

Theoretical Research on $K\alpha$ X-Rays of Highly Ionized Manganese Ion*

Huili Li, Guohua Jin, li Zhou

School of Computer, Jiangxi University of Traditional Chinese Medicine, Nanchang
Email: huili_scu@126.com

Received: Aug. 2nd, 2013; revised: Aug. 16th, 2013; accepted: Aug. 21st, 2013

Copyright © 2013 Huili Li et al. This is an open access article distributed under the Creative Commons Attribution License, which permits unrestricted use, distribution, and reproduction in any medium, provided the original work is properly cited.

Abstract: By using relativistic configuration interaction (RCI) and multi-configuration Dirac-Fock (MCDF) method, we have calculated the transition energies, transition probabilities, absorption oscillator strengths and line strengths $K\alpha$ X-ray from MnXVII through XXIV. Furthermore, configuration interaction includes Breit interaction and quantum electrodynamics (QED) corrections. Our calculated results are compared with the other available data on He-like and Li-like manganese and are in accord with them. The present wide range data are useful for studying manganese plasma.

Keywords: Highly Ionized; Mn Ion; Spectrum Properties

高离化态 Mn 离子的 $K\alpha$ 谱线性质的理论研究*

李会丽, 金国华, 周 丽

江西中医药大学, 计算机学院, 南昌
Email: huili_scu@126.com

收稿日期: 2013 年 8 月 2 日; 修回日期: 2013 年 8 月 16 日; 录用日期: 2013 年 8 月 21 日

摘要: 基于相对论组态相互作用和多组态 Dirac-Fock (MCDF) 方法, 我们系统地研究和讨论了 $K\alpha$ 谱线类氦到类铍的跃迁能级, 跃迁几率, 吸收振子强度和线强度的性质。组态相互作用计算包括 Breit 相互作用, 量子电动力学修正。我们的理论数据与可得到的实验数据(类氦和类锂)符合得很好, 这些数据为等离子体锰离子的研究提供了有价值的信息。

关键词: 高离化; 锰离子; 谱线性质

1. 引言

原子的核外电子大量剥离形成高离化态原子, 其光谱特征与电离后剩下的核外电子的行为有关, 是现代原子物理学研究的热点之一, 我们知道 $K\alpha$ 射线的能级和跃迁几率在天体物理的分光镜应用, 溶解等离子体和 x 射线激光方面起着很重要的作用^[1-5]。K 壳发射的光谱可以比较可靠的用来诊断发生在宇宙空间

*基金项目: 国家自然科学基金项目(11147156, 11264019); 江西省教育厅科学技术研究项目(12532)。

的电离区, 并且识别比较年轻的超星系残迹。锰元素不仅是比较丰富的元素而且是恒星和气态星云演变扮演重要的角色, 所以锰元素是研究 Kx-射线重要的元素。到目前为止, 尚无对高离化锰的 $K\alpha$ 射线光谱的系统完整的研究, 特别是从类 He 锰到类 F 锰。所以详细研究这些射线的性质是很有必要的。

2. 理论方法

多组态 Dirac-Fock 方法扩展的优化版本(EOL)是

用来计算跃迁的, 该方法的理论基础很多研究者^[6-11]已经讨论过, 在这我们简单介绍一下:

在 Dirac-Fock 方法中, 一定 J 和宇称的组态函数 $\varphi(\Gamma J^P)$ 是 Dirac 轨道的行列式的线性组合而成的。这些组态函数(CSF)的线性组合是用来构建相同的 J 和宇称的原子态函数(AS)

$$\Psi_i(J^P) = \sum_{\alpha=i}^{n_{csf}} c_{i\alpha} \varphi(\Gamma_{\alpha} J^P) \quad (1)$$

式中 $C_{i\alpha}$ 是态 i 的混合系数, n_{csf} 是包括在原子态函数(ASF)的估计的组态函数(CSF)的数目。构建的原子态函数(ASF)是用来求解 Dirac-Fock 方程, Dirac-Coulomb 自旋哈密顿量可以表示成:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_D(i) + \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{j=i+1}^N \left| \hat{r}_i - \hat{r}_j \right|^{-1} \quad (2)$$

式中第一项是 jj 耦合, 是一体的贡献来自电子动能和与核的相互作用的。第二项是两体 Coulomb 相互作用是电子之间产生的这些贡献主要来自 Breit 相互作用, 真空极化, 自洽场能量, 并且作为一级微扰附加项。对于 Breit 修正和高阶修正项是与已有的文献中的方法一样^[10,12]。

相对论的跃迁几率可以通过 Coulomb 规范和 Babushkin 规范来计算, 一般认为非相对论速度方向上的测量和长度方向上的测量。用这两种类型规范计算的跃迁比率与多组态模型略有不同, 但是这两个规范都与全组态相互作用波函数一致。

基于多组态的 Dirac-Fock 方法的组态相互作用的扩展, 本文系统计算了高离化态 Mn 的 $K\alpha$ 和 $K\beta$ 线的一些性质。有限制的激发空间方法用来构建组态函数(CSF)。这种限制激发空间的方法的思想是只考虑激发空间的电子从占有的轨道激发到空轨道。为了检测计算的收敛轨道也相应地增加, 激发组通常随着轨道层数增加而扩大, 由于具有相同主量子数 n 通常有相似的能量。例如轨道层 $n=3$ 时的一组 $\{1s, 2s, 2p, 3s, 3p, 3d\}$ 和轨道层 $n=4$ 的 $\{1s, 2s, 2p, \dots, 4s, 4p, 4d, 4f\}$ 。比较大的轨道组会导致比较大的计算量, 所以适当的限制也是有必要的。基于上面的计算方法, 激发空间是由主量子数 $n=1\sim 7$ 的所有轨道组成并且只是从 s 到 f 。由于双激发相比单激发比较精确, 在我们的计算中我们只考虑双激发。

优化轨道是用于组态相互作用的计算。为了产生基本轨道的初步预算, Thomas-Fermi 势能也将用在计算中, 层层扩大的优化用于下面的 CI 计算。具体的步骤为: 首先根据组态波函数来优化 $n \leq 3$ 的轨道, 固定 $n \leq 3$ 的轨道来优化 $n=4$ 层的轨道。用同样的方法来优化 $n=5, 6, 7$ 的情况。优化以属于 LS 项的所有精细结构的 $(2J+1)$ 为权重并且促使自洽标准以 10^{-8} 收敛。在次方法中, 用哈密顿矩阵的块结构, 可以同时得到不同角量子 J 和宇称的态。由于 J 和宇称都是好量子数并且基函数是本征态, 以便于基函数阶的重排促使具有相同 J 和宇称的态分成特别的块。得到基函数以后, 通过对角化哈密顿矩阵, 包括 Breit 相互作用, 真空极化和自洽场能量修正, 基于相对论组态相对论组态相互作用的计算来确定 CSF 扩展系数。在 RCI 的计算中, 反复的 Davidson 方法和矩阵表示将用于比较大的扩展。

通过相对论组态相互作用和多组态 Dirac-Fock (MCDF) 方法, 我们系统地计算了 $K\alpha$ 谱线类氦到类氟的跃迁能级, 跃迁几率, 吸收振子强度和线强度的性质。

3. 计算结果与讨论

为了检测我们理论计算的可靠性, 在表 1 中, 我们列出了随着轨道层不断增加的两组跃迁的 MCDF 和 RCI 的长度和速度规范线强度的比较计算。从表中可以看出: 这两种长度和速度规范形式相互符合得很好, 而且随着轨道层数的增加符合度也在不断改善。长度值相对比较稳定, 这是由于长度随着激发空间的扩展变化比较小, 所以在我们的计算中, 我们采用的是长度规范。

为了更进一步地检验我们理论计算的可信度, 在表 2 中, 我们的理论计算值与相应的实验数据作了比较, 我们可以看到类 He 锰和类 Li 锰的 $K\alpha$ 射线的能级和波长与相对应的实验值符合得较好, 并且类 He 锰能级与相应的实验值的不同度小于 0.2%, 类 Li 锰能级与相应的实验值的不同度小于 0.6%。这些理论与实验的比较可以证明我们理论计算的方法是可行的。

基于 MCDF 方法和 RCI 计算, 运用扩展的优化版本(EOL), 我们系统计算了高离化锰类 He 到类 F 的 $K\alpha$ 射线的跃迁能级, 跃迁几率(A_i), 吸收震荡能

Table 1. Selected line strengths obtained from MCDF and RCI model, differences equal $[S_v - S_l] \times 100 / \max\{S_v, S_l\}$

表 1. MCDF 和 RCI 模型选出的线强度。不同度等于 $[S_v - S_l] \times 100 / \max\{S_v, S_l\}$

Transitions (E1)	n	S_v^b	S_l^b	Difference (%)	
1s2p-1s ²	³ P ₁ - ¹ S ₀	3	7.008698	7.061406	0.74
		4	7.102998	7.055935	0.66
		5	7.107359	7.057784	0.69
		6	6.994253	7.037059	0.60
		7	7.028908	7.058254	0.38
¹ P ₁ - ¹ S ₀	3	3	7.859363	7.789074	0.89
		4	7.856540	7.789134	0.85
		5	7.819864	7.877696	0.73
		6	7.742347	7.788778	0.59
		7	7.760444	7.788830	0.36

S_v^b 是 velocity 标准的线强度, S_l^b 是 length 标准的线强度。

Table 2. Energies and wavelengths of K α X-ray for He-like and Li-like manganese
表 2. 类 He 锰和类 Li 锰的 K α 线的能级和波长的比较

Levels	Energy (cm ⁻¹)			
	Present	Ref. ^[13]	Ref. ^[14]	Ref. ^[15]
¹ S ₀	0	0	0	0
³ P ₁	49,607,810	49,607,558	49,607,700	49,500,000
¹ P ₁	49,848,600	49,848,527	49,848,620	49,800,000
² S _{1/2}	0	0	0	0
(¹ S) ² P _{1/2}	49,658,250	49,662,000	49,662,000	
(³ S) ² P _{3/2}	49,636,840	49,684,000	49,684,000	
(¹ S) ² P _{3/2}	49,380,240	49,554,000	49,554,000	
⁴ P _{1/2}	49,275,310	49,186,000	49,186,000	
⁴ P _{3/2}	49,207,090	49,216,000	49,213,000	
(³ S) ² P _{1/2}	49,173,380	49,493,000	49,493,000	
Transition	Wavelength(Å)			
	Present	Ref. ^[13]	Ref. ^[14]	Ref. ^[15]
1s2p-1s ²				
³ P ₁ - ¹ S ₀	2.0158116	2.015820	2.015800	2.020000
¹ P ₁ - ¹ S ₀	2.0060743	2.006080	2.006200	2.010000
1s2s2p-1s ² 2s				
(¹ S) ² P _{1/2} - ² S _{1/2}	2.0137640	2.013600	2.013600	
(³ S) ² P _{3/2} - ² S _{1/2}	2.0146326	2.013600	2.013600	
(¹ S) ² P _{3/2} - ² S _{1/2}	2.0251015	2.012700	2.012700	
⁴ P _{1/2} - ² S _{1/2}	2.0294139	2.033100	2.033100	
⁴ P _{3/2} - ² S _{1/2}	2.0322274	2.031800	2.032000	
(¹ S) ² P _{1/2} - ² S _{1/2}	2.0336206	2.020500	2.020500	

Table 3. Present results of transition energies in au, transition probabilities (A_i) in s^{-1} , absorption oscillator strengths (f_i) in length gauge, the line strengths (S) and the ratios of length to velocity rates (A_i/A_v) for K α X-ray from He-like to F-like manganese

表 3. 高离化态类 He Mn 到类 F Mn 的 K α 线的跃迁能级(au), 跃迁几率 A_i 以 s^{-1} 为单位, 长度与速度的比率(A_i/A_v), 吸收振子强度 f_i (长度规范)和线强度 S (au)

Transition	Energy	A_i	A_i/A_v	f_i	S
1s2p-1s ²					
¹ P ₁ - ¹ S ₀	227.1300	1.1825(15)	1.0019	7.1345(-1)	4.7118(-3)
³ P ₁ - ¹ S ₀	226.0329	9.8063(13)	1.0044	5.9739(-2)	3.9645(-4)
1s2s2p-1s ² 2s					
(¹ S) ² P _{1/2} - ² S _{1/2}	226.2627	1.8933(14)	1.0040	2.3021(-1)	1.5262(-3)
(³ S) ² P _{3/2} - ² S _{1/2}	226.1651	2.4720(14)	1.0039	3.0084(-1)	1.9953(-3)
(¹ S) ² P _{3/2} - ² S _{1/2}	224.9960	5.3832(14)	1.0070	6.6195(-1)	4.4131(-3)
⁴ P _{1/2} - ² S _{1/2}	224.5179	2.1183(14)	1.0076	2.6159(-1)	1.7477(-3)
⁴ P _{3/2} - ² S _{1/2}	224.1711	3.9245(13)	1.0073	4.8614(-2)	3.2529(-4)
(³ S) ² P _{1/2} - ² S _{1/2}	224.0534	1.1148(13)	1.0077	1.3823(-2)	9.2548(-5)
1s2s ² 2p-1s ² 2s ²					
¹ P ₁ - ¹ S ₀	224.5275	1.1079(15)	1.1123	6.8404(-1)	4.5699(-3)
³ P ₁ - ¹ S ₀	223.4706	8.7084(13)	1.1104	5.4275(-2)	3.6431(-4)
1s2s ² 2p ² -1s ² 2s ² 2p					
² S _{1/2} - ² P _{1/2}	224.0145	4.6916(12)	1.0489	5.8196(-3)	3.8969(-5)
² D _{3/2} - ² P _{1/2}	223.5850	1.6037(13)	1.1509	1.9970(-2)	1.3397(-4)
² S _{1/2} - ² P _{3/2}	223.5501	1.0464(14)	1.1144	2.6069(-1)	1.7492(-3)
² D _{3/2} - ² P _{3/2}	223.1206	4.7744(14)	1.1316	1.1940 (0)	8.0272(-3)
² P _{1/2} - ² P _{1/2}	223.0392	4.2616(14)	1.1305	5.3326(-1)	3.5863(-3)
⁴ P _{3/2} - ² P _{1/2}	223.0121	4.9102(14)	1.1348	6.1457(-1)	4.1337(-3)
² D _{5/2} - ² P _{3/2}	222.6955	2.5645(14)	1.1245	6.4379(-1)	4.3364(-3)
² P _{1/2} - ² P _{3/2}	222.5748	5.4973(13)	1.1382	1.3815(-1)	9.3106(-4)
⁴ P _{3/2} - ² P _{3/2}	222.5476	2.7204(13)	1.1381	6.8384(-2)	4.6092(-4)
² P _{3/2} - ² P _{1/2}	222.0115	4.7456(10)	1.2201	5.9856(-5)	1.0416(-7)
⁴ P _{1/2} - ² P _{1/2}	221.8981	1.7330(13)	1.1194	2.1909(-2)	1.4810(-4)
⁴ P _{5/2} - ² P _{3/2}	221.8780	3.0134(13)	1.1220	7.8482(-2)	5.3058(-4)
² P _{3/2} - ² P _{3/2}	221.6912	6.7355(12)	1.1284	1.7062(-2)	1.1544(-4)
⁴ P _{1/2} - ² P _{3/2}	221.4337	3.2325(11)	1.0525	8.2077(-4)	5.5600(-6)
1s2s ² 2p ³ -1s ² 2s ² 2p ²					
¹ P ₁ - ³ P ₀	223.0440	1.5111(09)	0.9128	9.4540(-7)	6.3580(-9)
¹ P ₁ - ³ P ₁	222.7801	1.7235(12)	1.1577	3.2425(-3)	2.1832(-5)
¹ P ₁ - ³ P ₂	222.5996	2.7913(11)	1.2979	8.7666(-4)	5.9075(-6)
³ P ₂ - ³ P ₁	222.3494	6.7020(12)	1.1589	1.2657(-2)	8.5392(-5)

续表

$^3D_1-^3P_0$	222.3215	1.4162(12)	1.2279	8.9180(-4)	6.0170(-6)
$^3P_2-^3P_2$	222.1689	6.3474(08)	9.6450	2.0012(-6)	1.3511(-8)
$^1P_1-^1D_2$	222.0761	1.8817(14)	1.1443	5.9378(-1)	4.0107(-3)
$^3P_0-^3P_1$	221.9812	6.0727(13)	1.2064	1.1507(-1)	7.7760(-4)
$^3P_1-^3P_0$	221.9620	9.2260(13)	1.1465	5.8285(-2)	3.9389(-4)
$^3D_2-^3P_1$	221.9445	1.0418(12)	1.0363	1.9748(-3)	1.3347(-5)
$^3D_1-^3P_2$	221.8772	1.4601(14)	1.1371	4.6156(-1)	3.1204(-3)
$^3D_2-^3P_2$	221.7639	2.5288(14)	1.1313	8.0021(-1)	5.4126(-3)
$^3P_1-^3P_1$	221.6982	3.6029(14)	1.1316	6.8447(-1)	4.6312(-3)
$^3P_2-^1D_2$	221.6454	3.7594(14)	1.1296	1.1909 (0)	8.0596(-3)
$^3S_1-^3P_0$	221.5804	6.3680(14)	1.1264	4.0368(-1)	2.7328(-3)
$^3P_1-^3P_2$	221.5177	1.0360(14)	1.1334	3.2855(-1)	2.2248(-3)
$^1P_1-^1S_0$	221.3863	6.6455(14)	1.1192	4.2201(-1)	2.8594(-3)
$^1D_2-^3P_1$	221.3636	2.8874(14)	1.1230	5.5019(-1)	3.7282(-3)
$^3D_1-^1D_2$	221.3537	3.2156(12)	1.1072	1.0213(-2)	6.9211(-5)
$^3S_1-^3P_1$	221.3166	4.5046(10)	0.7555	8.8572(-5)	5.2801(-7)
$^3D_3-^3P_2$	221.2645	2.0319(14)	1.1196	6.4588(-1)	4.3786(-3)
$^3D_2-^1D_2$	221.2404	8.7115(13)	1.2314	2.7697(-1)	1.8778(-3)
$^1D_2-^3P_2$	221.1830	4.2817(11)	1.2773	1.3620(-3)	9.3270(-6)
$^3S_1-^3P_2$	221.1366	2.2572(13)	1.1296	7.1833(-2)	4.8726(-4)
$^3P_1-^1D_2$	220.9942	1.3619(13)	1.1253	4.3397(-2)	2.9456(-4)
$^3D_3-^1D_2$	220.7410	5.4023(13)	1.1164	1.7253(-1)	1.1724(-3)
$^3D_1-^1S_0$	220.6639	7.2508(13)	1.1204	4.6347(-2)	3.1506(-4)
$^1D_2-^1D_2$	220.6596	1.3188(13)	1.1148	4.2152(-2)	2.8655(-4)
$^3S_1-^1D_2$	220.6126	2.3146(12)	1.1639	7.4011(-3)	5.0322(-5)
$^5S_2-^3P_1$	220.3683	9.0407(12)	1.1281	1.7383(-2)	1.1832(-4)
$^3P_1-^1S_0$	220.3044	2.9498(10)	0.8223	1.8916(-5)	1.2880(-7)
$^5S_2-^3P_2$	220.1877	5.1740(12)	1.1326	1.6607(-2)	1.1314(-4)
$^3D_1-^3P_1$	220.0577	4.6602(12)	1.1358	8.8247(-3)	5.9611(-5)
$^3S_1-^1S_0$	219.9288	5.0622(10)	1.0128	3.2576(-5)	2.2219(-7)
$^5S_2-^1D_2$	219.6642	1.9630(11)	1.1497	6.3311(-4)	4.3233(-6)
$1s2s^22p^4-1s^22s^22p^3$					
$^2S_{1/2}-^4S_{3/2}$	221.9154	5.8209(10)	1.4322	1.4715(-4)	9.9468(-7)
$^2S_{1/2}-^2D_{3/2}$	221.3043	7.4242(11)	1.1947	1.8872(-3)	1.2792(-5)
$^2P_{1/2}-^4S_{3/2}$	221.2553	2.7498(09)	1.1677	6.9932(-6)	4.7411(-8)
$^2P_{3/2}-^4S_{3/2}$	221.2549	2.3860(12)	1.1521	6.0681(-3)	4.1139(-5)
$^2D_{5/2}-^4S_{3/2}$	221.0147	1.1206(12)	1.1799	2.8561(-3)	1.9384(-5)

续表

$^2D_{3/2}-^4S_{3/2}$	220.8815	2.4397(12)	1.1526	6.2256(-3)	4.2278(-5)
$^2S_{1/2}-^2P_{1/2}$	220.7249	1.0081(13)	1.1907	1.2880(-2)	8.7536(-5)
$^2P_{1/2}-^2D_{3/2}$	220.6441	1.3564(14)	1.1634	3.4687(-1)	2.3581(-3)
$^2P_{3/2}-^2D_{3/2}$	220.6438	8.7215(11)	1.1168	2.2303(-3)	1.5162(-5)
$^2P_{3/2}-^2D_{5/2}$	220.5171	2.2853(14)	1.1574	8.7764(-1)	5.9699(-3)
$^2S_{1/2}-^2P_{3/2}$	220.5122	2.0274(14)	1.1544	5.1908(-1)	3.5310(-3)
$^2D_{5/2}-^2D_{3/2}$	220.4035	3.3381(11)	1.0368	8.5551(-4)	5.8224(-6)
$^4P_{1/2}-^4S_{3/2}$	220.3802	8.7864(13)	1.1464	2.2523(-1)	1.5330(-3)
$^4P_{3/2}-^4S_{3/2}$	220.2901	1.8398(14)	1.1449	4.7202(-1)	3.2141(-3)
$^2D_{5/2}-^2D_{5/2}$	220.2769	2.3456(14)	1.1495	9.0277(-1)	6.1476(-3)
$^2D_{3/2}-^2D_{3/2}$	220.2703	3.7414(14)	1.1485	9.6004(-1)	6.5378(-3)
$^2D_{3/2}-^2D_{5/2}$	220.1437	5.0844(13)	1.1616	1.9592(-1)	1.3349(-3)
$^2P_{1/2}-^2P_{1/2}$	220.0647	2.7658(14)	1.1451	3.5551(-1)	2.4232(-3)
$^2P_{3/2}-^2P_{1/2}$	220.0644	2.2434(14)	1.1359	2.8836(-1)	1.9655(-3)
$^4P_{5/2}-^4S_{3/2}$	219.9823	2.4782(14)	1.1438	6.3756(-1)	4.3474(-3)
$^2P_{1/2}-^2P_{3/2}$	219.8520	4.1746(13)	1.1424	1.0752(-1)	7.3364(-4)
$^2P_{3/2}-^2P_{3/2}$	219.8517	1.0008(14)	1.1399	2.5778(-1)	1.7588(-3)
$^4P_{1/2}-^2D_{3/2}$	219.7690	4.9852(11)	1.1144	1.2850(-3)	8.7709(-6)
$^2D_{3/2}-^2P_{1/2}$	219.6910	9.2971(12)	1.1106	1.1991(-2)	8.1873(-5)
$^4P_{3/2}-^2D_{3/2}$	219.6789	5.2837(12)	1.1530	1.3631(-2)	9.3075(-5)
$^2D_{5/2}-^2P_{3/2}$	219.6114	1.6362(14)	1.1327	4.2238(-1)	2.8850(-3)
$^4P_{3/2}-^2D_{5/2}$	219.5523	4.5557(12)	1.1552	1.7649(-2)	1.2058(-4)
$^2D_{3/2}-^2P_{3/2}$	219.4782	2.1890(13)	1.1196	5.6575(-2)	3.8666(-4)
$^4P_{5/2}-^2D_{3/2}$	219.3711	1.1658(13)	1.1447	3.0159(-2)	2.0622(-4)
$^4P_{5/2}-^2D_{5/2}$	219.2445	1.2137(13)	1.1441	4.7154(-2)	3.2262(-4)
$^4P_{1/2}-^2P_{1/2}$	219.1896	9.4793(12)	1.1520	1.2282(-2)	8.4051(-5)
$^4P_{3/2}-^2P_{1/2}$	219.0995	3.7964(11)	1.1089	4.9229(-4)	3.3703(-6)
$^4P_{1/2}-^2P_{3/2}$	218.9779	8.5276(11)	1.1792	2.2140(-3)	1.5166(-5)
$^4P_{3/2}-^2P_{3/2}$	218.8868	1.5703(12)	1.1557	4.0805(-3)	2.7963(-5)
$^4P_{5/2}-^2P_{3/2}$	218.5791	1.0486(11)	1.1989	2.7326(-4)	1.8753(-6)
$1s2s^22p^5-1s^22s^22p^4$					
$^1P_1-^3P_2$	219.7737	3.7560(12)	1.1970	1.2101(-2)	8.2599(-5)
$^1P_1-^3P_0$	219.4539	1.5564(11)	0.9892	1.0058(-4)	6.8754(-7)
$^1P_1-^3P_1$	219.4372	9.8536(12)	1.1694	1.9107(-2)	1.3061(-4)
$^3P_1-^3P_2$	219.1486	1.0095(14)	1.1684	3.2711(-1)	2.2390(-3)
$^1P_1-^1D_2$	219.0845	3.0614(14)	1.1745	9.9260(-1)	6.7961(-3)
$^3P_0-^3P_1$	219.0747	1.1213(14)	1.1647	2.1815(-1)	1.4937(-3)

续表

$^3P_2-^3P_2$	218.9071	2.3180(14)	1.1655	7.5279(-1)	5.1584(-3)
$^3P_1-^3P_0$	218.8288	3.3810(14)	1.1626	2.1975(-1)	1.5063(-3)
$^3P_1-^3P_1$	218.8121	7.4714(13)	1.1637	1.4570(-1)	9.9886(-4)
$^3P_2-^3P_1$	218.5706	1.4256(14)	1.1631	2.7865(-1)	1.1923(-3)
$^3P_1-^1D_2$	218.4594	1.3415(13)	1.1773	4.3746(-2)	3.0037(-4)
$^1P_1-^1S_0$	218.3328	3.4169(14)	1.1475	2.2310(-1)	1.5327(-3)
$^3P_2-^1D_2$	218.2180	2.1691(13)	1.1595	7.0889(-2)	4.8729(-4)
$^3P_1-^1S_0$	217.7077	2.7080(11)	1.1241	1.7782(-4)	1.2252(-6)
$1s^22s^22p^6-1s^22s^22p^5$					
$^2S_{1/2}-^2P_{3/2}$	217.7912	1.6172(14)	1.1866	4.2448(-1)	2.9236(-3)
$^2S_{1/2}-^2P_{1/2}$	217.4005	1.6480(14)	1.1827	2.1705(-1)	1.4976(-3)

量(f_l), 线强度(S)和长度标准与速度标准的比率(A_l / A_v), 相应的理论计算数据分别列表 3。从表中可以看到: 速度对长度的比值(A_l / A_v)都在 1 附近波动, 速度和长度规范几乎相等与速度形式对波函数的外部空间比较敏感和在非相对论限制下两种规范比较接近的理论是一致的。长度规范比较容易探测内部空间而接近与速度规范。我们计算的关于高离化锰的 K α 射线的数据为等离子锰的能级寿命, 电荷贡献和平均电荷提供可靠的科学参考。

4. 小结

基于多组态的 Dirac-Fock 方法的扩展的优化版本 (EOL), 我们系统计算了高离化锰的 K α 和 K β 射线从 MnXVII 到 MnXXIV 的跃迁能级, 跃迁几率, 振子强度和线强度的完整的数据, 我们的理论数据与可得到的实验数据符合得很好, 同时证明了我们计算的大量新数据的可靠性。这些数据为未来的科学应用提供了可靠的参考数据。

参考文献 (References)

[1] V. A. Boiko, S. A. Pikuz, A. Y. Faenov and U. I. Safronova. Spectra of be-like ions with nuclear charge $Z = 22, 34$ from laser-produced plasmas. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 1977, 10(7): 1253.
 [2] P. Jonnard, G. Giorgi and C. Bonnelle. Experimental and theoretical $k\alpha$ x-ray spectra of manganese. *Physical Review A*, 2002, 65(3): 0325071.

[3] I. Martinson. The spectroscopy of highly ionised atoms. *Reports on Progress in Physics*, 1989, 52(2): 157.
 [4] D. C. Robert. The theory of atomic structure and spectra. Oakland, Regents of University of California Press, 1981.
 [5] V. Decaux, P. Beiersdorfer, A. Osterheld, M. Chen and S. M. Kahn. High-resolution measurements of the $k\alpha$ spectra of low-ionization species of iron: A new spectral signature of nonequilibrium ionization conditions in young supernova remnants. *Astrophysical Journal*, 1995, 443: 464-468.
 [6] K. G. Dyall, I. P. Grant, C. T. Johnson, F. A. Parpia and E. P. Plummer. GRASP: A general-purpose relativistic atomic structure program. *Computer Physics Communications*, 1989, 55(3), 425-426.
 [7] F. A. Parpia, C. F. Fisher and I. P. Grant. GRASP92: A package for large-scale relativistic atomic structure calculations. *Computer Physics Communications*, 1996, 94(2-3): 249-271.
 [8] A. Stathopoulos, C. F. Fisher. A Davidson program for finding a few selected extreme eigenpairs of a large, sparse, real, symmetric matrix. *Computer Physics Communications*, 1994, 79(2): 268-290.
 [9] J. Olsen, M. R. Godefroid, P. Jonsson, P. Malmqvist and F. C. Froese. Transition probability calculations for atoms using nonorthogonal orbitals. *Physical Review E*, 1995, 52(4): 4499-4508.
 [10] L. Natarajan. Relativistic configuration interaction calculations on the $k\alpha$ x-ray satellites of argon. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 2003, 36(1): 105.
 [11] A. Natarajan, L. Natarajan. $k\beta$ x-ray satellites of highly ionized iron. *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*, 2004, 37(24): 4789-4801.
 [12] Y. G. Mulye, L. Natarajan. Systematic studies on the inter-combination lines of he-like to O-like argon. *Physica Scripta*, 2004, 69(1): 24.
 [13] T. Shirai, T. Nakagaki, K. Okazaki, J. Sugar and W. L. Wiese. Spectral data and Grotrian diagrams for highly ionized manganese. MnVII through Mn XXV. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 1994, 23(2): 179
 [14] TheNISTatomicsspectracollection. http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/line_from.html
 [15] S. M. Younger, J. R. Fuhr, G. A. Martin and W. L. Wiese. Atomic transition probabilities for vanadium, chromium, and manganese. *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 1978, 7(2): 495.