

类锂离子双电子复合过程中辐射光子角分布和极化特性的理论研究*

王金霞¹⁾ 师应龙¹⁾ 张登红^{1)†} 颌录有¹⁾ 董晨钟¹⁾²⁾

1) (甘肃省原子分子物理与功能材料重点实验室, 西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730070)

2) (西北师范大学与中科院近代物理研究所极端环境原子分子物理实验室, 兰州 730070)

(2013年8月4日收到; 2013年9月5日收到修改稿)

基于多组态 Dirac-Fock 方法和密度矩阵理论, 本文详细计算了高电荷态类锂离子 ($26 \leq Z \leq 92$) KLL 双电子复合过程中, 自由电子被共振俘获到中间双激发态 $1s2s^22p_{3/2}J=1$ 的磁子能级截面以及该双激发态的取向参数, 进而得到了此激发态向基态电偶极辐射跃迁 $1s2s^22p_{3/2}J=1 \rightarrow 1s^22s^2J=0$ 所发出光子的角分布和极化度, 重点讨论了 Breit 相互作用对相关物理量的影响. 研究表明, Breit 相互作用极大地改变了中间双激发态 $1s2s^22p_{3/2}J=1$ 不同磁子能级的截面, 从而导致了随后退激发放出光子的角分布和极化特性的显著变化.

关键词: 角分布和极化特性, 多组态 Dirac-Fock 方法, 密度矩阵理论

PACS: 34.80.Lx, 31.30.J-, 32.30.Rj

DOI: 10.7498/aps.62.233401

1 引言

在电子与离子碰撞中, 离子俘获自由电子的同时, 其某一束缚电子被激发到较高的能级, 从而形成中间双激发态, 如果此双激发态通过辐射退激而达到稳态, 这个过程就称为双电子复合 (dielectronic recombination) 过程. 双电子复合是各种实验室和天体等离子体中非常重要的过程, 尤其对热等离子体中的电荷态布居和所产生的 X 射线分布都有着重要的影响, 而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工具^[1,2]. 因此, 双电子复合过程及其相关性质一直是人们感兴趣的研究课题.

在双电子复合过程中, 入射的电子束或离子束对于整个碰撞体系来说具有一个特定的方向或者说具有对方向的偏向性, 这导致了共振俘获所形成的中间双激发态的磁子能级布居一般是非统计分布的 (即取向的), 这将导致从该激发态辐射衰变到

低能态放出的光子通常具有各向异性的角分布和线性极化的特性. 通过对辐射谱线角分布或极化特性的研究, 不仅能为等离子体特性诊断和光谱模拟等提供重要的科学依据, 而且还可以更详细的揭示原子内部的电子结构及散射过程中的各种动力学信息, 这使得双电子复合过程中辐射光子的角分布和极化特性成为了目前人们最感兴趣的研究领域之一^[3-8]. 实际上, 各种碰撞动力学过程中所辐射光子的角分布行为或极化特性, 也为分析高电荷态离子强库仑场中电子与电子间相互作用提供了非常重要的研究途径. 上世纪末, Chen 和 Scolfield 等^[9] 研究了相对论效应对类氢离子双电子复合过程中辐射光子角分布和极化特性的影响, 发现在非相对论情况下光子的角分布和极化度与原子序数无关, 而在考虑了相对论效应后, 其角分布和极化度对原子序数有很强的依赖性. 近年来, 随着位置灵敏晶体探测器技术的不断改进^[10], 这方面的研究已变得切实可行, 这就需要更多、更细致的理论研究来帮助选取碰撞体系并解释其实验结果. 2009

* 国家自然科学基金 (批准号: 11274254, 91126007, 11147018)、甘肃省自然科学基金 (批准号: 1010RJZA014) 和西北师范大学科技创新工程科研骨干培育项目资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: zhangdh@nwnu.edu.cn

年, Fritzsche 等^[11]研究了电子间的磁相互作用和延迟效应(即 Breit 相互作用)对高电荷态类锂离子双电子复合过程中共振双激发态 $1s2s^22p_{1/2}J=1$ 所辐射谱线角分布和极化特性的影响,发现 Breit 相互作用使该谱线光子发光模式发生了根本性的变化. 而 Wu 等^[12]则研究了在电子碰撞激发过程中, Breit 相互作用对同样的激发态 $1s2s^22p_{1/2}J=1$ 所辐射光子极化特性的影响,并与 Fritzsche 等^[11]关于双电子复合过程的结论进行了比较,发现 Breit 相互作用在不同过程中的影响有很大的不同. 2012 年, Fritzsche 的理论预言被 Hu 等^[13]在 Tokyo-EBIT 上通过两种不同方式测量该条谱线的角分布而予以证实. 2013 年, Shi 等^[14]研究了类氢离子双电子复合过程中产生 X 射线的角分布和极化特性. 近来, 我们^[15]在有关类锂 Xe 离子 KLL 双电子复合过程的研究中发现, Breit 相互作用对另一双激发态 $1s2s^22p_{3/2}J=1$ 双电子复合强度的贡献达到了 20%, 可以预期 Breit 相互作用对其角分布和极化特性应有非常重要的影响. 而实验上确定双电子复合强度也需要理论提供准确的极化角修正因子^[16]. 因此, 有必要做进一步的研究.

本文利用多组态 Dirac-Fock (MCDF) 方法和密度矩阵理论, 计算了类锂离子由初态 $1s^22s$ 共振俘获电子形成中间双激发态 $1s2s^22p_{3/2}J=1$ 的磁子能级俘获截面及该中间双激发态的取向参数, 进而得到了双电子复合过程中电偶极辐射跃迁 $1s2s^22p_{3/2}J=1 \rightarrow 1s^22s^2J=0$ 放出光子的角分布和线性极化度. 文中重点分析了 Breit 相互作用对双激发态磁子能级布居及随后辐射谱线特性的影响.

2 理论方法

双电子复合是电子与离子非弹性碰撞中发生的共振辐射复合过程, 可以表示为

$$A^{n+}(\alpha_i j_i) + e^-(\epsilon l j) \rightarrow A^{(n-1)+**}(\alpha_d j_d) \rightarrow A^{(n-1)+*}(\alpha_f j_f) + \gamma. \quad (1)$$

在这一过程中, 一个具有特定能量的自由电子与电离度为 n 的离子 A^{n+} 碰撞, A^{n+} 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, 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 $A^{(n-1)+}$ 离子的一个双电子激发的自电离态 $A^{(n-1)+**}$, 随后该双电子激发态通过辐射光子而变成 $A^{(n-1)+}$ 离子.

在这一过程中, 中间双激发态的磁子能级布居一般是非统计分布的, 即取向的. 在密度矩阵理论中^[17], 激发态磁子能级的布居一般用约化统计张量或取向参数 $A_{k0}(\alpha_d J_d)$ 来描述, 该参数可以用磁子能级共振俘获截面 σ_{Md} 来表示. 例如, 对于激发态 $1s2s^22p_{3/2}J=1$, 它的取向参数只有 A_{20} 是非零项^[18], 可表述为

$$A_{20}(J_d=1) = \sqrt{2} \frac{\sigma(1, \pm 1) - \sigma(1, 0)}{2\sigma(1, \pm 1) + \sigma(1, 0)}, \quad (2)$$

其中, $\sigma(1, 0)$ 和 $\sigma(1, \pm 1)$ 是从基态到中间双激发态不同磁子能级 $M_d=0$ 和 $M_d=\pm 1$ 的共振俘获截面.

当具有一定能量 ϵ_i 的自由电子与离子发生碰撞时, 从初态 $\beta_i J_i M_i$ 俘获电子到中间态 $\beta_d J_d M_d$ 各磁子能级上的截面上可以表示为^[19]

$$\sigma_{ei}^{\text{cap}}(\beta_i J_i M_i - \beta_d J_d M_d) = S^{\text{cap}}(\beta_i J_i M_i - \beta_d J_d M_d) \delta(\epsilon_i - \epsilon_d), \quad (3)$$

其中

$$\begin{aligned} & S^{\text{cap}}(\beta_i J_i M_i - \beta_d J_d M_d) \\ &= \frac{2\pi a_0^2}{k_i^2} \sum_{l_i, l'_i, j_i, j'_i, m_{s_i}} (i)^{l_i - l'_i} [(2l_i + 1)(2l'_i + 1)]^{1/2} \\ & \times \exp[i(\delta_{k_i} - \delta_{k'_i})] C\left(l_i \frac{1}{2} 0 m_{s_i}; j_i m_i\right) \\ & \times C\left(l'_i \frac{1}{2} 0 m_{s_i}; j'_i m_i\right) C(J_i j_i M_i m_i; J_d M_d) \\ & \times C(J_i j'_i M_i m_i; J_d M_d) R(\gamma_d, \gamma_i) R(\gamma'_d, \gamma'_i), \quad (4) \end{aligned}$$

这里, 下标 i, d 分别表示双电子复合过程中初态和中间双激发态; a_0 是玻尔半径; C 's 是 Clebsch-Gordan 系数; $\gamma_i = \epsilon_i l_i j_i \beta_i J_i J M$, $\gamma_d = \epsilon_d l_d j_d \beta_d J_d J M$; J, M 分别是相应的俘获体系的总角动量及其 Z 分量的量子数, β_i, β_j 表示除总角动量 J 及 Z 分量 M 之外用来确定离子初态和末态的所有其他量子数; $m_{s_i}, l_i, j_i, m_{l_i}$ 和 m_i 分别为入射电子 e_i 的自旋角动量、轨道角动量、总角动量及 Z 分量的量子数, δ_{k_i} 是连续电子的相因子, k_i 是入射电子的相对论波数; R 是俘获矩阵元

$$R(\gamma_i, \gamma_d) = \left\langle \Psi_{\gamma_d} \left| \sum_{p, q, p < q}^{N+1} V \right| \Psi_{\gamma_i} \right\rangle, \quad (5)$$

式中电子与电子间相互作用算符 V 的表达式为

$$\begin{aligned} V = V^C + V^B = & \sum_{i < j} \left[\frac{1}{r_{ij}} - (\alpha_i \cdot \alpha_j) \frac{\cos(\omega r_{ij})}{r_{ij}} \right. \\ & \left. + (\alpha_i \cdot \nabla_i)(\alpha_j \cdot \nabla_j) \frac{\cos(\omega r_{ij}) - 1}{\omega^2 r_{ij}} \right], \quad (6) \end{aligned}$$

上式中包含了库仑排斥和 Breit 相互作用, 右侧第二项和第三项表示电子间的磁相互作用和延迟效应, ω 是电子间交换虚光子的频率, α_i 是第 i 个粒子的 Dirac 矩阵.

共振俘获所形成中间双激发态的磁子能级的非统计布居, 将导致辐射跃迁放出的光子具有各向异性角分布和线性极化特性, 因此光子的这些特性都与取向参数紧密相关. 对于电偶极辐射跃迁, 双电子复合过程中辐射光子的角分布公式为^[18,20]

$$W_{E1}(\theta) \propto 1 + \beta_2 P_2(\cos \theta), \quad (7)$$

其中

$$\begin{aligned} \beta_2 &\equiv \beta_2(\alpha_d J_d, \alpha_f J_f) \\ &= f_2(\alpha_d J_d, \alpha_f J_f) A_{20}(\alpha_d J_d) \end{aligned} \quad (8)$$

是各向异性参数, $P_2(\cos \theta)$ 是二阶勒让德多项式, θ 是发出光子与入射电子之间的夹角. $f_2(\alpha_d J_d, \alpha_f J_f)$ 是辐射跃迁过程的结构函数, 通常它依赖于具体的电子结构和辐射跃迁过程. 对于纯的电偶极跃迁, 结构函数不依赖于束缚态到束缚态的跃迁振幅, 而是简化成一个仅仅与跃迁初末态总角动量量子数有关的几何因子.

如果在垂直于电子束的方向观察 ($\theta = 90^\circ$), 线性极化度的公式可表达为^[21]

$$\begin{aligned} P(\theta = 90^\circ) &= \frac{3\beta_2}{\beta_2 - 2} \\ &= \frac{3f_2(\alpha_d J_d \rightarrow \alpha_f J_f) A_{20}(\alpha_d J_d)}{f_2(\alpha_d J_d \rightarrow \alpha_f J_f) A_{20}(\alpha_d J_d) - 2}. \end{aligned} \quad (9)$$

实验上可以通过测量辐射跃迁谱线强度来得

到其线性极化度, 其定义为^[22]

$$P = \frac{I_{\parallel} - I_{\perp}}{I_{\parallel} + I_{\perp}}, \quad (10)$$

其中, I_{\parallel} 和 I_{\perp} 分别是辐射光子电矢量平行和垂直于电子束方向的光强.

本文中有关原子态波函数和能级的计算利用了 MCDF 理论框架下的 GRASP92 程序, 辐射衰变率和 Auger 衰变率的计算利用了 REOS99^[23] 和 AUGER 程序^[24], 磁子能级截面的计算则是使用了近年来我们发展起来的程序^[25] 实现的. 有关 MCDF 理论方法及相关程序在很多文献中已有详细的描述^[26-30], 这里不再赘述.

3 结果与讨论

表 1 给出了 Fe^{23+} , Xe^{51+} , Hg^{77+} , U^{89+} 离子共振俘获电子形成中间双激发态 $1s2s^2 2p_{1/2} J = 1$ 和 $1s2s^2 2p_{3/2} J = 1$ 的 Auger 跃迁能及总的 Auger 跃迁概率、辐射跃迁能和库仑规范下总的辐射跃迁概率及辐射分支比, 并与部分已有的计算结果^[16,31,32] 做了详细的比较. 可以看出, 本文的计算结果与已有文献中的结果符合的比较: 跃迁能之间的最大相对误差仅为 1%. 从表 1 的结果还可以看出, 随着离子核电荷数的增大, Auger 跃迁概率和辐射跃迁概率都在增大. 并且, 中间双激发态 $1s2s^2 2p_{3/2} J = 1$ 的辐射分支比大于中间双激发态 $1s2s^2 2p_{1/2}$ 的辐射分支比, 说明中间双激发态 $1s2s^2 2p_{3/2} J = 1$ 向基态辐射所放出光的强度更强, 在实验上更容易测得其谱线.

表 1 类钡 Fe^{22+} , Xe^{50+} , Hg^{76+} , U^{88+} 离子 Auger 和辐射退激能量、总的跃迁概率和辐射分支比 (其中 A(B) 表示 $A \times 10^B$)

元素	组态	能级	Auger 衰变				辐射衰变				辐射分支比
			能量/keV		$A^a/10^{12}\text{s}^{-1}$		能量/keV		$A^r/10^{12}\text{s}^{-1}$		
			本文	文献	本文	文献	本文	文献	本文	文献	
Fe	$1s2s^2 2p_{1/2}$	3P_1	4.641	4.647 ^{a)}	2.19(2)	1.92(2) ^{a)}	6.598	6.597 ^{a)}	4.98(1)	4.68(1) ^{a)}	0.183
	$1s2s^2 2p_{3/2}$	1P_1	4.673	4.678 ^{a)}	1.53(2)	1.38(2) ^{a)}	6.628	6.627 ^{a)}	4.45(2)	4.44(2) ^{a)}	0.744
Xe	$1s2s^2 2p_{1/2}$	3P_1	20.452	20.456 ^{b)}	3.02(2)		30.090		2.98(3)		0.907
	$1s2s^2 2p_{3/2}$	1P_1	20.851	20.862 ^{b)}	2.44(2)		30.495		6.76(3)		0.965
Hg	$1s2s^2 2p_{1/2}$	3P_1	46.687	46.688 ^{c)}	5.27(2)		70.058		1.65(4)		0.969
	$1s2s^2 2p_{3/2}$	1P_1	48.906		4.60(2)		72.308		3.01(4)		0.985
U	$1s2s^2 2p_{1/2}$	3P_1	63.435	63.433 ^{c)}	7.58(2)		96.154		2.97(4)		0.975
	$1s2s^2 2p_{3/2}$	1P_1	67.724		6.73(2)		100.512		5.06(4)		0.987

a) 文献 [31], b) 文献 [16], c) 文献 [32].

为了说明本文计算的体系波函数和能级的可靠性及对各种效应考虑的合理性, 图 1 给出了高电荷态类锂离子双电子复合形成中间双激发态 $1s2s^22p_{1/2}J=1$ 的取向参数和电偶极辐射跃迁谱线 $1s2s^22p_{1/2}J=1 \rightarrow 1s^22s^2J=0$ 的线性极化度随核电荷数的变化情况, 并与 Fritzsche 等^[11] 的计算结果做了比较. 图中 C+B 表示包括 Breit 相互作用后的计算结果, C 表示不包括 Breit 相互作用时的计算结果. 可以看出, 无论是包括 Breit 相互作用还是不包括 Breit 相互作用的情形, 本文的计算结果都与 Fritzsche 等人的结果符合得很好. 从图中可以看出, 在不包括 Breit 相互作用时, 中间双激发态 $1s2s^22p_{1/2}J=1$ 的取向参数为正值, 随核电荷数的增加缓慢而单调的减小, 谱线 $1s2s^22p_{1/2}J=1 \rightarrow 1s^22s^2J=0$ 的极化度则为负值, 且随核电荷数的增大而缓慢的增加. 这表明在不包括 Breit 相互作用时, 磁子能级 $M_d = \pm 1$ 的布居始

终大于磁子能级 $M_d = 0$ 的布居; 而在包括 Breit 相互作用后, 其取向参数和线性极化度的值随核电荷数而急速的变化, 甚至在 Z 等于 73 时改变了符号, 取向参数由正值变为负值, 说明磁子能级 $M_d = 0$ 的布居大于磁子能级 $M_d = \pm 1$ 的布居, 线性极化度则由负值而变为正值.

图 2 给出了包括和不包括 Breit 相互作用时, 高电荷态类锂离子双电子复合形成激发态 $1s2s^22p_{3/2}J=1$ 的磁子能级 $M_d = \pm 1$ 和 $M_d = 0$ 的截面和取向参数随核电荷数的变化曲线. 与图 1 相比较发现, 激发态 $1s2s^22p_{3/2}J=1$ 的取向参数随核电荷数的变化是非单调的. 在不包括 Breit 相互作用时, 激发态 $1s2s^22p_{3/2}J=1$ 磁子能级 $M_d = \pm 1$ 的截面明显大于 $M_d = 0$ 的截面, 且随核电荷数的增加磁子能级 $M_d = \pm 1$ 的截面先增大, 在 $Z = 34$ 时达到最大值然后随核电荷数的增加逐渐减小, 而磁子能级 $M_d = 0$ 的截面几乎为零, 从 (2) 式中可以

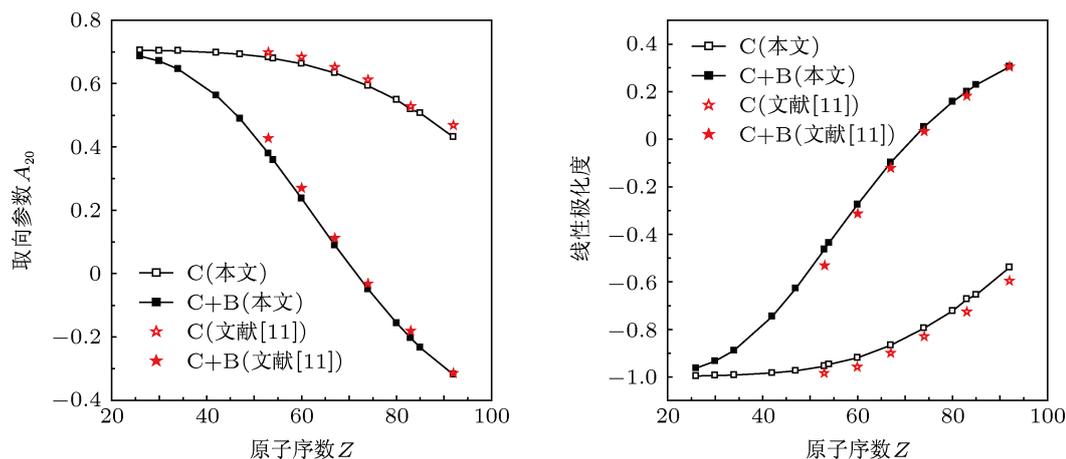


图 1 中间双激发态 $1s2s^22p_{1/2}J=1$ 的取向参数及跃迁谱线 $1s2s^22p_{1/2}J=1 \rightarrow 1s^22s^2J=0$ 的线性极化度

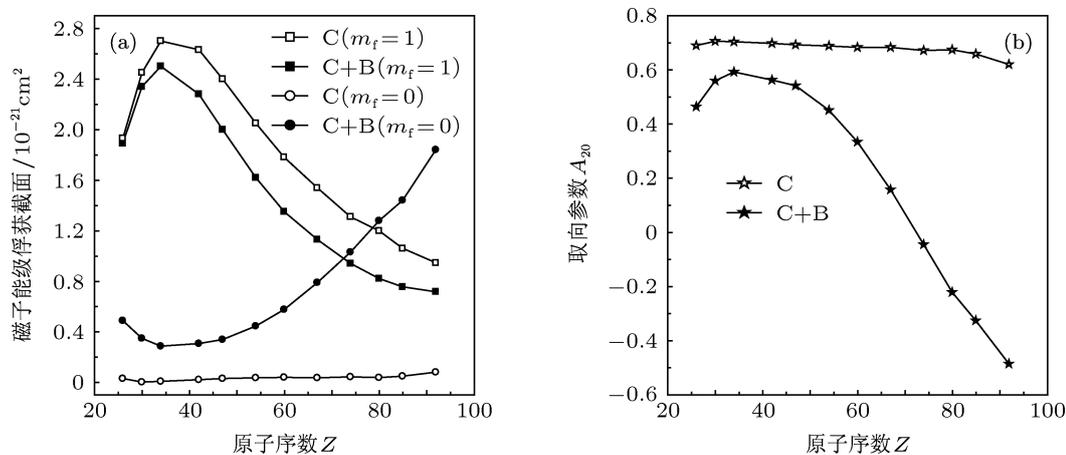


图 2 中间双激发态 $1s2s^22p_{3/2}J=1$ 的磁子能级俘获截面和取向

看出, 如果 $\sigma(1,0)$ 等于 0, 则取向参数为常数. 因此, 在图 2(b) 中, 不包括 Breit 相互作用时的取向参数随核电核数的变化曲线几乎为平行于 x 轴、大约为 0.708 的一条直线. 在考虑了 Breit 相互作用后, 激发态 $1s2s^22p_{3/2}J=1$ 磁子能级 $M_d = \pm 1$ 的截面减小了, 而磁子能级 $M_d = 0$ 的截面显著的增大. 因此, Breit 相互作用改变了激发态 $1s2s^22p_{3/2}J=1$ 不同磁子能级的布居, 且随着核电荷数的增大, 这种影响越加显著. 随核电核数 Z 的增加, 磁子能级 $M_d = \pm 1$ 的截面迅速的增大, 而 $M_d = 0$ 上的截面则逐渐的减小, 在 $Z = 34$ 它们分别到达极大值和极小值. 因此, 取向参数逐渐增大到极大值. 当 $Z > 34$ 后, 磁子能级 $M_d = \pm 1$ 的截面逐渐减小, 而 $M_d = 0$ 上的截面则逐渐增大, 相应的取向参数则逐渐减小在核电荷数大约为 73 时, 磁子能级 $M_d = 0$ 和 $M_d = \pm 1$ 的截面相等, 相应的取向参数为 0. 在

$Z > 73$ 时, 磁子能级 $M_d = 0$ 的截面甚至超过了 $M_d = \pm 1$ 的截面, 因而取向参数变为负值.

图 3 给出了以 Xe^{51+} , Hg^{77+} , U^{89+} 离子为例, 双电子复合过程中电偶极辐射跃迁 $1s2s^22p_{3/2}J=1 \rightarrow 1s^22s^2J=0$ 放出光子的角分布. 在仅考虑库仑相互作用时, Xe^{51+} , Hg^{77+} , U^{89+} 离子辐射跃迁发出光子的方向倾向于沿入射电子共线的方向 ($\theta = 0^\circ$ 或 $\theta = 180^\circ$). 当考虑了 Breit 相互作用后, Xe^{51+} 发出沿入射电子共线方向的光子有所减弱, 沿垂直于入射电子方向的光子有所增强, Hg^{77+} 发出沿入射电子共线方向的光子明显减弱, 沿垂直于入射电子方向的光子明显增强, 而 U^{89+} 发出光子的方向明显倾向于沿垂直于入射电子的方向因此随着核电荷数的增加, Breit 相互作用对光子角分布的影响越来越大.

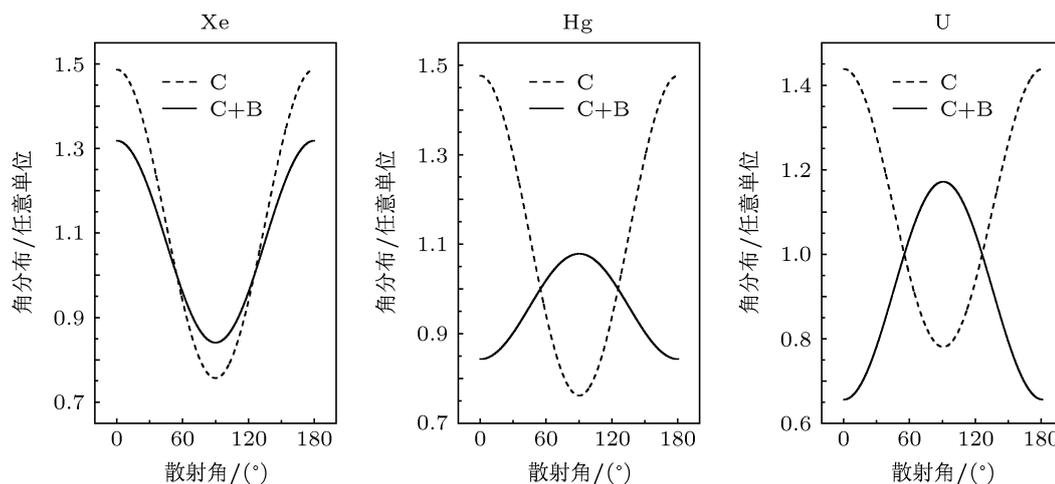


图 3 类铍 Xe^{50+} , Hg^{76+} , U^{88+} 离子电偶极辐射跃迁 $1s2s^22p_{3/2}J=1 \rightarrow 1s^22s^2J=0$ 放出光子的角分布

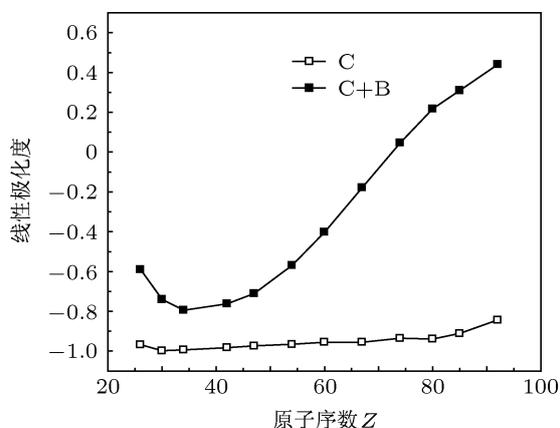


图 4 跃迁谱线 $1s2s^22p_{3/2}J=1 \rightarrow 1s^22s^2J=0$ 的线性极化

对于 ($J = 1 \rightarrow 0$) 特定的电偶极辐射跃迁, 由 (10) 式可知, 中间双激发态 $1s2s^22p_{3/2}J=1$ 的线性

极化度由该双激发态的取向参数决定. 因此, 通过对光子极化的测量, 给人们获知第一步动力学过程形成激发态磁子能级布居的信息提供了很好的路径, 也可以揭示离子不同动力学过程中电子与电子以及电子与光子等相互作用. 图 4 给出了包括和不包括 Breit 相互作用时谱线线性极化度随核电荷数的变化. 从图中可以看出, 只包括库仑相互作用时, 类铍离子辐射跃迁线 $1s2s^22p_{3/2}J=1 \rightarrow 1s^22s^2J=0$ 的线性极化度几乎不随核电核数而变化, 其数值为 -1 , 即光子的极化方向垂直于入射电子方向; 而在包括了 Breit 相互作用后, 光子的极化方向发生了改变: 在 $Z < 34$ 时, 跃迁谱线的线性极化度为负值, 其绝对值随核电荷数的增加而增大, 说明极化方向垂直于入射电子方向, 极化度在增大; 当

$34 < Z < 73$ 时, 极化度仍为负值, 但其绝对值随核电荷数的增加而迅速的减小; 在 $Z = 73$ 时极化度为零, 随后随核电荷数的增加, 光子的极化度变为正值, 即极化方向逐渐平行于入射电子方向.

4 结论

本文研究了高电荷态类锂离子 KLL 双电子复合过程中电偶极辐射跃迁 $1s2s^22p_{3/2}J = 1 \rightarrow 1s^22s^2J = 0$ 放出光子的角分布和极化特性. 重点讨论了电子间 Breit 相互作用对其角分布和极化度的影响. 作为电子间库仑排斥的修正, Breit 相

互作用影响了双电子复合过程形成中间双激发态 $1s2s^22p_{3/2}J = 1$ 的磁量子能级布居, 导致随后各向异性角分布和极化度发生了很大的变化. 在 $Z = 73$ 时, 中间双激发态 $1s2s^22p_{3/2}J = 1$ 的磁量子能级 $M_d = 0$ 和 $M_d = \pm 1$ 截面相等, 对应的该双激发态的取向参数为零, 因此激发态辐射到基态发出光子是各向同性的. 随着位置灵敏固体探测器及 X 射线极化测量技术的不断改善, 这些强的相对论效应的理论预言在储存环或电子束离子阱 (EBIT) 上可以得到证实, 希望本文的计算结果对以后的实验研究有所帮助.

- [1] Burgess A 1964 *Astrophys. J.* **139** 776
- [2] Yang J H, Zhang H, Cheng X L 2010 *Chin. Phys. B* **19** 063201
- [3] Fritzsche S, Kabachnik N M, Surzhykov A 2008 *Phys. Rev. A* **78** 032703
- [4] Matula O, Fritzsche S, Surzhykov A 2012 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **45** 215004
- [5] Ma X, Mokler P H, Bosch F, Gumberidze A, Kozhuharov C, Liesen D, Sierpowski D, Stachura Z, Stöhlker Th, Warczk A 2003 *Phys. Rev. A* **68** 042712
- [6] Wu Z Q, Li Y M, Duan B, Zhang H, Yan J 2009 *Chin. Phys. Lett.* **26** 123202
- [7] Ou W Y, Shen T M, Chen C Y, Roger H, Zou Y M 2005 *Chin. Phys. Lett.* **22** 2248
- [8] Shen T M, Chen C Y, Wang Y S 2007 *Chin. Phys.* **16** 1008
- [9] Chen M H, Scofield J H 1995 *Phys. Rev. A* **52** 2057
- [10] Weber G, Bräuning H, Surzhykov A, Brandau C, Fritzsche S, Geyer S, Hagmann S, Hess S, Kozhuharov C, Martin R, Petridis N, Reuschl R, Spillmann U, Trotsenko S, Winters D F A, Stöhlker Th 2010 *Phys. Rev. Lett.* **105** 243002
- [11] Fritzsche S, Surzhykov A, Stöhlker Th 2009 *Phys. Rev. Lett.* **103** 113001
- [12] Wu Z W, Jiang J, Dong C Z 2011 *Phys. Rev. A* **84** 032713
- [13] Hu Z M, Han X Y, Li Y M, Kato D, Tong X M, Nakamura N 2012 *Phys. Rev. Lett.* **108** 073002
- [14] Shi Y L, Dong C Z, Fritzsche S, Zhang D H, Xie L Y 2013 *Chin. Rev. Lett.* **30** 023402
- [15] Zhang D H, Shi Y L, Jiang J, Dong C Z, Fumihiko K 2012 *Chin. Phys. B* **21** 013402
- [16] Yao K, Geng Z, Xiao J, Yang Y, Chen C, Fu Y, Lu D, Hutton R, Zou Y 2010 *Phys. Rev. A* **81** 022714
- [17] Blum K 1981 *Density Matrix Theory and Applications* (New York: Plenum Press)
- [18] Balashov V V, Grum-Grzhimailo A N, Kabachnik N M 2000 *Polarization and Correlation Phenomena in Atomic Collisions* (New York: Kluwer Academic/Plenum)
- [19] Zhang H L, Sampson D H 2002 *Phys. Rev. A* **66** 042704
- [20] Berezko E, Kabachnik N M 1977 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **10** 2467
- [21] Chen M H, Scofield J H 1995 *Phys. Rev. A* **52** 2057
- [22] Percival I C, Seaton M J 1958 *Philos. Trans. R. Soc. London A* **251** 113
- [23] Fritzsche S, Fischer C F, Dong C Z 2000 *Comput. Phys. Commun.* **124** 340
- [24] Fritzsche S, Aksela H, Dong C Z, Heinäsmäki S, Sienkiewicz J E 2003 *Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B* **205** 93
- [25] Jiang J, Dong C Z, Xie L Y, Wang J G 2008 *Phys. Rev. A* **78** 022709
- [26] Dyall K G, Grant I P, Johnson C T, Parpia F A, Plummer E P 1989 *Comput. Phys. Commun.* **55** 425
- [27] 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** 052711
- [28] Grant I P, McKenzie B J, Norrington P H 1980 *Comput. Phys. Commun.* **21** 207
- [29] Parpia F A, Fischer C F, Grant I P 1996 *Comput. Phys. Commun.* **94** 249
- [30] 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** 052710
- [31] Chen M H 1985 *Phys. Rev. A* **31** 1449
- [32] Shi Y L, Dong C Z, Zhang D H, Fu Y B 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 0088 (in Chinese) [师应龙, 董晨钟, 张登红, 符彦飙 2008 物理学报 **57** 0088]

Theoretical study on angular distribution and polarization characteristics of X-ray emission following dielectronic recombination of lithium-like ions*

Wang Jin-Xia¹⁾ Shi Ying-Long¹⁾ Zhang Deng-Hong^{1)†}
Xie Lu-You¹⁾ Dong Chen-Zhong¹⁾²⁾

1) (Key Laboratory of Atomic and Molecular Physics & Functional Materials of Gansu Province, College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China)

2) (Joint Laboratory of Atomic and Molecular Physics, Northwest Normal University and Institute of Modern Physics of Chinese Academy of Sciences, Lanzhou 730070, China)

(Received 4 August 2013; revised manuscript received 5 September 2013)

Abstract

Based on the multiconfiguration Dirac-Fock method and the theory of density matrix, we have calculated the magnetic sublevel captured cross section of intermediate doubly-excited state $1s2s^22p_{3/2}J = 1$ formed by dielectronic recombination of lithium-like ions ($26 \leq Z \leq 92$). Then, we obtain the angular distribution and linear polarization of X-rays of electric-dipole radiation $1s2s^22p_{3/2}J = 1 \rightarrow 1s^22s^2J = 0$. In this study, emphasis is placed on the effects of the Breit interaction on the relevant physical quantities. We find that the influences of the Breit interaction on the alignment for the capture to the doubly-excited state $1s2s^22p_{3/2}J = 1$ are dramatic, resulting in the remarkable change in the angular distribution and polarization properties of the X-ray emission.

Keywords: angular distribution and polarization degree, MCDF method, density matrix theory

PACS: 34.80.Lx, 31.30.J-, 32.30.Rj

DOI: 10.7498/aps.62.233401

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 11274254, 91126007, 11147018), the Natural Science Foundation of Gansu Province, China (Grant No. 1010RJZA014), and the Foundation of Northwest Normal University.

† Corresponding author. E-mail: zhangdh@nwnu.edu.cn