

指数变分方法应用于电荷交换反应*

刘 强 王建中 徐向东 陈学俊¹⁾

清华大学现代应用物理系, 北京, 100084

1990 年 11 月 15 日收到

本文考虑如下的电荷交换反应: $H^+ + H(1s) \rightarrow H(1s) + H^+$. 用指数变分方法得到类 H^+ 的波函数, 并将这样的波函数用于上述的电荷交换反应. 对入射 H^+ 的能量为 60 和 125 keV 的两种情况, 计算了电荷交换反应的角分布. 结果表明, 指数变分波函数带来明显的改进, 理论结果与实验数据符合得比较好.

PACC: 3470

一、引 言

在原子物理学中, 电荷交换反应是很早就开始研究的课题^[1-7]. 时至今日, 这一研究仍在持续进展中^[8]. 最近几年, 人们对这一问题的兴趣又增加了, 因为从应用角度来考虑, 电荷交换反应有很大的价值, 例如, 串列加速器就需要利用电荷交换反应来改变离子电荷的正负性; 又例如, 化学反应动力学在近几年有很大的进展. 在这一研究中, 如果能制备出单能强流的中性原子和分子束, 那是极为理想的. 实现这一目标的有效途径是先得到单能离子束, 再通过电荷交换得到中性束. 从基础研究角度来考虑, 电荷交换反应的机制还有不清楚之处, 理论与实验还有差距. 特别是, 电荷交换反应涉及库仑长程力, 它有一些特殊性需要考虑. 1986 年, Dewangan 和 Eichler^[9] 首先注意到库仑力的特点. 他们指出, 过去的以短程力为背景发展起来的散射理论应该作些修改. 他们提出了不论是入射道还是出射道都应满足的库仑边界条件. 在此基础上, 提出了新的一级 Born 近似(以下简称为 B1B 近似), 从理论上推进了电荷交换反应的研究.

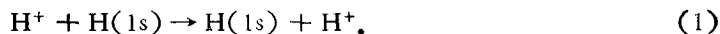
不难想到, 电荷交换反应理论的进一步发展有一些可能途径. 例如, 以库仑边界条件为基础的二级 Born 近似, DWBA, ... 本文的目的并不在于考察高级项的改进, 而是在 B1B 框架下研究波函数的影响. 我们以指数变分方法得到的波函数代替 B1B 近似中的过于简化的波函数. 针对两个人射能量作了数值计算, 结果表明, 即使在 B1B 框架下, 指数变分波函数也能给出相当好的结果.

* 国家自然科学基金资助的课题.

¹⁾ 中国高等科学技术中心(世界实验室).

二、理 论

本文研究如下过程:



由于质子的质量比电子的大得多,碰撞参数方法是一个好的方法^[10]. Bransden 指出^[10],对于过程(1),只要入射能量大于几百电子伏,这一方法就可用. 在碰撞参数方法下,入射离子被近似为沿着一条直线前进,其位置可表示为 $\mathbf{R} = \mathbf{b} + \mathbf{v}t$, 其中 $\mathbf{b}$ 为碰撞参量, $\mathbf{v}$ 为入射速度, t 为时间. Dewangan 和 Eichler^[9] 已经证明,对于过程(1),满足库仑边界条件的一级 Born 近似的反应振幅可表示为

$$A_{\text{BIB}}(\text{H}^+ - \text{H}) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \phi_f \left| \frac{1}{R} - \frac{1}{r_T} \right| \phi_i \right\rangle, \quad (2)$$

其中

$$\phi_i = \phi_i(\mathbf{r}_T) \exp(-iE_i t), \quad (3)$$

$$\phi_f = \phi_f(\mathbf{r}_p) \exp(-iE_f t + i\mathbf{v} \cdot \mathbf{r}_T - \frac{1}{2}i\mathbf{v}^2 t), \quad (4)$$

E_i 和 E_f 为电荷交换前后的电子能量, $\phi_i(\mathbf{r}_T)$ 和 $\phi_f(\mathbf{r}_p)$ 则为相应的波函数, $\mathbf{r}_T$ 和 $\mathbf{r}_p$ 为电子相对于靶核和入射离子的坐标. 坐标关系如图 1 所示. 本文始终采用原子单位, 除特别说明外.

一级 Born 近似的实质在于用始态波函数 ϕ_i 代替了完全的波函数. 这样处理的近似性是很明显的. 实际过程的物理图象可描述如下: 碰撞前, 入射离子与靶核远离, 电子束缚在靶原子中, 随着离子与靶原子的靠近, 电子逐渐被两核所共有, 碰撞后两核又远离, 此时电子已束缚在入射离子中. 对这样的过程, 指数变分波函数^[11]能给出相当精确的描述, 其形式如下:

$$\psi = N(\phi_p + \phi_T), \quad (5)$$

其中

$$\phi_p = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} e^{-\alpha r_p}, \quad (6)$$

$$\phi_T = \sqrt{\frac{\alpha^3}{\pi}} e^{-\alpha r_T}, \quad (7)$$

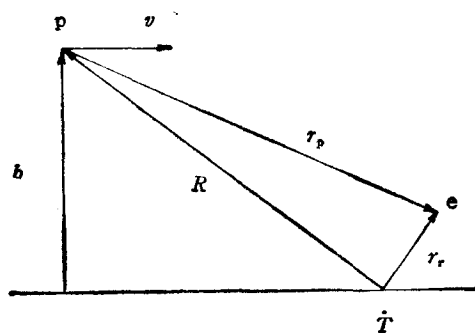


图 1 坐标关系

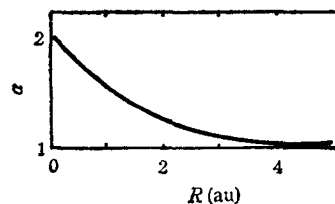


图 2 α 与 R 的关系

α 为变分参数, N 为归一化常数, 即

$$N = [2(1+s)]^{-1/2}, \quad (8)$$

$$s = e^{-\alpha R} (1 + \alpha R + \alpha^2 R^2/3). \quad (9)$$

由变分条件可得出 α 应满足的代数方程,从而求出 α ,它为 R 的函数,如图 2 所示。图 2 的物理意义相当清楚:碰撞前后, R 很大,电子或束缚在靶原子中,或束缚于入射离子中,它感受到的电荷为 $+1$;在碰撞区域内,电子被两核共有,当 $R \sim 0$ 时,它感受到的电荷为 $+2$ 。本文用 ψ 代替 ϕ_i ,因而 A_{BIB} 改写成

$$A_{BF}(H^+ - H) = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \Phi_f \left| \frac{1}{R} - \frac{1}{r_T} \right| \psi \right\rangle = A_1 + A_2 - A_3 - A_4, \quad (10)$$

$$\text{其中} \quad A_1 = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \Phi_f \left| \frac{1}{R} \right| N\phi_T \right\rangle, \quad (11)$$

$$A_2 = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \Phi_f \left| \frac{1}{R} \right| N\phi_p \right\rangle, \quad (12)$$

$$A_3 = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \Phi_f \left| \frac{1}{r_T} \right| N\phi_T \right\rangle, \quad (13)$$

$$A_4 = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \left\langle \Phi_f \left| \frac{1}{r_T} \right| N\phi_p \right\rangle. \quad (14)$$

采用 Dewangan 和 Eichler 的处理方法^[9], A_1 可化为

$$A_1 = -\frac{2i}{r} \int_{-\infty}^{+\infty} dZ \frac{N}{R} \alpha^{3/2} \int_0^1 dy g_1(R, y) e^{iJ \cdot R}, \quad (15)$$

$$\text{其中} \quad J = \left[(E_f - E_i)/v + v \left(\frac{1}{2} - y \right) \right] v, \quad (16)$$

$$g_1(R, y) = [D_1^{-2} + (R + D_1^{-1})^2] \alpha \beta_1 y (1 - y) D_1^{-3} e^{-D_1 R} \quad (17)$$

$$D_1^2 = v^2 y (1 - y) + \alpha^2 y + \beta_1^2 (1 - y), \quad (18)$$

β_1 为一个临时性参数,运算完成后,取 $\beta_1 = 1$ 。

对 A_1 作二维傅里叶变换,可得

$$F_1(q) = (2\pi)^{-1} \int d^2b e^{iq \cdot b} A_1(b). \quad (19)$$

将(15)式代入(19)式,得

$$F_1(q) = -\frac{i}{\pi v} \int dR \frac{N}{R} \alpha^{3/2} \int_0^1 dy g_1(R, y) e^{ip \cdot R}, \quad (20)$$

$$\text{其中} \quad p = \left[(E_f - E_i)/v + v \left(\frac{1}{2} - y \right) \right] v + q. \quad (21)$$

利用 $e^{ip \cdot R}$ 的球谐函数展开,并完成对 R 的角度积分,最终可得

$$F_1(q) = -2\pi i \int_0^\infty dR \int_0^1 dy f_1(R, y), \quad (22)$$

$$\text{其中} \quad f_1(R, y) = C_1(R) g_1(R, y) j_0(pR), \quad (23)$$

$$C_1(R) = \frac{2}{\pi v} N(R) R \alpha^{3/2}, \quad (24)$$

$j_0(pR)$ 为球贝塞耳函数。对 A_2, A_3 和 A_4 可作完全相似的处理,结果为

$$F_2(q) = 0, \quad (25)$$

$$F_3(q) = -2\pi i \int_0^\infty dR \int_0^1 dy f_3(R, y), \quad (26)$$

其中

$$f_3(R, y) = RC_1(R)g_3(R, y)i_0(pR), \quad (27)$$

$$g_3(R, y) = (R + D_3^{-1})D_3^{-2}(1 - y)e^{-D_3R}, \quad (28)$$

$$D_3^2 = v^2y(1 - y) + \alpha^2y + (1 - y), \quad (29)$$

$$F_4(\mathbf{q}) = -2\pi i \int_0^\infty dR \int_0^1 dy f_4(R, y), \quad (30)$$

其中

$$f_4(R, y) = RC_1(R)g_4(R, y)i_0(pR), \quad (31)$$

$$g_4(R, y) = (R + D_4^{-1})D_4^{-2}(1 - y)(1 + \alpha)e^{-D_4R}, \quad (32)$$

$$D_4^2 = v^2y(1 - y) + (1 + \alpha)(1 - y). \quad (33)$$

为什么 A_2 或 $F_2(\mathbf{q})$ 为零呢? 这可从实际推导过程的中间结果明显地看出来, 也可从 A_2 的表达式(12)看出来, 因为 Φ_f 和 Φ_p 只是 $\mathbf{r}_p$ 的函数, 与 R 无关, 由于正交性, 这个矩阵元应为零。

正如 Bransden^[10]指出的, $\mathbf{q}$ 即为电荷交换反应中的动量传递, $\mathbf{q} = \mu(\mathbf{v}_f - \mathbf{v})$, 其中 μ 为约化质量, $\mathbf{v}_f$ 为反应后的速度。在电荷交换反应中, 入射离子的角度偏转和能量损失都非常小, 所以有

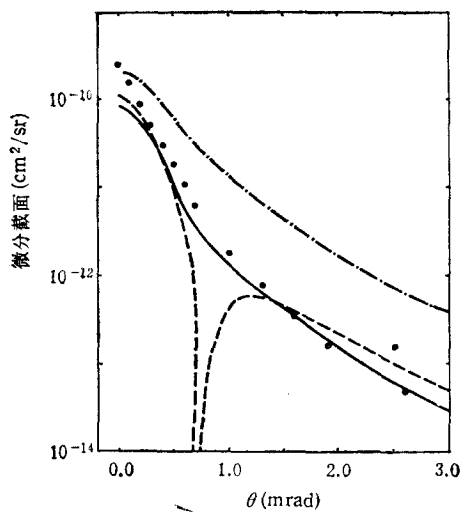
$$q = 2\mu v \sin \frac{\theta}{2}, \quad (34)$$

其中 θ 为质心系中入射离子的偏转角度。总的电荷交换反应振幅为

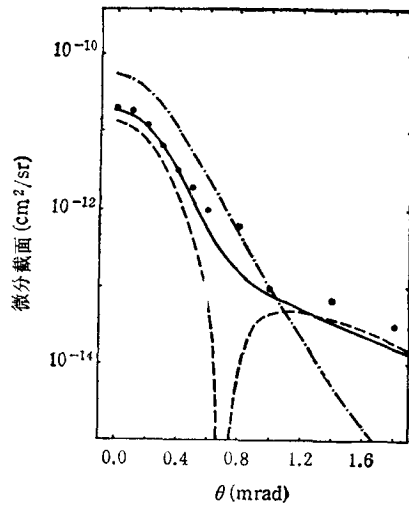
$$F(\theta) = \mu v(F_1 - F_3 - F_4), \quad (35)$$

角分布为

$$d\sigma/d\Omega = |F(\theta)|^2. \quad (36)$$



(a) 入射质子能量为 60 keV; 黑点代表实验数据^[12]; 点虚线代表文献[4]的计算结果; 短虚线代表 B1B 的计算结果; 实线代表指数变分方法的结果



(b) 入射质子能量为 125 keV; 其余同 (a)

图 3 在 $H^+ - H$ 碰撞中电荷交换的微分截面

三、结果与讨论

从上面的公式可以得到如下的论断:

1. 指数变分方法和标准的 B1B 近似比较起来, 现在的 $F_4(q)$ 是多出来的一个新项.

2. 即使对于 $F_1(q)$ 和 $F_3(q)$, 由于在 B1B 近似中, α 被近似为 1, 而现在的 α 是随 R 而变, 所以在两个方法中, F_1 和 F_3 的具体内容也有不同. 但如果取近似 $\alpha(R) = 1$, 则两者一致. 因此, 现在的指数变分方法为标准的 B1B 近似的拓展.

以上面的公式为基础, 具体计算了两个人射能量, 即 60 和 125 keV 的角分布. 用二重高斯积分程序完成所需的数值积分计算. R 的上限取 100, 对 R 积分的高斯点数目取 $N_R = 800$, 对 ν 积分的高斯点数目取 $N_\nu = 56$. 比较了不同高斯点数目和不同上限的结果后, 我们判定, 计算的相对误差约为 8%. 结果如图 3(a) 和 (b) 所示. 这些结果表明, 指数变分方法的结果比 B1B 的好得多, 它已经相当符合实验了. 看来, 指数变分方法应用于其它电荷交换反应的问题也是值得探讨的.

本工作还得到清华大学研究生院和理学院基金的资助. 感谢黄祖洽教授审阅本文并提出很有价值的意见.

- [1] J. R. Oppenheimer, *Phys. Rev.*, **31**(1928), 349.
- [2] H. C. Brinkmann and H. A. Kramers, *Proc. K. Ned. Akad. Wet.*, **33**(1930), 973.
- [3] D. Bates and A. Dalgarno, *Proc. Phys. Soc. London Sect.*, **B65**(1952), 919.
- [4] J. D. Jackson and H. Schiff, *Phys. Rev.*, **89**(1953), 359.
- [5] R. H. Bassel and E. Gerjuoy, *Phys. Rev.*, **177**(1960), 749.
- [6] A. M. Halpern and J. Law, *Phys. Rev.*, **A12**(1975), 1776.
- [7] D. R. Bates, *Proc. Roy. Soc. London Sect.*, **A274**(1975), 294.
- [8] B. H. Bransden, *Theory of Charge-exchange*, Pergamon, Oxford, (1987).
- [9] D. P. Dewangan and J. Eichler, *J. Phys. B*, **19**(1986), 2939.
- [10] B. H. Bransden, *Atomic Collision Theory*, 2nd ed., Benjamin, London, (1983), p. 342.
- [11] 唐敖庆, 量子化学, 科学出版社, (1982), 第72页.
- [12] P. J. Martin *et al.*, *Phys. Rev.*, **A23**(1981), 3357.

EXPONENTIAL VARIATION METHOD FOR CHARGE EXCHANGE IN $H^+ + H$ COLLISIONS

LIU QIANG WANG JIAN-ZHONG XU XIANG-DONG CHEN XUE-JUN

Department of Modern Applied Physics, Tsinghua University, Beijing, 100084

(Received 15 November 1990)

ABSTRACT

The exponential variation method is applied to the charge exchange in $H^+ + H$ collisions in the present paper. The angular distributions have been calculated practically for two incident energies, 60 and 125 keV. The present results show that the obvious improvement with respect to B1B approximation can be obtained by the exponential variation method.

PACC: 3470