arXiv:2304.09505v1 [physics.atom-ph] 19 Apr 2023

K壳层重类氢离子的电离

O. Novak* 和 R. Kholodov乌克兰国家科学院应用物理研究所，乌克兰苏梅市彼得罗巴甫利夫斯卡街 *58* 号，邮编 *40000*

A. Surzhykov德国联邦物理技术研究院，布伦瑞克市联邦大道 *100* 号，邮编 *38116*；
以及德国布伦瑞克工业大学数学物理研究所，门德尔松街 *3* 号，邮编 *D-38106*

A. N.Artemyev德国卡塞尔大学物理研究所与
CINSaT，海因里希-普莱特街 *40* 号，邮编 *34132*

Th. Stöhlker德国耶拿亥姆霍兹研究所，弗勒贝尔斯蒂格街 *3* 号，邮编 *07743*（日期：2018）

本文在含时狄拉克方程框架下，对类氢离子与裸核碰撞时的 K 壳层电离进行了理论研究。重点考察了电离概率随碰撞参数、碰撞能量和核电荷的变化。为在较宽的碰撞参数范围内评估该概率，我们提出了一个简洁的跃迁振幅解析表达式。该表达式包含三个拟合参数，这些参数由基于绝热近似的数值计算确定。与以往研究不同，我们给出的跃迁振幅和电离概率解析表达式考虑了双中心势的完整多极展开，能够准确描述原子序数不同的核之间的非对称碰撞，$Z_1 \neq Z_2$。对对称碰撞和非对称碰撞的计算表明，离子的原子序数差异越大，电离概率越低。

I. 引言

几十年来，储存环中的重离子碰撞一直是研究的重点。例如，达姆施塔特现有的 GSI 设施已开展了多项实验 [1–15]。未来的反质子与离子研究设施（FAIR）计划开展各种涉及重离子的碰撞实验 [16–19]。这些研究关注的关键过程之一是离子和原子的内壳层电离 [20–24]。对此过程的分析为相对论碰撞理论提供了重要基准。此外，这也有助于我们深入了解强电磁场中的电子动力学。在如此极端的条件下，相对论效应、非偶极效应乃至量子电动力学（QED）效应都至关重要，并可能影响电离截面。

然而，对离子的 K 壳层电离进行理论分析是一项相当复杂的任务。通常，这类分析基于各种数值方法 [25–32]。然而，数值方法可能涉及复杂且耗时的计算。此外，电离截面与碰撞参数之间的依赖关系往往难以从数值结果中推断出来。

因此，本文提出一种简单的方法，用于估算重离子碰撞中 K 壳层电离的概率。我们的方法基于参考文献 [33–39]，提出的方法，其中相应的矩阵元用一个包含拟合参数的简单解析表达式近似表示。这些参数可通过将解析矩阵元拟合到数值数据来确定。

过去，人们在单极近似下采用解析方法计算 K 壳层的电离概率；在这种近似中，对两个碰撞原子核的势进行多极展开时，只考虑球对称项。对于核间距较小且碰撞近乎对称的情形，单极近似有充分的依据，例如 $R \lesssim 500$ fm，$Z_1 \approx Z_2$。电离主要发生在小距离处，因此，小核间距这一条件确实成立。另一方面，碰撞离子的电荷不对称性所起的作用至今仍不明确。为更好地理解 $Z_1 \neq Z_2$ 的电离截面的变化，需要考虑双中心势展开中的高阶多极项。在本研究中，我们进行这一分析，并得到可用于非对称碰撞的电离概率解析表达式。

本文组织如下。第II A节回顾双中心哈密顿量的含时狄拉克方程解。采用绝热近

*电子邮箱：novak-o-p@ukr.net

似，并将波函数展开为带有含时系数的定态准分子轨道。双中心势的定态波函数由一组在单极近似下得到的本征函数生成。在第II B节中，基于一阶微扰理论计算含时跃迁振幅。在第II C节中，通过对相应矩阵元进行参数化，获得电离概率的近似解析表达式。该解析表达式包含三个拟合参数。在第III节中，我们讨论拟合过程及结果。特别地，我们研究了不同原子序数的碰撞类氢离子和裸离子的K壳层电离概率。我们发现，随着 Z_1 与 Z_2之间差值的增大，从基态类氢态电离一个电子的概率会降低。

全文采用自然单位（$\hbar = c = m = 1$）。

II. 理论背景

A. 双中心狄拉克方程的解

我们从含时狄拉克方程的解开始，该方程描述单个电子在两个碰撞原子核的库仑场中的运动。电子波函数 $\Psi_k(\vec{r},t)$ 可表示为

$$i\frac{\partial \Psi_k(\vec{r},t)}{\partial t} = \hat{H}_{TC}\Psi_k(\vec{r},t), \tag{1}$$

其中，k 是用于指定在 $t=-\infty$ 处某一特定态的量子数集合，而 H_{TC} 是双中心哈密顿量，其表达式为

$$\hat{H}_{TC} = (\vec{\alpha}\cdot\vec{p}) + \beta + V_{TC}(\vec{r},t). \tag{2}$$

在此表达式中，$\vec{\alpha}$ 和 β 是狄拉克矩阵，双中心势为

$$V_{TC}(\vec{r},t) = -\frac{Z_1\alpha}{|\vec{r}-\vec{R}_1(t)|} - \frac{Z_2\alpha}{|\vec{r}-\vec{R}_2(t)|} \tag{3}$$

其中 α 是精细结构常数。这里假设原子核沿经典轨迹 $\vec{R}_1(t)$ 和 $\vec{R}_2(t)$ 运动。

为了进一步简化含时狄拉克方程 (1) 和 (2)，我们需要将电子波函数 $\Psi_k(\vec{r},t)$ 展开为一组基函数。基函数的选择取决于所考虑的具体碰撞情形。例如，对于相对较慢的碰撞，即离子相对速度远小于电子速度的碰撞，可以采用绝热近似。在这一框架下，我们将波函数 $\Psi_k(\vec{r},t)$ 展开为以下稳态双中心狄拉克方程解 $\Phi_i(\vec{r},\vec{R})$ 的叠加

$$\Psi_k(\vec{r},t) = \sum_i a_{ki}(t)e^{-i\chi_i(t)}\Phi_i(\vec{r},\vec{R}). \tag{4}$$

这里，$\vec{R} = \vec{R}_1 - \vec{R}_2$ 是原子核之间的瞬时位置矢量。对于原子核的每个固定位置，波函数 $\Phi_i(\vec{r},\vec{R})$ 可通过求解定态狄拉克方程得到

$$\hat{H}_{TC}\Phi_i(\vec{r},\vec{R}) = E_i\Phi_i(\vec{r},\vec{R}). \tag{5}$$

相位 $\chi_i(t)$ 由定态双中心哈密顿量的本征值 E_i 定义，

$$\chi_i(t) = \int_0^t E_i(R(t'))\,dt'. \tag{6}$$

时间 $t=0$ 被设为原子核最近接近时的时间。

随时间变化的系数 $a_{ki}(t)$ 满足初始条件

$$a_{ki}(t) \xrightarrow{t\to-\infty} \delta_{ki}. \tag{7}$$

条件 (6) 和 (7) 确保波函数 (4) 在 $t\to-\infty$ 处趋近于孤立原子的定态。

本研究采用文献 [40] 中提出的方法，对定态波函数 $\Phi_i(\vec{r},R)$进行数值计算。在该方法中，双中心波函数由单极近似下哈密顿量的本征函数 $\phi^n_{\kappa\mu}$ 构造，

$$\Phi_{i\mu}(\vec{r},R) = \sum_{\kappa=-K}^{K}\sum_n C^{\kappa}_{ni\mu}\phi^n_{\kappa\mu}(\vec{r},R), \tag{8}$$

其中，n、μ 和 κ 分别为主量子数、磁量子数和角量子数。函数 $\phi^n_{\kappa\mu}$ 是采用文献 [28] 首次介绍的 B样条基组方法求解狄拉克方程得到的。为确保不存在非物理伪态，应用了文献 [41] 中的双动能平衡方法。

式 (8) 中的求和上限 K 根据所需精度选取。当 K 固定时，双中心势的多极展开中取前 $2K+1$ 项

$$V_{TC}(\vec{r}) = \sum_{l=0}^{2K} V_l(r,R)P_l(\cos\theta), \tag{9}$$

$$V_l(r,R) = \frac{2l+1}{2}\int_0^{\pi} V_{TC}(\vec{r})P_l(\cos\theta)\,\sin\theta\,d\theta. \tag{10}$$

计算采用分波方法，使用由 200 个 8 阶 B样条构成的 $|\kappa|\le 3$，计算区域的长度为 300 个自然单位。该组

参数使我们能够以 1% 的精度获得电离截面 [40]。

B样条基组是在有限尺寸盒中构造的，这会使狄拉克连续谱离散化。因此，正、负连续谱分别分解为一组离散态，其本征能量为 $E_n > mc^2$和 $E_n < -mc^2$。 K 壳电离过程对应于从基态跃迁到具有 $E > mc^2$的离散态。尽管本文着重讨论电离，但值得指出的是，也可能发生类似的激发过程：从具有 $E < -mc^2$ 的占据能级跃迁到空的 1σ 态，这描述了束缚-自由对产生。在核间距较小时，对产生的能隙可能小于电离能。尽管如此，正电子产生的总概率仍远小于电离概率 [14, 42]。

B. 电离概率

将式 (4) 和式 (6) 代入含时狄拉克方程 (1)，可得到关于振幅 $a_{kn}(t)$ 的一组一阶耦合微分方程，

$$\dot{a}_{kn}(t) = -\sum_i a_{ki} e^{i(\chi_n - \chi_i)} \left\langle \Phi_n(\vec{r},\vec{R}) \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| \Phi_i(\vec{r},\vec{R}) \right\rangle . \tag{11}$$

这里，时间导数算符仅通过状态$\Phi_i(\vec{r},R)$对随时间变化的矢量 R 的依赖作用于这些状态，因此可写为

$$\frac{\partial}{\partial t} = \dot{\vec{R}} \cdot \frac{\partial}{\partial \vec{R}} . \tag{12}$$

请注意，此处并未涉及任何近似，方程组 (11) 在数学上与原始狄拉克方程 (1) 等价。然而，为了以闭合形式求得方程 (11) 的解，我们将采用基于微扰理论的近似方法。假设各解之间为弱耦合，我们在方程 (11) 右侧令 $a_{ii} \sim 1$ 和 $a_{ki} \ll 1$ 取 $k \neq i$ 。于是，振幅 $a_{kn}(t)$ 可写为

$$a_{kn}(t) \approx -\int_{-\infty}^{t} dt\, e^{i(\chi_n - \chi_k)} \left\langle \Phi_n(\vec{r},\vec{R}) \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| \Phi_k(\vec{r},\vec{R}) \right\rangle . \tag{13}$$

振幅 $a_{kn}(t)$ 描述碰撞过程中电子从状态 k 跃迁到状态 n 的过程。因此，在 $t = +\infty$ 处，电子从初始束缚态跃迁到能量为 E 的最终连续态的振幅为

$$a_k(E) \approx -\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i(\chi_E - \chi_k)} \left\langle \Phi_E \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| \Phi_k \right\rangle . \tag{14}$$

这里，相应地将积分上限设为 $+\infty$ 。最后，电离的总概率为在给定碰撞参数 b 的碰撞中，从第 k态

$$P_k(b) = 2\int_0^{\infty} |a_k(E)|^2 dE, \tag{15}$$

其中因子 2 源于自旋简并。实际上，对于双中心势，沿核间轴的角动量投影守恒。因此，每个电子轨道都由唯一的本征值 μ表征。由于绕核间轴旋转并无差别，具有 $\pm|\mu|$ 的解在能量上是简并的。因此，为了计入电子从基态跃迁到角动量投影分别为 $+|\mu|$ 和 $-|\mu|$ 的最终态，方程 (15) 中引入了因子 2。

C. K壳层电离概率的解析表达式

由式 (14) 和 (15) 可知，电离概率的计算归结为矩阵元$\langle \Phi_E \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| \Phi_k \rangle$。虽然一般情况下只能通过数值方法求得该矩阵元，但对于从基态1σ 出发的电离，可以推导出一个简单的解析表达式。该表达式体现了矩阵元 $\langle \Phi_E \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| \Phi_k \rangle$的主要特征，下面将对此进行讨论。

为了分析跃迁振幅$\langle \Phi_E \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| \Phi_k \rangle$，我们首先详细考察算符 $\partial/\partial t$。由于态 Φ_k 是沿核间轴取向的分子态，因此可以将时间导数分解为径向部分和角向部分。

$$\frac{\partial}{\partial t} = \dot{R}\frac{\partial}{\partial R} - i(\vec{\omega}\cdot\vec{j}) \tag{16}$$

其中， $\vec{\omega}$ 是核间轴的角速度，而 j 是电子角动量算符。已知，式（16）中第二项的矩阵元在小核间距 [34]处趋于零。另一方面， 1σ 态与 $n\sigma$ 耦合时，其径向矩阵元在小核间距处呈现出非常强的峰值。因此，可以放心地忽略算符（16）的第二部分，矩阵元可写为 $\langle \Phi_E \left| \frac{\partial}{\partial t} \right| \Phi_{1\sigma} \rangle \approx \dot{R} \langle \Phi_E \left| \frac{\partial}{\partial R} \right| \Phi_{1\sigma} \rangle$，其中 Φ_E选为轨道角动量为零的 σ 态。

我们的方法基于用解析函数近似径向矩阵元 $\langle \Phi_E \left| \frac{\partial}{\partial R} \right| \Phi_{1\sigma} \rangle$。然而，由于第II B节末尾提到的连续谱离散化，无法直接采用任何拟合方法。许多离散能级对应的跃迁受到强烈抑制。因此，相邻矩阵元的数值可能存在显著差异。通过引入平均矩阵元可以解决这一问题:

$$M_{1\sigma}(E,R) = \sqrt{\frac{1}{\Delta E}\sum_n \left| \left\langle E_n \left| \frac{\partial}{\partial R} \right| 1\sigma \right\rangle \right|^2} . \tag{17}$$

这里，平均区间 ΔE 以数值 E为中心。平均区间内的能级数量应足够多，以使平均值平滑，并适于用连续函数进行参数化。根据数值分析，我们将区间 ΔE内的能级数量设为25。

请注意，由式 (17) 得到的量 $M_{1\sigma}(E,R)$ 为实数。因此，式 (17) 仅适用于矩阵元 $\langle E_n|\partial/\partial R|1\sigma\rangle$为实数或纯虚数的情况。正如前文所述，本研究仅考虑跃迁至轨道角动量为零的 σ 态。这确保矩阵元 $\langle E_n|\partial/\partial R|1\sigma\rangle$为实数，从而证明使用式 (17) 是合理的。

$M_{1\sigma}(E,R)$ 的重要特点是其随发射电子能量 E 平滑变化。根据对数值结果的分析，文献 [34, 39] 表明，对于电离至具有$E < 3mc^2$ 的态，径向矩阵元的近似可写为

$$M_{1\sigma}(E,R) \approx \frac{\sqrt{D}}{2\pi}\, E^{-\frac{\gamma}{2}} R^{-\frac{\delta}{2}}, \tag{18}$$

这里， δ、 γ和 D 是通过将函数 (18) 拟合到数值计算结果中得到的参数。需要强调的是，在单极近似中，式 (18) 中的所有参数仅取决于原子核的总电荷 $Z = Z_1 + Z_2$。与此相反，本研究中用于式 (18) 近似的数值是使用双中心函数得到的。因此，跃迁振幅分别取决于电荷数 Z_1 和 Z_2 。因此，参数 D、 γ和 δ 是两个变量 Z_1 和 Z_2的函数。这使得我们能够研究总电荷 $Z_1 + Z_2$ 相同的不同碰撞原子核组合，并考察这种不对称性如何影响电离过程的概率。

当 $Z_1 + Z_2 \lesssim 120$ 时，参数化形式 (18) 不适用。尤其是在这种情况下，矩阵元在小距离处趋于零。尽管如此，对于足够大的核间距，逆幂律仍可粗略估计平均矩阵元 $M_{1\sigma}(E,R)$ 的总体变化趋势。

将矩阵元 (18) 代入式 (14)，可得从基态电离的振幅

$$a_{1\sigma}(E) = \frac{\sqrt{D}}{i\pi} E^{-\frac{\gamma}{2}} \int_{R_0}^{\infty} \frac{dR}{R^{\frac{\delta}{2}}} \sin\varphi, \tag{19}$$

$$\varphi = \int_{R_0}^{R} \frac{dR'}{\dot{R}(R')} (E - E_{1\sigma}). \tag{20}$$

这里， R_0 是原子核的最近接近距离， φ 是由式（6）定义的相应相位之差 χ_j。

由式（19）和（20）可知，计算电离振幅 $a_{1\sigma}(E)$需要知道$\vec{R}(t)$及其导数。如前所述，原子核沿经典轨迹 $\vec{R}_1(t)$和 $\vec{R}_2(t)$运动。为了进一步计算电离概率，我们需要选定这些轨迹的具体形式。这里考虑点状原子核在纯库仑势作用下的卢瑟福散射。因此，径向速度 $\dot{R}(t)$由下式给出：

$$\dot{R}(R) = \frac{v}{R}\sqrt{(R - R_0)(R + R_0 - 2a)}, \tag{21}$$

with

$$R_0 = a + \sqrt{a^2 + b^2}, \quad a = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{2E_{cm}} \tag{22}$$

其中碰撞参数为 b，质心轰击能量为 E_{cm} ，无穷远处的速度为 v 。相位差 (20) 可改写为

$$\varphi = \frac{R_0}{v} \int_0^{\rho} \frac{(E - E_{1\sigma})(1 + \rho')d\rho'}{\sqrt{\rho'(\rho' + 2 - 2a/R_0)}}, \tag{23}$$

其中 $\rho = R/R_0 - 1$。电离主要发生在小距离处，因此可令 $\rho \ll 1$ ，并将积分估算为

$$\varphi \approx w\sqrt{\rho}, \tag{24}$$

其中

$$w = \frac{1}{2}k(E - E_{1\sigma}^0), \qquad k = \frac{4R_0}{v\sqrt{2 - 2a/R_0}}, \tag{25}$$

且 $E_{1\sigma}^0 = E_{1\sigma}(R_0)$。因子 w 的实际值满足条件 $w \gtrsim 1$。

将相位差 (24) 代入方程 (19)，并对 R 积分后，跃迁振幅$a_{1\sigma}(E)$ 可写为

$$a_{1\sigma}(E) = \frac{2\sqrt{D}}{i\sqrt{\pi}\Gamma(\frac{\delta}{2})} E^{-\frac{\gamma}{2}} \left(\frac{2R_0}{w}\right)^{1-\frac{\delta}{2}} K_{\frac{3-\delta}{2}}(w), \tag{26}$$

其中 $K_\nu(w)$ 是第二类修正贝塞尔函数 [43]。利用振幅 (26)，我们可以计算总电离概率 (15)。经过简单的代数运算，得到

$$P_{1\sigma}(b) = 2D\, \frac{(4R_0)^{2-\delta} k^{\gamma-1}}{\pi\Gamma^2(\delta/2)}\, I_{\gamma\delta}(k, E_{1\sigma}^0) \tag{27}$$

其中，函数 $I_{\gamma\delta}(k,E)$ 定义如下：

$$I_{\gamma\delta}(k,E) = \int_k^{\infty} \frac{(x - kE)^{\delta-1}}{x^{\gamma}}\, K^2_{\frac{\delta-3}{2}}\left(\frac{x - kE}{2}\right) dx. \tag{28}$$

III. 结果与讨论

推导出跃迁振幅（19）和总电离概率（27）的解析表达式后，我们现在可以分析离子-离子碰撞中的 K 壳层电离。为进行这一分析，方便起见，引入总核电荷 $Z = Z_1 + Z_2$ 和电荷不对称程度

$$A = \frac{Z_1 - Z_2}{Z_1 + Z_2}. \tag{29}$$

显然，在对称碰撞中，量 A 会消失，并且始终满足 $|A| \leq 1$。

为分析不对称性如何影响电离概率，首先需要确定进入矩阵元 (18) 的参数D、 γ和 δ。我们通过将方程 (18) 拟合到数值结果来求得这些参数。在本研究中，我们计算了约 350 对点状原子核的矩阵元，其总电荷范围为 Z =130 至 175，不对称度取值范围为 A =0 至 0.6。采用双中心波函数 (8)，我们可以考察函数 D、 γ 和 δ 对不对称度的依赖关系。相比之下，在单极近似中，这些函数仅取决于总电荷 Z。

对于每组 Z 和 A，通过最小二乘拟合确定了函数 D、 γ和 δ 的取值；拟合范围为电子逃逸能量不超过 3 MeV，核间距为 20 至 100 fm。

研究发现， D、 γ和 δ 可以用二次多项式进行合理近似，

$$\begin{aligned} D &= 5.50 - 1.79\zeta - 4.65A^2 \\ \gamma &= -0.81 + 6.20\zeta - 3.44\zeta^2, \\ \delta &= -12.08 + 20.82\zeta - 7.74\zeta^2 + 0.34A^2, \end{aligned} \tag{30}$$

其中 $\zeta = \alpha Z$ 和 α 是精细结构常数。在这种情况下，典型的近似误差约为 2%；当 Z 较小时，参数 D 对应的最大误差接近 10%。

为了说明如何利用近似表达式（18）重现“精确”的矩阵元，我们给出了图1和图2。图1展示了核间距为40 fm时，平均矩阵元随电子逃逸能量的变化；图2展示了逃逸能量为 $2mc^2$时，平均矩阵元随核间距的变化。计算针对总核电荷分别为$Z = 140$ 和 $Z = 160$的离子进行了对称碰撞（ $A = 0$）和非对称碰撞（$A = 0.5$）。数值计算结果以圆圈（对应 $Z = 160$）和三角形（对应$Z = 160$）表示，并与基于解析表达式（18）的预测结果进行了比较。对于对称碰撞和非对称碰撞，这些近似结果分别以实线和虚线表示。拟合参数 D、 γ、 δ 的取值由方程（30）给出。请注意，方程（30）的参数选择旨在使方程（18）在整个逃逸能量范围内都能最佳拟合数值数据。

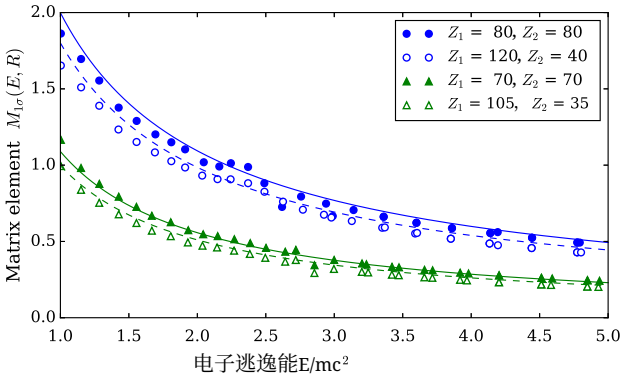


图1：总核电荷为160（圆圈）和140（三角形）的对称碰撞与非对称碰撞中，平均径向矩阵元 $M_{1\sigma}(E,R)$（自然单位）随电子逃逸能的变化。核间距设为40 fm。根据解析表达式（18）并采用方程（30）给出的拟合参数所得的预测结果，以实线表示对称碰撞，以虚线表示非对称碰撞。

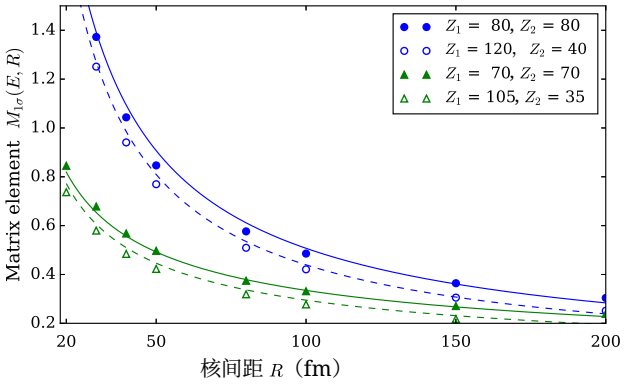


图2：与图1相同，但将矩阵元 $M_{1\sigma}(E,R)$ 表示为电子逃逸能 $E = 2mc^2$ 下核间距的函数。

能量和核间距离，而不仅限于图 1 和图 2 中使用的参数。

1σ 态的电离概率由近似表达式 (27) 给出，如图 3 所示。冲量参数设为零，原子核最近接近时的距离为 $R_0 = 20$ fm。实线对应不对称参数 A 的不同取值。此外，我们还将计算结果与文献 [24, 34] 的预测进行了比较。在这些研究中，采用了单极近似来估算离子碰撞中的 K 壳层电离概率。图 3 中的虚线表示 [24] 的数值结果。此外，文献 [34, 35] 采用了与式 (18) 类似的解析方法，但只涉及两个拟合参数。对应的电离概率预测以...

...表示

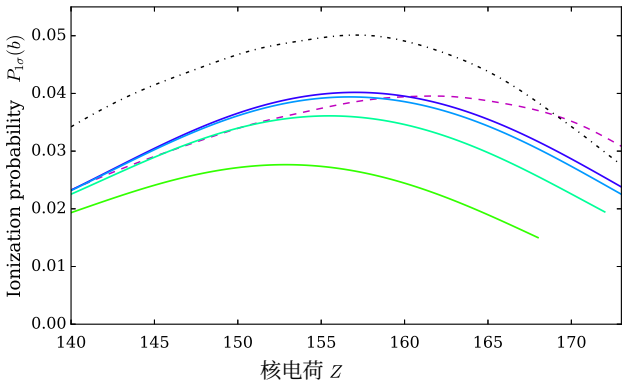


图 3：类氢离子的 1σ 态与裸原子核碰撞时的电离概率。计算采用零碰撞参数，并设最近接近距离为 $R_0 = 20$ fm。实线表示公式 (27) 给出的近似结果，对应不同的不对称度 A；虚线表示参考文献 [24], 中的数值结果，点划线表示参考文献 [34] 中在单极近似下得到的近似结果。

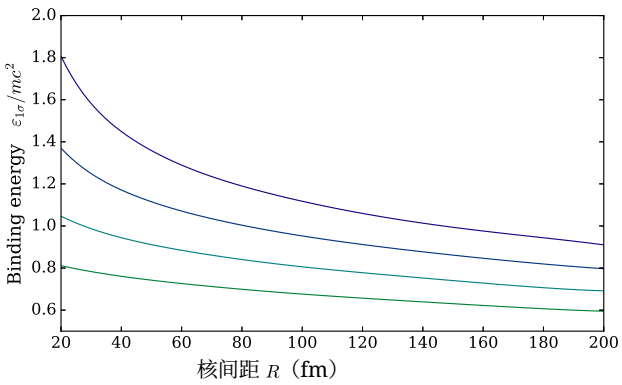


图 4：对称碰撞中 1σ 态的束缚能随核间距的变化。不同曲线对应不同的总电荷 Z。

点划线。

从一般考虑可知，在对称碰撞情形下，单极近似所得结果应能很好地描述电离概率。事实上，对于$A = 0$, 式 (27) 能很好地再现数值计算结果（虚线）。与文献 [34],的解析公式相比，由于在式 (18) 中引入了额外的拟合参数 δ，我们的方法精度有所提高。此外，我们的解析方法还能够将非对称碰撞纳入考虑。可以得出结论：核电荷不对称性会使电离概率相较于对称情形有所降低。对于较重的原子核，概率降幅更为显著；对于 $A \approx 0.5$, 降幅接近 $\sim 30\%$。

为了说明电离概率 $P_{1\sigma}(b)$ 对不对称参数 A 的敏感性，我们先考察函数 D，它出现在表达式 (18) 中。从方程 (30) 可以看出，该函数对不对称度最为敏感，并且在非对称碰撞中会减小。这会抑制电离概率，从方程 (27) 可以很容易看出这一点。

电离概率降低的另一个原因是非对称准分子中的 1σ 能级下降，这使基态与连续态之间的能隙增大。根据我们的计算，当总电荷 Z 和核间距固定时，基态的束缚能 $\varepsilon_{1\sigma}$ 会随着不对称度 A 的平方而持续增大，

$$\varepsilon_{1\sigma} = \varepsilon^0_{1\sigma}(1 + \eta A^2). \qquad (31)$$

这里， $\varepsilon^0_{1\sigma}$ 是在总核电荷取相同值时的对称情形下的束缚能 $A = 0$ Z

以及距离 R。系数 η 取决于 Z 和 R，可近似表示为

$$\eta \approx 1.70 + 1.90R - 1.42\zeta R - 4.38\zeta + 2.71\zeta^2, \qquad (32)$$

其中 $\zeta = \alpha Z$。图 4 展示了对称准分子束缚能随核间距的变化，涵盖总电荷 Z的不同取值。

非对称碰撞中电离概率受到抑制并不令人意外。事实上，在极限情形 $Z_1 \gg Z_2$ 下，第二个原子核可视为一种微扰。在总电荷 Z 固定时，降低不对称度 A 会增强第二个原子核造成的微扰，同时削弱电子与准分子之间的束缚。因此，对称碰撞时电离概率最大，并会随着不对称度 A 增大而降低。

图 5 展示了 $Z = 160$和 $Z = 180$情况下电离概率对碰撞参数的依赖关系。质心轰击能量分别设为 3.5 和 2.5 兆电子伏特/核子。实线对应完全对称碰撞（Hg+Hg 和 Th+Th），虚线则对应涉及已知最重元素 $_{118}$Og 的碰撞，以此作为示例。在所考察的情况下，非对称碰撞与对称碰撞的概率之比 $P_{asym}(b)/P_{sym}(b)$ 在 $b = 0$ 时超过 50%（图 6）。

需要强调的是，尽管核间距很小，单极近似仍无法再现非对称碰撞中电离概率的降低，因为单极势不依赖于不对称度。因此，非对称碰撞需要采用非微扰处理。

IV. 总结

我们给出了一个近似公式，用于估算在类氢离子与裸核碰撞时从 1σ 态发生电离的概率——

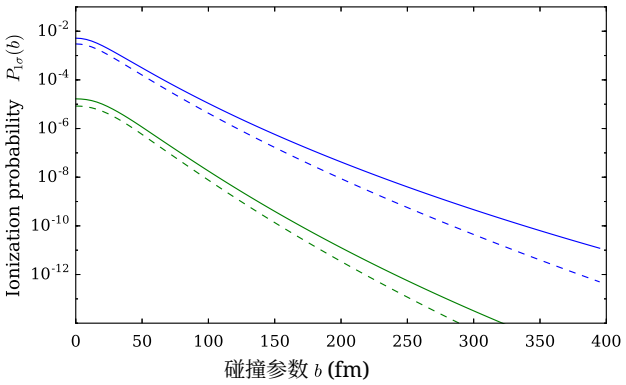


图 5：电离概率对碰撞参数的依赖关系。实线表示 Z =180的对称碰撞， $Z = 160$ ，虚线表示与原子序数为 118 的原子核发生的碰撞。

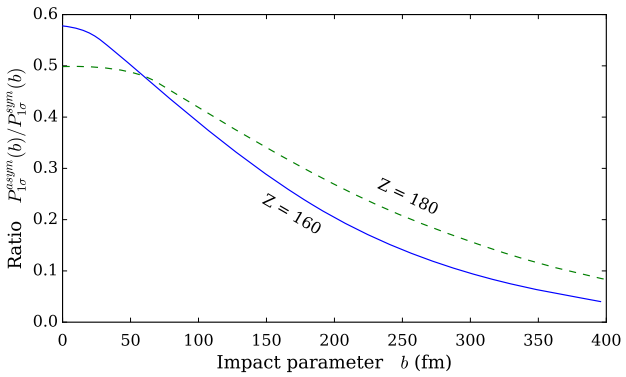


图 6：非对称碰撞与对称碰撞的电离概率之比 $P_{1\sigma}^{asym}(b)/P_{1\sigma}^{sym}(b)$ 随碰撞参数 b 的变化。在非对称情形中，重原子核的原子序数设为 118。

该方法与文献 [34, 35] 中提出的方法相似。在此方法中，利用电子在碰撞原子核势场中的含时波函数对定态进行绝热展开，并在一阶微扰理论框架内求得电离概率。基态到正能连续谱的跃迁矩阵元用含三个拟合参数 D、 γ 和 δ 的简洁表达式（18）进行参数化。矩阵元的数值计算采用了根据文献 [40] 中提出的方法得到的双中心波函数。与先前研究 [34]，不同，我们的公式基于双中心势的完整多极展开，因此可以研究原子序数不同的原子核之间的碰撞 $Z_1 \neq Z_2$。

对于对称碰撞，由式（27）得到的电离概率值与单极近似 [24]下进行的数值计算结果吻合良好。相比之下，在非对称碰撞中，估算出的概率显著下降，降幅达百分之几十。由此可见，尽管两原子核间距较小，单极近似仍倾向于高估非对称碰撞中的电离概率。

[1] H. Backe、L. Handschug、F. Hessberger 等，《物理评论快报》**40**，1443（1978）。[2] G. Mehler、T. de Reus、J. Reinhardt、G. Soff 和 U. Müller，《物理学杂志A》**320**，355（1985）。[3] T. Cowan、H. Backe、M. Begemann 等，《物理评论快报》**54**，1761（1985）。[4] M. Krämer、B. Blank、E. Boek 等，Phys. Rev. C **40**, 1662 1989( )。[5] Th. Stöhlker、P. H. Mokler、K. Beckert 等，Phys. Rev. Lett. **71**，2184（1993）。[6] Th. Stöhlker、P. H. Mokler、F. Bosch 等，Phys. Rev. Lett. **85**，3109（2000）。[7] S. Heinz、E. Berdermann、F. Heine 等，Eur. Phys. J. A **9**，55（2000）。[8] C. Brandau、C. Kozhuharov、A. Müller 等，Phys. Rev. Lett. **91**，073202（2003）。[9] Th. Stöhlker、A. Gumberidze、X. Ma 等，Hyperfine Interactions **146**，97（2003）。[10] G. Bednarz、A. Warczak、D. Sierpowski 等，Hyperfine 相互作用**146**, 29 (2003). [11] A. Gumberidze, Th. Stöhlker, D. Banaś, 等，《超精细相互作用》**199**, 59 (2011). [12] K. E. Stiebing, H. Schmidt-Böcking, W. Schadt, 等，《物理学杂志A》**319**, 239 (1984). [13] U. Wille 和 R. Hippler.《物理报告》**132**, 129 (1986). [14] U. Müller-Nehler, G. Soff.《物理报告》**246**, 101 (1994). [15] W. Greiner, B. Müller 和 J. Rafelski. 强场量子电动力学 (Springer-Verlag Berlin Heidelberg: 1985).[16] 概念设计报告：离子束与反质子束国际加速器设施，W. Henning 编（GSI，达姆施塔特，2001）。[17] A. Gumberidze 等，《核仪器与方法：物理研究B》**233**, 28 (2005). [18] Th. Stöhlker 等，《核仪器与方法：物理研究B》**235**, 494 (2005). [19] A. Gumberidze 等，《核仪器与方法：物理研究B》**267**, 248 (2009).

[20] J. D. Molitoris, R. Anholt, W. E. Meyerhof 等, 《物理学杂志A》**323**, 127 (1986). [21] D. Liesen, B. Liu 和 A. Warczak, 《物理学杂志A》**323**, 253 (1986). [22] P. Verma, P. H. Mokler, A. Bräuning-Demian 等, 《核仪器与方法：物理研究B》.**245**, 56 (2006). [23] G. Soff, W. Betz, B. Müller, W. Greiner 和 E. Merzbacher, 《物理学快报A》**65**, 19 (1978). [24] G. Soff, B. Müller 和 W. Greiner.《物理评论快报》**40**, 540 1978( ). [25] W. Betz, G. Soff, B. Müller 和 W. Greiner.《物理评论快报》**37**, 1046 (1976). [26] G. Soff, W. Greiner, W. Betz 和 B. Müller, 《物理评论A》.**20**, 169 (1979). [27] F. Fillion-Gourdeau, E. Lorin 和 A. D. Bandrauk, 《物理评论A》**85**, 022506 (2012). [28] W. R. Johnson, S. A. Blundell 和 J. Sapirstein.《物理评论A》**37**(2) 307 (1988). [29] O. Kullie 和 D. Kolb, 《欧洲物理学杂志D》**17**, 167 (2001). [30] A. N. Artemyev, A. Surzhykov, P. Indelicato, G. Plunien 和 Th. Stöhlker, 《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》**43**, 235207 2010( ). [31] I. I. Tupitsyn 等, 《物理评论A》**82**, 042701 (2010). [32] A. Marsman 和 M. Horbatsch, 《物理评论A》**84**, 032517 (2011). [33] D. Liesen、P. Armbruster、H. H. Behncke 和 S. Hag- mann, 《物理学杂志A》**288**, 417 (1978). [34] B. Müller、G. Soff、W. Greiner 和 V. Ceausescu, 《物理学杂志A》**285**, 27 (1978). [35] B. Müller、J. Reinhardt 和 W. Greiner. 《物理学杂志A》**311**, 151 (1983). [36] J. Bang 和 J. M. Hansteen, 《物理学快报A》**72**, 218 (1979). [37] J. Bang 和 J. M. Hansteen, 《物理学评论》**22**, 609 (1980). [38] D. Liesen、P. Armbruster、F. Bosch 等, 《物理评论快报》**44**, 983 (1980). [39] F. Bosch、D. Liesen、P. Armbruster 等, 《物理学杂志A》**296**, 11 (1980). [40] S. R. McConnell、A. N. Artemyev、M. Mai、A. Surzhykov. 《物理评论A》**86**, 052705 (2012). [41] V. M. Shabaev、I. I. Tupitsyn、V. A. Yerokhin、G. Plu- nien 和 G. Soff. 《物理评论快报》**93**(13) 130405 (2004). [42] J. Reinhardt、B. Müller 和 W. Greiner. 《物理评论A》**24**, 103 (1981). [43] M. Abramowitz 和 I. Stegun.《数学函数手册》《数学函数手册》(Dover出版社、纽约，1965)。