

# 一维库仑三体系统中电子碰撞导致的 (e, 2e) 电离截面

段 斌 白在桥 顾 雁

(中国科学技术大学天文与应用物理系, 非线性中心, 合肥 230026)

(1999 年 11 月 15 日收到 2000 年 1 月 10 日收到修改稿)

用经典力学的方法, 研究了三种不同类型的一维库仑三体模型在总能量大于零时 (e, 2e) 电离截面与总能量的关系. 发现了不同的模型的 (e, 2e) 电离截面有不同的阈值行为, 即 s 波模型, 共线 e<sup>-</sup>Ze<sup>-</sup> 和 Ze<sup>-</sup>e<sup>-</sup> 模型的 (e, 2e) 电离截面在阈值附近分别遵守线性律, Wannier 定律和平方根律. 还对所得数值结果作了理论分析.

关键词: 库仑三体系统, 经典动力学, (e, 2e) 电离截面

PACC: 0547, 3480D

## 1 引 言

用经典力学方法研究库仑三体的电离现象, 可以追溯到 1953 年 Wannier 的工作. 根据双电子逃逸的主要特征和准遍历假设, 他得到了 He 原子双电子电离的 (e, 2e) 截面 (记为  $\sigma(e, 2e)$ ) 对总能量  $E$  在阈值 ( $E=0$ ) 附近有幂次的依赖关系, 即

$$\sigma(e, 2e) \propto E^\alpha, \quad (1)$$

其中  $\alpha = \frac{1}{4} \left( \frac{100Z-9}{4Z-1} \right)^{1/2} - \frac{1}{4}$ ,  $Z$  是核电荷数<sup>[1]</sup>.

Wannier 定律是关于双电子电离的少有的确定性结论之一, 至今关于它的讨论仍在进行<sup>[2-4]</sup>. 随着实验上激光原子光谱技术的进展和理论上对量子混沌的探讨, 近年来库仑三体系统的经典动力学成为备受人们关注的课题. 人们提出了一些简化模型, 其中包括 s 波模型, 共线 e<sup>-</sup>Ze<sup>-</sup> 和 Ze<sup>-</sup>e<sup>-</sup> 模型, 在其中发现了丰富的物理现象. 在以往的研究中, 人们关心的主要是束缚运动. 于是自然要问, Wannier 定律是否对这些简化模型也适用? 进而, 如果答案是否定的, 那么是什么决定了它们的双电离行为? 为此, 我们用几何方法, 研究了上述三个一维库仑三体模型的 (e, 2e) 电离截面与入射能量之间关系, 发现它们有各自的阈值规律.

## 2 模型和一般考虑

我们要考虑的三个模型简介如下:

(i) 共线 e<sup>-</sup>Ze<sup>-</sup> 模型 在此模型中, 三个粒子被限制到一条直线上, 两个电子分别处在原子核的两边<sup>[5-7]</sup>. 采用原子单位  $m_e = e = 1$  (下同), 系统的哈密顿量可写为

$$H_c = \frac{p_1^2}{2} + \frac{p_2^2}{2} - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_1 + r_2}, \quad (2)$$

其中  $r_i \geq 0$  和  $p_i$  是电子 ( $i=1, 2$ ) 的径向坐标和动量. 研究发现, 当  $E < 0$  时, 这个模型的有界运动完全混沌, 而且几乎所有的初始条件都会导致一个电子的逃逸 (自发电离).

(ii) s 波模型 在 s 波模型中, 氢原子或类氢离子被表述为两个带电  $-e$  的球壳在电荷为  $Z$  的核周围收缩和扩展<sup>[8,9]</sup>, 其哈密顿量写为

$$H_s = \frac{p_1^2}{2} + \frac{p_2^2}{2} - \frac{Z-1}{r_>} - \frac{Z}{r_<}, \quad (3)$$

其中  $r_> = \max\{r_1, r_2\}$ ,  $r_< = \min\{r_1, r_2\}$ . 系统的主要特点是在  $r_1 > r_2$  或  $r_1 < r_2$  区域内两个电子间没有耦合. s 波模型与共线 e<sup>-</sup>Ze<sup>-</sup> 模型有形状非常相似的势函数, 只是这里势函数在  $r_1 = r_2$  处不光滑. 这点差异将导致两个系统具有完全不同的阈值行为, 虽然它们的整体动力学很相似.

(iii) 共线 Ze<sup>-</sup>e<sup>-</sup> 模型 三个粒子也是在一条直线上运动. 但是这里两个电子在原子核的同一边. 系统哈密顿量为

$$H_F = \frac{p_1^2}{2} + \frac{p_2^2}{2} - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_1 - r_2}. \quad (4)$$

核电荷数  $Z$  满足  $1 < Z < \infty$ . 当  $E < 0$  时, 这是一个

典型的近可积系统. 其中稳定的周期轨道很好地解释了实验上发现的钡原子双电子激发态的冻结行星构型, 因而这个模型曾引起人们的极大兴趣<sup>[5,6,10]</sup>.

以上三个系统都有奇异性, 如果一个(或两个)电子的位置坐标为零, 即发生二体(或三体)碰撞时, 势能发散, 运动方程没有定义. 但是, 二体碰撞与三体碰撞之间有着本质的不同. 前者存在于三个体系中, 而且通过标准的处理, 如 Kustaanheimo-Stiefel 变换, 奇异性可以从方程中消去, 即二体碰撞是可以规则化的. 三体碰撞则不然, 简单的计算和分析表明, 它只能存在于共线  $e^-Ze^-$  模型. 只要轨道充分接近三体碰撞, 其中一个电子会以任意大的能量逃逸, 所以这种奇异性不可规则化<sup>[7]</sup>. 此外, 这些势函数都是位置坐标的齐次函数, 因而体系具有标度不变性. 在我们的工作中有两处用到这一性质. 首先, 在散射实验中, 我们可以固定内电子能量为  $-1$ , 只改变入射能量  $\epsilon$  就可以穷尽所有可能的散射条件. 其次, 也可以把前面的不同能量  $E = \epsilon - 1$  的系统标定成  $E = 1$ , 从而放在同一等能面上研究.

在研究两个自由度的哈密顿系统时, 最方便的几何化方法是取庞加莱截面(surface of section, 缩写为 SOS), 而把动力学变成一个二维保面积映射, 即庞加莱映射  $F$ . 注意这里的特殊性, 由于我们处理的是无界系统, 可能庞加莱映射并非在 SOS 上都有定义. 利用电子的交换对称性, 可以把 SOS 选在内电子与核碰撞处. 这样, 外电子的位置坐标  $r$  和动量  $p$  成了 SOS 的自然坐标. 为了避免  $p$  在  $r \rightarrow 0$  时的发散, 可以用  $P = r^{1/2}p$  代替  $p$ .

### 3 (e 2e)电离截面 $\sigma(e 2e)$

由于(e 2e)电离轨道的终态是双电子逃逸, 我们先在 SOS 上确定双逃逸轨道的位置. 定义双逃逸区为所有双电子逃逸轨道与 SOS 最后一次的交集, 记为  $D_e$ .  $D_e$  的边界线  $M_e$  对应双电子逃逸临界轨道, 即当  $t \rightarrow +\infty$  时, 内电子的能量趋于零. 称  $M_e$  为临界双逃逸流形. 作时间反演变换,  $P \rightarrow -P$ ,  $D_e$  变成双入射区  $D_i$ ,  $M_e$  变成临界双入射流形  $M_i$ . 系统的(e 2e)散射决定于  $M_e$  与  $M_i$  及其在庞加莱映射下的像的相对关系. 如果有正整数  $n$  满足  $F^n(M_i) = M_e$ , 则双入射的轨道都终止于双逃逸, 反之, 所有双逃逸轨道都起始于双入射. (e 2e)散射就不可能发生. 这种情况一般只在系统完全可积时才

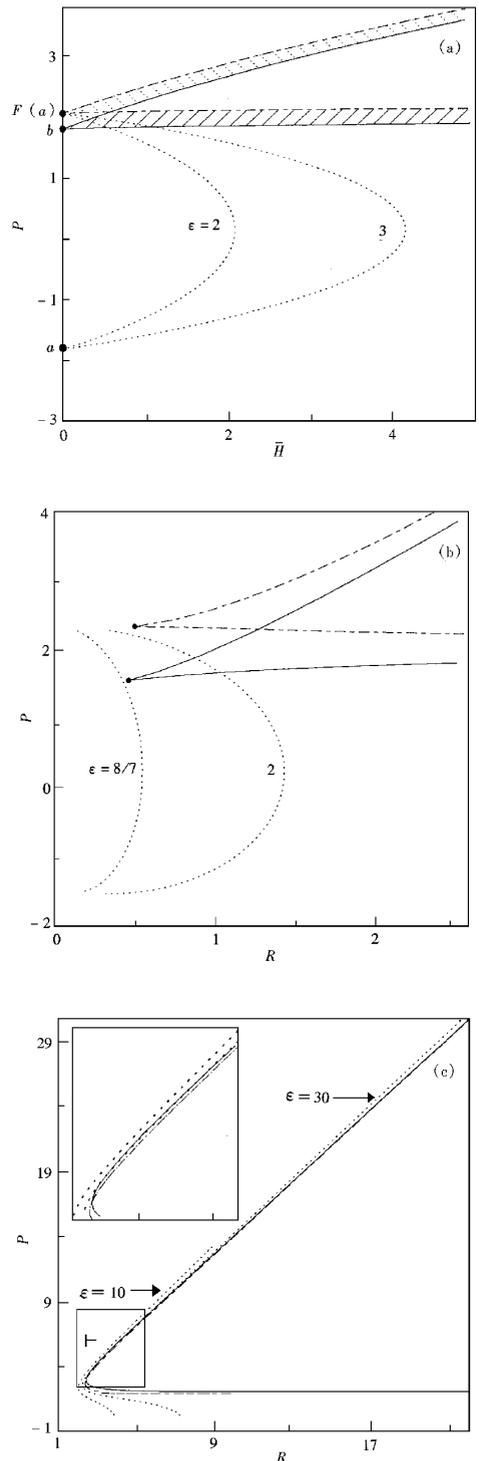


图1  $Z=2$  时三个模型的临界双逃逸流形  $M_e$  (实线) 和  $F(M_i)$  (点划线) 以及两根单电子入射系曲线(虚线) (a) 为共线  $e^-Ze^-$  模型, 实线阴影区为(e 2e)电离散射, 虚线阴影区为(2e, e)俘获散射; (b) 为 s 波模型; (c) 为共线  $Ze^-e^-$  模型. (b) 和 (c) 中的横坐标为  $R = (rE)^{1/2}$ . 三模型的(e 2e)电离的阈值  $\epsilon_e$  依次为 1.1, 1.69777, 23.84652

出现. 一般情况下,  $F^n(M_i)$  与  $M_c$  相交, 从而给出了 SOS 上关于  $(e, 2e)$  电离散射和  $(2e, e)$  俘获散射的区域. 我们的三个模型都属于后面这种情况. 在确定出各个通道对应的区域之后, 我们可以制备固定入射能量的单电子入射完备系统, 它与由临界流形分割成的各个区域的相交情况刻划了相应通道的反应概率. 把无量纲的概率变成截面的方法之一是乘上一个面积因子, 比如入射能量的倒数  $1/\epsilon$  (它相当于波数平方的倒数)<sup>[8]</sup>.

在图 1 中, 我们画出三个系统的临界双逃逸流形  $M_c$  和  $F(M_i)$  以及两根具有不同能量的单电子入射系综曲线. 可以看出, 在三个系统中  $M_c$  和  $F(M_i)$  都相交, 所以  $(e, 2e)$  散射都可能发生. 但是, 它们的几何位置和光滑性有显著的不同, 这决定了  $(e, 2e)$  散射不同的阈值行为.

首先, 在共线  $e^- Z e^-$  模型中,  $M_c$  (以及  $F(M_i)$ ) 由两段光滑曲线构成, 它们在纵轴上相切形成一个尖角 (图 1(a)). 可以证明,  $M_c$  的两个光滑分支在尖角处的相切指数就是  $\alpha$  (定义及证明见后). 入射系综曲线随着  $\epsilon$  减小逐渐向左移动, 当  $\epsilon \rightarrow 1$  时靠近纵轴  $\bar{H} = 0$ . 由它们与  $M_c$  的相对关系可知  $(e, 2e)$  电离阈值  $E_c = 0$ , 而且在阈值附近  $(e, 2e)$  截面遵从 Wannier 幂次律 (图 2).

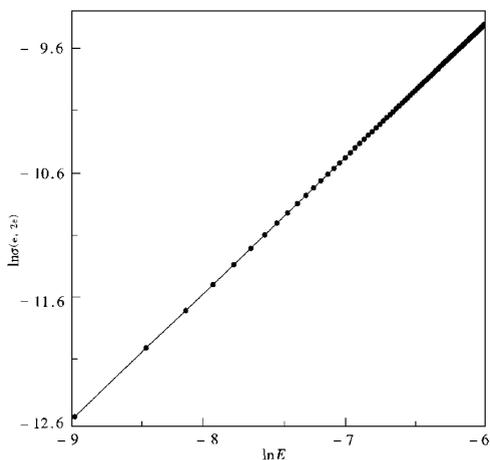


图 2 共线  $e^- Z e^-$  型氢原子在阈值附近的  $(e, 2e)$  电离截面. 实线是拟合直线  $\ln \sigma(e, 2e) = -3.072 + 1.053 \ln E$ ,  $Z = 2$  时  $\alpha \approx 1.056$ .

其次,  $s$  波模型与共线  $e^- Z e^-$  模型的情形很相似,  $M_c$  (以及  $F(M_i)$ ) 也是由两段光滑曲线构成. 但是这里两个光滑分支在  $R > 0$  的地方以有限角度相交 (图 1(b)). 于是立即得出  $(e, 2e)$  电离存在正的阈值  $E_c$ , 在阈值附近  $(e, 2e)$  截面线性地依赖于  $E - E_c$ .

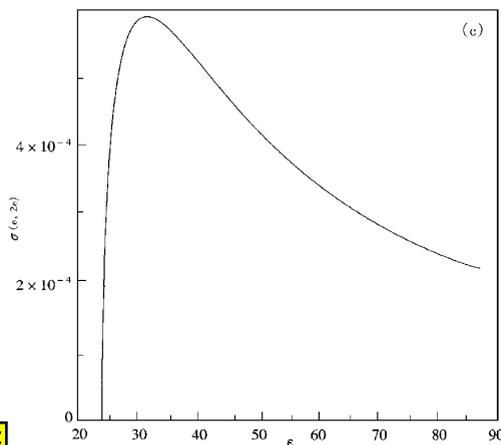
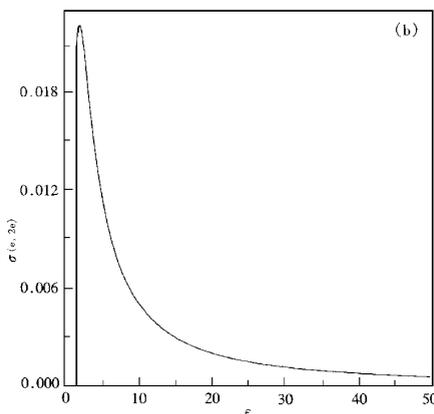
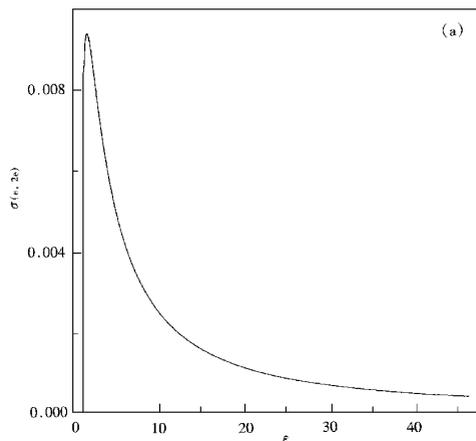


图 3  $(e, 2e)$  电离截面  $\sigma(e, 2e)$  与入射能量  $\epsilon$  之间关系 ( $Z = 2$ ) (a) 为共线  $e^- Z e^-$  模型; (b) 为  $s$  波模型; (c) 为共线  $Z e^- e^-$  模型



最后, 共线  $e^- Z e^-$  模型中  $M_c$  与  $F(M_i)$  都是整体光滑曲线而且远离  $R = 0$  的纵轴, 所以  $(e, 2e)$  电离也存在正的阈值  $E_c$ . 考虑到入射系综曲线与  $M_c$  相交的情形 (见图 1(c)), 在  $E_c$  附近,  $\sigma(e, 2e)$  正比于  $\sqrt{E - E_c}$ .

在三个系统中,  $\sigma(e, 2e)$  随  $\epsilon$  ( $\epsilon > \epsilon_c$ ) 有相似的变化形式(图 3). 从  $\epsilon = \epsilon_c$  开始,  $\sigma(e, 2e)$  先增后降, 形成一个单峰曲线.

## 4 结果分析

三个模型完全不同的电离阈值行为直接来源于它们依次降低的奇异性. 共线  $e^-Ze^-$  模型拥有三体碰撞, 而这种奇点一般不可以规则化. 事实上, 系统的整体动力学很强地依赖于奇点附近的轨道.  $s$  波模型的奇异性稍弱, 由于势能不光滑, 不会出现三体碰撞, 但会导致一种双电子临界碰撞<sup>[11]</sup>. 共线  $Ze^-e^-$  模型本质上是光滑的, 它有最简单的电离规律. 下面我们将对共线  $e^-Ze^-$  模型和  $s$  波模型的阈值行为做一些理论分析.

### 4.1 共线 $e^-Ze^-$ 模型的 Wannier 定律

显著区别于其他两个模型的是, 在共线  $e^-Ze^-$  模型中  $M_c$  的端点  $b$  在  $\bar{H} = 0$  的边界上, 这是该体系特有的三体碰撞导致的直接结果. 为了研究三体碰撞, 一个方便的作法是利用系统的标度变换对称性, 写出约化方程<sup>[7]</sup>. 首先选择标度变换不变量

$$(x_1, x_2, x_3, d\tau) = (\arctan(r_2/r_1), (r_1 p_1 + r_2 p_2)r^{-1/2}, (r_1 p_2 - r_2 p_1)r^{-1/2}, r^{-3/2}d\tau), \quad (5)$$

其中  $r = \sqrt{r_1^2 + r_2^2}$ . 以上面的变量为约化坐标, 可以写出约化方程

$$\begin{aligned} \frac{dx_1}{d\tau} &= x_3, & \frac{dx_2}{d\tau} &= \frac{1}{2}x_3^2 + \bar{H}, \\ \frac{dx_3}{d\tau} &= -\frac{1}{2}x_2x_3 - V(x_1), \end{aligned} \quad (6)$$

其中  $\bar{H} = r H_c = \frac{1}{2}(x_2^2 + x_3^2) + V(x_1)$ ,  $V(x_1) = -Z(\arccos x_1 + \arcsin x_1) + (\cos x_1 + \sin x_1)^{-1}$ .  $\bar{H} = 0$  定义了一个二维不变子流形, 记作  $M_0$ .  $M_0$  上的流一方面对应了  $E = 0$  能面上的运动, 同时也描述  $r = 0$ , 即三体碰撞的极限行为.  $M_0$  上的轨道给出了边界  $\bar{H} = 0$  上的庞加莱映射,  $M_0$  上有两个不动点, 一个是  $B = (\pi/4, P_0, 0)$  ( $P_0 = (-2V(\pi/4))^{1/2}$ ), 它代表  $E = 0$  时的对称的双临界逃逸轨道, 另一个是它的时间反演点  $A = (\pi/4, -P_0, 0)$ . 简单的计算得出  $B$  点的稳定指数在  $M_0$  上是

$$\lambda_{1,2} = \frac{P_0}{4} \left( -1 \pm \sqrt{\frac{100Z-9}{4Z-1}} \right), \quad (7)$$

而在离开  $M_0$  的方向上是  $\lambda_3 = P_0$ . 所以  $B$  点有扩展到  $M_0$  之外二维的不稳定流形  $B^u$  和在  $M_0$  上的一维稳定流形  $B^s$ . 对称地,  $A$  点有二维的稳定流形  $A^s$  和一维不稳定流形  $A^u$ . 所有进入三体碰撞奇点的轨道都位于  $A^s$  上, 故  $A^s$  也称为三体碰撞稳定流形<sup>[7]</sup>. 如果入射能量  $\epsilon \rightarrow 1_+$ , 入射轨道充分靠近  $M_0$ , 只要它不经过不动点  $B$  的附近, 其去向就主要由与之接近的  $M_0$  上的轨道决定. 同时, 因为  $E = 0$  时绝大部分都是单入单出的散射轨道, 所以  $E \rightarrow 0_+$  时的双散射轨道只能在  $B$  点附近(以近似对称的形式)出射. 阈值附近双逃逸轨道的这个特征在 Wannier 早年的研究中已经指出. 基于对这类轨道的分析和准遍历假设, 他得出  $(e, 2e)$  散射截面的阈值行为, 即 Wannier 定律. 可以发现, 在他的分析中并没有考虑两个电子如何从入射时的非对称构型发展成出射时近似对称的构型(即到达  $B$  点附近), 也就是说, 没有考虑散射的动力学. 当然, 在他最初的讨论中, 逃逸之前在反应区的运动由量子力学描述, 经典力学并不需要回答这个问题. 在纯经典分析中, 我们发现准遍历假设相当于三体碰撞不可以规则化.

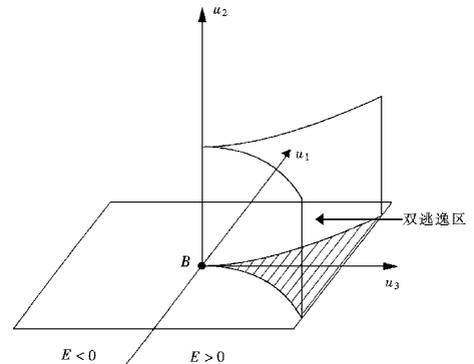


图 4 不动点  $B$  附近的双逃逸区. 阴影区示出了它与  $u_2 = 0$  平面的交截区

$B$  点附近的出射轨道的运动主要由它的不稳定分量, 即它在  $B^u$  上的投影决定. 为此, 我们在  $B$  点附近以它的三个本征方向为坐标轴建立局部坐标系  $(u_1, u_2, u_3)$ , 即  $\frac{d}{d\tau}u_i = \lambda_i u_i$ . 所以曲面  $M_0$  和  $B^u$  分别由  $u_3 = 0$  与  $u_2 = 0$  确定. 如果初始点的  $u_1/u_3$  较大, 轨道将与  $B$  点在  $M_0$  上的不稳定流形一样, 导致单电子逃逸; 反之,  $u_3/u_1$  较大, 轨道将与  $B$  点离开  $M_0$  的不稳定流形一样, 导致双电子逃逸. 考虑到

$u_1^\lambda(\tau) \mathcal{Y} u_3^\lambda(\tau) = \text{const.}$ ,  $B$  附近的双逃逸区必然由  $|u_1| \leq cu_3^\alpha$  的形式给出, 这里  $\alpha = \lambda_1/\lambda_3$  就是 Wannier 指数, 而  $c > 0$  是常数(见图 4). 双逃逸区两边的临界双逃逸轨道与  $u_2$  为小常数的截面, 记作  $\Delta$ , 相交成两条光滑曲线, 它们在  $B^s \cap \Delta$  处相切, 形成一个尖角. 这个尖角的开口宽度  $w$  与离  $B^s$  的距离  $l$  有幂次关系,  $w \propto l^\alpha$ , 我们称这样的  $\alpha$  为两条曲线的相切指数, 它是非退化变换下的不变量.

$B$  点附近的双逃逸轨道逆时间演化第一次与 SOS 相交得到  $D_e$ , 它的端点  $b$  由  $B_s$  生成. 三体碰撞规则化时, 可以在碰撞点附近用  $(x_2, \bar{H}, \bar{x}_3)$  写出没有奇点的约化方程, 这时 SOS 由  $\bar{x}_3 = x_3 \sin 2x_1 = 0$  确定, 而  $(\bar{H}, x_2) = (\bar{H}, P)$  是自然的坐标. 因为  $B^s$  横穿  $\Delta$  与 SOS, 在  $B^s$  附近的映射非退化, 所以  $M_e$  的两个光滑分支在  $b$  也以指数  $\alpha$  相切.

再来看入射系综. 在图 1(a) 中可以看到每一个完备的入射系综都可以表示为一段曲线, 它的两端都在边界  $\bar{H} = 0$  上的. 这两个端点代表无限接近三体碰撞奇点的轨道. 其中下端点  $a$  由  $A^u$  第一次穿过 SOS 生成, 它与  $b$  点关于  $P = 0$  对称, 上端点是  $F(a)$ . 注意到  $b$  点处于  $a$  与  $F(a)$  之间, 这意味着  $A^u$  与  $B^s$  不重合, 它是三体碰撞不可规则化的充分条件<sup>[12]</sup>. 随着入射能量  $\epsilon \rightarrow 1_+$ , 这段系综曲线  $S(\epsilon)$  向  $P$  轴靠近. 这个现象是我们采用了约化坐标的结果. 如果采用物理坐标  $(r, p)$ , 当  $\epsilon \rightarrow 1_+$  时, 趋于一条固定的曲线  $(r, p) = (\bar{r}(s), \bar{p}(s))$ , 这里  $s$  是两个电子初始的相位差. 回到约化坐标系, 系综曲线  $(\bar{H}, P) \approx ((\epsilon - 1)\bar{r}(s), \bar{r}^{1/2}(s)\bar{p}(s))$ , 随着  $\epsilon \rightarrow 1_+$  它以近似恒定的速度靠近  $P$  轴. 另一方面  $(e, 2e)$  散射概率正比于系综曲线落入  $D_e$  尖角内的系统数. 在零级近似下, 可以忽略系统密度在  $b$  点附近的不均匀性. 所以反应概率正比于系综曲线割  $D_e$  所得线段的长度. 综上所述, 当  $\epsilon \rightarrow 1_+$  时  $(e, 2e)$  散射概率正比于  $(\epsilon - 1)^\alpha$ . 这样就在经典动力学的框架内证明了 Wannier 定律. 最后需要指出的是, 如果三体碰撞可以规则化, 比如  $b = F(a)$ , 入射系综与双逃逸区的相对关系完全是另一种形式, Wannier 定律(至少在经典过程中)就不适用了.

#### 4.2 $s$ 波模型的线性律

我们将从理论上给出  $s$  波模型电离截面在阈值附近的线性律. 假定  $s$  波模型中入射电子(不妨设是

$e_1$ ) 从渐近区进到核附近, 第一次与内电子( $e_2$ ) 在  $r_1 = r_2 = s$  发生碰撞. 简单的分析表明, 此时只有  $p_2 > 0$ , 即碰撞是头对头, 才可能发生  $(e, 2e)$  电离<sup>[11]</sup>. 经过这次  $e-e$  碰撞, 两个电子的能量分别是  $E_1 = \epsilon - 1/s$ ,  $E_2 = 1/s - 1$ . 此后  $e_1$  继续向内碰到核并被反弹, 然后向外运动. 下面两类轨道都可以导致  $(e, 2e)$  反应. 第一类的  $s$  较小, 第一次  $e-e$  碰撞后  $e_1$  损失的能量较多, 以致它追不上  $e_2$ . 这时, 只要  $s \geq s_1 \equiv 1/\epsilon$  就可以发生  $(e, 2e)$  电离. 散射后  $E_1 < E_2$ . 第二类的  $s$  较大,  $e_1$  可以追上  $e_2$ , 设第二次  $e-e$  碰撞发生在  $r_1 = r_2 = s'$ . 这样只需  $1/s - 1/s' - 1 \geq 0$ , 对应  $s \leq s_2 = s'/(s' + 1)$ , 也可以发生  $(e, 2e)$  电离. 这类轨道出射时  $E_1 > E_2$ . 总之, 发生  $(e, 2e)$  电离的条件是  $s \in [s_1, s_2]$  而且  $s = s_1, s_2$  分别对应入射电子和束缚电子临界逃逸的情况, 它们给出了系综曲线与  $M_e$  的两个交点. 当  $\epsilon = \epsilon_c$  时, 只有一根轨道可以实现  $(e, 2e)$  散射. 如果视之为第二类  $(e, 2e)$  电离, 后一次  $e-e$  碰撞发生在  $s' = 1/(\epsilon - 1)$ , 相应地有  $p_1 = p_2$ . 我们称这样的碰撞为双电子临界碰撞. 所谓“临界”是指它是介于有与没有发生  $e-e$  碰撞的中间状态(因而一般情况下它们是两类  $(e, 2e)$  散射的分界线). 轨道出射时  $E_1 = \epsilon$ ,  $E_2 = 0$ . 同时, 也可以认为这条轨道没有发生后一次  $e-e$  碰撞, 轨道在第一次碰撞之后就  $E_1 = 0$ ,  $E_2 = \epsilon$  结束于双逃逸, 这样它属于第一类  $(e, 2e)$  电离. 所以此时  $s_1 = s_2 = 1/\epsilon$ .

由于已知  $s_1 = 1/\epsilon$ , 问题的关键是根据两次碰撞间时间关系

$$\begin{aligned} & t(Z, \epsilon - \frac{1}{s_2}, s') + t(Z, \epsilon - \frac{1}{s_2}, s_2) \\ &= t(Z - 1, \frac{1}{s_2} - 1, s') - t(Z - 1, \frac{1}{s_2} - 1, s_2). \end{aligned} \quad (8)$$

求出  $s_2$  对  $\epsilon$  的依赖关系, 这里  $s' = s_2/(1 - s_2)$ , 而

$$t(Z, E, s) \equiv \int_0^s (\chi E + Z/r)^{-1/2} dr$$

是电子在库仑场中从  $r = 0$  到  $r = s$  的运动时间. 知道了  $s_1, s_2$ , 可以求出电离概率. 注意到两个电子在第一次碰撞之前没有耦合, 我们固定内电子的初始位相, 得到轨道  $r_2 = \xi(t)$ , 然后改变入射电子通过  $r_1 = r_c$  的时间. 不妨设在  $t = 0$  时通过  $r_c$  的轨道  $r_1 = r(t)$  将导致第一类临界逃逸, 即有  $r(t_1) = \xi(t_1) = s_1$ . 考虑比它稍稍延迟的轨道  $r_1 = r(t - \Delta t)$  ( $\Delta t > 0$ ). 随着  $\Delta t$  的增大, 两个电子的第一次碰撞点逐渐外移, 直到  $\Delta t = \Delta T$  时导致发生第二类临界逃

逸, 即有  $r(t_2 - \Delta T) = \xi(t_2) = s_2$ . 易知(e, 2e)电离概率  $\rho$  就等于  $\Delta T/T$ , 这里  $T = \sqrt{2}Z\pi/2$  是内电子的周期. 利用前面的关系有

$$t_2 - \Delta T - t_1 = t(Z-1, \epsilon, s_1) - t(Z-1, \epsilon, s_2) \\ \equiv -T_1,$$

$$t_2 - t_1 = t(Z, -1, s_2) - t(Z, -1, s_1) \equiv T_2.$$

所以

$$\rho = (T_1 + T_2)/T \quad (9)$$

设  $\epsilon = \epsilon_c + \Delta\epsilon$  ( $\Delta\epsilon$  正的小量), 把方程(8)在  $\epsilon_c$  展成泰勒级数, 取一阶项, 有

$$\Delta s \approx \frac{1}{(1 + f(\epsilon_c, Z))\epsilon_c^2} \Delta\epsilon, \quad (10a)$$

其中  $\Delta s = s' - s = s' - 1/\epsilon$ ,  $f(\epsilon_c, Z)$  是

$$f(\epsilon_c, Z) = \frac{\epsilon_c^2(\epsilon_c - 1) + \epsilon_c(1 - 1/\epsilon_c)^{3/2}}{5Z^{3/2}(\sqrt{(\epsilon_c - 1)Z\epsilon_c} + \sqrt{(\epsilon_c - 1)(Z\epsilon_c - 1)})} \quad (10b)$$

的简写. (10a)(10b)式代入方程(9)可以计算出电离概率

$$\rho \approx \frac{\Delta s}{Z\pi} \left( \sqrt{\frac{1}{Z\epsilon_c - 1}} + \sqrt{\frac{1}{Z\epsilon_c}} \right) \\ = \frac{1}{Z\pi(1 + f(\epsilon_c, Z))\epsilon_c^2} \left( \sqrt{\frac{1}{Z\epsilon_c - 1}} + \sqrt{\frac{1}{Z\epsilon_c}} \right) \Delta\epsilon$$

$$\equiv D\Delta\epsilon, \quad (11)$$

即在阈值  $\epsilon_c$  附近, 电离概率(或(e, 2e)截面  $\sigma$  (e, 2e))遵守线性律. 当  $Z=2$  时,  $\epsilon_c \approx 1.169777$ , 代入(11)式, 给出的线性系数  $D=0.092$ . 数值计算结果与之很好地符合.

## 5 总 结

利用临界双逃逸流形  $M_c$  和单电子入射系综曲线之间的几何关系, 我们计算了共线  $e^-Ze^-$  模型,  $s$  波模型和共线  $Ze^-e^-$  模型库仑三体系统的(e, 2e)电离截面  $\sigma$ (e, 2e).  $M_c$  的端点的位置决定了(e, 2e)电离的阈值  $E_c$ . 在共线  $e^-Ze^-$  模型中  $E_c=0$ , 后两个模型的  $E_c>0$ , 而且, 共线  $Ze^-e^-$  模型的  $E_c$  要比  $s$  波模型的大得多.  $M_c$  的端点形状决定了  $\sigma$ (e, 2e)在阈值附近的随  $(E - E_c)$  增长的形式, 在三个模型中分别是 Wannier 幂次律、线性律和平方根律. 我们的理论分析表明三种完全不同的阈值行为直接来源于系统不同的奇异性.

- [1] G. H. Wannier, *Phys. Rev.*, **90**(1953), 817.  
 [2] M. B. Shah, D. S. Elliott, H. B. Gilbody, *J. Phys.*, **B20**(1987), 3501.  
 [3] J. M. Rost, *Phys. Rev. Lett.*, **72**(1994), 1998; J. M. Rost, *J. Phys.*, **B27**(1994), 5923; J. M. Rost, *J. Phys.*, **B28**(1995), 3003; J. M. Rost, *Phys. Rep.*, **297**(1998), 271.  
 [4] J. M. Feagin, *J. Phys.*, **B28**(1995), 1495; J. M. Feagin, M. J. Goddard, *J. Phys.*, **B30**(1997), 693.  
 [5] K. Richter, G. Tanner, D. Wintgen, *Phys. Rev.*, **A48**(1993), 4182.

- [6] D. Wintgen, K. Richter, G. Tanner, *Chaos*, **2**(1992), 19.  
 [7] Z. Q. Bai, Y. Gu, J. M. Yuan, *Physica*, **D 188**(1998), 17.  
 [8] G. Handke, *Phys. Rev.*, **A50**(1994), R3561; G. Handke, M. Draeger, H. Friedrich, *Physica*, **A197**(1993), 113.  
 [9] G. Handke, M. Draeger, W. Ihra, H. Friedrich, *Phys. Rev.*, **A48**(1993), 3699.  
 [10] K. Richter, D. Wintgen, *Phys. Rev. Lett.*, **65**(1990), 1965.  
 [11] Z. Q. Bai, Y. Gu, *Phys. Rev.*, **E 60**(1999), 3866.  
 [12] R. McGhee, *Inventions Math.*, **27**(1974), 191.

# ( $e\ 2e$ ) IONIZATION CROSS SECTION IN ONE-DIMENSIONAL COULOMB THREE-BODY SYSTEMS

DUAN BIN BAI ZAI-QIAO GU YAN

(*Department of Astronomy and Applied Physics, Center of Nonlinear Science,  
University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China*)

(Received 15 November 1999; revised manuscript received 10 January 2000)

## ABSTRACT

We have studied the classical theory of ( $e\ 2e$ ) collision between electron and atoms or ions based on three kinds of one-dimensional models, i. e., the s-wave model, the collinear  $e^-Ze^-$  and  $Ze^-e^-$  models. We find numerically the relation of ionization cross sections with increasing energy obey different threshold laws, i. e., the linear law, Wannier law and square root law. These results have been also discussed analytically.

**Keywords** : Coulomb three-body system, classical dynamics, ( $e\ 2e$ ) ionization cross section

**PACC** : 0547, 3480 D