

高能离子原子碰撞*

仝晓民 李家明

(中国科学院物理研究所)

1986 年 6 月 9 日收到

提 要

本文在 Born 一阶近似下, 建立了一种能够方便计算各种过程的高能原子(或离子)碰撞截面的理论计算方法. 对各种碰撞过程, 进行了详细的理论分析. 并对已有实验结果^[1]的 H^+ , e , H , H^- 四种入射粒子与 $Na(3s \rightarrow 3p)$ 的碰撞激发过程进行了理论计算. 与实验结果的比较是令人满意的.

一、引 言

由于高能原子束(或离子束)的广泛应用, 人们对高能原子(或离子)碰撞过程研究的兴趣日益增加. 例如在离子惯性聚变, 粒子束刻印术和等离体体的中性束加热^[2-5]等应用方面, 都涉及到离子或中性原子所引起的原子碰撞过程; 这些过程极为丰富, 包括激发、电离以及电荷转移等过程. 有关应用方面需要的原子碰撞数据非常多. 因此, 有必要建立比较方便的理论计算方法, 能够计算各种各样原子碰撞截面, 从而掌握原子碰撞数据及其规律.

在 Born 一阶近似下, 我们建立了能够方便计算各种高能原子(或离子)碰撞激发和电离截面的理论计算方法. 由于目前对于四种入射粒子 (H^+ , e , H^- , H) 与 Na 原子的碰撞激发过程, 已有碰撞截面的绝对测量^[1]. 因此, 我们以 Na 原子碰撞激发过程为例, 进行了理论计算, 并与实验测量做了比较和分析; 明确了理论的适用范围(例如, 对电子而言

$$x = \frac{m_e T}{M \Delta E} \geq 45,$$

T 为入射粒子能量, ΔE 为激发能, m_e , M 分别为电子和入射粒子的质量). 当入射粒子为电子而其入射能量低于适用范围时, 以本文 Born 近似理论计算截面 $\sigma^B(x)$ 为基础, 存在校正函数 $\lambda(x)$, 使 $\sigma(x) = \lambda(x) \cdot \sigma^B(x)$. 该校正函数具有一定的普适性^[6]. 对于其它入射粒子是否也存在这种普适的校正函数, 这是一个十分有趣的问题, 有待于进一步探索.

二、理论计算方法

速度为 v , 动量为 k 的入射粒子与静止靶原子碰撞, 碰撞前, 入射粒子处于 $|i\rangle =$

* 中国科学院科学基金和中国科学院院长基金资助的课题.

$|\eta_p L_p M_p\rangle$ 态上, 靶原子处在 $|i\rangle = |\eta_i L_i M_i\rangle$ 态上. L, M, η 分别为总角动量及其 z 分量和其它好量子数. 碰撞后, 入射粒子动量为 $\mathbf{k}_f$, 处在 $|f\rangle = |\eta_f L_f M_f\rangle$ 态上, 靶原子处在 $|k\rangle = |\eta_k L_k M_k\rangle$ 态上, 这里取动量转移 $\mathbf{q} = \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i$ 为量子化轴. 则在 Born 一阶近似下, 碰撞的微分截面为(采用原子单位)

$$d\sigma_{(if), (ik)}^B = \frac{8\pi}{v^2} S_{(if)}(q) \mathcal{F}_{(ik)}(q) dq/q^3, \quad (1)$$

其中 $S_{(if)}(q)$ 与 $\mathcal{F}_{(ik)}(q)$ 分别为入射粒子和靶粒子的各种形式因子. 我们以 $S_{(if)}(q)$ 为例, 给出具体表达式. 为了讨论方便, 我们略去 $|i\rangle$ 和 $|f\rangle$ 态中各量子数的下标, 假定 $|i\rangle \approx |f\rangle$, 则其非弹性形式因子为

$$\begin{aligned} S_{(if)}(q) &= |\langle \eta L M | \sum_j e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j} | \eta' L' M' \rangle|^2 \\ &= \left| (-1)^{L-M} \sum_{\lambda} i^{\lambda} \sqrt{4\pi(2\lambda+1)} \begin{pmatrix} L & \lambda & L' \\ -M & 0 & M' \end{pmatrix} \right. \\ &\quad \left. \cdot \langle \eta L \left\| \sum_j Y_{\lambda 0}(\hat{r}_j) j_{\lambda}(qr_j) \right\| \eta' L' \rangle \right|^2, \end{aligned} \quad (2)$$

其中 $\langle \eta L \left\| \sum_j Y_{\lambda 0}(\hat{r}_j) j_{\lambda}(qr_j) \right\| \eta' L' \rangle$ 为组态波函数的约化矩阵元. 可以化为单电子轨道波函数矩阵元

$$\begin{aligned} &\langle \eta L \left\| \sum_j Y_{\lambda 0}(\hat{r}_j) j_{\lambda}(qr_j) \right\| \eta' L' \rangle \\ &= \sqrt{w_{nl}} \sum_{L_0} (-1)^{L+L_0} G_{a_0^i l_0 L_0}^{a_i L} \cdot \begin{Bmatrix} L & \lambda & L' \\ l' & L_0 & l \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} l' & \lambda & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ &\quad \cdot \sqrt{(2L+1)(2L'+1)(2l+1)(2l'+1)(2\lambda+1)} \frac{1}{4\pi} \langle nl | j_{\lambda}(qr) | n'l' \rangle, \end{aligned} \quad (3)$$

其中 w_{nl} 为激发壳层的电子占有数, $G_{a_0^i l_0 L_0}^{a_i L}$ 为根源系数^[8]. 单电子轨道波函数的径向积分矩阵元为

$$\langle nl | j_{\lambda}(qr) | n'l' \rangle = \int R_{nl}^*(r) j_{\lambda}(qr) R_{n'l'}(r) r^2 dr, \quad (4)$$

令

$$M^{\lambda} = \sqrt{(2\lambda+1)(4\pi)} \langle \eta L \left\| \sum_j Y_{\lambda 0}(\hat{r}_j) j_{\lambda}(qr_j) \right\| \eta' L' \rangle, \quad (5)$$

则

$$S_{(if)}(q) = \left| (-1)^{L-M} \sum_{\lambda} i^{\lambda} \begin{pmatrix} L & \lambda & L' \\ -M & 0 & M' \end{pmatrix} M^{\lambda} \right|^2. \quad (6)$$

用同样的方法, 我们可以得到 $\mathcal{F}_{(ik)}(q)$ 的表达式.

根据(1)式, 我们可以计算各种跃迁过程的微分散射截面; 当以动量转移 $\mathbf{q}$ 为量子化轴时, 根据 Born 一阶近似, 可得到磁量子数守恒的关系. 该关系可做为验证 Born 近似的标准之一. 当不监测磁量子数时, 就需要对(1)式进行初态平均, 末态求和, 其总截面为^[7]

$$\sigma_{if,lk}^B = \frac{8\pi}{v^2} \int_{q_{\min}}^{q_{\max}} S_{if}(q) \mathcal{F}_{lk}(q) dq/q^3, \quad (7)$$

其中 $q_{\min}$, $q_{\max}$ 为最小、最大可能的动量转移。这里 $S_{if}(q)$ 和 $\mathcal{F}_{lk}(q)$ 的下标不加括号, 则表示对初态平均, 末态求和, 即^[9]

$$S_{if}(q) = \frac{1}{2L+1} \sum_M \sum_{M'} S_{ifM}(q) = \frac{1}{2L+1} \sum_l \frac{|M_l|^2}{2\lambda+1}. \quad (8)$$

用同样的方式, 可以求得 $\mathcal{F}_{lk}(q)$ 。

根据(7)式, 可以计算各种激发过程的散射截面。

1) 入射粒子和靶都不激发

$$\sigma_{ii,u}^B = \frac{8\pi}{v^2} \int S_{ii}(q) \mathcal{F}_{u}(q) dq/q^3. \quad (9)$$

若对入射原子初态电荷分布做球对称近似, 其弹性形式因子为

$$S_{ii}(q) = |S_{el}(q) - z_p|^2, \quad (10)$$

这里

$$S_{el}(q) = \sum_{nl} w_{nl} \langle nl | j_0(qr) | nl \rangle. \quad (11)$$

同理也可以求得靶原子的弹性形式因子 $\mathcal{F}_u(q)$ 。

2) 靶原子激发(包括电离), 而入射粒子不激发

$$\sigma_{ii,lk}^B = \frac{8\pi}{v^2} \int S_{ii}(q) \mathcal{F}_{lk}(q) dq/q^3. \quad (12)$$

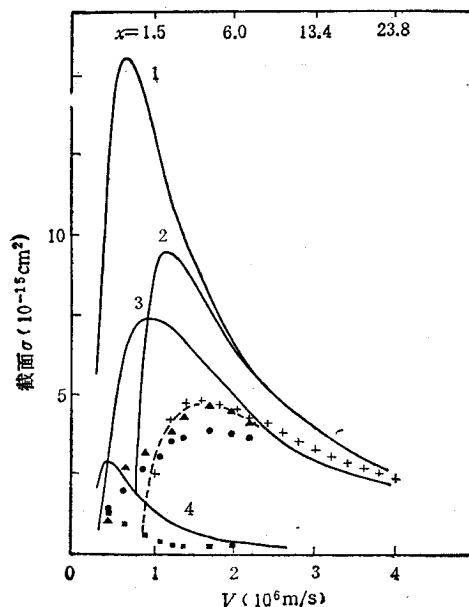


图 1

1,2,3,4 分别为本文计算的 H^+ , e^- , H^- 和 H 与 $Na(3s \rightarrow 3p)$ 的散射截面曲线;
 $\blacktriangle$, $\bullet$, $\blacksquare$ 为 H^+ , e^- , H^- 和 H 与 $Na(3s \rightarrow 3p)$ 碰撞的实验结果; $+$
 为 e^- 与 $Na(3s \rightarrow 3p)$ 碰撞, 对 Born 近似校正后的理论值

3) 入射粒子与靶粒子同时激发(包括电离)

$$\sigma_{ii,lk}^B = \frac{8\pi}{v^2} \int S_{ii}(q) \mathcal{F}_{lk}(q) dq/q^3. \quad (13)$$

4) 当实验不监测入射粒子末态,只测量靶原子的 $l \rightarrow k$ 激发过程,则需将所有可能的人射原子过程(包括弹性和非弹性)都考虑进去,其总截面为

$$\sigma_{\text{tot},lk}^B = \frac{8\pi}{v^2} \int S_{\text{tot}}(q) \mathcal{F}_{lk}(q) dq/q^3, \quad (14)$$

其中

$$S_{\text{tot}}(q) = S_{ii}(q) + \sum_{i \neq j} S_{ij}(q). \quad (15)$$

根据(7)式还可以计算除电荷转移外的其它各种高能碰撞截面,就不赘述了.作为说明的例子,计算了 H^+ , e^- , H^- , H 四种入射粒子与 $Na(3s \rightarrow 3p)$ 的碰撞激发截面.对于 H^- , e^- , H^+ 都是弹性过程, H 包括全部弹性和非弹性过程.将理论计算的结果与实验测量值做一比较(见图 1)结果是令人满意的.

三、讨 论

虽然目前只有低能区的实验截面数据,但从图 1,可以看出实验结果与理论计算值在高能区域的趋势是完全符合的.因此,根据本文理论计算可以得到可靠的各种高能激发截面.但是在低能区,由于 Born 近似,计算值比实验测量结果高,后面将作进一步补充说明.仔细分析不同粒子的散射截面, H^+ , e^- , H^- 都是电荷为 1 的粒子,在高能碰撞过程中,其截面较中性粒子 H 的散射截面要大很多,这种关系还维持到低能区 ($x \sim 1.5$),理论和实验结果是相互一致的.对于 H^+ , e^- , H^- 等粒子电荷虽都为 1,但其散射截面也稍有不同; H^+ 和 e^- 皆为点电荷粒子,因此,其散射截面在高能处趋于一致,而 H^- 则由于有内部结构截面较 H^+ , e^- 要小一些.理论计算也完全描述了这种特征.

在有关的应用方面,涉及的原子碰撞过程是多种多样的,因此碰撞截面数据的需求也是极其大量的.本文所提出的简单方便的理论计算方法可以: 1) 对特定入射和靶原子(离子),计算除电荷转移以外的各种高能碰撞激发截面(在第二节已做了详细的讨论); 2) 还能方便地计算各种入射和靶原子(离子)的有关碰撞截面.因此,本文理论计算可以提供可靠的高能截面数据,满足应用方面的需要.

最后,我们再补充一点. Born 近似适用于高能碰撞(例如,对电子 $x \geq 45$). 但电子的低能碰撞截面,可在 Born 截面 $\sigma^B(x)$ 的基础上,进行校正,即 $\sigma(x) = \lambda(x) \cdot \sigma^B(x)$,该校正函数 $\lambda(x)$ 在 50% 范围内具有普适性^[6]. 校正后的理论计算结果与实验值符合得很好.如图 1 所示,这是很有启发性的.对于其它粒子,是否也存在一个普适的校正函数呢?有待于进一步的研究.

参 考 文 献

- [1] A. M. Howald, L. W. Anderson and C. C. Lin, *Phys. Rev. Lett.*, **51**(1983), 2029.
- [2] R. L. Seliger, J. W. Ward, V. Wang and R. L. Kubena, *Appl. Phys. Lett.*, **34**(1979), 310.

- [3] C. L. Olson, *J. Fusion Engery*, 1(1982), 309.
- [4] A. Broers, *Phys. Today*, 32(11) (1979), 39.
- [5] L. R. Grisham, *Nucl. Tech-Fusion*, 2(1982), 199.
- [6] 田伯刚、李家明, 物理学报, 35(1986), 305.
- [7] George H. Gillespie, *Phys. Rev.*, A26(1982), 2421.
- [8] I. I. Sobelman, *Atomic Spectra and Radiative Transitions*, Spinger-Verlag Berlin, (1979).
- [9] 田伯刚、李家明, 物理学报, 33(1984), 1041.

ATOMIC COLLISION PROCESSES WITH HIGH ENERGY ATOMIC IONS

TONG XIAO-MIN LI JIA-MING

(*Institute of Physics, Academia Sinica*)

ABSTRACT

Based on the first Born approximation, we develop a simple theoretical method to calculate the cross sections of various high energy atomic collision processes. For the 4 kinds of incident particles (H^+ , e^- , H , H^-) our theoretical cross sections for the target-atom excitation process $Na(3s \rightarrow 3p)$ are consistent with the recent absolute experimental measurement.