

基于多体经典轨迹蒙特卡罗方法的 H^+ , Li^{3+} , Be^{4+} , O^{7+} 与He原子电荷交换过程

李国壮 张晟 焦志宏 李新霞

Charge transfer in collisions of H^+ , Li^{3+} , Be^{4+} and O^{7+} ions with He atom based on 4-classical trajectory Monte Carlo method

Li Guo-Zhuang Zhang Sheng Jiao Zhi-Hong Li Xin-Xia

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 71, 035201 (2022) DOI: 10.7498/aps.71.20211470

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.71.20211470>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

考虑共振电荷转移的离子引出过程理论研究

Numerical research on ion extraction with resonant charge exchange process

物理学报. 2021, 70(14): 145201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210105>

态选择电荷交换实验测量以及对天体物理软X射线发射模型的检验

Experimental measurement of state-selective charge exchange and test of astrophysics soft X-ray emission model

物理学报. 2021, 70(8): 080702 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201685>

基于蒙特卡罗方法的4H-SiC(0001)面聚并台阶形貌演化机理

Formation of step bunching on 4H-SiC (0001) surfaces based on kinetic Monte Carlo method

物理学报. 2019, 68(7): 078101 <https://doi.org/10.7498/aps.68.20182067>

激发态电荷转移有机体的多铁性研究

Excited charge-transfer organics with multiferroicity

物理学报. 2018, 67(15): 157509 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180759>

考虑空间电荷层效应的氧离子导体电解质内载流子传输特性

Charge carrier transport in oxygen-ion conducting electrolytes with considering space charge layer effect

物理学报. 2021, 70(6): 068801 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20201651>

低能高电荷态离子与Al表面作用产生的X射线

X-ray emission produced by interaction of slow highly charged ions with Al surfaces

物理学报. 2021, 70(19): 193201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210757>

基于多体经典轨迹蒙特卡罗方法的 H^+ , Li^{3+} , Be^{4+} , O^{7+} 与 He 原子电荷交换过程*

李国壮¹⁾²⁾⁴⁾ 张晟^{2)4)†} 焦志宏³⁾⁴⁾ 李新霞^{1)‡}

1) (南华大学核科学技术学院, 衡阳 421001)

2) (中国科学院近代物理研究所, 兰州 730000)

3) (西北师范大学物理与电子工程学院, 兰州 730030)

4) (先进能源科学与技术广东省实验室, 惠州 516003)

(2021 年 8 月 10 日收到; 2021 年 9 月 16 日收到修改稿)

经典轨迹蒙特卡罗 (CTMC) 方法是研究离子-原子碰撞系统电荷交换过程的常用方法, 广泛应用于天体物理以及实验室等离子体环境下重粒子碰撞过程的研究. 本文利用四体碰撞模型 (4-CTMC) 研究了包括两个束缚电子的四体碰撞过程, 通过数值求解四体碰撞系统的哈密顿运动方程, 计算了高电荷态入射离子 (Li^{3+} , Be^{4+} 和 O^{7+}) 同氢原子在大能量范围的单、双电子电离和俘获截面. $\text{H}^+ + \text{He}$ 碰撞截面的计算中, 在 50—200 keV/amu 的入射能区, 4-CTMC 的结果几乎重复了实验结果. 在高电荷态入射情形下, 4-CTMC 计算的单电子电离和俘获截面值相较于三体碰撞模型 (3-CTMC) 在 100—500 keV/amu 的入射能区内与实验符合更好. 尽管 4-CTMC 和 3-CTMC 忽略了电子关联, 均高估了双电子电离和俘获截面 (与实验值相比), 但 4-CTMC 的结果更接近实验.

关键词: 高电荷态入射离子, 4-CTMC, 电荷交换过程

PACS: 52.20.Hv, 34.70.+e

DOI: 10.7498/aps.71.20211470

1 引言

中高能区域 (碰撞能: 几十 keV/amu — 百 keV/amu) 重粒子碰撞的各种反应通道截面对于天体物理^[1,2]、受控热核聚变^[3,4]、高能量密度物理实验^[5,6]以及重离子治疗^[7–9]都有十分重要的意义. 重粒子碰撞的常用理论模型主要包括平面波玻恩近似 (plane-wave Born approximation, PWBA)^[10,11]、连续扭曲波 (continuum distorted wave, CDW) 近似^[12,13]、原子轨道紧耦合 (atomic-orbital close-coupling, AOCC) 方法^[14]、分子轨道紧耦合 (molecu-

lar-orbital close-coupling, MOCC) 方法^[15,16]、含时密度泛函方法 (time-dependent density functional theory, TDDFT)^[17,18]和经典轨迹蒙特卡罗 (classical trajectory Monte Carlo, CTMC) 方法^[19]等. PWBA 和 CDW 方法基于确定反应通道的电子初末态波函数计算该通道的截面, 因此不能同时给出不同反应通道的截面, 这不利于多通道问题的分析. TDDFT 通过完全求解时间依赖的电子密度给出不同反应通道的截面, 对计算精度要求很高. 半经典的轨道紧耦合方法中, MOCC 方法常用于低能 (< 1 keV/amu) 离子-分子碰撞问题, AOCC (MOCC) 方法的主要优势在于能够清晰地展示各

* 国家自然科学基金 (批准号: 11775108) 资助的课题.

† 通信作者. E-mail: halifaxy@gmail.com

‡ 通信作者. E-mail: li_xx@usc.edu.cn

原子态 (分子态) 之间的跃迁过程. 如果不关注各态之间的激发或者退激发过程, 利用经典的 CTMC 方法计算电离和俘获截面具有计算效率高、容易扩展到多电子体系的优势^[20,21]. 当入射离子为高电荷态离子时, 三体碰撞模型 (3-CTMC) 由于使用类氢模型代替双电子体系而容易在低能区域 (<100 keV/amu) 高估电离和俘获截面^[22,23], 特别当电离截面与俘获截面相差 5 倍时, 计算结果同实验值有较大偏差^[24]. 显然在双电子体系靶的碰撞研究中应该选择四体碰撞模型 (4-CTMC). Kirschbaum 和 Wilets^[25] 提出含有海森伯不确定原理和泡利不相容原理的 Kirschbaum-Wilets CTMC (KW-CTMC) 模型, 可有效地避免双电子体系下的经典自电离. Olson 等^[26] 在高电荷态离子入射情形下忽略了双电子系统的电子间相互作用, 利用 Born 原子模型研究了电荷交换过程. Frémont^[27,28] 利用 KW-CTMC 模型计算了 3.6 MeV 下的 Au⁵³⁺ 同 He 的双微分截面. Bachi 和 Otranto^[29] 研究了 50—300 keV 能量区间的 H⁺ 同 He 原子碰撞体系中电子间相互作用对截面的影响. Jorge 等^[30] 提出 switching CTMC (S-CTMC) 方法研究了 20—200 keV 能量区间稳定负氢离子的形成. 在 S-CTMC 方法中, 当靶电子和炮弹的电子束缚于同一原子时, 四体模型转换成三体模型计算, 而有电子电离或俘获时, 则转换回四体模型. 当前的研究主要集中在几百 keV 的入射能量区间内, 还未见有对较大入射能量区间 (0.1—5 MeV) 碰撞过程的研究. 高电荷态的碰撞过程在可控热核聚变或者天体物理研究具有重要意义: 如托克马克装置第一壁材中被化学腐蚀而完全剥离的锂和铍离子^[31,32] 与等离子体芯部 He 原子碰撞的电荷交换过程^[4,33], O⁷⁺ 射线同木星大气中 He 原子碰撞形成的极光现象^[34].

本文基于 4-CTMC 模型描述了包含有两个束缚电子的四体碰撞过程, 以质子、高电荷态入射离子 (Li³⁺, Be⁴⁺ 和 O⁷⁺) 同 He 原子的碰撞体系为例, 研究了在较大入射能量区间 (0.1—5 MeV) 下的作用截面. 在我们的程序中, 分别对靶原子的两个束缚电子进行逐步判断是否电离, 以更新靶核对电子的感应电荷. 在计算过程中为了保证计算精度同时节省计算时间, 给出了最优的入射离子释放距离和结束判据距离. 在低电荷态入射离子的计算案例中 (质子入射), 低于 200 keV/amu 能量区间内, 4-CTMC 计算的单电离截面更接近实验值, 原因

在于 4-CTMC 可以更新靶核感应电荷, 因此计算结果也更接近实验值. 在高电荷态入射离子的计算案例中 (Li³⁺ 和 Be⁴⁺ 入射), 在较大能量区间 (100—800 keV/amu) 内 4-CTMC 计算的单电子电离和俘获截面同实验值符合很好. 在双电子电离和俘获截面的计算中, 高能区的结果接近实验值. 整体上, 4-CTMC 比 3-CTMC 表现更好, 原因在于 4-CTMC 模型在避免了经典自电离的同时, 对包含有两个束缚电子的四体碰撞系统哈密顿运动方程求解.

2 理论模型

如图 1 所示, 四体碰撞过程要同时确定入射离子、靶核以及两个束缚电子的位置和动量.

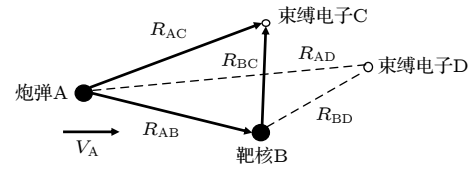


图 1 四体碰撞系统示意图

Fig. 1. Four-body collision system.

位置和动量可通过哈密顿运动方程确定:

$$\begin{aligned}\frac{dQ_j}{dt} &= \dot{Q}_j = \frac{\partial H}{\partial P_j}, \\ \frac{dP_j}{dt} &= \dot{P}_j = -\frac{\partial H}{\partial Q_j}, \\ j &= 1, 2, \dots, 12,\end{aligned}\quad (1)$$

式中, (Q_1, Q_2, Q_3) 表示入射离子 A 的位置坐标; (Q_4, Q_5, Q_6) 表示靶核 B 的位置坐标; (Q_7, Q_8, Q_9) 表示轨道电子 C 的位置坐标; (Q_{10}, Q_{11}, Q_{12}) 表示轨道电子 D 的位置坐标, P_j ($j = 1, 2, \dots, 12$) 为对应的动量. 四体碰撞系统的哈密顿量 H 表示为

$$\begin{aligned}H &= \frac{p_A^2}{2M_A} + \frac{p_B^2}{2M_B} + \frac{p_C^2}{2} + \frac{p_D^2}{2} + \frac{Z_A Z_B}{R_{AB}} + \frac{Z_A Z_C}{R_{AC}} \\ &+ \frac{Z_A Z_D}{R_{AD}} + \frac{Z_B Z_C}{R_{BC}} + \frac{Z_B Z_D}{R_{BD}}.\end{aligned}\quad (2)$$

(2) 式前 4 项为入射离子、靶核和两个束缚电子的动能项, 后 5 项分别为入射离子与靶核、入射离子与电子以及靶核与电子的相互作用项. 在碰撞过程中忽略了电子-电子的相互作用, 在初始状态中通过中心场近似的屏蔽因子引入^[21,26]. P_A, P_B, P_C 和 P_D 分别表示在实验室坐标系下入射离子、靶核以及两个束缚电子的动量, $R_{AB}, R_{AC}, R_{AD}, R_{BC}$

和 R_{BD} 表示入射离子、靶核同两个束缚电子之间的距离.

在计算中首先要确定束缚电子的初始状态, 在经典框架下描述束缚电子的初始空间分布和动量分布可以采用 Reinhold 和 Falcón^[21] 提出的微正则系综的方法:

$$\begin{aligned} x &= r(1 - v_r^2)^{1/2} \cos \varphi_r, \\ y &= r(1 - v_r^2)^{1/2} \sin \varphi_r, \\ z &= rv_r, \\ p_x &= \{2\mu[E - V(r)]\}^{1/2} (1 - v_p^2)^{1/2} \cos \varphi_p, \\ p_y &= \{2\mu[E - V(r)]\}^{1/2} (1 - v_p^2)^{1/2} \sin \varphi_p, \\ p_z &= \{2\mu[E - V(r)]\}^{1/2}, \end{aligned} \quad (3)$$

$$\begin{aligned} w(r) &= \int_0^r dr' \mu r'^2 \{2\mu[E - V(r')]\}^{1/2}, \\ v_r &\in [-1, 1], \quad v_p \in [-1, 1], \quad w \in [0, w(r_0)], \\ \varphi_r &\in [0, 2\pi], \quad \varphi_p \in [0, 2\pi] \end{aligned} \quad (4)$$

式中, (x, y, z) 表示束缚电子的空间位置; (p_x, p_y, p_z) 表示束缚电子的动量, $V(r)$ 和 E 分别表示相互作用项和电离能. 电子初始空间分布和动量分布由 6 个随机值 $r, v_r, v_p, \omega, \varphi_r$ 和 φ_p 确定, 其中 r 由定积分关系式 (4) 抽样得到.

碰撞结束时的位置和动量由两处结束判据确定, 第一处设置在发生碰撞后略大于释放距离的位置, 通常为 $(10Z + 5)a_0$, Z 为入射离子电荷量, a_0 为玻尔半径, 当轨道电子被俘获或者激发, 该轨迹停止计算, 若发生电离, 则在 $1000Za_0$ 处进行第二次结束判据, 判断被电离的电子是否再次被入射离子或者靶核俘获. 束缚电子终态的判断由相对能量确定, E_{BC} 和 E_{BD} 分别表示电子 C 和 D 相对于靶核的能量, E_{AC} 和 E_{AD} 分别表示电子 C 和 D 相对于入射离子的能量, 具体判断方法如表 1 所列.

当入射离子是高电荷态的离子, 碰撞参数较低, 且入射离子能量较低时, 反应截面相对较高, 这时要保留量子干涉效应, 而入射离子为高电荷态时, 这一特性会显著增加^[24], 反应概率需要指数近似方法修正:

$$\begin{aligned} \delta(b) &= -\ln[1 - p(b)], \\ P(b) &= 1 - \exp[-n\delta(b)], \end{aligned} \quad (5)$$

式中, $p(b)$ 表示统计得到的反应概率, 是关于碰撞参数的函数; $P(b)$ 是指数近似后的反应概率; n 为

靶子的轨道电子数, 例如当靶子为氢原子, 则 n 为 2. 这时, 总反应截面 σ 通过对与碰撞参数 b 相对应的反应概率 $P(b)$ 积分得到:

$$\sigma = \int_0^{b_{\max}} 2\pi b P(b) db. \quad (6)$$

为了保证计算精度同时考虑到计算成本, 程序计算的轨迹总数应保证不确定度小于 15%^[20]:

$$\Delta Q_R = Q_R \left(\frac{N - N_R}{N N_R} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (7)$$

式中, Q_R 是某一反应的反应截面; N 和 N_R 分别表示总计算轨迹数和某一反应对应的事例数, 这里 5000 条计算轨迹可满足计算精度要求.

表 1 4-CTMC 程序中反应类型判据方法
Table 1. Criteria followed for the determination of reactions in 4-CTMC method.

反应类型		E_{CB}	E_{DB}	E_{CA}	E_{DA}
双电子激发	C和D被激发	<0	<0	≥ 0	≥ 0
双电子俘获	C和D被俘获	≥ 0	≥ 0	<0	<0
单电子俘获	C被俘获、D被激发	≥ 0	<0	<0	≥ 0
	D被俘获、C被激发	<0	≥ 0	≥ 0	<0
双电子电离	C和D被电离	≥ 0	≥ 0	≥ 0	≥ 0
单电子电离	C被电离、D被激发	≥ 0	<0	≥ 0	≥ 0
	D被电离、C被激发	<0	≥ 0	≥ 0	≥ 0
转移电离	C被电离、D被俘获	≥ 0	≥ 0	≥ 0	<0
	D被电离、C被俘获	≥ 0	≥ 0	<0	≥ 0

3 计算结果及分析

3.1 H^+ 同 He 原子的电荷交换过程计算结果

首先展示了低电荷态入射离子 (质子) 的碰撞案例, 分别用 3-CTMC 和 4-CTMC 方法计算了质子同氢原子的单电子电离和俘获截面, 实验数据来自于文献 [35]. 计算过程中, 入射离子释放距离 R_A 设置为 $10a_0$, 时间步长 dh 设置为 1.0×10^{-5} , 结束判据距离设置为 $1000a_0$. 图 2(a) 显示了两种模型下的单电子电离截面计算结果, 同 Shah 等^[35] 的实验结果以及 Reinhold 等^[21] 的计算结果进行了比较, 发现在 50—200 keV 的入射粒子能量区间, 4-CTMC 程序的计算结果相较于 3-CTMC 程序和 Reinhold 等的计算结果更接近实验结果. 在 200—1000 keV 的能量区间, 两种计算模型同 Reinhold 等的计算结果差别不大, 但均略小于实

验结果, 这里考虑的原因可能是高入射能量对应的电离截面较小, 需要更多的计算样本数. 图 2(b) 显示了两种模型下的单电子俘获截面计算结果和实验结果, 在 80—150 keV 的入射粒子能量区间, 两种计算模型的单电子俘获截面的计算结果同实验符合较好, 在 150—250 keV 能量区间, 3-CTMC 程序的结果略低于实验值, 原因可能由于三体碰撞系统计算作用截面时, 若俘获截面同电离截面相差一个量级, 会存在一定误差 [24].

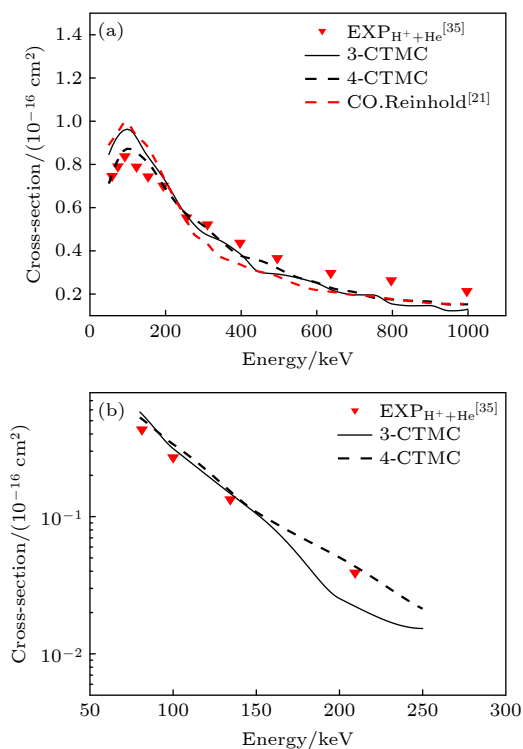


图 2 (a) $H^+ + He$ 单电子电离截面; (b) $H^+ + He$ 单电子俘获截面

Fig. 2. The $H^+ + He$ total cross section for (a) single ionization and (b) electron capture as a function of the projectile energy.

另外, 质子算例的计算结果显示, 当相应的反应截面低于 $5 \times 10^{-17} \text{ cm}^2$ 时, 计算值相较于实验值偏低, 考虑的原因是在某一能量区间, 相应反应类型对应的事例数较少, 处于竞争关系下的其他反应类型对应事例数较多, 因此出现了统计偏差, 可通过增加计算轨迹数提高计算准确度, 但相应会增加计算时间, 如何提高计算速度同时保证准确度, 这将是今后改进 4-CTMC 程序的主要方向.

图 3 展示了分别利用 3-CTMC 和 4-CTMC 程序计算得到的质子同氦原子的双电离截面, 实验数据来自文献 [35], 红色虚线是 Reinhold 等 [21] 的

计算结果. 结果显示, 对于双电子电离过程, 由于 4-CTMC 对电离过程进行了类似分步电离的处理, 在计算中每步计算结束对束缚电子判断是否电离, 进而更新靶核对另一电子的感应电荷, 因此 4-CTMC 计算结果更接近实验值. 产生偏差的原因在于将双电子电离过程分离处理, 低估了靶核对于轨道电子的束缚, 此外未考虑电子间相互作用, 从而忽略了如电子发射这类电子间相互作用导致的机制.

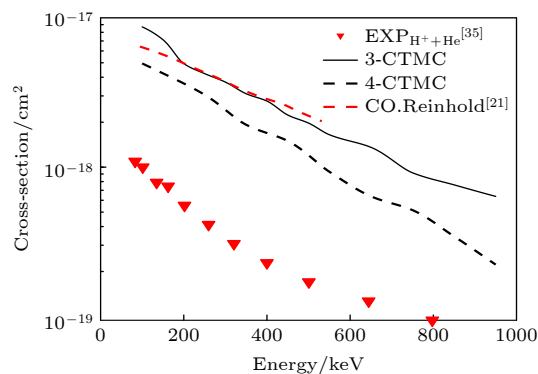


图 3 $H^+ + He$ 双电子电离截面

Fig. 3. The $H^+ + He$ total cross section for double ionization.

3.2 高电荷态入射离子同 He 原子的电荷交换过程计算结果

接下来展示了高电荷态入射离子的碰撞案例, 利用 3-CTMC 和 4-CTMC 程序计算了全剥离锂离子与氦原子的单电子电离和俘获截面, 如图 4(a) 和图 4(b) 所示. 计算过程中, 入射离子释放距离 R_A 设置为 $30a_0$, 时间步长 dh 设置为 1.0×10^{-5} , 结束判据距离设置为 $3000a_0$. 值得一提的是, 全剥离的锂离子相较于质子有较高的电荷态, 为了避免入射离子释放距离过小而扰动束缚电子的初始状态, 入射离子的释放距离选取为 $10Za_0$ [20], Z 为入射离子电荷量. 也有文献提出为了忽略入射离子的初始扰动, 释放距离至少为 4 倍的最大碰撞参数 [8]. 以全剥离锂离子与氦原子的碰撞体系为例, 最大碰撞参数为 $5a_0$, 则相应的释放距离至少为 $20a_0$. 这里采取第一种方式选取释放距离为 $10Za_0$ (即 $30a_0$) 来避免入射离子扰动. 此外在碰撞系统的初态确定阶段, 入射离子释放距离不宜过大, 首先会增加计算成本, 其次过大的释放距离, 将延长整个碰撞过程的持续时间, 从而放大了束缚电子在轨道上受到的扰动 [19]. 图 4 中实验值来自 Pivovar 等 [36] 以及 Santanna 等 [37] 的测量结果 (较高能量部分

(>2 MeV) 来自文献 [37]), 3-CTMC 方法在 1.5—6.0 MeV 的能量区间略高于实验值, 4-CTMC 计算结果同实验符合更好. 4-CTMC 方法的计算结果相较于 3-CTMC 方法更接近实验结果.

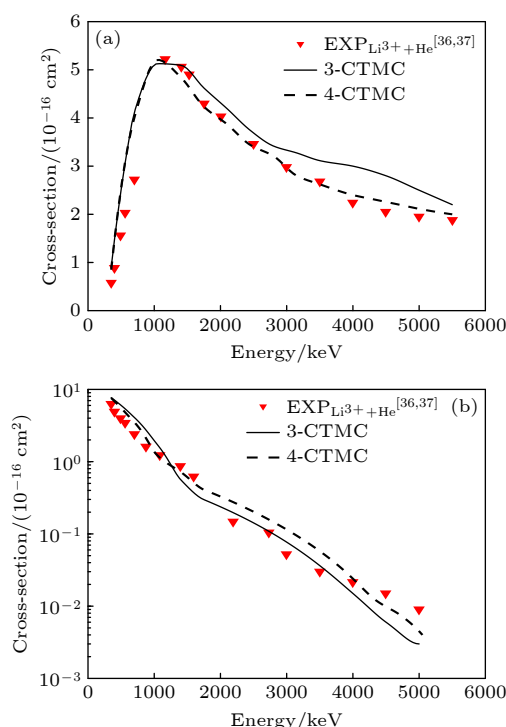


图 4 (a) $\text{Li}^{3+}+\text{He}$ 单电子电离截面; (b) $\text{Li}^{3+}+\text{He}$ 单电子俘获截面

Fig. 4. The $\text{Li}^{3+}+\text{He}$ total cross section for (a) single ionization and (b) electron capture as a function of the projectile energy.

图 5(a) 和图 5(b) 分别显示了全剥离锂离子同氦原子的双电离与双俘获截面, 实验数据来自文献 [37]. 计算结果显示, 类似质子的案例, 对于双电子过程, 同实验值仍有较大的偏差, 但 4-CTMC 方法相较于 3-CTMC 方法更接近实验结果.

进一步计算了全剥离铍离子与氦原子的单电子电离和俘获截面, 计算过程中, 入射离子释放距离 R_A 设置为 $40a_0$, 时间步长 dh 设置为 1.0×10^{-5} , 结束判据距离设置为 $4000a_0$. 图 6(a) 显示了 3-CTMC 和 4-CTMC 方法的单电子电离截面结果, 目前缺少全剥离铍离子的实验结果, 电离以及俘获截面的对比结果来自 Olson^[24] 的理论计算值, 3-CTMC 方法的计算结果在 2.0—4.5 MeV 的能量区间略高于 4-CTMC 方法. 图 6(b) 显示了相应的单电子俘获截面计算结果, 同样地, 4-CTMC 方法的计算结果更接近 Olson^[24] 的理论计算值.

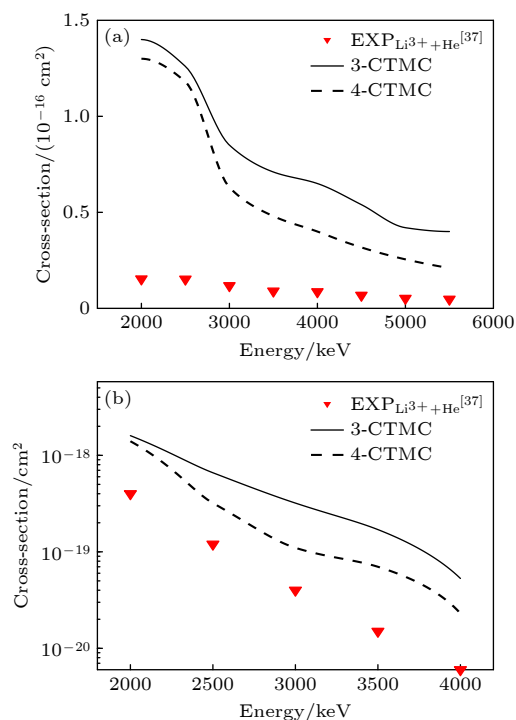


图 5 (a) $\text{Li}^{3+}+\text{He}$ 双电子电离截面; (b) $\text{Li}^{3+}+\text{He}$ 双电子俘获截面

Fig. 5. The $\text{Li}^{3+}+\text{He}$ total cross section for (a) double ionization and (b) electron capture as a function of the projectile energy.

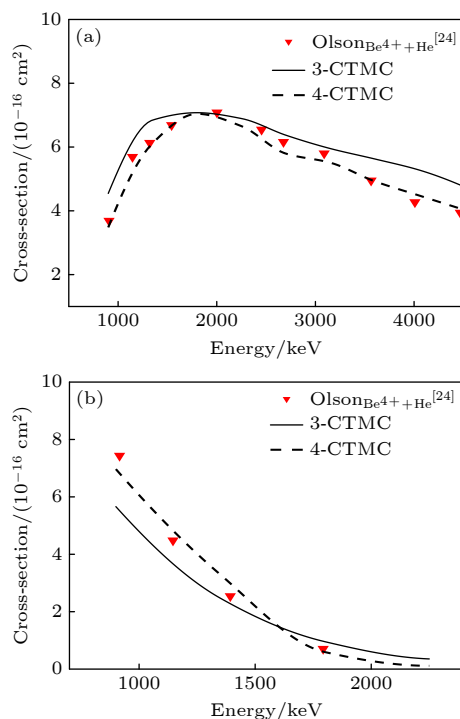


图 6 (a) $\text{Be}^{4+}+\text{He}$ 单电子电离截面; (b) $\text{Be}^{4+}+\text{He}$ 单电子俘获截面

Fig. 6. The $\text{Be}^{4+}+\text{He}$ total cross section for (a) single ionization and (b) electron capture as a function of the projectile energy.

图 7 显示了分别利用 3-CTMC 和 4-CTMC 程序计算得到的全剥离铍离子同氦原子的双电离与双俘获截面. 计算结果显示, 对于双电子过程, 在较低能量区间, 计算结果差别不大, 在 2.0—4.5 MeV 能量区间, 4-CTMC 方法相较于 3-CTMC 方法计算值更低.

最后, 图 8 显示了利用 4-CTMC 所计算的氧离子 (O^{7+}) 同氦原子碰撞体系的单、双电离和俘获截面, 图中 SI, SC, DI 和 DC 分别表示单电离、单

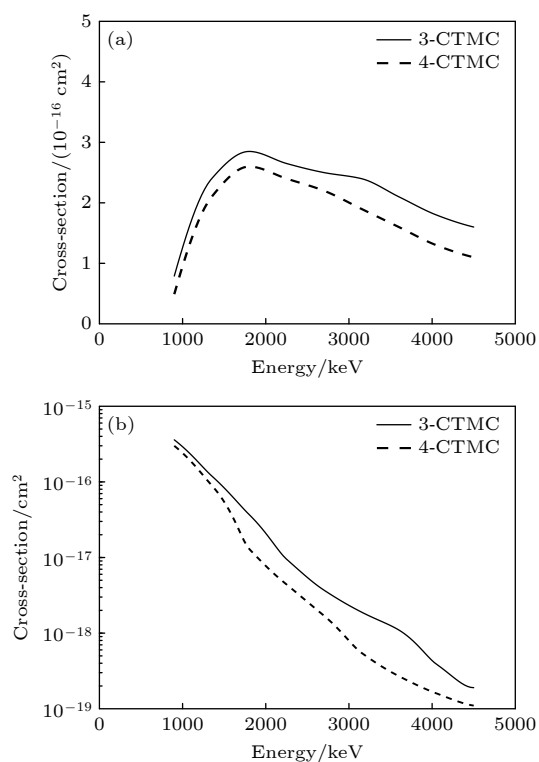


图 7 (a) $Be^{4+}+He$ 双电子电离截面; (b) $Be^{4+}+He$ 双电子俘获截面

Fig. 7. The $Be^{4+}+He$ total cross section for (a) double ionization and (b) electron capture as a function of the projectile energy.

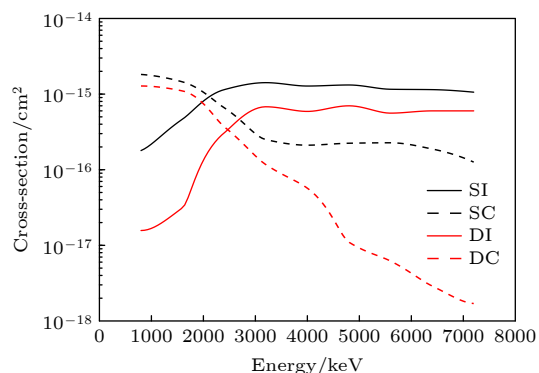


图 8 $O^{7+}+He$ 碰撞体系的 4-CTMC 计算结果

Fig. 8. The $O^{7+}+He$ total cross section calculated by 4-CTMC.

俘获、双电离和双俘获. 入射离子能量区间为 0.8—7.2 MeV, 在入射离子能量接近 2 MeV 时, 单电离截面超过单俘获和双俘获截面, 在入射离子能量接近 2.5 MeV 时, 双电离截面超过单、双俘获截面, 并且随着入射离子能量逐渐增加, 电荷交换过程将以电离过程为主, 电子俘获过程尤其双电子俘获所占份额将显著下降. 该碰撞体系下的预测结果有待实验进一步验证.

4 结 论

本文基于 3-CTMC 方法, 在碰撞体系中考虑两个束缚电子, 扩展得到了 4-CTMC 程序, 并分别用这两种计算模型, 计算了质子、高电荷态入射离子 (Li^{3+} , Be^{4+} 和 O^{7+}) 同氦原子的电离和俘获截面, 当质子为入射离子时, 在低于 200 keV 的能量区间, 4-CTMC 单电离计算结果更接近实验值, 而对于高电荷态的入射离子 (Li^{3+} 和 Be^{4+}), 在 100—500 keV/amu 区间同实验结果符合更好, 原因在于 4-CTMC 模型在避免了经典自电离的同时, 考虑包含两个束缚电子的四体碰撞系统哈密顿量, 可以更精确地描述双电子体系. 对于上述的任何一个算例, 4-CTMC 方法的计算时长均大于 3-CTMC 方法, 在时间步长、结束判据距离等计算参数一致的情况下, 4-CTMC 方法的计算时长要比 3-CTMC 方法超出约 30%. 需要指出的是, 4-CTMC 和 3-CTMC 会对四体碰撞过程的双电子电离、俘获截面整体高估, 可能的原因是忽略了碰撞过程中电子间相互作用. 下一步的工作中我们将考虑四体碰撞过程中的电子-电子间关联效应 [38].

参考文献

- [1] Haberli R M, Gombosi T I, DeZeeuw D L, Combi M R, Powell K G 1997 *Science* **276** 939
- [2] Cravens T E 1997 *Geophys. Res. Lett.* **24** 105
- [3] Apicella M L, Apruzzese G, Mazzitelli G, Ridolfini V P, Alekseyev A G, Lazarev V B, Mirnov S V, Zagórski R 2012 *Plasma Phys. Controlled Fusion* **54** 197
- [4] Mavrin A A 2020 *Plasma Phys. Controlled Fusion* **62** 105023
- [5] Redmer R, Holst B, Hensel F 2010 *Metal-to-Nonmetal Transitions* (Berlin, Heidelberg: Springer)
- [6] Cheng R, Zhang S, Shen G D, Chen Y H, Zhang Y S, Chen L W, Zhang Z M, Zhao Q T, Yang J C, Wang Y Y, Lei Y, Lin P, Yang J, Yang L, Ma X W, Xiao G Q, Zhao H W, Zhan W L 2020 *Sci. Sin.-Phys. Mech. Astron.* **50** 14 (in Chinese) [程锐, 张晟, 中国栋, 陈燕红, 张延师, 陈良文, 张子民, 赵全堂, 杨建成, 王瑜玉, 雷瑜, 林平, 杨杰, 杨磊, 马新文, 肖国青, 赵红卫,

- 詹文龙 2020 中国科学: 物理学 力学 天文学 **50** 14]
- [7] Jäkel O, Karger C P, Debus J 2008 *Med. Phys.* **35** 5653
- [8] Liamsuwan T, Nikjoo H 2013 *Phys. Med. Biol.* **58** 641
- [9] Liamsuwan T, Uehara S, Emfietzoglou D, Nikjoo H 2011 *Radiat. Prot. Dosim.* **143** 152
- [10] Benka O, Kropf A 1978 *At. Data Nucl. Data Tables* **22** 219
- [11] Brandt W, Lapicki G 1981 *Phys. Rev. A* **23** 1717
- [12] Ning Y, He B, Liu C L, Yan J, Wang J G 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 3075 (in Chinese) [宁烨, 何斌, 刘春雷, 颜君, 王建国 2005 物理学报 **54** 3075]
- [13] Montanari C C, Montenegro E C, Miraglia J E 2010 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43** 165201
- [14] Yang W, Cai X H, Yu D Y 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 2128 (in Chinese) [杨威, 蔡晓红, 于得洋 2005 物理学报 **54** 2128]
- [15] Shimakura N, Koizumi S, Suzuki S, Kimura M 1992 *Phys. Rev. A* **45** 7876
- [16] Wu Y, Stancil P C, Liebermann H P, Funke P, Havener C C 2011 *Phys. Rev. A* **84** 022711
- [17] Hong X, Wang F, Wu Y, Gou B, Wang J 2016 *Phys. Rev. A* **93** 062706
- [18] Gu B, Jin N Q, Wang Z P, Zeng X H 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 4648 (in Chinese) [顾斌, 金年庆, 王志萍, 曾祥华 2005 物理学报 **54** 4648]
- [19] Abrines R, Percival I C 1966 *Proc. Phys. Soc.* **88** 861
- [20] Olson R E, Salop A 1977 *Phys. Rev. A* **16** 531
- [21] Reinhold C O, Falcón C 1986 *Phys. Rev. A* **33** 3859
- [22] Gray T J, Cocke C L, Justiniano E 1980 *Phys. Rev. A* **22** 849
- [23] Pfeifer S J, Olson R E 1982 *Phys. Lett. A* **92** 175
- [24] Olson R E 1978 *Phys. Rev. A* **18** 2464
- [25] Kirschbaum C L, Wilets L 1980 *Phys. Rev. A* **21** 834
- [26] Olson R E, Ullrich J, Schmidt-Böcking H 1989 *Phys. Rev. A* **39** 5572
- [27] Frémont F 2018 *Atoms* **6** 68
- [28] Frémont F 2020 *Atoms* **8** 19
- [29] Bachi N, Otranto S 2019 *Eur. Phys. J. D* **73** 4
- [30] Jorge A, Illescas C, Méndez L, Pons B 2016 *Phys. Rev. A* **94** 022710
- [31] Pitcher C S, Stangeby P C 1997 *Plasma Phys. Controlled Fusion* **39** 779
- [32] Federici G, Skinner C H, Brooks J N 2001 *Nucl. Fusion* **41** 1967
- [33] Deng B Q, Xie Z Y 1986 *Nucl. Fusion Plasma Phys.* **16** 22 (in Chinese) [邓柏权, 谢中友 1986 核聚变与等离子体物理 **16** 22]
- [34] Dunn W R, Branduardi-Raymont G, Elsner R F, Vogt M F, Lamy L, Ford P G, Coates A J, Gladstone G R, Jackman C M, Nichols J D 2016 *J. Geophys. Res. Space Phys.* **121** 2274
- [35] Shah M B, Gilbody H B 1999 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **18** 899
- [36] Pivovarov L I, Levchenko Y Z, Krivonosov G A 1971 *J. Exp. Theor. Phys.* **32** 11
- [37] Santanna M M, Santos A, Coelho L, Jalbert G, Belkic D 2009 *Phys. Rev. A* **80** 042707
- [38] McGuire J H, Burgdorfer J 1987 *Phys. Rev. A* **36** 4089

Charge transfer in collisions of H^+ , Li^{3+} , Be^{4+} and O^{7+} ions with He atom based on 4-classical trajectory Monte Carlo method*

Li Guo-Zhuang¹⁾²⁾⁴⁾ Zhang Sheng^{2)4)†} Jiao Zhi-Hong³⁾⁴⁾ Li Xin-Xia^{1)‡}

1) (*School of Nuclear Science and Technology, University of South China, Hengyang 421001, China*)

2) (*Institute of Modern Physics, Chinese Academy of Science, Lanzhou 730000, China*)

3) (*College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730030, China*)

4) (*Advanced Energy Science and Technology Guangdong Laboratory, Huizhou 516003, China*)

(Received 10 August 2021; revised manuscript received 16 September 2021)

Abstract

The classical trajectory Monte Carlo (CTMC) method is a common method to study the charge-transfer and impact-ionization cross sections for the collisions between ions and atoms, and the heavy particle collision in astrophysics and laboratory plasma environment. Here in this work, we use the 4-CTMC method to study a four-body collision process including two bound electrons, and the Hamiltonian equation of the four-body dynamic system is solved numerically. The single/double electron ionization and capture cross sections are calculated for collisions of high charge state ions (Li^{3+} , Be^{4+} and O^{7+}) with helium atom in a wide range of projectile energy. The calculation results show that the results from the 4-CTMC method and the experimental measurements are in better agreement in a projectile energy range of 50—200 keV/amu for proton-helium collision system. In addition, for incident ions with high charge state, the results calculated by the 4-CTMC method are in better agreement with the experimental measurements or other theoretical values in a projectile energy range of 100—500 keV/amu. Though the double ionization and capture cross sections calculated by 4-CTMC or 3-CTMC method are higher than the experimental results due to ignoring the electron correlation, the results from the 4-CTMC method are in better agreement with the experimental results.

Keywords: high charge state ion, 4-CTMC, charge transfer process

PACS: 52.20.Hv, 34.70.+e

DOI: 10.7498/aps.71.20211470

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11775108).

† Corresponding author. E-mail: halifaxy@gmail.com

‡ Corresponding author. E-mail: li_xx@usc.edu.cn