

# 类氢 $U^{91+}$ 离子的辐射复合及其辐射退激发过程的理论研究\*

王永军<sup>1)</sup> 万建杰<sup>1)</sup> 丁晓彬<sup>1)</sup> 董晨钟<sup>1)</sup> 马新文<sup>2)</sup> 王建国<sup>3)</sup> 吴 勇<sup>3)</sup>

1) 西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070)

2) 中国科学院近代物理研究所, 兰州 730000)

3) 北京应用物理与计算数学研究所计算物理重点实验室, 北京 100088)

(2008 年 5 月 23 日收到, 2008 年 8 月 6 日收到修改稿)

基于多组态 Dirac-Fock 理论方法, 利用 GRASP92 和 RATIP 以及在此基础上最新发展的 RERR06 程序, 对类氢  $U^{91+}(1s)$  离子的辐射复合截面以及辐射退激发过程进行了详细的理论研究. 系统地计算了具有确定能量的连续电子被处于基态的类氢  $U^{91+}(1s)$  离子俘获到  $nl$  ( $1 \leq n \leq 8, 0 \leq l \leq 6$ ) 轨道形成类氢  $U^{90+}(1s nl)$  离子的辐射复合截面, 并研究了这些辐射复合末态退激发谱的相对强度. 研究发现, 类氢  $U^{91+}(1s)$  离子辐射复合到不同轨道的截面随其主量子数的增大而显著减小, 同时, 辐射复合末态的退激发对  $K\alpha$  谱线的相对强度有重要影响.

关键词: 辐射复合, 多组态 Dirac-Fock 理论方法, 辐射退激发

PACC: 3280F, 3230J, 3120B

## 1. 引 言

辐射复合(RR)是高离化态离子与电子碰撞中最重要的过程之一, 它和光电离互为逆过程. 该过程可以描述如下: 一个具有特定能量和角动量的连续电子  $\epsilon l$  与电离度为  $q$  的离子  $A^{q+}$  碰撞, 连续电子被俘获到离子  $A^{q+}$  的某一束缚轨道  $nl$  上, 形成  $A^{(q-1)+}$  离子, 同时放出一个光子. 辐射复合截面的研究在等离子体物理、天体物理和原子物理中对准确模拟各元素不同电离度离子的相对丰度、电离平衡、光谱特性以及平均电离度等都具有非常重要的意义<sup>[1]</sup>. 此外, 高精度的辐射复合截面计算对电子束离子阱(EBIT)也是很重要的, 因为 EBIT 实验一般只能测得相对的截面, 利用高精度的辐射复合截面数据可以对实验结果进行绝对定标<sup>[2]</sup>.

类 He 离子是最简单的多电子体系, 是实验和理论较为关注的对象. 对类 He 等电子系列离子, 尤其对重元素的类 He 离子结构的研究有助于我们理解多体系中的相对论效应、关联效应以及量子电动力学效应<sup>[3]</sup>. 在理论方面, 早在 20 世纪 20 年代,

Kramers<sup>[4]</sup>给出了类 H 离子辐射复合截面的半经典解析计算公式. 1930 年, Stobbe<sup>[5]</sup>根据细致平衡原理提出了在非相对论偶极近似下描述电子被复合到任意一个散射态的辐射复合过程的基本公式; 后来, Sauter<sup>[6]</sup>进一步将非相对论近似扩展到相对论近似. 然而, Sauter 的理论对于中  $Z$  和高  $Z$  原子的处理结果不能令人满意. 因此, 1960 年, Gavrilin<sup>[7]</sup>和 Nagel<sup>[8]</sup>等对其进行了修改, 包括了其他阶的 Born 修正. 到 20 世纪 90 年代初期, Pajek 和 Schuch<sup>[9]</sup>给出了低能极限下裸核俘获自由电子的态选择辐射复合截面解析表达式. 最近几年, 人们又开始应用精确的相对论公式来处理辐射复合过程<sup>[10]</sup>.

实验上, Andersen 等<sup>[11]</sup>于 20 世纪 80 年代末首次直接测得辐射复合速率系数, 其结果与理论计算结果符合很好. 此后, 相继出现了一系列与辐射复合相关的实验报道<sup>[3, 12-19]</sup>. 例如, Knapp 等<sup>[13]</sup>首次观测到高能  $KLL$  双电子复合的同时还观测到双电子复合与辐射复合间明显的干涉效应; Gumberidze 等<sup>[15]</sup>通过观测裸  $U^{92+}$  离子俘获一个电子时发出的 X 射线确定出基态类氢  $U^{91+}$  离子(1s)的  $Lamb$  位移约为  $460.2 \pm 4.6$  eV; Hoffknecht 等<sup>[19]</sup>研究  $Au^{25+}$  离子的辐

\* 国家自然科学基金(批准号: 10434100, 10774122, 10876028) 高等学校博士学科点专项科研基金(批准号: 20070736001) 兰州重离子加速器国家实验室原子核理论中心基金和西北师范大学科技创新工程(批准号: NWN-UKJCGXG-03-21) 资助的课题.

† 通讯联系人, E-mail: dongcz@nwnu.edu.cn

射复合速率增强现象时发现,低能 ( $E_{rel} < 1 \text{ meV}$ ) 条件下的辐射复合速率增强明显地依赖于导向磁场的强度.这些实验为我们进一步理解辐射复合过程提供了可能.

本文利用基于全相对论框架、较为全面地考虑电子关联效应的相对论多组态 Dirac-Fock (MCDF) 方法结合最近开发的 RERR06 程序<sup>[20]</sup>系统地计算了类氢  $U^{91+}$  离子通过以下过程的辐射复合截面;

$$e^- + U^{91+}(1s) \rightarrow U^{90+}(1snl) + h\nu^{RR} \quad (1 \leq n \leq 8, 0 \leq l \leq 6). \quad (1)$$

在此基础上结合程序包 RATIP<sup>[21]</sup>和 GRASP92<sup>[22]</sup>进一步计算了类氢  $U^{90+}(1snl)$  离子的辐射跃迁能和跃迁概率,并利用多步辐射模型研究了类氢  $U^{90+}(1snl)$  离子通过以下过程的辐射退激发级联过程:

$$U^{90+}(1snl) \rightarrow U^{90+}(1sn'l') + h\nu^{RT} \quad (1 \leq n \leq 8, 0 \leq l \leq 6), \quad (2)$$

并与有关的实验结果进行了详细比较.

## 2. 理论计算方法

### 2.1. 波函数及能级的计算

有关 MCDF 理论方法,文献 [22—24] 已经有过详细的描述,这里仅作简要介绍.在该理论方法中,一个核电荷数为  $Z$ 、具有  $N$  个电子的原子或离子体系,其 Dirac-Coulomb 哈密顿量在原子单位下表示为

$$\hat{H}_{DC} = \sum_{i=1}^N \hat{H}_i + \sum_{i < j} |\hat{r}_i - \hat{r}_j|^{-1}, \quad (3)$$

$$\hat{H}_i = c\hat{\alpha} \cdot \hat{p}_i + (\beta - 1)c^2 + V_{nuc}(\hat{r}_i), \quad (4)$$

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.

在中心力场近似下单电子的自旋轨道波函数可表示为

$$\psi_{n\kappa m}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} P_{n\kappa}(r) \chi_{\kappa m}(\theta, \phi) \\ i Q_{n\kappa}(r) \chi_{-\kappa m}(\theta, \phi) \end{bmatrix}, \quad (5)$$

式中  $\kappa$  为 Dirac 量子数,  $P_{n\kappa}(r)$  和  $Q_{n\kappa}(r)$  分别为相对论径向轨道波函数的大、小分量,  $\chi_{\kappa m}(\theta, \phi)$  为自旋球谐函数.

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

$$|\Gamma_r(PJM)\rangle = \sum_p B_p |\Psi_p(PJM)\rangle. \quad (6)$$

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

$$|\alpha(PJM)\rangle = \sum_{r=1}^{n_c} C_r^\alpha |\Gamma_r(PJM)\rangle, \quad (7)$$

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

对角化由原子态波函数(7)式构造的哈密顿矩阵,则可得到原子态的能量和组态混合系数.对于其他的高阶效应,例如 Breit 相互作用<sup>[22,23]</sup>、主要的量子电动力学效应<sup>[22,23]</sup>和原子核的有限体积效应<sup>[24]</sup>, 本文都将作为微扰处理.

### 2.2. 辐射跃迁概率的计算

根据含时微扰理论,单位时间量子体系从激发态  $i$  到末态  $f$  的爱因斯坦自发辐射跃迁概率为<sup>[20]</sup>

$$A_{ij} = \frac{2\pi}{2j_i + 1} \sum_{M_i} \sum_{M_f} |M_{ij}|^2, \quad (8)$$

其中  $j_i$  是激发态  $i$  的总角动量,  $M_{ij}$  是激发态  $i$  到能量较低的末态  $f$  的跃迁矩阵元.  $M_{ij}$  可表示为

$$\begin{aligned} M_{ij} &= \langle \alpha_f(P_f J_f M_f) | O^{(L)} | \alpha_i(P_i J_i M_i) \rangle \\ &= \sum_{r,s} C_r^f C_s^i \langle \Gamma_r(P_f J_f M_f) | \\ &\quad \times O^{(L)} | \Gamma_s(P_s J_s M_s) \rangle, \end{aligned} \quad (9)$$

式中  $O^{(L)}$  是阶数为  $L$  的辐射电磁场张量算符.

当考虑由于发射光子而引起的辐射跃迁初、末态电子密度的重排时,初、末态的轨道波函数将不再严格正交.则(9)式中的矩阵元可进一步表示为

$$\begin{aligned} &\langle \Gamma_r(P_f J_f M_f) | O^{(L)} | \Gamma_s(P_s J_s M_s) \rangle \\ &= \sum_{p,q} \sum_{k,l} \psi_k \| O^{(L)} \| \psi_l D_{pq}^L(kl), \end{aligned} \quad (10)$$

其中,  $D_{pq}^L(kl)$  包含了与辐射跃迁初、末态相联系的两个行列式波函数的系数乘积、角部积分及由轨道弛豫引起的重叠积分,而单电子跃迁矩阵元  $\psi_k \| O^{(L)} \| \psi_l$  是由下式计算:

$$\begin{aligned} \psi_k \| O^{(L)} \| \psi_l &= \left( \frac{(2j_l + 1)\omega}{\pi c} \right)^{1/2} (-1)^{i-1/2} \\ &\quad \times \begin{pmatrix} j_k & L & j_l \\ \frac{1}{2} & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \bar{M}_{kl}^L, \end{aligned} \quad (11)$$

式中  $\bar{M}_{kl}^L$  是 Grant 定义的辐射跃迁径向积分<sup>[24]</sup>.

### 2.3. 辐射复合截面及辐射退激发级联截面的计算

一个处于初能级  $i$  的离子在俘获一个动能为  $\epsilon$

的自由电子的同时释放一个光子而达到未能级的过程中, 辐射复合截面通常表示为

$$\sigma_{if}^{RR} = \frac{g_f}{g_i} \frac{\pi^2 a_0^2 \alpha^3 \omega^2}{\epsilon} \frac{df_{if}}{d\epsilon}. \quad (12)$$

这里,  $a_0$  是 Bohr 半径,  $\alpha$  为精细结构常数,  $\omega$  是出射光子能量,  $\epsilon$  是入射电子的动能,  $g_i$  和  $g_f$  分别是辐射复合初离子态和末离子态能级权重,  $\frac{df_{if}}{d\epsilon}$  为振子强度密度<sup>[25]</sup>, 可将其表示为

$$\frac{df_{if}}{d\epsilon} = \frac{\pi c}{(2L + 1)\omega^2} \left| \alpha_{f'}^{N-1}(P_{f'}J_{f'}) \epsilon \kappa; \alpha_f^N(P_fJ_f) \parallel O^{(L)} \parallel \alpha_i^N(P_iJ_i) \right|^2, \quad (13)$$

其中,  $O^{(L)}$  是辐射电磁场的阶数为  $L$  的张量算符,  $|\alpha_i^N(P_iJ_i)\rangle$  和  $|\alpha_{f'}^{N-1}(P_{f'}J_{f'})\rangle$  分别表示辐射复合初、末离子态波函数,  $|\alpha_{f'}^{N-1}(P_{f'}J_{f'})\rangle, \epsilon \kappa; |\alpha_f^N(P_fJ_f)\rangle$  表示由连续电子态  $|\epsilon \kappa\rangle$  和离子态  $|\alpha_{f'}^{N-1}(P_{f'}J_{f'})\rangle$  耦合而成的末体系波函数. 由于辐射复合与光致电离互为逆过程, 因此本文中我们利用细致平衡原理由光电离截面得到辐射复合截面.

辐射退激发级联可看作是一个两步过程, 第一步是连续电子被类氢  $U^{91+}(1s)$  离子俘获到不同的轨道, 形成类氢  $U^{90+}(1snl)$  离子. 第二步是处于激发态的类氢  $U^{90+}(1snl)$  离子通过辐射光子退激发到较低能级, 它对应的截面由下式给出<sup>[26]</sup>:

$$\sigma_{ij}^{RDC}(\hbar\omega_{jf}^{RT}) = \sigma_{ij}^{RR} B_{jk}^{Rj}(\hbar\omega_{jf}^{RT}), \quad (14)$$

其中,  $B_{jk}^{Rj}(\hbar\omega_{jf}^{RT})$  是从能级  $j$  到能级  $f$  的辐射跃迁分支比

$$B_{jk}^{Rj}(\hbar\omega_{jf}^{RT}) = \frac{A_{jk}^R}{\sum_k A_{jk}^R}. \quad (15)$$

而两步退激发级联的贡献, 可表示为

$$\sigma_{ij}^{2-RDC}(\hbar\omega_{jf}^{RT}) = \sigma_{ij}^{RR} B_{jj}^{2-R}(\hbar\omega_{jf}^{RT}), \quad (16)$$

$$B_{jj}^{2-R}(\hbar\omega_{jf}^{RT}) = B_{jk}^R B_{kf}^R. \quad (17)$$

### 3. 结果和讨论

结合最近在德国 GSI 的重离子存储环上进行的类氢  $U^{91+}$  离子的态选择辐射复合实验<sup>[27]</sup>, 我们系统地计算了在给定电子能量(0.01 eV)情况下,  $U^{91+}(1s)$  离子的辐射复合截面及辐射复合末离子态的辐射退激发级联谱, 并与该实验及其他相关理论结果进行了详细比较.

#### 3.1. 类氢 $U^{91+}$ 离子的辐射复合

在类氢  $U^{91+}(1s)$  离子的辐射复合过程中, 一个连续电子可以被俘获到束缚轨道  $nl$  上, 形成类氢  $U^{90+}(1snl)$  离子. 表 1 给出了一个动能为 0.01 eV 的连续电子被类氢  $U^{91+}$  离子俘获到  $K, L$  直到  $R$  壳层的辐射复合截面及相应发射的光子能量, 其中每个主壳层的第一行给出了复合电子形成相应能级时发射光子的能量, 第二行是辐射复合截面. 由能量守恒定律可知, 辐射复合过程中产生的光子能量为  $\hbar\omega^{RR} = (E_i^{ion} + E_{kin}) - E_f^{ion}$ , 其中  $E_{kin}$  表示连续电子的动能,  $E_i^{ion}$  和  $E_f^{ion}$  分别为初、末离子态的本征能量. 由

表 1 辐射复合截面及光子能量随量子数  $n$  和  $l$  的变化特性(辐射复合截面单位为  $cm^2$ , 光子能量单位为 keV)

主量子数	$(1sns)$	$(1sns)$	$(1snp_{3/2})_1$	$(1snp_{3/2})_2$	$(1snp_{1/2})_1$	$(1snp_{1/2})_2$	$(1snd_{5/2})_2$	$(1snf_{5/2})_2$	$(1sng_{9/2})_4$
	176.212								
$n = 1$	$7.50 \times 10^{-17}$								
	45.236	45.583	39.288	39.389	45.163	45.313			
$n = 2$	$6.32 \times 10^{-18}$	$1.91 \times 10^{-17}$	$1.07 \times 10^{-17}$	$2.00 \times 10^{-17}$	$9.36 \times 10^{-18}$	$2.81 \times 10^{-17}$			
	19.413	19.504	17.634	17.666	19.395	19.433	17.188		
$n = 3$	$1.98 \times 10^{-18}$	$5.97 \times 10^{-18}$	$4.48 \times 10^{-18}$	$8.31 \times 10^{-18}$	$2.91 \times 10^{-18}$	$8.76 \times 10^{-18}$	$6.24 \times 10^{-19}$		
	10.638	10.674	9.907	9.910	10.631	10.646	9.706	9.707	
$n = 4$	$8.73 \times 10^{-19}$	$2.63 \times 10^{-18}$	$2.27 \times 10^{-18}$	$3.80 \times 10^{-18}$	$1.12 \times 10^{-18}$	$3.39 \times 10^{-18}$	$7.69 \times 10^{-19}$	$6.93 \times 10^{-19}$	
	6.686	6.704	6.311	6.318	6.682	6.689	6.213	6.214	6.140
$n = 5$	$4.67 \times 10^{-19}$	$1.41 \times 10^{-18}$	$2.07 \times 10^{-18}$	$3.47 \times 10^{-18}$	$1.04 \times 10^{-18}$	$3.13 \times 10^{-18}$	$3.67 \times 10^{-19}$	$1.09 \times 10^{-18}$	$1.02 \times 10^{-18}$
	4.582	4.592	4.368	4.371	4.580	4.584	4.311	4.311	4.268
$n = 6$	$2.83 \times 10^{-19}$	$8.50 \times 10^{-19}$	$1.15 \times 10^{-18}$	$1.93 \times 10^{-18}$	$4.03 \times 10^{-19}$	$4.03 \times 10^{-19}$	$2.14 \times 10^{-19}$	$7.73 \times 10^{-19}$	$4.86 \times 10^{-19}$
	3.333	3.340	3.199	3.201	3.332	3.334	3.164	3.164	3.137
$n = 7$	$1.86 \times 10^{-19}$	$5.59 \times 10^{-19}$	$5.39 \times 10^{-19}$	$8.99 \times 10^{-19}$	$1.39 \times 10^{-19}$	$4.18 \times 10^{-19}$	$1.49 \times 10^{-19}$	$2.64 \times 10^{-19}$	$2.28 \times 10^{-19}$
	2.533	2.537	2.443	2.445	2.532	2.533	2.149	2.149	2.401
$n = 8$	$1.30 \times 10^{-19}$	$3.92 \times 10^{-19}$	$2.78 \times 10^{-19}$	$4.65 \times 10^{-19}$	$5.88 \times 10^{-20}$	$1.76 \times 10^{-19}$	$1.14 \times 10^{-19}$	$9.27 \times 10^{-20}$	$1.14 \times 10^{-19}$

此可知, 在入射电子能量一定的情况下, 离子复合电子形成不同能级时发射的光子能量反映了辐射复合末离子态的能级结构信息. 由表 1 可以看出, 在同一个主壳层中, 俘获具有相同  $j$  值的电子形成不同能级时, 发射的光子能量相差较小. 例如, 当电子俘获到  $L$  主壳层形成  $(1s2p_{3/2})_2$  态时发出的光子能量在 45.3 keV 附近, 而形成  $(1s2s)_{0,1}$  和  $(1s2p_{1/2})_{0,1}$  态时出射的光子能量在 39.3 keV 附近. 这是由于强相对论效应和自旋轨道相互作用共同导致这种能级结构特征. 另外, 在给定主量子数  $n$  时, 辐射复合截面随角量子数  $l$  的变化并未呈现出明显的规律, 而对于给定  $l_j$  和  $J$  的能级, 辐射复合截面均随主量子数  $n$  的增大而单调减小, 这种变化在  $n$  较大时更具规律性. 这为我们进一步拟合高  $n$  轨道的辐射复合截面提供了可能.

为了对目前计算的辐射复合截面的精度有进一步了解并与已有的结果进行比较, 表 2 具体给出辐射复合到  $K$  和  $L$  壳层的截面比值. 由表 2 可以看出, 我们的计算结果与文献 [27] 中的相对论结果相近, 而两者均与实验结果有较大差异, 相对误差大约为 20%. 文献 [27] 中对这种差异成因的解释是由于计算中未考虑电子关联效应所致. 但在本文中发现, 即使很好包括了俘获末态电子之间的关联效应后仍有较大差异. 因此, 可以断定形成这种差异的主要原因应该不是电子关联效应, 推测它可能是由环境效应造成的. 例如, 由于实验装置中不可避免地应用导向磁场, 这将使离子附近的电子密度增大, 进而增大离子俘获电子的态密度<sup>[28]</sup>, 而这些电子的退激发对  $K$  和  $L$  壳层的贡献不尽相同, 这可能是产生差异的主要原因. 定量考虑上述影响还有待于进一步探讨.

表 2  $K$  壳层和  $L$  壳层的辐射复合截面比及其与实验结果和其他计算结果的比较

	$I_{K-RR}/I_{L_{3/2}-RR}$	$I_{K-RR}/I_{L_{1/2}-RR}$
实验值 <sup>[27]</sup>	$1.31 \pm 0.04 \pm 0.07$	$1.11 \pm 0.03 \pm 0.06$
非相对论计算值 <sup>[27]</sup>	2.79	2.12
相对论计算值 <sup>[27]</sup>	1.62	1.41
本文计算值	1.67	1.34

### 3.2. 类氢 $U^{90+}$ 离子的辐射退激发对 $K\alpha$ 谱线强度的贡献

类氢  $U^{91+}(1s)$  离子俘获一个连续电子后既有可能形成处于基态的类氢  $U^{90+}(1s^2)$  离子, 又有可能形

成各种处于激发态的类氢  $U^{90+}(1snl)$  离子, 这些激发态会不断地通过自发辐射跃迁达到稳定的末态. 已有许多文献对高  $n$  轨道复合电子的情形进行了详细的讨论<sup>[27, 29-31]</sup>. 这些文献都考虑了很高的主量子数上限, 例如  $n = 150$ <sup>[27]</sup>. 这些研究表明, 在高度离化的  $U$  离子辐射复合实验中, 连续电子可以被俘获到极高  $n$  的轨道上, 而这些高  $n$  激发态的退激发可以为低能级的布居提供“延迟贡献”, 从而会对低能级的退激发谱产生极强的影响. 此外, 根据本文的计算还发现, 辐射复合形成的不同能级系列(具有相同  $l_j$  和  $J$  的能级)中, 除个别低  $n$  时的特例(如  $(1s3d_{5/2})_2$  和  $(1s4f_{5/2})_2$  等)之外, 辐射复合截面均随主量子数  $n$  的增大而单调减小. 同时, 我们还发现相应的辐射跃迁分支比随着  $n$  的变化也具有好的单调连续性. 因此可以按通道(具有相同  $l_j$  和  $J$  的能级)分别对辐射复合截面及辐射跃迁分支比进行拟合, 从而对高  $n$  低  $l$  能级通过辐射退激发对低  $n$  能级的布居贡献进行估计.

图 1 给出了考虑不同主量子数上限时理论模拟的  $K\alpha$  谱线的相对强度, 并与实验结果进行了比较. 结果表明, 随着考虑的激发态的增多,  $K\alpha$  谱线绝对强度比未考虑退激发贡献时的值大了近 2 倍, 同时  $K\alpha$  跃迁的两组谱的相对强度之比  $K\alpha_{1/2} : K\alpha_{3/2}$  也逐渐改善, 比值从  $n_{\max} = 20$  时的 1.5 近似地稳定到  $n_{\max} = 130$  时的 1.2, 这与实验结果非常接近. 这说明在研究高离化度离子辐射复合末态的辐射退激发过程时, 我们必须包括足够多的高激发态, 这样才能可能

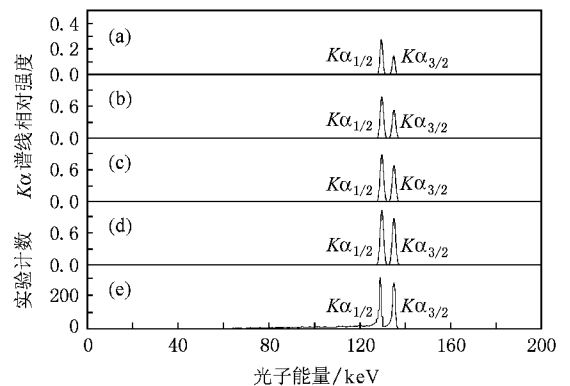


图 1  $K\alpha$  谱线随主量子数的变化及与实验谱的比较 (a)只考虑复合到  $L$  壳层的电子退激发产生的  $K\alpha$  谱 (b)包含复合到  $n \leq 20$  主壳层低  $l$  轨道电子退激发贡献后的  $K\alpha$  谱 (c)包含复合到  $n \leq 70$  主壳层低  $l$  轨道电子退激发贡献后的  $K\alpha$  谱 (d)含复合到  $n \leq 130$  主壳层低  $l$  轨道电子退激发贡献后的  $K\alpha$  谱 (e)  $K\alpha$  的实验观测谱

获得更接近于实验的模拟结果.

以上分析虽然没有考虑辐射复合到高  $n$  高  $l$  轨道的电子退激发对  $K\alpha$  谱线的贡献,但是可以推断,这些过程也应该对  $K\alpha$  谱线的结构有一定的影响.另外,根据文献[31,32],实验观测谱中  $K\alpha$  谱线在低能端细长的尾部也是由类氢  $U^{91+}$  离子俘获连续电子到高  $n$  高  $l$  轨道辐射退激发产生的.由于辐射跃迁选择定则的限定,致使这些电子只能通过多步跃迁才能退激发到较低的  $L$  壳层,在此过程中离子逐渐靠近探测器,观测角的逐渐增大以及相对论 Doppler 效应共同导致  $K\alpha$  谱线在低能区尾部的形成.

## 4. 结 论

本文利用基于 MCDF 理论方法发展起来的程序包 GRASP92 和 RATIP 以及 RERR06 程序,系统地计算了类氢  $U^{91+}(1s)$  离子的辐射复合截面及辐射复合末态的退激发谱.通过将本文结果与实验结果及其他理论计算的比较,我们发现在类氢  $U^{91+}(1s)$  离子的辐射复合过程中, $K$  壳层俘获电子的能力最强,其他壳层俘获电子的能力随其主量子数的增大而减小,并且辐射复合之后的辐射退激发级联对  $K\alpha$  谱线的相对强度比有很大的影响.对于辐射复合到高  $n$  高  $l$  轨道的电子对  $K\alpha$  谱线结构具体的影响还有待进一步开展.

- [1] Liu X B, Dong C Z, Ding X B 2005 *J. At. Mol. Phys.* **22** 316 (in Chinese)[刘晓斌、董晨钟、丁晓彬 2005 原子与分子物理学报 **22** 316]
- [2] Zeng S L, Pang J Q, Li P, Li Y M, Yan J, Wang J G 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2625 (in Chinese)[曾思良、逢锦桥、李萍、李月明、颜君、王建国 2005 物理学报 **54** 2625]
- [3] Gumberidze A, Stöhlker T, Banaš D, Beckert K, Beller P, Beyer H F, Bosch F, Cai X, Hagmann S, Kozhuharov C, Liesen D, Nolden F, Ma X, Mokler P H, Oršić-Muthig A, Steck M, Sierpowski D, Tashenov S, Warczak A, Zou Y 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92** 203004
- [4] Kramers H A 1923 *Philos. Mag.* **46** 836
- [5] Stobbe M 1930 *Ann. Phys. (Leipzig)* **7** 661
- [6] Sauter F 1931 *Ann. Phys.* **11** 454
- [7] Gavrilin M 1960 *Nuovo Cim.* **15** 691
- [8] Nagel B 1960 *Ark. Fysik* **18** 1
- [9] Pajek M, Schuch R 1992 *Phys. Rev. A* **45** 7894
- [10] Eichler J, Ichihara A, Shirai T 1995 *Phys. Rev. A* **51** 3027
- [11] Andersen L H, Bolko J, Kvistgaard P 1990 *Phys. Rev. A* **64** 729
- [12] Hoffknecht A, Brandau C, Bartsch T, Böhme C, Knopp H, Schippers S, Müller A, Kozhuharov C, Beckert K, Bosch F, Franzke B, Krämer A, Mokler P H, Nolden F, Steck M, Stöhlker T, Stachura Z 2000 *Phys. Rev. A* **63** 012702
- [13] Knapp D A, Beiersdorfer P, Chen M H, Scofield J H, Schneider D 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 54
- [14] Gao H, Schuch R, Zong W, Justiniano E, Dewitt D R, Lebius H, Spies W 1997 *J. Phys. B* **30** L499
- [15] Gumberidze A, Stöhlker T, Banaš D, Beckert K, Beller P, Beyer H F, Bosch F, Hagmann S, Kozhuharov C, Liesen D, Nolden F, Ma X, Mokler P H, Steck M, Sierpowski D, Tashenov S 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 223001
- [16] Uwira O, Müller A, Linkemann J, Bartsch T, Brandau C, Schmitt M, Wolf A, Schwalm D, Schuch R, Zong W, Lebius H, Graham W G, Doerfert J, Savin D W 1997 *Hyperfine Int.* **108** 149
- [17] Shi W, Bartsch T, Böhme C, Brandau C, Hoffknecht A, Knopp H, Schippers S, Müller A 2002 *Phys. Rev. A* **66** 022718
- [18] Gwinner G, Hoffknecht A, Bartsch T, Beutelspacher M, Eklöv N, Glans P, Griesser M, Krohn S, Lindroth E, Müller A, Saghiri A A, Schippers S, Schramm U, Schwalm D, Tokman M, Wissler G, Wolf A 2000 *Phys. Rev. Lett.* **84** 4822
- [19] Hoffknecht A, Uwira O, Schennach S, Frank A, Haselbauer J, Spies W, Angert N, Mokler P H, Becker R, Kleinod M, Schippers S, Müller A 1998 *J. Phys. B* **31** 2415
- [20] Dong C Z, Ding X B, Xie L Y, Jiang J 2006 *Exactly theoretical study on spontaneous emission and radiative recombination (Technical Report)* (in Chinese)[董晨钟、丁晓彬、颜录有、蒋军 2006 自发辐射及辐射复合过程的精确计算研究(技术报告)]
- [21] Fritzsche S 2001 *J. Electron. Spectrosc. Relat. Phenom.* **114—116** 155
- [22] Parpia F A, Froese C F, Grant I P 1996 *Compt. Phys. Commun.* **94** 249
- [23] Grant I P, Mckenzie B J, Norrington P H 1980 *Compt. Phys. Commun.* **21** 207
- [24] Dyal K G, Grant I P, Johnson C T, Parpia F A, Plummer E P 1989 *Compt. Phys. Commun.* **55** 425
- [25] Sang C C, Wan J J, Dong C Z, Ding X B, Jiang J 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 2152 (in Chinese)[桑萃萃、万建杰、董晨钟、丁晓彬、蒋军 2008 物理学报 **57** 2152]
- [26] Wan J J, Ding X B, Dong C Z, Ma X W, Rzakiewicz J, Stöhlker T, Fritzsche S 2009 *Phys. Rev. A* **79** 022707
- [27] Reuschl R, Gumberidze A, Kozhuharov C, Spillmann U, Tashenov S, Stöhlker T, Eichler J 2008 *Phys. Rev. A* **77** 032701
- [28] Spreiter Q, Toepffer C 1998 *Hyperfine Int.* **114** 245
- [29] Wu Y, Zeng S L, Duan B, Yan J, Wang J G, Dong C Z, Ma X W 2007 *Chin. Phys. Lett.* **24** 404
- [30] Reuschl R, Gumberidze A, Stöhlker T, Kozhuharov C, Rzakiewicz J, Spillmann U, Tashenov S, Fritzsche S, Surzhykov A 2006 *Radiat. Phys. Chem.* **75** 1740

- [ 31 ] Reuschl R , Gumberidze A , Fritzsche S , Kozhuharov C , Spillmann U , Stöhlker T , Surzhykov A , Tashenov S 2004 *GSI Report* APHY-EXP-06
- [ 32 ] Gumberidze A 2003 *Ph. D. Dissertation* ( Frankfurt :University of Frankfurt )

## Theoretical study on radiative recombination and subsequent radiative decay of H-like uranium ions<sup>\*</sup>

Wang Yong-Jun<sup>1)</sup> Wan Jian-Jie<sup>1)</sup> Ding Xiao-Bin<sup>1)</sup> Dong Chen-Zhong<sup>1)†</sup>  
Ma Xin-Wen<sup>2)</sup> Wang Jian-Guo<sup>3)</sup> Wu Yong<sup>3)</sup>

1) *College of Physics and Electronic Engineering , Northwest Normal University , Lanzhou 730070 , China*

2) *Institute of Modern Physics , Chinese Academy of Sciences , Lanzhou 730000 , China*

3) *Key Laboratory of Computational Physics , Institute of Applied Physics and Computational Mathematics , Beijing 100088 , China*

( Received 23 May 2008 ; revised manuscript received 6 August 2008 )

### Abstract

Based on multi-configuration Dirac-Fock method , radiative recombination( RR ) process of H-like uranium ion and radiative decay process of the resultant ion have been studied systematically using the recently developed program RERR06 , which is based on GRASP92 and RATIP packages. In the studies , the RR cross sections from 1s state of H-like uranium ion to  $1snl$  ( $1 \leq n \leq 8$  ,  $0 \leq l \leq 6$ ) of He-like uranium ion have been calculated in detail. Meanwhile , the relative intensity of the radiative decay spectra of the RR final states have also been studied. It was found that the RR cross sections to different orbitals decrease with the increasing of principal quantum number. Furthermore , an important contribution of the radiative decay of the RR final states to the relative intensity of  $K\alpha$  spectra has also been found in the present work.

**Keywords** : radiative recombination , multi-configuration Dirac-Fock method , radiative decay

**PACC** : 3280F , 3230J , 3120B

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China( Grant Nos. 10434100 , 10774122 , 10876028 ) , the Specialized Research Fund for the Doctoral Program of Higher Education of China ( Grant No. 20070736001 ) , the Foundation of Center of Theoretical Nuclear Physics of National Laboratory of Heavy Ion Accelerator of Lanzhou and the Foundation of Scientific and Technical Innovation of Northwest Normal University ,China( Grant No. NWNNU-KJCXGC-03-21 ).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail : dongcz@nwnu.edu.cn