

# 氢离子与里德伯原子碰撞中的电荷转移过程\*

赵益清<sup>1)†</sup> 刘玲<sup>2)</sup> 刘春雷<sup>2)</sup> 薛平<sup>1)</sup> 王建国<sup>2)</sup>

1) 清华大学物理系原子分子纳米科学教育部重点实验室, 北京 100084)

2) 北京应用物理与计算数学研究所计算物理实验室, 北京 100088)

(2008 年 3 月 3 日收到, 2008 年 4 月 7 日收到修改稿)

应用双中心原子轨道强耦合方法研究了  $H^+$  与里德伯态原子  $L(5d)$  碰撞的电荷转移过程, 计算了电子转移到氢原子各个  $n, l$  壳层 (这里  $n$  为主量子数,  $l$  为角量子数) 的态选择截面. 结果发现, 电荷转移的末态主要分布在与初态电子能量  $5d$  接近的  $n=4-7$  能级, 该分布随碰撞能量的变化不大, 但俘获末态的  $l$  分布对入射离子能量很敏感. 在  $1\text{ keV}$  左右的低能时主要分布在高  $l$  的末态, 随着碰撞能量增加峰值逐渐向低  $l$  方向移动, 并在  $l=1$  左右达到峰值.

关键词: 电子俘获过程, 双中心原子轨道强耦合方法, 态选择截面

PACC: 5220H, 3400, 0365N

## 1. 引 言

重粒子碰撞过程是指原子、离子、分子间发生的各种相互作用过程, 包括弹性过程和非弹性过程, 如电荷转移、碰撞激发和电离等. 它一直是原子分子物理研究的热点问题之一, 主要是因为涉及复杂的多中心问题, 特别是多体关联效应的理论处理仍然很不完备. 在有关带电粒子的重粒子碰撞过程中, 电荷转移是中低能区最重要的非弹性反应过程, 该过程在许多实际问题中扮演着重要角色. 如在托克马克中, 质子与氢分子或碳氢化合物的电荷转移过程对偏滤器区域等离子体的反常冷却起着至关重要的作用<sup>[1,2]</sup>, 它也是中性束注入加热和利用光谱方法诊断等离子体裸核杂质的物理基础, 同时也是未来聚变中产生的高能粒子输运和加热的主要机理. 在天文环境中, 它是宇宙线光电离产生的多电荷态离子最重要的复合机理<sup>[3]</sup>. 最近, 极端紫外和 X 射线卫星 Extreme Ultraviolet Explorer (EUE) 和 Chandra X-ray Observatory (CXO) 的观测发现, 从很多彗星如 Hale-Bopp<sup>[4]</sup> 和 Hyakutake<sup>[5]</sup> 及行星大气中可发射极端紫外和 X 射线. 实验观测和理论研究表明, 这些极端紫外和 X 射线来源于高电荷态的太阳风粒子 (如  $O^{9+}$ ,

$C^{9+}$ ,  $Ne^{9+}$ ,  $Si^{9+}$ ) 与彗星中性粒子 (包括  $H_2O$ ,  $CO$ ,  $CO_2$  和它们的解离产物  $H$ ,  $H_2$ ,  $O$ ,  $OH$ ,  $C$ ) 的碰撞电荷转移过程<sup>[4]</sup>.

近年来, 离子与里德伯态原子碰撞的过程获得了越来越多的关注. 这是因为里德伯原子广泛存在于天体环境中, 离子与里德伯原子碰撞过程的研究可以为天体物理提供许多有用参数, 电荷转移后发出的特征谱线也是诊断物质丰度的一个重要手段. 另外, 在最近的磁光阱实验中可以产生超冷的等离子体与冷里德伯态原子, 而离子与里德伯态原子碰撞过程, 对冷等离子体和里德伯态原子的时空演化起着至关重要的作用<sup>[6,7]</sup>, 实验观察到, 里德伯原子的主量子数、角量子数在里德伯原子的演化中都有着决定性的影响<sup>[7]</sup>.

在理论研究上, 里德伯原子自身的特点也使之成为研究碰撞过程的理想系统. 一方面由于里德伯原子的半径与主量子数  $n$  平方成正比, 碰撞截面比低激发态大很多, 另一方面, 由于活跃电子离原子实很远, 离子与里德伯原子碰撞过程是一个接近经典的三体系统, 各种物理机理可以得到充分展示. 由于里德伯原子的主量子数很高, 量子力学很难处理. 目前为止, 离子与里德伯原子的碰撞过程都是用经典

\* 国家自然科学基金 (批准号: 10676014, 10574018, 10574020 和 90508001), 国家 863 高技术专业委员会惯性约束聚变主题和教育部重点实验室项目 (批准号: 306020) 资助的课题.

† E-mail: yq-zhao@mails.tsinghua.edu.cn

力学的方法进行模拟. 最近的实验结果与经典蒙特卡罗法 (CTMC) 得到的主量子数分布也基本是符合的<sup>[8]</sup>. 由 CTMC 方法所得到的磁量子数分布计算出的偏振度与单电子俘获偏振光谱所探测到的结果也是符合的<sup>[9,10]</sup>. 然而, 关于俘获过程的角量子数分布, 经典力学的结果并没有得到实验的检验, 里德伯原子的碰撞过程又是研究量子力学与经典力学对应的一个很好的体系, 所以, 尝试使用量子力学的方法对离子与里德伯原子碰撞过程进行研究是一项很有意义的工作.

我们曾用双中心原子轨道强耦合 (two-center atomic-orbital close-coupling, TC-AOCC 或 AOCC) 方法研究了离子与基态原子<sup>[11]</sup>或负离子<sup>[12,13]</sup>的碰撞电荷转移过程, 得到了与实验很好符合的结果. 本文工作中, 我们扩展该方法研究  $H^+$  离子与  $Li(5d)$  里德伯态原子碰撞过程中的单电子转移过程



得到了入射离子能量在 0.5—50 keV 区间电子俘获到氢原子各个  $n, l$  壳层的态选择截面, 讨论了电子在氢原子  $n, l$  壳层上布居的分布情况, 并与 CTMC 方法的计算结果进行了对比, 检验了 AOCC 方法计算里德伯原子碰撞过程中的可行性. 本文第 2 节简单介绍 AOCC 的基本理论, 第 3 节给出计算结果和讨论. 最后是一个简单的结论.

## 2. 理论方法

双中心原子轨道方法是由 Bates 和 McCarroll<sup>[14]</sup> 于 1958 年提出, 经过其他人的不断完善<sup>[15-18]</sup>, 现在已经被普遍应用于离子-原子碰撞问题的研究中. 在半经典的碰撞参数方法的框架下, 我们把原子轨道按照 even-tempered Slater-type-orbital (ET-STO)<sup>[16,17]</sup> 基展开:

$$\begin{aligned} \phi_{nlm} &= \sum_k C_{nk} N(\zeta_k) e^{-\zeta_k r} r^l Y_{lm}(\hat{r}), \\ \xi_k &= \alpha \beta^k, \quad k = 1, 2, \dots, N, \end{aligned} \quad (2)$$

其中  $N(\zeta_k)$  是 ET-STO 基的归一化系数,  $\alpha$  和  $\beta$  是变分参数,  $C_{nk}$  是展开系数, ET-STO 基相比传统的 Slater 基有着一系列的优势. 第一, 它只有两个参数  $\alpha$  和  $\beta$ , 因此可以方便的利用实验或理论得到的能量来优化参数选择. 第二, 传统的 Slater 基是一个局部的基组, 不能描述远区的波函数, 而对 ET-STO 基可以通过大的基组数目选择可以很容易达到收敛.

当我们选择  $\alpha$  很小的弥散基时, 可以使波函数扩散到远区, 能够很好地描述里德伯原子的行为.

系统总波函数在双中心展开下, 可以写成如下形式:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t) &= \sum_i a_i(t) \phi_i^A(\mathbf{r}, t) \\ &+ \sum_j b_j(t) \phi_j^B(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (3)$$

其中,  $\{\phi_i^A(\mathbf{r}, t)\}$  和  $\{\phi_j^B(\mathbf{r}, t)\}$  分别代表  $A$  中心和  $B$  中心的电子束缚态和赝连续态. 我们列出体系的薛定谔方程

$$\left( H - i \frac{\partial}{\partial t} \right) \Psi(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (4)$$

其中  $H = -\frac{1}{2} \nabla^2 + V_A(r_A) + V_B(r_B)$ . 这里  $V_{A,B}(r_{A,B})$  分别表示发生转移的活跃电子与入射粒子以及靶之间的相互作用. 把总波函数代入薛定谔方程, 可得关于散射振幅的耦合方程

$$i(\dot{A} + S\dot{B}) = HA + KB, \quad (5)$$

$$i(\dot{B} + S^*\dot{A}) = \bar{K}A + \bar{H}B, \quad (6)$$

其中  $A$  和  $B$  表示振幅  $a_i (i=1, 2, \dots, N_A)$  和  $b_j (j=1, 2, \dots, N_B)$  的矢量. 重叠积分  $S$ , 直接耦合矩阵元  $H$  和  $\bar{H}$ , 电子交换矩阵元  $K$  和  $\bar{K}$  具体表示形式如下:

$$S_{kj} = \int w_k^*(\mathbf{r}_B, t) u_j(\mathbf{r}_A, t) \exp(i\mathbf{v} \cdot \mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (7)$$

$$H_{kk} = \int w_k^*(\mathbf{r}_B, t) w_k(\mathbf{r}_B, t) V_A(\mathbf{r}_A) d\mathbf{r}_B, \quad (8)$$

$$\bar{H}_{j'j} = \int u_{j'}^*(\mathbf{r}_A, t) u_j(\mathbf{r}_A, t) V_B(\mathbf{r}_B) d\mathbf{r}_A, \quad (9)$$

$$\begin{aligned} K_{bj} &= \int w_k^*(\mathbf{r}_B, t) u_j(\mathbf{r}_A, t) \\ &\times \exp(i\mathbf{v} \cdot \mathbf{r}) V_B(\mathbf{r}_B) d\mathbf{r}, \end{aligned} \quad (10)$$

$$\begin{aligned} \bar{K}_{kj} &= \int w_k(\mathbf{r}_B, t) u_j^*(\mathbf{r}_A, t) \\ &\times \exp(-i\mathbf{v} \cdot \mathbf{r}) V_A(\mathbf{r}_A) d\mathbf{r}, \end{aligned} \quad (11)$$

其中  $j, j' = 1, 2, \dots, N_A, k, k' = 1, 2, \dots, N_B$ . 方程满足如下的初始条件:

$$a_i(-\infty) = \delta_{1i}, b_j(-\infty) = 0. \quad (12)$$

求解方程后, 可得电荷转移的态选择截面

$$\sigma_{exc, i} = 2\pi \int_0^\infty |a_i(-\infty)|^2 b db. \quad (13)$$

## 3. 计算结果和讨论

### 3.1. 能级和波函数

电子与入射  $H^+$  离子间的作用势  $V_A$  用库仑势

表示,电子与靶粒子间的作用势  $V_B$  用模型势表示. 模型势的具体表示形式如下<sup>[17]</sup>:

$$V(r) = -Z_0/r + (Z_1 + Z_2 r) \times \exp(-Z_3 r) r, \quad (14)$$

其中,  $Z_0 = 1, Z_1 = -2, Z_2 = -2.92, Z_3 = 2.92$ . (14) 式中系数来源于文献 [19]. 利用 (2) 式中的 ET-STO 基, 采用变分方法, 我们可以得到变分参数  $\alpha$  和  $\beta$ . 表 1 和表 2 中是对氢原子我们计算得到的变分参数和能级. 可以看到, 当主量子数  $n \leq 7$  时, 变分计算的能与精确值很好符合, 主量子数再高, 低  $l$  能级

有一定的差距.

表 1 氢原子变分参数

	$\alpha$	$\beta$	$k$
s 态	0.011	1.454	20
p 态	0.021	1.354	14
d 态	0.023	1.297	12
f 态	0.033	1.245	10
g 态	0.041	1.224	10
h 态	0.053	1.207	10

表 2 氢原子能级计算值与精确值的比较(能级为原子单位 a. u. )

$n$	精确值	s	p	d	f	g	h
1	-0.5	-0.5					
2	-0.125	-0.125	-0.125				
3	-0.05556	-0.05556	-0.05556	-0.05556			
4	-0.03125	-0.03125	-0.03125	-0.03125	-0.03125		
5	-0.02	-0.01998	-0.02	-0.02	-0.02	-0.02	
6	-0.01389	-0.01381	-0.01389	-0.01389	-0.01389	-0.01389	-0.01389
7	-0.0102	-0.01005	-0.01019	-0.0102	-0.0102	-0.0102	-0.0102
8	-0.00781	-0.00743	-0.00777	-0.00781	-0.00781	-0.00781	-0.00781
9	-0.00617	-0.0365	-0.00595	-0.00614	-0.00617	-0.00617	-0.00617

表 3 锂原子变分参数

	$\alpha$	$\beta$	$k$
s 态	0.0072	1.402	12
p 态	0.0084	1.336	12
d 态	0.0175	1.295	12

表 3 和表 4 中, 我们分别给出锂原子外层电子的变分系数和计算的能级. 对比 NIST 实验数据, 可

以看到我们的计算值与实验很好符合.

因为里德伯原子的半径很大, 所以仅仅考察能级值不能保证其在远区的行为, 我们画出了氢原子的波函数图像, 与氢原子非相对论精确解析解进行了对比, 见图 1. 我们发现不论在近区还是在远区, 我们的变分波函数与精确值都符合得非常好. 因此, 我们可以得出结论: 由 ET-STO 基计算的波函数是可信的.

表 4 锂原子能级计算值与实验值的比较(能级为原子单位 a. u. )

	实验值 <sup>a)</sup>	计算值		实验值 <sup>a)</sup>	计算值		实验值 <sup>a)</sup>	计算值
2s	-0.19814	-0.15827	2p	-0.13024	-0.12483			
3s	-0.07418	-0.0666	3p	-0.05724	-0.05608	3d	-0.05563	-0.05559
4s	-0.03862	-0.03638	4p	-0.03197	-0.03174	4d	-0.03129	-0.03127
5s	-0.02364	-0.02282	5p	-0.02037	-0.02037	5d	-0.02001	-0.02001
6s	-0.01594	-0.01555	6p	-0.01411	-0.01414	6d	-0.0139	-0.0139
7s	-0.01148	-0.01119	7p	-0.01034	-0.01034	7d	-0.01021	-0.01021
8s	-0.00866	-0.0083	8p	-0.00791	-0.00783	8d	-0.00782	-0.00781

a) NIST 数据表<sup>[20]</sup>.

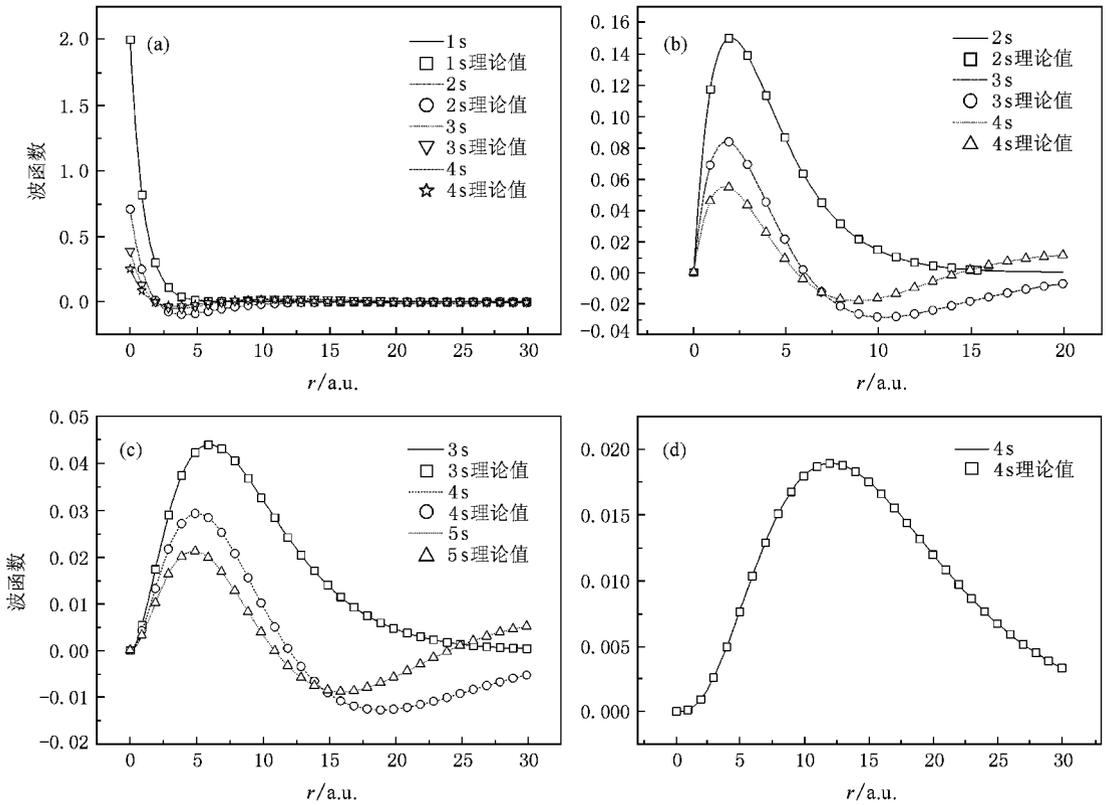


图1 氢原子波函数的计算值和精确理论值的比较 (a)  $ns$  态波函数计算值与理论值 (b)  $np$  态波函数计算值与理论值; (c)  $nd$  态波函数计算值与理论值 (d)  $nf$  态波函数计算值与理论值(计算值用实线表示,氢原子波函数的精确理论值用散点表示)

### 3.2. 直接和交换耦合矩阵元

在波函数的展开系数确定后,我们计算了重叠积分  $S$ ,直接耦合矩阵元  $H$  和  $\bar{H}$ ,电子交换矩阵元  $K$  和  $\bar{K}$ .在图2中,我们画出了随核间距  $R$  变化的直接和交换矩阵元.图2(a)中的直接矩阵元考虑的是氢原子中电子的跃迁过程.在我们的计算中,包含了

电子转移因子(electron transformation factor,ETF)的贡献,交换矩阵元与入射粒子能量有关<sup>[16-18]</sup>.图2(b)为入射离子能量为 1 keV 时的矩阵元.由于发生转移的电子处于入射离子和靶离子的双中心场中,耦合矩阵元(或反应过程)与电子态的磁量子数  $m$  有关.图中我们给出了不同  $nlm$  态之间的耦合矩阵元,可以看到初末态  $m$  相同的态之间的相互作用

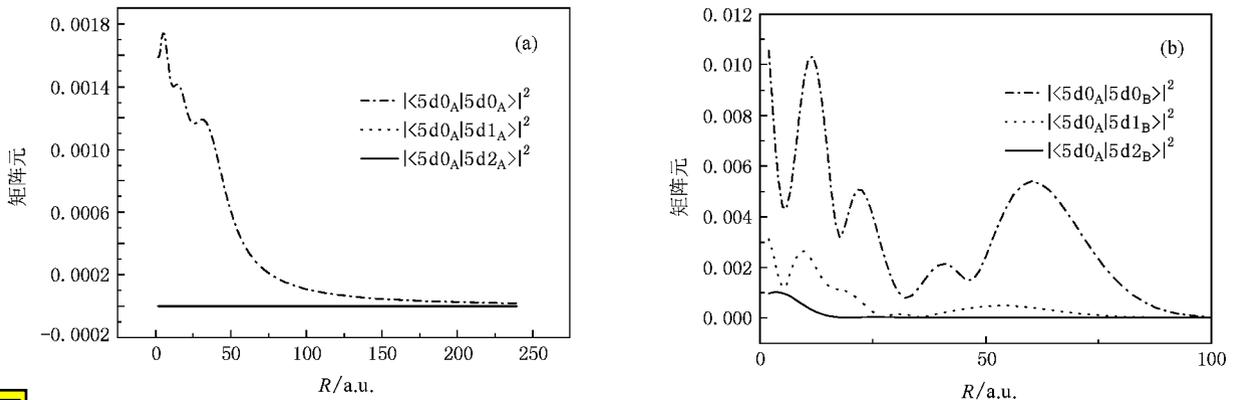


图2 随核间距  $R$  变化的直接和交换矩阵元 (a)入射粒子 H 原子 5d 态不同磁量子数之间的直接跃迁矩阵元 (b)入射粒子从 5d 态到靶粒子 5d 态不同磁量子数的交换矩阵元(不同线形的曲线代表氢原子的 5d 态磁量子数  $|m|=0,1,2$ )

强. 由于我们计算的是和里德伯态相关的过程, 电子波函数扩展到很远的区域, 如图 2 中, 矩阵元延伸到了近 100 个波尔半径的距离, 这与我们平时计算的有关基态电荷转移的过程是不同的. 同时可以看到, 尽管矩阵元扩展很远, 并有多峰, 但变化基本光滑, 说明我们的计算是可靠的.

### 3.3. 电荷转移截面

对于靶为里德伯态原子的电荷转移过程, 往往要涉及大量的反应通道. 但在 AOCC 方法的散射计算中, 如果耦合方程的数目太多, 会导致计算无法进行下去, 然而又需要有足够的态以保证结果的收敛性. 本文工作中, 我们并不追求计算的绝对精度, 主要研究物理规律. 因此, 在靶锂原子上我们只放了一个电子初态 5d, 在俘获末通道上氢原子放了较多的态. 考虑到俘获到氢原子  $n = 5$  是一个接近共振的态, 我们在计算中加入了  $n = 1-8$  的束缚态. 利用上文得到的矩阵元, 我们计算了入射粒子能量为 0.5—10 keV 时  $H^+ - Li(5d)$  碰撞的单电荷转移过程, 给出了电子俘获到氢原子不同次壳层上的态选择截面.

在本文计算的入射粒子能量为 0.5—50 keV 的能区, 电子主要俘获到氢原子主量子数  $n = 4-7$  的能态, 到其他能态的贡献小于总截面的 10%. 图 3 中我们给出了电子转移到氢原子主量子数  $n = 4-7$  的态选择截面. 可以看出, 随着能量的升高, 转移到各个态的截面都迅速下降. 实际上, 虽然我们没有继续计算更低的能区, 这些态选择截面在 1 keV 左右会达到极大值, 因为锂原子 5d 电子的平均运动速度约为 0.2 a.u., 该速度与能量为 1 keV 的入射粒子速度相等. 这是速度匹配的结果. 对比不同  $n$  的态选择截面, 我们发现在低能时, 主要俘获到较高的量子数; 高能时, 俘获过程以俘获到较低的量子数为主. 由于这些态的能级差不大, 该规律并不是特别明显.

图 4 和图 5 中我们给出了电子俘获到不同的主量子数  $n$  时, 随角量子数  $l$  变化的布居(截面)分布. 图中采用了以  $l$  中截面最大值归一的相对值. 可以看到, 低能时, 对不同的末态主量子数, 俘获电子角量子数分布大体都随着角量子数增加而增加; 入射粒子能量增高时, 分布向低角动量的方向逐渐偏移, 并在增加到某个极限后, 分布变成以  $l = 1$  为极大值的分布. 令人吃惊的是该结果与文献 [21] 及天体物理中应用<sup>[22, 23]</sup>的公式完全不一样. Janev 等<sup>[21]</sup>根

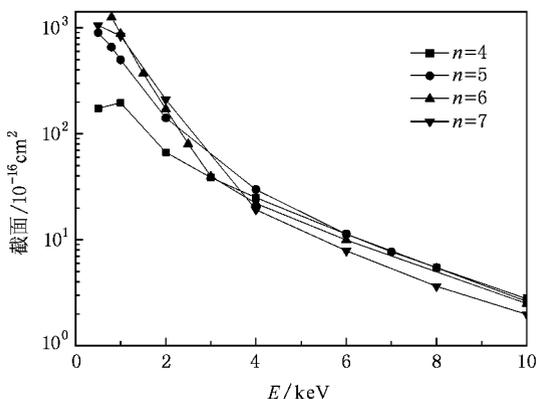


图 3  $H^+$  和  $Li(5d)$  碰撞中俘获到  $H(n)$  的态选择截面

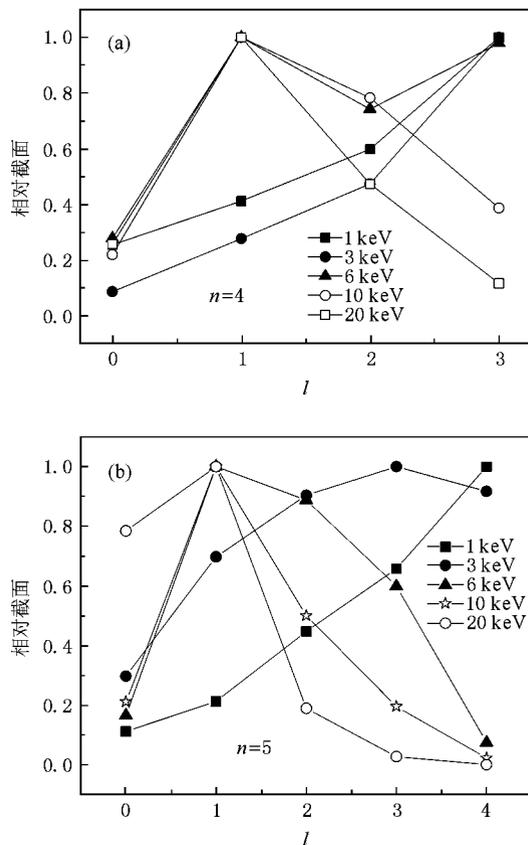


图 4  $H^+$  和  $Li(5d)$  碰撞中不同入射能量下单电子俘获到的不同角量子数截面分布 (a)  $n = 4$  (b)  $n = 5$

据多通道 Landau-Zeiger 方法估计认为<sup>[21]</sup>: 由于转动耦合效应, 在低能区  $l$  布居接近二项式分布

$$W_{nl} = (2l + 1) \frac{[(n - 1)!]}{(n + l)(n - 1 - l)!}, \quad (15)$$

在高能区接近统计分布

$$W_{nl}^{st} = (2l + 1)n^2. \quad (16)$$

我们的结果刚好相反, 低能区接近统计分布, 高能区

接近二项式分布. Janev 等人的工作主要考虑低能非绝热效应引起的跃迁, 具有可避免交叉点的反应通道. 而我们目前考虑的反应过程基本都没有可避免交叉点, 是较高能区的碰撞过程. 我们的结果与 Olson 等人<sup>[8]</sup>用 CTMC 方法计算的结论是一致的. 具体原因还有待深入研究.

进行了比较, 可以看到角动量分布的趋势是比较一致的, 都有一个角动量分布的最大位置, 角量子数位置偏离最大值后逐渐变小, 碰撞能量增加, 极大值位置向低角量子数方向移动. 然而在最大截面的角量子数的位置上有一些区别, 这可能主要来源于量子与经典计算的区别, 需要进一步考察.

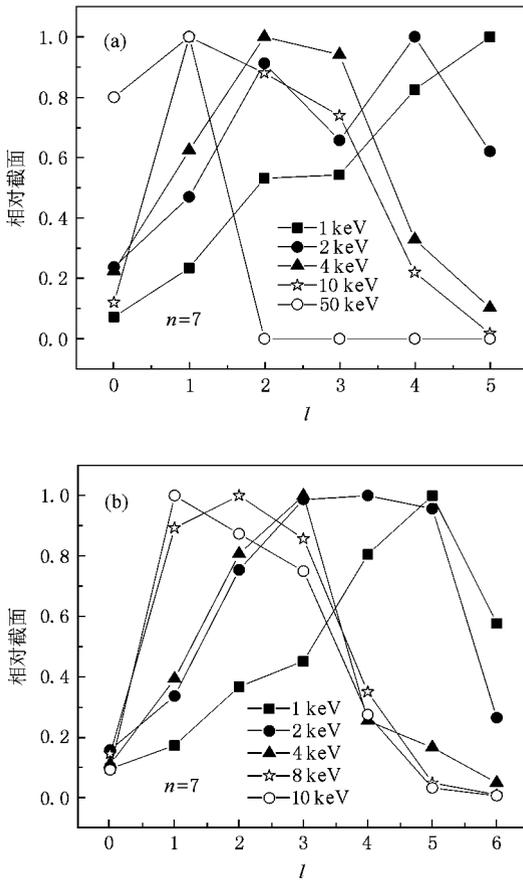


图 5  $H^+$  和  $Lx(5d)$  碰撞中不同入射能量下单电子俘获到的角量子数截面分布 (a)  $n=6$  (b)  $n=7$

为了进一步检验我们的计算结果, 我们也进行了 CTMC 计算, 计算方法可以见我们以前的工作<sup>[24, 25]</sup>, 这里不再赘述. 在图 6 中, 我们将 AOCC 计算的俘获电子角动量分布与 CTMC 方法得到的结果

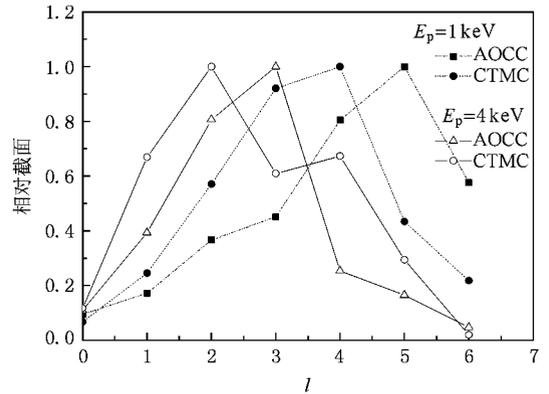


图 6 单电子俘获到  $n=7$  的不同角量子数截面分布的 AOCC 和 CTMC 计算结果的比较

## 4. 结 论

离子和里德伯态原子碰撞过程的研究还是一个比较新的问题, 以往都是采用经典力学的 (CTMC) 方法进行计算. 我们采用双中心 AOCC 方法对单电荷转移过程进行了一定的尝试计算, 给出了俘获电子截面的  $n, l$  量子数分布, 并与 CTMC 的结果进行了比较, 获得了比较可信的结果, 证明了将原子轨道的方法引入离子与里德伯原子碰撞的计算是可行的. 但还有很多问题有待进一步研究, 特别是关于俘获电子的角量子数分布问题, 它直接决定电荷转移发射谱的情况<sup>[4, 5, 23]</sup>, 而目前又是不清楚的问题, 一般用一些解析或标度方法计算<sup>[4, 5, 22, 23]</sup>. 通过本文的工作, 我们相信 AOCC 方法将是研究这一问题的有力工具, 可以得到一些定量可信的结果.

[1] Janev R K 1995 *Atomic and Molecular Processes in Fusion Edge Plasma* (New York: Plenum Press) p397  
 [2] Janev R K, Kato T, Wang J G 2000 *Physics of Plasma* **7** 4364  
 [3] Sternberg A, Yan M, Dalgarno A, in *Molecules in astrophysics: probes and processes*, IAU symposium 178, ed. van Dishoeck E F (IAU, 1996) p141

[4] Lisse C M, Dennerl K, Englhauser J, Harden M, Marshall F E, Mumma M J, Petre R, Pye J P, Ricketts M J, Schmitt J, Trümper J, West R G 1996 *Science* **274** 205  
 [5] Krasnopolsky V A, Mumma M J 2001 *Astrophys. J.* **549** 629  
 [6] Robicheaux F, Hanson J D 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 055002  
 [7] Oliveira A L, Mancini M W, Bagnato V S, Marcassa L G 2003 *Phys.*

- Rev. Lett.* **90** 143002
- [ 8 ] Olson R E 1981 *Phys. Rev. A* **24** 1726
- [ 9 ] Jacquet E ,Kucal H ,Bazin V ,Boduch P ,Chantepi M ,Cremer G ,Laulhe C ,Lecler D 2000 *Phys. Rev. A* **62** 022712
- [ 10 ] Bazin V ,Boduch P ,Chantepie M ,Jacquet E ,Kucal H ,Lecler D ,Pascale J 2002 *Phys. Rev. A* **65** 032712
- [ 11 ] Liu L ,Wang J G ,Janev R K 2007 *Phys. Rev. A* **77** 023709
- [ 12 ] Liu L ,Wang J G 2007 *Chin. Phys. Lett.* **24** 3115
- [ 13 ] Liu L ,Wang J G ,submitted to *J. Phys. B*
- [ 14 ] Bates D R ,McCarroll R 1958 *Proc. R. Soc. A* **245** 175
- [ 15 ] Fritsch W ,Lin C D 1991 *Phys. Rep.* **202** 1
- [ 16 ] Kuang Jiyun ,Lin C D 1996 *J. Phys. B* **29** 5443
- [ 17 ] Jiyun Kuang ,C D Lin 1997 *J. Phys. B* **30** 101
- [ 18 ] Bransden B H ,McDowell R 1992 *Charge Exchange and Theory of Ion-Atom Collisions* ,The International Series of Monographs on Physics Vol. 82 ( Clarendon ,Oxford )
- [ 19 ] Ermolaev A M 1984 *J. Phys. B* **17** 1069
- [ 20 ] NIST 数据表 ,见 [http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/levels\\_form.html](http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/levels_form.html)
- [ 21 ] Janev R K ,Belic D S ,Bransden B H 1983 *Phys. Rev. A* **28** 1293
- [ 22 ] Ali R 2002 *Bull. Am. Phys. Soc.* **47** H5.007
- [ 23 ] Krasnopolsky V ,Greenwood J B ,Stancil P C 2004 *Space Science Reviews* **113** 271
- [ 24 ] Liu C L ,He B ,Ning Y ,Yan J ,Wang J G 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 3206 ( in Chinese ) [ 刘春雷、何 斌、宁 焯、颜 君、王建国 2005 物理学报 **54** 3206 ]
- [ 25 ] Liu C L ,He B ,Ning Y ,Yan J ,Wang J G 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 327 ( in Chinese ) [ 刘春雷、何 斌、宁 焯、颜 君、王建国 2007 物理学报 **56** 327 ]

## Atom-orbital close-coupling calculation of charge exchange processes in collisions of $H^+$ with $Li(5d)^*$

Zhao Yi-Qing<sup>1)†</sup> Liu Ling<sup>2)</sup> Liu Chun-Lei<sup>2)</sup> Xue Ping<sup>1)</sup> Wang Jian-Guo<sup>2)</sup>

<sup>1)</sup> Department of Physics and Key Laboratory for Atomic and Molecular Nanosciences ,Tsinghua University ,Beijing 100084 ,China )

<sup>2)</sup> The Key Laboratory of Computational Physics ,Institute of Applied Physics and Computational Mathematics ,Beijing 100088 ,China )

( Received 3 March 2008 ; revised manuscript received 7 April 2008 )

### Abstract

The charge exchange process in collisions of  $H^+$  with  $Li(5d)$  is investigated using the two-center atomic-orbital close-coupling method. The state-selective cross-sections are obtained in the energy range of 0.5—10 keV. It is found that the processes for capture to  $n = 4—7$  are the dominant reactions ,and the  $n$ -distribution of state-selective cross-sections is weakly dependent on the collision energy. But the  $l$ -distribution of state-selective cross-sections strongly depends on the collision energy. For the lower collision energy around 1 keV ,the  $l$ -distribution increases with increasing  $l$ . However ,the  $l$ -distribution moves to the lower quantum number as the collision energy increases ,and the maximum value appears around  $l = 1$ .

**Keywords :** charge exchange , atomic-orbital close-coupling method , state-selective cross-section

**PACC :** 5220H , 3400 , 0365N

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China ( Grant Nos. 10676014 ,10574018 ,10574020 , 90508001 ) and the National High Technology Research and Development Program for Intertial Confinement Fusion of China , and the Laboratory of Atom and Molecular Nanoscience Ministry of Education of China ( Grant No. 306020 ).

† E-mail : yq-zhao@mails.tsinghua.edu.cn