

类氦离子的 KLL 双电子复合过程的相对论理论研究*

张登红¹⁾ 董晨钟^{1)†} 颌录有¹⁾ 丁晓斌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)

(2005 年 5 月 7 日收到, 2005 年 6 月 21 日收到修改稿)

在相对论多组态 Dirac-Fock 理论上, 发展了计算双电子复合截面的程序. 并以类锂 C^{3+} , Ar^{15+} , Kr^{33+} 和 U^{89+} 等离子为例, 详细计算了共振双激发态 $1s2l2l'$ 的辐射衰变率、Auger 衰变率及相应的双电子复合截面. 对于 C^{4+} , Ar^{16+} 和 Kr^{34+} 离子的结果与已有的计算和实验结果都能很好地符合, 对于 U^{90+} 离子, 则重点讨论了 Breit 效应对双电子复合截面的贡献.

关键词: 双电子复合, 截面, 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. 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共振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, 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. 在太阳或磁聚变等高温低密等离子体中, 双电子复合是高离化态离子的主要复合机理, 它对于建立和维持等离子体的电离平衡以及离子的激发态布局起着重要作用^[2]; 在高温高密的惯性约束聚变 (ICF) 等离子体中, 双电子复合也对等离子体的状态、激光-X 射线转换效率以及等离子体的光谱特性有明显的影响^[3,4]. 同时以双电子复合为主要机理产生的、位于共振线长波端的双电子伴线, 对温度的变化非常敏感, 已成为等离子体温度诊断的重要手段^[5]. 双电子复合过程的研究也是揭示复杂离子的双电子激发结构及其衰变规律的

重要途径. 因此, 双电子复合一直是人们感兴趣的研究课题, 世界上已有许多研究小组在进行这方面的理论和实验研究工作^[1-8]. 但是比较各种理论和实验结果, 常常会发现在不同的理论和实验结果之间, 以及不同的理论计算结果之间有较大的差别. 因此, 有必要进一步发展新的理论计算方法. 近来, 我们在相对论多组态 Dirac-Fock (MCDF) 理论上, 发展了一套研究双电子复合过程的相对论组态相互作用程序. 本文介绍该理论方法对类氦离子的双电子复合过程的研究结果.

由于从类氦离子到类锂离子双电子复合过程相对来说比较简单, 便于实验观测, 人们已经对该系列离子进行了许多研究工作^[6-9], 分析了低 Z 和中 Z 离子中的强组态相互作用 (CI) 效应^[10] 和高 Z 高离化态离子中的强相对论效应的贡献^[11]. 为了进一步系统研究这些效应对该双电子复合过程的影响, 并与已有的实验和理论计算比较, 我们分别以具有较低核电荷数的类锂 C^{3+} 离子、具有较高核电荷数的类锂 Ar^{15+} 和 Kr^{33+} 离子以及具有很高核电荷数的类铀 U^{89+} 离子为例, 详细计算了这些离子的共振双激发态 $1s2l2l'$ 的辐射衰变率、Auger 衰变率及相应的双电子复合截面, 讨论了组态相互作用效应和 Breit 效应对双电子复合过程的影响.

* 国家自然科学基金 (批准号: 10274062, 10376026, 10434100) 教育部优秀青年教师资助计划项目, 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-KJCXGC-214) 资助的课题.

† E-mail: dongcz@nwnu.edu.cn

2. 计算方法

类氦离子的 KLL 双电子复合过程可表示为

$$1s^2 + e^- \rightarrow 1s2l2l' \rightarrow 1s^22l + h\nu. \quad (1)$$

这里,类氦离子从初态 $i(1s^2)$ 俘获一个自由电子形成类锂离子的中间双激发态 $j(1s2l2l')$ 再辐射衰变到末态 $k(1s^22l)$ 的积分双电子复合截面为^[9]

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

式中 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 衰变过程进行的, i 和 g_i 分别是初态 i 和共振双激发态 j 的统计权重, ϵ_i 是自由电子的共振能量.

(2) 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

$$A_{ji}^a = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \alpha_j(PJM) \left| \sum_{s<t} \frac{1}{r_{s,t}} + V_{\text{Breit}} \right| \alpha_i(P'J'M') \right|^2, \quad (3)$$

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 算符, 其表达式可写为

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

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.

(2) 式中 A_{jk}^r 为从中间态 j 到末态 k 的辐射衰变率, 可以由下面的公式计算得到^[13]:

$$A_{jk}^r = \frac{4e^2 E_{jk}^3}{3\hbar c^3} \left| \alpha_j(PJM) \right| T^{(1)} \left| \alpha_k(P'J'M') \right|^2, \quad (5)$$

其中, $\alpha_j(PJM)$ 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.

在本文中,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 和 Auger 程序^[14,15]进行的.

3. 结果与讨论

3.1. C^{4+} 离子的双电子复合

有关类氦 C^{4+} 离子的双电子复合过程的研究已有较多的工作^[6-9,16],特别是 Mannervik 等人^[6]完成的测量结果,具有很高的分辨率.近来, Xu^[7]和 Zou 等人^[8]曾分别用改良后的简单的相对论组态相互作用 (SRCI) 方法和相对论多通道理论 (RMCT) 方法对该实验结果进行了深入细致地理论研究,获得的结果与实验符合得很好.这里,为了检验我们的程序的可靠性以及研究组态相互作用对较低核电荷数离子的双电子复合过程的影响,进一步计算了该离子的双电子复合数据并与 Mannervik 等人^[6]的高精度实验结果和其他理论计算结果做了对比.

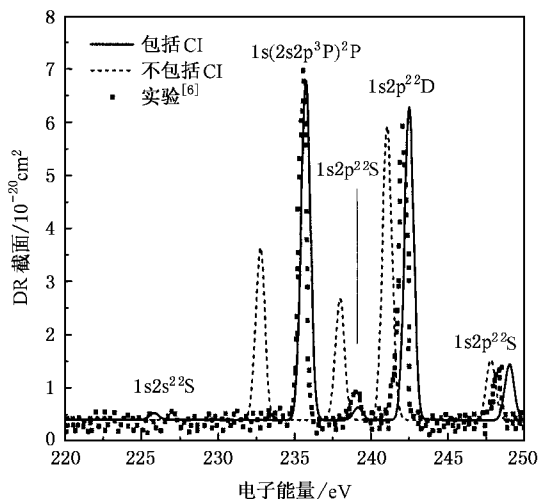


图1 类氦 C^{4+} 离子的 KLL 共振 DR 截面

图1给出了类氦 C^{4+} 离子的双电子复合截面随电子能量的变化曲线.其中实线表示的是考虑了所有来自 3l 激发态的组态相互作用后的计算结果;虚线表示的是单组态下的计算结果;离散点是 Mannervik 等人的高精度实验结果^[6].从图中可以看出,不包括组态相互作用时,我们计算的峰的位置和线型都与实验结果相差很大,且在 227eV 附近不出

现共振峰,但当包括组态相互作用时,除几个较小的共振峰的位置与实验有很小的差别外,其他峰的位置以及线型都与实验结果符合得很好.其中,来自谱项 $1s(2s2p^3P)P$ 和 $1s2p^2D$ 的强共振峰的位置仅比实验结果偏离了 0.2eV 和 0.46eV. 特别需要指出的

是 $1s2s^2S_{1/2}$ 态虽然不能通过直接辐射形成复合离子态,但由于它与组态 $1s2p^2S_{1/2}$ 的强烈混合,使得它可以衰变到 $1s^22p^2P_{1/2,3/2}$ 态. 因此考虑了组态相互作用后,在 227eV 附近出现了来自共振态 $1s2s^2S_{1/2}$ 的共振峰. 实验上也确实观测到了该共振过程.

表 1 类锂 C^{3+} 离子的几个共振双激发态相对于电离限($1s^21S$)的激发能和双电子复合截面

双激发态	激发能/eV				截面/ $10^{-21}cm^2eV$			
	本文	理论 ^[7]	理论 ^[6]	实验 ^[6]	本文	理论 ^[7]	理论 ^[6]	实验 ^[6]
$1s2s^2S_{1/2}$	225.818	226.764	227.13	227.10(9)	0.66	0.65		0.7(0.2)
$1s(2s2p^3P)P_{1/2}$	235.723	235.114	235.495	235.49(1)	16.12	47.97 ^{a)}	10.77	32.25 ^{a)}
$1s(2s2p^3P)P_{3/2}$	235.730	235.13			31.86		21.58	39
$1s(2s2p^1P)P_{1/2}$	239.155	239.427	238.96	238.99(2)	0.61	1.75 ^{b)}	1.76	5.21 ^{b)}
$1s(2s2p^1P)P_{3/2}$	239.157	239.424			1.14		3.45	13.2
$1s2p^2D_{3/2}$	242.498	242.043	242.029	242.05(1)	14.88	41.41 ^{c)}	12.79	31.86 ^{c)}
$1s2p^2D_{5/2}$	242.481	242.032			26.53		19.07	42.2
$1s2p^2P_{3/2}$	244.112	242.244	243.269		0.07		11	
$1s2p^2S_{1/2}$	249.024	248.096	248.16	248.18(2)	5.31	5.7		8.4

a) $1s(2s2p^3P)P_{1/2}$ 和 $1s(2s2p^3P)P_{3/2}$ 的 DR 截面之和 b) $1s(2s2p^1P)P_{1/2}$ 和 $1s(2s2p^1P)P_{3/2}$ 的 DR 截面之和 c) $1s2p^2D_{3/2}$ 和 $1s2p^2D_{5/2}$ 的 DR 截面之和.

表 1 进一步给出了类锂 C^{3+} 离子的几个主要的共振双激发态的激发能和 DR 截面的值,并与其他理论和实验结果做了详细比较.总体上看,不同的理论与实验结果都能较好地符合.对于激发能,除 $1s2s^2S_{1/2}$ 态(本文的结果偏小), $1s2p^2P_{3/2}$ 和 $1s2p^2S_{1/2}$ 态(本文的结果偏大)之外,本文计算的结果与其他的理论和实验结果都符合得非常好.对于 DR 截面,本文计算的 $1s2s^2S_{1/2}$ 态和 $1s2p^2S_{1/2}$ 态的结果,与 Xu 等人的理论值^[7]以及 Mannervik 等人的实验值^[6]符合得都很好.本文计算的 $1s2p^2D$ 态的 DR 截面,与 Bellantone 等人的理论结果^[16]、我们以前用 Cowan 的准相对论方法计算的结果 $42.109(cm^2eV)^{91}$ 以及实验结果 $37.7(cm^2eV)^{61}$ 也能较好得符合.但是,我们也注意到本文计算的 $1s2p^2P_{3/2}$ 态的 DR 截面与 Xu 等人的理论结果^[7]有较大的差别,同时不同理论计算的 $1s2s2p$ 态的 DR 截面与实验的符合情况都不是很好.所有这些差别,有待于进一步探讨.

3.2. Ar^{16+} 离子的双电子复合

Ar 离子的双电子复合数据被广泛用于惯性约束聚变和磁约束聚变等离子体中电子温度和密度的诊断^[17]. 实验上, Ali 等人早期曾测量过类氩 Ar^{16+} 离

子的双电子复合截面^[18]. 近来, Beiersdorfer 等人进一步测量了类锂 Ar^{15+} 离子的一些双激发态的伴线波长^[19]; Zou 等人在 EBIT 上通过观测两电子—光子跃迁测量了其 KLL 共振双电子复合截面^[20]. 理论上也有许多人做过这方面的工作^[20-24].

表 2 类氩 Ar^{16+} 离子的双电子复合截面($10^{-20}cm^2eV$)

双激发态	理论			实验	
	本文	文献[21]	文献[20]	文献[20]	文献[18]
$1s2s^2S_{1/2}$	1.09	0.983	0.974	1.05±0.1	
$1s2s2p$	8.49	11.2	13.1	12.8±1.3	
$1s2p^2$	54.2	56.4	50.1	49.5±6.0	
KLL 共振 DR 总截面	63.8	68.6	64.2	63.4±7.5	59.4

表 2 列出了本文计算的类氩 Ar^{16+} 离子复合到类锂离子的 $1s2s^2$, $1s2s2p$, $1s2p^2$ 组态的双电子复合截面、所有 KLL 双电子复合的总截面以及其他的理论和实验结果. 从表 2 中可以看出,除 $1s2s2p$ 组态我们的计算结果偏小外,本文的数据更接近实验值. 另外,对于双激发态 $1s2s^2S_{1/2}$ 的电离能,本文的计算结果为 2160.2eV, Zou 等人^[20]的理论值及在 EBIT 上测得的实验值分别为 2162.5eV 和 $2159.7 ± 1.1eV$; 对于两电子-光子跃迁 $1s2s^2S_{1/2} → 1s^22p^2P_{1/2,3/2}$ 的辐射衰变率,本文的计算结果为 $4.93(10^{12})$

s^{-1}) Zou 等人^[20]的理论值和实验值分别为 4.42 ($10^{12} s^{-1}$) 和 $4.76 \pm 0.57(10^{12} s^{-1})$, 这些数据符合得也相当好.

表 3 进一步列出了我们计算的类锂 Ar^{15+} 离子的几个双激发态的伴线波长及其他理论和实验的结果.

表 3 类锂 Ar^{15+} 离子的几个双激发态的伴线波长(\AA)

标记	理论						实验
	本文	文献 22]	文献 23]	文献 24]	文献 20]	文献 20]	文献 19]
s	3.96775	3.96738	3.96918				
r	3.98348	3.98150	3.98568				3.98353(11)
q	3.98160	3.98370	3.98351				3.98141(11)
t	3.96883	3.96659	3.97000				
u	4.01758	4.01607	4.01790				4.01484(11)
v	4.01866	4.01719	4.01902				4.01593(14)
a	3.98648			3.9860			
j	3.99521			3.9941			
k	3.99125			3.9901			
o	4.07652				4.0731 ^{a)}	4.0699	4.07709 ^{b)}
p	4.07240				4.0689 ^{a)}	4.0656	4.07307 ^{b)}

a) NIST 数据库中的数据^[20], b) 文献 20].

3.3. Kr^{34+} 离子的双电子复合

有关类氩 Kr^{34+} 离子的双电子复合也有较多的工作^[26-28]. Fuchs 等人曾测量过高离化态 Kr 离子的双电子复合截面,并用 HULLAC 程序作了理论分析^[26];Chen 曾用多组态 Dirac-Fock 方法计算过类氩 Kr^{34+} 离子的双电子复合速率系数^[27];史习珩等人也用 Flexible Atomic Code (FAC) 程序研究了高离化态 Kr 离子的双电子复合过程^[28]. 作为比较,这里我们也对此过程作了系统地研究.

图 2 给出了在半高全宽 (FWHM) 为 50eV 下,本文计算的 Kr^{34+} 离子的 KLL 双电子复合截面随电子能量的变化曲线,并与 Fuchs 等人^[26]的理论结果作了比较.可以看出,两条曲线基本符合.本文给出的总截面为 $56.2(10^{-20} \text{ cm}^2 \text{ eV})$,它与 Fuchs 等人^[26]的计算结果 $54.2(10^{-20} \text{ cm}^2 \text{ eV})$ 也能很好的相符.

表 4 进一步列出了双电子复合过程中类氩 Kr^{34+} 离子的几个 KLL 共振双激发态的 Auger 衰变率和总辐射衰变率.比较几种不同理论方法获得的结果,可以看出,除 $1s2s(1S)2p^2P_{3/2}$ 态的总辐射衰变率与其他

果.其中, $1s2l2l' \rightarrow 1s^22p$ 电偶极跃迁的标记使用了 Gabriel^[25]引入的符号.从表中可以看出,对于双激发态的伴线波长,本文的计算结果无论与其他理论还是实验相比,都能很好地符合,与实验结果的最大差别不超过 0.07%.

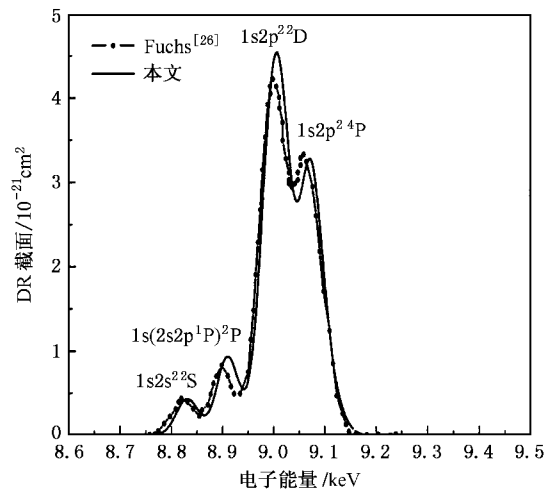


图 2 类氩 Kr^{34+} 离子的 KLL 共振 DR 截面

理论结果符合得不好外,其他的数据符合得都很好.

3.4. U^{90+} 离子的双电子复合

类氩 U^{90+} 离子的核电荷数很高,目前还没有看到有关该离子的双电子复合截面的实验观测和理论计算方面的报道.但在对与其相关的电子与高离化态 U 离子碰撞导致的共振激发过程的理论研究中,人们已经注意到 Breit 效应可以引起共振激发截面

显著地增加^[12],这种效应在实验上也得到了很好的验证^[29—31].这里,我们进一步研究了Breit效应对类

表 4 类铯 Kr³³⁺ 离子 1s2l2l' 双激发态的 Auger 衰变率和总辐射衰变率(X [Y] 表示 X · 10^Y)

双激发态	A_{β}^a/s^{-1}				$\sum A_{\beta}^a/s^{-1}$			
	本文	FAC ^[28]	HULLAC ^[26]	MCDF ^[27]	本文	FAC ^[28]	HULLAC ^[26]	MCDF ^[27]
2s2s ²² S _{1/2}	1.5[14]	1.5[14]	1.4[14]	1.5[14]	5.3[13]	5.4[13]	5.0[13]	5.1[13]
1s2(³ S)2p ² P _{1/2}	1.0[14]	7.5[13]	7.8[13]	9.7[13]	7.6[14]	7.7[14]	6.0[14]	7.4[14]
1s2(¹ S)2p ² P _{1/2}	4.8[13]		4.8[13]	4.5[13]	1.0[15]		1.0[15]	9.7[14]
1s2(¹ S)2p ² P _{3/2}	1.1[14]		1.1[14]	1.1[14]	5.5[13]		1.8[13]	2.9[13]
1s2p ²⁴ P _{5/2}	7.1[13]	7.2[13]	7.1[13]	7.0[13]	3.7[14]	3.9[14]	3.5[14]	3.8[14]
1s2p ²² D _{3/2}	1.2[14]	1.2[14]	1.2[14]	1.1[14]	1.5[15]	1.5[15]	1.4[15]	1.4[15]
1s2p ²² D _{5/2}	9.9[13]	9.7[13]	9.9[13]	9.8[13]	5.4[14]	5.4[14]	5.2[14]	5.0[14]
1s2p ²² P _{3/2}	4.0[13]		4.7[13]	4.1[13]	2.1[15]		2.0[15]	1.9[15]
1s2p ²² S _{1/2}	2.7[13]		3.1[13]	3.0[13]	1.0[15]		1.0[15]	9.6[14]

氦 U⁹⁰⁺ 离子双电子复合截面的影响.

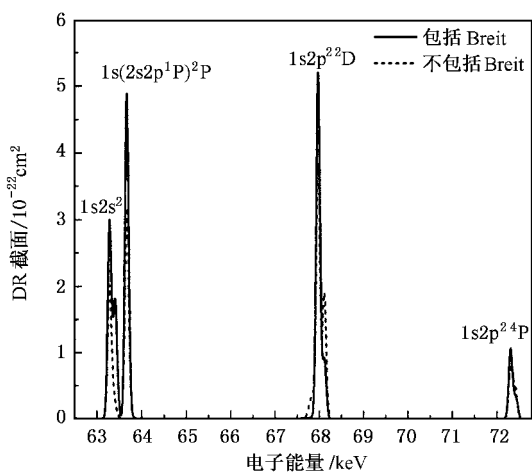


图 3 类氦 U⁹⁰⁺ 离子的 KLL 共振 DR 截面

图 3 给出了在 Auger 衰变率计算中包括和不包括 Breit 效应时类氦 U⁹⁰⁺ 离子的双电子复合截面随电子能量的变化曲线.从图中可以看出,在低能区 Breit 效应使得双电子复合截面显著地增加.例如,在共振峰 1s2s² 和 1s(2s2p¹P)²P 上,Breit 效应的贡献几乎达到了一半.但随着电子能量的增高,Breit 效应对双电子复合截面的贡献明显减小.这可以解释为当 Auger 电子能量较小时与 Auger 初态和 Auger

末态相应的电子轨道间的差别要小于 Auger 电子能量较大时的差别,因而在 Auger 电子能量较小时(2) 式中 Breit 效应对 Auger 衰变率的贡献较大.而双电子复合截面与 Auger 衰变率几乎成线性关系,所以 Breit 效应对低能区的双电子复合截面有很大的贡献.因此,在研究高离化态重离子的双电子复合过程时,必须很好的考虑 Breit 效应的贡献.

4. 结 论

总之,本文在 MCDF 理论框架下,发展了研究双电子复合过程的相对论组态相互作用计算程序,并以类氦 C⁴⁺, Ar¹⁶⁺, Kr³⁴⁺ 和 U⁹⁰⁺ 离子为例,具体地研究了低 Z、中 Z 和高 Z 离子的 KLL 双电子复合过程中需要特别关注的组态相互作用效应和 Breit 效应的影响.结果表明,组态相互作用不仅可以极大地影响双电子共振峰的强度,而且也可以极大地改变双电子共振峰的位置,而 Breit 效应对高离化态重离子的双电子复合截面的影响也很重要.特别是对低能区的双电子复合截面有很大的贡献.与已有的理论和实验相比,我们的结果都能与之很好地符合.因此,我们所发展的程序可用于任意离子的任意一个双电子复合过程的精确研究.

- [1] 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、李天明 1995 物理学报 **44** 1712]
- [2] Yan J , Li P , Liu C L , Qiu Y B , Fang Q Y 2001 *Chin. Phys.* **10** 1124
- [3] Gu P J , Wang J G , Chang T Q 1999 *High Power Laser and Particle Beams* **11** 785 (in Chinese) [古培俊、王建国、常铁强 1999 强激光与粒子束 **11** 785]
- [4] Glenzer S H , Rozmus W , MacGowan B J *et al* 1999 *Phys. Rev. Lett.* **82** 97
- [5] Dasgupta A , Whitney K G 2004 *Phys. Rev. A* **69** 022702
- [6] Mannervik S , Asp S , Broström L *et al* 1997 *Phys. Rev. A* **55** 1810
- [7] Xu Y Q , Qu Y Z , Zhang X H , Li J M 2000 *Phys. Rev. A* **62** 022715
- [8] Zou Y , Li Y M , Liu Y , Fang Q Y 2001 *Phys. Rev. A* **63** 052703
- [9] Dong C Z , Wang J G , Qu Y Z , Zhao Y , Chen G Y 1998 *Chinese Journal of Atomic and Molecular Physics* (Supplement) 107 (in Chinese) [董晨钟、王建国、屈一至、赵仪、陈冠英 1998 原子与分子物理学报(增刊) 107]
- [10] Zhao L B , Han G X , Li S C 1995 *Chinese Journal of Computational Physics* **12** 490 (in Chinese) [赵力波、韩国兴、李世昌 1995 计算物理 **12** 490]
- [11] Chen M H 1990 *Phys. Rev. A* **41** 4102
- [12] Kollmar K , Grun N , Scheid W 2000 *Eur. Phys. J. D* **10** 27
- [13] Dong C Z , Wang J G , Qu Y Z 1998 *Chin. Phys. Lett.* **15** 263
- [14] Fritzsche S , Fischer C F , Dong C Z 2000 *Compt. Phys. Commun.* **124** 340
- [15] Fritzsche S , Aksela H , Dong C Z *et al* 2003 *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research B* **205** 93
- [16] Bellantone R , Hahn Y 1989 *Phys. Rev. A* **40** 6913
- [17] Cheng X L , Zhang H , Yang X D , Wang C M 2002 *Chinese Journal of Atomic and Molecular Physics* **19** 331 (in Chinese) [程新路、张红、杨向东、王春梅 2002 原子与分子物理学报 **19** 331]
- [18] Ali R , Bhalla C P , Cocks C L , Schulz M , Stokli M 1991 *Phys. Rev. A* **44** 223
- [19] Beiersdorfer P , Bitter M , Hey D , Reed K J 2002 *Phys. Rev. A* **66** 032504
- [20] Zou Y , Crespo López-Urrutia J R , Ullrich J *et al* 2003 *Phys. Rev. A* **67** 042703
- [21] Behar E 2004 *Phys. Rev. A* **69** 022704
- [22] Chen M H , Crasemann B , Mark H 1981 *Phys. Rev. A* **24** 1852
- [23] Nilsen J 1988 *At. Data Nucl. Data Tables* **38** 339
- [24] Bitter M , Gu M F , Vaisstein L A *et al* 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 265001
- [25] Gabriel A H 1972 *Mon. Not. R. Astron. Soc.* **160** 99
- [26] Fuchs T , Biedermann C , Radtke R 1998 *Phys. Rev. A* **58** 4518
- [27] Chen M H 1986 *At. Data Nucl. Data Tables* **34** 301
- [28] Shi X H , Wang Y S , Chen C Y , Gu M F 2004 *Chinese Journal of Atomic and Molecular Physics* (Supplement) 127 (in Chinese) [史习珩、王炎森、陈重阳、顾明峰 2004 原子与分子物理学报(增刊) 127]
- [29] Zimmerer P , Grun N , Scheid W 1991 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **24** 2663
- [30] Grail M , Grun N , Scheid W 1998 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **31** 4645
- [31] Kandler T , Mokler P H , Stöhlker Th *et al* 1995 *Phys. Lett A* **204** 274

Relativistic theoretical study on the KLL dielectronic recombination of helium-like ions^{*}

Zhang Deng-Hong¹⁾ Dong Chen-Zhong^{1)‡} Xie Lu-You¹⁾ Ding Xiao-Bin¹⁾ Fu Yan-Biao¹⁾

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

² *National Laboratory of Heavy-Ion Accelerator of Lanzhou, Lanzhou 730000, China*

(Received 7 May 2005 ; revised manuscript received 21 June 2005)

Abstract

Based on the multiconfiguration Dirac-Fock method, a new program was developed for the calculation of cross sections of dielectronic recombination (DR). As an example, the decay rates and the corresponding DR cross sections have been systematically calculated for the doubly excited state $1s2l2l'$ of C^{3+} , Ar^{15+} , Kr^{33+} and U^{89+} ions. For C^{4+} , Ar^{16+} and Kr^{34+} ions, a good agreement has been found between the present calculations and the previous theoretical and experimental results; for U^{90+} ion, the effect of the Breit interaction on the DR cross sections has been emphasized especially.

Keywords : dielectronic recombination, cross section, MCDF method

PACC : 3120B, 3480L

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10274062, 10376026, 10434100), the Excellent Young Teachers Program of MOE, P. R. C., 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. NWNKJXGC-214).

[‡] E-mail: dongcz@nwnu.edu.cn