

# 质子与 $\text{He}^+$ , $\text{Li}^{++}$ 高能碰撞过程中 电子俘获截面的理论计算<sup>\*</sup>

周效信 张现周<sup>1)</sup> 陈宏善 董晨钟

(西北师范大学物理系, 兰州 730070)

1)(河南师范大学物理系, 新乡 453002)

(1996 年 9 月 11 日收到; 1996 年 11 月 25 日收到修改稿)

用 OBK 近似和 CDW 近似计算了  $\text{H}^+ + \text{He}^+$  和  $\text{H}^+ + \text{Li}^{++}$  碰撞过程中电子俘获到激发态的分截面与俘获到基态分截面的比值, 结果发现用 OBK 近似给出的比值和用 CDW 方法所给出的相应比值在高能区符合得很好. 由此提出了一种用于计算高能  $\text{H}^+$  与任一类氢离子碰撞的电子俘获总截面及任一激发态分截面的方法.

PACC: 3470

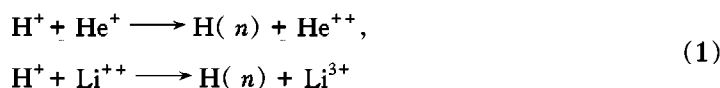
## 1 引 言

在高能离子-原子或离子-离子碰撞中, Oppenheimer-Brinkman-Kramers(OBK)近似能够给出电子俘获截面的解析表达式, 使得进行数值计算变得较为容易. 但即使在能量甚高时, 由该近似得到的电子俘获总截面仍然比实验值高出 2—4 倍, 其渐近行为与二级微扰理论(如连续扭曲波近似、二级玻恩近似等)也不同. 在高能区, 二级微扰理论能够给出与实验相一致的结果, 电子俘获截面的渐近行为是  $Q \propto v^{-11}$  ( $v$  为入射离子相对于靶离子的速度); 而 OBK 近似的渐近行为是  $Q \propto v^{-12}$ , 两者明显不符. 在二级近似中, 连续扭曲波(continuum-distorted-wave, CDW)近似在高能区给出的电子俘获截面与实验符合得很好<sup>[1,2]</sup>. 这是因为 CDW 近似不仅考虑了连续中间态的效应, 而且还考虑了被俘获的电子波函数在初通道和末通道的扭曲效应, 所以能给出较好的电荷转移截面数值. 对于 OBK 近似, 既没有考虑中间态的效应, 也没有考虑到入射离子和靶离子对被转移电子波函数的影响(即没有考虑入射离子或靶离子对电子的长程库仑作用), 这样边界条件自然不能满足, 它的结果与实验值不符是可以理解的.

由于 OBK 近似能给出电子俘获截面的解析表达式, 无论是用它来处理电子俘获到基态还是俘获到激发态都是容易进行的. 可是, 用 CDW 近似处理电子俘获到基态是容易

<sup>\*</sup> 国家自然科学基金资助的课题.

的<sup>[3]</sup>,但对俘获到激发态的计算就变得很复杂<sup>[2,4]</sup>. Crothers<sup>[4]</sup>分析了由 CDW 方法给出电子俘获截面的标度(scaling)情况,在 高能区域,俘获到激发态  $n$  的分截面  $Q_n$  与  $n^{-3}$  成正比(其中  $n$  为电子俘获到激发态的主量子数),这与 OBK 近似的标度情况是一致的.但在这两种近似下的标度因子是不同的,这些标度因子依赖于入射离子的能量(或速度)、碰撞体系中入射离子的核电荷数和靶离子的核电荷数.然而在同一近似方法下,俘获到激发态截面的标度因子与基态截面的标度因子差别很小.这样,虽然由这两种近似方法给出的电子俘获截面数值相去甚远,但由于标度性质相同及标度因子的表现,我们有理由假定在相同的入射能量下,对同一碰撞体系来说,其激发态分截面与基态分截面比值  $Q_n^{\text{OBK}}/Q_{1s}^{\text{OBK}}$  与  $Q_n^{\text{CDW}}/Q_{1s}^{\text{CDW}}$  近似相等,其中  $n, 1s$  分别表示主量子数为  $n$  的激发态和基态,  $Q_n^{\text{OBK}}, Q_n^{\text{CDW}}$  分别表示由 OBK 近似和 CDW 近似计算出的电子俘获到某一态的分截面,这个近似条件只能在高能区域才能够成立. Belkić 等<sup>[1]</sup>计算了高能  $\text{H}^+ + \text{H}$  碰撞的电子俘获过程,发现由 OBK 方法得到的分截面比值与 CDW 方法得到的分截面比值在同一入射能量下符合得较好.本文试图通过对下述反应过程



进行计算,发现对于这些碰撞体系也有相似的结论,从而提出一种能用于计算高能  $\text{H}^+$  与任一类氢离子碰撞的电子俘获总截面和任一激发态分截面的方法.

## 2 原有理论方法概述和初步计算结果

### 2.1 OBK 近似

忽略碰撞体系的核间势作用的一级玻恩近似为 OBK 近似.考虑一个单电子碰撞体系,采用  $n$  壳层的电子动量密度矩阵及 Fourier 变换法,与文献[5]得到 eikonal 结果的方法相似,可以得到在 OBK 近似情况下电子由  $1s$  轨道俘获到激发态  $n$  壳层的分截面为

$$Q_n^{\text{OBK}} = \frac{2^8 \pi Z_p^5 Z_t^5}{5 n^3 v^2 \left[ Z_t^2 + \left( \frac{1}{2} v - \Delta \epsilon \eta \right)^2 \right]^5}, \quad (2)$$

式中  $Z_p, Z_t$  分别为入射离子和靶离子的核电荷数,  $\eta = \frac{1}{v}$  ( $v$  为入射离子的速度);  $\Delta \epsilon$  为电子初、末态的束缚能之差(即  $\Delta \epsilon = \frac{1}{2} (Z_t^2 - Z_p^2/n^2)$ ).

### 2.2 CDW 近似

Cheshire<sup>[3]</sup>提出了 CDW 近似方法.该方法将被俘获电子的初态和末态波函数同等对待,使之都满足相应的边界条件,且都考虑了连续中间态的效应.这就部分地考虑了二级

效应,因此所得结果要比仅考虑一级近似的结果精确。

若用  $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{s}$  分别表示被俘获电子相对于靶离子和入射离子的位置矢量,在 CDW 近似下,电子俘获过程的跃迁振幅的超前形式可写成<sup>[6]</sup>(在该近似下,超前形式与滞后形式无差别)

$$R_{if}(\boldsymbol{\eta}) = -\exp\left(\frac{\pi Z_p}{2v} + \frac{\pi Z_t}{2v}\right) \Gamma\left(1 - i\frac{Z_p}{v}\right) \Gamma\left(1 - i\frac{Z_t}{v}\right) \mathbf{J} \cdot \mathbf{K}, \quad (3)$$

式中

$$\mathbf{J} = \int d\mathbf{x} \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}) (\nabla_x \varphi_{1s}(\mathbf{x})) {}_1F_1\left(i\frac{Z_t}{v}, 1, i\mathbf{v} \cdot \mathbf{x} + vx\right),$$

$$\mathbf{K} = \int d\mathbf{s} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{s}) \varphi_{nlm}(\mathbf{s}) \nabla_s {}_1F_1\left(i\frac{Z_p}{v}, 1, i\mathbf{v} \cdot \mathbf{s} + vs\right).$$

在上述表达式中,

$$\mathbf{p} = -\boldsymbol{\eta} - \left(\frac{\Delta\varepsilon}{v^2} + \frac{1}{2}\right) \mathbf{v},$$

$$\mathbf{q} = \boldsymbol{\eta} + \left(\frac{\Delta\varepsilon}{v^2} - \frac{1}{2}\right) \mathbf{v},$$

其中  $\boldsymbol{\eta}$  为电子的横向动量转移,  ${}_1F_1$  为合流超几何函数,  $\varphi_{1s}(\mathbf{x})$ ,  $\varphi_{nlm}(\mathbf{s})$  分别为被俘获电子在初态和末态的波函数. 电子由  $1s$  态到  $(nlm)$  态的俘获截面为

$$Q_{nlm} = \frac{1}{(2\pi v)^2} \int |R_{if}(\boldsymbol{\eta})|^2 d\boldsymbol{\eta}, \quad (4)$$

俘获到一个给定的  $n$  壳层的分截面为

$$Q_n^{\text{CDW}} = \sum_{l,m} Q_{nlm}. \quad (5)$$

为了使(3)式的计算容易进行,可以将电子的束缚态波函数由球坐标系变换到抛物柱面坐标系. 根据文献[7]的方法,跃迁振幅被表达成 Lauricella 多项式的线性组合,从而计算出(4)式的俘获截面,最后根据(5)式对  $m, l$  求和得到电子俘获的分截面.

### 2.3 初步计算结果

利用上述理论方法,我们分别用 OBK 近似和 CDW 近似方法计算了(1)式中速度范围为  $v/v_e > 2$  反应过程的分截面( $v_e$  为电子在靶离子轨道上的速度). 若将速度范围变换成能量范围相应于对  $\text{H}^+ + \text{He}^+$  系统,能量大于 100 keV,对  $\text{H}^+ + \text{Li}^{++}$  系统,则能量大于 400 keV,并求出俘获到激发态的分截面与基态分截面的比值. 表 1 和表 2 分别列出了  $\text{H}^+ + \text{He}^+$  和  $\text{H}^+ + \text{Li}^{++}$  的初步计算结果. 由表中可以看出,具有相同的入射能量时,虽然由两种方法得到的  $Q_{1s}$  相差很大,但相应的分截面比值却符合得很好,这导致我们提出本文的计算方法。

表 1  $\text{H}^+ + \text{He}^+$  碰撞俘获到基态的分截面和俘获到激发态的分截面比值

E/keV	$Q_{1s}(10^{-17}\text{cm}^2)$		$Q_2/Q_{1s}$		$Q_3/Q_{1s}$		$Q_4/Q_{1s}$		$Q_5/Q_{1s}$	
	OBK	CDW	OBK	CDW	OBK	CDW	OBK	CDW	OBK	CDW
100	3.25	1.10	$1.34^{-1}$	$1.41^{-1}$	$4.00^{-2}$	$4.48^{-2}$	$1.69^{-2}$	$1.98^{-2}$	$8.65^{-3}$	$1.04^{-2}$
200	$7.19^{-1}$	$1.64^{-1}$	$1.58^{-1}$	$1.54^{-1}$	$4.86^{-2}$	$4.83^{-2}$	$2.08^{-2}$	$2.09^{-2}$	$1.07^{-2}$	$1.09^{-2}$
300	$2.01^{-1}$	$3.96^{-2}$	$1.59^{-1}$	$1.55^{-1}$	$4.93^{-2}$	$4.86^{-2}$	$2.11^{-2}$	$2.10^{-2}$	$1.09^{-2}$	$1.09^{-2}$
400	$6.95^{-2}$	$1.28^{-2}$	$1.57^{-1}$	$1.54^{-1}$	$4.85^{-2}$	$4.79^{-2}$	$2.08^{-2}$	$2.07^{-2}$	$1.07^{-2}$	$1.07^{-2}$
500	$2.81^{-2}$	$4.99^{-3}$	$1.54^{-1}$	$1.52^{-1}$	$4.75^{-2}$	$4.71^{-2}$	$2.03^{-2}$	$2.03^{-2}$	$1.05^{-2}$	$1.05^{-2}$
600	$1.28^{-2}$	$2.23^{-3}$	$1.51^{-1}$	$1.50^{-1}$	$4.66^{-2}$	$4.64^{-2}$	$1.98^{-2}$	$1.99^{-2}$	$1.02^{-2}$	$1.03^{-2}$
1000	$1.15^{-3}$	$2.00^{-4}$	$1.44^{-1}$	$1.45^{-1}$	$4.37^{-2}$	$4.42^{-2}$	$1.86^{-2}$	$1.89^{-2}$	$9.55^{-3}$	$9.78^{-3}$
1200	$4.59^{-4}$	$8.08^{-5}$	$1.41^{-1}$	$1.42^{-1}$	$4.28^{-2}$	$4.35^{-2}$	$1.82^{-2}$	$1.86^{-2}$	$9.34^{-3}$	$9.61^{-3}$
1500	$1.44^{-4}$	$2.59^{-5}$	$1.38^{-1}$	$1.40^{-1}$	$4.18^{-2}$	$4.28^{-2}$	$1.78^{-2}$	$1.83^{-2}$	$9.12^{-3}$	$9.43^{-3}$
2000	$3.09^{-5}$	$5.78^{-6}$	$1.35^{-1}$	$1.38^{-1}$	$4.07^{-2}$	$4.20^{-2}$	$1.73^{-2}$	$1.79^{-2}$	$8.87^{-3}$	$9.24^{-3}$
4000	$6.47^{-7}$	$1.36^{-7}$	$1.31^{-1}$	$1.34^{-1}$	$3.90^{-2}$	$4.06^{-2}$	$1.65^{-2}$	$1.73^{-2}$	$8.46^{-3}$	$8.94^{-3}$
6000	$6.26^{-8}$	$1.43^{-8}$	$1.29^{-1}$	$1.33^{-1}$	$3.84^{-2}$	$4.03^{-2}$	$1.62^{-2}$	$1.72^{-2}$	$8.31^{-3}$	$8.84^{-3}$
10000	$3.17^{-9}$	$8.03^{-10}$	$1.27^{-1}$	$1.32^{-1}$	$3.78^{-2}$	$4.00^{-2}$	$1.60^{-2}$	$1.71^{-2}$	$8.19^{-3}$	$8.81^{-3}$

注:表中数值  $a^n$  表示  $a \times 10^n$ .表 2  $\text{H}^+ + \text{Li}^{++}$  碰撞俘获到基态的分截面和俘获到激发态的分截面比值

E/keV	$Q_{1s}(10^{-17}\text{cm}^2)$		$Q_2/Q_{1s}$		$Q_3/Q_{1s}$		$Q_4/Q_{1s}$		$Q_5/Q_{1s}$	
	OBK	CDW	OBK	CDW	OBK	CDW	OBK	CDW	OBK	CDW
400	$6.83^{-1}$	$1.82^{-1}$	$1.37^{-1}$	$1.39^{-1}$	$4.12^{-2}$	$4.26^{-2}$	$1.75^{-2}$	$1.83^{-2}$	$8.97^{-3}$	$9.45^{-3}$
500	$3.72^{-1}$	$8.90^{-2}$	$1.38^{-1}$	$1.40^{-1}$	$4.18^{-2}$	$4.27^{-2}$	$1.77^{-2}$	$1.83^{-2}$	$9.11^{-3}$	$9.45^{-3}$
600	$2.10^{-1}$	$4.68^{-2}$	$1.39^{-1}$	$1.40^{-1}$	$4.20^{-2}$	$4.27^{-2}$	$1.78^{-2}$	$1.83^{-2}$	$9.12^{-3}$	$9.41^{-3}$
1000	$3.15^{-2}$	$6.11^{-3}$	$1.38^{-1}$	$1.38^{-1}$	$4.16^{-2}$	$4.21^{-2}$	$1.76^{-2}$	$1.80^{-2}$	$9.06^{-3}$	$9.26^{-3}$
1200	$1.45^{-2}$	$2.75^{-3}$	$1.37^{-1}$	$1.38^{-1}$	$4.12^{-2}$	$4.18^{-2}$	$1.75^{-2}$	$1.78^{-2}$	$8.98^{-3}$	$9.18^{-3}$
1500	$5.32^{-3}$	$9.88^{-4}$	$1.35^{-1}$	$1.37^{-1}$	$4.07^{-2}$	$4.14^{-2}$	$1.73^{-2}$	$1.76^{-2}$	$8.87^{-3}$	$9.07^{-3}$
2000	$1.34^{-3}$	$2.48^{-4}$	$1.34^{-1}$	$1.35^{-1}$	$4.01^{-2}$	$4.09^{-2}$	$1.70^{-2}$	$1.74^{-2}$	$8.72^{-3}$	$8.95^{-3}$
4000	$3.65^{-5}$	$7.16^{-6}$	$1.30^{-1}$	$1.32^{-1}$	$3.88^{-2}$	$3.98^{-2}$	$1.64^{-2}$	$1.69^{-2}$	$8.42^{-3}$	$8.71^{-3}$
6000	$3.89^{-6}$	$8.11^{-7}$	$1.29^{-1}$	$1.31^{-1}$	$3.83^{-2}$	$3.94^{-2}$	$1.62^{-2}$	$1.68^{-2}$	$8.29^{-3}$	$8.62^{-3}$
10000	$2.13^{-7}$	$4.86^{-8}$	$1.27^{-1}$	$1.30^{-1}$	$3.78^{-2}$	$3.91^{-2}$	$1.60^{-2}$	$1.66^{-2}$	$8.18^{-3}$	$8.54^{-3}$

注:表中数值  $a^n$  表示  $a \times 10^n$ .

### 3 方法的提出及计算结果的比较

一般而言, CDW 方法在高能区 ( $v/v_0 \geq 2.5$ ) 能给出很精确的电子俘获截面, 而 OBK 近似给出的结果往往比实验数据高出 2—4 倍. 而上述结果显示, 由这两种方法给出的电子俘获到激发态的分截面与基态的分截面之比值符合得很好. 结合文献[1]给出的  $H^+ + H$  的数据和我们初步得到的结果, 可以预计用 OBK 近似来计算  $H^+$  与任一个类氢离子碰撞的电子俘获截面比值, 都能够得到与 CDW 方法给出相似的结果. 然而用 CDW 方法对激发态的计算很复杂<sup>[6]</sup>, 尤其是对高激发态更是如此, 而 OBK 近似能够给出正确的截面比值, 且计算简便. 为此, 我们提出利用 CDW 近似给出的俘获到基态的分截面, 再结合 OBK 近似给出的截面比值, 计算  $H^+$  与任一个类氢离子碰撞的电子俘获到激发态的分截面和俘获的总截面, 这是一种较为简单的方法.

首先, 用 CDW 方法计算出  $H^+$  与类氢离子碰撞过程中电子俘获到基态的分截面, 这是比较容易的, 因为文献[3]已经得到这一结果的半解析形式; 其次, 利用(2)式计算出 OBK 近似下的电子俘获到基态和各个激发态  $n$  壳层的分截面, 进而计算出不同激发态分截面与基态分截面的比值; 然后, 用 CDW 近似下的基态结果代替 OBK 基态的截面, 那么俘获到各个激发态的分截面可用 CDW 基态截面乘以由 OBK 近似给出相应的截面比值而得到; 最后, 利用得到的各分截面由下式近似求出<sup>[8]</sup>电子俘获的总截面:

$$Q_t = \sum_{n=1}^N Q_n + \gamma(3, N) Q_{n+1},$$

式中

$$\gamma(3, N) = 1 + (N+1)^3 \zeta(3) - \sum_{n=1}^{N+1} \left( \frac{N+1}{n} \right)^3,$$

其中  $\zeta(3)$  为黎曼 zeta 函数. 我们取  $N=4$ , 则

$$Q_t = \sum_{n=1}^4 Q_n + 3.05 Q_5.$$

用我们的方法重新计算了(1)式中的反应过程, 并与直接用 CDW 方法得出的结果进行了比较. 对于俘获到激发态的分截面, 用这两种不同方法得到的结果符合得很好, 这是基于表1和表2的结果; 对于俘获的总截面, 在表3和表4列出了用我们的方法和直

表3  $H^+ + He^+$  碰撞电子俘获的总截面 ( $10^{-17} \text{cm}^2$ )

E/keV	100	200	300	400	500	600	1000
CDW	1.363	$1.994^{-1}$	$4.987^{-2}$	$1.604^{-2}$	$6.239^{-3}$	$2.778^{-3}$	$2.474^{-4}$
本文的方法	1.341	$2.071^{-1}$	$5.005^{-2}$	$1.609^{-2}$	$6.251^{-3}$	$2.781^{-3}$	$2.470^{-4}$
E/keV	1200	1500	2000	4000	6000	10000	
CDW	$9.968^{-5}$	$3.191^{-5}$	$7.083^{-6}$	$1.659^{-7}$	$1.740^{-8}$	$9.768^{-10}$	
本文的方法	$9.941^{-5}$	$3.179^{-5}$	$7.049^{-6}$	$1.649^{-7}$	$1.728^{-8}$	$9.681^{-10}$	

注: 表中数值  $a^n$  表示  $a \times 10^n$ .

接用 CDW 方法得到的结果. 由表中可以看出无论是对  $\text{H}^+ + \text{He}^+$  系统, 还是对  $\text{H}^+ + \text{Li}^{++}$  系统, 用这两种方法计算的结果几乎一致, 最大误差小于 2%. 说明我们提出的方法对这两种碰撞系统的处理是成功的. 同时, 由于  $\text{H}^+$  离子与任一类氢离子的碰撞和我们研究的这两种碰撞是完全类似的, 因此我们的方法对研究这类碰撞系统的电子俘获过程同样可能是适用的.

表 4  $\text{H}^+ + \text{Li}^{++}$  碰撞电子俘获的总截面 ( $10^{-17}\text{cm}^2$ )

E/keV	400	500	600	1000	1200
CDW	$2.241^{-2}$	$1.094^{-2}$	$5.754^{-3}$	$7.501^{-4}$	$3.368^{-4}$
本文的方法	$2.230^{-2}$	$1.091^{-2}$	$5.742^{-3}$	$7.488^{-4}$	$3.361^{-4}$
E/keV	1500	2000	4000	6000	10000
CDW	$1.209^{-4}$	$3.033^{-5}$	$8.699^{-7}$	$9.838^{-8}$	$5.889^{-9}$
本文的方法	$1.206^{-4}$	$3.024^{-5}$	$8.665^{-7}$	$9.794^{-8}$	$5.858^{-9}$

注:表中数值  $a^n$  表示  $a \times 10^n$ .

## 4 结 论

我们利用 CDW 方法得到电子俘获到基态的分截面, 再结合 OBK 近似得到的电子俘获到激发态与基态分截面的比值, 不仅给出了在反应过程(1)式中电子俘获的总截面, 而且也能给出俘获到激发态的分截面. 本文的计算表明, 我们的结果与直接用 CDW 方法得到的结果符合得很好. 由此可以得出这样一个结论:OBK 近似没有考虑电子在初、末通道的库仑扭曲作用, 也没有考虑中间态的作用. 但这些作用对基态和激发态电子俘获的平均贡献几乎是相同的, 至少对我们研究的这类碰撞体系是如此, 这样才能保证由 OBK 近似给出的截面比值与 CDW 近似得到的相应比值相同. 我们的方法对基态的电子俘获截面考虑到库仑扭曲和中间态的贡献, 这些贡献通过一个简化的计算过程, 对激发态也得到了同等考虑. 初步研究表明, 用本方法来处理  $\text{H}^+$  与任一类氢离子这类碰撞体系的电子俘获过程是可行的, 其适用的能量范围与 CDW 方法适用的能量范围相同(即  $v/v_e \geq 2.5$ ).

- [1] D. Belkić, R. Gayet and A. Salin, *Phys. Rep.*, **56**(1979), 279.
- [2] B. H. Bransden, *Contemporary Physics*, **31**(1990), 19.
- [3] I. M. Cheshire, *Proc. Phys. Soc.*, **84**(1964), 89.
- [4] D. S. F. Crothers, *J. Phys. B*, **18**(1985), 2879.
- [5] J. Eichler and F. T. Chan, *Phys. Rev.*, **A20**(1979), 104.
- [6] S. Datta, C. R. Mandal, S. C. Mukherjee *et al.*, *Phys. Rev.*, **A26**(1982), 2551.
- [7] D. Belkić, R. Gayet and A. Salin, *Comput. Phys. Commun.*, **30**(1983), 193.
- [8] D. Belkić, *Z. Phys.*, **D3**(1986), 59.

# THEORETICAL CALCULATIONS OF CROSS SECTIONS FOR ELECTRON CAPTURE IN COLLISIONS OF PROTON WITH $\text{He}^+$ AND $\text{Li}^{++}$ IONS AT HIGH ENERGIES

ZHOU XIAO-XIN ZHANG XIAN-ZHOU<sup>a)</sup> CHEN HONG-SHAN DONG CHEN-ZHONG

(*Department of Physics, Northwest Normal University, Lanzhou 730070*)

a) (*Department of Physics, Henan Normal University, Xinxiang 453002*)

(Received 11 September 1996; revised manuscript received 25 November 1996)

## ABSTRACT

We have computed the partial cross section ratios of electron capture into excited states to ground state in collisions of proton with  $\text{He}^+$  and  $\text{Li}^{++}$  ions using Oppenheimer-Brinkman-Kramers and continuum-distorted-wave methods. Our results show that the cross section ratios obtained by the two different methods are consistent with each other at high energies. Consequently, we propose a simple method to estimate the partial and total cross sections of electron capture by proton from any hydrogen-like ions at high energies.

PACC: 3470