

中等能量入射的质子, α 粒子与氦原子 碰撞的电荷转移*

周效信^{1) 2)} 李白文¹⁾

¹⁾ (中国科学院武汉物理与数学研究所波谱与原子分子物理国家重点实验室, 武汉 430071)

²⁾ (西北师范大学物理系, 兰州 730070)

(1997 年 11 月 3 日收到; 1998 年 10 月 19 日收到修改稿)

将最近引入的渐近两态原子轨道展开方法用来研究双电子碰撞体系 $H^+ + He$ 和 $He^{2+} + He$ 的电荷转移过程. 结果表明, 由该方法得到的电子俘获截面在中高能区与满足边界条件的一级波恩近似(即 B1B 近似)和实验结果符合得很好, 并且在中低能区, 比 B1B 方法有很大改善, 然后指出了由一级微扰理论所得结果在中低能区与实验结果不符的原因.

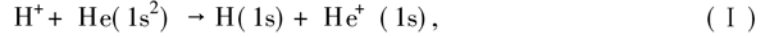
PACC: 3470

1 引 言

在离子-原子碰撞发生的各种过程中, 电荷转移过程引起了人们的高度重视, 不仅因为它在多种自然现象中都会发生(如天体、大气等离子体以及实验室等离子体中), 而且更重要的是由于这个过程牵涉到三体问题, 与直接激发相比, 对于理论上如何正确描述这个过程提出了很高的要求^[1]. 在理论上处理电荷转移问题可按入射离子的速度 v 与电子在靶原子轨道上的速度 v_e 的比值 $\gamma = v/v_e$ 的大小可将碰撞分为低能、中能和高能碰撞. 当 $\gamma \ll 1$ 时, 称为低能碰撞, 当 $\gamma \approx 1$ 时, 则为中能碰撞, 而当 $\gamma \gg 1$ 时, 即为高能碰撞.

一般来说, 在不同的碰撞能区采用不同的理论方法来研究电荷转移问题. 通常在低能区采用分子轨道展开法^[2], 在中能区常使用原子轨道展开法^[3], 而在高能区则多使用微扰法^[1]. 使用这些方法在各自的能区内一般都能得到很好的结果. 然而欲使某一理论方法在更宽的能区内得到与实验相一致的结果往往比较困难. 在文献[4]中, 我们根据传统的两态原子轨道展开法和满足边界条件的一级玻恩近似(即 B1B 法)各自的特点, 提出了渐近的两态原子轨道展开法, 并使用该方法来处理单电子碰撞体系的电荷转移问题, 在较宽的能区内得到了与实验一致的结果, 与一级微扰理论的 B1B 方法得到的结果相比, 在中高能区两者是一致的, 而在中低能区我们的结果有明显改善. 为了考察使用该方法研究比单电子更复杂的碰撞体系的适应性问题, 很自然的我们将该方法用来研究双电子碰撞体系的电荷转移问题. 因此在本文中我们将用该方法研究下面的反应过程:

* 国家自然科学基金(批准号: 19474059)资助的课题.



在本文中我们将碰撞能区再一次加以区分, 如果 v 在 1—7 之间, 我们称其为中高能碰撞, 而将 v 在 0.5—1 之间则称为中低能碰撞. 具体说来, 对反应过程(I), 能量在 5—45 keV 为中低能碰撞, 能量在 45—2500 keV 为中高能碰撞; 对反应过程(II), 能量在 20—180 keV 为中低能碰撞, 能量在 180—10⁴ keV 为中高能碰撞. 文中除特殊声明外, 均采用原子单位.

2 理论方法

渐近两态原子轨道展开方法已在文献[4]中给出, 这里仅对该方法加以概述. 考虑一个单电子系统的电荷转移, 使用半经典的碰撞参量法, 入射离子相对于靶原子的运动可用经典的直线轨道描述, 其位置矢量为 $\mathbf{R} = \mathbf{b} + v\mathbf{t}$ (v 为入射离子速度, $\mathbf{b}$ 为碰撞参量, t 表示时间), 被入射离子俘获的电子, 其运动满足依赖时间的薛定谔方程

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t) = \left[-\frac{1}{2} \Delta^2 - \frac{Z_t}{r_t} - \frac{Z_p}{r_p} \right] \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (1)$$

其中 Z_t, r_t 分别为靶原子的核电荷数和电子相对于靶原子的距离, Z_p, r_p 分别为入射离子的核电荷数和电子相对于入射离子的距离, $\mathbf{r}$ 为电子相对于两离子连线中点的位置矢量. 将电子波函数 $\Psi(\mathbf{r}, t)$ 按两态原子轨道展开

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t) = & a(t) \phi(\mathbf{r}_t) \exp \left[i \left[-\frac{1}{2} v \cdot \mathbf{r} - \frac{1}{8} v^2 t - \varepsilon_t t \right] \right] \\ & + b(t) \phi(\mathbf{r}_p) \exp \left[i \left[\frac{1}{2} v \cdot \mathbf{r} - \frac{1}{8} v^2 t - \varepsilon_p t \right] \right], \end{aligned} \quad (2)$$

式中 $\phi(\mathbf{r}_t)$ 和 $\phi(\mathbf{r}_p)$ 分别为中心在靶原子和入射离子上的未微扰的类氢离子波函数, ε_t 和 ε_p 分别为相应波函数的本征值, a, b 为展开系数. 将(2)式代入(1)式并通过对展开系数的一阶变分后可得到关于 $a(t), b(t)$ 的两个耦合方程, 再引入一个相变换, 将展开系数 $a(t), b(t)$ 分别变为 c_t, c_p 后, 可得到下面的两个耦合方程:

$$\begin{aligned} i \frac{dc_t}{dt} &= \frac{h_{tp} - s_{tp} h_{pp}}{1 - s^2} \exp[i(\omega t + \delta)] c_p, \\ i \frac{dc_p}{dt} &= \frac{h_{pt} - s_{pt} h_{tt}}{1 - s^2} \exp[-i(\omega t + \delta)] c_t. \end{aligned} \quad (3)$$

上式中 $\omega = \varepsilon_t - \varepsilon_p$, 相因子

$$\delta = \int_{-\infty}^t \left[\frac{h_{tt} - h_{pp} + s_{pt} h_{tp} - s_{tp} h_{pt}}{1 - s^2} \right] dt, \quad (4)$$

重叠矩阵元 $s_{tp} = s_{pt}^*$, 且 $s^2 = s_{pt} s_{tp}$, s_{tp} 表示式为

$$s_{tp} = \int \phi^*(\mathbf{r}_t) \phi(\mathbf{r}_p) \exp(i v \cdot \mathbf{r}) d\tau, \quad (5)$$

直接矩阵元为

$$h_{tt} = \int \phi^*(\mathbf{r}_t) \left[-\frac{Z_p}{r_p} \right] \phi(\mathbf{r}_t) d\tau, \quad (6)$$

$$h_{pp} = \int \phi^*(\mathbf{r}_p) \left[-\frac{Z_t}{r_p} \right] \phi(\mathbf{r}_p) d\tau, \quad (7)$$

交换矩阵元为

$$h_{tp} = \int \phi^*(\mathbf{r}_t) \left[-\frac{Z_t}{r_t} \right] \phi(\mathbf{r}_p) \exp(i\mathbf{v} \cdot \mathbf{r}) d\tau, \quad (8)$$

$$h_{pt} = \int \phi^*(\mathbf{r}_p) \left[-\frac{Z_p}{r_p} \right] \phi(\mathbf{r}_t) \exp(-i\mathbf{v} \cdot \mathbf{r}) d\tau, \quad (9)$$

(3) 式满足的初始条件为: $c_t(-\infty) = 1$, $c_p(-\infty) = 0$, 其中重叠矩阵元和交换矩阵元均为双中心积分. 在 高能区, (3) 式中的 s^2 和 (4) 式相因子 δ 中与双中心矩阵元有关的项很小可以忽略, 并令 $c_t \approx 1$, 这时 (3) 式的解就是扭曲波一级玻恩近似(DWBA1)^[5], 从而得到一级微扰的 DWBA1 方法就是两态原子轨道展开方法的高能近似解. 不过使用 DWBA1 方法在 高能区得到的电子俘获截面往往比实验值高(使用传统的两态原子轨道展开法也是如此). Crothers 等^[6]由连续扭曲波(CDW)方法出发, 使用连续扭曲波作为基函数建立了相应的两态展开方法, 且在 高能区这种方法的近似解就是一级微扰的 CDW 方法, 从而建立了相应的两态展开方法与 CDW 方法的联系, 并且在中低能区两态展开法给出的电子俘获截面比 CDW 方法给出的结果有很大的改善. 千文甲^[7]则提出用程函近似(eikonal approximation)的波函数作为基函数建立了程函两态展开方法, 其高能近似解就是一级程函近似, 在中低能区用该方法对 $H^+ + H$ 碰撞的电子俘获截面的计算结果较一级程函近似也有改善. 然而, 在连续扭曲波两态展开和程函两态展开方法中, 由于基函数选取的较为复杂, 对求解耦合方程带来了一定的困难. 而作为相对简单且在 高能区能够给出可靠截面的 B1B 方法也需要建立与之相对应的两态原子轨道展开, 并且希望这样的两态原子轨道展开法在中低能区同样能给出较好的电子俘获截面. 于是, 在文献[4]中, 我们提出将 (3) 式中的直接矩阵元 h_{tt} 和 h_{pp} 所给出的相互作用势

$$\begin{aligned} h_{tt} &= \frac{Z_p}{R} [(1 + Z_t R) \exp(-2Z_t R) - 1], \\ h_{pp} &= \frac{Z_t}{R} [(1 + Z_p R) \exp(-2Z_p R) - 1], \end{aligned} \quad (10)$$

用渐近势 $h_{tt} = -Z_p/R$, $h_{pp} = -Z_t/R$ 来代替(即在上式中取 R 很大时 h_{tt} 和 h_{pp} 的值). 这是因为使用这种渐近势, 在 高能区, (3) 式等号右端的 s^2 项和相因子 δ 中包含重叠积分 s_{tp} 和 s_{pt} 项都很小可以忽略, 且此时电子俘获截面很小, 则 $c_t \approx 1$, 于是跃迁振幅为

$$\begin{aligned} c_p &= -i \int_{-\infty}^{\infty} dt \left[h_{pt} - s_{pt} \left[-\frac{Z_p}{R} \right] \right] \exp(-i\omega t) \exp \left[-i \int_{-\infty}^t \left[\frac{Z_p}{R} - \frac{Z_t}{R} \right] dt \right] \\ &= -i \int_{-\infty}^{\infty} dt \phi^*(\mathbf{r}_p) \left[\frac{Z_p}{R} - \frac{Z_p}{r_p} \right] \phi(\mathbf{r}_t) \exp(-i\mathbf{v} \cdot \mathbf{r}) \exp(-i\omega t) \exp \left[-i \int_{-\infty}^t \left[\frac{Z_p}{R} - \frac{Z_t}{R} \right] dt \right]. \end{aligned} \quad (11)$$

上式正好就是 B1B 近似. 用渐近势取代 (10) 式中的相互作用势在中低能区的合理性已在

文献[4]中给出. 这样的两态原子轨道展开我们称为渐近的两态原子轨道展开法, 而 B1B 方法只是该展开方法的高能近似解, 使用该方法对单电子体系的对称碰撞 $H^+ + H$ 和非对称碰撞 $H^+ + He^+$ 的电子俘获截面计算表明^[4], 在较宽的能量范围内得到了很好的结果.

本文的目的是利用渐近的两态原子轨道展开法研究双电子碰撞体系的电荷转移, 而上述的理论是在单电子模型下引入的, 因此对双电子碰撞体系需作一点修改. Bransden 等^[8]使用传统的两态原子轨道展开方法对 $H^+ + He$ 碰撞中取不同形式的 He 原子波函数研究了电子俘获截面的影响, 结果发现, 不同的 He 原子波函数对电子俘获截面的影响很小, 所以在本文中我们取单参数变分波函数: $\phi(r_1, r_2) = \exp[-\alpha(r_1 + r_2)]$, 其中 $\alpha = 1.6875$ 为有效电荷. 这样选取的波函数意味着可将哈密顿量 $\hat{H} = -\frac{1}{2}\Delta_1^2 - \frac{1}{2}\Delta_2^2 - \frac{2}{r_1} - \frac{2}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}$ 改写为 $\hat{H} = -\frac{1}{2}\Delta_1^2 - \frac{1}{2}\Delta_2^2 - \frac{\alpha}{r_1} - \frac{\alpha}{r_2}$, 即两个电子作互不相关的独立运动, 被俘获的电子(主动电子 active electron)在另一个电子(被动电子 passive electron)屏蔽的核库仑场中运动, 按照通常处理碰撞的办法^[9], 可将双电子问题转化为单电子问题, 但靶原子的核电荷数 Z_1 要用有效电荷 α 来替换.

3 计算方法与计算结果

在解(3)式的耦合方程时, 先要计算有关的矩阵元, 除直接矩阵元使用上面的渐近势能有解析形式外, 重叠矩阵元和交换矩阵元都涉及到双中心积分问题, 需借助于数值积分方法得到. 使用 McCarroll^[10]的积分技术, 可将(5), (8), (9)式的积分由球坐标(r, θ, φ)下转变成椭球坐标(λ, η, φ)下进行. 对 η, φ 变量的积分可进行解析计算, 这样就将三维积分变成一维数值积分, 并用 30 点的高斯-拉盖尔方法进行数值计算. (3)式的两个耦合方程通过使用 Runge-Kutta 方法结合初始条件进行数值求解. 其电子俘获截面

$$\sigma_{1s} = 2 \times 2\pi \int_0^\infty |c_p(\infty)|^2 b db, \quad (12)$$

则使用辛普森数值积分法得到, (12)式中的因子 2 考虑了 He 原子中有两个等价电子的情况.

使用上面的方法对 $H^+ + He$ 碰撞能量为 5—2500 keV 和 $He^{2+} + He$ 碰撞能量为 20—10⁴ keV 范围内的电子俘获总截面进行了计算, 考虑到电子俘获到激发态对总截面的贡献, 根据 n^{-3} 标度规律, 电子俘获总截面为俘获到基态 1s 截面 σ_{1s} 的 1.2 倍. 在图 1 和图 2 中分别给出了我们的计算结果, 为了与实验及 B1B 理论结果进行比较, 我们还将有关数据也在图 1 和图 2 中给出. 由图 1 和图 2 可以看出, 无论对于 $H^+ + He$ 碰撞还是对 $He^{2+} + He$ 碰撞, 在中高能区我们的结果与 B1B 方法和实验结果都符合得很好; 而在中低能区, 对 $H^+ + He$ 碰撞的实验结果显示, 当入射离子能量约在 20 keV 时, 电子俘获总截面出现极大值, 使用渐近的两态原子轨道展开方法在该能量附近也出现了极大值, 而在该能量附近, B1B 方法给出的结果却与此不同, 电子俘获截面仍然随入射离子能量的降低而增

加, 没有极大值出现. 这与实验结果明显不符. 类似的对 $\text{He}^{2+} + \text{He}$ 碰撞, 我们的结果和实验结果都显示, 在入射离子能量约为 150 keV 时出现极大值, 而 B1B 方法仍然与实验结果不符. 虽然我们的结果在中低能区比实验值稍低(对 $\text{H}^+ + \text{He}$ 碰撞)或稍高(对 $\text{He}^{2+} + \text{He}$ 碰撞), 但与 B1B 方法给出的结果相比都有明显的改善. 从这些结果来看, 与 B1B 方法相比, 用渐近的两态原子轨道展开来研究双电子碰撞体系的电荷转移过程, 避免了在中低能区过高的估算了电子俘获截面, 而在中高能区与 B1B 方法给出的结果几乎重合, 实现了在更宽的能量范围内能给出可靠的结果, 这与我们对单电子碰撞体系的电子俘获研究的结论是相同的.

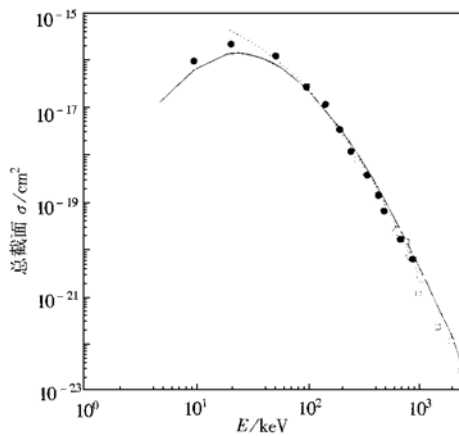


图 1 $\text{H}^+ + \text{He}$ 碰撞的电子俘获总截面. 实线为本文结果; 虚线为 B1B 方法的结果^[11]; 实验结果: $\circ$ 为文献[12]; $\square$ 为文献[13]; $\bullet$ 为文献[14]

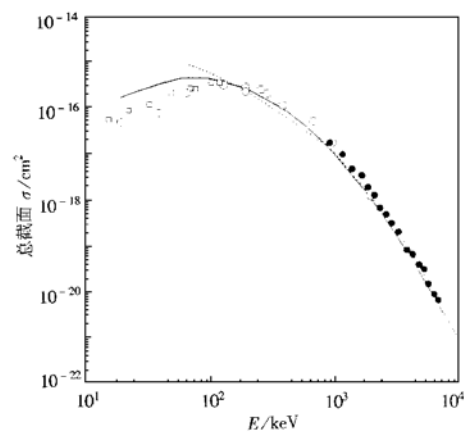


图 2 $\text{He}^{2+} + \text{He}$ 碰撞的电子俘获总截面. 实线为本文结果; 虚线为 B1B 方法的结果^[15]; 实验结果: $\circ$ 为文献[16]; $\square$ 为文献[17]; $\bullet$ 为文献[18]

4 讨论与结论

使用渐近两态原子轨道展开方法在中高能区能给出较好结果的原因是因为它的高能近似解就是 B1B 近似, 这一点正是我们提出该方法时所预期的, 因为 B1B 近似在该能区能给出与实验一致的结果, 那么我们的方法也能给出同样的结果是合理的; 在中低能区, 一般 B1B 方法给出的结果与实验差别很大, 例如, 在本文研究的这种非共振碰撞系统(即非对称碰撞)中, B1B 方法给不出实验上出现的极大值, 甚至在该能区给出的结果比实验高出很多, 而我们的方法不仅能给出极大值, 而且该极大值的位置和大小都与实验符合较好. 结合文献[4]对单电子碰撞体系得到的结果, 说明我们的方法与 B1B 方法相比不仅在处理单电子碰撞体系, 而且对双电子碰撞体系的电子俘获在更宽的能区内都能得到很好的结果.

在文献[4]中我们讨论了渐近两态原子轨道展开方法与传统两态原子轨道展开方法的区别, 这里我们着重指出一级微扰理论在中低能区与实验不符的原因. 通过我们引入的渐近两态原子轨道方法以及文献[6, 7]建立的各自不同的两态展开方法, 说明一级微扰理

论与相应的两态展开方法有密切的关系, 一级微扰理论一般都是相应的两态轨道展开的高能近似解, 只不过在展开过程中取不同的波函数或势函数. 这样我们由一级微扰理论与两态展开的关系上可以很清楚地看到一级微扰理论在中低能区给不出较好结果的原因; 与高能碰撞相比, 在中低能区由于入射离子速度变慢, 引起初态波函数与末态波函数重叠的时间较长, 导致(5)式的重叠积分有较大的值, 此时若再将 s_{ip} 和 s_{pi} 忽略就不合理了, 同时这种波函数的长时间重叠还引起在两离子接近的区域内(即 $t \approx 0$ 附近区域内)展开系数 c_i 和 c_p 几乎有相同的数量级, c_i 并不在任何时候都趋近 1, 这两种在中低能碰撞中出现的效应正好是 BIB 近似以及其他一级微扰理论(如 CDW 近似, eikonal 近似等)没有加以考虑而忽略的. 在高能区, 这些效应的忽略是合理的, 但在中低能区将会导致不合理的结果. 当然随着入射离子能量继续降低(即低能区), 原子轨道的特征逐渐消失, 而分子效应逐渐明显, 这时用分子图象来描述电荷转移过程更合适^[19]. 此外, 渐近两态原子轨道展开方法不象两态连续扭曲波展开和两态程函扭曲波展开方法那样选用复杂的波函数, 而是仍然使用未微扰的原子波函数作为基函数, 这样在解耦合方程(3)时, 使计算双中心矩阵元的工作量大为减少, 也是我们能够用该方法既可以研究对称碰撞体系也可以研究非对称碰撞体系的电荷转移问题. 还可以进一步考虑结合模型势的方法, 将渐近原子轨道展开法推广用来研究比双电子更复杂的多电子碰撞体系的电荷转移过程.

总之, 通过本文的计算和分析我们可以得出这样一个结论, 一级微扰理论在中低能区给不出可靠的电子俘获截面结果, 但我们能够建立与之相对应的两态波函数展开方法, 使其在高能区的结果与相应的一级微扰理论结果一致, 而在中低能区则能改善一级微扰理论的结果, 从而使两态波函数展开方法能够在较宽的能量范围内得到与实验一致的结果, 不过选用两态波函数展开时要考虑到它的高能近似解所对应的一级微扰理论是否在高能区能得到与实验一致的结果, 这样可以改变传统的两态原子轨道展开方法在中高能区给出的结果过高的问题.

- [1] D. P. Dewangan and J. Eichler, *Phys. Rep.*, **247**(1994), 62.
- [2] M. Kimura and N. F. Lane, *Adv. At. Mol. Opt. Phys.*, **26**(1989), 80.
- [3] T. G. Winter, *Phys. Rev.*, **A35**(1987), 3799.
- [4] 周效信、董晨钟、张现周等, 原子与分子物理学报(待发表) [Zhou Xiao-xin, Dong Chen-zhong and Zhang Xian-zhou, *J. At. Mol. Phys.*, to be published (in Chinese)].
- [5] C. D. Lin, S. C. Soong and L. N. Tunnell, *Phys. Rev.*, **A17**(1978), 1646.
- [6] D. C. F. Crothers and J. F. McCann, *J. Phys.*, **B18**(1985), 2907.
- [7] 千文甲, 原子与分子物理学报, **2**(1985), 55 [Qian Wen-jia, *J. At. Mol. Phys.*, **2**(1985), 55 (in Chinese)].
- [8] B. H. Bransden and L. T. Sin Fai Lam, *Proc. Phys. Soc.*, **87**(1966), 653.
- [9] R. K. Ruang, *J. Phys.*, **B24**(1991), 1645.
- [10] R. McCarroll, *Proc. Roy. Soc.*, **A264**(1961), 547.
- [11] D. Belkic, *Phys. Scr.*, **T28**(1989), 106.
- [12] L. M. Welsh, *et al.*, *Phys. Rev.*, **158**(1967), 85.
- [13] L. H. Tobuuren, M. Y. Nakai and R. A. Langley, *Phys. Rev.*, **171**(1968), 114.
- [14] C. F. Barnett and H. K. Reynolds, *Phys. Rev.*, **109**(1958), 355.
- [15] D. P. Dewangan and J. Eichler, *Nucl. Instrum. Methods.*, **B23**(1987), 160.

- [16] R. D. DuBois, *Phys. Rev.*, **A36**(1987), 2585.
[17] J. E. Bayfield and G. A. Khayrallah, *Phys. Rev.*, **A11**(1975), 920.
[18] P. Hvelplund *et al.*, *J. Phys.*, **B19**(1976), 491.
[19] 刘 强、王建中、徐向东、陈学俊, 物理学报, **40**(1991), 1590 [Liu Qiang, Wang Jian-zhong, Xu Xiang-dong and Chen Xue-jun, *Acta Physica Sinica*, **40**(1991), 1590(in Chinese)].

CHARGE TRANSFER FOR PROTON AND α PARTICLE COLLIDING WITH HELIUM ATOM AT INTERMEDIATE ENERGIES*

ZHOU XIAO-XIN^{a)b} LI BAI-WEN^{a)}

^{a)} (State Key Laboratory of Magnetic Resonance and Atomic and Molecular Physics, Wuhan Institute
of Physics and Mathematics, Chinese Academy of Sciences, Wuhan 430071)

^{b)} (Department of Physics, Northwest Normal University, Lanzhou 730070)

(Received 3 November 1997; revised manuscript received 19 October 1998)

ABSTRACT

Charge transfer processes for double-electron colliding systems $H^+ + He$ and $He^{2+} + He$ have been studied by using the asymptotic two-state atomic expansion method developed recently. Our results for the cross sections of electron capture are in good agreement with those given by the boundary-corrected first-order Born (B1B) approximation and experimental data in high-intermediate energies, and in the low-intermediate energies the present results are better than those obtained by the B1B approximation. Finally, we point out that the reason that capture cross sections predicted by first-order perturbation theory are in poor agreement with experimental data.

PACC: 3470

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 19474059).