

辐射复合截面的扭曲波计算^y

夏海宁, 陈重阳, 齐静波, 王炎森

(复旦大学现代物理研究所, 上海 200433)

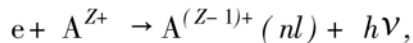
摘要: 采用非相对论量子计算方法计算了电子与高电荷态离子碰撞的辐射复合截面, 其中连续态电子的波函数是由扭曲波近似方法(DWBE)获得. 计算了低能电子与中、低核电荷的高电荷态离子(类 H 和类 Li)的辐射复合截面, 并与采用有效电荷的库仑波计算结果进行了比较, 说明了扭曲波计算的重要性.

关键词: 辐射复合截面; 高电荷态离子; 库仑波; 扭曲波

中图分类号: O413.1; O562.5 文献标识码: A

1 引言

电子俘获是等离子体物理和天体物理中的重要基本过程. 一般讲有两种模式: 辐射复合(RR)和共振激发双电子复合(DR). RR 是指自由电子被离子(带总电荷 Z)俘获到一个束缚态能级 nl 并放出一个光子的过程:



DR 过程是一个自由电子被离子俘获, 同时离子中一个电子被激发, 然后放出光子退激:



通常情况下 DR 过程占优, 且它对入射能量有选择, 发射光子的能量是分立的. 对于低能和高电荷态(即高 Z)离子, RR 过程变得重要^[1], 发射的光子能量是连续的. 在近代开展高电荷态离子实验的电子束离子阱(EBIT)装置中, 所产生的离子电荷态分布与 RR 过程有密切联系, 理论研究中必须包括 RR 过程的贡献^[2].

实验中很难直接测量辐射复合截面 σ_{RR} 的绝对值, 一般测量的是辐射复合的速率系数 $\langle v\sigma \rangle$ ^[3-5]. 理论计算一般采用非相对论量子力学微扰法计算. 早期有计算裸离子 σ_{RR} 的解析公式 Bethe-Salpeter 公式^[6]. 有采用有效电荷的库仑波计算, 即在偶极辐射的矩阵元中的连续态电子波函数用相当于点电荷的库仑波; 对于非裸核引入有效电荷 Z_{eff} 作为点电

荷^[1,7,8]. 实际计算中 Z_{eff} 较难确定, 一般作为可调参数. 在文献[9]中还用相对论量子力学计算了不同核电荷的类 H 离子在很宽的入射电子能量(1— 10^6 eV)下的 σ_{RR} , 并与非相对论计算作了比较, 指出在入射电子能量或较高核电荷数的情况下应采用相对论计算. 还有参数化方法计算^[10], 即对较严格计算的结果用经验公式进行拟合, 这种经验公式在实际应用中还是很有用的.

有必要指出, 正如文献[8]中所强调的, 对非裸核用有效电荷的库仑波计算对于离子总电荷 Z 较小的离子就不可靠了. 为此有必要对连续电子波函数采用扭曲波计算, 即需要考虑核外电子的分布对入射电子所受库仑势的影响, 也就是要考虑在不同入射能量下核外电子对核电荷的不同屏蔽效应.

本文利用扭曲波方法计算了类 H 和类 Li 氧离子(O^{7+} 和 O^{5+})和类 Li 钛离子(Ti^{19+})的 σ_{RR} . 其中对 O^{7+} 计算了复合到 $2s$ 态时的 σ_{RR} , 对 O^{5+} 同时计算了复合到 $2s$ 和 $4s$ 态时的 σ_{RR} , 对 Ti^{19+} 计算了复合到 $2s$ 态上的 σ_{RR} , 并将这些值与用有效电荷的库仑波计算结果比较.

2 基本公式

文献[4]中给出了采用非相对论下的量子力学微扰法严格计算电子被俘获到离子中 nl 子壳层上的辐射复合截面公式(以 πa_0^2 为单位):

$$\sigma_{nl} = \frac{2(2l+1) - q}{2(2l+1)} \frac{16}{3\sqrt{2}\alpha^2} \left| \frac{\eta \omega}{mc^2} \right|^3 \left| \frac{mc^2}{E} \right|^{1/2}.$$

^y 收稿日期: 2002 - 03 - 07; 修改日期: 2002 - 05 - 31

* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10104005); 国家 863 高技术惯性约束主题; 中国原子分子数据联合体资助项目

作者简介: 夏海宁(1977-), 男(汉族), 福建宁德人, 硕士研究生, 从事电子离子碰撞的理论研究.

$$\left| l(R_{nl}^{E, l-1})^2 + (l+1)(R_{nl}^{E, l+1})^2 \right|, \quad (1)$$

其中 q 是复合前 nl 壳层上的电子数, α 是精细结构常数, $\eta\omega$ 是发射光子能量, m 是电子质量, E 是入射电子能量, 而偶极辐射矩阵元为

$$R_{nl}^{E, l'} = \int R_{E, l'} R_{nl} r dr, \quad (l' = l \pm 1), \quad (2)$$

式中 R_{nl} 是束缚态电子波函数, $R_{E, l'}$ 是连续电子波函数. R_{nl} 用 Cowan 的原子结构程序^[11] 进行计算, $R_{E, l'}$ 利用自己编写的扭曲波程序计算(详细的扭曲波计算见我们以前的工作^[12]).

3 计算结果

为了验证我们的计算程序的正确性, 在较大范围的入射能量下, 我们用自己编写的扭曲波程序计算了不同裸核的 n 从 1 到 5 的所有子壳层的辐射复合截面 σ_{RR} , 计算结果与文献[1]中所给库仑波计算值的差别小于 5%, 从而验证了我们的计算程序的可靠性.

图 1 给出了入射电子能量范围在 0—100 eV 时,

我们的扭曲波计算值与库仑波的计算, 其中库仑波的结果都取自文献[1]. 图 1(a) 给出了电子被俘获到 O^{7+} 离子 $2s$ 态的辐射复合截面. 由图可见, 我们的扭曲波计算值与 $Z_{\text{eff}} = 7$ 时的库仑波计算值几乎重合, 说明对于类 H 离子来讲有效电荷方法是适用的.

图 1(b) 和图 1(c) 分别给出了 O^{5+} 离子被俘获到 $2s$ 态和 $4s$ 态的 σ_{RR} 值与入射能量 E_i 的关系. 由图 1(b) 可见, 扭曲波计算值是介于 $Z_{\text{eff}} = 5$ 和 $Z_{\text{eff}} = 6.5$ 的库仑波计算值之间, 且低能时扭曲波计算值与 $Z_{\text{eff}} = 5$ 的库仑波计算值几乎重合, 能量较高时扭曲波计算值趋向 $Z_{\text{eff}} = 6.5$ 的计算值. 这在物理上是合理的, 这是由于能量较低时, 核外电子的屏蔽效应厉害; 而随着能量的升高, 核外电子的屏蔽效应逐渐变弱. 由图 1(c) 可见, 电子被俘获到较高的激发态时的核外电子的屏蔽效应比被俘获到相对较低的激发态时的屏蔽效应要厉害.

图 1(d) 给出了电子被俘获到 Ti^{19+} 离子 $2s$ 态的辐射复合截面. 通过与图 1(a) 的比较可见, 在同样

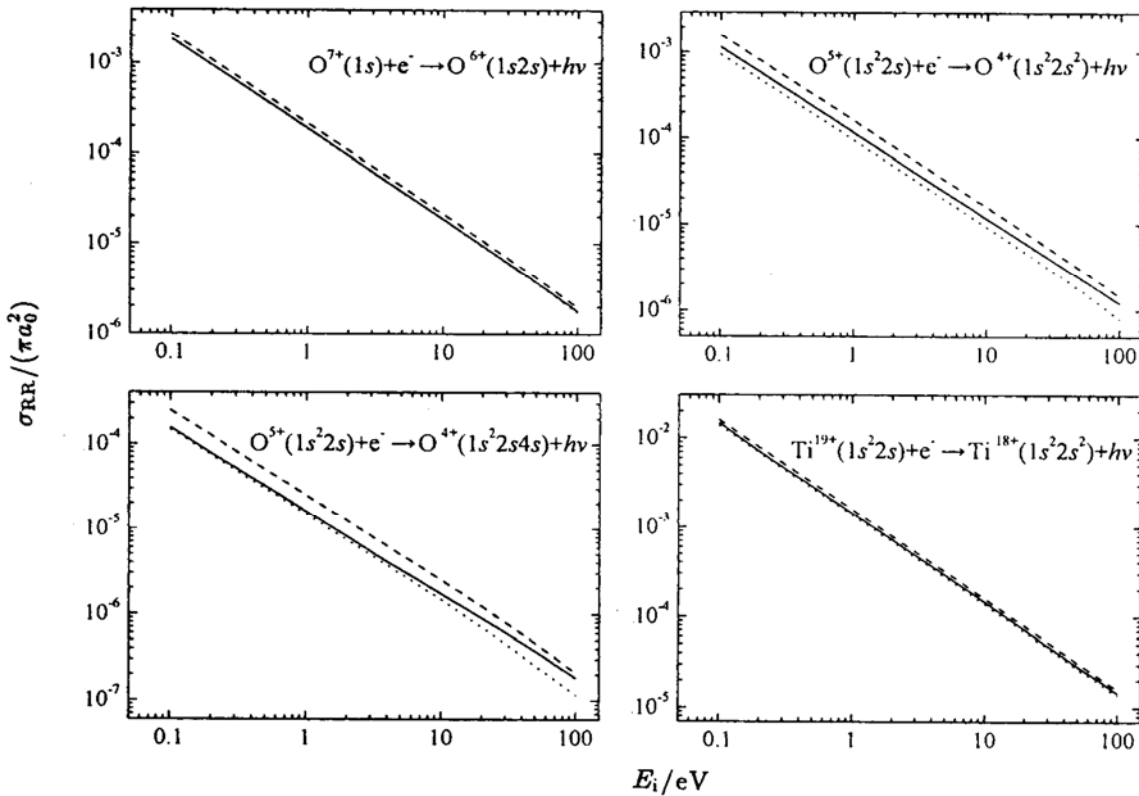


图 1 扭曲波计算的辐射复合截面(—)与库仑激发计算结果的比较

(a) ... 有效电荷 Z_{eff} 取 7 时的库仑波计算值, --- 有效电荷取 7.5 时的库仑波计算值, (b) ... 有效电荷 Z_{eff} 取 5 时的库仑波计算值, --- 有效电荷取 6.5 时的库仑波计算值, (c) ... 有效电荷 Z_{eff} 取 5 时的库仑波计算值, --- 有效电荷取 6.5 时的库仑波计算值, (d) ... 有效电荷 Z_{eff} 取 19 时的库仑波计算值, --- 有效电荷取 20.5 时的库仑波计算值.

的核外电子分布以及被俘获到相同的激发态时, 核电荷越大的离子其核外电子的屏蔽效应就越厉害, 扭曲波计算值就越靠近取 $Z_{\text{eff}} = Z$ 的库仑波计算值.

由以上讨论可见, 在入射电子能量较低、靶离

子所带电荷 Z 较高以及所复合到的能级较高时采用有效电荷的库仑波计算是合适的, 其有效电荷可取为 Z ; 其它情况下用单一的有效电荷计算是不合适的, 利用扭曲波计算可以反映不同入射能量、核外电子的不同分布的屏蔽效应.

参 考 文 献:

- [1] McLaughlin D J, Hahn Y. Scaling Behavior of Radiative Recombination Cross Section and Rate Coefficients[J]. Phys Rev, 1991, **A43**(3): 1 313.
- [2] Penetrante B M, Bardsley J N, Dewitt D, *et al.* Evolution of Ion charge state Distributions in an Electron beam Ion Trap[J]. Phys Rev, 1991, **A43**(9): 4 861.
- [3] Andersen L H, Bolko J, Kvistgaard P. Radiative Recombination Between Free Electron and Bare Carbon Ions[J]. Phys Rev Lett, 1990, **64**(7): 729.
- [4] Andersen L H, Bolko J. Radiative Recombination Measurements with H⁻ and Li⁻ like Ions[J]. J Phys, 1990, **B23**(18): 3 167.
- [5] Anderson L H, Pan G Y, Schmidt H T. Radiative Recombination with Highly Charged Si⁶⁺ and Si¹¹⁺ Ions[J]. J Phys B: At Mol Opt Phys, 1992, **25**(1): 277.
- [6] Bethe H, Salpeter E. Quantum Mechanics of One and Two electron Systems Handbuch der Physik [M]. Berlin: Springer, 1957, 35.
- [7] Hahn Y, Rule D W. Direct Radiative Capture of High energy Electrons by Atomic Ions [J]. J Phys, 1977, **B10**(13): 2 689.
- [8] Zerrad E, Hahn Y. Radiative Recombination at Low Energies[J]. J Quant Spectrosc Radiat Transfer, 1998, **59**(6): 637.
- [9] Ichihara A, Eichler J. Cross Section for Radiative Recombination and the Photoelectric Effect in the K, L and M Shells of One electron Systems with $1 \leq Z \leq 112$ Calculated within an Exact Relativistic Description[J]. Atomic Data and Nuclear Data Tables, 2000, **74**(1): 1.
- [10] Erdas A, Mezzorani G, Quarati P. Parametrization of Radiative recombination Cross Sections[J]. Phys Rev, 1993, **A48**(1): 452.
- [11] Cowan R D. The Theory of Atomic Structure and Spectra[M]. Berkeley: University of California press, 1981.
- [12] Hu W, Fang D, Wang Y, *et al.* Electron impact ionization Cross Sections for the Hydrogen Atom[J]. Phys Rev, 1994, **A49**(2): 989.

Calculation of Radiative Recombination Cross Sections Using Distorted Wave Approximation*

XIA Hai-ning, CHEN Chong-yang, QI Jing-bo, WANG Yan-sen

(Institute of Modern Physics, Fudan University, Shanghai 200433, China)

Abstract: In this work we have calculated electron ion collision radiative recombination (RR) cross sections using semi-relativistic distorted wave approximation. The radiative recombination for highly charged ions (e. g. H-like and Li-like) with low nuclear charge are studied. By comparing our calculated values with coulombic wave approximation, we concluded that it is necessary to use distorted wave Born exchange approximation in calculating RR cross sections.

Key words: radiative recombination cross section; highly charged ion; coulombic wave; distorted wave

* **Foundation item:** National Natural Science Foundation of China(10104005); National 863 Technology Inertial Confinement Fusion; Atomic and Molecular Data Unite System of China