

文章编号: 1007-4627(2002)02-0153-04

电子碰撞电离截面的全相对论扭曲波计算*

陈重阳, 赵 永, 齐静波, 王炎森

(复旦大学现代物理研究所, 上海 200433)

摘 要: 在相对论框架下, 给出了电子与高电荷态离子碰撞直接电离截面的扭曲波玻恩交换近似计算方法. 作为示例, 计算了几个离子(类氢、类锂和类氦离子)的电离截面, 计算结果与实验值和其它理论计算值有比较好的符合.

关键词: 相对论扭曲波玻恩交换近似; 电子碰撞电离截面; 高电荷离子

中图分类号: O571.5 **文献标识码:** A

1 引言

电子与离子的碰撞电离是原子物理中的一个基本物理过程, 其截面数据在可控热核聚变、X 光激光以及天体物理等研究中有比较广泛的应用. 近年来, 随着高能加速器的冷却储存环(Storage Ring)和电子束离子阱(EBIT)等实验装置的发展, 已能获得极高 Z 的高电荷态离子^[1, 2], 电子与这些离子的非弹性碰撞研究已成为热点. 理论方面研究电子与高 Z 的高电荷态离子的碰撞必须考虑相对论效应, 需要在基于 Dirac 方程的基础上处理. 20 世纪 90 年代以来, 国际上已有一些课题组利用全相对论的扭曲波玻恩交换近似方法对电子与高 Z 高电荷态离子碰撞电离开展了研究^[3, 4].

在以前工作的基础上^[5](主要是利用相对论修正下的扭曲波玻恩近似方法对电子与中、低 Z 的高电荷态离子碰撞电离进行了比较系统的研究), 在本文中简单介绍全相对论的扭曲波近似计算方法, 利用自编的相对论扭曲波计算程序计算几个中、高 Z 的类氢、类锂和类氦离子的电离截面, 并与实验或其它的理论计算结果进行比较.

2 计算方法

全相对论框架下, 取原子单位, 靶离子中($n_b l_b j_b$)束缚电子的电离截面为^[3]

$$Q(n_b l_b j_b) = \frac{8}{(2j_b + 1)k_i^2} \cdot \int_0^{(E_i - I)^{1/2}} dE_e \sum_{\lambda} Q^{\lambda}(n_b l_b j_b), \quad (1)$$

式中, I 是电离阈能, E_i 是入射电子的能量, k_i 是入射电子的波数, E_e 是出射电子的能量,

$$Q^{\lambda}(n_b l_b j_b) = \sum_{\substack{l_i, l_e, l_f \\ j_i, j_e, j_f}} P^{\lambda}(n_b l_b j_b k_i l_i j_i; k_e l_e j_e k_f l_f j_f)^2, \quad (2)$$

式中, k, l 和 j 分别是自由电子(入射、出射和散射电子)下标依次为 i, e 和 f 的波数、轨道角动量和总角动量,

$$P^{\lambda} = (2\lambda + 1)^{-1/2} \langle j_b \| C^{\lambda} \| j_e \rangle \langle j_i \| C^{\lambda} \| j_f \rangle \cdot D^{\lambda}(n_b l_b j_b k_i l_i j_i; k_e l_e j_e k_f l_f j_f) + \sum_t (-1)^{\lambda+1} (2\lambda + 1)^{1/2} \begin{Bmatrix} j_b & j_i & t \\ j_i & j_e & \lambda \end{Bmatrix} \cdot \langle j_b \| C^{\lambda} \| j_i \rangle \langle j_i \| C^{\lambda} \| j_e \rangle \cdot E^{\lambda}(n_b l_b j_b k_i l_i j_i; k_e l_e j_e k_f l_f j_f), \quad (3)$$

式中, D 和 E 分别是直接和交换部分的径向 Slater 积分,

$$D^{\lambda} = \int_0^{\infty} \int_0^{\infty} [P_{n_b l_b j_b}(r_1) P_{k_e l_e j_e}(r_1) + Q_{n_b l_b j_b}(r_1) Q_{k_e l_e j_e}(r_1)] \cdot \frac{r_1^{\lambda}}{r_2^{\lambda+1}} [P_{k_i l_i j_i}(r_2) P_{k_f l_f j_f}(r_2) +$$

收稿日期: 2002-03-08; 修改日期: 2002-04-10

* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10104005); 国家 863 高技术惯性约束聚变主题; 中国原子分子数据联合体资助课题
作者简介: 陈重阳(1972-), 男(汉族), 湖南祁东人, 博士, 从事电子离子碰撞理论研究.

$$\begin{aligned}
 & Q_{k_i l_i j_i}(r_2) Q_{k_i l_i j_i}(r_2) \Big], \quad (4) \\
 E^\lambda = & \int_0^\infty \int_0^\infty [P_{n_b l_b j_b}(r_1) P_{k_i l_i j_i}(r_1) + \\
 & Q_{n_b l_b j_b}(r_1) Q_{k_i l_i j_i}(r_1)] \cdot \\
 & \frac{r_<^\lambda}{r_>^{\lambda+1}} [P_{k_i l_i j_i}(r_2) P_{k_e l_e j_e}(r_2) + \\
 & Q_{k_i l_i j_i}(r_2) Q_{k_e l_e j_e}(r_2)] \Big], \quad (5)
 \end{aligned}$$

式中, $r_>$ 和 $r_<$ 分别是 r_1 和 r_2 中较大和较小的一个, P 和 Q 分别是相应电子的相对论径向波函数中的大、小分量. 束缚电子的相对论波函数从 Grant 程序包^[6]得到, 自由电子的波函数在我们自编的计算程序中利用数值方法得到. 自由电子的径向波函数满足以下方程:

$$\begin{aligned}
 & \left[\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r} \right] P_{\epsilon\kappa}(r) \\
 & = \frac{\alpha}{2} \left[\epsilon - V(r) + \frac{4}{\alpha^2} \right] Q_{\epsilon\kappa}(r), \quad (6)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & \left[\frac{d}{dr} - \frac{\kappa}{r} \right] Q_{\epsilon\kappa}(r) \\
 & = -\frac{\alpha}{2} [\epsilon - V(r)] P_{\epsilon\kappa}(r), \quad (7)
 \end{aligned}$$

式中, α 是精细结构常数; $\kappa=l$, 当 $j=l-1/2$ 时或 $\kappa=-(l+1)$, 当 $j=l+1/2$ 时; ϵ 是自由电子的能量; V 是自由电子所受到的离子的库仑势. 文献[3]取的是所有的自由电子都受到同样的 Dirac-Fock-Slater 势:

$$\begin{aligned}
 V(r) = & -\frac{2Z}{r} + V_c + V_{ex} \\
 = & -\frac{2Z}{r} + \sum_{n'\kappa'} \omega_{n'\kappa'} \int_0^\infty \frac{2}{r_>} [P_{n'\kappa'}^2(r_b) + \\
 & Q_{n'\kappa'}^2(r_b)] dr_b - \left[\frac{24}{\pi} \rho \right]^{1/3}, \quad (8)
 \end{aligned}$$

式中, N 是靶离子的核外束缚电子数, $r_>$ 是 r (自由电子) 与 r_b (束缚电子) 较大的一个, $\omega_{n'\kappa'}$ 是 $n'\kappa'$ 轨道的同科电子数, ρ 是靶离子的核外电子电荷密度. 上式中的第一项是核的库仑势, 第二项是考虑核外电子的分布对核的扭曲势, 第三项是自由电子气近似下描述自由电子与束缚电子交换作用的交换势 (此交换势与自由电子的能量无关). 与上述处理不同, 本文采用与我们以前工作中相似的作用势^[7, 8], 即取快、慢电子近似, 入射和散射电子受到同样的势, 出射电子比入射电子少受到核外一个束缚电子

的屏蔽作用. 同时, 引入一个与自由电子能量有关的半经验交换势. 这样在我们的计算中, 自由电子所受到的势可以表示成

$$\begin{aligned}
 V_i(r) = V_f(r) = & -\frac{2Z}{r} + V_c^N(r) + V_{ex}^N(r) \\
 = & V_E^N(r) + V_{ex}^N(r), \quad (9)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 V_c(r) = & -\frac{2Z}{r} + V_c^{N-1}(r) + V_{ex}^{N-1}(r) \\
 = & V_E^{N-1}(r) + V_{ex}^{N-1}(r), \quad (10)
 \end{aligned}$$

其中, V_c 与式(8)的表示一样, 半经验交换势 V_{ex} 的表示式为^[8]

$$\begin{aligned}
 V_{ex}^N = & \frac{1}{2} \left[(\epsilon - V_E) - \left((\epsilon - V_E)^2 + \right. \right. \\
 & \left. \left. \frac{2}{r^2} \sum_{n'\kappa'}^N \omega_{n'\kappa'} [P_{n'\kappa'}^2(r) + Q_{n'\kappa'}^2(r)] \right)^{1/2} \right], \quad (11)
 \end{aligned}$$

式中, $P_{n'\kappa'}$ 和 $Q_{n'\kappa'}$ 是束缚电子的径向波函数.

数值计算中, 入射电子能量低于 3 倍电离阈能时对出射电子的能量积分采用 3 点高斯积分, 高于 3 倍电离阈能时采用 5 点高斯积分; 慢收敛的径向 Slater 积分采用辛普森积分方法, 其积分格点的选取参见我们以前的工作^[9]; 自由电子的角动量求和采取自然截断方法, 即当所计算的分波的贡献低于贡献最大的分波的 0.5% 时, 对角动量的求和截断, 在本文所计算的入射能量范围 (10 倍电离阈能), 总角动量求和最大到 50.

3 结果和讨论

图 1 给出了 Se^{24+} 离子基态的 2p 电子的电离截面, 图中也给出了文献[3]的相对论扭曲波交换近似的计算值. 由图可见, 低能时本文给出的计算值与文献[3]所给的值有约 5%—10% 的偏离, 随着入射能量的增高, 我们的计算值与文献[3]给出的值越来越接近. 这主要是由于我们所选取的交换势与文献[3]的不同引起的, 而交换势主要是影响较低入射能量时的电离截面^[8].

图 2 给出了类氢 Fe^{25+} 离子的电离截面. 图中也给出了采用文献[3]的计算方法给出的扭曲波计算值^[10], 以及利用 EBIT 实验装置测量到的电离截面的实验值^[11]. 由图 2 可见, 我们的理论计算值在入射电子能量较低的区域能较好地与实验值符合, 而文献[10]和[11]所给的相对论扭曲波计算值与实

验值相比稍偏高，这也说明了本文所取的交换势有其合理性。我们也将本文对 Fe^{25+} 离子的计算值与文献[12]中利用准相对论扭曲波的计算值进行了比较，发现两者的偏差小于 5%，说明对于 Fe 的类氢离子，相对论效应还不明显，准相对论下的扭曲波近似还能给出比较合理的结果。

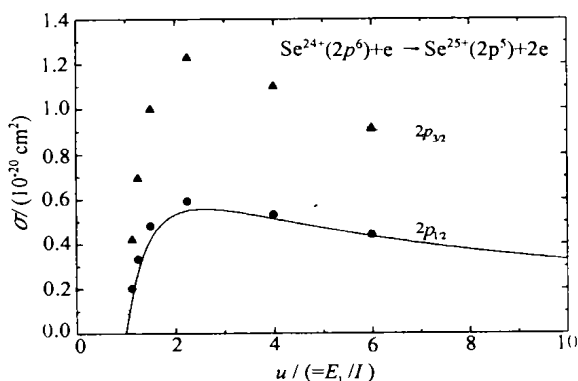


图 1 Se 的类氦离子 2p 壳层的电离截面
—是本文给出的 $2p_{1/2}$ 子壳层的电离截面，---是本文给出的 $2p_{3/2}$ 子壳层的电离截面，●和▲是文献[3]的相应相对论扭曲波计算值。

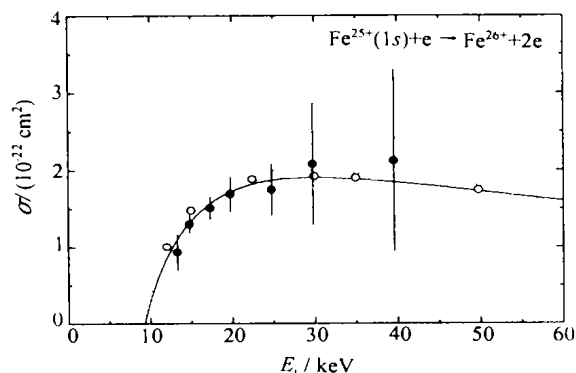


图 2 Fe 的类氢离子基态的电离截面
—是本文给出的计算值，---是文献[10]给出的相对论扭曲波计算值(计算方法同文献[3])，○和●分别是文献[11]给出的相对论扭曲波计算值和 EBIT 装置给出的实验值。

图 3 和图 4 给出了 U 的类氢和类锂离子电离截面。图中也给出了其它相对论扭曲波的计算值^[13, 3]以及 EBIT 装置给出的实验值^[2, 14]。由图可见，本文所给的理论值与其它理论计算值符合很

好，这主要是由于随着核电荷数的增高，自由电子所受的势主要是核电荷的作用，此时交换势的选取已不太重要。与实验值相比， U^{91+} 离子的理论计算值约是实验值的 50%，而 U^{89+} 离子的理论计算值只比实验值约低 10%，这主要是由于对于 U^{91+} 离子来说量子电动力学(QED)效应的影响比较显著^[13]。所谓 QED 效应是指电子间的相互作用中不能只考虑纯库仑作用，需要将量子电动力学对库仑相互作用的低级修正也作为微扰相互作用。比较图 3 和图 4 的理论计算值和实验值，可以发现这种修正主要是对高 Z 高电荷离子的 1s 电子电离起作用。我们将在以后的工作中将 QED 效应包括到计算程序中，以给出与实验能较好符合的高 Z 高电荷离子的 1s 电子电离截面。

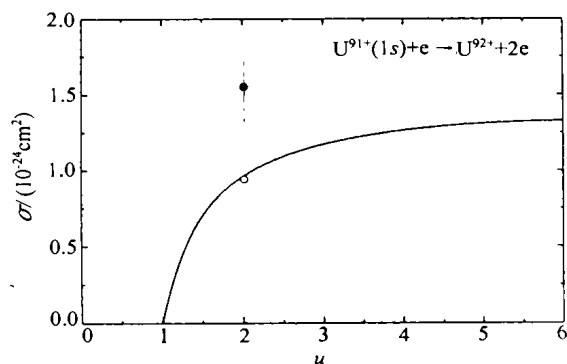


图 3 U 的类氢离子基态的电离截面
—是本文的计算值，○是文献[13]给出的相对论扭曲波计算值，●为 BIT 装置给出的实验值。

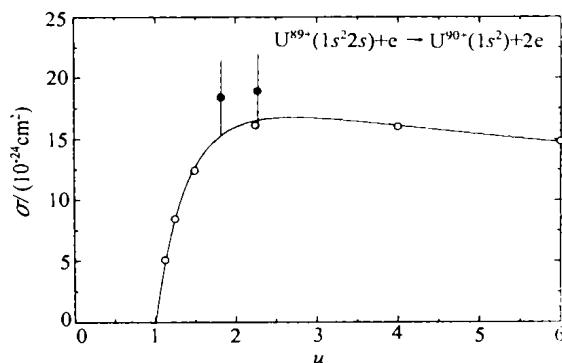


图 4 U 的类锂离子基态的电离截面
—是本文的计算值，○是文献[3]给出的相对论扭曲波计算值，●为 BIT 装置给出的实验值。

参 考 文 献:

- [1] Shi W, Böhm S, Böhme C, *et al.* Recombination of U^{92+} Ions with Electrons[J]. *Eur Phys J*, 2001, **D15**: 145.
- [2] Marres R E, Elliott S R, Knapp D A. Production and Trapping of Hydrogen-like and Bare Uranium Ions in an Electron Beam Ion Trap[J]. *Phys Rev Lett*, 1994, **72**(26): 4 082.
- [3] Zhang H L, Sampson D H. Rapid Relativistic Distorted-wave Approach for Calculating Cross Sections for Ionizations of Highly Charged Ions[J]. *Phys Rev*, 1990, **A42**(9): 5 378.
- [4] Chen M H, Reed K J, Moores D L. Contributions of Resonant Excitation Double Autoionization to the Electron-impact Ionization of Fe^{15+} [J]. *Phys Rev Lett*, 1990, **64**(12): 1 350.
- [5] Chen C Y, Qi J B, Wang Y S, *et al.* Electron-ion Collisional Ionization Cross Sections and Rates for the Na Isoelectronic Sequence[J]. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 2001, **79**(1): 65.
- [6] Parpia F A, Fischer C F, Grant I P. Grasp 92: A package for large-scale relativistic atomic structure calculations[J]. *Comput Phys Commun*, 1996, **94**: 249.
- [7] Fang D, Hu W, Tang J, *et al.* Energy Distribution of Secondary Electrons in Electron-impact Ionization of Hydrogenic and Heliumlike Ions[J]. *Phys Rev*, 1993, **A47**(3): 1 861.
- [8] Hu W, Fang D, Wang Y, *et al.* Electron-impact-ionization Cross Sections For the Hydrogen Atom[J]. *Phys Rev* 1994, **A49**(2): 989.
- [9] Fang D, Wang Y. Calculation of Slowly Converging Integrals in Electron-ion Collision Problems[J]. *J Phys*, 1991, **B24**: 1 749.
- [10] Fontes C J, Sampson D H, Zhang H L. Fully Relativistic Calculations of and Fits to $1s$ Ionization Cross Sections[J]. *Phys Rev*, 1999, **A59**(2): 1 329.
- [11] Rourke B O, Currell F J, Kuramoto H, *et al.* Electron-impact Ionization of Hydrogen-like Iron Ions[J]. *J Phys*, 2001, **B34**: 4 003.
- [12] Fang D, Hu W, Chen C, *et al.* Electron-ion Collisional Ionization Cross Sections for the H and He Isoelectronic Sequences[J]. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 1995, **61**(1): 91.
- [13] Fontes C J, Sampson D H, Zhang H L. Relativistic Calculations of Cross Sections for Ionization of U^{90+} and U^{91+} Ions by Electron Impact[J]. *Phys Rev*, 1995, **A51**(1): R12.
- [14] Stohlker Th, Kramer A, Elliott S R, *et al.* Measurement of L-shell Electron-impact Ionization Cross Sections for Highly Charged Uranium Ions[J]. *Phys Rev*, 1997, **A56**(4): 2 819.

A Fully Relativistic Distorted-wave Calculation for Electron-impact Ionization Cross Section*

CHEN Chong-yang, ZHAO Yong, QI Jing-bo, WANG Yan-sen

(Institute of Modern Physics, Fudan University, Shanghai 200433, China)

Abstract: A fully relativistic distorted-wave exchange approximation method is presented. It can be used to obtain electron impact ionization cross section of highly charged ions. The ionization cross sections of several H-, Li, and Ne-like ions have been calculated. Good agreement is obtained while the calculated values are compared with the experiments or other relativistic calculations.

Key words: relativistic distorted-wave exchange approximation; electron-impact ionization cross section; highly charged ion

* **Foundation item:** National Natural Science Foundation of China(10104005); National 863 Technology Inertial Confinement Fusion of China; Atomic and Molecular Data Unite System of China