

# 高离化态 $\text{Cu}^{18+}$ 离子的双电子复合及 共振转移激发过程的理论研究\*

董晨钟<sup>1)2)</sup> 符彦飙<sup>1)</sup>

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重点实验室, 兰州 730000)

(2004 年 8 月 4 日收到, 2005 年 6 月 16 日收到修改稿)

在准相对论理论框架下计算了  $\text{Cu}^{18+}$  离子的双电子复合截面, 分析了组态相互作用对截面的影响. 基于这些数据, 在冲量近似下, 通过对靶原子中电子动量分布的卷积, 进一步得到了  $\text{Cu}^{18+}$  与  $\text{H}_2$  碰撞过程中的共振转移激发截面, 并与已有的实验结果作了比较, 符合得很好.

关键词: 双电子复合, 共振转移激发

PACC: 3120B, 3480D, 3480L

## 1. 引言

双电子复合(DR)是实验室高温等离子体以及天体等离子体中影响等离子体电离平衡的一种十分重要的原子物理过程<sup>[1-3]</sup>. 它可以看作一个两步过程: 首先, 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  $nala$  被激发到未占满轨道  $nlrl$  上, 与此同时, 该自由电子由于损失了部分能量而共振俘获到另一个未占据轨道  $nl$  上, 从而形成了  $A^{(q-1)+}$  离子的一个共振双电子激发态; 随后该共振双电子激发态通过发射光子衰变成单激发态离子  $A^{(q-1)+}$ . 类似于 DR 过程, 高离化态离子和原子或分子碰撞的共振转移激发(RTE)过程也是一个双电子过程. 但在这个过程中, 俘获的不是自由电子, 而是靶原子或分子中的束缚电子. 因此通过研究共振转移激发过程, 不仅可以得到离子双激发态的结构和衰变过程的信息, 而且能间接得到靶原子中束缚电子的动量分布.

近年来, 有关 K 壳层的 RTE 过程的研究已有大量的理论和实验符合较好的工作<sup>[4-6]</sup>, 但对 L 壳层的研究却很少, 而且 L 壳层的 RTE 截面的理论计算

和实验结果之间也存在着较大的偏差<sup>[7-9]</sup>. 如在 1997 年 Zavodszky 等人<sup>[10]</sup>进行的  $\text{Cu}^{18+} + \text{H}_2$  系统的研究中, 理论计算和实验观测结果之间的偏差竟达到 60%. 为了解释这种偏差, 我们用准相对论组态相互作用理论方法<sup>[11]</sup>对这一系统作了进一步的详细分析计算. 计算中包括了内壳层 2p 电子的激发以及所有重要的组态相互作用效应. 本文的计算结果有助于实验工作者对高离化离子的 L 壳层 DR 和 RTE 过程进行更深入地研究.

## 2. 理论方法

类钠铜离子的 DR 过程可表示为

$$\begin{aligned} \text{Cu}^{18+}(2l^8 3s) + e^- &\rightarrow \text{Cu}^{17+}(2l^7 3s 3l, n l)^{**} \\ &\rightarrow \text{Cu}^{17+}(2l^8 3l'_{k, n_k l_k})^* + h\nu. \end{aligned} \quad (1)$$

这里, 类钠铜离子从初态  $2l^8 3s$  (即  $2s^2 2p^6 3s$ ) 俘获一个自由电子形成类镁离子的中间双激发态  $j(2l^7 3s 3l, n l)^{**}$ , 再辐射衰变到末态  $k(2l^8 3l'_{k, n_k l_k})^*$  的积分 DR 截面可通过下式计算:

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

上式中的  $k'$  求和是对所有可能的辐射末态进行的,

\* 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: NWNW-KJXCXC-214) 资助的课题.

† E-mail: dongcz@nwnu.edu.cn

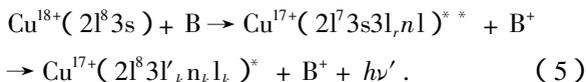
$j'$  求和是对所有的 Auger 末态进行的,  $g_i$  和  $g_j$  分别是初态  $i$  和共振双激发态  $j$  的统计权重,  $\varepsilon_i$  是自由电子的能量,  $A_{ji}^a$  ( $A_{ji}^r$ ) 是 Auger 衰变率,  $A_{jk}^r$  是辐射衰变率, 它们分别由下面的公式计算:

$$A_{ji}^a = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \Psi_j \left| \sum_{s < t} \frac{1}{r_{s,t}} \right| \Psi_{i\varepsilon_i} \right|^2, \quad (3)$$

$$A_{jk}^r = \frac{4e^2\omega}{3\hbar c^3 g_j} \left| \Psi_j \left| T^{(1)} \right| \Psi_k \right|^2, \quad (4)$$

其中  $1/r_{s,t}$  和  $T^{(1)}$  分别是第  $s$  个电子和第  $t$  个电子之间的库仑作用算符和电偶极算符,  $\Psi_j$  和  $\Psi_k$  分别为体系的辐射衰变初、末态的反对称化波函数.  $\Psi_{i\varepsilon_i}$  为自电离衰变末态  $i$  和能量为  $\varepsilon_i$  的自电离电子所构成的体系波函数.

类似于 DR 过程, 类钠铜离子  $\text{Cu}^{18+}$  和靶原子 (分子) B 碰撞的 RTE 过程可表示为



这里靶 B 中的弱束缚电子类似于 (1) 式中的自由电子. 当碰撞速度远大于束缚电子的轨道速度, 并且靶原子 (分子) 的共振形变很小时, 可采用冲量近似方法<sup>[12]</sup>, 由  $\text{Cu}^{18+}$  离子的 DR 截面  $S_{ij,k}$  和靶电子的康普顿轮廓  $\mathcal{K}(P_z)$ , 通过下式计算其 RTE 截面:

$$\sigma_{\text{RTE}} = \sum_{j,k} S_{ij,k} \mathcal{K}(P_z) \left( \frac{M}{2E} \right)^{1/2}, \quad (6)$$

其中, 对  $j$  和  $k$  的求和是对所有的中间双激发态和辐射末态进行的;  $E$  是实验室坐标系下入射离子的动能;  $M$  是入射离子的质量;  $\mathcal{K}(P_z)$  是靶电子的康普顿轮廓, 可以通过对靶电子的动量分布的积分得到

$$\mathcal{K}(P_z) = \iint dp_x dp_y \left| \Psi(p_x, p_y, p_z) \right|^2. \quad (7)$$

这里  $P_z$  是靶电子的动量, 可以由动量守恒定律得到

$$P_z = \left( E_j + E_i - \frac{m}{M} E \right) \left( \frac{M}{2E} \right)^{1/2}, \quad (8)$$

式中,  $E_j$  是中间双激发态能量;  $E_i$  是靶电子的束缚能,  $m$  是电子质量.

### 3. 双电子复合截面

双电子复合是一个较为复杂的过程, 其中辐射通道和 Auger 通道及相关的组态相互作用 (CI) 对双电子复合截面有重要影响. 以下详细分析了影响类钠铜离子的双电子复合截面的各种因素.

### 3.1. 2s 电子激发和 2p 电子激发产生的 DR 截面

我们知道,  $\text{Cu}^{18+}$  离子的基组态为  $2s^2 2p^6 3s$ . 在双电子复合过程中, 处于基态上的  $\text{Cu}^{18+}$  离子的束缚电子的激发既可以是 2p 电子, 也可以是 2s 电子, 甚至还可以是更内壳层上的 1s 电子; 而俘获的电子可以处于一系列不同的高激发轨道  $nl$  上. 按照我们提出的通道的概念<sup>[13]</sup>, 即构成了所谓的俘获通道. 由于激发 1s 电子所需要的能量要比激发 2s 和 2p 电子大得多, 因此激发 1s 电子与激发 2s 和 2p 电子所形成的双电子复合谱的范围将极大的不同. 这里, 只考虑了 2s 和 2p 电子激发的情况.

图 1 给出了 2s 电子激发和 2p 电子激发产生的 DR 截面. 其中, 图 1(a) 展示的是 2s 电子激发的结果, 图 1(b) 展示的是 2p 电子激发的结果. 可以看出, 2s 电子激发时, 最强峰峰位在 678 eV, 峰值不到  $3 \times 10^{-21} \text{ cm}^2$ ; 而 2p 电子激发时, 最强峰峰位在 540 eV, 峰值约  $400 \times 10^{-21} \text{ cm}^2$ , 比 2s 电子激发的峰值大了两个数量级. 可见, 在此 2s 电子激发不是主要的双电子复合通道.

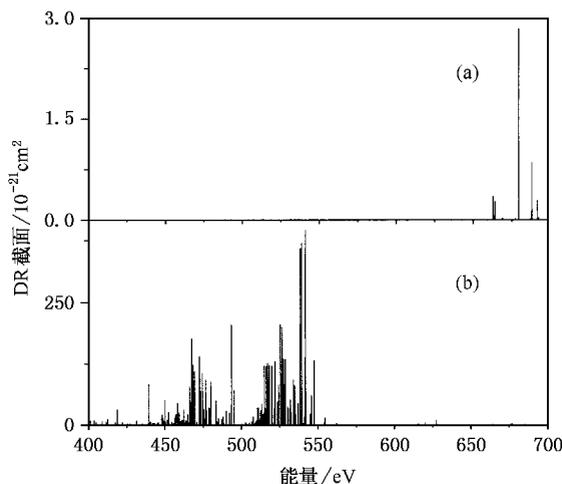


图 1 不同轨道的电子激发产生的 DR 截面 (a) 2s 电子激发; (b) 2p 电子激发

### 3.2. 组态相互作用对 DR 截面的影响

在以往对类钠离子的 DR 过程的理论研究中, 常常只考虑了  $2p^5 3s 3l, n l$  形式的中间双激发态, 而对于像  $2p^5 3p^2 n l$ ,  $2p^5 3p 3d n l$  和  $2p^5 3d^2 n l$  形式的组态的情况则未考虑. 例如 1990 年 Badnell 等人<sup>[14]</sup>对  $\text{Nb}^{30+}$  的研究便是如此. 这主要是由于当时人们认为这些组态不能由双电子复合过程直接得到, 因为它

涉及到三个电子的变动,并且,即使  $2p^5 3s3l, n1$  和其他组态的 CI 被包括进来,在大多数情况下其总体效应也只是重新分布了 DR 截面,而对总截面没有影响<sup>[15]</sup>.因而许多文献并未真正予以考虑.事实上,在许多情况下组态相互作用对截面的影响还是很大的.如 1996 年 Gorczyca 等人<sup>[16]</sup>对类钠离子 DR 的 CI 研究表明,CI 的考虑使 DR 截面降低了 50%.这里,我们详细研究了组态相互作用对  $\text{Cu}^{18+}$  离子双电子复合过程中的辐射衰变率和 Auger 衰变率的影响.

图 2 给出了类钠铜离子通过  $2l^7 3s3l, 3l$  中间双激发组态而产生的 DR 截面.其中,图 2(a)展示的是没有考虑任何 CI 的 DR 截面,图 2(b)展示的是考虑了 CI 对辐射衰变率的影响后的 DR 截面.由图可见,在辐射衰变率的计算中考虑了 CI 效应后,DR 截面的最强峰位有微小的移动,相应的峰值有近 40% 的下降.

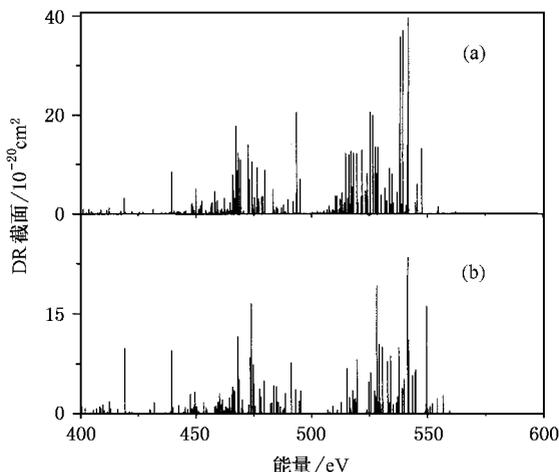


图 2 组态相互作用对通过中间双激发组态  $3s3l, 3l$  产生的 DR 截面的影响(辐射过程) (a) 不包括 CI; (b) 包括 CI

为了对 CI 效应对通过  $2l^7 3s3l, 3l$  中间双激发组态而产生的 DR 截面的影响有一个更加清楚的理解,我们以  $2p^5 3s3d^2$  组态为例,在辐射衰变初态(中间双激发态)中,考虑组态  $2p^5 3s3d^2$  与组态  $2p^5 3p^2 3d$ ,  $2p^5 3s3p^2$ ,  $2p^5 3s^2 3d$  及  $2p^5 3d^3$  间的组态相互作用,而在辐射衰变末态  $2p^6 3s3d$  及  $2p^6 3d^2$  中,考虑组态  $2p^6 3p^2$  及  $2p^6 3s^2$  的组态相互作用.图 3 中(a), (b), (c), (d) 分别为考虑了  $2p^5 3p^2 3d$ ,  $2p^5 3s3p^2$ ,  $2p^5 3s^2 3d$  及  $2p^5 3d^3$  组态的组态相互作用后的 DR 截面,图 3(e) 则是考虑了以上所有组态后的 DR 截面.由图可见,图 3(a) 的最强峰位(542eV) 峰值 ( $24.5 \times 10^{-20} \text{ cm}^2$ ) 与图 3(e) 的最强峰位(543eV) 峰值

( $23.0 \times 10^{-20} \text{ cm}^2$ ) 相比很接近,并且谱形相似.而图 3(b), (c), (d) 与图 3(e) 差异很大.由此可见,在通过中间双激发组态  $2p^5 3s3d^2$  而进行的 DR 过程中,  $2p^5 3p^2 3d$  组态的组态相互作用有着非常重要的作用.

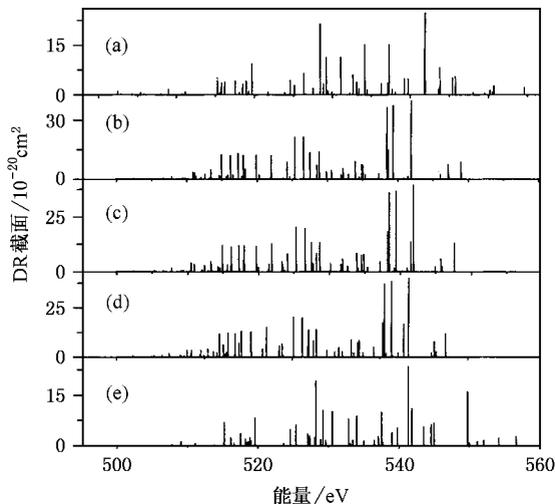


图 3 组态相互作用对通过中间双激发组态  $2p^5 3s3d^2$  产生的 DR 截面的影响(辐射过程) (a) 包括  $2p^5 3p^2 3d$  (b) 包括  $2p^5 3s3p^2$ ; (c) 包括  $2p^5 3s^2 3d$  (d) 包括  $2p^5 3d^3$ ; (e) 包括以上所有组态

进一步对通过  $2l^7 3s3l, n(n > 3)$  中间双激发组态产生的 DR 截面的相似研究表明,辐射初、末态中的 CI 效应对 DR 截面有类似的影响,并且这种影响随着  $n$  的增大而逐渐减弱.

对双电子复合截面产生影响的另一个重要因素是 Auger 衰变率.在不考虑 CI 效应的情况下,中间双激发组态  $2l^7 3s3l, n1$  不能通过 Auger 过程衰变到组态  $2l^8 3l'$ , 因为这涉及三个电子变动.然而,当  $2l^7 3s3l, n1$  和  $2l^7 3l' 3l', n1$  间有较强的 CI 时,由于  $2l^7 3l' 3l', n1$  有向  $2l^8 3l'$  发生 Auger 衰变的概率,从而使  $2l^7 3s3l, n1$  也能通过 Auger 衰变到  $2l^8 3l'$ .

图 4 给出了 CI 效应对通过中间双激发组态  $2p^5 3s3d^2$  形成双电子复合过程中的 Auger 衰变率的影响.其中图 4(a) 展示的是不考虑 CI 效应对 Auger 衰变率的影响时的结果,图 4(b) 展示的是考虑了 CI 效应对 Auger 衰变率的影响时的结果.可见,考虑了 CI 效应对 Auger 衰变的影响后,DR 截面的各峰峰值都有轻微的下降.进一步对  $2l^7 3s3l, 4l$ ,  $2l^7 3s3l, 5l$  的相似研究表明,CI 效应对  $2l^7 3s3l, n(n > 3)$  组态的 Auger 衰变不产生重要影响,相应地也不会由此而影响其所对应的 DR 截面.

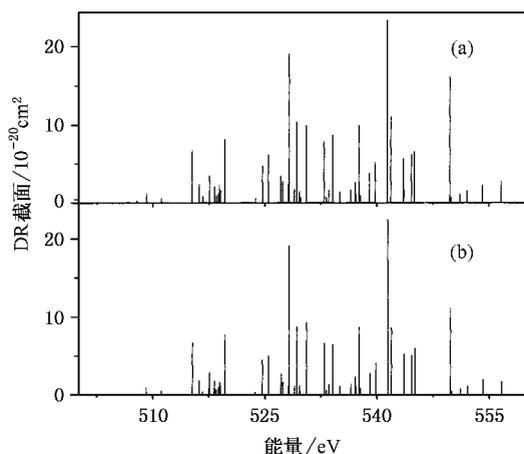


图4 组态相互作用对通过中间双激发组态  $2p^5 3s 3d^2$  产生的 DR 截面的影响(Auger 过程) (a)没有包括 CI 效应 (b)包括 CI 效应

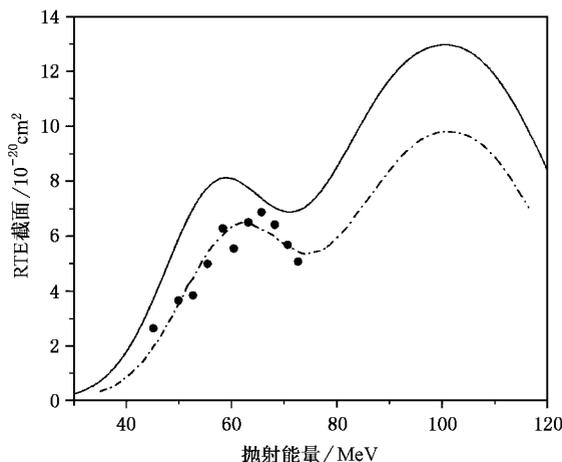


图5  $\text{Cu}^{18+} + \text{H}_2$  的共振转移激发截面(实线是本文的计算结果,点是实验值,虚线是 Zavodszky 等人的理论计算值乘了 1.6 的结果)

## 4. 共振转移激发截面

在综合考虑了以上各种因素对  $\text{Cu}^{18+}$  离子的 DR 截面影响的基础上,根据(6)–(8)式我们进一步计算了  $\text{Cu}^{18+}$  离子与  $\text{H}_2$  碰撞过程中的共振转移激发截面.其中,靶电子的康普顿轮廓来自 Lee 等人的实验<sup>[17]</sup>,而氢分子中的电子束缚能(17.4eV)取自文献[6].图5给出了据此计算得到的共振转移激发截面结果.作为比较,同时也给出了 Zavodszky 等人<sup>[10]</sup>的实验结果及理论计算结果.其中,实线是本文的计算结果,呈双峰结构:第一个峰主要来自中间双激发组态  $2l^7 3s 3l_r 3l$  的贡献,峰位在 58MeV,峰强  $7.2 \times 10^{-20} \text{ cm}^2$ ,第二个峰主要来自中间双激发组态  $2l^7 3s 3l_r n l$  ( $n > 3$ )的贡献,峰位在 100MeV,峰强  $12.8 \times 10^{-20} \text{ cm}^2$ .点为实验值,虚线是 Zavodszky 等人的理论计算值乘了 1.6 的结果.由图可见,本文的计算结果和实验结果相比,符合较好.

## 5. 结 论

本文详细研究了组态相互作用对类钠铜离子的 DR 截面和 RTE 截面的影响.结果表明,  $2p$  电子的激发为 DR 的主要通道,  $2s$  电子激发的贡献非常小,小于总截面的 1%;由于 CI 效应对辐射跃迁概率的显著影响,从而对 DR 截面的影响非常大.尤其是辐射初组态 CI 效应的影响,其中  $3s 3l_r 3l$  中间双激发组态的组态相互作用最强,其 CI 效应使 DR 截面峰值降低了 40%,且中间双激发组态  $2l^7 3s 3l_r n l$  上的 CI 效应对 DR 截面的影响随着  $n$  的增大,呈减弱的趋势;CI 效应对中间双激发态的 Auger 衰变概率也有一定影响,从而也产生了对 DR 截面不可忽略的影响.基于对 DR 截面的上述分析,进一步计算得到了  $\text{Cu}^{18+}$  离子与  $\text{H}_2$  碰撞过程中的 RTE 截面,与最新的实验结果<sup>[10]</sup>相比符合得很好.我们希望本文的理论结果有助于实验工作者对高离化离子 L 壳层的 DR 和 RTE 过程进行更为深入的研究.

- [1] Yan J, Li P, Liu Ch L, Qiu Y B, Fang Q Y 2001 *Chin. Phys.* **10** 1124  
 [2] Yang T L, Jiang G, Zhu Zh H 2004 *Chin. Phys.* **13** 850  
 [3] Shi X H, Wang Y S, Chen C Y *et al* 2005 *Chin. Phys.* **14** 959  
 [4] Badnell N R 1989 *Phys. Rev. A* **40** 3579  
 [5] Tains J A, Bernstein E M 1986 *Phys. Rev. A* **34** 2543  
 [6] Dong C Z, Wang J G, Qu Y Z *et al* 1999 *Physica Scripta T* **80** 301

- [7] Bernstein E M, Clark M W, Tanis J A *et al* 1989 *Phys. Rev. A* **40** 4085  
 [8] Hahn Y, Gau J N, Omar G *et al* 1987 *Phys. Rev. A* **36** 576  
 [9] Linkemann J, Kenntner J, Muller A *et al* 1995 *Phys. Res. Sect. B* **98** 154  
 [10] Zavodszky P A, Wroblewski J A, Ferguson S M *et al* 1997 *Phys. Rev. A* **56** 1989

- [ 11 ] Cowan R D 1981 *The theory of atomic structure and spectra*. 44 1712 ]  
 ( University of California Press ,Berkeley, Los Angeles, London )
- [ 12 ] Brandt D 1983 *Phys. Rev. A* **27** 1314
- [ 13 ] 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、李家明 1995 物理学报
- [ 14 ] Badnell N R 1990 *Phys. Rev. A* **42** 204
- [ 15 ] Cowan R D , Griffin D C 1987 *Phys. Rev. A* **36** 26
- [ 16 ] Gorczyca T W , Badnell N R 1996 *Phys. Rev. A* **54** 4113
- [ 17 ] Lee J S 1977 *J. Chem. Phys.* **66** 4906

## Theoretical studies of dielectronic recombination and resonant transfer excitation for highly ionized $\text{Cu}^{18+}$ ions<sup>\*</sup>

Dong Chen-Zhong<sup>1,2)</sup> Fu Yan-Biao<sup>1)</sup>

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 4 August 2004 ; revised manuscript received 16 June 2005 )

### Abstract

The dielectronic recombination cross sections of  $\text{Cu}^{18+}$  ions are calculated using a quasi-relativistic theory. The effects of configuration interaction to the cross sections are analysed. Base on the calculated data, the resonant transfer excitation cross sections of  $\text{Cu}^{18+}$  with  $\text{H}_2$  targets are estimated by using the convolution of Compton profile of the target electron in the impulse approximation. Good agreement of the present calculation with new experimental observation is achieved.

**Keywords** : dielectronic recombination , resonant transfer excitation

**PACC** : 3120B , 3480D , 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 ).