

# 类镧等电子序列 Nd XIII-Sm XV 离子 $n=5$ complex 能级与跃迁谱线研究

丁 凯, 牟致栋\*, 叶世旺

中国矿业大学理学院物理系, 江苏 徐州 221008

**摘 要** 用 HFR 方法对类镧等电子序列 I VI-Sm XV 离子  $5s^2, 5p^2, 5s5d, 5s5p$  组态能级结构进行系统的理论计算。在已有实验研究的基础上, 通过分析各能级值的 HFR 理论计算值与相应实验值之差随着  $Z_c$  沿等电子序列的变化规律, 找出用于最小二乘拟合(LSF)计算的半经验拟合公式, 结合设计的 FORTRAN 程序, 预言出 Nd XIII-Sm XV 离子  $n=5$  complex 中至今还没有实验值的部分能级, 能级的计算结果与已有实验值吻合得很好, 同时给出了  $5s^2-5s5p, 5s5p-5p^2, 5s5p-5s5d$  跃迁谱线波长和跃迁概率。

**关键词** Cd I 等电子序列; Nd XIII-Sm XV 离子; 能级; 跃迁谱线波长; 跃迁概率

**中图分类号:** O562.3 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2011)01-0025-05

## 引 言

Nd XIII, Pm XIV 和 Sm XV 离子属于类镧等电子序列, 基组态为  $4d^{10}5s^2$ 。由于该等电子序列离子电子关联效应和相对论效应并存, 离子能级结构随原子序数的增加其变化规律性十分复杂, 为了准确理解该等电子序列离子的能级结构和光谱规律, 对这些离子进行高分辨率的实验测量和高精度的理论计算十分迫切。

对于类镧等电子序列部分离子组态的跃迁能谱, 科学工作者们已经进行了长期的实验和理论研究。Kaufman 等<sup>[1]</sup>利用激光等离子体光谱实验技术首次观测出 Xe VII-Pr XII 离子部分组态能级值和跃迁谱线, 并通过拟合外推的方法计算出 Nd XIII 离子  $5s^2\ ^1S_0-5s5p\ ^1P_1, 5s5p\ ^3P_2-5p^2\ ^3P_2, 5s5p\ ^3P_2-5s5d\ ^3D_3$  跃迁谱线和 Sm XV 离子  $5s^2\ ^1S_0-5s5p\ ^1P_1$  跃迁谱线。随着束箔光谱实验技术和全息光谱技术的发展, Tauheed 等<sup>[2]</sup>通过实验观察到 I VI 离子  $5p5d$  和  $5p6s$  组态能级值和  $n=5, \Delta=0$  组态 66 条跃迁谱线, 精确度为  $\pm 0.0005$  nm。Gayasov 等<sup>[3]</sup>通过实验得到了 Cs VIII 离子 86 条新的跃迁谱线, 并修正了部分  $n=5$  组态能级值。Churilov 等<sup>[4]</sup>拟合计算出 Ba IX 离子  $n=5$  complex 大部分能级值, 并用激光等离子体实验观测到 88 条新的跃迁谱线, 计算结果与实验值非常吻合。Joshi 等<sup>[5]</sup>通过触发点火激光等离子体实验观察到 Ce XI 离子  $n=5$  组态能级和跃迁谱线, 修正了 Kaufman 等报道的 Ce XI 离子  $5s5d$  组态中的错误, 其波长最大不确定度为  $0.0007$  nm。Churilov 等<sup>[6]</sup>计算出 Xe VII 离子部分组态能级和

跃迁谱线。同年, Ryabtsev 等<sup>[7]</sup>计算出 La X 离子部分能级和 130 条跃迁谱线。Churilov 等<sup>[8]</sup>计算出 Pr XII 离子的 82 条能级和 136 条跃迁谱线, 精确度达到  $0.0005$  nm。Churilov 等<sup>[9]</sup>计算分析了 Nd XIII 离子 84 个组态能级和 134 条跃迁谱线。然而, 对于 Pm XIV 离子, 目前没有任何研究报道。对于 Sm XV 离子, 仅有 Kaufman 对上述谱线的理论预测, 其余大部分谱线都是未知的。因此通过理论计算预测 Cd I 等电子序列 Pm XIV-Sm XV 离子未知的原子结构参数, 不仅对于进一步理解类镧等电子序列离子结构相关参数的变化规律性十分必要, 而且也为天体物理和等离子体物理实验提供重要的理论参考数据。在上述文献所报道的实验研究基础上, 我们运用 HFR 方法计算出类镧等电子序列 I VI-Sm XV 离子  $5s^2, 5p^2, 5s5d, 5s5p$  组态能级, 通过分析  $\Delta E$  沿等电子序列的变化规律, 用拟合外推(或者内插)方法对上述离子各组态能级精细结构进行计算, 预测出 Nd XIII-Sm XV 离子  $n=5$  complex 中至今还没有实验值的部分能级, 并进一步计算了  $5s^2-5s5p, 5s5p-5p^2, 5s5p-5s5d$  跃迁谱线波长和跃迁概率, 计算结果中除了少数组态跃迁谱线需要进一步研究之外, 大部分谱线不确定度在  $0.003$  nm 之内。

## 1 理论方法与计算

### 1.1 多组态相对论 HFR (Hartree-Fock with relativistic corrections) 方法概述

设  $N$  个电子原子体系中电子组态为

收稿日期: 2010-02-12, 修订日期: 2010-05-16

基金项目: 中国矿业大学科技基金项目(ok4522)和中央高校基本科研业务费专项资金项目(2010LKWL07)资助

作者简介: 丁 凯, 1985 年生, 中国矿业大学理学院物理系硕士研究生 e-mail: cumtdick@163.com

\* 通讯联系人 e-mail: muzhidong@126.com

$$(n_1 l_1)^{w_1} (n_2 l_2)^{w_2} \cdots (n_i l_i)^{w_i} \cdots (n_q l_q)^{w_q} \quad (1)$$

$$N = \sum_{i=1}^q w_i \quad (2)$$

对于  $(n_i l_i)$  壳层, 单电子 HF 径向方程为

$$\left[ -\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l_i(l_i+1)}{r^2} + V^i(r) - (w_i - 1)A_i(r) \right] P_i(r) = \epsilon_i P_i(r) + \sum w_j [\delta_{i,l_j} \epsilon_{ij} + B_{ij}(r)] P_j(r) \quad (3)$$

其中

$$A_i(r) = \frac{2l_i+1}{4l_i+1} \sum_{k>0} \begin{pmatrix} l_i & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \int_0^{2\infty} \frac{2r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} P_i^2(r_2) dr_2 \quad (4)$$

$$B_{ij}(r) = \frac{1}{2} \sum_k \begin{pmatrix} l_i & k & l_j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \int_0^{2\infty} \frac{2r_{<}^k}{r_{>}^{k+1}} P_j(r_2) P_i(r_2) dr_2 \quad (5)$$

$A_i(r)$  和  $B_{ij}(r)$  分别与库仑直接积分和交换积分有关,  $V^i(r)$  为 Hartrees 势能函数, 表达式为

$$V^i(r) = -\frac{Z}{r} + \sum_{j=1}^q (w_j - \delta_{ij}) \int_0^{2\infty} \frac{2}{r_{>}} P_j^2(r_2) dr_2 \quad (6)$$

在式(3)中增加两项最主要的相对论修正(达尔文和质速修正)来考虑相对论效应对体系能量的影响, 再通过自洽场方法求解方程(3)获得单电子径向 HFR 波函数。在构造整个原子体系波函数时, 体系波函数在所有可能的组态基矢空间展开, 可以表示如下

$$\Psi = \sum_{\beta J \gamma} y_{\beta J \gamma} |\beta J \gamma\rangle \quad (7)$$

其中  $|\beta J \gamma\rangle$  是组态  $\beta$  的具有同一总角动量  $J$  的第  $\gamma$  个谱项基矢,  $y_{\beta J \gamma}$  是其相应的基矢分量。求和是对各种可能组态的具有同一总角动量  $J$  的所有谱项基矢进行的。体系的能量矩阵元可以咱式(7)表示的波函数之间得到, 表示为

$$h_{ij} = \sum_{ijk} C_{ijk} X_k \quad (8)$$

其中  $X_k$  表示 Slater 径向积分参数, 这些参数包括自旋-轨道相互作用积分  $\zeta$ , 组态相互作用积分  $R^k$ , 库仑直接积分  $F^k$  和库仑交换积分  $G^k$  等。

## 1.2 具体计算过程与分析

运用 Cowan<sup>[10]</sup> 原子结构和光谱计算程序计算出 I VI-Eu XVI 离子  $5s^2$ ,  $5p^2$ ,  $5s5p$ ,  $5s5d$  的组态平均能  $E_{av}$ , 图 1 表示  $E_{av}$  随  $Z_c$  的变化情况, 从组态平均能的计算结果可以看出对于本文涉及的组态平均能  $E_{av}$  从小到大的次序为:  $5s^2$ ,  $5s5p$ ,  $5p^2$ ,  $5s5d$ ,  $5s6d$ , 进一步分析 Cd I 等电子序列中各组态相互作用以及本征矢混合情况, 我们发现上述组态中  $5s^2$  和  $5p^2$  之间,  $5s5p$  和  $5p5d$  之间,  $5p^2$  和  $5s5d$  之间都有不同程度的相互作用, 其中  $5p^2$  和  $5s5d$  之间相互作用最强。依照组态选取规则, 确定了体系的波函数在偶宇称组态  $5s^2$ ,  $5p^2$ ,  $5s5d$ ,  $5s6d$ ,  $5s6s$ ,  $4f5p$ ,  $4f^2$  和奇宇称组态  $5s5p$ ,  $5s6p$ ,  $4f5s$ ,  $4f6s$ ,  $5p5d$ ,  $5p6s$ ,  $5s5f$ ,  $4f5d$  之间展开。在 HFR 方法计算过程中, 优选了 Slater 积分调节因子, 通过多次选择后发现, 当电子的径向积分因子和库伦积分因子全部设为 0.85, 且自旋轨道因子设为 0.99 时, 离子计算值与实验值最为接近。由图 2 可知 I VI-Nd VIII 离子大部分组态实验值  $E_{exp}$  与 HFR 计算结果  $E_{HFR}$  之差  $\Delta E$  随  $Z_c$  沿着等电子序列的变化曲线光滑, 因此我们用广义最小二乘拟合法进行外推计

算, 得到预测离子  $\Delta E$  值, 于是 Nd VIII, Pm XIV, Sm XV 离子能级预测值  $E_{fit}$  即为  $E_{HFR}$  与  $\Delta E$  之和。其中  $\Delta E$  数值大小的差异性反映了理论计算过程中各种效应对能级有着不同程度的影响, 我们把这些影响归纳为相对论效应、电子剩余关联效应、量子电动力学(QED)<sup>[11]</sup> 效应以及 Breit 效应和弱组态累积效应所导致的微扰修正, 这些效应同时会导致 HFR 计算值与外推值的差异性。综上, 根据以往计算经验和我们设计的 FORTRAN 程序, 将这种影响确定为正比与  $(Z_c - s)^K$ , 能级拟合公式即为

$$\Delta E = AZ_c^{-1} + BZ_c^0 + CZ_c^1 + DZ_c^2 + E(Z_c - s)^K \quad (9)$$

其中  $A, B, C, D, E, K$  均为半经验可调拟合参数,  $s$  表示半经验可调屏蔽参数,  $Z_c = Z - N + 1$  ( $Z_c$  表示有效核电荷数,  $Z$  为原子序数,  $N$  为核外电子数),  $(Z_c - s)^K$  正比于各种效应对此序列  $\Delta E$  的影响。为得到最佳的计算结果, 则引入了一个标准偏差  $\delta$  来评判计算结果, 定义为

$$\delta = \sqrt{\frac{\sum (E_{exp} - E_{fit})^2}{N_c(N_c - 1)}} \quad (10)$$

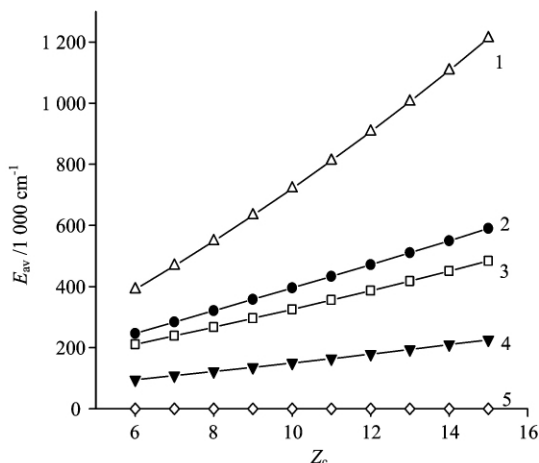


Fig 1  $E_{av}$  versus  $Z_c$

1:  $5s6d$ ; 2:  $5s5d$ ; 3:  $5p^2$ ; 4:  $5s5p$ ; 5:  $5s^2$

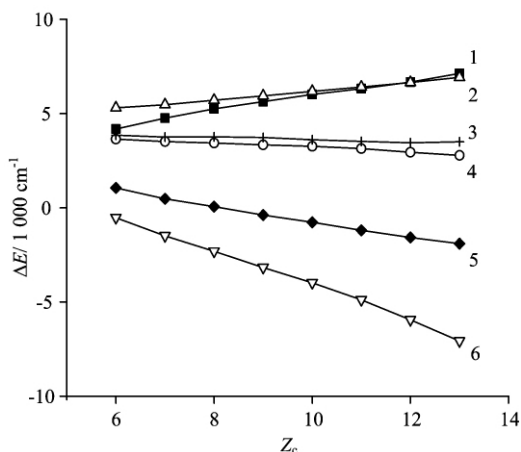


Fig 2  $\Delta E$  versus  $Z_c$

1:  $5s5p^1P_1$ ; 2:  $5s5p^3P_2$ ; 3:  $5p^2^3P_2$ ;  
4:  $5p^2^1D_2$ ; 5:  $5p^2^3P_1$ ; 6:  $5p^2^3P_0$

其中求和是对所有参加拟合的离子能级进行的,  $N_c$  是实际参加拟合的离子能级数,  $E_{\text{exp}}$  表示实验观测值,  $E_{\text{fit}}$  表示本文计算预言值。将  $s$  初始值设定为 5.0, 通过计算得到使最终的标准偏差最小的  $s$  值和其对应的拟合参数  $A, B, C, D, E, K$ , 从而获得最接近实验值的理论计算值。

## 2 结果与讨论

表 1 列出了 Cd I 等电子序列 Nd III-Sm XV 离子  $5s^2, 5p^2, 5s5p, 5s5d$  组态能级值。  $E_{\text{HFR}}$  表示 HFR 方法计算值,  $E_{\text{exp}}$  表示文献[10]的实验值,  $E_{\text{fit}}$  表示本文拟合计算值,  $\Delta E = E_{\text{exp}} - E_{\text{fit}}$ , 单位均为  $1\,000\text{ cm}^{-1}$ 。将本文的计算结果与文献[10]的实验能级值对比可知, 除了  $5p^2$  组态的  $^3P_0$  能级与实验值相差较大之外, 其余计算结果与实验值非常接近。Pm XIV 和 Sm XV 离子各组态能级值目前没有任何的实验和理论研究报道, 因此没有计算其  $\Delta E$  值, 仅报道了本文的拟合计算值, 本文给出的结果是理论预测, 还需进一步的实验验证。

证。对于 Nd III 离子  $5p^2\ ^3P_0$  组态能级, 本文的计算结果为  $361\,636.4\text{ cm}^{-1}$ , 而文献[9]的计算结果为  $362\,100\text{ cm}^{-1}$ , 与本文相差  $463.6\text{ cm}^{-1}$ , 对此本文分析如下: (1) 将 Nd III 离子各组态实验能级值代入标准偏差公式(10)计算, 结果表明  $5p^2\ ^3P_0$  组态的标准偏差(远大于其他组态, 且从文献[9]给出的与  $5p^2$  组态能级跃迁有关的实验谱线( $50\,860.0\text{ nm}$ )分析, 本文计算得到的  $5s5p\ ^3P_1 - 5p^2\ ^3P_0$  的跃迁谱线的波长  $50\,962.7\text{ nm}$  与文献[9]给出的实验结果相差  $0.102\text{ nm}$ , 表明  $5p^2\ ^3P_0$  谱项值还需要今后在实验上作进一步的实验观测。(2) 与  $5p^2\ ^3P_0$  谱项能级有关的实验能谱除了  $5s5p\ ^3P_1 - 5p^2\ ^3P_0$  外, 目前还没有任何与其有关的实验能谱的报道, 本文给出了  $5s5p\ ^1P_1 - 5p^2\ ^3P_0$  谱线波长值的计算结果为  $86\,290.1\text{ nm}$ , 而与  $5s5p\ ^3P_1$  有关的跃迁谱线波长值与已有的实验观测结果进行比较可以看出, 所有与该谱项能级有关的谱线波长值与已有的实验观测结果完全一致, 说明本文关于  $5s5p\ ^3P_1$  的谱项能级的计算是正确的。

Table 1 Energy levels of configurations  $5s^2, 5p^2, 5s5p$  and  $5s5d$  for ions Nd III-Sm XV ( $1\,000\text{ cm}^{-1}$ )

| Designation   | Nd III           |                  |            | Pm XIV           |            | Sm XV            |            |
|---------------|------------------|------------------|------------|------------------|------------|------------------|------------|
|               | $E_{\text{exp}}$ | $E_{\text{fit}}$ | $\Delta E$ | $E_{\text{fit}}$ | $\Delta E$ | $E_{\text{fit}}$ | $\Delta E$ |
| $5s^2\ ^1S_0$ | 0                | 0                | 0          | 0                | 0          | 0                | 0          |
| $5s5p\ ^3P_0$ | 156.417          | 156.348 8        | 0.068 2    | 168.996 6        |            | 190.035 4        |            |
|               | 165.482          | 165.414 5        | 0.067 5    | 178.939 7        |            | 200.966 9        |            |
|               | 204.685          | 204.617 5        | 0.067 5    | 224.276 7        |            | 252.963 4        |            |
| $5p^2\ ^1P_1$ | 245.748          | 245.748 3        | -0.000 3   | 265.464 2        |            | 287.404 5        |            |
|               | 362.100          | 361.636 4        | 0.463 6    | 433.586 7        |            | 622.057 8        |            |
|               | 398.244          | 398.178 6        | 0.065 3    | 430.428 8        |            | 472.043 3        |            |
| $5p^2\ ^3P_2$ | 446.132          | 446.109 4        | 0.022 6    | 484.724 0        |            | 531.573 2        |            |
|               | 402.542          | 402.494 7        | 0.047 3    | 433.211 8        |            | 468.875 4        |            |
|               | 479.469          | 479.462 4        | 0.006 6    | 522.955 0        |            | 575.823 4        |            |
| $5s5d\ ^1D_2$ | 545.245          | 545.274 8        | -0.029 8   | 581.345 5        |            | 599.274 6        |            |
|               | 505.494          | 505.477 4        | 0.016 6    | 547.112 6        |            | 592.805 8        |            |
|               | 508.532          | 508.541 1        | -0.009 1   | 548.504 6        |            | 591.185 8        |            |
| $5s5d\ ^3D_3$ | 514.177          | 514.084 2        | 0.092 8    | 551.312 9        |            | 587.107 0        |            |

表 2 给出了 Nd III-Sm XV 离子  $5s^2 - 5s5p, 5s5p - 5p^2, 5s5p - 5s5d$  组态各能级跃迁谱线波长和跃迁概率值,  $\lambda_{\text{exp}}$  为文献[9]报道的 Nd III 离子跃迁谱线波长实验值,  $\lambda$  为本文的跃迁谱线波长计算值,  $\lambda_k$  为文献[2]所报道的 Sm XV 离子跃迁谱线波长理论计算值, 没有列出实验值的部分是因为当前还没有相关的实验观测报道。从表 2 可知, Nd III 离子组态各能级跃迁谱线的计算结果与文献[9]所给的实验谱线值符合的很好, 除了  $5s^2\ ^1S_0 - 5s5p\ ^3P_1$  与文献[9]报道的数值偏差  $0.024\,7\text{ nm}$ ,  $5s5p\ ^3P_1 - 5p^2\ ^3P_0$  与实验值偏差  $0.102\text{ nm}$  之外, 其他计算值与实验值的不确定度一般都在  $0.003\text{ nm}$  之内。其中  $5s5p\ ^3P_1 - 5s5d\ ^1D_2$  和  $5s5p\ ^3P_2 - 5s5d\ ^1D_2$  谱线没有实验报道, 我们的预测值分别为  $26\,290.9$  和  $29\,312.0\text{ nm}$ 。对于 Pm XIV 离子, 没有任何实验和理论报道, 纯属于外推计算的结果。对于 Sm XV 离子, Kaufman<sup>[1]</sup> 仅计算出  $n = 5$  组态间一条跃迁谱线  $5s^2\ ^1S_0 - 5s5p\ ^1P_1$ , 计算结果为

$34\,750.0\text{ nm}$ , 我们的计算结果为  $34\,794.2\text{ nm}$ , 相差  $0.044\,2\text{ nm}$ , 产生偏差的主要原因是: 首先我们在组态选取过程中最大程度的包含了所有可能的强相互作用组态, 其次在拟合计算过程中充分考虑了各种效应对能级不同程度的影响以及各组态之间的强相互作用, 并把这种影响表示为式(9)中的  $E(Z_c - s)^K$ , 然后再进行拟合计算, 而 Kaufman 的计算则忽略了各种效应的影响。表 2 中 Sm XV 离子除了谱线  $5s^2\ ^1S_0 - 5s5p\ ^1P_1$  外, 其余 11 条谱线也是第一次理论报道。在跃迁谱线计算的基础上, 表 2 给出了相应的跃迁概率计算结果  $gA$  (单位:  $10^{10}\text{ s}^{-1}$ )。  $gA = 0.667\,026\sigma^2 gf(\text{s}^{-1})$ , 其中  $gf$  表示跃迁谱线的振子强度,  $gf = 3.037\,6 \times 10^{-6}\sigma S$ ,  $\sigma$  是谱线波数 (单位:  $\text{cm}^{-1}$ ),  $S$  表示电偶极跃迁的谱线强度 (单位:  $\text{e}^2 a_0^2$ )。从表 2 可见, 跃迁概率随  $Z_c$  增加而有规律的递增, 例如 Nd III-Sm XV 离子  $5s5p\ ^3P_0 - 5p^2\ ^3P_1$  谱线的跃迁概率分别为  $3.029, 3.519, 4.054$  (单位:  $10^{10}\text{ s}^{-1}$ ),  $5s5p\ ^3P_2 - 5s5d\ ^3D_3$

谱线的跃迁概率分别为 30.99, 34.94, 39.07 (单位:  $10^{10} \text{ s}^{-1}$ )。表 2 所有谱线中  $5s5p\ ^3P_2-5s5d\ ^3D_3$  跃迁概率最大, 说明这条谱线为最强线,  $5s5p\ ^1P_1-5p^2\ ^3P_0$  跃迁概率最小, 为最弱线。本文跃迁概率计算结果的性质是比较好的, 特别

是加入了达尔文修正和质速修正来考虑相对论效应对体系能量的影响, 这样在很大程度上提高了计算结果的准确度<sup>[12-15]</sup>。

Table 2 Wavelength, transition probability of  $n=5$  complex for ions Nd XIII-Sm XV

| Transitions   | Nd XIII             |                                  |                               | Pm XIV              |                               | Sm XV               |                                  |                               |
|---------------|---------------------|----------------------------------|-------------------------------|---------------------|-------------------------------|---------------------|----------------------------------|-------------------------------|
|               | $\lambda/\text{nm}$ | $\lambda_{\text{exp}}/\text{nm}$ | $gA/(10^{10} \text{ s}^{-1})$ | $\lambda/\text{nm}$ | $gA/(10^{10} \text{ s}^{-1})$ | $\lambda/\text{nm}$ | $\lambda_{\text{exp}}/\text{nm}$ | $gA/(10^{10} \text{ s}^{-1})$ |
| $5s^2-5s5p$   |                     |                                  |                               |                     |                               |                     |                                  |                               |
| $^1S_0-^3P_1$ | 60.454 2            | 60.429 5                         | 0.170                         | 55.884 7            | 0.217                         | 49.759 4            |                                  | 0.216                         |
| $^1S_0-^1P_1$ | 40.692 0            | 40.692 2                         | 5.914                         | 37.669 8            | 6.803                         | 34.794 2            | 34.750 0                         | 6.330                         |
| $5s5p-5p^2$   |                     |                                  |                               |                     |                               |                     |                                  |                               |
| $^3P_0-^3P_1$ | 41.351 4            | 41.352 2                         | 3.029                         | 38.250 8            | 3.519                         | 35.459 9            |                                  | 4.054                         |
| $^3P_1-^3P_0$ | 50.962 7            | 50.860 0                         | 1.779                         | 39.270 0            | 1.974                         | 23.747 8            |                                  | 2.171                         |
| $^3P_1-^3P_1$ | 42.961 9            | 42.962 4                         | 1.881                         | 39.763 1            | 2.158                         | 36.889 9            |                                  | 2.457                         |
| $^3P_2-^3P_1$ | 51.663 3            | 51.663 5                         | 2.086                         | 48.507 8            | 2.319                         | 45.645 4            |                                  | 2.552                         |
| $^1P_1-^3P_2$ | 49.909 9            | 49.906 0                         | 1.671                         | 45.607 9            | 2.046                         | 40.955 3            |                                  | 2.456                         |
| $^1P_1-^1S_0$ | 42.787 3            | 42.785 9                         | 3.090                         | 38.836 3            | 3.559                         | 34.671 8            |                                  | 4.076                         |
| $^1P_1-^3P_0$ | 86.290 1            |                                  | 0.008                         | 59.480 4            | 0.009                         | 28.043 1            |                                  | 0.009                         |
| $5s5p-5s5d$   |                     |                                  |                               |                     |                               |                     |                                  |                               |
| $^3P_2-^3D_3$ | 32.313 7            | 32.311 2                         | 30.99                         | 30.577 6            | 34.94                         | 29.927 2            |                                  | 39.07                         |
| $^3P_1-^1D_2$ | 26.290 9            |                                  | 3.186                         | 24.850 5            | 3.926                         | 25.106 2            |                                  | 4.746                         |
| $^3P_2-^1D_2$ | 29.312 0            |                                  | 0.012                         | 28.005 8            | 0.013                         | 28.875 8            |                                  | 0.015                         |

## References

- [1] Kaufman V, Sugar J. J. Opt. Soc. Am., 1987, B4: 1919.
- [2] Tauheed A, Joshi Y N, Pinnington E H. Physica Scripta, 1997, 56: 289.
- [3] Gayasov R, Joshi Y N. J. Opt. Soc. Am., 1999, 16(8): 1280.
- [4] Churilov S S, Joshi Y N. Physica Scripta, 2000, 62: 282.
- [5] Joshi Y N, Ryabtsev A N, Churilov S S. J. Opt. Soc. Am. B, 2001, 18(12): 1935.
- [6] Churilov S S, Joshi Y N. Physica Scripta, 2002, 65: 35.
- [7] Ryabtsev A N, Churilov S S, Joshi Y N. Physica Scripta, 2002, 65: 227.
- [8] Churilov S S, Joshi Y N. Physica Scripta, 2003, 68: 128.
- [9] Churilov S S, Joshi Y N, Ryabtsev A N. Physica Scripta, 2005, 71: 43.
- [10] Cowan R D. The Theory of Atomic Structure and Spectra. California: University California Press, 1981.
- [11] Paul H Mokler. Hyperfine Interactions, 1998, 114: 21.
- [12] Alnaser A S, Landers A L, Tanis J A. Physical Review A, 2005, 71: 023201.
- [13] Blundell S A, Johnson W R, Safronova M S. Physical Review Letters A, 2008, 77: 032507.
- [14] YE Shi-wang, MU Zhi-dong, WEI Qi-ying(叶世旺, 牟致栋, 魏琦瑛). J. At. Mol. Phys. (原子与分子物理学报), 2006, 23(3): 566.
- [15] MU Zhi-dong, WEI Qi-ying(牟致栋, 魏琦瑛). Acta Physica Sinica(物理学报), 2005, 54(6): 2614.

# Study on the $n=5$ Complex Transitions for Ions Nd XIII-Sm XV in Cd I Isoelectronic Sequence

DING Kai, MU Zhi-dong\*, YE Shi-wang

Department of Physics, College of Science, China University of Mining and Technology, Xuzhou 221008, China

**Abstract** The energy levels of the  $n=5$  complex configuration  $5s^2$ ,  $5s5p$ ,  $5s5d$  and  $5p^2$  were computed for Cd I isoelectronic sequence ions from I VI to Sm XV by Hartree-Fock with relativistic corrections (HFR) method. By analyzing the variation of difference  $\Delta E$  between energy levels calculated by HFR method and the experimental values with  $Z_c$  along this isoelectronic sequence, the authors put forward a new fitting formula for generalized-least-square-fit (LSF) calculation. Using this formula and the FORTRAN programme designed by us, the energy levels of configurations mentioned above were calculated. The unknown energy levels of configuration  $5s^2$ ,  $5s5p$ ,  $5s5d$  and  $5p^2$  for ions from Nd XIII-Sm XV were predicted by extrapolation (or interpolation). Also, the wavelengths and HFR probabilities of transition  $5s^2-5s5p$ ,  $5s5p-5p^2$  and  $5s5p-5s5d$  were computed. The calculated energy levels and wavelength results are in good agreement with corresponding experimental data reported in the references.

**Keywords** Cd I isoelectronic sequence; Nd XIII-Sm XV; Energy level; Transition wavelength; Transition probability

(Received Feb. 12, 2010; accepted May 16, 2010)

\* Corresponding author

## 《分析化学》(2011 年) 征订启事

邮发代号 12-6

《分析化学》(ISSN 0253-3820, CODEN FHHHDT, CN 22-1125/O6) 是中国科学院和中国化学会共同主办的专业性学术期刊, 主要报道我国分析化学创新性研究成果, 反映国内外分析化学学科前沿和进展。刊物设有特约来稿、研究快报、研究报告、研究简报、评述与进展、仪器装置与实验技术、来稿摘登等栏目。读者对象为从事分析化学研究和测试的科技人员及大专院校师生。本刊也是有关图书、情报等部门必不可少的信息来源。

《分析化学》目前是我国自然科学核心期刊及全国优秀科技期刊, 1999 年荣获首届国家期刊奖, 2000 年获中国科学院优秀期刊特别奖, 2001 年入选“中国期刊方阵”高知名度、高学术水平的“双高”期刊, 2002 年又荣获第二届全国国家期刊奖和第三届中国科协优秀科技期刊奖。论文已被包括美、英、日、俄的国内外近 20 种刊物和检索系统收录。根据中国科技信息研究所历年来发布的“中国科技期刊引证报告”获悉, 2008 年公布的影响因子为 1.2。多年来, 本刊逐年被选入美国权威文摘《化学文摘》(CA) 摘引量最大的 1000 种期刊(简称“CA 千种表”)中, 并居我国入选“CA 千种表”期刊的前列。从 1999 年第 27 卷第一期开始被美国科学信息研究所(Institute for Scientific Information)正式收入《科学引文索引扩大版》(Science Citation Index-Expanded, SCIE, also known as SciSearch), 同时还被收入《Research Alert》和《Chemistry Citation Index》等 ISI 系列。近期公布的 2009 年 SCI 影响因子为 0.79。

本刊为月刊, 每期 160 页(大 16 开), 由科学出版社出版。国内单价 15.00 元, 全年 180.00 元。邮发代号 12-6, 全国各地邮局订阅, 国外代号 M336, 中国国际书店订购, 漏订读者, 可与编辑部联系。广告经营许可证号: 2200004000094, 广告代理: 北京行胜言广告有限公司, 电话: 010-52086537。

编辑部地址: 长春市人民大街 5625 号

邮政编码: 130022

编辑部电话: (0431)85262017/85262018

传真: (0431)85262018

e-mail: fzhx@ciac.jl.cn

网址: <http://www.analchem.cn>