

# Fe<sup>24+</sup> 离子双电子复合以及和 H<sub>2</sub> 碰撞的共振转移与激发 X 射线发射过程的研究\*

牟致栋<sup>†</sup> 魏琦瑛

(中国矿业大学理学院, 徐州 221008)

(2013 年 11 月 17 日收到; 2014 年 1 月 6 日收到修改稿)

以准相对论 Hartree-Fock 理论为基础, 对 Fe<sup>24+</sup> 离子 KLn ( $n = L, M, N, O, P$ ) 共振激发态可能辐射衰变通道的双电子复合过程的共振强度进行了系统的理论计算研究. 计算了 KLL 共振激发态谱项能级电偶极允许跃迁的共振强度和截面. 在此基础上, 根据已有 H<sub>2</sub> 分子的实验 Compton 轮廓, 进一步计算了能量在 300—800 MeV 范围内, 抛射体 Fe<sup>24+</sup> 离子俘获 H<sub>2</sub> 分子靶电子的 KLn ( $n = L, M, N, O, P$ ) 共振电荷转移与激发 X 射线发射截面. 计算结果与最新实验值或者其他理论计算结果做了对比分析. 研究表明, 对于 Fe<sup>24+</sup> 离子 KLn ( $n = L, M, N, O, P$ ) 的双激发态, K $\alpha$  辐射衰变通道对双电子复合过程的共振强度贡献最大, 是起主导性作用的重要通道. K $\alpha$  辐射衰变 X 射线的波长范围  $\lambda$  为 1.850—1.880 Å, 而非 K $\alpha$  辐射衰变的波长范围  $\lambda$  为 1.460—1.601 Å, 两者共振 X 射线的波长位置并不重叠.

**关键词:** Fe<sup>24+</sup> 离子, H<sub>2</sub> 分子, 共振转移激发, 共振电荷转移与激发 X 射线光子发射截面

**PACS:** 34.50.Fa, 34.70.+e, 34.80.Dp, 32.30.Rj

**DOI:** 10.7498/aps.63.083402

## 1 引言

共振电荷转移与激发 X 射线光子发射 (R-TEX) 是实验等离子体和天文等离子体中十分重要的离子与原子或分子相互作用过程. 众所周知, 这种抛射体离子和靶原子或分子的相互作用实质上是抛射体离子中的电子与靶原子或分子中的电子之间的相互作用. 其相互作用的物理机制可以看成是在同一时刻发生的两步过程: 首先, 抛射体离子俘获靶原子或者分子中的一个束缚较弱的电子, 形成抛射体离子的一个双激发态; 然后, 处于双激发态的离子通过 X 射线光子发射的辐射衰变形成一个亚稳定态, 这一过程称之为 RTEEX 过程. 事实上, 实际的离子与原子或分子的相互作用过程十分复杂<sup>[1-5]</sup>, 例如, 共振电荷转移与激发 (RTE) 过程形成的激发态除了通过上述 RTEEX 过程实现

其稳定衰变外, 也可能通过 RTE 自电离发射电子 (RTEA) 的过程实现其稳定衰变<sup>[6-10]</sup>. 在高温低密度等离子体研究领域, 离子与等离子体中的自由电子相互作用的双电子复合 (DR) 过程同样是人们十分熟知的一种普遍存在的原子过程<sup>[11]</sup>, 显然 DR 过程与 RTEEX 过程极为相似<sup>[12-15]</sup>. 在实验研究中, DR 过程截面的测量主要涉及  $\Delta n = 0$  的内壳层激发, 对于  $\Delta n \neq 0$  的各种激发过程, 由于其截面太小, 目前难以在实验上获得比较准确的实验结果, 而通过对 RTEEX 过程的研究可以弥补 DR 过程的实验和理论研究之不足. 人们对高剥离态 Fe 离子感兴趣的主要原因之一是由于其在天文物理学和等离子体物理学领域有着重要的应用, 尤其是高剥离态 Fe 离子在日冕等离子体和作为杂质在核聚变等离子体中的广泛存在, 通过对于其相关共振过程的研究, 可以为等离子体的温度和密度诊断提供重要方法. 关于 RTEEX 过程, 早在 1981—1982 年由

\* 中央高校基本科研业务费 (批准号: 2013XK04) 资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯作者. E-mail: muzhidong@126.com

Tanis等<sup>[16,17]</sup>首次通过实验得到证实. 1984年<sup>[18]</sup>, 他们又在实验上对100—360 MeV 能量范围Ca<sup>9+</sup>离子和180—460 MeV 能量范围V<sup>9+</sup>离子与靶原子He碰撞的RTEX过程做了全面的实验研究, 指出了RTEX过程与DR过程的相互关系. 1992年, Clark等<sup>[19]</sup>在实验上研究了Fe<sup>9+</sup>离子与H<sub>2</sub>分子碰撞的RTEX过程, 得到了高剥离态抛射体Fe<sup>24+</sup>离子与H<sub>2</sub>分子靶碰撞的KLL激发态X射线产生截面, 其实验值的估计不确定度不超过10%, 实验结果与基于DR过程计算的结果符合得较好. 这一结果表明, 涉及K壳层激发的高剥离态离子的DR截面可以在实验上通过RTEX截面的测量得到预言和验证. 1992年, Beiersdorfer等<sup>[20,21]</sup>利用电子束离子阱(EBIT)实验装置, 首次通过实验观测得到了Fe<sup>24+</sup>离子KLL激发态具体能级之间辐射衰变X射线发射的DR共振强度, 研究报道了K $\alpha$ 衰变对DR共振强度的贡献以及DR伴线与其母线的特征关系, 与前人EBIT实验不同的是, 他们采用了高分辨率晶体光谱仪得到了部分谱项能级态之间的相关共振强度数据, 特别是 $\Delta n = 0$ 的辐射衰变强线的共振强度数据与相关的理论计算结果符合得较好, 而部分中间强度和一些弱线的共振强度实验值与理论值仍然存在着较大的差异. 根据Beiersdorfer等在文献<sup>[20]</sup>中的分析, Fe<sup>24+</sup>离子KLL激发态具体能级之间辐射衰变X射线发射的DR共振强度实验值的估计不确定度为20%, 相对不确定度约13%, 本文认为这是一个可以接受的实验不确定度. 在文献<sup>[20]</sup>实验研究成果的基础上, 2001年, Watanabe等<sup>[22]</sup>利用EBIT装置在实验上获得了KLM, KLN, KLO激发的各分支总的共振强度; 2010年, Kavangh等<sup>[23]</sup>在与文献<sup>[22]</sup>报道的相同EBIT实验装置上研究了数个类He, 类Li, 类Be高剥离态等离子体KLL和KLM激发DR共振过程, 得到了类氦铁离子的KLL和KLM激发的分支总的DR截面的实验结果, 但是, 实验结果和实验值的估计不确定度与文献<sup>[22]</sup>报道的相应结果明显不一致. 2004年, Behar等<sup>[24]</sup>采用投影算符理论方法计算了Fe<sup>24+</sup>离子KLL激发DR过程的能级态之间辐射衰变跃迁的共振强度, 辐射衰变最强线的计算结果与实验值之间存在明显差异. 2006年, Nahar等<sup>[25]</sup>采用Breit-Pauli能量算符的R矩阵方法计算了Fe<sup>24+</sup>离子KLL激发DR过程能级态之间辐射衰变跃迁的共振强度和自电离Auger

电子的能量. 通过对上述文献资料的分析可以看出, 对于高剥离态Fe<sup>24+</sup>离子而言, 尽管DR过程的理论研究十分广泛, 但是, 这些理论计算研究大部分只集中于对KLL共振激发的研究, 而基于准相对论HFR<sup>[26-31]</sup> (Hartree-Fock with relativistic corrections) 理论, 计算研究KLn ( $n = M, N, O, P$ ) 等激发组态的不同辐射衰变通道DR强度和截面的报道很少. 在对Fe<sup>24+</sup>离子DR过程理论计算研究的基础上, 对其RTEX过程的系统综合的理论研究结果同样很少. 因此, 本文在已有研究的基础上, 对Fe<sup>24+</sup>离子与等离子体中电子相互作用的DR过程与H<sub>2</sub>分子的RTEX过程做一全面系统的综合分析研究, 从理论和实验上更进一步全面准确地理解这些过程. 本文以准相对论HFR理论为基础, 首先对Fe<sup>24+</sup>离子KLL共振激发态的具体的谱项能级电偶极跃迁的辐射衰变共振强度和截面做了详细的计算, 并且与已有实验和最新的理论结果做了对比分析, 然后对Fe<sup>24+</sup>离子DR过程中KLn ( $n = M, N, O, P$ ) 共振激发组态电偶极辐射衰变通道的分支共振强度进行了系统的计算研究. 以上述DR过程计算研究为基础, 在冲量近似条件下, 根据已有H<sub>2</sub>分子的实验Compton轮廓, 进一步计算了能量在300—800 MeV 范围内抛射体Fe<sup>24+</sup>离子俘获H<sub>2</sub>分子靶电子的KLn ( $n = L, M, N, O, P$ ) 激发RTEX截面.

## 2 理论方法

设初始复合离子态为 $|i\rangle$ , 俘获电子所产生的共振双激发态为 $|j\rangle$ , 共振双激发态通过发射X射线光子衰变到一个能量小于初始复合离子基态的亚稳态, 用 $|k\rangle$ 表示, 则整个DR过程的共振强度可以表示为<sup>[32,33]</sup> (能量为原子单位a.u.)

$$S_{i,j,k} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{m \varepsilon_r} \left( \frac{g_j}{2g_i} \right) \frac{\sum_i A_{ji}^a \sum_k A_{jk}^r}{\sum_{i'} A_{ji'}^a + \sum_{k'} A_{jk'}^r}, \quad (1)$$

(1)式中,  $A_{ji'}^a$ 表示从共振双激发态 $|j\rangle$ 到可能的初始态 $|i\rangle$ 的自电离速率,  $A_{jk'}^r$ 表示由 $|j\rangle$ 态辐射衰变到可能的亚稳态 $|k\rangle$ 的自发辐射速率, 对 $i$ 和 $k$ 的求和只对初始态 $|i\rangle$ 和亚稳态 $|k\rangle$ 的基态求和,  $\varepsilon_r$ 为Auger电子的能量. 若采用扭曲波近似,  $|i\rangle$ 到 $|j\rangle$ 的自电离速率可以根据微扰理论计算, 表示为<sup>[26]</sup>

$$A_{ji}^a = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \left\langle j \left| \frac{1}{r_{12}} \right| i \right\rangle \right|^2, \quad (2)$$

而  $|j\rangle$  到  $|k\rangle$  的电偶极自发辐射衰变速率为

$$A_{jk}^r = \frac{4e^2\omega_{jk}}{3\hbar c^3 g_j} |\langle j|P^{(1)}|k\rangle|^2, \quad (3)$$

(1)–(3) 式中,  $\hbar$  为约化普朗克常数,  $c$  为光速,  $P^{(1)}$  为电偶极跃迁算符,  $\omega_{jk}$  为 X 射线光子能量. 具体计算自电离跃迁速率 (2) 式和辐射衰变跃迁速率 (3) 式时采用 HFR 波函数, 自洽场计算时考虑了相对论质量效应和达尔文两项修正, 同时也包括了近似 Breit 修正. 从初始离子的  $|j\rangle$  态到共振双激发的  $|k\rangle$  态的能量平均 DR 截面表示为

$$\sigma_{i,j,k} = \frac{S_{i,j,k}}{\Delta\sqrt{\pi}} \exp\left[-\frac{(\varepsilon - \varepsilon_r)}{\Delta^2}\right], \quad (4)$$

$\Delta = \omega/(2\sqrt{\ln 2})$ ,  $\omega$  为电子束能量分布的半高全宽 (FWHM) 分辨率.

在冲量近似条件下, 处于初始态  $|i\rangle$  的离子与靶原子或分子碰撞后形成的共振双激发态  $|j\rangle$ , 通过 X 射线光子发射辐射衰变到可能的亚稳态  $|k\rangle$  的 RTEX 截面表示为 [34,35]

$$\sigma^{\text{RTEX}}(i) = \sum_{j,k} (M/(2E))^{1/2} S_{i,j,k} J(P_{z_i}), \quad (5)$$

(5) 式中,  $P_{z_i} = (\varepsilon_r + \varepsilon_t - Em/M)/(M/(2E))^{1/2}$  为靶分子的激发电子的动量在离子抛射体入射方向的分量,  $E$  表示在实验室参考系中抛射体的能量,  $m$  和  $M$  分别为电子和抛射体的质量,  $J(P_{z_i})$  为靶分子电子的 Compton 轮廓 [36–42],  $\varepsilon_r$  和  $\varepsilon_t$  分别为在抛射体实验室参考系中 Auger 电子的能量和靶分子中电子的激发电离能.

### 3 结果与讨论

#### 3.1 KLL 激发 DR 过程的共振强度和截面

表 1 列出了本文计算得到的  $\text{Fe}^{24+}$  离子 KLL 双激发 DR 过程的数据. 为了叙述方便, 表 1 的第一列为文献中普遍采用的  $\text{Fe}^{24+}$  离子 KLL 双激发 DR 过程辐射衰变的跃迁标记 [43], 第二列为辐射衰变通道上下能级之间具体的跃迁类型, 第三列为本文计算得到的 Auger 电子能量  $E$  (单位为 eV), 第四列为 1992 年 Beiersdorfer 等在文献 [20] 中报道的相应 Auger 电子能量的实验值  $E_{\text{exp}}$  (单位为 eV), 第五列为本文计算得到的辐射衰变跃迁 X 射线的波长值 (单位为 Å), 第六列为本文计算得到的 DR 共振强度  $S$  (单位为  $10^{-20} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2$ ). 为了对本文结果与其他已有的最新理论研究结果进行对比, 表 1 同时也列出了他人最新的计算研究

结果. 表 1 的第七列为 2004 年 Behar 等 [24] 采用投影算符理论方法计算得到的  $\text{Fe}^{24+}$  离子 KLL 激发 DR 过程能级态之间辐射衰变跃迁的共振强度. 2006 年, Nahar 等 [25] 采用 Breit-Pauli 哈密顿的  $R$  矩阵方法计算了  $\text{Fe}^{24+}$  离子 KLL 激发 DR 过程能级态之间辐射衰变跃迁的共振强度在表 1 的最后一列. 表 1 方括号中的数值表示 10 的幂指数. 从表 1 可以看到, 本文的 Auger 电子能量计算值与文献 [20] 报道的实验值十分符合, 其中最大偏差是标记为 q 的跃迁通道的 Auger 电子能量, 计算值与实验值的绝对偏差为 1.805 eV, 相对不确定度小于 0.004%; 其余通道的 Auger 电子能量, 本文理论计算值与实验值符合得很好. 关于  $\text{Fe}^{24+}$  离子 KLL 激发 DR 过程共振强度, 从表 1 可以看出, 对于跃迁标记为 j, k, a, t 的 DR 跃迁通道共振谱线的强线, 其中标记为 j 的最强共振谱线文献 [24] 计算报道的共振强度为  $33.6 \times 10^{-20} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2$ , 本文计算结果为  $27.587 \times 10^{-20} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2$ , 文献 [25] 为  $27.22 \times 10^{-20} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2$ . 由此可以看出, 本文计算结果与文献 [24] 报道的计算值有较大的偏差, 而与文献 [25] 的计算值基本一致, 其余的理论计算值和本文计算值都十分符合. 而弱线则有明显差异, 例如, 对于标记为 q, v 的跃迁通道, 文献 [23] 报道的标记为 q 的跃迁通道的结果为  $0.0102 \times 10^{-20} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2$ , 文献 [25] 报道的标记为 v 的跃迁通道的结果为  $0.06 \times 10^{-20} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2$ , 本文相应计算值分别为  $0.068 \times 10^{-20}$  和  $0.016 \times 10^{-20} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2$ , 前者相差近 6 的因子, 后者相差近 4 的因子; 其余本文计算结果总体与文献 [24, 25] 计算报道的结果基本符合. 很明显, 对于弱线不同的理论, 计算结果差异较大. 关于 KLL 激发辐射衰变 X 射线波长范围 1.856–1.874 Å, 属于典型的  $\lambda$  为 1.8 Å 位置的共振, 其总共振强度本文计算值为  $73.35 \times 10^{-20} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2$ , 2010 年, Kavanagh 等在文献 [23] 中报道的最新的 EBIT 实验值结果为  $(64.1 \pm 11.5) \times 10^{-20} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2$ , 显然, 本文计算结果与文献 [23] 在实验值的估计不确定度内十分符合. 如果把本文计算得到的 KLL 激发 DR 总共振强度与已有的其他理论计算得到的最新结果对比, 那么, 文献 [24] 报道的计算值为  $79.29 \times 10^{-20} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2$ , 文献 [25] 报道的计算值为  $74.43 \times 10^{-20} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2$ , 本文计算得到的 KLL 激发 DR 共振强度结果与文献 [25] 的结果十分接近, 显然文献 [24] 的结果与本文以及实验结果的偏差较大.

表1 Fe<sup>24+</sup> 离子 KLL 双激发 Auger 电子能量  $E$ , X 射线波长  $\lambda$  和 DR 共振强度  $S$  (单位为  $10^{-20}$  eV·cm<sup>2</sup>)

标记	谱项能级跃迁	$E/\text{eV}$	$E_{\text{exp}}^{[13]}/\text{eV}$	$\lambda/\text{\AA}$	$S$	$S^{[24]}$	$S^{[25]}$
a	1s2p <sup>2</sup> ( <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub> )—1s <sup>2</sup> 2p( <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub> <sup>o</sup> )	4677.89	4677.0	1.861	6.613	6.24	6.12
b	1s2p <sup>2</sup> ( <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub> )—1s <sup>2</sup> 2p( <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub> <sup>o</sup> )	4677.89	4677.0	1.857	0.120	0.122	0.21
c	1s2p <sup>2</sup> ( <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub> )—1s <sup>2</sup> 2p( <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub> <sup>o</sup> )	4659.93	4658.6	1.866	0.019	0.0225	0.17
d	1s2p <sup>2</sup> ( <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub> )—1s <sup>2</sup> 2p( <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub> <sup>o</sup> )	4659.93	4658.6	1.862	0.066	0.0772	0.076
e	1s2p <sup>2</sup> ( <sup>4</sup> P <sub>5/2</sub> )—1s <sup>2</sup> 2p( <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub> <sup>o</sup> )	4639.63	4639.0	1.872	3.952	3.78	4.85
f	1s2p <sup>2</sup> ( <sup>4</sup> P <sub>3/2</sub> )—1s <sup>2</sup> 2p( <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub> <sup>o</sup> )	4632.16	4632.9	1.874	0.247	0.264	0.31
g	1s2p <sup>2</sup> ( <sup>4</sup> P <sub>3/2</sub> )—1s <sup>2</sup> 2p( <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub> <sup>o</sup> )	4632.16	4632.9	1.869	3.1[−3]	3.8[−3]	0.01
h	1s2p <sup>2</sup> ( <sup>4</sup> P <sub>1/2</sub> )—1s <sup>2</sup> 2p( <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub> <sup>o</sup> )	4624.03	4624.6	1.876	2.0[−4]	2.5[−4]	6.0[−3]
i	1s2p <sup>2</sup> ( <sup>4</sup> P <sub>1/2</sub> )—1s <sup>2</sup> 2p( <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub> <sup>o</sup> )	4624.03	4624.6	1.872	0.020	0.022	0.08
j	1s2p <sup>2</sup> ( <sup>2</sup> D <sub>5/2</sub> )—1s <sup>2</sup> 2p( <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub> <sup>o</sup> )	4665.11	4664.1	1.865	27.587	33.6	27.22
k	1s2p <sup>2</sup> ( <sup>2</sup> D <sub>3/2</sub> )—1s <sup>2</sup> 2p( <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub> <sup>o</sup> )	4658.09	4658.1	1.862	18.277	18.4	18.40
l	1s2p <sup>2</sup> ( <sup>2</sup> D <sub>3/2</sub> )—1s <sup>2</sup> 2p( <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub> <sup>o</sup> )	4658.09	4658.1	1.867	1.870	1.72	1.44
m	1s2p <sup>2</sup> ( <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub> )—1s <sup>2</sup> 2p( <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub> <sup>o</sup> )	4697.86	4697.7	1.856	2.302	2.37	2.74
n	1s2p <sup>2</sup> ( <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub> )—1s <sup>2</sup> 2p( <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub> <sup>o</sup> )	4697.86	4697.7	1.851	0.098	0.0963	0.14
o	1s2s <sup>2</sup> ( <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub> )—1s <sup>2</sup> 2p( <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub> <sup>o</sup> )	4554.81	4553.4	1.896	0.842	0.852	0.89
p	1s2s <sup>2</sup> ( <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub> )—1s <sup>2</sup> 2p( <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub> <sup>o</sup> )	4554.81	4553.4	1.892	0.848	0.812	0.88
q	1s2p( <sup>1</sup> P <sup>o</sup> )2s( <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub> <sup>o</sup> )—1s <sup>2</sup> 2s( <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub> )	4617.11	4615.3	1.860	0.068	0.0102	0.08
r	1s2p( <sup>1</sup> P <sup>o</sup> )2s( <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub> <sup>o</sup> )—1s <sup>2</sup> 2s( <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub> )	4606.78	4604.9	1.863	3.298	3.87	3.8
s	1s2p( <sup>3</sup> P <sup>o</sup> )2s( <sup>2</sup> P <sub>3/2</sub> <sup>o</sup> )—1s <sup>2</sup> 2s( <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub> )	4634.30	4633.2	1.855	1.361	1.05	1.29
t	1s2p( <sup>3</sup> P <sup>o</sup> )2s( <sup>2</sup> P <sub>1/2</sub> <sup>o</sup> )—1s <sup>2</sup> 2s( <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub> )	4631.51	4631.2	1.856	5.611	5.63	5.52
u	1s2p( <sup>3</sup> P <sup>o</sup> )2s( <sup>4</sup> P <sub>3/2</sub> <sup>o</sup> )—1s <sup>2</sup> 2s( <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub> )	4570.91	4570.1	1.873	0.135	0.131	0.16
v	1s2p( <sup>3</sup> P <sup>o</sup> )2s( <sup>4</sup> P <sub>1/2</sub> <sup>o</sup> )—1s <sup>2</sup> 2s( <sup>2</sup> S <sub>1/2</sub> )	4565.98	4566.3	1.874	0.016	0.0154	0.06

为了进一步分析本文上述 KLL 激发 DR 计算研究结果的准确性, 表 2 列出了与双电子复合共振强度相关的实验值和理论结果. 其中,  $R$  表示理论值与实验结果的比值,  $S^*$  表示 Beiersdorfer 等在文献 [20] 中报道的 EBIT 初始实验值, 根据 Beiersdorfer 等的实验所采用的晶体光谱仪, 共振强度的初始实验值  $S^*$  再除以晶体光谱仪的反应因子就得到了共振强度的最终实验值. 根据文献 [20] 中报道的关于实验不确定度的分析, 对于所有的辐射衰变通道, 能级之间的电偶极辐射衰变跃迁的共振强度的实验不确定度为 20%, 也就是说这一比值的范围应该在 0.8—1.2 之间.

从表 2 可以看出, 对于 KLL 激发 DR 共振强度, 除了标记 r 的跃迁通道外, 本文计算值都在其实验值的不确定度范围之内. 如果把本文的计算结果与文献 [24, 25] 报道的计算结果做一对比, 那么文

献 [24] 报道的跃迁标记为 j(+l), k(+a), r, t(+s), o 的理论值与实验值的比值  $R$  都不在 0.8—1.2 范围之内, 有 8 个跃迁通道, 而文献 [25] 报道的跃迁标记为 e, m, r, (t+s), o 的跃迁通道共振强度的理论值与实验值的比值  $R$  都不在 0.8—1.2 范围之内, 有 6 个跃迁通道. 通过上述对比可以看出, 除了标记 r 的跃迁通道外, 本文计算结果在文献 [20] 所确定的实验估计不确定度 (20%) 内与实验结果一致, 与文献 [24, 25] 报道的最新计算结果比较, 本文的计算结果更加准确.

为了对 Fe<sup>24+</sup> 离子 KLL 激发 DR 过程的实验研究给予支持, 图 1 给出了通过本文 (4) 式计算得到的 KLL 激发 DR 过程共振截面随着 Auger 电子能量的变化的情况. 其中, Auger 电子能量的 FWHM 分辨率为 2.0 eV. 在分辨率 FWHM = 2.0 eV 的条件下, 标记为 j 的跃迁通道的峰值峰位

是独立的, 而且, 其跃迁通道的峰值是最高的, 主要原因是在所有 KLL 激发态的辐射衰变通道中, 其共振强度的数值最大, 电子的激发能量与其他通道不重合, 即和其他的跃迁通道不存在任何重叠. 与此相似的还有标记为 r, e 的跃迁通道. 而 (o+p), (f+g), (k+l), (a+b), (m+n) 都属于相互重叠的共振通道.

表 2 DR 共振强度的理论计算值与实验值的比较

记号	$S^*/10^{-20} \text{ cm}^2 \cdot \text{eV}$	$R(\text{本文})$	$R^{[24]}$	$R^{[25]}$
e	3.63	1.01	1.05	1.24
j(+l)	24.06	1.08	1.31	1.06
k(+a)	21.23	0.96	1.51	0.91
m	1.52	1.03	1.06	1.23
r	3.42	0.66	0.77	2.33
t(+s)	3.65	1.09	1.35	1.38
o	0.48	1.19	1.21	1.26
p	0.50	1.15	1.10	1.2

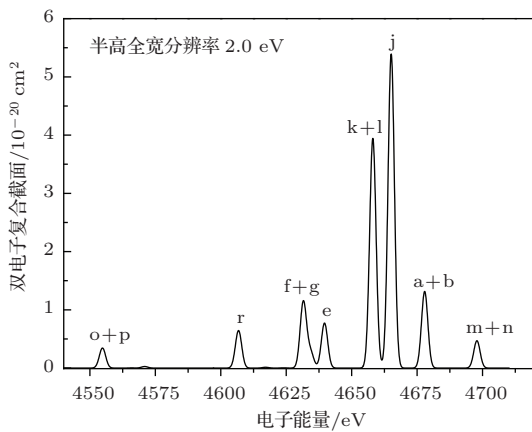


图 1 KLL 激发 DR 过程截面随着电子能量的变化

### 3.2 $\text{Fe}^{24+}$ 离子 $\text{KLn}$ ( $n = \text{M, N, O, P}$ ) 激发 DR 过程的分支共振强度和截面

为了对  $\text{Fe}^{24+}$  离子  $\text{KLn}$  ( $n = \text{M, N, O, P}$ ) 激发 DR 过程有一个比较全面的理解, 本文对  $\text{KLn}$  ( $n = \text{M, N, O, P}$ ) 激发的电偶极辐射衰变通道做了进一步的理论计算研究. 通道的一般形式表示如下:

$$\begin{aligned} \text{Fe}^{24} + (1s^2) + e &\longleftrightarrow \text{Fe}^{23+}(1s2pnl)^{**} \\ &\longrightarrow \text{Fe}^{23} + (1s^2nl)^* + \hbar\omega, \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \text{Fe}^{24} + (1s^2) + e &\longleftrightarrow \text{Fe}^{23+}(1s2lnl')^{**} \\ &\longrightarrow \text{Fe}^{23} + (1s^22l)^* + \hbar\omega, \end{aligned} \quad (7)$$

(6) 式表示了 DR 过程辐射通道为  $\text{K}\alpha$  类型, 即  $2p \rightarrow 1s$  的辐射衰变通道; (7) 式表示了由激发组态的外子壳层电子向内子壳层衰变的 DR 过程, 辐射通道为非  $\text{K}\alpha$  类型, 即  $nl'(l' > 2) \rightarrow 1s$  的辐射衰变通道. 表 3 详细列出了按照本文 (6) 和 (7) 式表示的全部激发和具体辐射衰变 DR 过程的有关数据. 表 3 的第一列为  $\text{Fe}^{24+}$  离子  $\text{KLn}$  ( $n = \text{M, N, O, P}$ ) 激发类型, 第二列为平均激发能量 (单位为 eV), 第三列为本文 (6) 和 (7) 式表示的具体辐射衰变类型, 第四列为相应激发和辐射衰变的 DR 共振强度 (单位为  $10^{-20} \text{ eV} \cdot \text{cm}^2$ ), 第五列为相应的辐射衰变跃迁的 X 射线波长 (单位为  $\text{\AA}$ ). 由于各种辐射衰变产生的谱项能级跃迁很多, 本文仅列出了相应 DR 通道的分支总共振强度和 X 射线波长范围. 从表 3 中可以看到, 对于不同的 DR 激发类型,  $\text{K}\alpha$  辐射衰变通道的分支共振强度所占的比重最大, 并且  $\text{K}\alpha$  辐射衰变跃迁的 X 射线波长范围约在  $1.85\text{--}1.88 \text{ \AA}$  内, 而非  $\text{K}\alpha$  辐射衰变跃迁的 X 射线波长约在  $1.47\text{--}1.60 \text{ \AA}$  的范围内, 两者 DR 共振辐射衰变的 X 射线波长并不重叠.

尽管表 3 中列出了本文 (6) 和 (7) 式表示的不同分支总共振强度的计算结果, 但是到目前为止还没有相应的实验结果的报道. 为了对表 3 中共振强度计算结果的准确性做出分析, 表 4 列出了按 DR 激发类型求和得到的  $\text{Fe}^{24+}$  离子  $\text{KLn}$  ( $n = \text{M, N, O, P}$ ) 激发分支总共振强度和最新的实验值. 下面结合表 3 和表 4 列出的结果对各激发类型的 DR 共振强度做一对比分析. 1) 关于 KLM 激发, 本文计算的  $\text{K}\alpha$  辐射衰变通道的 X 射线波长范围为  $1.849\text{--}1.865 \text{ \AA}$ , 总共振强度为  $49.6035 \times 10^{-20} \text{ eV} \cdot \text{cm}^2$ , 2010 年, Kavanagh 等在文献 [23] 报道的总共振强度的最新实验值为  $(48.1 \pm 8.7) \times 10^{-20} \text{ eV} \cdot \text{cm}^2$ , 而 Watanabe 等在文献 [22] 中报道的总共振强度的实验值为  $(50.2 \pm 4.2) \times 10^{-20} \text{ eV} \cdot \text{cm}^2$ , 显然, 本文计算结果与这两个实验值在其绝对估计不确定度内完全一致. 进一步比较  $\text{K}\alpha$  和非  $\text{K}\alpha$  辐射衰变通道的分支共振强度, 文献 [22] 报道的实验值分别为  $(37.7 \pm 4.0) \times 10^{-20} \text{ eV} \cdot \text{cm}^2$  和  $(12.5 \pm 1.4) \times 10^{-20} \text{ eV} \cdot \text{cm}^2$ , 本文相应的计算值分别为  $38.3869 \times 10^{-20} \text{ eV} \cdot \text{cm}^2$  和  $11.2166 \times 10^{-20} \text{ eV} \cdot \text{cm}^2$ . 两者在实验值的估计不确定度内完全一致. 同时, 从这些数据可以看出, 对于 KLM 激发的  $\text{K}\alpha$  辐射衰变通道对共振强度的贡

表3 Fe<sup>24+</sup> 离子 KLn (3 ≤ n ≤ 6) 激发与辐射衰变 X 射线发射的 DR 过程数据

激发类型	E/eV	衰变类型	S/10 <sup>-20</sup> eV·cm <sup>2</sup>	X 射线波长范围 λ/Å
KLM	5777.566	1s2p3s—1s <sup>2</sup> 3s	3.1779	1.852—1.863
KLM	5791.988	1s2p3p—1s <sup>2</sup> 3p	25.7051	1.850—1.865
KLM	5804.778	1s2p3d—1s <sup>2</sup> 3d	9.5039	1.849—1.863
KLM	5752.804	1s2s3p—1s <sup>2</sup> 2s	5.5938	1.584—1.592
KLM	5791.988	1s2p3p—1s <sup>2</sup> 2p	10.1795	1.586—1.600
KLN	6178.529	1s2p4s—1s <sup>2</sup> 4s	1.0371	1.851—1.861
KLN	6184.652	1s2p4p—1s <sup>2</sup> 4p	8.2854	1.850—1.862
KLN	6189.686	1s2p4d—1s <sup>2</sup> 4d	4.6719	1.850—1.861
KLN	6191.863	1s2p4f—1s <sup>2</sup> 4f	0.3862	1.850—1.860
KLN	6146.419	1s2s4p—1s <sup>2</sup> 2s	2.0885	1.509—1.514
KLN	6184.652	1s2p4p—1s <sup>2</sup> 2p	4.1707	1.511—1.521
KLO	6361.935	1s2p5s—1s <sup>2</sup> 5s	0.4543	1.850—1.860
KLO	6365.065	1s2p5p—1s <sup>2</sup> 5p	3.9627	1.850—1.861
KLO	6367.650	1s2p5d—1s <sup>2</sup> 5d	2.4479	1.850—1.860
KLO	6368.738	1s2p5f—1s <sup>2</sup> 5f	0.2946	1.850—1.860
KLO	6369.010	1s2p5g—1s <sup>2</sup> 5g	0.0092	1.850—1.860
KLO	6327.241	1s2s5p—1s <sup>2</sup> 2s	1.0108	1.476—1.482
KLO	6365.065	1s2p5p—1s <sup>2</sup> 2p	1.9463	1.479—1.488
KLP	6460.849	1s2p6s—1s <sup>2</sup> 6s	0.2336	1.850—1.860
KLP	6462.618	1s2p6p—1s <sup>2</sup> 6p	2.1784	1.850—1.860
KLP	6464.1152	1s2p6d—1s <sup>2</sup> 6d	1.4206	1.850—1.860
KLP	6464.659	1s2p6f—1s <sup>2</sup> 6f	0.2011	1.850—1.860
KLP	6464.931	1s2p6g—1s <sup>2</sup> 6g	0.0096	1.850—1.860
KLP	6464.931	1s2p6h—1s <sup>2</sup> 6h	0.0001	1.850—1.860
KLP	6424.930	1s2s6p—1s <sup>2</sup> 2s	0.5685	1.459—1.464
KLP	6462.618	1s2p6p—1s <sup>2</sup> 2p	1.0762	1.462—1.471

献很大, 为主要的共振通道. 2) 关于 KLN 激发, DR 过程总共振强度本文计算值为  $20.6398 \times 10^{-20} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2$ , 其中 K $\alpha$  和非 K $\alpha$  辐射衰变通道的共振强度分别为  $14.3806 \times 10^{-20}$  和  $6.2592 \times 10^{-20} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2$ , 文献 [22] 报道的总共振强度的实验值为  $(21.10 \pm 2.0) \times 10^{-20} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2$ , 其中 K $\alpha$  和非 K $\alpha$  辐射衰变通道的共振强度分别为  $(15.7 \pm 1.8) \times 10^{-20}$  和  $(5.4 \pm 0.8) \times 10^{-20} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2$ . 显然, 本文计算结果与相应的实验值同样十分一致. 3) 关于 KLO 激发, DR 过程总共振强度本文计算值为  $10.1257 \times 10^{-20} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2$ , 其中 K $\alpha$  和非 K $\alpha$  辐射衰变通道的共振强度分别为  $7.1687 \times 10^{-20}$  和

$2.9549 \times 10^{-20} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2$ , 而文献 [22] 报道的总共振强度的实验值为  $(11.0 \pm 1.4) \times 10^{-20} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2$ , 其中 K $\alpha$  和非 K $\alpha$  辐射衰变通道的共振强度分别为  $(9.0 \pm 1.3) \times 10^{-20}$  和  $(2.0 \pm 0.4) \times 10^{-20} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2$ . 显然, 本文 KLO 激发 DR 过程总共振强度与相应的实验值同样十分一致. 4) KLP 激发, DR 总共振强度本文计算值为  $5.6881 \times 10^{-20} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2$ , 其中 K $\alpha$  和非 K $\alpha$  辐射衰变通道的共振强度分别为  $4.0434 \times 10^{-20}$  和  $1.6447 \times 10^{-20} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2$ , 对于 KLP 激发的共振强度, 目前还没有发现相关实验结果的报道, 本文报道的结果纯属预估计算值. 通过对这些数据的对比分析还可以看出, 尽管对于 KLn

( $n = M, N, O, P$ ) 的激发, 本文 (6) 和 (7) 式表示的辐射衰变通道的理论计算结果与相应 DR 总共振强度的实验值完全一致, 但是, 按照  $K\alpha$  和非  $K\alpha$  辐射衰变通道的分支共振强度与总共振强度之比与相应的实验值略有差异, 也就是说, 对于所有  $KLn$  ( $n = M, N, O, P$ ) 的双激发, 当外层主量子数增大时, 与实验值比较,  $K\alpha$  和非  $K\alpha$  辐射衰变通道的分支共振强度与总共振强度之比随着最外子壳层的电子主量子数的增大, 前者有减小的趋势, 而后者有增大的趋势. 对此分析如下 [3,6]: 1) 对于  $Fe^{24+}$

离子  $KLn$  ( $n = M, N, O, P$ ) 双激发类型的最外子壳层的电子  $nl \rightarrow 1s(n > 2)$  的非  $K\alpha$  辐射衰变通道, 随着最外层主量子数的增加, 其中存在着可能的辐射复合和多极级联辐射衰变跃迁过程, 理论计算时并没有完全考虑辐射衰变全部可能的细致过程; 2) 对于  $Fe^{24+}$  离子  $KLn$  ( $n = M, N, O, P$ ) 双激发类型的  $K\alpha$  辐射衰变通道, 没有考虑自电离激发组态之间的组态相互作用, 尤其是这种组态混合会导致双电子-单光子类型的辐射跃迁衰变通道.

表4  $KLn$  ( $n = L, M, N, O, P$ ) 激发分支 DR 共振强度和总共振强度 (单位为  $10^{-20} \text{ cm}^2 \cdot \text{eV}$ )

衰变 激发	$1s2lnl' \rightarrow 1s^2nl'$		$1s2l'nl \rightarrow 1s^22l'$		总共振强度	
	本文	实验值 [22]	本文	实验值 [22]	本文	实验值
KLM	38.3869	37.7(4.0)	11.2166	12.5(1.4)	49.6035	50.2(4.2)[22] 48.1(8.7)[23]
KLN	14.3806	15.7(1.8)	6.2592	5.4(0.8)	20.6398	21.1(2.0)[22]
KLO	7.1687	9.0(1.3)	2.9549	2.0(0.4)	10.1257	11.0(1.4)[22]
KLP	4.0434	—	1.6447	—	5.6881	—

图 2 为  $Fe^{24+}$  离子  $KLn$  ( $n = L, M, N, O, P$ ) 激发 DR 共振截面随电子能量变化的情况, 其中电子束能的 FWHM 分辨率为 19.0 eV, 这一分辨率是 EBIT 实验目前可能实现的电子束能分辨率. 从图中可以看到, 各双激发态的共振峰位是十分明显的, 其中 KLL 激发的较低电子束能一端还出现了一个小的 DR 共振峰, 电子束能位置为 4605.426 eV, 对应辐射衰变类型为  $1s2s2p-1s^22s$ . 其他的 KLM, KLN, KLO, KLP 激发的 DR 共振截面电子的束能位置分别为 5791.998, 6184.652, 6365.065, 6462.618 eV.

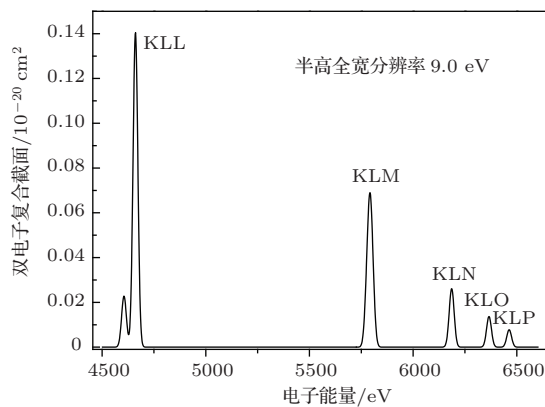


图2  $Fe^{24+}$  离子  $KLn$  ( $2 \leq n \leq 6$ ) 激发 DR 共振截面随着电子能量的变化

### 3.3 $Fe^{24+}$ 离子与 $H_2$ 分子碰撞的 RTE 截面

在冲量近似条件下, 抛射体  $Fe^{24+}$  离子与  $H_2$  分子碰撞的共振转移与激发 X 射线发射截面通过本文 (5) 式计算得到, 实验 Compton 轮廓采用 Lee [44] 报道的  $H_2$  分子的实验结果, 反应通道的一般形式与  $Fe^{24+}$  离子与电子碰撞的 DR 过程十分相似, 不同的是对于 RTE 过程, 抛射体  $Fe^{24+}$  离子与  $H_2$  分子碰撞激发过程中俘获的是  $H_2$  分子最弱束缚电子, 而不是自由电子. 图 3 为本文计算得到的  $Fe^{24+}$  与  $H_2$  碰撞的共振转移与激发截面随抛射体能量的变化情况, 图中粗实线表示  $KLn$  ( $n = L, M, N, O, P$ ) 激发总的 RTE 共振截面随抛射体能量的变化情况, 粗短线为  $K\alpha$  衰变的分支 RTE 共振截面随抛射体能量的变化情况, 细点线为非  $K\alpha$  衰变的分支 RTE 共振截面随抛射体能量的变化情况, 图中 KLL 激发的 RTE 截面的实验值 (取自文献 [19]) 用圆点表示, RTE 截面的单位为  $10^{-21} \text{ eV} \cdot \text{cm}^2$ . 从图中所表示的计算结果可以得到, 能量较低的第一个 RTE 共振峰位, 抛射体的能量为 474.66 MeV, 峰值为  $2.304 \times 10^{-20} \text{ eV} \cdot \text{cm}^2$ , 这一 RTE 截面的峰值显然

是KLL激发通道的贡献, 而能量较大的RTEX共振峰位, 其能量值为594.66 MeV, RTE截面峰值为 $1.316 \times 10^{-20} \text{ eV}\cdot\text{cm}^2$ , 这一RTE截面的峰值为 $\text{KLn}$  ( $n = \text{L, M, N, O, P}$ ) 激发辐射通道的贡献. 与文献[19]报道的实验值(估计不确定度为10%)比较本文计算结果与实验值在其估计不确定度内完全符合.

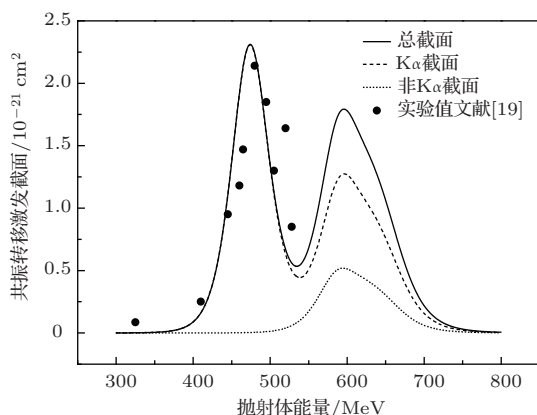


图3  $\text{Fe}^{24+}$  与  $\text{H}_2$  碰撞 RTE 截面随着抛射体能量的变化

## 4 结 论

1) 对于所有KLL激发态, 除了个别弱线外(标记为r), 本文得到的电偶极辐射衰变跃迁总的DR数据与Beiersdorfer等在文献[20]中报道的EBIT实验结果在其实验值的估计不确定度(20%)范围内基本符合, 而本文计算的总共振强度的值与文献[23]中报道的最新EBIT实验值在其实验值的估计不确定度内完全一致, 表明本文对于KLL激发态的计算结果是准确的.

2) 对于DR过程所有 $\text{KLn}$  ( $n = \text{L, M, N, O, P}$ ) 的双激发态, 本文计算得到的辐射衰变通道的分支总共振强度与文献[22]和[23]报道的相应实验值在其实验值的估计不确定度内一致. 本文计算结果表明, 对于DR过程所有 $\text{KLn}$  ( $n = \text{L, M, N, O, P}$ ) 的双激发态,  $\text{K}\alpha$  辐射衰变通道是起主导性作用的重要通道, 也就是说, 对DR过程X射线发射的共振强度而言,  $\text{K}\alpha$  辐射衰变通道是贡献最大的辐射衰变通道, 而且随着最外层电子主量子数的增大, DR过程X射线发射的共振强度减小的趋势十分明显. 本文研究还发现, 对于所有 $\text{KLn}$  ( $n = \text{M, N, O, P}$ ) 双激发态, 当外层主量子数增大时, 与实验值比较,  $\text{K}\alpha$  和非 $\text{K}\alpha$  辐射衰变通道的分支共振强度与总共振强度之比随着最外子壳层的电子主量子

数的增大, 前者有减小的趋势, 而后者有增大的趋势, 表明对于所有 $\text{KLn}$  ( $n = \text{L, M, N, O, P}$ ) 双激发态, 当外层主量子数增大时, 辐射衰变还存在着可能的辐射复合和多极级联辐射衰变等过程. 关于这一问题还需要更加详细准确的实验数据和理论的进一步分析研究.

3) 本文计算结果表明, 对于 $\text{KLn}$  ( $n = \text{M, N, O, P}$ ) 双激发态, 本文(6)式所表示的 $\text{K}\alpha$  辐射衰变的波长范围为 $1.850\text{--}1.880 \text{ \AA}$ , 而本文(7)式表示的最外子壳层的电子 $nl \rightarrow 1s(n > 2)$  非 $\text{K}\alpha$  辐射衰变的X射线光子的波长范围为 $1.460\text{--}1.601 \text{ \AA}$ , 这两者X射线光子的波长共振强度位置不重叠.

4) 在对 $\text{Fe}^{24+}$  离子DR过程计算研究的基础上, 本文计算得到的 $\text{Fe}^{24+}$  离子与 $\text{H}_2$  分子碰撞的RTEX截面与文献[19]报道的KLL激发RTEX实验值在其实验估计不确定度( $\pm 10\%$ )内基本一致. 这一结果表明, RTE截面可以比较准确地反映 $\text{KLn}$  ( $n = \text{L, M, N, O, P}$ ) 激发的DR过程,  $\text{K}\alpha$  辐射衰变通道是RTEX总截面中贡献最大的辐射衰变通道. 尽管目前还没有 $\text{Fe}^{24+}$  离子与 $\text{H}_2$  分子碰撞的 $\text{KLn}$  ( $n = \text{M, N, O, P}$ ) 激发的RTEX截面的实验数据, 但是期望本文的研究结果可以对进一步研究DR共振过程和基于DR过程的RTEX过程有所帮助.

感谢Beiersdorfer教授对本文研究提供的帮助.

## 参考文献

- [1] Clark M, Brandt D, Swenson J K, Shafroth S M 1985 *Phys. Rev. Lett.* **54** 544
- [2] Schulz M, Justiniano E, Schuch R, Mokler P H, Reusch S 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 1734
- [3] Hahn Y 1989 *Phys. Rev. A* **40** 2950
- [4] Wang F, Gou B C 2008 *Chin. Phys. B* **17** 1227
- [5] Yan L L, Qu Y Z, Liu C H, Zhang Y, Wang J G, Buenker R J 2012 *Chin. Phys. B* **21** 063401
- [6] Hahn Y, Gau J N, Omar G, Dube P M 1987 *Phys. Rev. A* **36** 576
- [7] McLaughlin D J, Hahn Y 1988 *Phys. Rev. A* **38** 531
- [8] Parameswaran R, Bhalla P C, Walch P B, DePaola D B 1991 *Phys. Rev. A* **43** 5929
- [9] Parameswaran R, Walch P B, Maleki S, Bhalla P C, DePaola D B 1993 *Phys. Rev. A* **47** 3801
- [10] Zaharakis E K, Haar R R, Voitke O, Zhu M, Tanis J A 1995 *Phys. Rev. A* **52** 2910
- [11] Mu Z D, Wei Q Y 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 1358 (in Chinese)[牟致栋, 魏琦瑛 2007 物理学报 **56** 1358]



- [12] Dong C Z, Fu Y B 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 107 (in Chinese)[董晨钟, 符彦飙 2006 物理学报 **55** 107]
- [13] Chi B Q, Liu L, Wang J G 2008 *Chin. Phys. B* **17** 2890
- [14] Hu X L, Qu Y Z, Zhang S B, Zhang Y 2012 *Chin. Phys. B* **21** 103401
- [15] Li C Y, Han X Y, Wang J G, Qu Y Z 2013 *Chin. Phys. B* **22** 123201
- [16] Tanis J A, Shafroth M S, Willis E J, Clark M, Swenson J, Strait E N, Mowat J R 1981 *Phys. Rev. Lett.* **47** 828
- [17] Tanis J A, Bernstein E M, Graham W G, Clark M, Shafroth M, Johnson B M, Jones K W, Meron M 1982 *Phys. Rev. Lett.* **49** 1325
- [18] Tanis J A, Bernstein E M, Graham W G, Stockli M P, Clark M, McFarl R H, Morgan T J, Berkner K H, Schlachter A S, Stearns J W 1984 *Phys. Rev. Lett.* **53** 2551
- [19] Clark M W, Tanis J A, Bernstein E M, Badnell N R, DuBois R D, Graham W G, Morgan T J, Plano V L, Schlachter A S, Stockli M P 1992 *Phys. Rev. A* **45** 7846
- [20] Beiersdorfer P, Phillips T W, Wong K L, Marrs R E, Vogel D A 1992 *Phys. Rev. A* **46** 3812
- [21] Beiersdorfer P, Schneider M B, Bitter M, Goeler S 1992 *Rev. Sci. Instrum.* **63** 5029
- [22] Watanabe H, Currell J F, Kuramoto H, Li M Y, Ohtani S, O'Rourke E B, Tong M X 2001 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **34** 5095
- [23] Kavanagh A P, Watanabe H, Li M Y, O'Rourke B E, Tobiyama H, Nakamura N, McMahon S, Yamada C, Ohtani S, Currell J F 2010 *Phys. Rev. A* **81** 022712
- [24] Behar E, Jacobs V L, Oreg J, BarShalom V, Haan S L 2004 *Phys. Rev. A* **69** 022704
- [25] Nahar N S, Pradhan A K 2006 *Phys. Rev. A* **73** 062718
- [26] Cowan R D 1981 *Theory of Atomic Structure and Spectra* (Berkeley: University of California Press) p202
- [27] Mu Z D, Wei Q Y 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 103101 (in Chinese)[牟致栋, 魏琦瑛 2013 物理学报 **62** 103101]
- [28] Mu Z D, Wei Q Y, Chen D Y 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4070 (in Chinese)[牟致栋, 魏琦瑛, 陈涤纓 2006 物理学报 **55** 4070]
- [29] Mu Z D, Wei Q Y 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2614 (in Chinese)[牟致栋, 魏琦瑛 2005 物理学报 **54** 2614]
- [30] Mu Z D, Wei Q Y 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1742 (in Chinese)[牟致栋, 魏琦瑛 2004 物理学报 **53** 1742]
- [31] Ding K, Mu Z D, Ye S W 2011 *Spectrosc. Spect. Anal.* **31** 25 (in Chinese) [丁凯, 牟致栋, 叶世旺 2011 光谱学与光谱分析 **31** 25]
- [32] McLaughlin D J, Hahn Y 1981 *Phys. Rev. A* **24** 2273
- [33] DeWitt D R, Schneider D, Clark M W, Chen M H 1991 *Phys. Rev. A* **44** 7185
- [34] Brandt D 1983 *Phys. Rev. A* **27** 1314
- [35] Gorczyca T W, Pindzola M S 1995 *Phys. Rev. A* **52** 859
- [36] Eisenberger P, Reed W A 1972 *Phys. Rev. A* **5** 2085
- [37] Eisenberger P, Reed W A 1974 *Phys. Rev. A* **9** 3237
- [38] Lam L, Platzman P M 1974 *Phys. Rev. A* **9** 5128
- [39] Wellenstein H F, Bonhan R A 1973 *Phys. Rev. A* **7** 1568
- [40] Wong T C, Lee J S, Wellenstein H F, Bonham R A 1975 *Phys. Rev. A* **12** 1846
- [41] Biggs F, Mendelsohn L B, Mann J B 1975 *At. Data Nucl. Data Tables* **16** 201
- [42] Mu Z D, Wei Q Y, Ding K, Ye S W 2010 *J. At. Molec. Phys.* **27** 19 (in Chinese) [牟致栋, 魏琦瑛, 丁凯, 叶世旺 2010 原子与分子物理学报 **27** 19]
- [43] Gabriel A H 1972 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **160** 99
- [44] Lee J S 1977 *J. Chem. Phys.* **66** 4906

# Study of dielectronic recombination and resonance transfer and excitation with X-ray emission for $\text{Fe}^{24+} + \text{H}_2$ collision\*

Mu Zhi-Dong<sup>†</sup> Wei Qi-Ying

(School of Science, China University of Mining Science and Technology, Xuzhou 221008, China)

( Received 17 November 2013; revised manuscript received 6 January 2014 )

## Abstract

Based on the theory of Hartree-Fock with relativistic correction, the theoretical study is carried out on the resonance strength of dielectronic recombination (DR) of the resonance double-excited states (i.e., KLL, KLM, KLN, KLO, KLP) of  $\text{Fe}^{24+}$ . The resonance strength and colliding cross section of KLL are investigated. By using the experimental results of Compton profiles for  $\text{H}_2$ , the resonance transfer and excitation with X-ray emission cross sections during collision between  $\text{Fe}^{24+}$  and target molecule  $\text{H}_2$  in an energy range of 300–800 MeV are studied. Our results are compared with the recent experimental and theoretical studies. It is found that for the double-excited states of  $\text{Fe}^{24+}$ , the  $\text{K}\alpha$  decay tunnel is the major decay tunnel, and the wavelengths of X-ray in this process range from 1.850 to 1.880 Å. For other decay tunnels, the wavelengths of decay wave range from 1.460 to 1.601 Å. There is no overlap between the wavelengths for two cases. Our results are in reasonable agreement with the experimental results within an estimated uncertainty.

**Keywords:**  $\text{Fe}^{24+}$ , molecular  $\text{H}_2$ , resonance transfer and excitation, cross sections of resonance transfer and excitation with X-ray emission

**PACS:** 34.50.Fa, 34.70.+e, 34.80.Dp, 32.30.Rj

**DOI:** [10.7498/aps.63.083402](https://doi.org/10.7498/aps.63.083402)

---

\* Project supported by the Fundamental Research Fund for the Central Universities, China (Grant No. 2013XK04).

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [muzhidong@126.com](mailto:muzhidong@126.com)