

Si²⁺ 离子与氢原子碰撞电离过程的 CTMC 计算^{*}

刘春雷^{1,2)} 何 斌¹⁾ 宁 焯¹⁾ 颜 君¹⁾ 王建国¹⁾

¹⁾ 北京应用物理与计算数学研究所计算物理实验室, 北京 100088)

²⁾ 中国工程物理研究院研究生院, 北京 100088)

(2004 年 10 月 14 日收到, 2004 年 11 月 29 日收到修改稿)

应用经典径迹蒙特卡罗方法研究 Si²⁺ 离子与氢原子碰撞电离反应过程. 计算了随入射离子能量变化的总截面、出射电子随角度和能量变化的一阶、二阶微分截面, 及出射电子随入射离子能量变化的平均能量. 根据计算结果, 讨论展示了软碰撞、电子转移到入射离子连续态、两体相遇碰撞等电离机理, 阐明了它们对碰撞总截面、微分截面、电离电子能量的影响. 通过计算出射电子到入射离子和靶的距离比的电离电子数分布研究了不同入射离子能量“鞍点”电离机理的可能性.

关键词: 重粒子碰撞过程, 经典径迹蒙特卡罗方法, 电离机理

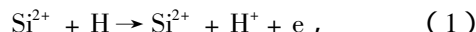
PACC: 5220H, 3490, 3400, 0365N

1. 引 言

重粒子碰撞过程广泛存在于天体物理和实验室等离子体环境中, 对离子电离平衡和能量输运都有重要影响. 最近的极端紫外和 x 射线卫星 extreme ultraviolet Explorer 和 Chandra x-ray observatory (CXO) 观测发现, 从很多彗星如 Hale-Bopp^[1] 和 Hyakutake^[2] 及行星大气中发射极端紫外和 x 射线. Cravens^[3] 和 Haberli 等^[4] 认为这些极端紫外和 x 射线来源于高电荷态的太阳风粒子(如 O^{q+}, C^{q+}, Ne^{q+}, Si^{q+}) 与彗星中性粒子(包括 H₂O 和它的解离产物 H, H₂, O, OH, 和 CO, CO₂) 的碰撞电荷转移过程. extreme ultraviolet explorer 和 CXO 的观测也确实在彗星 Hyakutake 发现了 O⁴⁻⁶⁺, C^{4,5+} 和 Ne⁷⁺ 线^[5], 在彗星 McNaught-Hartley 发现了 O⁶⁺ 和 O⁷⁺ 线. 类似的木星极光被相信是由于多电荷的 O^{q+} 和 S^{q+} 离子(可能 Na^{q+}, C^{q+} 和 Si^{q+} 等离子) 与木星大气层中 H, He, H₂ 发生碰撞产生的. 在磁约束聚变实验中, 在低温的等离子体边和偏滤器区, 会有较多的质子、杂质离子与中性的氢分子、氢原子甚至碳氢化合物发生重粒子碰撞过程, 并形成一种重要的等离子体冷却机理^[6,7]. 在惯性约束聚变(inertial confinement fusion,

ICF) 实验中, 聚变产物 α 粒子及被加热的高能 H, D, T 离子的输运过程和诊断都涉及重粒子碰撞过程, 包括碰撞激发、电离、单(多)电子俘获及相关的自电离和 x 射线发射等. 在最近的 ICF 实验中, 发现了一些反常的硅离子伴线谱^[8], Rosmej 等^[9] 认为这是由于重粒子碰撞过程产生的. 目前这些领域正朝着精密化的方向发展, 高精度的重粒子碰撞参数是理论模拟所不可少的. 特别是碰撞电离过程是入射离子最重要的能量损失方式之一, 在入射离子能量大于每个核子上百个千电子伏时, 它的截面往往是最大的非弹性散射截面. 而硅粒子是太阳风中的重要离子, 又往往是托克马克中的重要杂质, 也经常是构成 ICF 靶丸的成分之一. 因此, 硅元素的重粒子碰撞电离过程具有重要的应用意义.

本文利用经典径迹蒙特卡罗(classical trajectory Monte Carlo, CTMC)方法研究了中高能的 Si²⁺ 离子与氢原子碰撞电离过程



计算了随入射离子能量变化的总截面、出射电子随角度和能量变化的一阶、二阶微分截面, 及出射电子随入射离子能量变化的平均能量. 对该碰撞系统, 我们还没有发现任何已发表的理论或实验数据可以与我们的计算结果相比较. 根据计算结果, 我们讨论展示了软碰撞、电子转移到入射离子连续态、两体相遇

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 10344001 和 10174009)资助的课题.

碰撞等电离机理,阐明了它们对碰撞总截面、微分截面、电离电子能量的影响.下面介绍一下 CTMC 方法及计算结果和一些讨论.

2. 理论研究方法

在低能区的离子与原子碰撞中,主要的反应过程是电荷转移.随着入射离子能量的增加,碰撞电离过程逐渐变得重要起来.当入射离子能量大于每个核子几千电子伏时,碰撞电离过程已经不能被忽略.作为一个多中心的量子多体问题,同时在电离能域由于碰撞电离、碰撞激发和电荷转移是相互竞争的过程,目前还没有一个好的量子力学方法统一处理该能区的各种反应过程.人们广泛采用的是 CTMC 方法.该方法把所有的电子、离子作为经典粒子,采用经典方程来研究各种粒子的运动和反应过程. CTMC 方法的优点是包含了相互竞争的各种过程,在中高能区具有较高的计算精度,并且计算简单,适于大规模产生数据.目前在实际应用中的中高能重粒子碰撞参数主要是利用 CTMC 方法产生的,它的缺点是没有量子效应的影响,特别是对电子部分的处理有一定的缺欠. CTMC 的详细描述可以见文献 [10—16],这里仅做一个简单介绍.

CTMC 方法利用从大量的初始入射离子和靶态中抽样的方法来研究重粒子碰撞过程^[10,11].以本文的 Si^{2+} 离子与氢原子碰撞系统为例,把它作为一个三体系统来研究:入射离子 Si^{2+} (入射离子中的电子只作为一个屏蔽势来考虑)、靶中的一个电子、靶离子 H^+ ,它们之间的相互作用为库仑相互作用.

第一步确定入射离子、靶离子和靶中电子的初始状态.假定入射离子的碰撞参数为 b 、入射能量为 E_p (速度 $v_p = (2E_p/M_p)^{1/2}$, M_p 为入射离子质量)和入射方向为 Z 方向,见图 1.

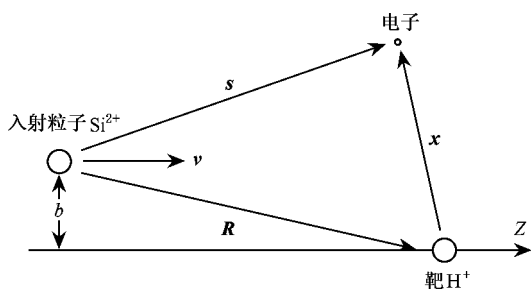


图 1 入射离子、靶核、靶中电子初始位置示意图

对靶中的电子,利用微正则分布给出靶电子的初始动量分布.对氢原子靶,该分布与量子平均动量分布是一致的.有了动量分布以后,在目前的库仑势情况下,束缚电子的经典轨道是一个闭合的椭圆轨道.再结合随机参数可以得到电子的动量和空间坐标^[10,11].

第二步利用迭代方法求解三体系统经典运动方程.系统运动方程可由经典 Hamilton 方程决定(文中如果没有特别说明,所有量都是原子单位)

$$F_j = \frac{dP_j}{dt} \quad j = 1, 2, 3, \quad (2)$$

j 表示入射粒子、靶电子、靶核, F_j 是某个粒子所受到的力,由 V_T, V_P, W 决定, V_T, V_P, W 分别是电子-靶核、电子-入射粒子、入射粒子-靶核之间的相互作用势.由于 Si^{2+} 离子本身也是一个多电子系统,与靶电子的相互作用我们用一个半经验的模型参数势来表示^[17]:

$$V(r) = \frac{Z - (N - 1) \left[1 - \frac{1}{\eta / \xi (e^{\xi r} - 1) + 1} \right]}{r}, \quad (3)$$

参数值是通过求解 Hartree-Fock 方程,然后经过参数拟合得到的.对入射离子为 Si^{2+} 的情况,参数值 $\eta = 3.26$, $\xi = 1.012$,目前的靶是氢原子,电子与靶核的相互作用是清楚的,如果是多电子靶,也可以利用类似的方法得到参数势.对每一个径迹计算完成后,利用电子相对于入射离子和靶核的经典能量(包括束缚能和动能)来决定发生的过程是碰撞电荷转移、激发、电离或弹性碰撞过程.对态选择的电荷转移或碰撞激发截面计算,可以利用波尔模型并做一个经典量子对应^[18].对目前的非裸核入射离子,我们利用量子亏损方法对波尔模型进行修正^[14].对所有的径迹进行分类统计后,可以计算各种过程的反应截面.

对碰撞电离过程,除了计算随入射离子能量变化的总截面外,也可以计算出射电子随电子能量或出射角度的一阶微分截面或同时随出射电子能量和方向变化的二阶微分截面.利用公式

$$\sigma = \frac{\Delta N}{N_t} \times \pi \times b_{\max}^2 \quad (4)$$

可计算出电离总截面,其中 ΔN 为电离径迹数, N_t 为总的径迹数, b_{\max} 为最大碰撞参数.总径迹数的选择依赖于考虑的碰撞过程和计算的碰撞能量,原则上必须保证统计误差足够小,可以用 $(\Delta N)^{1/2} / \Delta N$ 来估计统计误差.一般随着碰撞能量的增加,需计算的

总径迹数要随着增加.随着入射离子能量的增加,需计算的最大碰撞参数逐渐减小,因为高碰撞能量的过程主要发生在小碰撞参数区,但要细致检查收敛性.

计算电离电子随角度变化的一阶微分截面,可以采用公式

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{1}{2\pi\sin(\theta)} \times \frac{\Delta N}{N_i\Delta\theta} \times \pi \times b_{\max}^2, \quad (5)$$

其中 ΔN 是对应于从 $\theta - \Delta\theta/2$ 到 $\theta + \Delta\theta/2$ 范围内的径迹数, θ 为电离电子出射方向相对于入射离子初始运动方向的角度. 电离电子随能量变化的一阶微分截面,可以采用公式

$$\frac{d\sigma}{dE_e} = \frac{\Delta N}{N_i\Delta E_e} \times \pi \times b_{\max}^2, \quad (6)$$

其中 ΔN 是对应于从 $E_e - \Delta E_e/2$ 到 $E_e + \Delta E_e/2$ 范围内的径迹数, E_e 为电离电子的能量.

电离电子随电子能量和角度变化的二阶微分截面可以表示为

$$\frac{d^2\sigma}{dE_e d\Omega} = \frac{1}{2\pi\sin(\theta)} \times \frac{\Delta N}{N_i\Delta E\Delta\theta} \times \pi \times b_{\max}^2, \quad (7)$$

其中 ΔN 是对应于从 $\theta - \Delta\theta/2$ 到 $\theta + \Delta\theta/2$, 从 $E_e - \Delta E_e/2$ 到 $E_e + \Delta E_e/2$ 范围内的径迹数.

电离电子的平均能量为

$$\bar{E}_e = \sum_{i=1}^{N_{\text{ion}}} E_i / N_{\text{ion}}, \quad (8)$$

其中 E_i 为电离电子的能量, N_{ion} 为电离电子的总数.

3. 计算结果和讨论

我们计算了 Si^{2+} 离子和氢原子系统入射离子能量在每个核子 1keV/u 到 1 MeV/u 区间的总碰撞电离截面和电离电子的平均能量,及一些能量点的电离电子随能量和角度变化的一阶、二阶微分截面. 在我们的计算中, N_i 的取值为 $N_i = 1 \times 10^7$, b_{\max} 从 0 到 5.

3.1. 二阶微分截面

利用(7)式可以计算电离电子随能量和发射角度变化的二阶微分截面. 图 2, 图 3 分别显示了入射离子能量为 100 和 400 keV/u 电离电子随能量变化的二阶微分截面. 对二阶微分截面(7)式中在某个小的电子能量和小的立体角内的 ΔN 往往非常小, 为了保证统计误差限制在一定范围内、计算的曲线

较为光滑,我们必须计算非常多的径迹数,目前我们采用的总径迹数为二千万($N_i = 1 \times 10^7$).

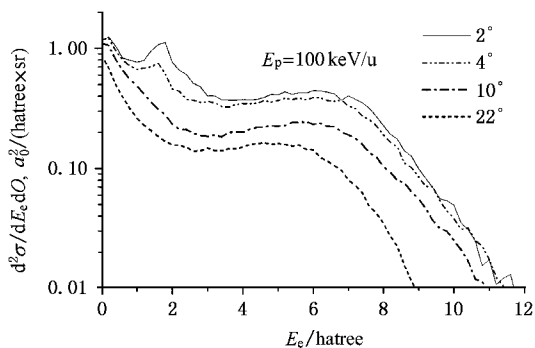


图 2 电离电子随能量变化的二阶微分截面(入射离子能量为 $E_p = 100\text{keV/u}$)

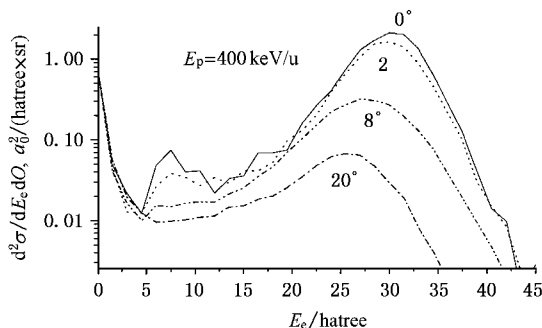


图 3 电离电子随能量变化的二阶微分截面(入射离子能量 $E_p = 400\text{keV/u}$)

在图 2 和图 3 中,对于较小的出射角如 0° — 2° , 可以看到有三个峰值. 图 2 中出射电子能量低于 1 个原子单位能量的峰和图 3 中电子能量低于 5 个原子单位能量的峰是软碰撞(soft collision)峰^[19], 软碰撞是指靶粒子受到入射粒子的碰撞后,靶中电子被激发到靶粒子连续态,该电离机理产生的电子能量较低,一般在零点最大,但图 2 中 2° 发射角的峰值并不在能量零点,这可能是由于两体相遇碰撞造成的,下面会进一步讲到. 软碰撞的另一个特征是它随电子发射角的变化不大,这也是软碰撞机理产生的电离电子占总电离电子主要部分的原因^[20]. 图 2 中出射电子能量在 1—2 个原子单位能量的峰和图 3 中电子能量在 5—10 个原子单位能量的峰是电子被俘获到入射粒子连续态(electron captured to continuum state, ECC)的峰,它与电荷转移过程的不同是电荷转移中的靶电子被俘获到入射离子束缚态. 因电子转移到入射粒子连续态,所以有着与入射粒子几乎相

同的速度和方向.对于入射离子能量 $E_p = 200 \text{ keV/u}$ 和 400 keV/u 的情况,相同速度的电子动能分别约为 4 a.u. 和 8 a.u. ,与我们的计算结果基本符合.因 ECC 峰必须与入射粒子方向一致,所以随着夹角的增大,ECC 峰迅速减小,到 8° 时,峰已经不明显了,ECC 电离机理对经过角度积分后的一阶微分截面贡献不大,对总截面的贡献一般小于几个百分点^[20].图 3 中的 ECC 的峰由于径迹数很少,误差是 12% ,从而导致在二阶微分截面中曲线不是很光滑.在数值上, $E_p = 100 \text{ keV/u}$ 时的 ECC 峰比 $E_p = 400 \text{ keV/u}$ 时大一个数量级以上,这是由于后者的速度比前者的快了一倍,作用时间加长,所以有足够时间俘获更多粒子,可以预期入射离子的能量越低,ECC 机理对电离过程的相对影响越大.

第三个是在较高能量处的峰,即两体相遇碰撞(binary encounter, BE)峰^[19].此时入射粒子与电子具有很强的相互作用,可以忽略靶对电子的作用,入射粒子与电子近似为两体相互作用.这种情况下两者之间具有大的动量转移,电子可获得很高的能量.假定电子在入射粒子方向动量为零,利用能量动量守恒,可得到电离电子的能量为 $E_e = 4T \cos^2 \alpha$ (T 为电子速度等于入射粒子速度时所具有的能量).但由于靶中的电子具有一定的初始动量,因此该峰具有一定的展宽.随着角度增加,峰值位置逐渐变小,在三维图中将形成一个从低能到高能脊^[20].根据能量动量守恒,在求解二次方程中,会产生两个解,一个对应在较高能区的 BE 峰,另一个对应在靠近能量零点但不等于零附近的峰值^[21],我们认为图 2 中 2° 发射角的靠近能量零点但不等于零的峰值可能是这样产生的.在重粒子碰撞电离中,较高能量的电子主要是 BE 电离机理产生的.

对入射离子能量为 $E_p = 100 \text{ keV/u}$ 和 400 keV/u 的情况,当电子发射角 $\theta = 0^\circ$, BE 峰值应分别出现在 8 a.u. 和 32 a.u. ,图 2 和图 3 与此符合得很好.对比 BE 峰强度可以发现,在入射离子能量为 400 keV/u 时 BE 峰较大,这是由于高能入射时,电离主要发生在碰撞参数 b 较小的区域,电子更容易获得较大的动量转移,但随着电子出射角的增加,电离截面比入射离子能量为 100 keV/u 时更快地减少,所以从积分后的一阶或总截面来看,高的入射离子能量未必会有较高的 BE 机理的电离贡献.

图 4 为入射粒子能量为 400 keV/u 电离电子随角度分布的二阶微分截面.较低能量电离的电子,大

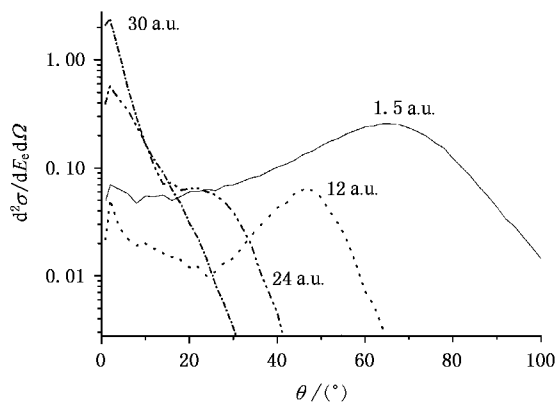


图 4 电离电子随角度变化的二阶微分截面(入射离子能量为 $E_p = 400 \text{ keV/u}$)

部分以接近 90° 的大角度射出.这是由于低能电子大部分是由软碰撞所产生的.低能电子有着较小的速度,在入射离子靠近靶和远离靶两个时间段内移动了较小的距离,入射粒子对电子的综合作用相当于在垂直于入射粒子方向有一个作用力,导致电子更趋向于垂直于入射粒子方向运动,从而以大角度射出.随着电离电子能量的增大,入射离子转移给电子的动量增加,并且在跟随入射粒子运动方向运动的电子增多,导致出射角度减小.能量为 30 a.u. 的电离电子在小角度时的峰值,是由两体碰撞所产生的峰值,其能量大小也与图 3 中 BE 峰的能量相同;而较低能量的电子,小角度的两体碰撞峰值较小,说明两体碰撞的结果是大的动量转移,产生高能电子,且高能电子占两体碰撞电离的主要部分,出射角度很小.而从整个电离过程看,被电离的电子中高能电子也主要是由两体碰撞机理产生,且集中在小的角度.

3.2. 一阶微分截面

利用(5)和(6)式可以计算电离电子随能量和角度变化的一阶微分截面.

图 5 为电离电子随能量变化的一阶微分截面,图中显示了不同入射能量下的五条曲线,对应的入射离子能量分别为 $20, 100, 200, 400, 800 \text{ keV/u}$.这些截面都是随着能量增加迅速下降,然后形成一个较高能量的平台.一阶微分截面的最大值均出现在非常靠近零点的位置上,即大部分被电离的电子都是较低的能量的软碰撞电子,截面以软碰撞为主要机理.特别对于高能入射粒子,软碰撞所占比重更大.一般情况下,软碰撞产生的电离电子数要占总电离电子数 50% 以上^[19].正如在双微分截面中讨论的一

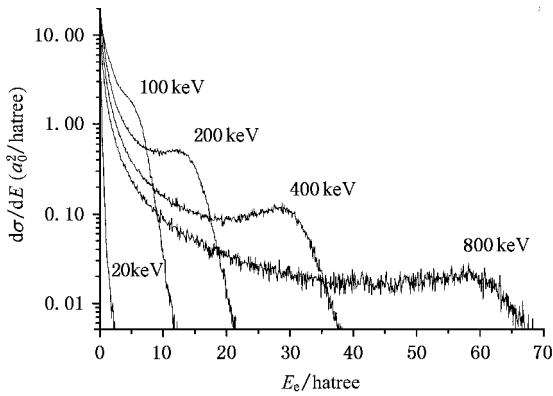


图 5 电离电子随能量变化的一阶微分截面

样,在目前计算的能区,ECC 机理的贡献是很小的,在图 5 中看不到它的效应.能量比较高的电离电子主要是 BE 机理的贡献,超过 BE 机理起作用的区间,截面很快下降;由于 BE 位置 $E_e = 4T\cos^2\theta$ 对 θ 积分,从而形成了一个平台.图中由于高能区电离粒子数较少,误差达到 14%,可看到曲线已变得非常不光滑,这也正体现了 CTMC 计算的特征.

图 6 为电离电子随角度分布的一阶微分截面.入射离子能量与图 5 相对应.图中显示大部分被电离电子散射方向集中在 0° — 90° 之间,大角度散射的只占小部分.随着入射离子能量的增大,峰值位置逐渐由低角度向 90° 位置移动.其原因可从经典理论解释:入射粒子对电子的作用时间可分为两个部分,入射粒子靠近靶时和远离靶时.在入射粒子不断靠近靶时,靶中的电子在库仑力作用下,不断远离靶核而接近入射粒子.由于靶电子和入射粒子距离的减小,使电子在入射粒子远离时受到的库仑力作用大于靠近靶时的作用,从而电子运动方向趋向于入射粒子运动方向.低能时,入射粒子对电子的时间长,电子向入射粒子移动较长距离,从而使入射粒子在远离时受到的库仑力作用更大,电子跟随入射粒子运动方向被电离,即以小角度被电离.随着入射粒子能量的增大,作用时间减小,电子向入射粒子移动的距离减小,从而使电子在两个时间段内在入射粒子运动方向受到的力大小接近、方向相反而抵消,只显现出垂直于入射粒子运动方向的力的效果,即以接近 90° 方向被电离.

3.3. 电离总截面和电离电子平均能量

根据(4)式可以计算碰撞电离的总截面.图 7 是 Si^{2+} 离子与 H 原子碰撞电离总截面随入射离子能量

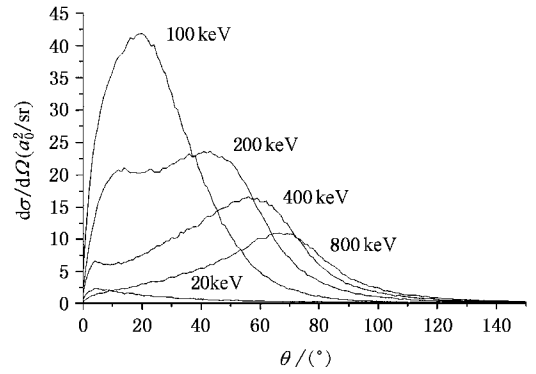
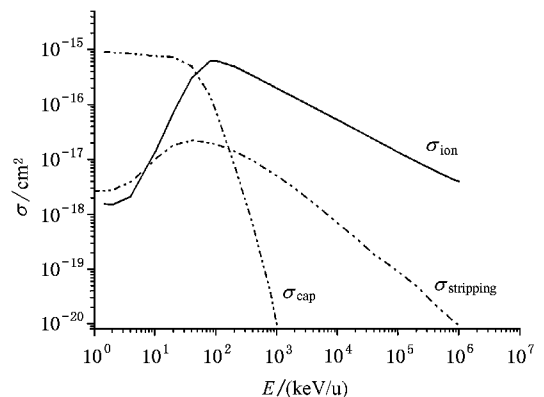


图 6 随电离电子角度变化的一阶微分截面

的变化,作为对比,我们也给出了利用 CTMC 计算的单电子俘获(single electron capture)和入射离子本身电离损失(stripping)的截面.可以看到,在低能区碰撞以单电子俘获过程为主,碰撞电离和入射离子电离损失都可以忽略不计.在碰撞能量大于 10 keV/u 以后,碰撞电离截面迅速增加,并在 200 keV/u 左右达到极大值;在碰撞能量大于 100 keV/u 时,电荷转移截面迅速单调下降,碰撞电离截面超过电荷转移截面,变成最主要的非弹性散射过程;在碰撞能量大于 400 keV/u 时,电离截面开始单调下降,可以通过拟合给出标度关系,具体形式为

$$\sigma = 1.04 \times E_p^{-0.577} (10^{-14} \text{ cm}^2), \quad (9)$$

但明显慢于电子俘获 $E_p^{-7/2}$ 的下降速度.同时可以看到入射离子电离损失在计算的整个能区都是不重要的.由于在碰撞能量大于 100 keV/u 时电离是最主要的碰撞过程,成为入射离子最重要的能量损失方式,将对宏观的高能粒子输运产生最大的影响.

图 7 Si^{2+} 与 H 原子碰撞系统中,电离总截面随入射离子能量的变化

在我们计算的较高能区(大于 100 keV/u),高能

粒子通过碰撞损失能量的机理主要是碰撞电离. 在天体物理应用中, 人们往往利用被电离电子的平均能量来定量地估计高能离子在星际空间、大气等环境中的能量损失, 因此电离电子的平均能量是一个重要的应用参量. 利用(8)式可以很方便地计算电离电子平均能量.

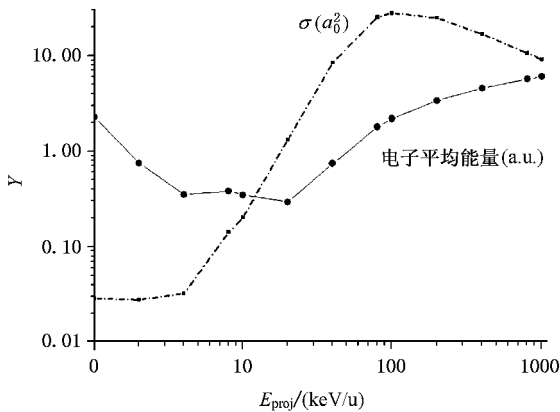


图 8 电离电子平均能量随入射离子能量的变化

图 8 给出了电离电子平均能量随入射离子能量的变化, 总的趋势是随入射离子能量的增加而增加. 入射离子能量增加近三个量级, 但电离电子平均能量只增加了一个量级, 这主要是由于碰撞电离以软碰撞为主, 而软碰撞的电子能量变化并不大^[20].

3.4. 电离电子在入射离子与靶核之间的分布

鞍点(saddle point)是指电子相对于靶粒子和相对于入射粒子的势相等的点^[19]. 由于此处电子受力均匀, 从而形成一个较为“自由”的区域, 大量电子处于此区域, 形成鞍点电离. 目前仍有大量文章对鞍点电离机理进行讨论^[22-25]. 我们希望通过计算最终电离电子相对于入射离子和靶核空间分布的方法来探讨在较高的碰撞能区这种机理的可能性.

我们计算了入射离子能量为 $E_p = 100, 400 \text{ keV/u}$ 时, 反应后末态电离电子在靶核与入射离子之间

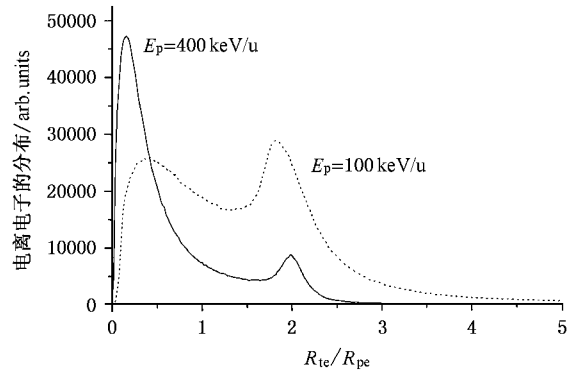


图 9 电离电子随它与靶核和入射离子距离比的分布(入射离子能量分别为 $E_p = 100 \text{ keV/u}$ 和 $E_p = 400 \text{ keV/u}$)

的分布, 如图 9 所示. 图中的横坐标为电子和靶核的距离(R_{te})与电子和入射粒子之间距离(R_{pe})的比值. 由图可知, 在 $E_p = 100 \text{ keV/u}$ 时, 有大量电子位于 $R_{te}/R_{pe} \approx 1/2$ 处, 从而预示了鞍点电离存在的可能性, 因为在该点正是鞍点电离的位置. 在 $E_p = 400 \text{ keV/u}$ 时, 由于入射粒子速度很快, 电子没有足够速度运动到 $R_{te}/R_{pe} \approx 1/2$ 处, 鞍点电离机理不成立.

4. 结 论

本文应用经典径迹蒙特卡罗方法计算了 Si^{2+} 离子与氢原子中高能碰撞电离反应过程. 计算了电离电子随能量、角度变化的二阶微分截面, 并分析了软碰撞峰、电子被俘获到入射粒子连续态峰、两体相遇碰撞峰的产生机理. 计算了一阶微分截面, 并分析了在不同入射能量下, 各种碰撞机理对截面的贡献大小及变化趋势, 以及产生的原因. 计算了电离总截面, 得到了截面的标度关系. 计算了电离电子随入射离子能量变化的平均能量, 分析了其缓慢增长的原因. 本文还通过计算到入射离子和靶的距离比电离电子数分布, 研究了不同入射离子能量下“鞍点”电离机理的可能性.

[1] Owens A et al 1998 *Astrophys. J.* L **47** 493

[2] Lisse C M et al 1996 *Science* **274** 205

[3] Cravens T E 1997 *Geophys. Res. Lett.* **24** 105

[4] Haberli R M et al 1997 *Science* **275** 939

[5] Krasnopolsky V A et al 2001 *Astrophys. J.* **549** 629

[6] Krasheninnikov S I, Pgarov A Y and Sigmar D J 1996 *Phys. Lett. A* **214** 295

Krasheninnikov S I et al 1996 *Phys. Lett. A* **222** 251

[7] Janev R K, Kato T and Wang J G 2000 *Phys. Plasma* **7** 4364

[8] Elton R C et al 2000 *J. Quant. Spectra. Radiat. Transf.* **65** 185

- [9] Rosmej F B *et al* 2002 *Phys. Rev. E* **66** 056402
- [10] Abrines R and Percival I C 1966 *Proc. Phys. Soc.* **88** 861
- [11] Abrines R and Percival I C 1966 *Proc. Phys. Soc.* **88** 873
- [12] Olson R E and Salop A 1977 *Phys. Rev. A* **16** 531
- [13] Schultz D R, Reinhold C O and Olson R E 1992 *Phys. Rev. A* **46** 666
- [14] Rakovic M J, Schultz D R, Stancil P C and Janev R K 2001 *J. Phys. A : Math. Gen.* **34** 4753
- [15] Stancil P C *et al* 2001 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **34** 2481
- [16] Wang J G *et al* 2002 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **35** 3137
- [17] Garvey R H *et al* 1975 *Phys. Rev. A* **12** 1144
- [18] Becker R L and MacKellar A D 1984 *J. Phys. B* **17** 3923
- [19] Stolterfoht N *et al* 1997 *Electron Emission in Heavy Ion-Atom Collisions* (Springer-Verlag , Heidelberg)
- [20] 宁 焯、何 斌、刘春雷、颜 君、王建国,已投物理学报 (2004)
- [21] Fiol J *et al* 2003 *Phys. Rev. A* **67** 050702(R)
- [22] Illescas C, Rabadan I and Riera A 1997 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **30** 1765
- [23] Illescas C, Rabadan I and Riera A 1998 *Phys. Rev. A* **57** 1809
- [24] Sidky E Y, Illescas C and Lin C D 2001 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **34** L163
- [25] Afaneh F *et al* 2002 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **35** L229

CTMC calculation of $\text{Si}^{2+} + \text{H}$ impact ionization *

Liu Chun-Lei^{1,2)} He Bin¹⁾ Ning Ye¹⁾ Yan Jun¹⁾ Wang Jian-Guo¹⁾

¹⁾ *Laboratory of Computational Physics, Institute of Applied Physics and Computational Mathematics, Beijing 100088, China*

²⁾ *Graduate School, China Academy of Engineering Physics, Beijing 100088, China*

(Received 14 October 2004 ; revised manuscript received 29 November 2004)

Abstract

The $\text{Si}^{2+} + \text{H}$ collision ionization is studied using classical trajectory Monte-Carlo (CTMC) method. The total cross section as functions of the energy of incident projectile, single differential cross section and double differential cross section as a functions of the energy and the angle of the ejected electron are calculated. The ionization mechanisms of soft collision, electron capture to the continuum state, binary encounter collision are demonstrated. The effect of "saddle point" is also discussed by calculating the ejected electron distribution depending on the ratios of distances between electron and target and between electron and projectile.

Keywords : heavy-particle collision, classical trajectory Monte-Carlo method, ionization mechanism

PACC : 5220H, 3490, 3400, 0365N

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10344001, 10174009).