

# (e, 2e) 反应中碰撞机理的理论研究\*

张穗萌

(安徽省六安师范专科学校物理系, 六安 237012)

(1999 年 5 月 23 日收到)

在前期工作的基础上,研究了共面等能几何条件下,电子入射离化氢原子三重微分截面的结构. 讨论了 Brauner, Briggs 和 Klar 理论的修正对截面结构的影响. 在两个出射电子相对角固定的情形下,验证了一种被称为“triple-binary”碰撞的新的碰撞过程. 研究了各峰的位置分布和主要的碰撞机理是怎样随入射能和相对角的增加而改变的.

PACC: 3480D; 3450H

## 1 引 言

近年来,对于电子入射离化中性原子的(e, 2e)反应,从实验测量到理论研究都得到了广泛关注<sup>[1-5]</sup>. 在各种不同几何条件下(e, 2e)反应的实验测量给出了电离过程中不同的动力学方面的信息. 如何从理论上圆满地解释碰撞过程的微观机理,是理论研究尚未完全解决的问题. 就我们所知,到目前为止,在(e, 2e)反应中已定义并为人们广泛接受的碰撞机理有 4 种. 它们分别是: single-binary(SB)碰撞和通常的 double-binary(DB)碰撞,在共面非对称几何条件下,这两种碰撞峰分别对应于三重微分截面(TDCS)中的 binary 和 recoil 峰<sup>[6]</sup>;另两种碰撞也是两体二次碰撞,但微观机制上与上述 DB 碰撞不同,所以被标记为 DB2 碰撞<sup>[7]</sup>.

最近,Chen 等<sup>[8]</sup>用 Brauner, Briggs 和 Klar(缩写为 BBK)理论研究了共面等能、两个出射电子相对角固定几何条件下,电子入射离化 He 原子的 TDCS. 提出了一种新的碰撞过程——triple-binary(TB)碰撞. 在进一步的研究中,为了对 TB 碰撞提供更有力的理论支持,本文用 BBK 理论研究了入射能很低的情况下( $E_0 = 20$  和  $30$  eV),共面等能、两个出射电子相对角取不同固定值时,电子入射离化 H 原子的 TDCS. 结果发现,理论曲线得不到合理的截面结构. 而修正后的 BBK 理论却给出了与实验基本符合的 DB2 碰撞峰和 TB 碰撞峰. 再次从理论上

验证了 TB 碰撞模型的正确性. 本文还详细地研究了形成各峰的微观机理以及峰的大小是怎样随入射能和两个出射电子相对角的不同而变化的;讨论了交换效应对峰的影响. 在此基础上,研究了各峰的位置分布所遵循的一般规律.

## 2 理论计算

在原子单位中,考虑具有动量  $k_0$ 、能量  $E_0$  的入射电子与基态氢原子发生碰撞,假设碰撞后两个出射电子的动量和能量分别为  $k_1, k_2$  和  $E_1, E_2$ ,则这一过程的 TDCS 由下式给出:

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE} = (2\pi)^4 \frac{k_1 k_2}{k_0} \left\{ \frac{3}{4} |f(k_1, k_2) - f(k_2, k_1)|^2 + \frac{1}{4} |f(k_1, k_2) + f(k_2, k_1)|^2 \right\}, \quad (1)$$

其中  $\Omega_1, \Omega_2$  为接收动量为  $k_1, k_2$  两个电子的立体角;  $f(k_1, k_2)$  和  $f(k_2, k_1)$  分别为直接散射振幅和交换散射振幅,  $f(k_1, k_2)$  定义为

$$f(k_1, k_2) = \Psi_{k_1, k_2}^-(r_1, r_2) \left| -\frac{1}{r_1} + \frac{1}{|r_1 - r_2|} \right| \cdot \Psi_{k_0}(r_1, r_2), \quad (2)$$

其中  $r_1$  和  $r_2$  分别为入射电子 1 和束缚电子 2 的位置矢量,初态  $\Psi_{k_0}(r_1, r_2)$  为具有动量为  $k_0$  的入射平面波与基态 H 原子波函数的乘积,末态

\*安徽省教育委员会骨干教师基金资助的课题.

$\Psi_{k_1, k_2}^-(r_1, r_2)$  选用 BBK 波函数, 其一般形式为

$$\Psi_{k_1, k_2}^-(r_1, r_2) = (2\pi)^{-3} \exp[i(k_1 \cdot r_1 + k_2 \cdot r_2)] \cdot C(\alpha_1, k_1, r_1) C(\alpha_2, k_2, r_2) \cdot C(\alpha_{12}, k_{12}, r_{12}), \quad (3)$$

其中

$$C(\alpha, k, r) = \Gamma(1 - i\alpha) \exp\left(-\frac{1}{2}\pi\alpha\right) F_1 \left[ i\alpha; 1; -i(kr + k \cdot r) \right]. \quad (4)$$

(3) 式中  $\alpha$  称为索末菲参量<sup>[1]</sup>,  $\alpha_1 = -Z/k_1$ ,  $\alpha_2 = -Z/k_2$ ,  $\alpha_{12} = 1/2 k_{12}$ , 其中

$$k_{12} = \frac{1}{2}(k_1 - k_2). \quad (5)$$

由上述  $\alpha_i$  ( $i = 1, 2, 12$ ) 得到的末态波函数  $\Psi_{k_1, k_2}^-(r_1, r_2)$  称为 3C 函数<sup>[1]</sup>.

在前期的工作中, 考虑末态三粒子间的动力学屏蔽 (DS) 之后, 曾对 BBK 理论提出过各种不同的修正方案<sup>[3, 6]</sup>, 这些修正归结为对索末菲参量的修正. 然而在对称几何条件下,  $k_1 = k_2 = k$  时, 各修正方案给出的新的索末菲参量均为

$$\beta_1 = \beta_2 = -\frac{Z - \sin\theta/4}{k}, \quad \beta_{12} = \frac{1 - \sin^2\theta}{2k \sin\theta}, \quad (6)$$

其中  $\theta = (\arccos k_1 \cdot k_2)/2$  为两个出射电子对入射方向的张角. 由  $\beta_i$  ( $i = 1, 2, 12$ ) 得到的末态波函数  $\Psi_{k_1, k_2}^-(r_1, r_2)$  称为 DS3C 函数<sup>[1]</sup>.

本文利用上述 3C 和 DS3C 函数, 在不同入射能的情况下, 分别计算了共面等能、两个出射电子相对角取不同固定值时, 电子入射离化 H 原子的 TDCS, 数值方法继续沿用文献 [6] 使用过的计算机程序.

## 3 结果与讨论

### 3.1 本文曲线与实验及超球分波 (HPW) 法结果的比较

最近, Das 等<sup>[2]</sup>用 HPW 方法研究了入射能为  $E_0 = 20$  和  $30$  eV 时, 两个出射电子相对角取不同固定值时, 电子入射离化 H 原子的 TDCS, 并与 Röder 等<sup>[9]</sup>的最新测量结果进行了比较. 在该几何条件下, 本文用 3C 和 DS3C 波函数分别进行了计算. 计算结果如图 1 和图 2 所示.

图 1 给出入射能为  $E_0 = 30$  eV,  $E_1 = E_2$  条件下, 用 3C 和 DS3C 波函数得到的两个出射电子相对

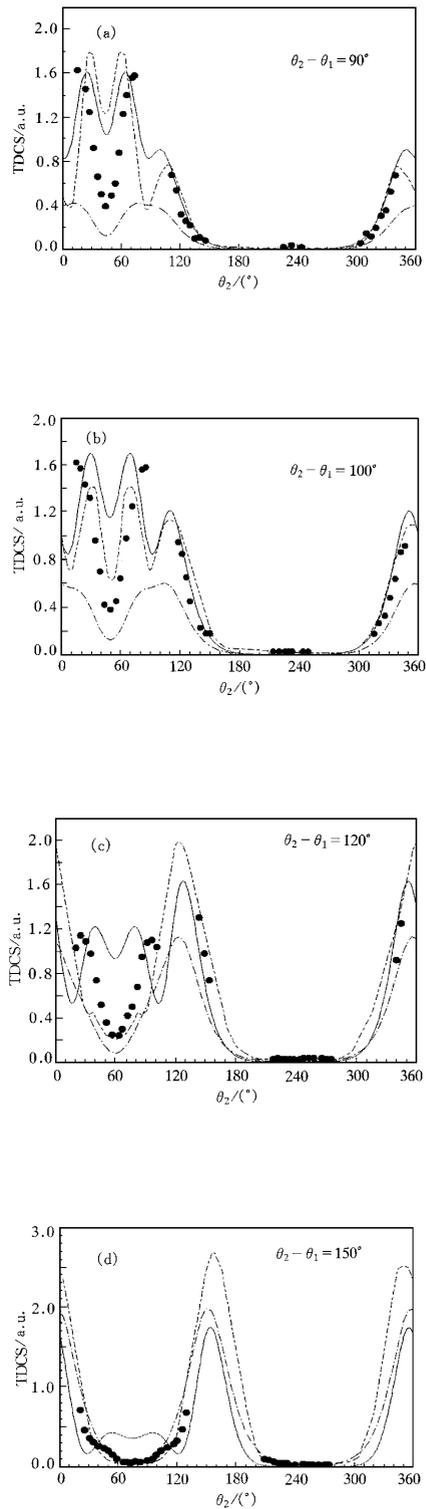


图 1 (a)–(d)  $E_0 = 30$  eV, 共面等能、两个出射电子相对角固定几何条件下, 电子入射离化 H 原子的 TDCS.  $\bullet$  为实验数据<sup>[9]</sup>; — 为 DS3C 结果; - - 为 3C 结果; - · - 为 HPW 结果<sup>[2]</sup>

角为  $\theta_{21} = 90^\circ, 100^\circ, 120^\circ$  和  $150^\circ$  时, 电子入射离化 H 原子的 TDCS 随  $\theta_2$  的变化曲线. 图 1 同时给出 HPW 曲线和实验结果. 由图 1 可见, DS3C 曲线以  $(\theta_2 - \theta_1)/2$  为对称点, 呈现 4 个峰. 靠近对称点的两个峰称为向前峰<sup>[8]</sup>, 远离对称点的两个峰称为向后峰<sup>[8]</sup>. 随着  $\theta_{21}$  的增大, 两个向前峰逐渐减小, 而两个向后峰不断增大, 直到  $\theta_{21} = 150^\circ$  时(见图 1(d)), 两个向前峰变得很小, 几乎消失, 而两个向后峰变得很大. 这种变化规律与实验结果及 HPW 曲线一致. 而 3C 曲线始终没有出现 4 个峰, 因此它不仅不在峰的大小上, 而且在峰的形状上都严重地偏离了实验结果.

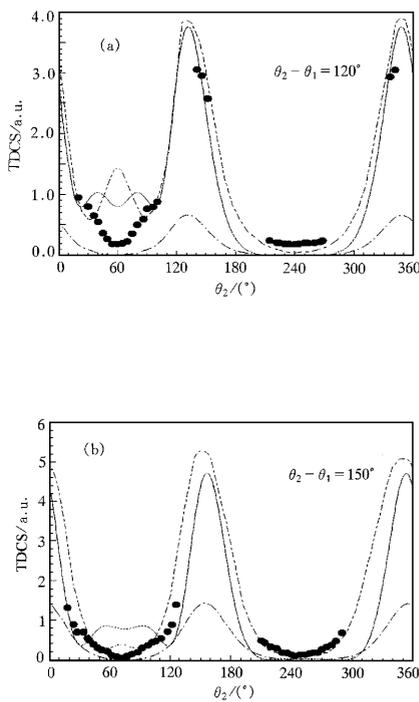


图 2 (a)(b) 图注同图 1, 但  $E_0 = 20$  eV

图 2 对应于  $E_0 = 20$  eV,  $E_1 = E_2$ ,  $\theta_{21} = 120^\circ$  和  $150^\circ$  的情形. 此时 DS3C 曲线仍然呈现 4 个峰. 这与扭曲波玻恩近似(DWBA)的结果一致(图 2 没有给出 DWBA 曲线, 但可从文献[9]中查到). 从实验结果来看, 似乎也有 4 个峰的变化趋势, 但是两个向前峰不是太明显. 然而 HPW 曲线在对称点  $\theta_2 = (\theta_2 - \theta_1)/2$  处却给出了一个峰, 这与实验结果明显不相符.

总之, DS3C 的计算结果, 在曲线形状上与实验符合得较好. 3C 曲线没有出现的两个向前峰, 经

DS3C 修正后, 得到了这两个峰. 这再次表明: 在低入射能情况下, 末态三粒子彼此间的屏蔽效应不可忽略.

### 3.2 由截面结构解释碰撞的微观机理

在以上讨论中, 可以看到: 不同几何条件下, DS3C 和 HPW 曲线都明显地呈现 4 个峰. 为了对峰的形成给出合理的物理解释, 下面将对  $E_0 = 30$  eV,  $\theta_{21} = 90^\circ$  的情形进行详细研究. 为此, 图 3 不仅给出这一几何条件下的 DS3C 曲线, 还给出取 DS3C 为末态波函数时, 由直接(---)和交换(... ) 散射振幅单独生成的截面. 由图 3 可见, 两个向前峰对称地分布在  $(\theta_2 - \theta_1)/2$  附近. 将这两个向前峰分别标记为  $(DB2)_1$  和  $(DB2)_2$ . 与此同时, 两个向后峰相应地被标记为  $(TB)_1$  和  $(TB)_2$ . 图 4(a)–(d) 分别给出形成 DB2 和 TB 峰的微观碰撞过程.

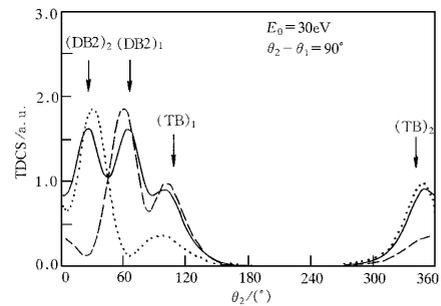


图 3  $E_0 = 30$  eV,  $\theta_{21} = 90^\circ$  时, 电子入射离化 H 原子的 TDCS — 为 DS3C 总截面; --- 为直接散射振幅的截面; ... 为交换散射振幅的截面

由图 3 可见, 两个向前峰出现在  $\theta_2 = 65^\circ$  和  $25^\circ$  附近, 它们分别由直接和交换散射振幅起决定作用. 这两个峰产生于 DB2 碰撞, 碰撞的微观过程是: 入射粒子首先被靶核弹性地散射, 它的方向改变  $\theta'$  的小角度, 接着又与束缚电子碰撞(见图 4(a)), 碰撞后, 两个电子分别沿着  $\theta_1 = -30^\circ$  ( $330^\circ$ ) 和  $\theta_2 = 60^\circ$  方向出射. 截面中由直接散射振幅单独给出的峰正好出现在  $\theta_2 = 60^\circ$  处. 可以推知, 两个电子交换后, 碰撞的微观过程如图 4(b)所示(两个出射电子交换前的方向分别在括号中给出), 此时,  $\theta_1 = -60^\circ$  ( $300^\circ$ ),  $\theta_2 = 30^\circ$ . 截面中由交换散射振幅单独给出的峰也正好出现在  $\theta_2 = 30^\circ$  处. 从以上讨论可以看到: 由直接和交换散射振幅单独给出的峰都准确地

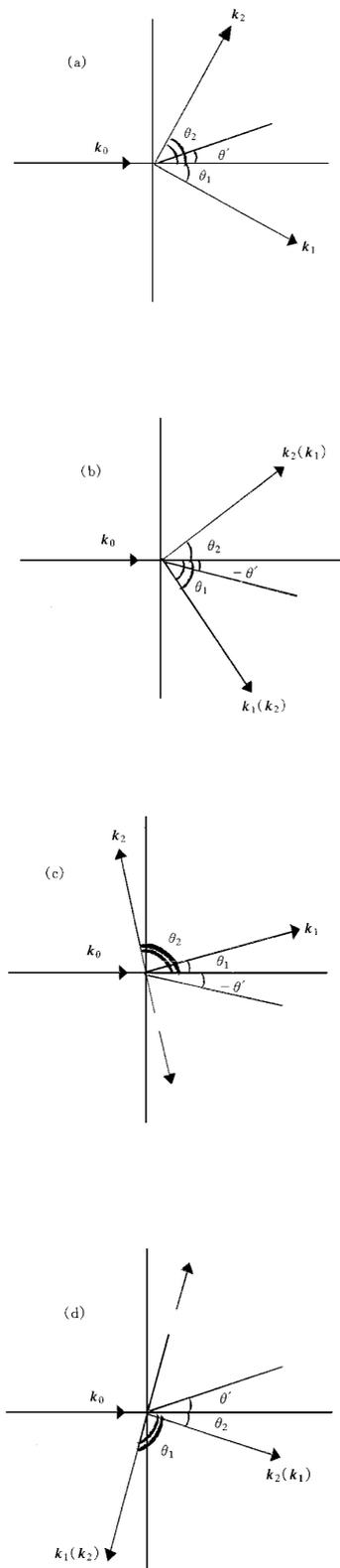


图4  $E_0 = 30 \text{ eV}$ ,  $\theta_{21} = 90^\circ$ , 共面等能几何条件下, 形成 DB2 和 TB 峰的碰撞机制 (a)–(d)

出现在碰撞模型所预言的位置处, 这是对 DB2 碰撞模型的有力证明. 至于总截面给出的两个 DB2 峰分别出现在  $\theta_2 = 65^\circ$  和  $25^\circ$  (而不是  $60^\circ$  和  $30^\circ$ ) 处, 是由于直接和交换散射相互作用的结果.

图 3 还表明: 两个向后峰出现在  $\theta_2 = 100^\circ$  和  $350^\circ$  附近, 它们也分别是由直接和交换散射振幅起决定作用. 这两个峰产生于一种被称为“triple-binary (TB) 碰撞”的新的微观过程<sup>[8]</sup>. 碰撞机理是: 入射粒子首先被靶核弹性地散射, 方向改变  $-\theta'$ , 接着与束缚电子碰撞(见图 4(c)), 碰后沿着  $\theta_1 = 12^\circ$  方向出射. 与此同时, 束缚电子获得一个与  $k_1$  成  $90^\circ$  方向的动量, 但并未直接出射, 被核反弹后沿着  $\theta_2 = 102^\circ$  方向出射, 所以由直接散射振幅单独给出的  $(\text{TB})_1$  峰出现在  $\theta_2 = 102^\circ$  处. 两个电子交换后的碰撞过程如图 4(d) 所示(括号中分别给出交换前两个出射电子的方向), 此时  $\theta_1 = -102^\circ$  ( $258^\circ$ ),  $\theta_2 = -12^\circ$  ( $348^\circ$ ). 由交换散射振幅单独给出的  $(\text{TB})_2$  峰出现在  $\theta_2 = -12^\circ$  ( $348^\circ$ ) 处. 由于同上的原因, 总截面给出的两个 TB 峰与直接和交换散射振幅单独给出的 TB 峰在大小和位置上都略有不同, 但差别不大. 这表明在 TB 碰撞过程中直接和交换散射之间的相互作用比 DB2 碰撞中要弱.

### 3.3 截面中各峰的位置分布规律

为了揭示各峰的位置分布所遵循的一般规律, 表 1 给出不同入射能和  $\theta_{21}$  取不同值时, 由直接和交换散射振幅单独给出的峰以及总截面的峰所在的位置.

由表 1 可见, 在入射能一定的情况下, 由直接和交换散射振幅单独给出的 DB2 峰的位置分布满足下列关系:

$$\theta_2 = \frac{\theta_2 - \theta_1}{2} \pm \theta', \quad (7)$$

其中“+”和“-”号分别对应于  $(\text{DB2})_1$  (直接) 和  $(\text{DB2})_2$  (交换) 峰,  $\theta'$  为入射电子被靶核弹性散射后的偏转角度. 对于给定的  $E_0$ , 由直接和交换振幅单独给出的两个 DB2 峰离对称点的距离  $\theta'$  是恒定的. 由表 1 数据容易求出: 当  $E_0 = 20 \text{ eV}$  时,  $\theta' = 14^\circ$ ;  $E_0 = 30 \text{ eV}$  时,  $\theta' = 15^\circ$ . 即随着入射能的增加, 入射粒子与核一次碰撞的偏角略有增加. 另一方面, 入射粒子被靶核弹性散射后的偏角应满足著名的 Rutherford 散射公式:

$$b = \left( \frac{1}{2E_0} \right) \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0} \cot \frac{\theta'}{2}, \quad (8)$$

其中  $b$  称为瞄准距离. 对于 H 原子, 可取  $b = 0.053$

表 1 不同入射能和  $\theta_{21}$  取不同值时各峰的位置

$E_0/eV$	$\theta_{21}/(^{\circ})$	(DB2) <sub>1</sub> 位置( $\theta_2/(^{\circ})$ )	(DB2) <sub>2</sub> 位置( $\theta_2/(^{\circ})$ )	(TB2) <sub>1</sub> 位置( $\theta_2/(^{\circ})$ )	(TB2) <sub>2</sub> 位置( $\theta_2/(^{\circ})$ )				
20	120	总截面	80	总截面	40	总截面	132	总截面	348
		直接散射振幅	74	交换散射振幅	46	直接散射振幅	133	交换散射振幅	347
	150	总截面	93	总截面	57	总截面	157	总截面	353
		直接散射振幅	89	交换散射振幅	61	直接散射振幅	157	交换散射振幅	353
30	90	总截面	65	总截面	25	总截面	100	总截面	350
		直接散射振幅	60	交换散射振幅	30	直接散射振幅	102	交换散射振幅	348
	100	总截面	70	总截面	30	总截面	110	总截面	350
		直接散射振幅	65	交换散射振幅	35	直接散射振幅	111	交换散射振幅	349
	120	总截面	80	总截面	40	总截面	128	总截面	352
		直接散射振幅	75	交换散射振幅	45	直接散射振幅	129	交换散射振幅	351
	150	总截面	96	总截面	54	总截面	154	总截面	356
		直接散射振幅	90	交换散射振幅	60	直接散射振幅	155	交换散射振幅	355

nm, 当  $\theta'$  为不同值时, 由(8)式可算出相应的  $Z$ . 例如将  $\theta' = 15^{\circ}$  代入(8)式, 可解得  $Z = 0.3$ , 这正是初通道中入射粒子感受到的靶核被束缚电子屏蔽后的有效电荷. 这一结果定量地给出初通道中库仑作用的强度. 这对于在初通道中引入库仑波描述, 具有重要的参考价值.

两个 TB 峰的位置分布情况较复杂. 由直接和交换散射振幅单独给出的 TB 峰离对称点的距离不仅与  $E_0$  有关, 而且与两个出射电子的相对固定角  $\theta_{21}$  有关. 由表 1 可见, 当  $E_0 = 20$  eV,  $\theta_{21} = 120^{\circ}$  和  $150^{\circ}$  时, 两个 TB 峰离对称点的偏角分别为  $73^{\circ}$  和  $82^{\circ}$ ; 而当  $E_0 = 30$  eV,  $\theta_{21} = 90^{\circ}, 100^{\circ}, 120^{\circ}$  和  $150^{\circ}$  时, 相应的偏角为  $57^{\circ}, 61^{\circ}, 69^{\circ}$  和  $80^{\circ}$ . 由此可见, 这个偏角在  $E_0$  给定时, 随着  $\theta_{21}$  的增加而增加; 而当  $\theta_{21}$  给定时, 随着  $E_0$  的增加而减小. 这一特点与两个 DB2 峰的分布不同, 这是 TB 碰撞峰所特有的分布规律.

## 4 结 论

本文研究了共面等能、两个出射电子相对角固定几何条件下, BBK 理论的修正以及交换效应对截面结构的影响. 验证了一种被称为两体三次(TB)碰撞的新的微观过程. 研究了各峰的位置分布所遵循的一般规律. 尤其值得指出的是, 本文给出了研究初通道中入射粒子与靶核之间库仑作用强度的方法. 这一方法的提出, 对于在进一步的工作中, 修正初通道中的平面波描述, 具有重要的指导意义.

安徽大学物理系陈长进博士与作者进行了有益的讨论, 中国科学院武汉物理与数学研究所刘煜炎研究员给予了有效的帮助, 六安师范专科学校副校长廖光林副教授为作者的研究工作提供了各种方便, 在此一并致谢.

[1] J. Berakdar, J. S. Briggs, *Phys. Rev. Lett.* **72**(1994) 3799.  
 [2] J. N. Das, K. Chakrabarti, *Phys. Rev.* **A56**(1997) 365.  
 [3] Z. Chen, Q. Shi, S. Zhang *et al.*, *Phys. Rev.* **A56**(1997), R2514.  
 [4] S. Zhang, Z. Chen, Q. Shi *et al.*, *Z. Phys.* **D41**(1997) 171.  
 [5] S. M. Zhang *et al.*, *Acta Physica Sinica* **48**(1999) 453 (in Chinese) [张穗萌等, *物理学报* **48**(1999) 453].

[6] S. M. Zhang *et al.*, *Acta Physica Sinica (Overseas Edition)* **8**(1999) 496.  
 [7] M. Brauner, J. S. Briggs, *J. Phys.* **B26**(1993) 2451.  
 [8] Z. Chen, Z. Ni, Q. Shi *et al.*, *J. Phys.* **B31**(1998) 3803.  
 [9] J. Röder, J. Rasch, K. Jung *et al.*, *Phys. Rev.* **A53**(1996), 225.

# A THEORETICAL STUDY ON COLLISION MECHANISMS FOR ( e 2e ) PROCESSES\*

ZHANG SUI-MENG

( *Department of Physics , Lu 'an Teachers College , Lu 'an 237012 , China* )

( Received 23 May 1999 )

## ABSTRACT

Based on our earlier paper ,the structure of the triple differential cross sections for electron impact ionization of atomic hydrogen in the coplanar equal energy-sharing geometry is considered. It has been discussed how the influence of the modification of the Brauner ,Briggs and Klar model on the structures of the cross sections. A new collision process called triple-binary collision is verified in the situation where the angle of the two outgoing electrons is fixed. It has been shown how the position of all peaks and the dominant collision mechanisms change as the incident energy and relative angle increases.

**PACC** : 3480D ; 3450H

---

\*Project supported by the Foundation for Backbone of the Teachers from Education Commission of Anhui Province , China ( Grant No. 1998-( 10 ) ).