

# 高离化态金离子的辐射复合及其退激发过程的理论研究\*

桑萃萃 王永军 万建杰 丁晓彬 董晨钟<sup>†</sup>

(西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070)

(2008 年 5 月 12 日收到; 2009 年 10 月 28 日收到修改稿)

利用基于多组态 Dirac-Fock 方法的程序包 GRASP92 和 RATIP 以及最新发展的 RERR06 程序, 详细计算了高离化态金离子(类镍  $Au^{51+}$ 、类铜  $Au^{50+}$  和类锌  $Au^{49+}$ )俘获一个自由电子到  $nl$  ( $n=4-8, l=0-3$ ) 壳层的辐射复合谱以及相应的辐射退激发谱. 理论计算的辐射复合谱很好地重现了实验谱. 研究表明: 对类镍  $Au^{51+}$ 、类铜  $Au^{50+}$  和类锌  $Au^{49+}$  而言, 将一个自由电子俘获到  $n=4$  壳层的概率最大; 在辐射复合过程之后, 处在  $n=4$  壳层的俘获电子的辐射退激发谱线最强, 并且体现了整个辐射退激发谱的主要特征.

**关键词:** 多组态 Dirac-Fock 方法, 辐射复合, 辐射退激发

**PACC:** 3110, 3290, 3270F

## 1. 引 言

辐射复合(RR)是离子俘获一个自由电子同时放出光子的过程. 在惯性约束聚变、X 射线激光、Z 箍缩和天体物理等研究领域中, RR 截面和速率系数是模拟和诊断高温等离子体状态必不可少的原子参数. 另外, 高精度的 RR 截面数据还可以对电子束离子阱中的实验结果进行绝对标定<sup>[1]</sup>.

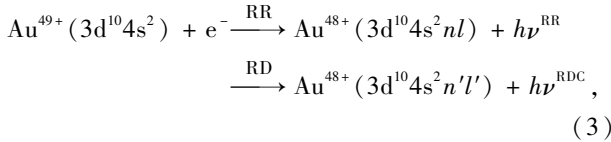
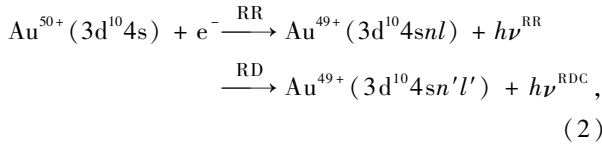
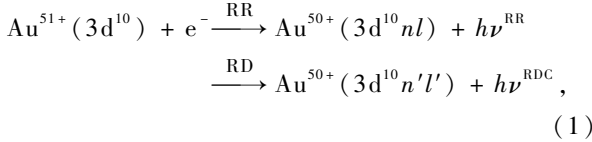
金元素具有高的 X 射线吸收率和转化率, 被看作是惯性约束聚变实验中的理想靶材料<sup>[2]</sup>. 近些年, 人们对金等离子体已经做了大量的实验和理论研究. 例如, 文献[3, 4]利用 NOVA 激光设备研究了高密度金等离子体的电荷态分布, 发现类镍  $Au^{51+}$ 、类铜  $Au^{50+}$ 、类锌  $Au^{49+}$  和类镓  $Au^{48+}$  等是金等离子体中含量较高的成分; Wong 等<sup>[5]</sup>首次在电子束离子阱中测量了冕区金等离子体的电荷态分布; Peyrusse 等<sup>[6]</sup>计算了冕区金等离子体的电荷态分布并得到了与实验一致的平均电离度; Fontes 等<sup>[7]</sup>用非局域热动平衡模型计算了金等离子体的辐射; Yang 等<sup>[8]</sup>用多组态 Dirac-Fock (MCDF) 方法

计算了金等离子体中电离态的平均分布; Hou 等<sup>[9]</sup>研究了金等离子体中能级加宽对等温态函数的影响; Honda 等<sup>[10]</sup>也用 MCDF 方法研究了金等离子体中  $M$  壳层的 X 射线谱; Yuan 等<sup>[11]</sup>用相对论平均原子模型在玻恩近似下研究了金等离子体中电子和离子的非弹性散射; Jiao 等<sup>[12]</sup>用自旋轨道劈裂阵模型计算了类镍金离子的双电子复合速率系数; Chen 等<sup>[13]</sup>也在自旋轨道劈裂阵模型下模拟了金等离子体的  $M$  带发射谱. 然而, 这些工作大都集中在金等离子体中电子碰撞激发、辐射跃迁以及双电子复合等过程, 对 RR 过程的研究相对较少. 2003 年, May 等<sup>[14]</sup>在电子束离子阱中测量了高离化态金等离子体的 RR 谱, 但由于实验中涉及到的光子能量范围太小, 测得的 RR 谱不完整. 2005 年, 他们扩大了光子能量范围, 测得了较完整的 RR 谱并初步分析了其结构<sup>[15]</sup>, 但是到目前为止还没有相应的理论研究. 另外, 当自由电子被俘获到较高束缚态后还会进一步辐射退激发(RD)直到离子达到稳定的状态. 由于在这种 RD 过程中涉及到俘获电子  $\Delta n=0$  的跃迁, 所以光子能量可能很小, 到目前为止还没有实验观测结果, 相应的理论研究也很缺乏.

\* 国家自然科学基金(批准号: 10434100, 10774122)、科学技术部国际科技合作计划(批准号: CI-2004-07)、兰州重离子加速器国家实验室原子核理论研究中心、高等学校博士学科点专项科研基金(批准号: 20070736001)和西北师范大学科技创新工程(批准号: NWNU-KJXGC-03-21)资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: dongcz@nwnu.edu.cn

本文利用在全相对论的 MCDF 方法<sup>[16-20]</sup>基础上发展起来的程序包 GRASP92<sup>[21]</sup> 和 RATIP<sup>[22]</sup> 以及我们最新开发的 RERR06 程序<sup>[23]</sup>, 计算了金等离子体中从类镍  $\text{Au}^{51+}$  到类铜  $\text{Au}^{50+}$ 、从类铜  $\text{Au}^{50+}$  到类锌  $\text{Au}^{49+}$  和从类锌  $\text{Au}^{49+}$  到类镓  $\text{Au}^{48+}$  的 RR 谱, 以及在 RR 过程后, 对应于俘获后的类铜  $\text{Au}^{50+}$ 、类锌  $\text{Au}^{49+}$  和类镓  $\text{Au}^{48+}$  的激发态的 RD 谱, 并分析了这些光谱的形成机制. 本文所涉及到的主要过程如下:



其中  $n(n') = 4-8$ ,  $l = 0-3$ ,  $l' = n' - 1$ . 在 RD 过程的计算中, 我们考虑了所有可能的电偶极 (E1) 和电偶极禁戒 (E2, M1, M2) 跃迁.

## 2. 理论方法

本文对 RR 以及 RD 过程的计算是在全相对论 MCDF 理论框架下进行的, 其中能级、波函数和 RD 概率通过使用程序包 GRASP92 和 RATIP 得到. 有关理论细节我们已在文献 [18-20] 中进行过详细介绍, 本文不再赘述.

RR 截面的计算是由我们最新发展的 RERR06 程序计算的. 在该程序中, 处于初态  $i$  的离子俘获一个自由电子形成处于末态  $j$  的原子 (或离子) 同时放出光子的 RR 截面为<sup>[24-26]</sup>

$$\sigma_{ij}^{\text{RR}}(\varepsilon) = \frac{g_j}{g_i} \frac{\alpha^2 \omega^2}{4\varepsilon} \sigma_{ji}^{\text{PI}}, \quad (4)$$

其中  $g_i = 2J_i + 1$  和  $g_j = 2J_j + 1$  分别是 RR 初态  $i$  和末态  $j$  的能级权重,  $\alpha$  是精细结构常数,  $\sigma_{ji}^{\text{PI}}$  是光电离截面<sup>[27]</sup>.  $\varepsilon$  是入射电子的动能, 在相应于该自由电子的波函数的求解过程中同时考虑了与初离子态中所有束缚电子的直接势与交换势<sup>[28]</sup>.

对于 RD 级联谱, 本文采用文献 [29] 提出的模

型来解释其形成机制. 一步 RD 级联过程的截面为

$$\sigma_{ij}^{\text{RD}}(\hbar\omega_{ij}^{\text{RT}}) = \sigma_{ij}^{\text{RR}} B_{ij}^{\text{R}}(\hbar\omega_{ij}^{\text{RT}}). \quad (5)$$

这里  $B_{ij}^{\text{R}}(\hbar\omega_{ij}^{\text{RT}})$  是从态  $j$  到态  $f$  的辐射跃迁分支比,

$$B_{ij}^{\text{R}}(\hbar\omega_{ij}^{\text{RT}}) = \frac{A_{ij}^{\text{R}}}{\sum_k A_{jk}^{\text{R}}}, \quad (6)$$

其中  $A_{ij}^{\text{R}}$  为从态  $j$  到态  $f$  的辐射跃迁概率<sup>[30]</sup>. 根据 Fermi 黄金定则,

$$A_{ij}^{\text{R}} = \frac{2\pi}{2j_j + 1} \sum_{M_j} \sum_{M_f} |M_{ij}^{(L)}|^2, \quad (7)$$

其中  $j_j$  是激发态  $j$  的总角动量,  $M_{ij}$  是从激发态  $j$  到较低的  $f$  态的跃迁矩阵元.  $M_{ij}$  可表示为

$$M_{ij}^{(L)} = \langle \alpha_j(P_j J_j M_j) | \hat{O}^{(L)} | \alpha_j(P_j J_j M_j) \rangle, \quad (8)$$

其中  $\hat{O}^{(L)}$  是辐射电磁场阶数为  $L$  的张量算符,  $|\alpha_j(P_j J_j M_j)\rangle$  是具有相同宇称  $P$ 、总角动量  $J$  和总角动量  $z$  分量  $M$  的原子态波函数.

可将 (8) 式推广到  $N$  步 RD 级联过程, 即

$$\sigma_{ij}^{\text{RD}(N)}(\hbar\omega) = \sum_j \sigma_{ij}^{\text{RR}} B_{ij}^{\text{R}(N)}(\hbar\omega_{k_{N-1}, k_N}^{\text{RT}}) \times G(\hbar\omega - \hbar\omega_{k_{N-1}, k_N}^{\text{RT}}), \quad (9)$$

$$B_{ij}^{\text{R}(N)}(\hbar\omega_{k_{N-1}, k_N}^{\text{RT}}) = \sum_{k_1, k_2, \dots, k_{N-1}} B_{k_0, k_1}^{\text{R}} B_{k_1, k_2}^{\text{R}} \dots B_{k_{N-1}, k_N}^{\text{R}} \quad (j \equiv k_0, f \equiv k_N), \quad (10)$$

其中  $G(\hbar\omega - \hbar\omega_{k_{N-1}, k_N}^{\text{RT}})$  是为了和实验谱进行比较而引入的归一化高斯轮廓. 经过计算发现, 在本文所涉及到的体系中, 两步和两步以上的 RD 过程对总 RD 级联谱的贡献很小, 本文只涉及一步退激发的计算, 即只取  $N = 1$ .

## 3. 结果及讨论

计算发现, 电子关联效应对本文中涉及到 RR 截面的影响很小, 因此我们给出了在单组态近似下的 RR 截面. 另外, 为了提高 RR 初、末态能级和波函数的精度, 本文还包括了 Breit 相互作用、量子电动力学以及有限核体积等高效效应.

表 1 给出了本文计算的类铜  $\text{Au}^{50+}$ 、类锌  $\text{Au}^{49+}$  和类镓  $\text{Au}^{48+}$  中最外层电子的主量子数  $n$  为 4 和 5 时的能级, 并与文献 [31] 中用多组态 Hartree-Fock 方法考虑了较全面的电子关联效应的结果作了比较. 其中, 类锌  $\text{Au}^{49+}$  的 4s4p 组态的能级与文献 [31] 中计算结果的相对误差较大 (5%), 但在考虑了其主要的电子关联 4p4d 后, 相对误差降到了

表 1 本文计算的相关离子态能级与其他理论值的比较(单位为 eV)

类铜 Au <sup>50+</sup>			类锌 Au <sup>49+</sup>			类镓 Au <sup>48+</sup>		
离子态	本文	文献[31]	离子态	本文	文献[31]	离子态	本文	文献[31]
4s <sub>1/2</sub>	0.00	0.00	4s <sup>2</sup>	0.00	0.00	4s <sup>2</sup> 4p <sub>1/2</sub>	0.00	0.00
4p <sub>1/2</sub>	110.23	110.06	(4s <sub>1/2</sub> 4p <sub>1/2</sub> ) <sub>0</sub>	99.37	98.27	4s <sup>2</sup> 4p <sub>3/2</sub>	139.64	139.11
4p <sub>3/2</sub>	253.18	253.23	(4s <sub>1/2</sub> 4p <sub>1/2</sub> ) <sub>1</sub>	107.71	106.40	4s <sup>2</sup> 4d <sub>3/2</sub>	317.89	319.79
4d <sub>3/2</sub>	420.77	421.07	(4s <sub>1/2</sub> 4p <sub>3/2</sub> ) <sub>2</sub>	240.71	239.83	4s <sup>2</sup> 4d <sub>5/2</sub>	347.25	345.86
4d <sub>5/2</sub>	451.10	451.39	(4s <sub>1/2</sub> 4p <sub>3/2</sub> ) <sub>1</sub>	260.49	259.05	4s <sup>2</sup> 4f <sub>5/2</sub>	534.63	533.06
4f <sub>5/2</sub>	629.18	629.56	(4s <sub>1/2</sub> 4d <sub>3/2</sub> ) <sub>1</sub>	414.89	416.88	4s <sup>2</sup> 4f <sub>7/2</sub>	542.36	541.95
4f <sub>7/2</sub>	637.29	637.65	(4s <sub>1/2</sub> 4d <sub>3/2</sub> ) <sub>2</sub>	418.91	421.30	4s <sup>2</sup> 5s <sub>1/2</sub>	1033.96	1037.88
5s <sub>1/2</sub>	1171.74	1174.34	(4s <sub>1/2</sub> 4d <sub>5/2</sub> ) <sub>3</sub>	444.68	446.60	4s <sup>2</sup> 5p <sub>1/2</sub>	1090.12	1094.03
5p <sub>1/2</sub>	1225.55	1228.06	(4s <sub>1/2</sub> 4d <sub>5/2</sub> ) <sub>2</sub>	453.99	455.06	4s <sup>2</sup> 5p <sub>3/2</sub>	1154.46	1158.54
5p <sub>3/2</sub>	1293.05	1295.69	(4s <sub>1/2</sub> 4f <sub>5/2</sub> ) <sub>2</sub>	635.97	631.67	4s <sup>2</sup> 5d <sub>3/2</sub>	1236.63	1240.47
5d <sub>3/2</sub>	1373.24	1375.74	(4s <sub>1/2</sub> 4f <sub>5/2</sub> ) <sub>3</sub>	637.68	630.57	4s <sup>2</sup> 5d <sub>5/2</sub>	1250.62	1254.48
5d <sub>5/2</sub>	1388.00	1390.52	(4s <sub>1/2</sub> 4f <sub>7/2</sub> ) <sub>4</sub>	643.83	638.36	4s <sup>2</sup> 5f <sub>5/2</sub>	1333.40	1337.29
5f <sub>5/2</sub>	1467.34	1469.85	(4s <sub>1/2</sub> 4f <sub>7/2</sub> ) <sub>3</sub>	648.79	642.50	4s <sup>2</sup> 5f <sub>7/2</sub>	1337.72	1341.63
5f <sub>7/2</sub>	1471.99	1474.52	(4s <sub>1/2</sub> 5p <sub>1/2</sub> ) <sub>0</sub>	1203.69	1209.91			
			(4s <sub>1/2</sub> 5p <sub>1/2</sub> ) <sub>1</sub>	1204.65	1210.86			
			(4s <sub>1/2</sub> 5p <sub>3/2</sub> ) <sub>2</sub>	1269.49	1275.88			
			(4s <sub>1/2</sub> 5p <sub>3/2</sub> ) <sub>1</sub>	1271.79	1278.16			
			(4s <sub>1/2</sub> 5d <sub>3/2</sub> ) <sub>1</sub>	1353.72	1357.34			
			(4s <sub>1/2</sub> 5d <sub>3/2</sub> ) <sub>2</sub>	1354.30	1357.93			
			(4s <sub>1/2</sub> 5d <sub>5/2</sub> ) <sub>3</sub>	1368.06	1371.69			
			(4s <sub>1/2</sub> 5d <sub>5/2</sub> ) <sub>2</sub>	1369.12	1372.77			
			(4s <sub>1/2</sub> 5f <sub>5/2</sub> ) <sub>2</sub>	1446.78	1452.96			
			(4s <sub>1/2</sub> 5f <sub>5/2</sub> ) <sub>3</sub>	1447.16	1453.35			
			(4s <sub>1/2</sub> 5f <sub>7/2</sub> ) <sub>5</sub>	1451.23	1457.44			
			(4s <sub>1/2</sub> 5f <sub>7/2</sub> ) <sub>3</sub>	1451.96	1458.18			

1.2% 以内(如表中所列),其他能级的相对误差均不超过 1%.

图 1 给出了类镍 Au<sup>51+</sup>、类铜 Au<sup>50+</sup> 和类锌 Au<sup>49+</sup> 俘获一个能量为 4540 eV 的自由电子到主量子数  $n$  为 4—8 的壳层的 RR 谱和 RR 截面. 在文献 [5] 中,实验测得的电荷态分布与理论计算值之间存在较大差别. 本文经过多次调试,发现当 RR 过程之前的类镍 Au<sup>51+</sup>、类铜 Au<sup>50+</sup> 和类锌 Au<sup>49+</sup> 所占的比例取为 6:3:1 时,理论谱与实验谱<sup>[15]</sup> 符合最好. 图 1(b) 是理论谱,其中各谱线的强度是在对最大的谱峰归一后给出的. 我们发现,当 RR 谱的高斯轮廓的半高全宽取为 50 eV,即与实验<sup>[15]</sup> 中入射电子束的宽度保持一致时,理论模拟谱的宽度相对较小. 为了与实验谱有更好的匹配,本文将高斯轮

廓的半高全宽取为 70 eV. 由于在该实验中实验谱仪的分辨率较高(为 12 eV),我们估计引起谱线展宽的主要原因可能来自等离子体中离子间的相互作用、离子的热运动以及外场的相互作用等效应. 我们也考虑了更高离化态和更低离化态的贡献,但结果表明这些离化态对模拟谱的贡献可以忽略. 图 1(c), (d) 和 (e) 分别给出了本文计算得到的从类镍 Au<sup>51+</sup> 到类铜 Au<sup>50+</sup>、从类铜 Au<sup>50+</sup> 到类锌 Au<sup>49+</sup> 和从类锌 Au<sup>49+</sup> 到类镓 Au<sup>48+</sup> 的 RR 截面. 由此可以看出,随着  $n$  的增大,RR 截面逐渐减小,这反映了自由电子被俘获到较高壳层的概率较小. 另外,相邻两条谱线间的距离减小,这也与离子的能级结构相符.

经过 RR 过程,处在较高能级的俘获电子会进

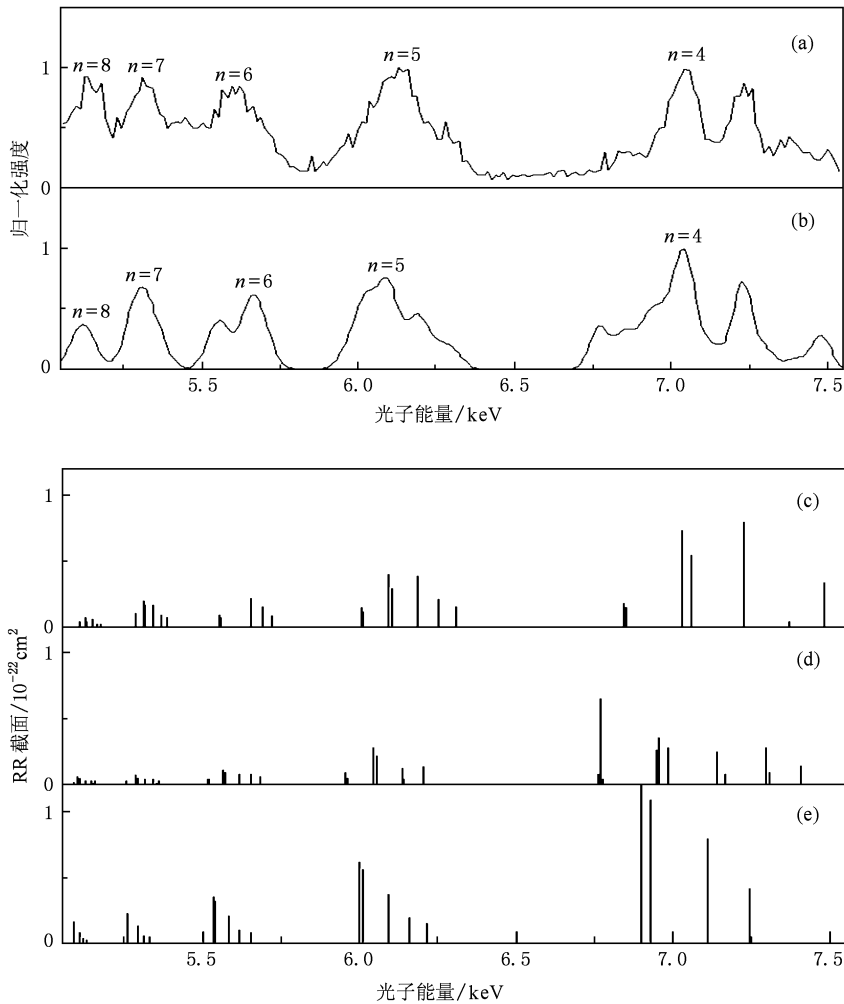


图1 高离化态金离子的RR谱和RR截面 电子能量为4540 eV. (a)实验RR谱<sup>[15]</sup>, (b)理论RR谱, (c)从类镍  $\text{Au}^{51+}$  到类铜  $\text{Au}^{50+}$  的RR截面, (d)从类铜  $\text{Au}^{50+}$  到类锌  $\text{Au}^{49+}$  的RR截面, (e)从类锌  $\text{Au}^{49+}$  到类镓  $\text{Au}^{48+}$  的RR截面

一步RD到较低的能级,使处于激发态的离子达到较稳定的状态,同时向外辐射光子. 本文计算了相应的RD谱,结果如图2所示. 图2中所有谱峰是对最大的谱峰(来自于从类锌  $\text{Au}^{49+}$  到类镓  $\text{Au}^{48+}$  的RR过程)进行了归一化处理而得到的,并设定其半高全宽为70 eV. 图2(a)是总的RD谱,这里仍假设在金等离子体中类镍  $\text{Au}^{51+}$ 、类铜  $\text{Au}^{50+}$  和类锌  $\text{Au}^{49+}$  所占比例为6:3:1. 比较后可知,图2(a)中RD谱的强度与图1(b)中总的RR谱的强度相当. 图2(b), (c)和(d)分别对应于类铜  $\text{Au}^{50+}$ 、类锌  $\text{Au}^{49+}$  和类镓  $\text{Au}^{48+}$  中俘获电子的RD谱. 计算发现,对于本文所涉及到的体系而言,RD谱中一步退激发过程起决定性作用,而多步退激发过程的贡献非常小. 另外,除了对应于类镓  $\text{Au}^{48+}$  中电子的电偶极禁戒(E2和M1)跃迁  $4s^2 4p_{3/2} \rightarrow 4s^2 4p_{3/2}$  的贡献不

可忽略(辐射能量为139.53 eV)之外,其他电偶极禁戒E2, M1和M2跃迁对RD谱的贡献也非常小. 为了进一步分析这些RD谱的结构,我们以类铜  $\text{Au}^{50+}$  为例,分别给出了  $n$  的上限取不同值时的RD谱(图3). 从图3可以看出,随着考虑的俘获态的增多,RD谱的变化减慢,这说明  $n$  的上限取到一定值时,理论计算就可以很好描述实际情况. 从图3还可以看出,随着考虑的俘获态增多,理论谱不断地向高能区扩展. 然而,处在最低俘获态( $n=4$ 壳层)的电子的RD谱是最强的,并且明显强于其他更高壳层俘获电子的RD谱. 这说明在研究类镍  $\text{Au}^{51+}$ 、类铜  $\text{Au}^{50+}$  和类锌  $\text{Au}^{49+}$  RR过程之后的RD谱时,只要考虑  $n=4$ 壳层上的俘获电子的RD过程就可以得到其主要特征.

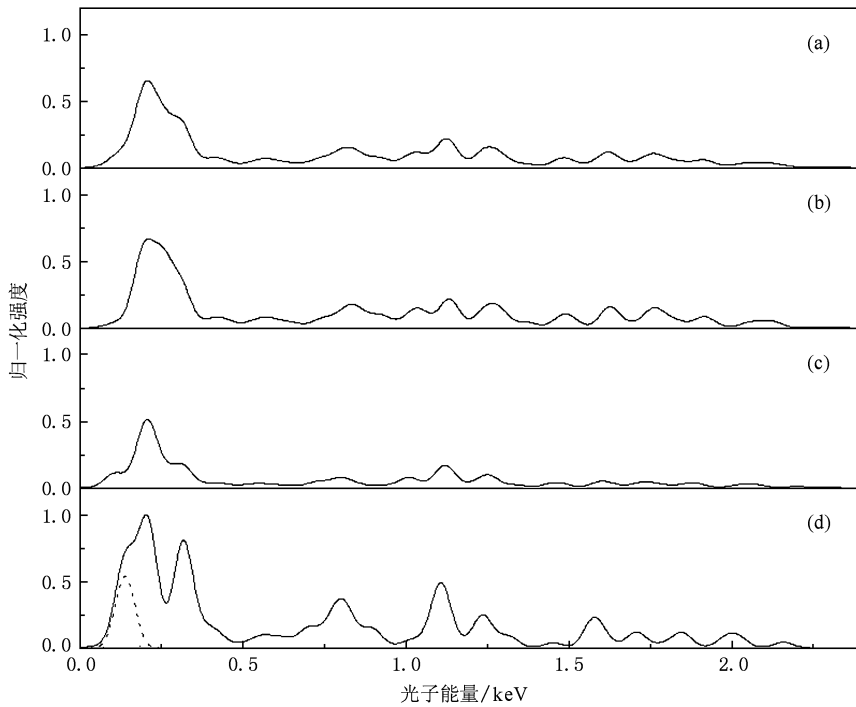


图2 本文计算得到的高离化态金离子的RD谱 (a)总RD谱, (b)俘获电子在类铜  $\text{Au}^{50+}$  中的RD谱, (c)俘获电子在类锌  $\text{Au}^{49+}$  中的RD谱, (d)俘获电子在类镓  $\text{Au}^{48+}$  中的RD谱,其中短划线对应于M1跃迁  $4s^2 4p_{3/2} \rightarrow 4s^2 4p_{1/2}$ ,点线对应于E2跃迁  $4s^2 4p_{3/2} \rightarrow 4s^2 4p_{1/2}$

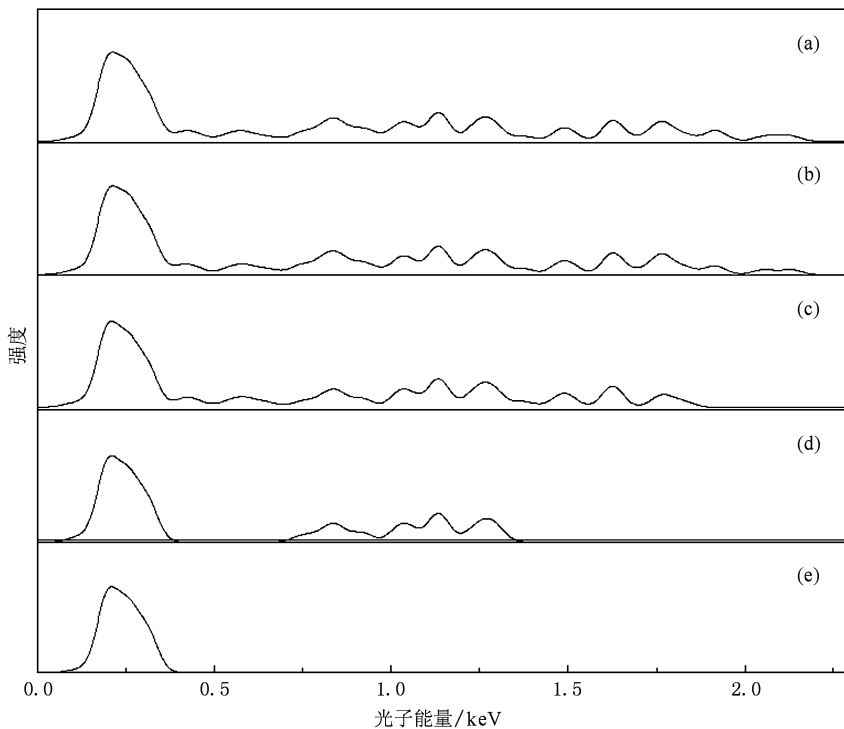


图3  $n$  的上限取不同值时俘获电子在类铜  $\text{Au}^{50+}$  中的RD谱 (a) $n$  的上限为8时得到的RD谱, (b) $n$  的上限为7时得到的RD谱, (c) $n$  的上限为6时得到的RD谱, (d) $n$  的上限为5时得到的RD谱, (e) $n$  的上限为4时得到的RD谱

## 4. 结 论

本文详细计算了在金等离子体中从类镍  $\text{Au}^{51+}$  到类铜  $\text{Au}^{50+}$ 、从类铜  $\text{Au}^{50+}$  到类锌  $\text{Au}^{49+}$  和从类锌  $\text{Au}^{49+}$  到类镓  $\text{Au}^{48+}$  的 RR 谱以及相应的 RD 谱, 理论计算的 RR 谱很好地重现了实验谱. 从 RR 谱可以看出, 电子被俘获到类镍  $\text{Au}^{51+}$ 、类铜  $\text{Au}^{50+}$  和类

锌  $\text{Au}^{49+}$  较低壳层的概率较大, 这也符合离子俘获电子的一般规律. 另外, 从 RD 谱可以看出, 处在  $n=4$  壳层的俘获电子的 RD 谱明显强于处在其他较高壳层的俘获电子的 RD 谱, 从而说明对于类镍  $\text{Au}^{51+}$ 、类铜  $\text{Au}^{50+}$  和类锌  $\text{Au}^{49+}$  RR 之后的 RD 谱的主要特征取决于  $n=4$  壳层俘获电子的 RD 过程. 我们希望本文的理论结果有助于实验工作者对高离化态金等离子体特性进行更加深入的研究.

- [1] O'Rourke B E, Kuramoto H, Li Y M, Ohtani S, Tong X M, Watanabe H, Currell F J 2004 *J. Phys. B* **37** 2343
- [2] Quintenz J P, Bloomquist D D, Leeper R J, Mehlhorn T A, Olson C L, Olson R E, Peterson R R, Matzen M K, Cook D L 1996 *Prog. Nucl. Ener.* **30** 183
- [3] Foord M E, Glenzer S H, Thoe R S, Wong K L, Fournier K B, Wilson B G, Springer P T 2000 *Phys. Rev. Lett.* **85** 992
- [4] Glenzer S H, Fournier K B, Wilson B G, Lee R W, Suter L J 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 045002
- [5] Wong K L, May M J, Beiersdorfer P, Fournier K B, Wilson B, Brown G V, Springer P 2003 *Phys. Rev. Lett.* **90** 235001
- [6] Peyrusse O, Arnoult C B, Bauche J 2005 *J. Phys. B* **38** L137
- [7] Fontes C J, Abdallah J Jr, Clark R E H, Kilcrease D P 2000 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **65** 223
- [8] Yang T L, Jiang G, Zhu Z H 2002 *Chin. Phys. Lett.* **19** 934
- [9] Hou Y, Jin F T, Yuan J M 2007 *J. Phys.: Condens. Matter* **19** 425204
- [10] Honda K, Mima K 1997 *Phys. Rev. E* **55** 4594
- [11] Yuan J K, Sun Y S, Zheng S T 1996 *J. Phys. B* **29** 153
- [12] Jiao R Z, Cheng X L, Yang X D 2003 *Chin. Phys.* **12** 1140
- [13] Cheng X L, Liu X H, Yang X D, Wang H B, Li S W, Zhen Z J 1999 *High Power Laser and Particle Beams* **11** 83 (in Chinese) [程新路, 刘小红, 杨向东, 王红斌, 李三伟, 郑志坚 1999 强激光与粒子束 **11** 83]
- [14] May M J, Fournier K B, Beiersdorfer P, Chen H, Wong K L 2003 *Phys. Rev. E* **68** 036402
- [15] May M J, Beiersdorfer P, Jordan N, Scofield J H, Reed K J, Hansen S B, Fournier K B, Gu M F, Brown G V, Porter F S, Kelley R, Kilbourne C A, Boyce K R 2005 *Nucl. Instrum. Meth. Phys. Res. B* **235** 231
- [16] Fritzsche S 2002 *Phys. Scripta* **T110** 37
- [17] Dyall K G, Grant I P, Johnson C T, Parpia F A, Plummer E P 1989 *Comput. Phys. Commun.* **55** 425
- [18] Dong C Z, Fritzsche S 2005 *Phys. Rev. A* **72** 012507
- [19] Dong C Z, Fritzsche S, Fricke B 2003 *Eur. Phys. J. D* **23** 5
- [20] Dong C Z, Fritzsche S, Xie L Y 2003 *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transf.* **76** 447
- [21] Parpia F A, Froese F C, Grant I P 1996 *Comput. Phys. Commun.* **94** 249
- [22] Koval P, Fritzsche S 2005 *Comput. Phys. Commun.* **172** 187
- [23] Wan J J, Dong C Z, Sang C C, Ding X B, Xie L Y, Jiang J 2007 *J. Phys.: Confer. Ser.* **58** 367
- [24] Cowan R D 1981 *The Theory of Atomic Structure and Spectral* (Berkeley: University of California Press)
- [25] Zhang H L 1998 *Phys. Rev. A* **57** 2640
- [26] Zhang H L, Nahar S N, Pradhan A K 2001 *Phys. Rev. A* **64** 032719
- [27] 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]
- [28] Grant I P, Mckenzie B J, Norrington P H, Mayers D F, Pyper N C 1980 *Comput. Phys. Commun.* **21** 207
- [29] Wan J J 2007 *M. S. Thesis* (Lanzhou: Northwest Normal University) (in Chinese) [万建杰 2007 硕士学位论文 (兰州: 西北师范大学)]
- [30] Grant I P 1974 *J. Phys. B* **7** 1458
- [31] Zeng J L, Zhao G, Yuan J M 2007 *At. Data Nucl. Data Tables* **93** 199

# Theoretical study of radiative recombination and the sub-subsequent radiative decay processes in highly charged Au ions<sup>\*</sup>

Sang Cui-Cui Wang Yong-Jun Wan Jian-Jie Ding Xiao-Bin Dong Chen-Zhong<sup>†</sup>

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

(Received 12 May 2008; revised manuscript received 28 October 2009)

## Abstract

Using multi-configuration Dirac-Fock method and the corresponding packages GRASP92 and RATIP, as well as the newly developed RERR06, we have calculated the radiative recombination (RR) spectra for capturing a continuum electron into  $nl$  ( $n = 4-8$ ,  $l = 0-3$ ) subshell of Ni-like  $\text{Au}^{51+}$ , Cu-like  $\text{Au}^{50+}$  and Zn-like  $\text{Au}^{49+}$  ions and their corresponding radiative decay spectra. The calculated RR spectra reproduce the experimental spectra excellently. It was found that for the Ni-like  $\text{Au}^{51+}$ , Cu-like  $\text{Au}^{50+}$  and Zn-like  $\text{Au}^{49+}$  ions, the probability of capturing a free electron to  $n = 4$  subshell is the largest. Furthermore, the main characteristics of the relative decay spectra is the domination of the lines from the captured electrons radiatively decaying from the  $n = 4$  subshell.

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

**PACC:** 3110, 3290, 3270F

---

<sup>\*</sup> Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10434100, 10774122), the International Science and Technology Cooperation Program of Ministry of Science and Technology, China (Grant No. CI-2004-07), the Center of Theoretical Nuclear Physics of National Laboratory of Heavy Ion Accelerator of Lanzhou, China, the Doctoral Program Foundation of Institution of Higher Education, China (Grant No. 20070736001) and the Science and Technology Innovation Program of Northwest Normal University, China (Grant No. NWNU-KJXGC-03-21).

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