

# 电子与氢及其同位素分子碰撞的非解离性电离截面研究\*

何曼丽<sup>†</sup> 王晓 高思峰

(解放军理工大学理学院, 南京 210007)

(2011年3月2日收到; 2011年4月18日收到修改稿)

在边界等离子体中, 氢及其同位素分子与高能电子碰撞可发生电离反应. 对于尚无可利用的氢及其同位素分子的电子碰撞非解离性电离反应截面, 基于莫尔斯函数、弗兰克-康登原理, 采用半经典的 Gryzinski 方法进行了计算. 得到反应截面随电子能量的变化情况以及振动能级对反应截面的影响. 计算结果表明分子的振动激发对电离反应有着显著影响.

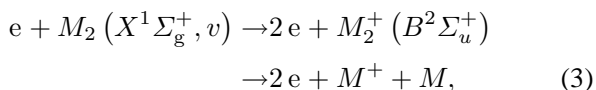
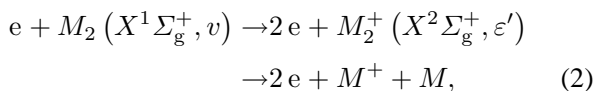
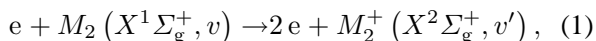
**关键词:** 电离, 截面, 半经典 Gryzinski 方法

**PACS:** 34.80.Gs, 52.20.Hv

## 1 引言

边界等离子体是整个聚变等离子体的重要组成部分, 边界等离子体位于芯部等离子体与第一壁之间, 边界等离子体温度相对较低, 因而将包含更多的未被电离的中性原子和中性分子, 其中的原子分子过程也更为复杂. 由于边界等离子体中的中性粒子行为既对芯部等离子体产生影响同时又对等离子体与第一壁的相互作用产生重要影响, 因此对边界等离子体中中性粒子的行为研究<sup>[1-5]</sup>成为聚变研究中的一项重要任务.

在边界等离子体中的氢及其同位素分子与高能电子碰撞可使分子中的电子完全摆脱库仑作用而逃逸发生电离反应, 产生分子离子. 电离反应有三种基本渠道, 即



第一反应(1)又称为非解离性电离, 后两反应(2),(3)先发生电离后又发生解离所以称为解离性电离. 最低的离子态为  $X^2\Sigma_g^+$  具有束缚特征, 而另一较高的离子态  $B^2\Sigma_u^+$  具有排斥特征. 本文主要研究氢及其同位素分子的电子碰撞非解离性电离反应.

$H_2(X^1\Sigma_g^+)$  非解离性电离截面都已有实验测量<sup>[6]</sup>, 对  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v)$  的非解离性电离反应已运用 GBB 方法进行了计算<sup>[7,8]</sup>.  $H_2(X^1\Sigma_g^+, v=0)$  所发生的(1)反应与实验结果在近阈附近比较结果是比较符合. 在文献[9]中对氢分子的总的非解离性电离反应截面也进行了计算. 对  $D_2$  的非解离电离 Cacciatore<sup>[10]</sup>也运用半经典的 Gryzinski 方法(GBB)进行了计算. Janev<sup>[4]</sup>对非解离性电离截面也进行了研究并给出了截面计算的解析式. Celiberto<sup>[2]</sup>已提供了  $D_2$  的非解离性电离截面数据, 在文献[11]中 Celiberto 指出由 GBB 方法计算得到的  $D_2(X^1\Sigma_g^+, v=0)$  非解离性电离反应与 Rapp 的实验结果相符合.

对于氢分子和其他同位素分子如  $T_2$ , HD 的电子碰撞非解离性电离反应截面到目前为止尚无可利用数据, 本文将通过运用半经典 Gryzinski 理论

\* 国家自然科学基金(批准号:03053751)和解放军理工大学理学院基金(批准号:QN-WL-2009-02)资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: hemary2001@tom.com

进行计算. 本文还研究了这些反应截面的影响因素, 得到了电子能量和分子振动能级对非解离性电离反应的影响情况.

## 2 理论计算方法

Gryzinski 基于两粒子碰撞截面和库仑碰撞截面研究得到了电子与原子发生非弹性碰撞的反应截面. Bauer 和 Bartky 将 Gryzinski 理论进行了扩展, 将它运用于电子与分子碰撞情形, 并考虑玻恩 - 奥本海默近似将电子和核运动分开, 得到截面为入射电子和轨道电子能量传输截面与核振动波函数重叠积分的平方即 Franck-Condon 因子的产物.

对电离截面, Bauer 和 Bartky 利用连接初电子态  $X_1$  (振动能级为  $v$ ) 与离子态  $X_2$  (振动能级为  $v'$ ) 的 Franck-Condon 因子  $q_{X_1, v}^{X_2, v'}$  和 Gryzinski 经典理论中的电离截面  $g_G$  得到半经典电离截面

$$\begin{aligned} & Q_{\text{ion};G}(E_2, I) \\ &= N_e \sum_{v'} \left( \frac{\sigma_0}{I_{vv'}} \right) q_{X_1, v}^{X_2, v'} g_G(E_2/I_{vv'}) \\ &= N_e \times 6.56 \times 10^{-14} \sum_{v'} q_{X_1, v_1}^{X_2, v'} \end{aligned}$$

$$\times g_G \left( \frac{E_2}{I_{vv'}} \right) / I_{vv'}^2, \quad (4)$$

式中的  $N_e$  为等电子数 —— 分子中具有相同量子数的电子数, 对电离  $N_e$  为 2,  $I_{vv'}$  为涉及能级  $v, v'$  的电离势. 其中

$$\begin{aligned} g_G(x) &= \frac{1}{x} \left( \frac{x-1}{x+1} \right)^{3/2} \left\{ 1 + \frac{2}{3} \left( 1 - \frac{1}{2x} \right) \right. \\ & \quad \left. \times \ln \left[ 2.7 + (x-1)^{1/2} \right] \right\}, \quad (5) \end{aligned}$$

这里的  $x$  定义为轰击电子的动能与轨道电子的束缚能之比即  $x = E_e/U_i$ .

## 3 计算结果与讨论

在氢的同位素分子与电子碰撞非解离性电离中连接初电子态  $X_1$  (振动能级为  $v$ ) 与离子态  $X_2$  (振动能级为  $v'$ ) 的弗兰克 - 康登 (Franck-Condon) 因子我们将根据莫尔斯 (Morse) 势函数和弗兰克 - 康登原理 [12] 计算得到 (表 1).

根据半经典 Gryzinski 理论给出的 (4) 式得到了氢及其同位素分子与电子碰撞后发生非解离性电离的反应截面 (图 1-4).

表 1  $T_2$  (a), HD (b) 的连接基态  $X^1\Sigma_g^+, v$  和离子态  $X^2\Sigma_g^+, v'$  的 Franck-Condon 因子

(a) $T_2$	$v = 0$	1	2	3	4	5	6
$v'$	0.016729	0.081237	0.183872	0.252586	0.231173	0.146230	0.064384
1	0.055337	0.153402	0.145608	0.031128	0.015713	0.137842	0.212743
2	0.100574	0.140616	0.024958	0.028772	0.114415	0.045984	0.009502
3	0.133315	0.074297	0.005575	0.089378	0.028416	0.024589	0.102813
4	0.144423	0.017677	0.050398	0.052497	0.007349	0.077730	0.008959
5	0.135924	0.000025	0.073731	0.004645	0.053488	0.024137	0.028094
6	0.115415	0.014020	0.056174	0.007747	0.053423	0.001688	0.058242
(b) HD	$v = 0$	1	2	3	4	5	6
$v'$	0.064455	0.212100	0.310207	0.253438	0.121624	0.033288	0.004642
1	0.141652	0.186683	0.030741	0.048150	0.234052	0.239354	0.100718
2	0.179372	0.061895	0.028781	0.131569	0.014819	0.091051	0.271863
3	0.172781	0.001958	0.093720	0.025315	0.057134	0.091916	0.007511
4	0.141285	0.013819	0.076330	0.006270	0.082187	0.000432	0.107572
5	0.103916	0.048471	0.027491	0.047055	0.020971	0.051520	0.024642
6	0.071213	0.073163	0.001594	0.059700	0.000737	0.057122	0.006200

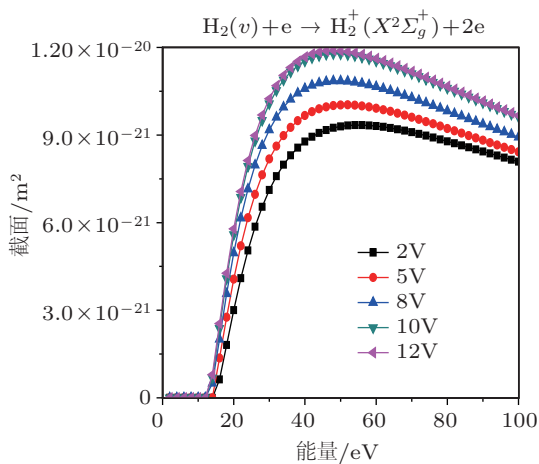


图1 H<sub>2</sub> 的非解离性电离截面

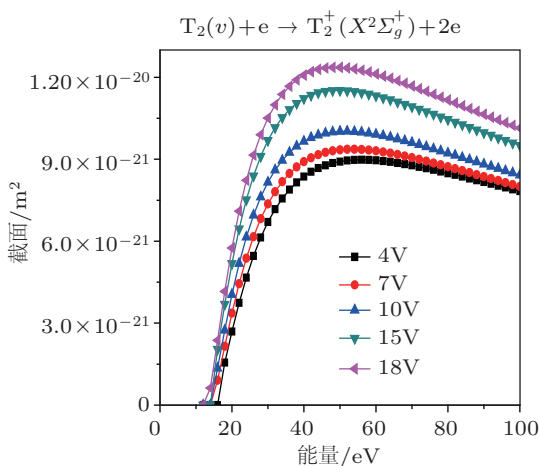


图2 T<sub>2</sub> 的非解离性电离截面

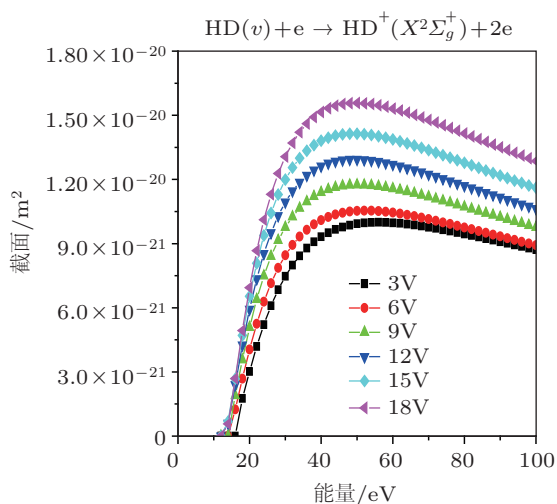


图3 HD 的非解离性电离截面

从图中可以看出边界等离子体中的氢及其同位素分子与高能电子碰撞发生非解离性电离的反应截面不仅和电子能量有关而且与分子所处的振

动能级有关系. 由计算结果表明对于处在各个振动能级的分子发生非解离性电离反应有一阈能值,

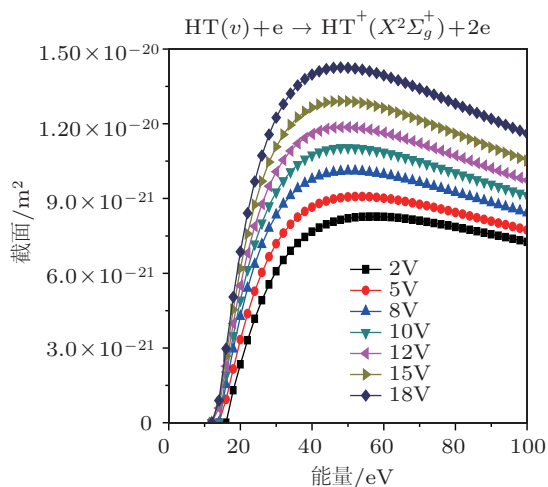


图4 HT 的非解离性电离截面

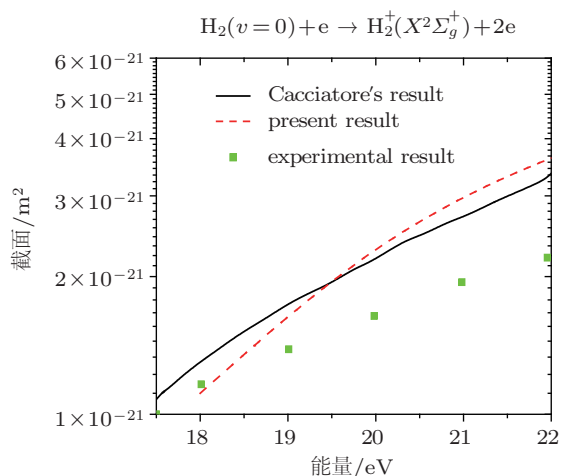


图5 H<sub>2</sub> (v = 0) 的非解离性电离截面

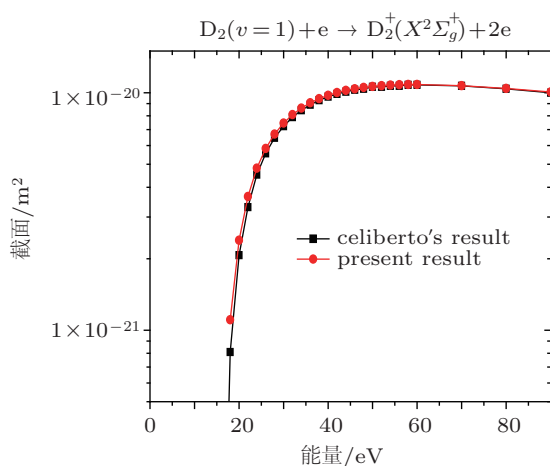


图6 D<sub>2</sub> (v = 1) 的非解离性电离截面

只有当电子能量高于某一定值 (12 eV 左右) 才能发生非解离性电离反应. 对于不同的振动能级, 分子的非解离性电离截面随着电子能量的变化规律都非常相似即反应截面随电子能量的增大先增大达到一个极大值然后减小, 而随分子振动量子数的增大反应截面会有所增加. 非解离性电离反应的阈能会随着振动量子数的增大而有所降低. 电子碰撞非解离性电离反应截面与电子碰撞经  $^2\Sigma_u^+$  的解离性电离截面<sup>[2]</sup> 相比要小 1—2 个量级.

本文采用半经典 Gryzinski 理论计算得到的  $H_2$  与电子碰撞的非解离性电离反应截面与 Cacciatore 等人<sup>[8]</sup> 的计算结果符合得很好 (图 5), 图 5 表明计算结果与 Englander-Golden 和 Rapp 的实验测量结果也比较符合, 差异因子不超过 2. 对于  $D_2$  与电子碰撞的非解离性电离反应截面我们也进行了计算, 结果与 Celiberto<sup>[2]</sup> 的计算结果非常符合 (图 6).

## 4 结论

氢及其同位素分子与电子碰撞可发生非解离性电离反应. 氢分子及其同位素分子的反应截面随电子能量的变化趋势都一样, 分子的振动激发对非解离性电离反应有着重要影响, 它将导致非解离性电离反应截面的增大. 本文采用半经典 Gryzinski 理论得到了氢及其同位素分子与电子碰撞的非解离性电离反应截面. 利用这些截面数据可以进一步去计算这些分子与电子碰撞发生非解离性电离反应的反应率, 而根据反应率和准稳态模型和准静态近似可以去研究氢及其同位素分子在边界等离子体中的振动分布从而分析得到各种分子过程的作用. 对于边界等离子体中的氢及其同位素分子与电子碰撞所发生的各种反应过程如激发、解离和电离等的反应截面数据可进一步采用最可靠的量子力学方法去获取.

- 
- [1] Pigarov A Y 2002 *Physica Scripta* T96 **77** 161
  - [2] Celiberto R, Janev R K, Capitelli M 2001 *Atomic Data and Nuclear Data Tables* **77** 161
  - [3] Capitelli M, Celiberto R, Esposito F 2002 *Plasma Sources Sci. Technol* **11** A7
  - [4] Janev R K, Reiter D, Samm U 2003 *Collision Processes in Low-Temperature Hydrogen Plasmas* **1** 188
  - [5] Matveyev A A, Silakovt V P 1995 *Plasma Sources Science and Technology* **4** 606
  - [6] Cowling I R, Fletcher J 1973 *J. Phys. B: Atom. Molec. Phys.* **6** 665
  - [7] Celiberto R, Cacciatore M 1990 *Chemical Physics* **140** 209
  - [8] Cacciatore M, Capitelli M, Gorse C 1980 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **13** 575
  - [9] Parikh Mihir 1975 *Phys. Rev. A* **12** 5
  - [10] Cacciatore M, Capitelli M 1981 *Chemical Physics* **55** 67
  - [11] Celiberto R, Cives P, Cacciatore M 1990 *Chemical Physics Letters* **169** 69
  - [12] Herzberg G 1950 *Molecular spectra and molecular structure* (United States of America: D. Van Nostrand Company)

# Cross sections for the electron impact non-dissociative ion of hydrogen and its isotopic molecule\*

He Man-Li<sup>†</sup> Wang Xiao Gao Si-Feng

(PLA University of Science and Technology, Nanjing 210007, China)

(Received 2 March 2011; revised manuscript received 18 April 2011)

## Abstract

In the edge plasma, hydrogen and its isotopic molecule will be ionized via collisions with the energetic electrons in the plasmas. The cross section data for the electron impact non-dissociative ion of the hydrogen and its isotopic molecule, which are unavailable from the literature are calculated on the basis of Morse potential function, Franck-Condon theory and semi-classical Gryzinski method. The change of cross section with electron energy and the effect of vibrational level of ground state on the cross section are presented in the paper. The results show that the vibrational excitation plays an important role in the process of ion.

**Keywords:** ion, cross section, semi-classical Gryzinski method

**PACS:** 34.80.Gs, 52.20.Hv

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China(Grant No. 03053751), and the Youth Foundation of PLA University of Science and Technology(Grant No. QN-WL-2009-02).

<sup>†</sup> E-mail: hemary2011@tom.com