

低和中等电离度离子的电子碰撞电离 截面的扭曲波计算^{*}

颜士翔 陈重阳 滕舟轩 王炎森

(复旦大学李政道物理学综合实验室, 复旦大学现代物理研究所, 上海 200433)

孙永盛

(北京应用物理与计算数学研究所, 北京 100088)

(1997 年 7 月 15 日收到; 1997 年 10 月 5 日收到修改稿)

利用扭曲波 Born 交换近似方法计算了 Ne^+ , $\dots$, Ne^{6+} 的电子碰撞电离截面, 计算结果同实验和其他理论结果相一致. 为满足实际应用需要, 给出了高精度的拟合公式. 还讨论了扭曲波 Born 交换近似方法对低电离度离子的适用性以及交换势的引进对计算结果的影响.

PACC: 3480D

1 引 言

电子与离子的碰撞电离是原子物理中一个非常重要的基本过程. 在天体物理、等离子体物理和 X 射线激光的研究中, 电子碰撞电离截面的数据是必不可少的. 这些数据对于决定高温等离子体的结构和动力学也是非常重要的^[1,2]. 近年来, X 射线激光的研究取得了巨大的进展^[3,4], 电子碰撞电离截面在研究等离子体的平衡中也是重要的参数. 并且, 一个合适的电离截面拟合公式对于实际应用是十分必要的.

就目前而言, 扭曲波方法主要应用于计算高电离度离子的电离截面, 有关该方法在低电离度离子中的应用的报道还比较少. Sampson 等^[5]指出当核电荷数 $Z > 2N$ (N 为电子数) 时, 用扭曲波 Born 交换近似 (DWBE) 方法计算电离截面有高的精度. 在我们以前的工作^[6,7]中, 利用 DWBE 方法计算了高电离度的类 H、类 He 和类 Li 等电子系离子的电离截面, 也取得了与实验很好相符的结果. Younger^[8]的计算进一步表明电离度越低, 扭曲波计算与实验测量的误差越大. 为了更好地看出扭曲波方法在低电离度离子中的适用性, 本文计算了 Ne 的低电离度和中低电离度离子 (Ne^+ , $\dots$, Ne^{6+}) 的电离截面, 以便于系统地讨论扭曲波方法在同一元素不同电离度离子的适用性.

Ne 的离子在实际应用中是一些十分重要的离子, 并且已经有了不少有关 Ne 离子电离截面的实验数据. 最近, Bannister^[9]又比较全面地测量了 Ne 的 2 价、4—6 价离子的电离截面. 相对而言理论计算就比较少, 而且没有利用 DWBE 方法系统计算 Ne 各价离子电

^{*} 国家自然科学基金 (No. 19774016) 和中国工程物理研究院基金资助的课题.

离截面的报道,在 Bannister 的文章中只是与半经典的 Lotz 公式的计算值作了系统比较.本文利用 DWBE 方法计算了 Ne 的这些离子的电离截面,对类 Be 离子(Ne^{6+})还包括了激发自电离的贡献.在相当宽的能区中,我们把计算结果与目前能找到的实验数据,包括最新的实验结果进行了比较,并与其他理论计算作了比较.比较结果表明,除了 Ne^+ 离子的计算与实验的误差较大外,我们的 DWBE 计算能与实验值相当符合.

文中我们也把有关的这些 Ne 离子的电离截面的计算结果用拟合公式进行了拟合,以便于实际使用.

另外,本文使用的 DWBE 方法中采用了半经典交换势^[6,7],考虑了自由电子与束缚电子间的交换效应.文中分析了该交换势在不同电离度离子的情况下对电离截面的影响,以看出其重要性.

2 基本理论与计算公式

关于 DWBE 方法,在我们以前的工作^[6,7,10,11]中已作过详尽的描述.该方法是 Coulomb-Born 近似方法发展而来的,具有下面四个方面的改进:1) 考虑了靶离子中束缚电子的分布,而不是把这些电子看作一个等效的点电荷;2) 考虑了末态的两个自由电子之间的交换效应;3) 讨论了自由电子与靶离子中束缚电子之间的交换效应;4) 引入了靶离子中电子波函数的相对论修正^[12].

一般可假设直接电离和激发自电离是独立的过程,那么总电离截面可以写为

$$Q_i(E_i) = Q_o(E_i) + Q_i(E_i) + \sum_j Q_e^j(E_i) B_j^a, \quad (1)$$

其中 $Q_o(E_i)$ 和 $Q_i(E_i)$ 分别是外层和内层直接电离截面,并有 $Q_e^j(E_i)$ 是内层电子到自电离能级 j 的激发截面, B_j^a 是该能级的激发自电离分支比,可表示为

$$B_j^a = \frac{\sum_m A_a(j \rightarrow m)}{\sum_m A_a(j \rightarrow m) + \sum_k A_r(j \rightarrow k)}, \quad (2)$$

式中的 $A_a(j \rightarrow m)$ 是到能级 m 的激发自电离速率, $A_r(j \rightarrow k)$ 是到能级 k 的辐射跃迁速率.在类 Be 离子(Ne^{6+})的激发自电离截面的计算中,该分支比可近似作为 1^[13].

在 DWBE 方法中,直接电离截面(以 πa_0^2 为单位, a_0 是 Bohr 半径)可写为

$$Q(E_i) = \int_0^{E/2} \sigma(E_e, E_i) dE_e, \quad (3)$$

其中 E_i 和 E_e 分别是入射电子和出射电子的能量, E 是末态出射电子和散射电子的总能量, $\sigma(E_e, E_i)$ 是微分电离截面.使用分波展开,散射振幅可以分解成角度因子和 Slater 积分.我们有

$$\sigma(E_e, E_i) = \frac{16}{\pi E_i} \sum_{l_i l_e l_f L} I_{l_i l_e l_f L}(E_e, E_i), \quad (4)$$

式中 l_i , l_e 和 l_f 分别是入射、出射和散射电子的角动量, L 是体系的总角动量.

$$I_{l_e l_i l_f L}(E_e, E_i) = |f|^2 + |g|^2 - \alpha |f| |g|, \quad (5)$$

其中 f 和 g 分别是直接和交换分波散射振幅. 在这里使用最大干涉近似 ($\alpha=1$)^[14], f 和 g 可以写为

$$f = \sum_{\lambda} f_{\lambda}(l_b l_i l_e l_f L) \left(P_b P_i \left| \frac{1}{r_{12}} \right| P_e P_f \right)_{\lambda}, \quad (6)$$

$$g = \sum_{\lambda} f_{\lambda}(l_b l_i l_f l_e L) \left(P_b P_i \left| \frac{1}{r_{12}} \right| P_f P_e \right)_{\lambda}, \quad (7)$$

式中 f_{λ} 是一个角度因子, $(P_b P_i | 1/r_{12} | P_e P_f)_{\lambda}$, $(P_b P_i | 1/r_{12} | P_f P_e)_{\lambda}$ 是 Slater 积分.

为了计算在很高能量下的电离截面, 并为提供一个快速计算截面的方法, 我们用 **Younger** 拟合公式^[15]

$$u I^2 Q = A(1 - 1/u) + B(1 - 1/u)^2 + C \ln u + D \ln u / u, \quad (8)$$

拟合了我们的计算结果, 式中的 Q 是外层或内层直接电离截面, I 是外层或内层电离阈能, u 是约化的入射能量, 被定义为

$$u = E_i / I, \quad (9)$$

其中 E_i 就是电子入射能量.

在我们的 **DWBE** 近似方法中, 在 **LS** 耦合表象下, 从能级 i 到能级 j 的跃迁的激发截面, 也就是(1)式中的 $Q_e^j(E_i)$, 可以写为^[9]

$$Q_e(i \rightarrow j) = \frac{2\pi a_0^2}{g_i E_i(\text{Ry})} \sum_J (2J+1) \times \sum_{u'j'} |R(\alpha_i L_i S_i J_i l s j J; \alpha_f L_f S_f J_f l' s' j' J)|^2, \quad (10)$$

其中 $g_i = (2L_i + 1)(2S_i + 1)$, 是初能级的统计权重, E_i 是入射电子能量(以 Rydberg 为单位), J 是体系的总角动量. $l s j$ 和 $l' s' j'$ 分别是入射电子和散射电子的轨道、自旋和总角动量. L_i , S_i 和 J_i 分别是靶离子的轨道、自旋和总角动量, α_i 代表靶离子的其他量子数; L_f , S_f , J_f 和 α_f 是剩余离子相应的量子数. 相互作用矩阵 $\mathbf{R}$ 分为直接项和交换项, 可表示为

$$\mathbf{R} = \mathbf{R}^d + \mathbf{R}^e, \quad (11)$$

其中的交换散射矩阵元 $\mathbf{R}^e$ 就代表散射电子和在激发态的电子之间的交换效应.

对于激发自电离截面的拟合, 我们使用下式:

$$u I^2 Q_{ea} = A + B/u + C/u^2 + D \ln u, \quad (12)$$

其中 Q_{ea} 是激发自电离截面, u 是约化入射能量, 被定义为

$$u = E_i / I, \quad (13)$$

式中的 E_i 是电子的入射能量, I 是取从能级 $1s^2 2s$ 到 $1s 2s^2$ 的跃迁能量 $I_{ex}(2s)$.

3 结果与讨论

3.1 电离截面的计算结果与 **DWBE** 方法的适用性

我们计算了 Ne^+ , $\dots$, Ne^{6+} 离子的电子碰撞电离截面, 计算中包括了外层和内层电子

的直接电离,对 Ne^{6+} 离子还计算了激发自电离截面.并且,我们用上面的拟合公式(8)和(12)拟合了所有的计算结果并给出全部的拟合参量.

我们在表 1 和表 2 中分别列出了 Ne 各价离子 $\text{Ne}^{\sigma+}$ ($\sigma=1, \cdots, 6$) 的外层和内层直接电离截面的拟合参数,其中的约化电离截面的单位是 $\pi a_0^2 \text{Ry}^2$,同时也给出了拟合相对误差.可以看到对所有离子的直接电离截面的拟合误差都小于 1%.在表 3 中给出了 Ne^{6+} 离子激发自电离截面的拟合参量和相对误差,截面的单位同前.其中拟合相对误差 F 的定义为

$$F = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{Q_{\text{fit}}(u) - Q_{\text{cal}}(u)}{Q_{\text{cal}}(u)} \right)^2} \times 100\%, \tag{14}$$

其中 i 表示不同的拟合点, N 表示拟合点的总数.

表 1 外层直接电离截面的拟合参量和拟合误差

σ	A	B	C	D	F/ %
6	16.414	-5.9598	1.1508	-12.427	0.49
5	15.088	-5.8183	0.0255	-12.018	0.58
4	32.633	-13.261	0.1897	-27.027	0.65
3	47.788	-20.348	1.3130	-41.524	0.47
2	50.106	-22.453	5.1612	-48.565	0.76
1	54.877	-31.787	10.714	-62.956	0.996

表 2 内层直接电离截面的拟合参量和拟合误差

σ	A	B	C	D	F/ %
6	28.649	-11.659	0.7846	-24.822	0.62
5	12.382	-4.4353	1.9784	-9.5495	0.12
4	24.144	-9.5112	0.2593	-19.800	0.70
3	20.482	-7.8330	0.9092	-17.404	0.30
2	17.698	-6.2321	1.3822	-16.267	0.39
1	15.572	-5.0911	1.7423	-16.416	0.28

表 3 激发自电离截面的拟合参量和拟合误差

σ	A	B	C	D	F/ %
6	-0.46068	1.2622	0.92259	2.9947	0.90

我们在图 1—图 6 中给出了全部的计算结果以及同实验数据和各种理论计算的比较.由图可见,对 $\text{Ne}^{2+}, \cdots, \text{Ne}^{6+}$, 我们的计算与实验是相当符合的.对 Ne^+ 而言,在高能部分符合得较好,但在 10^3 eV 以下,平均来看理论计算比实验结果高出约 30%.可见将 DWBE 方法应用于低电离度离子基本上是适用的,而正如以后将指出的,交换势的引入是重要的.

与其他理论计算比较,由于 Younger^[17]和 Jacubowicz^[26]的扭曲波计算与我们的计算

方法基本相同,可以看出我们的结果与他们的计算是相当符合的;而 Moores^[16]的 Coulomb 波计算由于没有考虑核外电子分布所引起的核势场的扭曲,可见扭曲波方法要比 Coulomb 方法更加精确些;McGuire^[24]的平面波计算把入射、散射和出射电子都用平面波来表示,而 Salop^[22]的半经典方法把电子看作半经典粒子来处理,这虽然可以简化计算,但是同电子与离子碰撞的实际过程有较大的差距,而造成了理论比实验偏高的许多。与最新的 Bannister^[9]的实验结果比较,我们的计算都偏低。在高峰处看,对 Ne^{2+} , 低 8% 左右;对 Ne^{4+} 和 Ne^{5+} , 低 14% 左右;对 Ne^{6+} , 低 10%。在这里的计算中,我们取了最大干涉 ($\alpha=1$),若采取自然干涉,则计算值会有所提高^[27]。

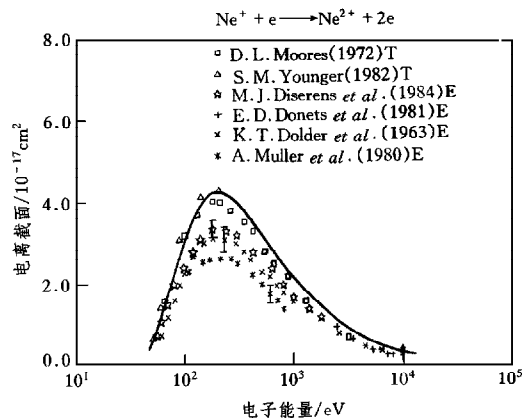


图1 Ne^+ 离子的电离截面 实线是本文的计算值;
□和△是理论值^[16,17];☆, +, × 和 * 是实验值^[18-21]

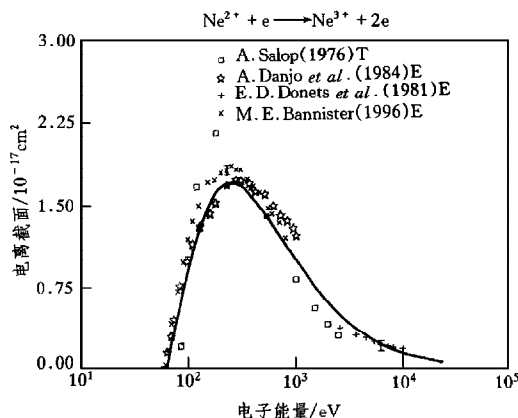


图2 Ne^{2+} 离子的电离截面 实线是本文的计算值;
□是理论值^[22];☆, + 和 × 是实验值^[23,19,9]

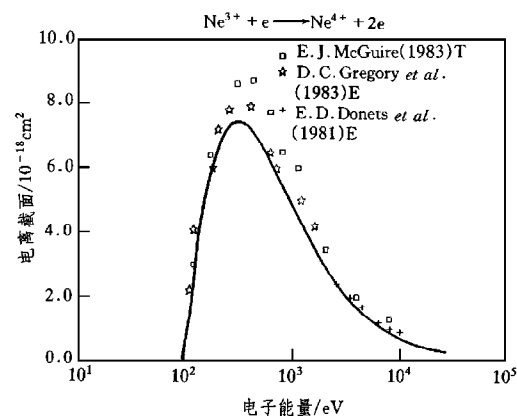


图3 Ne^{3+} 离子的电离截面 □是理论值^[24];☆和+是实验值^[25,19]

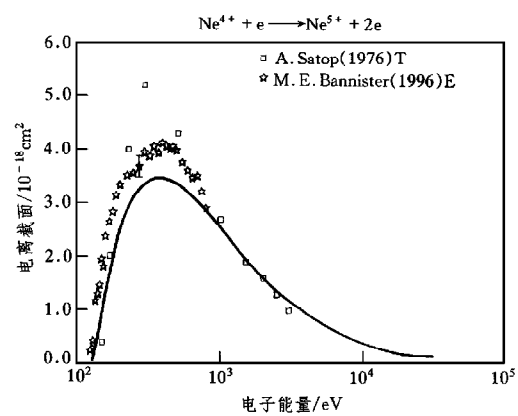


图4 Ne^{4+} 离子的电离截面 实线是本文的计算值;
□是理论值^[22];☆是实验值^[9]

关于 Ne^+ 的电离,我们的计算结果与 Younger^[17]的扭曲波计算相一致,但都比实验

值高.我们认为主要原因可能有以下的两个:第一,正如 Younger^[8]和 Sampson^[5]等人所指出的,DWBE 近似方法更适合于对电离度较高离子的计算,进一步的改进要求更严格的理论公式.另外一个原因是因为在我们的计算中,没有仔细考虑末态两电子之间的关联效应,但这关联效应将会对出射电子的波函数有所影响^[14].

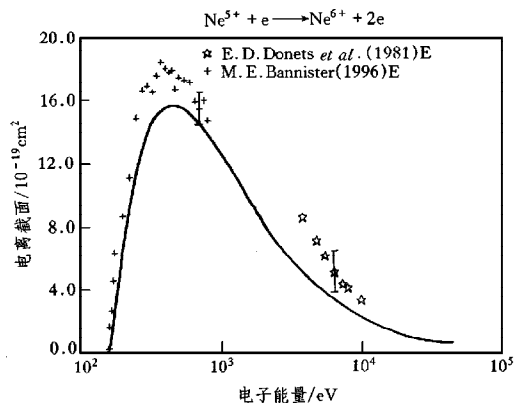


图5 Ne^{5+} 离子的电离截面 实线是本文的计算值;☆和+是实验值^[19,9]

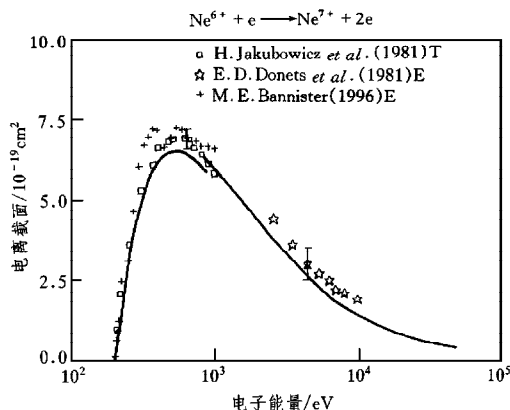


图6 Ne^{6+} 离子的电离截面 □是理论值^[26];☆和+是实验值^[19,9]

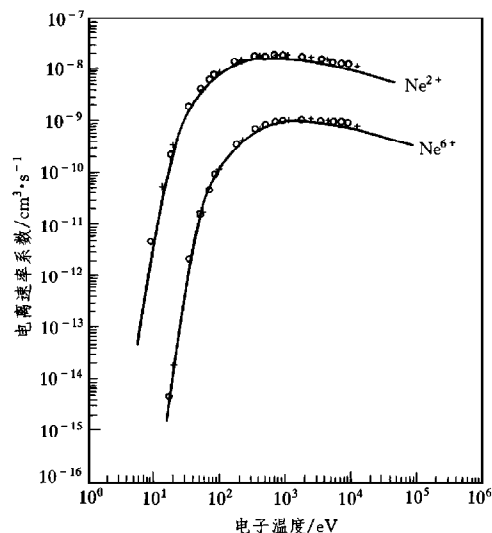


图7 速率系数的比较 实线是计算值;○是 Bannister^[9]的计算结果;+是 Voronov^[28]的推荐数据

而言,仅仅只有 2% 的贡献.由此,我们可以认为半经典交换势对低电离度离子电离截面的影响要大于对高电离度离子的影响,特别在低能入射的情况下,影响更大.

为进一步验证我们的计算结果,我们利用计算得到的截面和 Maxwell 分布计算了 Ne^{2+} 和 Ne^{6+} 的电子碰撞电离速率系数.在图 7 中给出了我们的计算结果与 Bannister^[9]所给出的来自实验截面的速率系数及 Voronov^[28]所推荐的速率系数进行了比较.由图 7 可见符合相当好.

3.2 半经典交换势的影响

为了讨论半经典交换势对高电离度和低电离度离子的电子碰撞电离截面的影响,我们计算了 Ne^+ 离子和 Ne^{6+} 离子在考虑了交换势和不考虑交换势的情况下的电离截面.计算的结果我们在表 4 中给出.我们发现对 Ne^+ 离子而言,交换势的影响在能量很低时十分明显,有 20% 以上的贡献,在高能时也有 5% 左右的贡献.对于 Ne^{6+} 离子

表 4 半经典交换势对 Ne ⁺ 和 Ne ⁶⁺ 离子直接电离截面的影响				
	E _i /eV	Q _{inc} /cm ²	Q _{exc} /cm ²	F/%
Ne ⁺	4.72 × 10 ¹	4.0533 × 10 ⁻¹⁸	5.1489 × 10 ⁻¹⁸	33.7
	6.29 × 10 ¹	1.2860 × 10 ⁻¹⁷	1.5837 × 10 ⁻¹⁷	23.2
	8.39 × 10 ¹	2.4337 × 10 ⁻¹⁷	2.6675 × 10 ⁻¹⁷	9.61
	2.10 × 10 ²	4.2427 × 10 ⁻¹⁷	4.3464 × 10 ⁻¹⁷	2.44
	5.03 × 10 ²	3.2603 × 10 ⁻¹⁷	3.3988 × 10 ⁻¹⁷	4.25
	6.29 × 10 ²	2.8939 × 10 ⁻¹⁷	3.0277 × 10 ⁻¹⁷	4.62
Ne ⁶⁺	2.30 × 10 ²	2.0179 × 10 ⁻¹⁹	1.9836 × 10 ⁻¹⁹	1.70
	3.07 × 10 ²	4.9609 × 10 ⁻¹⁹	4.9317 × 10 ⁻¹⁹	0.59
	6.14 × 10 ²	6.4803 × 10 ⁻¹⁹	6.5438 × 10 ⁻¹⁹	0.98
	1.64 × 10 ²	4.5142 × 10 ⁻¹⁹	4.5922 × 10 ⁻¹⁹	1.73
	3.07 × 10 ²	3.1007 × 10 ⁻¹⁹	3.1624 × 10 ⁻¹⁹	1.99
	8.19 × 10 ²	1.5019 × 10 ⁻¹⁹	1.5333 × 10 ⁻¹⁹	2.10

4 结 论

本文利用扭曲波 Born 交换近似方法系统地在较宽的能区范围中计算了 Ne 低电离度和中等电离度离子的电子碰撞电离截面.除了 Ne⁺ 离子误差较大以外,我们的计算结果同实验的符合是相当好的.可见 DWBE 方法基本上是适用于低电离度离子电离截面的计算的.另外也表明,对于低电离度离子,交换势的引入是必要的,特别在低能的情况下.

[1] T. D. Mark and G. H. Dunn, Electron Impact Ionization (Springer-Verlag, Berlin, 1986).
[2] J. Botero and J. A. Stephens, International Bulletin on Atomic and Molecular Data for Fusion, **50-51**(1996).
[3] D. L. Matthews *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **54**(1985), 110; H. D. Rosen *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **54**(1985), 106; B. J. McGowan *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **59**(1987), 2157.
[4] Zhi-Zhan Xu *et al.*, *Appl. Phys.*, **B50**(1990), 147.
[5] H. L. Zhang and D. H. Sampson, *Phys. Rev.*, **A42**(1990), 5378.
[6] D. Fang, W. Hu, C. Chen, Y. Wang *et al.*, *At. Data and Nucl. Data Tables*, **61**(1995), 91.
[7] C. Chen, W. Hu, D. Fang, Y. Wang and F. Yang, *At. Data and Nucl. Data Tables*, **64**(1996), 301.
[8] S. M. Younger, *Phys. Rev.*, **A23**(1980), 1138.
[9] M. E. Bannister, *Phys. Rev.*, **A54**(1996), 1435.
[10] D. Fang, W. Hu, J. Tang, Y. Wang and F. Yang, *Phys. Rev.*, **A47**(1993), 1861.
[11] W. Hu, D. Fang, Y. Wang and F. Yang, *Phys. Rev.*, **A49**(1994), 989.
[12] R. D. Cowan, The Theory of Atomic Structure and Spectra (University of California Press, Berkeley, 1981).
[13] M. H. Chen, *Phys. Rev.*, **A31**(1984), 1449.
[14] S. M. Younger, *Phys. Rev.*, **A22**(1980), 111; D. C. Griffin, C. Bottcher and M. S. Pindzola, *Phys. Rev.*, **A36**(1987), 3642.
[15] S. M. Younger, *Phys. Rev.*, **A24**(1981), 1272; 1278.
[16] D. L. Moores, *J. Phys.*, **B5**(1972), 286.

- [17] H. Tawara and T. Kato, *At. Data and Nucl. Data Tables*, **36**(1987), 167.
- [18] M. J. Diserens *et al.*, *J. Phys.*, **B17**(1984), L621.
- [19] E. D. Donets *et al.*, *Sov. Phys. JETP*, **53**(1981), 466.
- [20] K. T. Dolder *et al.*, *Proc. Roy Soc. London*, **A274**(1963), 546.
- [21] A. Muller *et al.*, *J. Phys.*, **B13**(1980), 1877.
- [22] A. Salop, *Phys. Rev.*, **A14**(1976), 2905.
- [23] A. Danjo *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **53**(1984), 4091.
- [24] E. J. McGuire, *Phys. Rev.*, **A28**(1983), 2091.
- [25] D. C. Gregory *et al.*, *Phys. Rev.*, **A27**(1983), 724.
- [26] H. Jakubowicz and D. L. Moores, *J. Phys.*, **B14**(1981), 3733.
- [27] Fang Du-fei, Wang Yan-sen *et al.*, *Acta Physica Sinica*, **42**(1993), 40 (in Chinese).
- [28] G. S. Voronov, *At. Data and Nucl. Data Tables*, **65**(1997), 1.

DISTORTED-WAVE CALCULATIONS OF THE ELECTRON-IMPACT IONIZATION FOR LOWLY AND MEDIUMLY IONIZED IONS^{*}

YAN SHI-XIANG CHEN CHONG-YANG TENG ZHOU-XUAN WANG YAN-SEN

(T. D. Lee Physics Laboratory, Institute of Modern Physics, Fudan University, Shanghai 200433)

SUN YONG-SHENG

(Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088)

(Received 15 July 1997; revised manuscript received 5 October 1997)

ABSTRACT

A distorted-wave Born exchange (DWBE) approximation is used to calculate the cross sections of electron-impact ionization for Ne^+ , $\cdots$, Ne^{6+} . The comparison shows good agreement between theoretical and experimental results. We give empirical formulas with high precision to meet the requirements of applications. The validity of the DWBE method in lowly ionized ions and the affect of the exchange potential on the calculated results are also discussed.

PACC: 3480D

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (No. 19774016) and by a Research Grant from the China Academy of Engineering Physics.