第 49 卷 第 6 期 2000 年 6 月
1000-3290/2000/49(06)/1052-06

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol. 49, No. 6, June, 2000

H^+, He^{2+} 与 Li 原子碰撞中电子俘获总截面的程函近似计算*

马淑红[1)]　张现周[1)]　梁颜天[2)]　孙金锋[1)]

[1)] (河南师范大学物理与信息工程学院, 新乡　453002)

[2)] (新乡师范高等专科学校物理系, 新乡　453000)

(1999 年 10 月 31 日收到; 1999 年 11 月 28 日收到修改稿)

采用 Li 原子价电子的有效势对前置形式程函近似振幅公式进行了修正, 提出有效势修正程函近似方法, 并对 H^+ 和 He^{2+} 与 Li 原子碰撞中的电子俘获总截面进行了计算, 取得了与实验比较吻合的结果.

PACC: 3400; 3470

1　引　　言

多电子原子散射过程中电子俘获在非平衡等离子体、热核聚变研究中的等离子体磁约束和其他天体物理中有很重要的研究意义[2]. 同 Li 原子散射的特定电子态转移, 被认为是在真空紫外线或 X 射线中粒子数反转的可能方法[3]. 由于 Li 原子可以作为等离子体探针和电子数目较少, 一些理论曾经对 $H^+ + Li$[4,5] 和 $He^{2+} + Li$[4,6,7] 两个散射过程进行了研究. 文献[4]应用复杂的多态原子轨道展开方法计算结果尽管在比较宽的能量范围内与实验符合较好, 但此方法复杂、耗时惊人; 文献[5]计算的结果在能量 10—400 keV 区间比实验结果高; 文献[6]计算的 K 壳层电子俘获截面在 80 keV 以下比实验及文献[4, 7]的结果高; 文献[7]应用有效势二态原子轨道展开方法计算的总截面结果在 60 keV 以下与实验差别较大. 因此, 有必要寻找一种相对简单且在较宽能量范围内与实验结果符合的理论方法. 而中高能区的前置程函近似理论[1,8] (Prior-form eikonal approximation) 可以计算电子从任意的 nlm 初始态到任意的 $n'l'm'$ 末态俘获截面, 公式推导简单, 程序计算速度较快, 并且对于靶原子是氢原子或简单多电子原子的 K 和 L 电子俘获, 用简单的库仑势计算的结果在中高能区与实验结果和趋势符合. 由于碱金属 Li 原子价电子受核的束缚较弱, 本文尝试应用 Li 原子价电子有效势和独立电子模型, 来对前置程函近似方法进行修正, 提出有效势修正程函近似并探讨该方法应用于价电子俘获的可能性, 计算了 H^+, He^{2+} 与 Li 原子散射过程中价电子俘获散射截面. 为了与实验结果比较, 本文计算的理论总截面包括 K 电子俘获截面, 这部分截面计算见文献[1]和[8].

除特别说明外, 本文均采用原子单位.

2　有效势修正程函近似理论

前置程函近似是考虑了入射离子与主动电子的一阶相互作用和主动电子与靶原子简单库轮势 $\left(-\frac{Z'_T}{r_T}\right)$ 的无穷阶相互作用的一种理论, 它适用于中高能区的电子俘获截面计算. 由文献[4] Li 原子价电子所处的有效势场可用有效势 $V(r_T)$ 来描述,

$$V(r_T) = -\frac{1}{r_T} - \frac{2e^{-\alpha_3 r_T}}{r_T} - \alpha_3 e^{-\alpha_3 r_T}$$
$$(\alpha_3 = 2.92), \tag{1}$$

r_T 是价电子与靶原子核间的距离. 在碰撞过程中, 主动价电子的哈密顿写为

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r_T} + V_s(r_P, r_T), \tag{2}$$

其中 $V_s(r_P, r_T)$ 是残余势,

$$V_s(r_P, r_T) = -\frac{Z_P}{r_P} - \frac{2e^{-\alpha_3 r_T}}{r_T} - \alpha_3 e^{-\alpha_3 r_T}. \tag{3}$$

* 河南省教委基金(批准号: 9914009)资助的课题.

令 $V_s^*(r_T) = -\dfrac{2e^{-\alpha_3 r_T}}{r_T} - \alpha_3 e^{-\alpha_3 r_T}$，式中 Z_P 和 r_P 分别是入射裸离子的核电荷数和主动电子与入射离子间的距离. 对有效势(1)式分析：在主动价电子俘获的过程中，即 $r_T \to \infty$ 时，第一项起主要作用，因此考虑它的无穷阶相互作用，考虑残余势的一阶相互作用. 所以有效势修正程函近似散射振幅公式为

$$A_{nlm-n'l'm}(\boldsymbol{b},v) = -\mathrm{i}\int_{-\infty}^{+\infty}\langle \psi^-_{n'l'm'}(\boldsymbol{r}_P) \mid \cdot V_s(r_P, r_T) \mid \psi_{nlm}(\boldsymbol{r}_T)\rangle \mathrm{d}t, \tag{4}$$

式中波函数分别是

$$\psi_{nlm}(\boldsymbol{r}_T) = \phi_{nlm}(\boldsymbol{r}_T)\exp(-\mathrm{i}E_T t) \cdot \exp\left[-\mathrm{i}\left(\frac{1}{2}\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{r} + \frac{1}{8}v^2 t\right)\right],$$

$$\psi^-_{n'l'm'}(\boldsymbol{r}_P) = \phi_{n'l'm'}(\boldsymbol{r}_P)\exp(-\mathrm{i}E_P t) \cdot \exp\left[\mathrm{i}\left(\frac{1}{2}\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{r} - \frac{1}{8}v^2 t\right)\right] \cdot \exp\left(-\mathrm{i}\int_t^{+\infty}\frac{1}{r_T}\mathrm{d}t'\right), \tag{5}$$

其中 E_T，E_P 为主动价电子的初、末态波函数 $\phi_{nlm}(\boldsymbol{r}_T)$，$\phi_{n'l'm'}(\boldsymbol{r}_P)$ 对应的本征能量；$\boldsymbol{v}$ 为两散射粒子核间的相对速度；$\boldsymbol{r}$，$\boldsymbol{r}_P$，$\boldsymbol{r}_T$ 分别是主动电子相对于坐标原点、入射离子和靶原子的位置矢量，坐标原点选在两散射粒子核间连线的中点. (5)式中主动价电子末态波函数的最后一项指数项就是程函近似的相因子. 值得指出的是：残余势(3)式中若只保留第一项入射离子与主动价电子的相互作用，则(4)式的振幅公式将退化为裸离子与氢原子或类氢离子散射的前置程函近似电子俘获振幅公式[1,8].

为便于理论推导，把 $A_{nlm-n'l'm}(\boldsymbol{b},v)$ 分成二项分别是 $A^{(1)}_{nlm-n'l'm}(\boldsymbol{b},v)$ 和 $A^{(2)}_{nlm-n'l'm}(\boldsymbol{b},v)$：

$$A^{(1)}_{nlm-n'l'm}(\boldsymbol{b},v) = -\mathrm{i}\int_{-\infty}^{+\infty}\langle \psi^-_{n'l'm'}(\boldsymbol{r}_P) \mid -\frac{Z_P}{r_P} \mid \psi_{nlm}(\boldsymbol{r}_T)\rangle \mathrm{d}t, \tag{6}$$

$$A^{(2)}_{nlm-n'l'm}(\boldsymbol{b},v) = -\mathrm{i}\int_{-\infty}^{+\infty}\langle \psi^-_{n'l'm'}(\boldsymbol{r}_P) \mid \cdot V_s^*(r_T) \mid \psi_{nlm}(\boldsymbol{r}_T)\rangle \mathrm{d}t. \tag{7}$$

所以，Li 原子的价电子被俘获到入射离子任意主量子数为 n' 的末态截面公式为

$$\sigma_{nlm-n'} = \int \sum_{l'm'} |A_{nlm-n'l'm}(\boldsymbol{b},v)|^2 \mathrm{d}^2\boldsymbol{b} = \sigma^{(1)}_{nlm-n'} + \sigma^{(2)}_{nlm-n'} + \sigma^{(3)}_{nlm-n'}, \tag{8}$$

其中

$$\sigma^{(1)}_{nlm-n'} = \int \sum_{l'm'} |A^{(1)}_{nlm-n'l'm}(\boldsymbol{b},v)|^2 \mathrm{d}^2\boldsymbol{b},$$
$$\sigma^{(2)}_{nlm-n'} = \int \sum_{l'm'} |A^{(2)}_{nlm-n'l'm}(\boldsymbol{b},v)|^2 \mathrm{d}^2\boldsymbol{b}, \tag{9}$$
$$\sigma^{(3)}_{nlm-n'} = \int \sum_{l'm'} 2Re(A^{(1)*}_{nlm-n'l'm}(\boldsymbol{b},v) * A^{(2)}_{nlm-n'l'm}(\boldsymbol{b},v))\mathrm{d}^2\boldsymbol{b}.$$

这里主要按照文献[1]的步骤推导 $\sigma^{(1)}_{nlm-n'}$，其余二部分 $\sigma^{(2)}_{nlm-n'}$ 和 $\sigma^{(3)}_{nlm-n'}$ 只给出最后的结果.

引入如下的傅里叶变换

$$g^{(1)}_{n'l'm'}(\boldsymbol{q}) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}}\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_P \frac{\phi_{n'l'm'}(\boldsymbol{r}_P)}{r_P}\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{r}_P),$$

$$G^{(1)}_{nlm}(\boldsymbol{p}) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}}\int \mathrm{d}^3\boldsymbol{r}_T \phi_{nlm}(\boldsymbol{r}_T)\exp(\mathrm{i}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}_T) \cdot \frac{1}{\Gamma(-\mathrm{i}\eta Z'_T)}\int_0^{+\infty}\lambda^{-\mathrm{i}\eta Z'_T-1} \cdot \exp[-\lambda(r_T - Z_T)]\mathrm{d}\lambda. \tag{10}$$

考虑到(5)式，把上式代入(6)式并依次完成一系列积分后可得

$$\sigma^{(1)}_{nlm-n'l'm'} = \frac{Z_P^2(2\pi)^4}{v^2}\int \mathrm{d}^2\boldsymbol{p}_b \, |g^{(1)}_{n'l'm'} \cdot (\boldsymbol{p}+\boldsymbol{v})|^2 \, |G^{(1)}_{nlm}(\boldsymbol{p})|^2 \, \Big|_{p_z = p_{oz}} \tag{11}$$

其中 $p_{oz} = \dfrac{\varepsilon}{v} - \dfrac{v}{2} = \varepsilon\eta - \dfrac{v}{2}$，$\varepsilon = E_P - E_T = -\dfrac{Z_P^2}{2n^2} - E_T$，$\eta = \dfrac{1}{v}$.

下面就分别推导 $|g^{(1)}_{n'l'm'}(\boldsymbol{q})|^2$ 和 $|G^{(1)}_{nlm}(\boldsymbol{p})|^2$. 为便于推导公式，我们把价电子的有效势 $V(r_T)$ 和它的初始态波函数写为如下的求和形式：

$$V(r_T) = -\frac{1+(Z_T-1)[1+c_1 r_T]e^{-c_2 r_T}}{r_T},$$
$$\phi_{nlm}(\boldsymbol{r}_T) = R_{nl}(r_T)Y_{lm}(\hat{r}_T) = \sum_{i=1}^{2} d_i(nl) r_T^{a_i}\exp(-b_i r_T)Y_{lm}(\hat{r}_T), \tag{12}$$

其中的参数为：$c_1 = \dfrac{\alpha_3}{2}$，$c_2 = \alpha_3$，$Z_T$ 为靶原子的核电荷数，d_i，a_i，b_i 都是对应于波函数中的已知常数，$\phi_{nlm}(\boldsymbol{r}_T)$ 为 Li 原子价电子的 2s 态波函数.

由文献[1]的(8)式和推导过程得

$$\sum_{l'm'} |g^*_{n'l'm'}(\boldsymbol{q})|^2 = \frac{2q_n^3}{\pi^2(q^2+q_n^2)^2}, \tag{13}$$

$$|G^{(1)}_{nlm}(p)|^2 = \frac{\eta Z'_T}{2\pi\sinh(\pi\eta Z'_T)}\sum_{i,i'=1}^{2} d_i d_{i'}$$
$$\cdot\Gamma(a_i+3)\Gamma(a'_i+3)\sum_{m,m'=0}^{\left[\frac{a_i+1}{2}\right]\left[\frac{a'_i+1}{2}\right]}$$
$$\cdot\sum_{m_1,m'_1=0}^{m,m'}\sum_{m_2,m'_2=0}^{2m_1,2m'_1}\sum_{m_3,m'_3=0}^{a_i+1-2m,a'_i+1-2m'}$$
$$\cdot M(a_i,m)M(a'_i,m')M_1(m,m_1)$$
$$\cdot M_1(m',m'_1)M_2(m_1,m_2)M_2(m'_1,m'_2)$$
$$\cdot M_3(a_i,m,m_3)M_3(a'_i,m',m'_3)$$
$$\cdot p_{oz}{}^{2m_1+2m'_1-m_2-m'_2}$$
$$\cdot b_i^{a_i+a'_i+2-2m-2m'-m_3-m'_3}$$
$$\cdot(2b_i-2\mathrm{i}p_{oz})^{-m_2-m_3}$$
$$\cdot(2b_i+2\mathrm{i}p_{oz})^{-m'_2-m'_3}$$
$$\cdot\exp\left[-2\eta Z'_T\arctan\left(-\frac{p_{oz}}{b_i}\right)\right]$$
$$\cdot(-1)^{a_i+m_3+a'_i+m'_3}(\mathrm{i})^{m_2}(-\mathrm{i})^{m'_2}$$
$$\cdot\binom{m_2+m_3-\mathrm{i}\eta Z'_T-1}{a_i+1}$$
$$\cdot\binom{m'_2+m'_3+\mathrm{i}\eta Z'_T-1}{a'_i+1}$$
$$\cdot p_b{}^{2m+2m'-2m_1-2m'_1}$$
$$\cdot(p_b^2+p_{oz}^2+b_i^2)^{m_2+m_3-a_i-2+m'_2+m'_3-a'_i-2}, \tag{14}$$

其中

$$M(a_i,m) = \frac{\left(-\frac{a_i+1}{2}\right)_m\left(-\frac{a_i}{2}\right)_m(-1)_m}{m!\left(\frac{3}{2}\right)_m},$$
$$M_1(m,m_1) = \frac{m!}{m_1!(m-m_1)!},$$
$$M_2(m_1,m_2) = \frac{(2m_1)!}{m_2!(2m_1-m_2)!},$$
$$M_3(a_i,m,m_3) = \frac{(a_i+1-2m)!}{m_3!(a_i+1-2m-m_3)!}. \tag{14'}$$

完成对(11)式$\int \mathrm{d}^2 \boldsymbol{p}_b$积分并对$\sum_{l'm'}$求和得

$$\sigma^{(1)}_{nlm-n'} = \frac{Z_P^5 2^2\eta Z'_T\exp\left[-2\eta Z'_T\arctan\left(-\frac{p_{oz}}{b_i}\right)\right](2\pi)^2(b_i)^2}{v^2 n'^3\sinh(\pi\eta Z'_T)\left(q_z^2+\frac{z_P^2}{n'^2}\right)^2\cdot(p_{oz}^2+b_i^2)^3}$$
$$\cdot\sum_{i,i'=1}^{2}d_i d_{i'}\Gamma(a_i+3)\Gamma(a'_i+3)$$
$$\cdot\sum_{m,m'=0}^{\left[\frac{a_i+1}{2}\right]\left[\frac{a'_i+1}{2}\right]}\sum_{m_1,m'_1=0}^{m,m'}\sum_{m_2,m'_2=0}^{2m_1,2m'_1}$$
$$\cdot\sum_{m_3,m'_3=0}^{a_i+1-2m,a'_i+1-2m'}M(a_i,m)$$
$$\cdot M(a'_i,m')M_1(m,m_1)M_1(m',m'1)$$
$$\cdot M_2(m_1,m_2)M_2(m'_1,m'_2)M_3(a_i,m,m_3)$$
$$\cdot M_3(a'_i,m',m'_3)D_{mi}D^*_{m'i'}$$
$$\cdot B(a,b-a)_2F_1\left(2,a,b,1-\frac{p_{oz}^2+b_i^2}{q_z^2+\frac{Z_P^2}{n'^2}}\right), \tag{15}$$

其中

$$a = m+m'-m_1-m'_1+1,$$
$$b = 6+a_i+a_{i'}-m_2-m'_2-m_3-m'_3,$$
$$D_{mi} = p_{oz}{}^{2m_1-m_2}b_i^{a_i-2m-m_3}$$
$$\cdot(2b_i-2\mathrm{i}p_{oz})^{-m_2-m_3}(-1)^{a_i+m_3}(\mathrm{i})^{m_2}$$
$$\cdot\binom{m_2+m_3-\mathrm{i}\eta Z'_T-1}{a_i+1}$$
$$\cdot(p_{oz}^2+b_i^2)^{m-m_1-a_i+m_2+m_3}. \tag{15'}$$

$D^*_{m'i'}$是D_{mi}的复共轭,并且把相应的$m\to m'$,$m_1\to m'_1$,$m_2\to m'_2$,$m_3\to m'_3$,$a_i\to a'_i$;$B(x,y)$是贝塔函数,有$B(x,y)=\frac{\Gamma(x)\Gamma(y)}{\Gamma(x+y)}$,$\binom{m}{n}=\frac{m!}{n!(m-n)!}$,${}_2F_1(x,y,z,\gamma)$是超几何函数.

同理有

$$\sigma^{(2)}_{nlm-n'}(v) = \frac{(Z_T-1)^2 2^6\pi^2 Z_P^5\eta Z'_T\exp\left[-2\eta Z'_T\arctan\left(-\frac{p_{oz}}{(b_i+c_2)}\right)\right]}{v^2 n'^3\sinh(\pi\eta Z'_T)(q_z^2+q_n^2)^4[p_{oz}^2+(c_2+b_i)^2]}$$
$$\cdot\sum_{i=1}^{2}\sum_{i'=1}^{2}\sum_{j=0}^{1}\sum_{j'=0}^{1}\sum_{n=0}^{\left[\frac{(a_i+j)}{2}\right]}\sum_{n'=0}^{\left[\frac{(a_i+j)}{2}\right]}\sum_{n_1=0}^{n}\sum_{n'_1=0}^{n'}\sum_{n_2=0}^{a_i+j-2n}\sum_{n'_2=0}^{a'_i+j'-2n'}$$
$$\cdot\sum_{n_3=0}^{2n_1}\sum_{n'_3=0}^{2n'_1}d_i d_{i'}c_j c_{j'}\Gamma(a_i+j+2)\Gamma(a_{i'}+j'+2)$$
$$\cdot N(a_i,j,n)N(a_{i'},j',n')N_1(n,n_1)N_1(n',n'_1)$$
$$\cdot N_2(a_i,j,n,n_2)N_2(a_{i'},j',n',n'_2)N_3(n_3,n_1)$$
$$\cdot N_3(n'_3,n'_1)D_{n,i,j}D^*_{n',i',j'}B(a,b-a)$$
$$\cdot{}_2F_1\left(4,a,b,1-\frac{p_{oz}^2+(c_2+b_i)^2}{q_z^2+q_n^2}\right). \tag{16}$$

上式的参数与第一部分中的参数一样,其中

$$N(a_i,j,n)=\frac{\left(\frac{-a_i-j}{2}\right)_n\cdot\left(\frac{-a_i-j+1}{2}\right)_n\cdot(-1)^n}{n!\cdot\left(\frac{3}{2}\right)_n},$$

$$N_1(n,n_1)=\frac{n!}{n_1!(n-n_1)!},$$

$$N_2(a_i,j,n,n_2)=\frac{(a_i+j-2n)!}{n_2!(a_i+j-2n-n_2)!},$$

$$N_3(n_3,n_1)=\frac{2n_1!}{n_3!(n_3-2n_1)!},$$

$$D_{n,i,j}=p_{oz}{}^{2n_1-n_3}(c_2+b_i)^{a_i+j-2n-n_2}\cdot(-1)^{a_i+j+n_2}(\mathrm{i})^{n_3}\cdot[2(c_2+b_i)-2\mathrm{i}p_{oz}]^{-n_2-n_3}\cdot[p_{oz}^2+(c_2+b_i)^2]^{n-n_1+n_2+n_3-a_i-j}\cdot\binom{n_2+n_3-\mathrm{i}\eta Z'_{\mathrm{T}}-1}{a_i+j},$$

$$a=n-n_1+n'-n'_1+1,$$

$$b=6+a_i+a_{i'}+j+j'-n_2-n'_2-n_3-n'_3. \tag{16′}$$

$D^*_{n',i',j'}$是$D_{n,i,j}$的复共轭，其中的变量相应转化为$n\to n'$，$n_1\to n'_1$，$n_2\to n'_2$，$n_3\to n'_3$，$i\to i'$，$j\to j'$，$a_i\to a'_i$.

$$\sigma^{(12)}_{nlm-n'}=\frac{2^6(Z_{\mathrm{T}}-1)\pi^2Z_{\mathrm{P}}^5\eta Z'_{\mathrm{T}}\exp\left\{-\eta Z'_{\mathrm{T}}\left[\arctan\left(-\frac{p_{oz}}{(b_i+c_2)}\right)+\arctan\left(-\frac{p_{oz}}{b_i}\right)\right]\right\}}{v^2n'^3\sinh(\pi\eta Z'_{\mathrm{T}})(q_z^2+q_n^2)^3\cdot(p_{oz}^2+b_i^2)^2}$$
$$\cdot\sum_{i=1}^{2}\sum_{ii=1}^{2}\sum_{j=0}^{2}\sum_{m=0}^{\left[\frac{a_{ii}+1}{2}\right]}\sum_{n=0}^{\left[\frac{a_i+j}{2}\right]}\sum_{m_1=0}^{m}\sum_{n_1=0}^{n}\sum_{m_2=0}^{2m_1}\sum_{n_3=0}^{2n_1}\sum_{n_2=0}^{a_i+j-2n}\sum_{m_3=0}^{a_{ii}+1-2m}$$
$$\cdot d_id_{ii}c_j\Gamma(a_i+j+2)\Gamma(a_{ii}+3)M(a_{ii},m)M_1(m,m_1)M_2(m_1,m_2)$$
$$\cdot M_3(a_{ii},m,m_3)N(a_i,j,n)N_1(n,n_1)N_2(a_i,j,n,n_2)N_3(n_3,n_1)$$
$$\cdot(-1)^{a_i+j+n_2+a_{ii}+1+m_2+m_3}(p_{oz}^2+b_i^2)^{n+m-n_1-m_1+m_2+m_3+n_2+n_3-a_{ii}-a_i-j}$$
$$\cdot p_{oz}{}^{2n_1+2m_1-n_3-n_2}(c_2+b_i)^{a_i+j-2n-n_2}b_i^{a_{ii}+1-2m-m_3}B(a,b-a)$$
$$\cdot{}_2F_1\left(3,a,b,1-\frac{p_{oz}^2+b_i^2}{q_z^2+q_n^2}\right)$$
$$\cdot\mathrm{Re}\left\{i^{n_3+m_2}[2(c_2+b_i)-2\mathrm{i}p_{oz}]^{-n_2-n_3}[2b_i+2\mathrm{i}p_{oz}]^{-m_2-m_3}\right.$$
$$\left.\cdot\binom{m_2+m_3+\mathrm{i}\eta Z'_{\mathrm{T}}-1}{a_{ii}+1}\binom{n_2+n_3-\mathrm{i}\eta Z'_{\mathrm{T}}-1}{a_i+j}\left[\frac{p_{oz}^2+(b_i+c_2)^2}{p_{oz}^2+b_i^2}\right]^{\frac{\mathrm{i}\eta Z'_{\mathrm{T}}}{2}}\right\}, \tag{17}$$

其中 $a=n-n_1+m-m_1+1$，$b=6+a_{ii}+a_i+j-m_2-m_3-n_2-n_3$，$M(a_{ii},m)$，$M_1(m,m_1)$，$M_2(m_1,m_2)$，$M_3(a_{ii},m,m_3)$，$N(a_i,j,n)$，$N_1(n,n_1)$，$N_2(a_i,j,n,n_2)$和 $N_3(n_3,n_1)$与前面的$\sigma^{(1)}_{nlm-n'}$和$\sigma^{(2)}_{nlm-n'}$中的定义形式一样，只是对应的变量替换.

上面为了便于推导，把有效势中的$(1+c_1r_{\mathrm{T}})$写成求和的形式$(1+c_1r_{\mathrm{T}})=\sum_{j=0}^{1}c_j\cdot r_{\mathrm{T}}^j$. 上述的$\sigma^{(1)}_{nlm-n'}$，$\sigma^{(2)}_{nlm-n'}$，$\sigma^{(3)}_{nlm-n'}$可以通过程序实现.

3　计算结果与讨论

一般认为，程函近似方法适用于入射粒子的速度大于被俘获电子的经典轨道速度，Li 原子价电子的经典轨道速度对应的能量为 40 keV. 本文计算的入射粒子能量在 40 keV 以下，主要是观察这种近似方法在较低能区的结果趋势. 在计算过程中，我们发现$\sigma^{(1)}_{nlm-n'}$对总截面的贡献比较大，$\sigma^{(2)}_{nlm-n'}$对总截面的贡献较小，可以忽略不计，而$\sigma^{(3)}_{nlm-n'}$的结果是负值，并且三者都随能量的降低而绝对值是增加的，这三者之和是本文 Li 原子价电子俘获截面结果，然后再加上 K 壳层电子俘获截面就是本文电子俘获的总截面.

首先，我们计算了 $H^++Li\to H+Li^+$ 散射体系在能量为 10—500 keV 区间电子俘获总截面，并与其他的理论和实验结果相比较，如图 1 所示.

从图 1 中可以看出：本文的结果在整个能量区

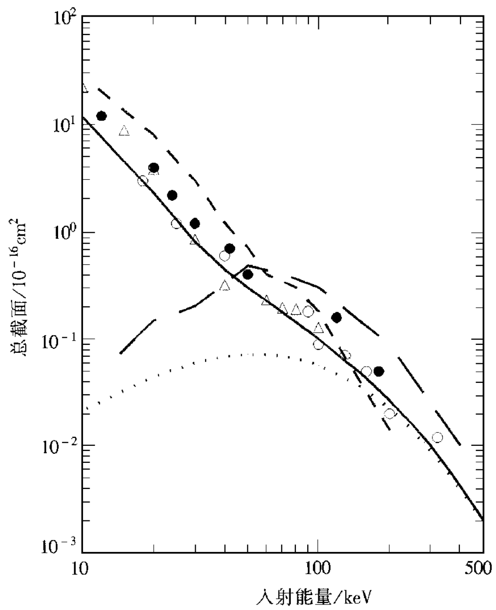

图 1

理论结果：

——本文电子俘获总结果；……本文 K 电子俘获结果；— —文献[5]的 K 电子俘获结果；- - -文献[5]的价电子俘获结果.

实验结果：

△文献[3]；○文献[9]；●文献[10]

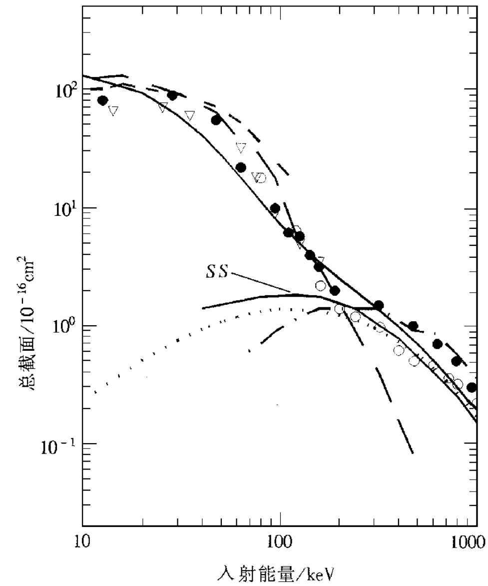

图 2

理论结果：

——本文电子俘获总结果；……本文 K 电子俘获结果；— —文献[4]二态近似价电子俘获结果；- - -文献[4]24 态近似结果；——文献[6]SS 结果；-·-文献[7]二态 K 电子俘获结果.

实验结果：

●文献[11]；▽文献[12]；○文献[13]

间与实验[3,9,10]符合得比较好.在能量约为 150 keV 处,本文 K 壳层电子的俘获截面与价电子的俘获截面相等,在 150 keV 以下,价电子的俘获截面对总截面起主要的贡献.而文献[5] IPFA 的理论结果在大约 70 keV 处 K 壳层电子与价电子俘获截面相等,这一点本文结果与文献[5]结果之间存在一定差异；但由图 1 可知：IPFA 的理论结果在整个能量区间均高于实验结果.另外本文的理论结果与 IPFA 的总结果曲线趋势是一致的,但在整个能量区间本文的理论结果明显优越于文献[5]理论结果.

其次,本文计算了 $He^{2+} + Li \rightarrow He^{+} + Li^{+}$ 散射体系在能量 10—1000 keV 区间的电子俘获截面,如图 2 所示.

从图 2 可以看出：除了在 40—50 keV 能区稍低于实验外,本文理论结果在大于 50 keV 能区与实验[11—13]符合得较好.在大约 250 keV 处,K 壳层的电子俘获截面和价电子的俘获截面相等,这一结论与文献[4,7]中的多态原子轨道展开方法结果一致；在 250 keV 能量以下,价电子的俘获是主要的俘获过程.对于 K 壳层电子俘获,本文结果与文献[6]的理论结果在能量200keV以上符合一致,与文献[13]的实验结果符合较好,但比二态原子轨道展开结果[7]低,后者更接近文献[11]的实验结果.在 40—200 keV 能量区间,本文 K 壳层电子俘获的理论结果介于文献[6]的 SS 结果与二态原子轨道展开方法结果[7]之间且较接近 SS 结果.另外,在 20—50 keV 能区,本文结果略低于实验,可能是由于在低能散射过程中入射离子在靶附近逗留的时间长,对靶原子的波函数扭曲效应较大,而本文未考虑这种效应所致.但在 20 keV 以下本文结果有发散的趋势,所以比实验结果高,因此此理论方法在大约 20 keV 能量以下是不适用的.

4 结 论

本文把较简单的程函近似理论通过与价电子有效势的结合应用于多电子原子的电子俘获过程,给出了与实验一致的结果.一般说来,程函近似的理论结果[1,8]在低能区是比实验结果高的,但本文的有效势修正程函近似大大改善了程函近似方法在低能区的俘获截面行为,表明本文对价电子有效势的处

理思想是可取的，并且这种方法的推导系统，计算速度快的特点比多态原子轨道展开方法[4,7]有一定的优越性．当然这种方法的应用要受到进一步的检验．

本文工作受到江玉海老师、刘玉芳副教授的指导和大力支持，在此致谢．

[1] T. S. Ho，D. Umberger，R. L. Day，M. Lieber，F. T. Chan，*Phys. Rev.*，**A24**（1981），705.

[2] R. Hoekstra，E. Wolfrum *et al.*，*J. Phys*，**B25**（1992），2587，2597.

[3] R. D. DuBois，L. H. Toburen，*Phys. Rev.*，**A31**（1985），3603.

[4] A. M. Ermolaev，B. H. Bransden，*J. Phys*，**B17**（1984），1069，1083.

[5] G. V. Avakov，L. D. Blokhintsev *et al.*，*J. Phys.*，**B25**（1992），213.

[6] Y. R. Kuang，*J. Phys.*，**B25**（1992），199.

[7] S. H. Ma *et al.*，*Chinese J. Atomic and Mol. Phys.*，**16**（1999），249（in Chinese）［马淑红、张现周，原子与分子物理学报，**16**（1999），249］.

[8] T. S. Ho，M. Lieber，F. T. Chan，K. Omidvar，*Phys. Rev.*，**A24**（1981），2933.

[9] B. A. Dyachkov，*At. Energ.*，**27**（1969），220.

[10] R. N. Il 'in，V. A. Oparin，E. S. Solov 'en，N. V. Fedorenko，*JEPT Lett.*，**2**（1967），197；*Sov. Phys.-Tech. Phys.*，**11**（1967），921.

[11] R. W. McCullogh，T. V. Goffe，M. B. Shah，M. Lennon，H. B. Gilbody，*J. Phys.*，**B15**（1982），111.

[12] G. A. Murray，J. Stone，M. Mayo，T. J. Morgan，*Phys*，*Rev.*，**A25**（1982），1805.

[13] M. B. Shah，H. B. Gilbody，*J. Phys.*，**B18**（1985），899.

THE EIKONAL APPROXIMATION CALCULATION OF ELECTRON CAPTURE CROSS SECTIONS FOR H^+，He^{2+} IONS COLLIDED WITH Li ATOM*

MA SHU-HONG[1)]　ZHANG XIAN-ZHOU[1)]　LIANG YAN-TIAN[2)]　SUN JIN-FENG[1)]

[1)]（*College of Physics & Information Engeering*，*Henan Normal University*，*Xinxiang*　453002，*China*）

[2)]（*Department of Physics*，*Xinxiang Teacher 's College*，*Xinxiang*　453000，*China*）

（Received 31 October 1999；revised manuscript received 28 November 1999）

ABSTRACT

We have improved the prior-form eikonal approximation to the corrected effective-potential eikonal approximation，using the valence electron effective-potential of Li atom，and calculated the total electron capture cross sections for H^+，He^{2+} ions collided with Li atom. The present results are in agreement with experments.

PACC：3400；3470

* Project supported by the Educational Committee Foundation of Henan Province（Grant No.9914009），China.