

高离化态 Hg 和 U 离子的双电子复合过程的理论研究^{*}

师应龙¹⁾ 董晨钟^{1)†} 张登红¹⁾ 符彦飙¹⁾

1) (西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070)

2) (兰州重离子加速器国家实验室原子核理论研究中心, 兰州 730000)

(2007 年 2 月 19 日收到, 2007 年 5 月 11 日收到修改稿)

在相对论多组态 Dirac-Fock 理论上, 利用近期发展的计算双电子复合截面的程序, 系统研究了高离化态类氢到类硼 Hg 和 U 离子的 KLL 双电子复合过程. 讨论了 Breit 效应和量子电动力学 (QED) 效应对 Hg 离子共振双激发态能级的贡献, 得到了双激发态的共振能、总线宽和相应的双电子复合共振强度, 所得结果与其他理论和实验结果都符合得很好. 在此基础上进一步研究了高离化态 U 离子的 KLL 双电子复合过程, 并与已有的实验和理论结果作了比较.

关键词: 双电子复合, MCDF

PACC: 3120B, 3480L

1. 引 言

双电子复合 (DR) 是电子-离子非弹性碰撞中发生的共振辐射复合过程, 可以表示为

$$e^- + A_i^{q+} \rightarrow A_j^{(q-1)+**} \rightarrow A_k^{(q-1)+} + h\nu. \quad (1)$$

在这一过程中, 一个具有特定能量的自由电子与电离度为 q 的离子 A^{q+} 碰撞, A^{q+} 离子中的一个束缚电子从其占据的轨道 $n_i l_i$ 激发到未占满轨道 $n_a l_a$ 上. 与此同时, 该自由电子由于损失了部分能量正好被俘获到另一个未占据的轨道 n_l 上, 从而形成了 $A^{(q-1)+}$ 离子的一个双电子激发的自电离态 $A^{(q-1)+**}$, 随后该双电子激发态通过发射光子而变成 $A^{(q-1)+}$ 离子^[1].

双电子复合是等离子体中的一种非常重要的原子过程, 尤其对热等离子体中的电荷态布局 and 所产生的 X 射线分布都有着重要影响, 而且双电子复合过程中所产生的双电子伴线已成为等离子体温度诊断的重要手段^[2]. 同时, 有关双电子复合截面的精确计算对天体物理和聚变等离子体物理的研究都非常重要^[1, 2]. 因此, 双电子复合过程一直是人们感兴趣的研究课题.

早期, 人们对双电子复合过程的研究主要集中在低中 Z 离子和低能较高 Z 离子^[2-9]. 由于靶原子中电子角分布的限制, 使得实验分辨率相对较低, 因而理论结果都与实验符合得很好. 近年来, 实验分辨率得到了很大的改进, 利用电子束离子阱 (EBIT) 和实验储存环 (ESR) 等一些高精度、高能量的实验装置, 世界上一些小组^[10-13] 开展了与高离化态重离子的内壳层电子激发相关的双电子复合过程的实验研究. 例如, Knapp 等人^[10] 在 LLNL 的 Super-EBIT 装置上进行了高离化态 U 离子的双电子复合实验研究, 观测到了在 KLL 共振附近双电子复合与辐射复合过程之间的量子干涉现象; Brandau 等人^[11] 在德国 GSI 的 ESR 上完成的类氢 U 离子 KLL 双电子复合过程的测量结果具有很高的分辨率, 能够分辨出 $KL_j L_j$ 共振的各个 $j-j'$ 精细结构成分; González Martínez 等人^[12-14] 在 Heidelberg 的 EBIT 上对类氢到类硼 Hg 离子的双电子复合过程进行了实验观测, 研究了双电子复合与辐射复合之间的量子干涉现象. 这些高精度的实验研究结果, 不但准确地反映了重离子的内部电子结构, 而且对目前的原子结构的计算精度也提出了更高的要求. 同时, 在理论上处理重离子的双电子复合过程中的激发自电

^{*} 国家自然科学基金 (批准号: 10434100, 10774122), 兰州重离子加速器国家实验室原子核理论中心基金及西北师范大学科技创新工程项目 (批准号: NWNNU-KJXCXC-03-21) 资助的课题.

[†] E-mail: dongcz@nwnu.edu.cn

离态时,必须要系统地考虑相对论效应、Breit 效应和量子电动力学(QED)效应,因此更具挑战性。这些都进一步激发了理论工作者对重离子的双电子复合过程的研究兴趣。近期,Hamman 等人^[14]用多组态 Dirac-Fock(MCDF)方法、组态相互作用 Dirac-Fock-Sturmian(CI-DFS)方法以及基于多电子体系 Furry 图像的量子电动力学(QED)方法,分析了 Breit 效应、QED 效应和核尺寸效应等对高离化态重离子的双电子复合过程的影响。

本文在相对论多组态 Dirac-Fock 理论上,系统地考虑了相对论效应、Breit 效应以及 QED 效应,利用已经发展的计算双电子复合截面的程序^[11],分别对高离化态 Hg 和 U 离子的双电子复合过程作了系统的理论研究。

2. 理论方法

2.1. MCDF 理论

有关多组态 Dirac-Fock(MCDF)理论方法已有详细的描述^[15-18],这里仅作扼要的介绍。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

$$|\alpha(PJM)\rangle = \sum_{r=1}^{n_c} C_r(\alpha) |\Gamma_r(PJM)\rangle, \quad (2)$$

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

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 $|\Psi_p\rangle$ 的线性组合,即

$$|\Gamma_r(PJM)\rangle = \sum_p B_{rp} |\Psi_p\rangle. \quad (3)$$

对角化由原子态波函数(2)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。对于其他高阶的相对论效应,如 Breit 相互作用^[16]和主要的 QED 效应^[16,17],在目前我们使用的 GRASP92 程序中可以予以详细地考虑。

Breit 相互作用是对两电子之间 Coulomb 相互作用的最重要的相对论贡献,它是由于两电子之间交换了一个横向光子而导致的横向电磁场相互作用,其表达式可写为^[16]

$$V_{\text{Breit}} = - \sum_{s < t} \left[\frac{\alpha_s \cdot \alpha_t \cos(\omega_{st} r_{st})}{r_{st}} \right. \\ \left. + (\alpha_s \cdot \nabla_t)(\alpha_t \cdot \nabla_s) \frac{\cos(\omega_{st} r_{st}) - 1}{\omega_{st}^2 r_{st}} \right], \quad (4)$$

其中 $r_{st} = |r_s - r_t|$ 为 s 电子与 t 电子间的距离, ω_{st} 为 s 电子与 t 电子间交换光子的能量, α_s 为 Dirac 矩阵。

QED 效应是对电子-正电子和辐射场相互作用的辐射修正。主要包括自能修正和真空极化修正。自能是 QED 修正的最主要部分。在屏蔽氢近似下,可以表述为^[17]

$$E_{\text{nk}}^{\text{SE}}(Z/c) = \frac{Z^4}{\pi c^3 n^3} F_{\text{nk}}(Z/c), \quad (5)$$

其中 $F_{\text{nk}}(Z/c)$ 是其变量的缓变函数。真空极化修正也是一种重要的 QED 修正,它来源于虚拟的电子-正电子对的屏蔽引起的核与电子间的相互作用,由 Uehling 势和 Wichmann-Kroll 势两部分组成。前者是主要部分,在目前使用的 GRASP92 程序中,直接产生对于能量矩阵的对角贡献,可以表述为^[17]

$$H_{rr}^{\text{VP}} = \sum_{a=1}^{n_\omega} q_r(a) \int_0^\infty dr V^{\text{VP}}(r) (P_{n_a k_a}^2(r) + Q_{n_a k_a}^2(r)), \quad (6)$$

而 Wichmann-Kroll 势为较高阶修正,在一般的多电子体系计算中通常忽略不计。

2.2. 双电子复合截面的计算

双电子复合共振过程一般用形成中间双激发态的电子的主量子数来标记^[10],分为 KLL, KLM, KMM 等。KLL 双电子复合过程就表示一个电子被离子俘获到 L 壳层,而离子中的另一个电子从 K 壳层激发到 L 壳层。根据不同壳层的角动量 J 值,又可以将 KLL 双电子复合分为 $KL_{12} L_{12}$ ($1s2s^2, 1s2s2p_{1/2}, 1s2p_{1/2} 2p_{1/2}$), $KL_{12} L_3$ ($1s2s2p_{3/2}, 1s2p_{1/2} 2p_{3/2}$) 以及 $KL_3 L_3$ ($1s2p_{3/2} 2p_{3/2}$)。

在双电子复合过程中,离子从初态 $i(A^{q+})$ 俘获一个自由电子形成离子的中间双激发态 $j(A^{(q-1)+**})$ 再辐射衰变到末态 $k(A^{(q-1)+})$ 的双电子复合共振强度为^[11]

$$S_{ijk} = \frac{\pi^2 \hbar^3}{m_e \epsilon_i} \frac{g_j}{2g_i} \frac{A_{ji}^a A_{jk}^r}{\sum_{k'} A_{jk'}^r + \sum_{i'} A_{ji'}^a}, \quad (7)$$

上式中的 k' 求和是对所有可能的辐射末态进行的, i' 求和是对所有的 Auger 末态进行的, g_i 和 g_j 分别是初态 i 和中间双激发态 j 的统计权重, ϵ_i 是自由电子的共振能量。

(7) 式中 A_{ji}^a 为从初态 i 到中间态 j 的俘获率(或

从 j 到 i 的 Auger 衰变率),可以由下面的公式计算得到:

$$A_{ji}^a = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \alpha_j(PJM) \left| \sum_{s < t} \frac{1}{r_{s,t}} + V_{\text{Breit}} \right| \alpha_i(P'J'M') \right|^2, \quad (8)$$

其中, $\alpha_j(PJM)$ 为中间双激发态的原子态波函数, 可以通过组态波函数的线性组合得到; $\alpha_i(P'J'M')$ 由初离子态的波函数与 Auger 电子的旋-轨波函数构成. 这个自由电子的旋-轨波函数可通过求解初离子态势场中的径向方程而得到. $\frac{1}{r_{s,t}}$ 为 s 电子与 t 电子的库仑相互作用算符. V_{Breit} 是 Breit 相互作用算符, 其具体表达式如(4)式所示.

(7)式中 A_{jk}^r 为从中间双激发态 j 到末态 k 的辐射衰变率, 可以由下面的公式计算得到^[11]:

$$A_{jk}^r = \frac{4e^2 E_{jk}^3}{3\hbar c^3} \left| \alpha_j(PJM) T^{(1)} \alpha_k(P'J'M') \right|^2, \quad (9)$$

式中 $\alpha_j(PJM)$ 和 $\alpha_k(P'J'M')$ 分别为中间态 j 和末态 k 的原子态波函数, $T^{(1)}$ 是辐射电磁场的偶极张量算符.

为了方便与实验比较(7)式计算得到的双电子复合强度 S_{ijk} 与 Gaussian 线型函数做卷积, 展宽后的 DR 截面为^[19]

$$\sigma^{\text{DR}}(\epsilon) = \sum_i \frac{S_{ijk}}{\sqrt{2\pi}\Gamma} \exp\left[-\frac{(\epsilon - \epsilon_i)^2}{2\Gamma^2}\right]. \quad (10)$$

式中 Γ 为实验分辨线宽(或 FWHM), ϵ_i 为 DR 共振能量, ϵ 为自由电子能量.

本文对于相关的原子态波函数以及能级的计算, 是利用相对论多组态 Dirac-Fock (MCDF) 理论框架下的 GRASP92 程序进行的. 而对于辐射衰变率和 Auger 衰变率的计算, 则是使用近年来我们发展起来的 REOS99^[20] 和 AUGER 程序^[21] 进行的.

3. 结果与讨论

3.1. 高离化态 $\text{Hg}^{75+\dots78+}$ 离子的双电子复合

González Martínez 等人^[12,13] 在德国 Heidelberg 的 EBIT 上完成的高离化态 $\text{Hg}^{75+\dots78+}$ 离子的 KLL 双电子复合过程的实验研究, 具有很高的分辨率, 并且得到了相对不确定度为 ± 4 eV 和绝对不确定度为 ± 14 eV 的 DR 共振能量. 在这样高精度的实验基础上就可以对各种不同理论计算结果进行详细的比较. 这里, 为了检验我们的计算方法的可靠性和 Breit 效应及 QED 效应对高离化态高核电荷数离子的双电子复合过程的影响, 本文进一步研究了 $\text{Hg}^{75+\dots78+}$ 离子的双电子复合过程, 与 González Martínez 等人^[12] 的实验结果和 Harman 等人^[14] 的理论计算结果做了详细地对比. 同时, 本文也给出了对应于某一给定中间双激发态的双电子复合共振强度. 为方便区分不同离化度离子, 本文采用文献[13]中的标记方法, 将离子按照双电子复合过程中离子的初始离化度来分类, 以类氦 (He_i)、类锂 (Li_i)、类铍 (Be_i) 和类硼 (B_i) Hg 离子来做标记, 其中 i 表示对于某一离化度离子的不同 KLL 中间双激发态.

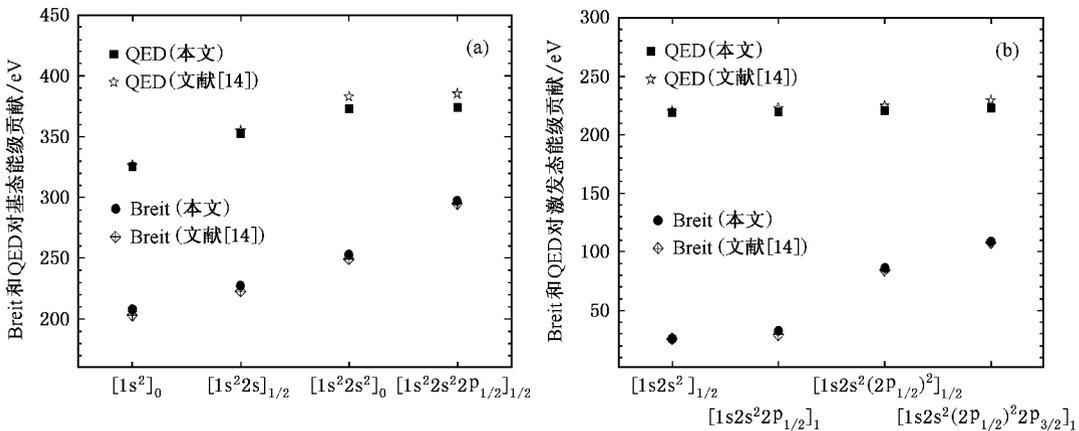


图 1 Breit 效应和 QED 效应对类氦-类硼 Hg 离子基态和中间双激发态能级的贡献

对于高 Z 少电子离子体系, 相对论效应和高阶效应就变得非常重要. 尤其是在处理与内壳层电子

激发相关的双电子复合过程时, Breit 效应和 QED 效应对能级的修正就必须给予详细考虑^[14]. 图 1 分别

给出了 Breit 效应及 QED 效应对类氫-类硼 Hg 离子 KLL 双电子复合过程中能级的贡献,其中图 1(a)是对基态能级的贡献,图 1(b)是对中间双激发态能级的贡献,并与其他理论结果^[14]作了比较,符合得很好.通过比较我们可以得出以下结论:1)从图 1(a)中可看出 Breit 效应和 QED 效应对基态能级的贡献分别为 200 eV 和 300 eV 的量级;2)Breit 效应和 QED 效应对内壳层 1s 电子被激发能级的贡献要比对基态能级的贡献小很多,例如,Breit 效应和 QED 效应对类铯 $1s^2 2s \frac{1}{2}$ 基态能级的贡献分别为 227 eV 和 352 eV,而对类锂 $Li[1s2s^2 2p_{1/2}]$ 激发态能级的贡献分别为 33 eV 和 220 eV;3)从图 1(a)和(b)的对比,可反映出 QED 效应对外壳层 2s, 2p 电子的影响不大.这就说明,Breit 效应和 QED 效应对高 Z 少电子

离子基态能级的贡献很大,且与内壳层电子激发有很大的关系,这与我们前期的结论是一致的^[22].

在系统地考虑了以上各种效应对高离化态 Hg 离子的基态及中间双激发态能级影响的基础上,表 1 给出了本文计算得到的类氫到类硼 Hg 离子的中间双激发态的共振能、总线宽 Γ_j 和 KLL 双电子复合共振强度 S_{ij} ,并与已有的实验及理论计算结果作了比较,其中共振强度 S_{ij} 是对某一中间双激发态 j 的所有可能辐射末态求和得到的.同时,为了更明显的对不同理论结果与实验结果进行比较,图 2 给出了有关中间双激发态 DR 共振能的理论与实验结果之间的差别比较,图中误差棒代表的是实验中得到的共振能的相对不确定度.

总体上看,对于中间双激发态的共振能,本文计

表 1 类氫-类硼 Hg 离子的中间双激发态的共振能、总线宽 Γ_j 和 KLL 双电子复合强度 S_{ij}

初态	双激发态	标记	共振能/keV				Γ_j /eV		DR 强度/ $10^{-21} \text{cm}^2 \text{eV}$
			本文	MCDF ₃ ^[13]	CI-DFS ^[13]	实验 ^[13]	本文	理论 ^[23]	本文
$[1s^2]_0$	$[1s2s^2]_{1/2}$	He ₁	46.357	46.358	46.361	46.358(4)	0.9	1.1	24.86
	$[(1s2s)2p_{1/2}]_{1/2}$	He ₂	46.609	46.613	46.614	46.611(6)	6.9	6.9	50.04
	$[(1s2s)2p_{3/2}]_{3/2}$	He ₃	48.842	48.844	48.843	48.844(4)	4.4	4.5	34.16
	$[(1s2p_{1/2})2p_{3/2}]_{3/2}$	He ₄	48.919	48.923	48.926	48.918(9)	18.9	18.8	19.64
	$[(1s2s)2p_{3/2}]_{3/2}$	He ₅	48.842	48.844	48.843	48.845(5)	4.4	4.5	34.16
	$[1s(2p_{3/2})^2]_{3/2}$	He ₆	51.061	51.065	51.064	51.064(6)	5.3	5.2	18.46
$[1s^2 2s \frac{1}{2}]$	$[1s2s^2 2p_{1/2}]_0$	Li ₁	46.688	46.688	46.690	46.686(5)	10.9	11.1	25.73
	$[(1s2s)2p_{1/2} \frac{1}{2} 2p_{3/2}]_0$	Li ₂	49.067	49.066	49.067	49.086(6)	20.7	20.7	14.33
	$[(1s2s)2p_{1/2} \frac{1}{2} 2p_{3/2}]_1$	Li ₃	49.118	49.116	49.118	49.136(9)	25.0	26.9	8.66
	$[(1s2s)2p_{1/2} \frac{1}{2} 2p_{3/2}]_2$	Li ₄	49.225	49.212	49.214	49.218(13)	14.6	14.5	11.45
	$[(1s2s)2p_{1/2} \frac{1}{2} 2p_{3/2}]_3$	Li ₅	48.965	48.964	48.966	48.970(5)	10.7	10.7	17.22
	$[(1s2s)(2p_{3/2})^2]_0$	Li ₆	51.150	51.150	51.153	51.154(5)	5.4	5.4	10.23
$[1s^2 2s^2]_0$	$[1s2s^2(2p_{1/2})^2]_{1/2}$	Be ₁	47.138	47.124	47.135	47.135(5)	16.8	16.1	5.72
	$[(1s2s^2 2p_{1/2})2p_{3/2}]_{3/2}$	Be ₂	49.262	49.248	49.260	49.270(8)	11.6	11.1	4.44
	$[(1s2s^2 2p_{1/2})2p_{3/2}]_{3/2}$	Be ₃	49.349	49.335	49.347	49.349(6)	19.0	18.9	18.11
	$[(1s2s^2 2p_{1/2})2p_{3/2}]_{3/2}$	Be ₄	49.257	49.244	49.254	49.265(17)	11.4	10.8	26.46
	$[1s2s^2(2p_{3/2})^2]_{3/2}$	Be ₅	51.438	51.425	51.429	51.433(5)	5.5	5.1	16.16
$[1s^2 2s^2 2p_{1/2} \frac{1}{2}]$	$[1s2s^2(2p_{1/2})^2 2p_{3/2}]_0$	B ₁	49.555	49.549	49.551	49.557(4)	35.7	35.0	11.62
	$[1s2s^2(2p_{1/2})^2 2p_{3/2}]_1$	B ₂	49.497	49.491	49.493	49.499(4)	15.9	15.9	14.07
	$[1s2s^2(2p_{1/2})^2 2p_{3/2}]_1$	B ₃	49.555	49.549	49.551	49.552(7)	35.7	35.0	11.64
	$[(1s2s^2 2p_{1/2})(2p_{3/2})^2]_0$	B ₄	51.605	51.601	51.603	51.603(8)	16.3	15.7	9.13

a) 总线宽 Γ_j 是辐射线宽和自电离线宽之和.

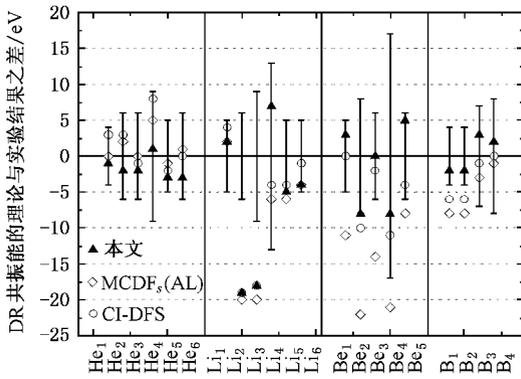


图 2 DR 共振能的不同理论计算结果与实验结果之间的差别比较

算的结果与其他理论和实验结果都很好符合。尤其是类氢离子的结果符合得很好,理论与实验之间的差别在 5 eV 以内。这是因为类氢基态和相应的 KLL 中间双激发态的电子组态结构比较简单,理论计算结果就比较精确。对于类锂离子的部分中间双激发态,各种理论与实验结果之间明显地存在着较大的差别。例如 Li_2 和 Li_3 这两个具有相同的电子组态 $(1s2s)2p_{1/2}3/22p_{3/2}$ 但对应不同的总角动量值 $J=2$ 和 $J=1$ 的能级,文献 [13] 中的 MCDFs 方法得到的理论值与实验之间的偏差均为 -20 eV, CI-DFS 方法得到的理论值与实验之间的偏差分别为 -19 eV 和 -18 eV。而我们得到 Li_2 和 Li_3 这两个态所对应的共振能结果与实验之间的偏差也比较大,分别

为 -20 eV 和 -18 eV。有关这些差别,有待于进一步探讨。类铍与类硼 Hg 离子的计算结果与实验符合得很好,而且有些态的共振能,我们的计算结果比其他理论结果更好地与实验相符合。例如,对于 B_1 态,本文计算的结果与实验值之间的差别为 -2 eV,而 MCDFs^[14]和 CI-DFS^[14]得到的结果与实验差别分别为 -8 eV 和 -6 eV;对于 B_2 态,本文计算的结果与实验值之间的差别为 -2 eV,而 MCDFs 和 CI-DFS 结果与实验差别分别为 -7 eV 和 -6 eV,这些也从图 2 中明显的反映出来。同时,可看出表 1 中所给本文计算的中间双激发态的总线宽与 González Martínez 等人^[23]的结果差别在 1 eV 以内。从这些方面反映出本文计算的类氢到类硼 Hg 离子的能级和波函数是相当准确和可靠的。

图 3(a)(b)(c)分别给出了在实验分辨即半高全宽(FWHM)为 70 eV 下,本文计算的 Hg^{75+...78+} 离子的 KLL 双电子复合截面在不同共振能量区域随电子能量的变化曲线,并与 González Martínez 等人^[12]的高精度实验结果作了比较。可以看出,除 B_1 激发态共振峰的线型之外,本文得到的各离化度离子不同中间双激发态的 DR 共振峰的位置和线型都与实验结果符合得很好。实验中观测到类硼 Hg 离子 B_1 激发态的 DR 共振峰的线型表现出较明显的不对称性,这是由 B_1 态共振附近双电子复合与辐射复合之间的量子干涉效应所引起的结果。

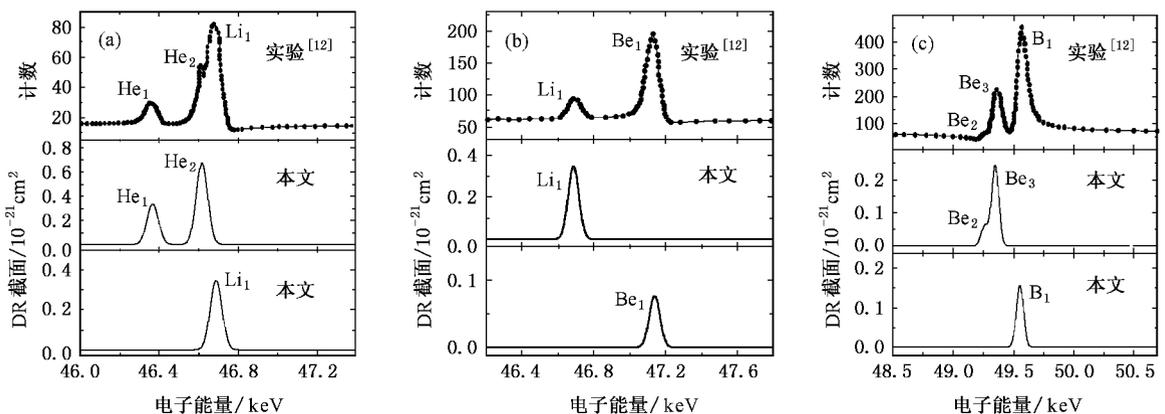


图 3 类氢到类硼 Hg 离子双电子复合截面与实验结果的比较

3.2. 高离化态 $U^{87+...90+}$ 离子的双电子复合

铀是自然界中最重的元素,相对论效应、Breit 效应、QED 效应以及电子关联效应等都对高离化态 U 离子的原子参数有非常大的影响。因此,有关 U

离子的实验研究也就成了检验不同理论计算结果的一个很好途径。同时,对于高离化态 U 离子的系统理论研究也可以为进一步的高精度实验研究提供理论依据和支持。

在高离化态 Hg 离子的双电子复合过程的理论

研究中,我们系统地考虑了相对论效应、Breit 效应和 QED 效应对能级和波函数影响,得到的结果与已有的理论和实验结果符合得很好,这说明所采用的计算模型是正确且合理的. 本文用该计算模型进一步详细地研究了类氦到类硼 U 离子的双电子复合过程,并与 Knapp 等人^[10]的实验结果和 Pindzola 等人^[24-25]的部分理论结果进行了比较.

表 2 给出了本文计算得到的高离化态类氦到类硼 U 离子中间双激发态的共振能、总线宽 Γ_j 和 KLL 双电子复合共振强度 S_{ij} , 并与早期的 Knapp 等人^[10]

的实验结果和 Pindzola 等人^[25]的理论结果作了比较. 本文中 U 离子中间双激发态的标记采用了与 Hg 离子完全相同的方式. 对于共振能,从表中可看出除 Li_3 态(同 Hg 离子类似,本文的结果比实验值偏小 26 eV)之外,本文计算的类氦和类铍 U 离子的结果与 Pindzola 等人^[25]的理论结果差别分别在 1—13 eV 和 1 eV 以内. 同时,本文对不同离化度离子的计算结果与 Knapp 等人^[10]的实验结果差别在 3—15 eV 以内,符合得较好.

表 2 类氦-类硼铀离子的中间双激发态的共振能、总线宽 Γ_j 和 KLL 双电子复合共振强度 S_{ij}

初态	双激发态	标记	共振能/keV			Γ_j /eV	DR 强度/ 10^{-21} cm ² eV
			本文	理论 ^[25]	实验 ^[10]	本文	本文
$[1s^2]$	$[1s2s^2]_{1/2}$	He ₁	63.050	63.063		0.8	25.00
	$[(1s2s)2p_{1/2}]_{1/2}$	He ₂	63.379	63.389		6.3	55.86
	$[(1s2s)2p_{3/2}]_{1/2}$	He ₃	67.703	67.702	67.693 ^{a)}	8.3	27.56
	$[(1s2p_{1/2})2p_{3/2}]_{1/2}$	He ₄	67.778	67.789		26.8	10.16
	$[(1s2s)2p_{3/2}]_{3/2}$	He ₅	67.703	67.702		8.3	27.56
	$[1s(2p_{3/2})^2]_{1/2}$	He ₆	71.964	71.975		8.8	12.30
$[1s^22s]_{1/2}$	$[1s2s^22p_{1/2}]_1$	Li ₁	63.433			12.8	33.58
	$[(1s2s)2p_{1/2}]_{3/2}2p_{3/2}]_1$	Li ₂	67.911			27.0	9.48
	$[(1s2s)2p_{1/2}]_{3/2}2p_{3/2}]_1$	Li ₃	67.887		67.913 ^{a)}	40.2	0.83
	$[(1s2s)2p_{1/2}]_{1/2}2p_{3/2}]_1$	Li ₄	68.144		68.147 ^{a)}	23.9	7.75
	$[(1s2s)2p_{1/2}]_{3/2}2p_{3/2}]_1$	Li ₅	67.775			11.3	11.49
	$[(1s2s)(2p_{3/2})^2]_1$	Li ₆	72.042			8.9	7.35
$[1s^22s^2]_1$	$[1s2s^2(2p_{1/2})^2]_{1/2}$	Be ₁	63.997			18.0	4.84
	$[(1s2s^22p_{1/2})2p_{3/2}]_{1/2}$	Be ₂	68.148	68.147	68.160 ^{a)}	19.6	2.92
	$[(1s2s^22p_{1/2})2p_{3/2}]_{3/2}$	Be ₃	68.275	68.274	68.280 ^{a)}	26.9	9.58
	$[(1s2s^22p_{1/2})2p_{3/2}]_{1/2}$	Be ₄	68.129	68.129		12.2	19.64
	$[1s2s^2(2p_{3/2})^2]_{1/2}$	Be ₅	72.377			9.1	10.99
$[1s^22s^22p_{1/2}]_{1/2}$	$[1s2s^2(2p_{1/2})^22p_{3/2}]_1$	B ₁	68.478		68.493 ^{a)}	51.4	8.47
	$[1s2s^2(2p_{1/2})^22p_{3/2}]_1$	B ₂	68.406			17.9	9.85
	$[1s2s^2(2p_{1/2})^22p_{3/2}]_1$	B ₃	68.478			51.4	8.47
	$[(1s2s^22p_{1/2})(2p_{3/2})^2]_1$	B ₄	72.516			20.7	6.31

a) 根据文献 [10] 中的共振峰位置得到.

图 4 给出了在半高全宽(FWHM)为 120 eV 下, 本文计算的 $U^{90+ \dots 87+}$ 离子的 $KL_{12}L_3$ 共振区域双电子复合截面随电子能量的变化曲线. 其中最上面的图

是 Knapp 等人^[10]的实验观测结果, 下图是本文计算得到的不同离化度离子的结果. 从图中可看出, 各离化态离子在 $KL_{12}L_3$ 共振附近的 DR 截面的共振峰

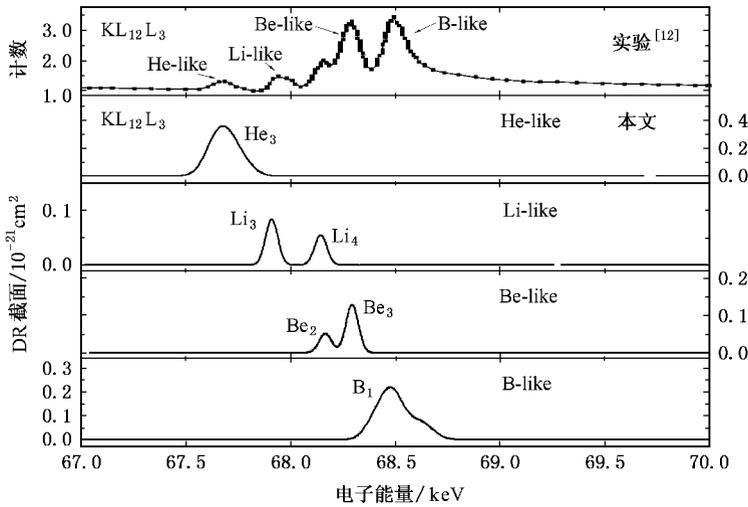


图 4 类氢到类硼 U 离子双电子复合截面与实验结果的比较

位置和线型都与实验结果符合得较好。同时,由于 Knapp 等人^[10]的实验分辨有限,实验结果并没有对某一离化度离子的共振峰给予辨认,在这里本文依据详细的计算结果对其进行了标记,指认了实验中的共振峰所对应的激发态,如图中所示。对于表 2 给出的中间双激发态的总线宽和共振强度,尽管目前还没有看到相关的实验报道结果,但期望我们的理论结果能对将来的高精度实验工作提供一定的参考。

4. 结 论

总之,在 MCDF 理论框架下,利用近期发展的研究双电子复合过程的相对论组态相互作用计算程序,系统地研究了高离化态 Hg 和 U 离子的内壳层电子激发的 KLL 双电子复合过程。结果表明,Breit

效应和 QED 效应对高离化态重离子的双电子复合过程的基态和中间双激发态能级都有着显著的贡献。因此,理论研究高离化态重离子内壳层电子激发的双电子复合过程时,必须要系统地考虑 Breit 效应和 QED 效应的影响。本文得到的类氢到类硼 Hg 离子的共振能与德国 Heidelberg 的 EBIT 上得到的实验及其理论结果相比,差别在 0—8 eV 以内,符合得很好,有些中间双激发态(如 $Be_{2,3,4}$ 态和 $B_{1,2}$ 态等)的共振能更接近实验值。同时,本文得到的高离化态类氢到类硼 U 离子的 DR 共振峰的位置和线型与 LLNL 的 Super-EBIT 上得到的实验结果符合得较好。而对于类氢到类硼 U 离子中间双激发态的总线宽和双电子复合共振强度,目前得到的数据还没有相应的实验结果进行比较,这些数据的可靠性将有待于进一步的双电子复合实验的验证。

- [1] Zhang D H, Dong C Z, Xie L Y, Ding X B, Fu Y B 2006 *Acta. Phys. Sin.* **55** 112 (in Chinese) [张登红、董晨钟、谭录有、丁晓彬、符彦飙 2006 物理学报 **55** 112]
- [2] Savin D W, Laming J M 2002 *Astrophys. J.* **556** 1166
- [3] Yan J, Li P, Liu C L, Qiu Y B, Fang Q Y 2001 *Chin. Phys.* **10** 1124
- [4] Dong C Z, Zou Y, Wang J G, Li J M 1995 *Acta. Phys. Sin.* **44** 1712 (in Chinese) [董晨钟、邹宇、王建国、李黎明 1995 物理学报 **44** 1712]

- [5] Kilgus G, Habs D, Schwalm D, Wolf A 1992 *Phys. Rev. A* **46** 5730
- [6] DeWitt D R, Schneider D, Chen M H, Clark M W, McDonald W J, Schneider M B 1992 *Phys. Rev. Lett.* **68** 1694
- [7] Schneider M B, Knapp D A, Chen M H, Schofield H J, Beiersdorfer P, Bennett C L, Henderson J R, Marrs R E 1992 *Phys. Rev. A* **45** R1291
- [8] Ali R, Bhalla C P, Cocks C L, Schulz M, Stockli M 1991 *Phys. Rev. A* **44** 223

- [9] Beiersdorfer P , Phillips T W , Wong L K , Marrs R E , Vogel D A 1992 *Phys. Rev. A* **46** 3812
- [10] Knapp D A , Beiersdorfer P , Chen M H , Scofield J H , Schneider D 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 54
- [11] Brandau C , Kozhuharov C , Müller A , Beckert K , Beller P , Bosch F , Böhm S , Currell F J , Franzke B , Gumberidze A , Harman Z , Jacobi J , Mokler P H , Nolden F , Scheid W , Schippers S , Schmidt E W , Spillmann U , Stachura Z , Steck M , Stöhlker Th 2005 *GSI Scientific Report* , **GSI2005-1** 201
- [12] González Martínez A J , Crespo López-Urrutia J R , Braun J , Brenner G , Bruhns H , Lapiere A , Mironov V , Soria Orts R , Tawara H , Trinczek M , Ullrich J 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 203201
- [13] González Martínez A J , Crespo López-Urrutia J R , Braun J , Brenner G , Bruhns H , Lapiere A , Mironov V , Soria Orts R , Tawara H , Trinczek M , Ullrich J , Artemyev A N , Harman Z , Jentschura U D , Keitel C H , Scofield J H , Tupitsyn I I 2006 *Phys. Rev. A* **73** 52710
- [14] Harman Z , Tupitsyn I I , Artemyev A N , Jentschura U D , Keitel C H , Crespo López-Urrutia J R , González Martínez A J , Tawara H , Ullrich J 2006 *Phys. Rev. A* **73** 52711
- [15] Grant I P , Mckenzie B J , Norrington P H 1980 *Compt. Phys. Commun.* **21** 207
- [16] Parpia F A , Fischer C F , Grant I P 1996 *Compt. Phys. Commun.* **94** 249
- [17] Dyall K G , Grant I P , Johnson C T , Parpia F A , Plummer E P 1989 *Comput. Phys. Commun.* **55** 425
- [18] Grant I P 1974 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **7** 1458
- [19] Wang J G , Chang T Q , Dong C Z , Kato T 1999 *Eur. Phys. J. D* **5** 167
- [20] Fritsche S , Fischer C F , Dong C Z 2000 *Compt. Phys. Commun.* **124** 2340
- [21] Fritsche S , Aksela H , Dong C Z , Heinämäki S , Sienkiewicz J E 2003 *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **205** 93
- [22] Dong C Z , Zhang D H , Stöhlker Th , Fritzsche S , Fricke B 2006 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **39** 3121
- [23] González Martínez A J 2005 *Ph. D. dissertation* (Ruperto-Carola University of Heidelberg)
- [24] Pindzola M S , Badnell N R 1990 *Phys. Rev. A* **42** 6526
- [25] Pindzola M S , Robicieux F J 1995 *Phys. Rev. A* **52** 420

Theoretical study on the dielectronic recombination of highly charged mercury and uranium ions^{*}

Shi Ying-Long¹⁾ Dong Chen-Zhong^{1)†} Zhang Deng-Hong¹⁾ Fu Yan-Biao¹⁾

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

2) (Center of Theoretical Nuclear Physics , National Laboratory of Heavy Ion Accelerator of Lanzhou , Lanzhou 730000 , China)

(Received 19 February 2007 ; revised manuscript received 11 May 2007)

Abstract

Based on the multiconfiguration Dirac-Fock method , with the recently developed program for the calculation of cross section of dielectronic recombination (DR) , the KLL DR process of highly charged mercury and uranium ions from helium-like to boron-like have been systematically studied. For Hg ions , the contributions to the level of doubly excited state from Breit effect and quantum electrodynamic (QED) effect , KLL DR resonant energies , total line width and corresponding DR resonant strength have been calculated and analyzed. A good overall agreement was found between the present calculations and the previous theoretical and experimental result. Based on the calculation of Hg ions , the KLL DR process of highly charged uranium ions was studied theoretically. The comparison of present results with the other theoretical and experimental results has been made.

Keywords : dielectronic recombination , MCDF method

PACC : 3120B , 3480L

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10434100 , 10774122) , the Foundation of Center of Theoretical Nuclear Physics of National Laboratory of Heavy Ion Accelerator of Lanzhou , and the Foundation of Northwest Normal University (Grant No. NWNU-KJXGC-03-21).

[†] E-mail : dongcz@nwnu.edu.cn