

电子关联效应对金离子的影响*

胡峰¹⁾²⁾ 杨家敏^{1)†} 王传珂¹⁾²⁾ 张继彦¹⁾ 蒋刚²⁾ 朱正和²⁾

1) (中国工程物理研究院激光聚变中心, 绵阳 629100)

2) (四川大学原子与分子物理研究所, 成都 610065)

(2010年11月16日收到; 2010年12月7日收到修改稿)

运用多组态 Dirac-Fock (MCDF) 方法, 考虑不同的电子关联效应, 详细地研究了类 Li, 类 Be, 类 B, 类 Na, 类 Mg, 类 Al, 类 Cu, 类 Zn, 以及类 Ga 金离子的特性. 结果表明, 考虑价电子与原子实的电子相互作用, 其结果更加符合实验和其他理论结果.

关键词: 电子关联效应, 能级, 波长

PACS: 31.15.V, 31.30.jc, 32.70.Cs

1. 引言

随着计算技术的发展, 高性能计算已经成为研究原子分子物理的重要手段. 精密的原子结构计算能够检验量子电动力学, 同时还能相关的重大科学研究领域提供不可或缺的参数, 例如天体物理^[1]、核聚变^[2]等方面的研究. 测量技术的进步和大型科学装置存储环^[3,4]的建立为实验的精密测量提出了更高的要求, 同时也对理论计算的精度提出了更高的要求.

电子关联效应是指价电子与原子实内的电子之间的相互作用. 国外已经有大量的文献报道^[5-7], 我们小组也做了相应的工作^[8,9]. 研究表明电子关联效应对原子的能级结构和跃迁特性有很大的影响, 考虑了电子关联效应后能够获得更加精确的数据.

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. 因此人们对于金离子的研究做了大量的实验和理论研究. 但是由于金是高 Z 元素, 其结构复杂, 因此很多理论结果和实验结果存在一定的差距. 本文正是这样的基础上, 利用多组态 Dirac-Fock 方法, 通过考虑电子关联效应, 去获得更加精确的数据和理解差距

产生的原因.

本文主要研究了研究类 Li, 类 Be, 类 B, 类 Na, 类 Mg, 类 Al, 类 Cu, 类 Zn, 以及类 Ga 金离子的特性. 这些离子闭壳层外有一个、两个和三个价电子, 是典型电子关联效应研究的对象. 和先前工作一样, 我们选取基于多组态 Dirac-Fock 方法的 GRASPVU 程序来进行计算.

2. 理论计算方法

2.1. 波函数和能级的计算

本文所用的多组态 Dirac-Fock 理论 (MCDF) 方法在文献 [10] 中已有详细描述, 这里仅作扼要的介绍. 在多组态 Dirac-Fock 理论中, 一个核电荷数为 Z , 具有 N 个电子的原子或离子体系的 Dirac-Coulomb 哈密顿量为 (原子单位)

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

这里的 \hat{H}_i 是第 i 个电子的 Dirac 哈密顿量, 可表示为

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

其中 $V_{\text{nuc}}(\hat{r}_i)$ 是核势场, $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$ 和 $\boldsymbol{\beta}$ 分别是 Dirac 矢量和标量矩阵, $\hat{\boldsymbol{p}}_i$ 是第 i 个电子的动量算符, c 是真空中

* 国家自然科学基金 (批准号: 10874156)、中国工程物理研究院重大发展基金 (批准号: 2010A0102003) 资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: yjm70018@my-public.se.cninfo.net

光速.

在中心场近似下单电子的旋轨波函数可表示为

$$\psi_{nk} = \frac{1}{r} \left[\begin{matrix} P_{nk}(r)\chi_{km}(\theta, \phi) \\ iQ_{nk}(r)\chi_{-km}(\theta, \phi) \end{matrix} \right], \quad (3)$$

式中 k 为 Dirac 量子数, $P_{nk}(r)$ 和 $Q_{nk}(r)$ 分别为相对论径向波函数的大小分量, χ_{km} 为自旋函数.

N 电子体系的组态波函数 $| \Gamma_r(PJM) \rangle$ 是所有单电子旋-轨波函数组成的 N 阶 Slater 行列式波函数 Ψ_p 的线性组合, 即

$$| \Gamma_r(PJM) \rangle = \sum_p B_p | \Psi_p \rangle. \quad (4)$$

在 MCDF 方法中, 任一原子态 α 的波函数 $| \alpha(PJM) \rangle$ 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

$$| \alpha(PJM) \rangle = \sum_{r=1}^{n_c} C_r(\alpha) \Gamma_r(PJM), \quad (5)$$

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

对角化由原子波函数(5)式构造的哈密顿矩阵, 则可得到相关原子态的能量和组态混合系数. 对于其他高阶效应, 如 Breit 修正和主要的量子电动力学 QED 效应, 可作为微扰处理.

2.2. 电子关联效应

在具体计算过程中, 我们主要是通过逐渐增加基矢数目来考虑更多的组态相互作用, 直至得到收敛的结果. 我们可以把组态相互作用分为三类:

VV 关联: 价电子之间的相互作用称为 VV 关联 (Valence-Valence correlation). CV 关联: 原子实内的电子与价电子之间的相互作用称为 CV 关联 (Core-Valence correlation). CC 关联: 原子实内电子之间的相互作用称为 CC 关联 (Core-Core correlation).

一般来说, 只考虑 VV 关联就能得到比较精确的结果, 但是对于电子数目比较多的体系, 如果要得到比较精确的结构, CV 和 CC 关联是必须考虑的. 在本文计算中为了得到比较精确的结果, 我们把这三种关联都进行了考虑.

2.3. 计算步骤

我们先前的文章已经详细介绍了电子关联作用, 这里仅简单地重复一下. 为了更好地解释如何

考虑电子关联效应, 我们选取类 Mg 金离子为例子来描述计算方法.

1) 我们运行 Dirac-Fock 初步得到 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2$ 的径向波函数. 在这一步里, 我们选用 Thomas-Fermi 模型势作为计算的初始波函数. 在自洽场计算中, 我们对所有的轨道都进行了优化.

2) 我们让 $n = 1, 2$ 为闭壳层, 也就是说主量子数为 1 和 2 的轨道上的电子是封闭的, 既不运行这些电子向其他轨道跃迁也不允许其他轨道的电子跃迁到这两个轨道. 我们允许从 $n = 3$ 跃迁一个电子可以 $n = 4, 5, 6, 7$ 轨道上任意分布, 这样就考虑了 VV 关联. 而对于 CV 关联来说, 我们考虑两种情况, 一种是 2p 轨道上一个电子不受限制, 或者另一种是 2s 上一个电子不受限制. 此时要求对于一个双激发, 一个电子必须来自原子实中的 2p(2s) 轨道, 另一个电子必须来自价电子. 这样原子实 $n = 2$ 轨道电子和价电子之间的 CV 关联作用就考虑进去了. 而对于 CC 关联, 我们允许 $n = 2$ 上同时有两个电子被激发.

3. 结果与讨论

表 1, 2, 3 给出了 Li, 类 Be, 类 B, 类 Na, 类 Mg, 类 Al, 类 Cu, 类 Zn, 以及类 Ga 金离子的能级. 结果包含了量子电动力学效应和特殊质量位移, 其中量子电动力学效应考虑了两种修正: 自能和真空极化. 需要说明的是表 1, 2 和 3 中的给出能级值是 CV 关联效应的结果, 因为在先前的文章中, 证明了 CV 的结果更加接近实验值.

表 1 类 Li, 类 Na 和类 Cu 金离子的能级 (cm^{-1})

类 Li		类 Na		类 Cu	
能级	能量	能级	能量	能级	能量
$^2P_{1/2}$	1745902	$^2P_{1/2}$	1428564	$^2P_{1/2}$	887498
$^2P_{3/2}$	18123366	$^2P_{3/2}$	5548584	$^2P_{3/2}$	2044551

表 2 类 Be, 类 Mg 和类 Zn 金离子的能级 (cm^{-1})

类 Be		类 Mg		类 Zn	
能级	能量	能级	能量	能级	能量
1S_0	15642862	1S_0	1251746	1S_0	788310
3P_0	18536861	3P_0	1391703	3P_0	852446
3P_1	17699533	3P_1	5323236	3P_1	1931393
1P_1	18491620	1P_1	5647863	1P_1	2081883

表3 类 B,类 Al 和类 Ga 金离子的能级(cm^{-1})

类 B			类 Al			类 Ga		
能级	谱项	能量	能级	谱项	能量	能级	谱项	能量
$2s^2 2p$	$^2P_{1/2}$	0	$3s^2 3p$	$^2P_{1/2}$	0	$4s^2 4p$	$^2P_{1/2}$	0
	$^2P_{3/2}$	2460465		$^2P_{3/2}$	1502511		$^2P_{3/2}$	885968
$2s2p^2$	$^4P_{1/2}$	15968131	$3s3p^2$	$^4P_{1/2}$	4021098	$4s4p^2$	$^4P_{1/2}$	1123925
	$^4P_{3/2}$	17704706		$^4P_{3/2}$	5243535		$^4P_{3/2}$	1888722
	$^4P_{5/2}$	18045965		$^4P_{5/2}$	5430574		$^4P_{5/2}$	1965096
	$^2D_{3/2}$	18699593		$^2D_{3/2}$	5698543		$^2D_{3/2}$	2071425
	$^2D_{5/2}$	18714306		$^2D_{5/2}$	5707496		$^2D_{5/2}$	2090267
	$^2S_{1/2}$	33816402		$^2S_{1/2}$	9358020		$^2S_{1/2}$	2586217
	$^2P_{1/2}$	34788353		$^2P_{1/2}$	9721129		$^2P_{1/2}$	2799422
	$^2P_{3/2}$	34793650		$^2P_{3/2}$	9783663		$^2P_{3/2}$	3213626

3.1. 类 Li,类 Na,和类 Cu 的金离子理论和实验结果分析

类 Li,类 Na,和类 Cu 的金离子,其外壳层只有一个电子,结构较为简单.类 Li 的计算值与文献[11]报道的相一致.表四给出了文献[12,13]和本文计算的类 Na 金的 $1s^2 2s^2 2p^6 3p$ 的三种模型能级值.从表中可以看出,对于 $^2P_{1/2}$ 能级而言,CV 的计算值与文献[12]的偏差在 0.004%,与文献[13]的偏差在 0.03%.当

前三种模型给出的 $^2P_{3/2}$ 能级值要高于文献[12,13]给出的结果,但是最大偏差只有 0.12%.

Träbert 给出了 $1s^2 2s^2 2p^6 3s-1s^2 2s^2 2p^6 3p_{1/2}$ 跃迁的实验波长值为 $69.96 \text{ \AA}^{[14]}$,文献[13]给出的波长值为 69.974 \AA ,文献[12]给出的波长值为 70.009 \AA ,本文 CV 的计算值为 69.962 \AA ,可以看出当前计算值与实验符合得很好.由波长反推能级值,可以看出,当前 CV 计算的 $^2P_{3/2}$ 能级值应该更加接近于实验值.

表4 类 Na 金离子的能级(cm^{-1})

能级	VV	CV	CC	文献[12]	文献[13]
$^2P_{1/2}$	1430222	1428564	1430046	1428506	1429101
$^2P_{3/2}$	5548791	5548584	5549874	5542749	5543326

表5 给出了类 Cu 的 $4s-4p$ 跃迁波长的不同理论计算值和实验值.从表中可以看出,当前包括电子关联效应的计算值要更加接近实验值.同时我们注意到文献报道的结果主要是基于两种方法,一是多组态 Dirac-Fock 方法,另一种是多体微扰方法(MBPT).通过比较发现,本文计算的结果要优于早期的 MCDF 结果.Cheng 的结果^[15]是基于 MCDF 的优化能级(OL)和扩展平均能级(EAL)方法得到的,

但是只计算了所有 $4l5l'$ ($l, l' = 3$) 组态,可以看出其结果与实验值之间的偏差在 0.07—0.43%,而本文的偏差在 0.02%—0.1%.同样没有考虑电子关联效应,当前 VV 的计算值仍然要好于文献[16]的结果,这是因为 Seely 等人仅仅考虑了 $4l4l'$ ($l, l' = 3$) 组态.同样早期 MBPT 的结果^[18]由于选取的基矢较少,得到的结果偏差在 0.61%—1.48%,而扩展基矢的 MBPT 结果^[19]与实验符合得很好.

表5 类 Cu 金离子的跃迁波长(\AA)

跃迁	理论								实验[16]
	VV	VC	CC	文献[15]	文献[16]	文献[17]	文献[18]	文献[19]	
$4s-4p_{1/2}$	111.925	112.603	112.562	112.324 ^{a)} , 112.001 ^{b)}	111.527	112.676	110.819	112.601	112.485(15)
$4s-4p_{3/2}$	48.856	48.917	48.908	48.889 ^{a)} , 48.882 ^{b)}	48.771	49.006	48.625	48.936	48.9280(26)

a) 优化能级(OL)方法, b) 扩展平均能级(EAL)方法.

3.2. 类 Be, 类 Mg 和类 Zn 的金离子理论和实验结果分析

类 Be, 类 Mg 和类 Zn 的金离子结构相似, 其外壳层都有两个价电子, 所不同的是计算组态空间的不同 ($2l2l'$, $3l3l'$, $4l4l'$ 分别对应类 Be, 类 Mg 和类 Zn 的金离子), 以及初始的 Dirac-Fock 势的选取 ($1s^2, 1s^22s^22p^6$ 和 $1s^22s^22p^63s^22p^63d^{10}$ 分别对应于类 Be, 类 Mg 和类 Zn 的金离子). 由于初始势选取的不同, 导致了组态波函数的急剧增加, 以类 Zn 金离子为例, 考虑 CV 效应, 并且扩展主量子数到 7, 其波函数的数目为 24043, 而考虑 CC 效应, 主量子数为 6 时, 波函数的数目高达 76906. 因此, 在进行计算时, 我们对电子数目比较多的离子, 在考虑 CC 效应时,

对扩展的主量子数进行了控制, 一是为了保证计算的精确性, 二是为了保证计算时间的可控性,

本文计算的类 Be 金的能级与文献[20]报道的相一致, 其偏差在 0.06%—0.039%. 表 6 列出了类 Mg 的 $3s^2(^1S_0) \rightarrow 3s3p(^1,^3P_1)$ 的跃迁概率. 通过比较发现, 当前计算的 CV 值与文献[21]中根据实验能级修正后的跃迁概率几乎相当. 文献[21]的计算同样是基于 MCDF 方法, 但是没有考虑电子关联效应, 其结果明显高于当前三种效应的计算值. 文献[22]中给出的数值是根据早期的已有的实验数据给出的拟合公式推导得出的, 其数值要偏大于其他计算结果. 对于 $^1S_0 \rightarrow ^1P_1$ 而言, 文献[22]给出的值明显偏大, 这是因为当时 $^1S_0 \rightarrow ^1P_1$ 的实验数据较少, 取点不够密集, 造成拟合的精度较低.

表 6 类 Mg 金的跃迁概率 (s^{-1})

	VV	CV	CC	文献[21]	文献[21]	文献[22]
$^1S_0 \rightarrow ^3P_1$	2.219(10)	2.194(10)	2.213(10)	2.443(10) ^{a)}	2.202(10) ^{b)}	2.475(10)
$^1S_0 \rightarrow ^1P_1$	4.663(12)	4.597(12)	4.611(12)	4.705(12) ^{a)}	4.593(12) ^{b)}	5.524(12)

a) 计算值, b) 根据实验能级修正值.

表 7 类 Zn 的能级 (cm^{-1})

能级	VV	CV	CC	文献[23]	文献[24]	文献[25]
1S_0	784729	788310	787651	788269	801468	792596
3P_0	851213	852446	852393	855181	868735	858169
3P_1	1926470	1931393	1930972	1930074	1941446	1934348
1P_1	2083589	2081883	2083227	2088428	2100982	2089367

表 7 中文献[23, 24] 和本文计算结果都是基于 MCDF 方法, 从表中看出, 文献[23] 和[24] 计算结果要明显高于其他计算结果, 这是因为文献[23, 24] 只计算了 $4l5l'$ ($l, l' = 4$) 组态, 考虑的组态相互作用比较少. 文献[25] 的结果是基于多组态 Hatree-Fock 方法得到的, 其结果与本文 CV 结果的相对误差较大(5%). 实验^[26] 给出类 Zn 金离子 $4s4p$ 的 1P_1 能级的值为 $2080806 cm^{-1}$, 与 CV 的值只相差 $1077 cm^{-1}$, 而文献[24] 与实验的偏差达到了 $19099 cm^{-1}$. 可以看出考虑了电子关联效应之后, 当前计算结果与实验值更加接近.

3.3. 类 B, 类 Al 和类 Ga 的金离子理论和实验结果分析

文献[27] 给出了基于多组态微扰方法计算的类 B 金的能级, 与本文给出的 CV 值偏差在 0.19%—1.06% 之间, 可以看出当前 CV 的值是可

信的.

对于对类 Al 离子的研究, 现在实验只研究到了元素序数为 54 的 Xe, 而尚未有类 Al 金离子的报道. 为了验证当前计算的正确性, 我们在表 8 中比较了类 Al 金离子的跃迁波长和跃迁概率. 可以发现当前计算的值与文献[12, 28, 29] 报道的相一致, 除了 $3s^23p^2P_{1/2} \rightarrow 3s3p^2P_{5/2}$ 和 $3s^23p^2P_{1/2} \rightarrow 3s3p^2P_{3/2}$ 的 CC 计算值与文献报道值偏差较大.

文献[30] 中给出了详细的类 Ga 金离子的能级, 通过比较发现, 我们的计算值与文献的偏差在 0.11%—1.34% 之间. 目前实验^[31] 只给出了 $4s^24p$ ($J = 1/2$)— $4s4p^2$ ($J = 1/2$) 和 $4s^24p$ ($J = 1/2$)— $4s4p^2$ ($J = 3/2$) 两条跃迁波长 47.86 Å 和 48.28 Å, 文献[30] 给出的结果是 47.540 和 48.079 Å, 与实验的偏差在 0.32—0.201 Å. 本文 CV 的值分别是 47.847, 48.25 Å, 与实验的偏差只有 0.013 和 0.03 Å. 可以看出本文 CV 的值与实验符合得很好.

表 8 类 Al 金离子的跃迁波长(Å)和概率(s^{-1})

跃迁	波长				跃迁概率			
	VV	CV	CC	文献	VV	CV	CC	文献
$3s^2 3p^2 P_{1/2} - 3s 3p^2 P_{3/2}$	16.43	16.45	16.39	16.49 ^{a)}	6.43(12)	6.60(12)	6.93(12)	6.69(12)
$3s^2 3p^2 P_{1/2} - 3s 3p^2 P_{1/2}$	17.58	17.59	17.55		4.94(12)	4.82(12)	4.99(12)	
$3s^2 3p^2 P_{1/2} - 3s 3p^2 D_{3/2}$	17.88	17.89	17.52	17.91 ^{b)}	1.28(12)	1.24(12)	1.14(12)	1.02(12)
$3s^2 3p^2 P_{1/2} - 3s 3p^2 P_{1/2}$	66.43	66.49	66.46	66.46 ^{c)}	4.68(10)	4.60(10)	4.83(10)	4.65(10)
$3s^2 3p^2 P_{1/2} - 3s 3p^2 P_{5/2}$	71.68	71.74	70.83	71.67 ^{c)}	1.73(10)	1.71(10)	2.55(10)	1.70(10)
$3s^2 3p^2 P_{1/2} - 3s 3p^2 P_{3/2}$	81.16	81.18	81.56	81.02 ^{c)}	2.43(9)	2.43(9)	3.24(9)	2.38(9)

a)文献[28];b)文献[7];c)文献[29].

4. 结 论

运用多组态 Dirac-Fock 方法,考虑不同的电子关联效应,详细地研究了类 Li,类 Be,类 B,类 Na,类 Mg,类 Al,类 Cu,类 Zn,以及类 Ga 金离子的特性.

发现考虑原子实与价电子的关联效应,其结果与实验结果及其他理论计算结果符合得很好.同时我们发现考虑电子关联效应之后,提高了早期 MCDF 计算结果的精度.这对于分析以前的理论和实验数据,及指导今后实验的开展都有很好的指导意义.

- [1] Kallman T R, Palmeri P 2007 *Rev. Mod. Phys.* **15** 37
- [2] Lindl J D, Amendt P, Berger R L, Glendinning S G, Glenzer S H, Hann S W, Kauffman R L, Landen O L, Suter L J 2004 *Phys. Plasmas* **11** 339
- [3] Larsson M 1995 *Rep. Prog. Phys.* **58** 1267
- [4] Augustin I 2007 *Nucl. Instrum. Meth. B* **261** 1014
- [5] Jönsson P, Fisher F C 1997 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **30** 5861
- [6] Chen M H, Cheng T K 1997 *Phys. Rev. A* **55** 3440
- [7] Chen M H, Cheng T K 2010 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43** 074019
- [8] Hu F, Jiang G, Yang J M, Wang C K, Zhao X F, Zang H P 2011 *Chin. Phys. B* **20** 063103
- [9] Hu F, Jiang G, Yang J M, Wang C K, Zhao X F, Hao L H 2011 *Eur. Phys. J. D* **61** 15
- [10] Hu F, Jiang G, Hong W, Hao L H 2008 *Eur. Phys. J. D* **49** 293
- [11] Yerokhin V A, Artemyev A N, Shabaev V M 2007 *Phys. Rev. A* **75** 062501
- [12] Vikas M J, Ishikawa Y, Träbert E 2007 *Eur. Phys. J. D* **41** 77
- [13] Kim Y K, Baik D H, Indelicato P, Desclaux J P 1991 *Phys. Rev. A* **44** 148
- [14] Träbert E, Doerfert J, Granzow J, Büttner R, Staude U, Schartner K H, Rymuza P, Engström L, Hutton R 1995 *Z. Phys. D* **32** 295
- [15] Cheng K T, Wagner R A 1987 *Phys. Rev. A* **36** 5435
- [16] Seely J F, Ekberg J O, Brown C M, Feldman U, Behring W E, Reader J, Richardson M C 1986 *Phys. Rev. Lett.* **57** 2924
- [17] Palmeri P, Quinet P, Biémont E, Träbert E 2007 *At. Data Nucl. Data Tables* **93** 537
- [18] Johnson W R, Blundell S A, Sapirstein J 1990 *Phys. Rev. A* **42** 1087
- [19] Chen M H, Cheng T K 1997 *Phys. Rev. A* **74** 042510
- [20] Safronova M S, Johnson W R, Safronova U I 1996 *Phys. Rev. A* **53** 4036
- [21] Zou Y, Fischer C F 2001 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **34** 915
- [22] Curtis L J 1991 *Phys. Scr.* **43** 137
- [23] Quinet P, Biémont E, Palmeri P, Träbert E 2007 *At. Data Nucl. Data Tables* **93** 711
- [24] Sang C C, Wang Y J, Wan J J, Ding X B, Dong C Z 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 3871 (in Chinese) [桑萃萃,王永军,万建杰,丁晓彬,董晨钟 2010 物理学报 **59** 3871]
- [25] Zeng J L, Zhao G, Yuan J M 2007 *At. Data Nucl. Data Tables* **93** 199
- [26] Träbert E, Beiersdorfer P, Chen H 2004 *Phys. Rev. A* **70** 032506
- [27] Safronova M S, Johnson W R, Safronova U I 1996 *Phys. Rev. A* **54** 2850
- [28] Jupén C, Denne B and Martinson I 1990 *Phys. Scr.* **41** 669
- [29] Safronova U I, Sataka M, Albritton J R, Johnson W R, Safronova M S 2003 *At. Data Nucl. Data Tables* **84** 1
- [30] Quinet P, Biémont E, Palmeri P and Träbert E 2007 *At. Data Nucl. Data Tables* **93** 167
- [31] Träbert E, Beiersdorfer P, Fournier K B, Utter S B, Wong K L 2001 *Can. J. Phys.* **79** 153

Influence of electron correlation on Au ions^{*}

Hu Feng^{1)2)†} Yang Jia-Min¹⁾ Wang Chuan-Ke¹⁾²⁾ Zhang Ji-Yan¹⁾ Jiang Gang²⁾ Zhu Zheng-He²⁾

1) (*Research Center of Laser Fusion, CAEP, Mianyang 621900, China*)

2) (*Institute of Atomic and Molecular Physics, Sichuan University, Chengdu 610064, China*)

(Received 16 November 2010; revised manuscript received 7 December 2010)

Abstract

We present a comprehensive theoretical study of atomic characteristics of nine isoelectron sequences of gold ions in a broad range of wavelengths and transitions. The calculation is performed by the multiconfiguration Dirac-Fock (MCDF) method. The valence-valence, the core-valence and the core-core correlations are also considered. The calculated values including core-valence correlation are found to be consistent very well with other theoretical and experimental values. We believe that our calculated values can guide experimentalists in identifying the fine-structure levels in their future work.

Keywords: electron correlation, energy level, wavelength

PACS: 31.15.V, 31.30.jc, 32.70.Cs

^{*} Project supported by National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10874156), and the Key Item of Science and Technology Foundation of CAEP, China (Grant No. 2010A0102003).

[†] E-mail: yjm70018@my-public.se.cninfo.net