读者自行取用.

从表 5—表 7 可发现, 相比于激发能, NIST^[26] 中跃迁速率的数据极为有限, 与 NIST^[26] 数据相比较, 本文大部分计算结果与 NIST^[26] 数据的差异在 5% 以内; 同时除少部分跃迁速率小于 10^3 s^{-1} 的弱跃迁外, 大部分当前计算结果与先前采用 MCDF+CI 方法的计算结果差异在 1% 以内^[10–12]. 对极少部分跃迁速率大于 10^8 s^{-1} 的强跃迁, 本文计算结果与 NIST^[26] 差异较大 (如表 6 所列跃迁编号 9 的 $[1s^2 4p]_{3/2}$ 到基态的 E1 跃迁, 与 NIST^[26] 数据相对差异大于 8%), 但在这些跃迁中, 本工作计算结果又与先前 MCDF+CI 方法的计算结果相符. 当前 NIST^[26] 中的这些数据往往来自一些较早期的文献^[31], 本文计算结果以及与其他理论结果的比较提示需对这些跃迁进行更为细致的理论和实验研究. 当前 NIST^[26] 数据对于 E1 跃迁的跃迁速率数据收录不全, 亦极为缺乏 E2 和 M1 跃迁的数据. 当 $Z \geq 30$ 时, NIST^[26] 往往没有相关跃迁数据, 而先前的理论工作对于高离化态离子 E1, M1 和 E2 跃迁数据的计算和整理亦极为缺乏, 因此本工作所获得的数据可为未来更高核电荷数离子的相关模拟提供精确数据支持.

表 5 Mg^{9+} 跃迁速率 (单位: s^{-1}) 计算结果及其与 NIST^[26] 数据及其他理论计算结果^[11] 的比较
 Table 5. Comparison of transition rates (in s^{-1}) calculations for Mg^{9+} with NIST^[26] data and other Ref. [11].

跃迁编号	上能级编号	下能级编号	跃迁类型	当前计算	NIST ^{a)}	其他理论结果 ^{b)}	与NIST的相对差异/%	
							当前计算	其他理论结果
1	2	1	E1	6.982×10^8	6.95×10^8	7.176×10^8	0.45	3.25
2	5	1	E1	2.149×10^{11}	2.17×10^{11}	2.136×10^{11}	-0.96	-1.55
3	10	1	E1	9.744×10^{10}	9.93×10^{10}	9.700×10^{10}	-1.88	-2.31
4	5	4	E1	8.870×10^7	8.85×10^7	9.023×10^7	0.23	1.95
5	10	4	E1	2.678×10^{10}	2.69×10^{10}	2.672×10^{10}	-0.44	-0.67
6	10	9	E1	2.060×10^7	1.91×10^7	2.090×10^7	7.84	9.40
7	3	1	E1	7.530×10^8	7.51×10^8	7.736×10^8	0.27	3.01
8	6	1	E1	2.135×10^{11}	2.16×10^{11}	2.122×10^{11}	-1.18	-1.76
9	11	1	E1	9.693×10^{10}	9.88×10^{10}	9.651×10^{10}	-1.89	-2.31
10	6	4	E1	9.616×10^7	9.67×10^7	9.771×10^7	-0.56	1.04
11	11	4	E1	2.656×10^{10}	2.68×10^{10}	2.651×10^{10}	-0.89	-1.10
12	11	9	E1	2.238×10^7	1.91×10^7	2.267×10^7	17.17	18.66
13	4	2	E1	3.456×10^{10}	3.39×10^{10}	3.428×10^{10}	1.96	1.12
14	9	2	E1	1.353×10^{10}	1.34×10^{10}	1.340×10^{10}	0.95	0.00
15	9	5	E1	9.319×10^9	9.47×10^9	9.324×10^9	-1.60	-1.54
16	7	2	E1	5.569×10^{11}	5.48×10^{11}	5.580×10^{11}	1.62	1.83
17	12	2	E1	1.826×10^{11}	1.85×10^{11}	1.835×10^{11}	-1.28	-0.79
18	7	5	E1	3.315×10^6	3.38×10^6	3.096×10^6	-1.92	-8.42
19	12	5	E1	5.791×10^{10}	5.83×10^{10}	5.795×10^{10}	-0.66	-0.60
20	12	10	E1	1.018×10^6	1.11×10^6	9.542×10^5	-8.28	-14.04
21	10	7	E1	4.340×10^9	4.26×10^9	4.323×10^9	1.88	1.48
22	11	7	E1	4.278×10^8	4.26×10^8	4.262×10^8	0.41	0.04
23	14	7	E1	1.289×10^{11}	—	1.290×10^{11}	—	—
24	14	12	E1	2.635×10^2	—	1.704×10^2	—	—
25	4	3	E1	6.967×10^{10}	6.81×10^{10}	6.909×10^{10}	2.31	1.45
26	9	3	E1	2.724×10^{10}	2.67×10^{10}	2.694×10^{10}	2.02	0.90
27	9	6	E1	1.878×10^{10}	1.88×10^{10}	1.878×10^{10}	-0.12	-0.11
28	7	3	E1	1.111×10^{11}	1.09×10^{11}	1.113×10^{11}	1.94	2.11
29	12	3	E1	3.637×10^{10}	3.66×10^{10}	3.654×10^{10}	-0.64	-0.16
30	7	6	E1	5.339×10^5	5.31×10^5	4.968×10^5	0.54	-6.44
31	12	6	E1	1.160×10^{10}	1.16×10^{10}	1.160×10^{10}	-0.04	0.00
32	12	11	E1	1.634×10^5	2.21×10^5	1.528×10^5	-26.04	-30.86
33	8	3	E1	6.666×10^{11}	6.55×10^{11}	6.680×10^{11}	1.77	1.98
34	13	3	E1	2.183×10^{11}	2.21×10^{11}	2.194×10^{11}	-1.20	-0.71
35	8	6	E1	3.432×10^6	3.43×10^6	3.198×10^6	0.05	-6.77
36	13	6	E1	6.950×10^{10}	6.96×10^{10}	6.955×10^{10}	-0.14	-0.08
37	13	11	E1	1.052×10^6	1.51×10^6	9.843×10^5	-30.36	-34.81
38	11	8	E1	3.865×10^9	3.82×10^9	3.851×10^9	1.18	0.81
39	14	8	E1	9.201×10^9	—	9.202×10^9	—	—
40	14	13	E1	6.379	—	3.394	—	—
41	15	8	E1	1.380×10^{11}	—	1.381×10^{11}	—	—
42	15	13	E1	1.786×10^2	—	1.035×10^2	—	—

表 5 (续) Mg^{9+} 跃迁速率 (单位: s^{-1}) 计算结果及其与 NIST^[26] 数据及其他理论计算结果^[11] 的比较
Table 5 (continued). Comparison of transition rates (in s^{-1}) calculations for Mg^{9+} with NIST^[26] data and other Ref. [11].

跃迁编号	上能级编号	下能级编号	跃迁类型	当前计算	NIST ^{a)}	其他理论结果 ^{b)}	与NIST的相对差异/%	
							当前计算	其他理论结果
43	7	1	E2	7.367×10^7	—	7.356×10^7	—	—
44	12	1	E2	1.208×10^7	—	1.208×10^7	—	—
45	7	4	E2	36.65	—	36.27	—	—
46	12	4	E2	4.721×10^6	—	4.718×10^6	—	—
47	12	9	E2	6.189	—	6.128	—	—
48	8	1	E2	7.372×10^7	—	7.361×10^7	—	—
49	13	1	E2	1.212×10^7	—	1.212×10^7	—	—
50	8	4	E2	37.81	—	37.40	—	—
51	13	4	E2	4.722×10^6	—	4.720×10^6	—	—
52	13	9	E2	6.386	—	6.321	—	—
53	3	2	E2	1.824×10^{-6}	—	1.755×10^{-6}	—	—
54	6	2	E2	1.263×10^7	—	1.261×10^7	—	—
55	11	2	E2	5.390×10^6	—	5.420×10^6	—	—
56	6	5	E2	1.544×10^{-7}	—	1.468×10^{-7}	—	—
57	11	5	E2	1.329×10^6	—	1.328×10^6	—	—
58	11	10	E2	2.373×10^{-8}	—	2.187×10^{-8}	—	—
59	14	2	E2	4.816×10^7	—	4.180×10^7	—	—
60	14	5	E2	5.013×10^6	—	4.997×10^6	—	—
61	14	10	E2	7.343×10^{-3}	—	6.368×10^{-3}	—	—
62	9	7	E2	4.852×10^5	—	4.852×10^5	—	—
63	12	7	E2	8.342×10^5	—	8.342×10^5	—	—
64	8	7	E2	6.385×10^{-11}	—	6.073×10^{-11}	—	—
65	13	7	E2	2.383×10^5	—	2.383×10^5	—	—
66	13	12	E2	1.368×10^{-11}	—	1.291×10^{-11}	—	—
67	5	3	E2	2.521×10^7	—	2.517×10^7	—	—
68	10	3	E2	1.071×10^7	—	1.076×10^7	—	—
69	10	6	E2	2.655×10^6	—	2.654×10^6	—	—
70	6	3	E2	1.259×10^7	—	1.257×10^7	—	—
71	11	3	E2	5.359×10^6	—	5.384×10^6	—	—
72	11	6	E2	1.326×10^6	—	1.326×10^6	—	—
73	14	3	E2	1.376×10^7	—	1.374×10^7	—	—
74	14	6	E2	1.422×10^6	—	1.418×10^6	—	—
75	14	11	E2	1.491×10^{-3}	—	1.286×10^{-3}	—	—
76	15	3	E2	6.186×10^7	—	6.180×10^7	—	—
77	15	6	E2	6.405×10^6	—	6.384×10^6	—	—
78	15	11	E2	7.114×10^{-3}	—	6.118×10^{-3}	—	—
79	9	8	E2	7.277×10^5	—	7.278×10^5	—	—
80	12	8	E2	3.572×10^5	—	3.572×10^5	—	—
81	13	8	E2	9.526×10^5	—	9.526×10^5	—	—
82	15	14	E2	1.519×10^{-13}	—	1.057×10^{-13}	—	—
83	4	1	M1	31.71	—	29.21	—	—
84	9	1	M1	26.58	—	24.18	—	—

表 5 (续) Mg^{9+} 跃迁速率 (单位: s^{-1}) 计算结果及其与 NIST^[26] 数据及其他理论计算结果^[11] 的比较
 Table 5 (continued). Comparison of transition rates (in s^{-1}) calculations for Mg^{9+} with NIST^[26] data and other Ref. [11].

跃迁编号	上能级编号	下能级编号	跃迁类型	当前计算	NIST ^{a)}	其他理论结果 ^{b)}	与NIST的相对差异/%	
							当前计算	其他理论结果
85	9	4	M1	2.899×10^{-1}	—	2.728×10^{-1}	—	—
86	7	1	M1	1.639	—	1.625	—	—
87	12	1	M1	9.801×10^{-1}	—	9.693×10^{-1}	—	—
88	7	4	M1	6.509×10^{-6}	—	6.565×10^{-6}	—	—
89	12	4	M1	5.915×10^{-3}	—	5.842×10^{-3}	—	—
90	12	9	M1	2.665×10^{-7}	—	2.683×10^{-7}	—	—
91	5	2	M1	6.256	—	5.847	—	—
92	10	2	M1	4.903	—	4.585	—	—
93	10	5	M1	7.465×10^{-2}	—	7.429×10^{-2}	—	—
94	3	2	M1	5.674×10^{-1}	—	5.534×10^{-1}	—	—
95	6	2	M1	41.41	—	39.89	—	—
96	11	2	M1	21.22	—	20.35	—	—
97	6	5	M1	1.456×10^{-2}	—	1.421×10^{-2}	—	—
98	11	5	M1	2.307	—	2.258	—	—
99	11	10	M1	1.084×10^{-3}	—	1.060×10^{-3}	—	—
100	9	7	M1	7.338×10^{-5}	—	8.191×10^{-5}	—	—
101	12	7	M1	1.849×10^{-1}	—	1.841×10^{-1}	—	—
102	8	7	M1	5.203×10^{-4}	—	5.012×10^{-4}	—	—
103	13	7	M1	1.458×10^{-1}	—	1.410×10^{-1}	—	—
104	13	12	M1	3.887×10^{-5}	—	3.748×10^{-5}	—	—
105	5	3	M1	1.550×10^2	—	1.543×10^2	—	—
106	10	3	M1	90.07	—	89.89	—	—
107	10	6	M1	6.361	—	6.287	—	—
108	6	3	M1	42.40	—	43.34	—	—
109	11	3	M1	33.34	—	34.06	—	—
110	11	6	M1	5.226×10^{-1}	—	5.291×10^{-1}	—	—
111	14	3	M1	4.582×10^{-1}	—	4.541×10^{-1}	—	—
112	14	6	M1	1.620×10^{-2}	—	1.619×10^{-2}	—	—
113	14	11	M1	1.431×10^{-9}	—	1.290×10^{-9}	—	—
114	12	8	M1	5.510×10^{-1}	—	5.408×10^{-1}	—	—
115	13	8	M1	6.109×10^{-1}	—	6.116×10^{-1}	—	—
116	15	14	M1	6.636×10^{-6}	—	5.095×10^{-6}	—	—

注: a) NIST^[26]数据库收录数据; b) 文献^[11]使用MCDF+CI方法的计算结果.

表 6 Cr^{21+} 跃迁速率 (单位: s^{-1}) 计算结果及其与 NIST^[26] 数据及其他理论计算结果^[10] 的比较
 Table 6. Comparison of transition rates (in s^{-1}) calculations for Cr^{21+} with NIST^[26] data and other Ref. [10].

跃迁编号	上能级编号	下能级编号	跃迁类型	当前计算	NIST ^{a)}	其他理论结果 ^{b)}	与NIST的相对差异/%	
							当前计算	其他理论结果
1	2	1	E1	1.642×10^9	1.65×10^9	1.660×10^9	-0.51	0.61
2	5	1	E1	5.277×10^{12}	5.28×10^{12}	5.260×10^{12}	-0.06	-0.38
3	10	1	E1	2.325×10^{12}	2.5×10^{12}	2.319×10^{12}	-7.00	-7.24
4	5	4	E1	2.142×10^8	—	2.160×10^8	—	—
5	10	4	E1	6.891×10^{11}	7.100×10^{11}	6.880×10^{11}	-2.95	-3.10

表 6 (续) Cr^{21+} 跃迁速率 (单位: s^{-1}) 计算结果及其与 NIST^[26] 数据及其他理论计算结果^[10] 的比较
 Table 6 (continued). Comparison of transition rates (in s^{-1}) calculations for Cr^{21+} with NIST^[26] data and other Ref. [10].

跃迁编号	上能级编号	下能级编号	跃迁类型	当前计算	NIST ^{a)}	其他理论结果 ^{b)}	与NIST的相对差异/%	
							当前计算	其他理论结果
6	10	9	E1	5.015×10^7	—	5.060×10^7	—	—
7	3	1	E1	3.270×10^9	3.29×10^9	3.300×10^9	-0.62	0.30
8	6	1	E1	5.129×10^{12}	5.13×10^{12}	5.110×10^{12}	-0.02	-0.39
9	11	1	E1	2.279×10^{12}	2.5×10^{12}	2.270×10^{12}	-8.83	-9.20
10	6	4	E1	4.428×10^8	—	4.450×10^8	—	—
11	11	4	E1	6.661×10^{11}	7.100×10^{11}	6.650×10^{11}	-6.18	-6.34
12	11	9	E1	1.054×10^8	—	1.060×10^8	—	—
13	4	2	E1	6.456×10^{11}	$6. \times 10^{11}$	6.427×10^{11}	7.60	7.12
14	9	2	E1	2.585×10^{11}	—	2.576×10^{11}	—	—
15	9	5	E1	1.800×10^{11}	—	1.801×10^{11}	—	—
16	7	2	E1	1.296×10^{13}	1.29×10^{13}	1.300×10^{13}	0.50	0.78
17	12	2	E1	4.220×10^{12}	4.1×10^{12}	4.230×10^{12}	2.93	3.17
18	7	5	E1	3.793×10^7	—	3.730×10^7	—	—
19	12	5	E1	1.366×10^{12}	1.4×10^{12}	1.370×10^{12}	-2.43	-2.14
20	12	10	E1	1.183×10^7	—	1.160×10^7	—	—
21	10	7	E1	9.770×10^{10}	—	9.759×10^{10}	—	—
22	11	7	E1	9.101×10^9	—	9.090×10^9	—	—
23	14	7	E1	3.027×10^{12}	—	3.030×10^{12}	—	—
24	14	12	E1	3.741×10^4	—	3.590×10^4	—	—
25	4	3	E1	1.350×10^{12}	1.3×10^{12}	1.344×10^{12}	3.88	3.38
26	9	3	E1	5.386×10^{11}	—	5.353×10^{11}	—	—
27	9	6	E1	3.754×10^{11}	—	3.754×10^{11}	—	—
28	7	3	E1	2.562×10^{12}	2.6×10^{12}	2.320×10^{12}	-1.48	-10.77
29	12	3	E1	8.256×10^{11}	7.9×10^{11}	8.030×10^{11}	4.51	1.65
30	7	6	E1	1.502×10^6	—	1.461×10^6	—	—
31	12	6	E1	2.745×10^{11}	2.7×10^{11}	2.745×10^{11}	1.65	1.67
32	12	11	E1	4.591×10^5	—	4.466×10^5	—	—
33	8	3	E1	1.537×10^{13}	1.54×10^{13}	1.540×10^{13}	-0.19	0.00
34	13	3	E1	4.974×10^{12}	4.9×10^{12}	4.990×10^{12}	1.52	1.84
35	8	6	E1	1.662×10^7	—	1.630×10^7	—	—
36	13	6	E1	1.639×10^{12}	1.7×10^{12}	1.640×10^{12}	-3.58	-3.53
37	13	11	E1	5.139×10^6	—	5.010×10^6	—	—
38	11	8	E1	8.356×10^{10}	—	8.349×10^{10}	—	—
39	14	8	E1	2.152×10^{11}	—	2.152×10^{11}	—	—
40	14	13	E1	19.64	—	16.90	—	—
41	15	8	E1	3.231×10^{12}	—	3.230×10^{12}	—	—
42	15	13	E1	8.590×10^3	—	8.040×10^3	—	—
43	7	1	E2	7.117×10^9	—	7.113×10^9	—	—
44	12	1	E2	9.610×10^8	—	9.618×10^8	—	—
45	7	4	E2	2.242×10^2	—	2.224×10^2	—	—
46	12	4	E2	4.891×10^8	—	4.890×10^8	—	—

表 6 (续) Cr^{21+} 跃迁速率 (单位: s^{-1}) 计算结果及其与 NIST^[26] 数据及其他理论计算结果^[10] 的比较
 Table 6 (continued). Comparison of transition rates (in s^{-1}) calculations for Cr^{21+} with NIST^[26] data and other Ref. [10].

跃迁编号	上能级编号	下能级编号	跃迁类型	当前计算	NIST ^{a)}	其他理论结果 ^{b)}	与NIST的相对差异/%	
							当前计算	其他理论结果
47	12	9	E2	39.00	—	38.65	—	—
48	8	1	E2	7.144×10^9	—	7.140×10^9	—	—
49	13	1	E2	9.797×10^8	—	9.806×10^8	—	—
50	8	4	E2	2.902×10^2	—	2.879×10^2	—	—
51	13	4	E2	4.900×10^8	—	4.899×10^8	—	—
52	13	9	E2	50.64	—	50.17	—	—
53	3	2	E2	4.938×10^{-1}	—	4.917×10^{-1}	—	—
54	6	2	E2	1.408×10^9	—	1.408×10^9	—	—
55	11	2	E2	6.093×10^8	—	6.122×10^8	—	—
56	6	5	E2	4.167×10^{-2}	—	4.114×10^{-2}	—	—
57	11	5	E2	1.493×10^8	—	1.493×10^8	—	—
58	11	10	E2	6.296×10^{-3}	—	6.130×10^{-3}	—	—
59	14	2	E2	5.450×10^9	—	5.446×10^9	—	—
60	14	5	E2	5.589×10^8	—	5.585×10^8	—	—
61	14	10	E2	3.995×10^{-1}	—	3.805×10^{-1}	—	—
62	9	7	E2	5.199×10^7	—	5.199×10^7	—	—
63	12	7	E2	9.476×10^7	—	9.476×10^7	—	—
64	8	7	E2	1.884×10^{-5}	—	1.872×10^{-5}	—	—
65	13	7	E2	2.707×10^7	—	2.707×10^7	—	—
66	13	12	E2	4.064×10^{-6}	—	4.010×10^{-6}	—	—
67	5	3	E2	2.795×10^9	—	2.794×10^9	—	—
68	10	3	E2	1.183×10^9	—	1.186×10^9	—	—
69	10	6	E2	2.974×10^8	—	2.973×10^8	—	—
70	6	3	E2	1.390×10^9	—	1.390×10^9	—	—
71	11	3	E2	5.952×10^8	—	5.965×10^8	—	—
72	11	6	E2	1.480×10^8	—	1.480×10^8	—	—
73	14	3	E2	1.555×10^9	—	1.554×10^9	—	—
74	14	6	E2	1.545×10^8	—	1.544×10^8	—	—
75	14	11	E2	1.221×10^{-2}	—	1.142×10^{-2}	—	—
76	15	3	E2	6.974×10^9	—	6.972×10^9	—	—
77	15	6	E2	6.973×10^8	—	6.968×10^8	—	—
78	15	11	E2	8.422×10^{-2}	—	7.921×10^{-2}	—	—
79	9	8	E2	7.807×10^7	—	7.806×10^7	—	—
80	12	8	E2	4.045×10^7	—	4.045×10^7	—	—
81	13	8	E2	1.079×10^8	—	1.078×10^8	—	—
82	15	14	E2	3.185×10^{-8}	—	3.199×10^{-8}	—	—
83	4	1	M1	6.556×10^4	—	6.418×10^4	—	—
84	9	1	M1	5.548×10^4	—	5.416×10^4	—	—
85	9	4	M1	6.576×10^2	—	6.488×10^2	—	—
86	7	1	M1	3.608×10^3	—	3.594×10^3	—	—
87	12	1	M1	2.117×10^3	—	2.106×10^3	—	—
88	7	4	M1	2.540×10^{-3}	—	2.558×10^{-3}	—	—

表 6 (续) Cr^{21+} 跃迁速率 (单位: s^{-1}) 计算结果及其与 NIST^[26] 数据及其他理论计算结果^[10] 的比较
 Table 6 (continued). Comparison of transition rates (in s^{-1}) calculations for Cr^{21+} with NIST^[26] data and other Ref. [10].

跃迁编号	上能级编号	下能级编号	跃迁类型	当前计算	NIST ^{a)}	其他理论结果 ^{b)}	与NIST的相对差异/%	
							当前计算	其他理论结果
89	12	4	M1	15.42	—	15.34	—	—
90	12	9	M1	1.094×10^{-4}	—	1.099×10^{-4}	—	—
91	5	2	M1	1.541×10^4	—	1.484×10^4	—	—
92	10	2	M1	1.210×10^4	—	1.164×10^4	—	—
93	10	5	M1	1.910×10^2	—	1.877×10^2	—	—
94	3	2	M1	6.737×10^3	6.76×10^3	6.699×10^3	-0.33	-0.90
95	6	2	M1	1.044×10^5	—	1.029×10^5	—	—
96	11	2	M1	5.354×10^4	—	5.263×10^4	—	—
97	6	5	M1	1.747×10^2	—	1.737×10^2	—	—
98	11	5	M1	5.859×10^3	—	5.820×10^3	—	—
99	11	10	M1	13.06	—	12.98	—	—
100	9	7	M1	1.938×10^{-1}	—	2.052×10^{-1}	—	—
101	12	7	M1	4.925×10^2	—	4.915×10^2	—	—
102	8	7	M1	6.596	—	6.552	—	—
103	13	7	M1	3.830×10^2	—	3.821×10^2	—	—
104	13	12	M1	4.957×10^{-1}	—	4.921×10^{-1}	—	—
105	5	3	M1	3.847×10^5	—	3.855×10^5	—	—
106	10	3	M1	2.239×10^5	—	2.248×10^5	—	—
107	10	6	M1	1.598×10^4	—	1.595×10^4	—	—
108	6	3	M1	1.033×10^5	—	1.045×10^5	—	—
109	11	3	M1	8.104×10^4	—	8.197×10^4	—	—
110	11	6	M1	1.318×10^3	—	1.325×10^3	—	—
111	14	3	M1	1.198×10^3	—	1.193×10^3	—	—
112	14	6	M1	41.17	—	41.19	—	—
113	14	11	M1	7.411×10^{-7}	—	7.092×10^{-7}	—	—
114	12	8	M1	1.449×10^3	—	1.449×10^3	—	—
115	13	8	M1	1.620×10^3	—	1.622×10^3	—	—
116	15	14	M1	6.561×10^{-2}	—	6.579×10^{-2}	—	—

注: ^{a)} NIST^[26]数据库收录数据; ^{b)}文献[10]使用MCDF+CI方法的计算结果.

表 7 Mo^{39+} 跃迁速率 (单位: s^{-1}) 计算结果及其与其他理论结果^[12] 的比较
 Table 7. Comparison of transition rates (in s^{-1}) calculations for Mo^{39+} with other Ref. [12].

跃迁编号	上能级编号	下能级编号	跃迁类型	当前计算	NIST ^{a)}	其他理论结果 ^{b)}	与NIST的相对差异	
							当前计算	其他理论结果
1	2	1	E1	3.549×10^9	—	3.54×10^9	—	—
2	5	1	E1	6.057×10^{13}	—	6.06×10^{13}	—	—
3	10	1	E1	2.625×10^{13}	—	—	—	—
4	5	4	E1	4.656×10^8	—	—	—	—
5	10	4	E1	8.009×10^{12}	—	—	—	—
6	10	9	E1	1.085×10^8	—	—	—	—
7	3	1	E1	5.448×10^{10}	—	5.48×10^{10}	—	—
8	6	1	E1	5.520×10^{13}	—	5.52×10^{13}	—	—
9	11	1	E1	2.466×10^{13}	—	—	—	—

表 7 (续) Mo³⁹⁺跃迁速率 (单位: s⁻¹) 计算结果及其与其他理论结果^[12] 的比较
 Table 7 (continued). Comparison of transition rates (in s⁻¹) calculations for Mo³⁹⁺ with other Ref. [12].

跃迁编号	上能级编号	下能级编号	跃迁类型	当前计算	NIST ^{a)}	其他理论结果 ^{b)}	与NIST的相对差异	
							当前计算	其他理论结果
10	6	4	E1	7.999×10^9	—	—	—	—
11	11	4	E1	7.165×10^{12}	—	—	—	—
12	11	9	E1	1.949×10^9	—	—	—	—
13	4	2	E1	6.644×10^{12}	—	6.64×10^{12}	—	—
14	9	2	E1	2.681×10^{12}	—	—	—	—
15	9	5	E1	1.867×10^{12}	—	—	—	—
16	7	2	E1	1.442×10^{14}	—	1.44×10^{14}	—	—
17	12	2	E1	4.742×10^{13}	—	—	—	—
18	7	5	E1	2.118×10^9	—	—	—	—
19	12	5	E1	1.493×10^{13}	—	—	—	—
20	12	10	E1	6.753×10^8	—	—	—	—
21	10	7	E1	1.211×10^{12}	—	—	—	—
22	11	7	E1	9.602×10^{10}	—	—	—	—
23	14	7	E1	3.331×10^{13}	—	—	—	—
24	14	12	E1	8.822×10^6	—	—	—	—
25	4	3	E1	1.547×10^{13}	—	1.55×10^{13}	—	—
26	9	3	E1	6.168×10^{12}	—	—	—	—
27	9	6	E1	4.307×10^{12}	—	—	—	—
28	7	3	E1	2.770×10^{13}	—	—	—	—
29	12	3	E1	8.805×10^{12}	—	—	—	—
30	7	6	E1	2.566×10^6	—	—	—	—
31	12	6	E1	3.034×10^{12}	—	—	—	—
32	12	11	E1	8.156×10^5	—	—	—	—
33	8	3	E1	1.663×10^{14}	—	1.66×10^{14}	—	—
34	13	3	E1	5.364×10^{13}	—	—	—	—
35	8	6	E1	2.143×10^8	—	—	—	—
36	13	6	E1	1.794×10^{13}	—	—	—	—
37	13	11	E1	6.846×10^7	—	—	—	—
38	11	8	E1	9.245×10^{11}	—	—	—	—
39	14	8	E1	2.344×10^{12}	—	—	—	—
40	14	13	E1	22.52	—	—	—	—
41	15	8	E1	3.528×10^{13}	—	—	—	—
42	15	13	E1	1.295×10^6	—	—	—	—
43	7	1	E2	2.551×10^{11}	—	—	—	—
44	12	1	E2	3.348×10^{10}	—	—	—	—
45	7	4	E2	9.550×10^3	—	—	—	—
46	12	4	E2	1.786×10^{10}	—	—	—	—
47	12	9	E2	1.729×10^3	—	—	—	—
48	8	1	E2	2.584×10^{11}	—	—	—	—
49	13	1	E2	3.573×10^{10}	—	—	—	—
50	8	4	E2	2.102×10^4	—	—	—	—

表 7 (续) Mo³⁹⁺跃迁速率 (单位: s⁻¹) 计算结果及其与其他理论结果^[12] 的比较
 Table 7 (continued). Comparison of transition rates (in s⁻¹) calculations for Mo³⁹⁺ with other Ref. [12].

跃迁编号	上能级编号	下能级编号	跃迁类型	当前计算	NIST ^{a)}	其他理论结果 ^{b)}	与NIST的相对差异	
							当前计算	其他理论结果
51	13	4	E2	1.797×10^{10}	—	—	—	—
52	13	9	E2	3.821×10^3	—	—	—	—
53	3	2	E2	7.513×10^3	—	—	—	—
54	6	2	E2	5.155×10^{10}	—	—	—	—
55	11	2	E2	2.269×10^{10}	—	—	—	—
56	6	5	E2	6.462×10^2	—	—	—	—
57	11	5	E2	5.488×10^9	—	—	—	—
58	11	10	E2	97.35	—	—	—	—
59	14	2	E2	1.960×10^{11}	—	—	—	—
60	14	5	E2	2.172×10^{10}	—	—	—	—
61	14	10	E2	3.443×10^2	—	—	—	—
62	9	7	E2	1.898×10^9	—	—	—	—
63	12	7	E2	3.444×10^9	—	—	—	—
64	8	7	E2	2.786×10^{-1}	—	—	—	—
65	13	7	E2	9.830×10^8	—	—	—	—
66	13	12	E2	6.059×10^{-2}	—	—	—	—
67	5	3	E2	1.003×10^{11}	—	—	—	—
68	10	3	E2	4.105×10^{10}	—	—	—	—
69	10	6	E2	1.083×10^{10}	—	—	—	—
70	6	3	E2	4.946×10^{10}	—	—	—	—
71	11	3	E2	2.108×10^{10}	—	—	—	—
72	11	6	E2	5.347×10^9	—	—	—	—
73	14	3	E2	5.576×10^{10}	—	—	—	—
74	14	6	E2	5.558×10^9	—	—	—	—
75	14	11	E2	5.488×10^{-1}	—	—	—	—
76	15	3	E2	2.483×10^{11}	—	—	—	—
77	15	6	E2	2.528×10^{10}	—	—	—	—
78	15	11	E2	8.617	—	—	—	—
79	9	8	E2	2.856×10^9	—	—	—	—
80	12	8	E2	1.457×10^9	—	—	—	—
81	13	8	E2	3.883×10^9	—	—	—	—
82	15	14	E2	4.660×10^{-4}	—	—	—	—
83	4	1	M1	2.594×10^7	—	—	—	—
84	9	1	M1	2.189×10^7	—	—	—	—
85	9	4	M1	2.650×10^5	—	—	—	—
86	7	1	M1	1.438×10^6	—	—	—	—
87	12	1	M1	8.373×10^5	—	—	—	—
88	7	4	M1	1.138	—	—	—	—
89	12	4	M1	6.242×10^3	—	—	—	—
90	12	9	M1	5.005×10^{-2}	—	—	—	—
91	5	2	M1	6.440×10^6	—	—	—	—
92	10	2	M1	5.038×10^6	—	—	—	—

表 7 (续) Mo³⁹⁺跃迁速率 (单位: s⁻¹) 计算结果及其与其他理论结果^[12] 的比较
 Table 7 (continued). Comparison of transition rates (in s⁻¹) calculations for Mo³⁹⁺ with other Ref. [12].

跃迁编号	上能级编号	下能级编号	跃迁类型	当前计算	NIST ^{a)}	其他理论结果 ^{b)}	与NIST的相对差异	
							当前计算	其他理论结果
93	10	5	M1	8.012×10^4	—	—	—	—
94	3	2	M1	9.297×10^6	—	—	—	—
95	6	2	M1	4.442×10^7	—	—	—	—
96	11	2	M1	2.269×10^7	—	—	—	—
97	6	5	M1	2.443×10^5	—	—	—	—
98	11	5	M1	2.493×10^6	—	—	—	—
99	11	10	M1	1.825×10^4	—	—	—	—
100	9	7	M1	80.40	—	—	—	—
101	12	7	M1	1.985×10^5	—	—	—	—
102	8	7	M1	8.877×10^3	—	—	—	—
103	13	7	M1	1.564×10^5	—	—	—	—
104	13	12	M1	6.709×10^2	—	—	—	—
105	5	3	M1	1.540×10^8	—	—	—	—
106	10	3	M1	8.971×10^7	—	—	—	—
107	10	6	M1	6.495×10^6	—	—	—	—
108	6	3	M1	3.961×10^7	—	—	—	—
109	11	3	M1	3.100×10^7	—	—	—	—
110	11	6	M1	5.186×10^5	—	—	—	—
111	14	3	M1	4.714×10^5	—	—	—	—
112	14	6	M1	1.633×10^4	—	—	—	—
113	14	11	M1	3.355×10^{-4}	—	—	—	—
114	12	8	M1	5.801×10^5	—	—	—	—
115	13	8	M1	6.412×10^5	—	—	—	—
116	15	14	M1	87.54	—	—	—	—

注: ^{a)} NIST^[26]数据库当前对该元素跃迁速率数据无收录; ^{b)} 文献^[12]使用MCDF+CI方法的计算结果.

4 结 论

本文使用 GRASP2018 程序包, 基于 MCDF 和 CI 方法, 并充分考虑 Breit 效应、自能修正、真空极化等高阶相对论和 QED 修正的影响, 系统计算了类锂等电子序列 $Z = 6-51$ 共 15 种类锂离子的 $1s^2nl$ ($n \leq 4$, $l \leq 3$) 对应的 15 个能级的能量以及这 15 个能级间的所有 116 个 E1, M1, E2 跃迁的跃迁速率, 并将之与 NIST 数据库及先前的一些理论结果进行比较. 对于激发能, 我们的计算结果能够很好地与 NIST 数据及已有的理论计算结果相符, 大部分能级数据与 NIST 数据的差异在 0.02% 以内. 得益于合理的基组构建方案以及更大的基组规模, 当前计算结果显著优于先前同样使用 MCDF+CI 方法得到的计算结果, 尤其对于收

敛较慢的 $[1s^22p]_{1/2, 3/2}$ 两个最低激发态, 当前计算结果与 NIST 数据的相对差异小于先前同样采用 MCDF+CI 方法的计算结果 1—2 个量级, 甚至接近于使用 S 矩阵方法专门针对基态及最低两个激发态进行优化的结果. 而对于跃迁速率, 除少部分跃迁速率小于 10^3 s^{-1} 的弱跃迁外, 我们的计算结果与先前同样采用 MCDF+CI 方法的理论结果相对差异在 1% 以内; 同时对于大部分跃迁本文计算结果与 NIST 数据的相对差异也在 5% 以内. 通过与 NIST 数据以及先前其他理论结果的比较, 研究发现对于少部分激发能以及跃迁速率数据, 本文计算结果与 NIST 存在较大差异, 而与其他理论计算结果相吻合, 这一结果提示需对这些能级以及跃迁进行更为细致的理论和实验研究. 当前对于高离化态类锂离子的能级能量和跃迁速率, 尤其是 E2 和 M1 等非电偶极跃迁的跃迁速率数据仍然十分缺

乏,而这些数据对于未来的等离子体模拟和诊断是必不可少的,本工作所提供的数据可为未来的天体和实验室等离子体的实验诊断和理论模拟提供精确数值支撑.

数据可用性声明

支撑本研究成果的数据集可在科学数据银行 <https://www.doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00154> 和补充材料 (online) 中访问获取.

参考文献

- [1] Hu Z M, Xiong G, He Z C, Yang Z H, Numadate N, Huang C W, Yang J M, Yao K, Wei B R, Zou Y M, Wu C S, Ma Y L, Wu Y, Gao X, Nakamura N 2022 *Phys. Rev. A* **105** L030801
- [2] Wu C S, Xie L Y, Hu Z M, Gao X 2020 *J. Quant. Spectrosc. Ra.* **246** 106912
- [3] Johnson W R, Blundell S A, Sapirstein J 1988 *Phys. Rev. A* **37** 2764
- [4] Doschek G A, Feldman U 2010 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43** 232001
- [5] Fujioka S, Takabe H, Yamamoto N, Salzmann D, Wang F, Nishimura H, Li Y, Dong Q, Wang S, Zhang Y, Rhee Y, Lee Y, Han J, Tanabe M, Fujiwara T, Nakabayashi Y, Zhao G, Zhang J, Mima K 2009 *Nat. Phys.* **5** 821
- [6] Del Zanna G, Mason H E 2018 *Living Rev. Sol. Phys.* **15** 5
- [7] Griem H R 1986 *Principles of Plasma Spectroscopy* (Dordrecht: Springer Netherlands) pp885–910
- [8] Foot C J 2005 *Atomic physics* (New York: Oxford University Press)
- [9] Aggarwal K M, Keenan F P, Heeter R F 2010 *Phys. Scripta* **81** 015303
- [10] Aggarwal K M, Keenan F P 2012 *Atom. Data Nucl. Data* **98** 1003
- [11] Aggarwal K M, Keenan F P 2013 *Atom. Data Nucl. Data* **99** 156
- [12] Khatri I, Goyal A, Aggarwal S, Singh A K, Mohan M 2016 *Radiat. Phys. Chem.* **123** 46
- [13] Liu S Z, Xie L Y, Ding X B, Dong C Z 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 093106 (in Chinese) [刘尚宗, 颜录有, 丁晓彬, 董晨钟 2012 物理学报 **61** 093106]
- [14] Hu M H, Liu B W, Xu E H, Ma Y L, Wu Y 2020 *J. Atomic Mol. Phys.* **37** 819 (in Chinese) [胡木宏, 刘博文, 徐恩慧, 马玉龙, 吴勇 2020 原子与分子物理学报 **37** 819]
- [15] Gu M F 2005 *Atom. Data Nucl. Data* **89** 267
- [16] Sapirstein J, Cheng K T 2011 *Phys. Rev. A* **83** 012504
- [17] Yerokhin V A, Surzhykov A, Müller A 2017 *Phys. Rev. A* **96** 042505
- [18] Ge Z M, Wang Z W, Zhou Y J, He L M, Liu G G 2003 *Chin. Phys. B* **12** 488
- [19] Wang Z W, Zhu X W, Chung K T 1992 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **25** 3915
- [20] Hu M H, Wang Z W, Zeng F, Wang T, Wang J 2011 *Chin. Phys. B* **20** 083101
- [21] Wang Z W, Zhu X W, Chung K T 1992 *Phys. Rev. A* **46** 6914
- [22] Wang Z W, Zhu X W, Chung K T 1993 *Phys. Scripta* **47** 65
- [23] Wang L M, Liu T T, Yang W Q, Yan Z C 2023 *Chin. Phys. B* **32** 033102
- [24] Cai J, Yu W W, Zhang N 2014 *Chin. Phys. Lett.* **31** 093101
- [25] Nahar S N 2002 *Astron. Astrophys.* **389** 716
- [26] NIST Atomic Spectra Database (ver. 5.12), Kramida A, Ralchenko Y, Reader J, NIST ASD Team (2024) <https://physics.nist.gov/asd> [2025-4-11]
- [27] Dylla K G, Grant I P, Johnson C T, Parpia F A, Plummer E P 1989 *Comput. Phys. Commun.* **55** 425
- [28] Froese Fischer C, Gaigalas G, Jönsson P, Bieroń J 2019 *Comput. Phys. Commun.* **237** 184
- [29] Grant I P 2007 *Relativistic Quantum Theory of Atoms and Molecules* (New York: Springer-Verlag)
- [30] Liu B W 2021 *M. S. Thesis* (Dalian: Liaoning Normal University) (in Chinese) [刘博文 2021 硕士学位论文 (大连: 辽宁师范大学)]
- [31] Martin G A, Wiese W L 1976 *J. Phys. Chem. Ref. Data* **5** 537

SPECIAL TOPIC—Atomic, molecular and materials properties data

Excitation energies and radiative transition rates of isoelectronic sequences of Li-like ions with $Z = 6-51$ *ZHAO Jiaxun WU Chensheng[†] SONG Qinghe[‡]

(Department of Physics, Faculty of Science, Kunming University of Science and Technology, Kunming 650500, China)

(Received 8 May 2025; revised manuscript received 14 July 2025)

Abstract

Li-like ions widely exist in astrophysical and laboratory plasmas, and their precise atomic parameters (e.g. excitation energies and transition rates) are very important for plasma diagnostics and spectral analysis. In this work, we employ the GRASP2018 software package, which is widely used in atomic structure calculations, to systematically compute the lowest 15 energy levels and the electric dipole (E1), magnetic dipole (M1), and electric quadrupole (E2) transition rates between them of 17 Li-like ions across the isoelectronic sequence ($Z = 6-51$: C^{3+} , F^{6+} , Mg^{9+} , P^{12+} , Ar^{15+} , Sc^{18+} , Cr^{21+} , Co^{24+} , Zn^{27+} , As^{30+} , Kr^{33+} , Y^{36+} , Mo^{39+} , Rh^{42+} , Cd^{45+} , Sn^{37+} , Sb^{38+}). The calculations are based on the multi-configuration Dirac-Fock (MCDF) and configuration interaction (CI) method combined with high-order relativistic corrections and quantum electrodynamics effects such as Breit interaction, self-energy correction and vacuum polarization. The computational convergence is achieved. The calculated excitation energies and transition rates are compared with the NIST database and previous theoretical results. Due to the reasonable construction and larger scale of baseset, the current computational results show evident improvement compared with the results obtained using the same MCDF+CI method previously. Particularly for the two lowest excited states, $[1s^22p]_{1/2}$ and $[1s^22p]_{3/2}$, which exhibit slower convergence, the relative difference between current results and the NIST data is reduced by one to two orders of magnitude compared with previous MCDF+CI calculations. This accuracy even approaches that achieved by S-matrix methods specifically optimized for the ground state and these two lowest excited states. For transition rates, except for certain weak transitions with rates below 10^3 s^{-1} , the difference between our calculations and previous theoretical results obtained using the MCDF+CI method is still within 1%. Furthermore, our calculations accord with the NIST data within 5% for the majority of transitions. A comparison of NIST data with other previous theoretical results shows evident discrepancies between our calculations and the NIST data for some excitation energies and transition rates. Our results are consistent with other theoretical results for these specific values, indicating that these particular energy levels and transitions need more detailed theoretical and experimental investigation. This work provides highly accurate data for supporting experimental diagnostics and theoretical modeling of astrophysical and laboratory plasmas in future research. The datasets presented in this paper are openly available at <https://www.doi.org/10.57760/sciencedb.j00213.00154>.

Keywords: Li-like ions, atomic structure, multi-configuration Dirac-Fock method, radiative transition rates**PACS:** 31.15.ag, 31.15.am, 32.30.-r**DOI:** 10.7498/aps.74.20250611**CSTR:** 32037.14.aps.74.20250611

* Project supported by the the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 12204057), the Applied Basic Research Program of Yunnan Province, China (Grant No. 202401CF070090), and the National Key Laboratory of Computational Physics.

[†] Corresponding author. E-mail: 20220209@kust.edu.cn

[‡] Corresponding author. E-mail: songqinghe@kust.edu.cn

$Z = 6-51$ 类锂离子等电子序列激发能及辐射跃迁速率

赵嘉勋 武晨晟 宋庆和

Excitation energies and radiative transition rates of isoelectronic sequences of Li-like ions with $Z = 6-51$

ZHAO Jiaxun WU Chensheng SONG Qinghe

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 74, 153102 (2025) DOI: 10.7498/aps.74.20250611

CSTR: 32037.14.aps.74.20250611

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.74.20250611>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

类锂离子体系自旋四重态费米接触项的精密计算

High precision calculations of Fermi contact term for lithium-like ions

物理学报. 2022, 71(20): 203101 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220923>

类铝离子钟跃迁能级的超精细结构常数和朗德 g 因子

Hyperfine interaction constants and Landé g factors of clock states of Al-like ions

物理学报. 2023, 72(22): 223101 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230940>

基于组态相互作用方法对AuB分子低激发态电子结构和光学跃迁性质的研究

Study of electronic structure and optical transition properties of low-lying excited states of AuB molecules based on configuration interaction method

物理学报. 2024, 73(5): 053101 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20231347>

Stark效应诱导的类氢离子 $2s_{1/2}-1s_{1/2}$ 跃迁几率的理论研究

Theoretical investigation on Stark-induced transition probabilities of hydrogen-like ions

物理学报. 2021, 70(17): 173201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210181>

局域热平衡Sn等离子体极紫外辐射不透明度和发射谱的理论研究

Theoretical investigation on extreme ultraviolet radiative opacity and emissivity of Sn plasmas at local-thermodynamic equilibrium

物理学报. 2023, 72(18): 183101 <https://doi.org/10.7498/aps.72.20230455>

高电荷态类硼离子 $^2P_{3/2} - ^2P_{1/2}$ 跃迁的实验和理论研究进展

Experimental and theoretical research progress of $^2P_{1/2} - ^2P_{3/2}$ transitions of highly charged boron-like ions

物理学报. 2024, 73(20): 203102 <https://doi.org/10.7498/aps.73.20241190>