

H 原子(e_2e)反应中电子角分布的理论研究*

张穗萌 吴兴举

(安徽皖西学院物理系, 六安 237012)

(2001 年 5 月 17 日收到, 2001 年 6 月 17 日收到修改稿)

使用 3C 和 DS3C 模型, 计算了不同入射能情形下电子入射离化 H 原子的三重微分截面, 并对截面的结构进行了分析. 结果表明, 角分布基本上由两个峰组成, 即 binary 峰和 recoil 峰. 两个峰的形状和位置对两个出射电子的能量分配及探测的几何条件十分敏感. 更进一步, 末态电子与电子的排斥对形成观测到的角分布有显著的贡献. 在不同几何条件下, 三体相互作用通过不同散射幅的不同权重控制了干涉花样. 此外, 对直接和交换效应也都进行了研究.

关键词: 角分布, binary 峰, recoil 峰

PACC: 3480D, 3450H

1 引 言

电子入射离化 H 原子, 同时接收两个出射电子的(e_2e)实验, 为人们提供了许多电离过程中基本量子动力学方面的信息. 这些数据也为理论研究提供了严格的检测标准. 近年来, 实验物理工作者在这方面作了许多测量^[1-4], 在不同几何条件下给出了大量的实验结果. 综合这些测量, 实验中变化的参数是入射能 E_i 、剩余能在两个电子之间的分配, 以及散射电子 a 与敲出电子 b 之间的相对夹角. 有意义的测量是当上述参数变化时, 出射电子角分布的形状. 它是人们揭示原子内各种相互作用强度的重要实验依据.

实验数据可用不同的初、末态电子动量的方向矢量 k_i (入射)、 k_a (散射)和 k_b (敲出)描述. 最常见的测量是在 k_i, k_a, k_b 位于同一平面内完成的. 在这一平面内的测量又分为共面等能两个出射电子相对角固定几何条件、共面对称和非对称几何条件等多种情形. 对于前一种情形, 作者已做过详细的研究^[5]. 在后一种几何条件下, 测量发现: 当上述实验参数变化时, 测量敲出电子 b 的角分布均呈现出双峰结构. 并且双峰的大小和位置在实验参数变化时, 表现出很强的规律性. 如何从理论上对实验结果给出合理的解释, 并揭示峰、谷变化的物理本质是理论

物理工作者急待解决的问题.

在前期工作中, 主要精力集中在对末态波函数的修正上. 对于不同原子和不同几何条件, 提出了许多行之有效的修正方案^[6-8], 较好地解决了(e_2e)反应中末态三体之间的关联问题. 本文将在前期工作的基础上, 通过对大量理论和实验数据的分析, 找出不同几何条件下电子角分布的规律, 并深入研究影响峰、谷变化的本质原因. 以下均使用原子单位.

2 理论计算

动量为 k_i 的电子入射离化基态 H 原子之后, 在立体角 Ω_a 和 Ω_b 中同时接收具有动量为 k_a 和 k_b 两个连续电子的概率称为三重微分截面(TDCS), 其大小由下式给出:

$$\text{TDCS}(k_a, k_b) = (2\pi)^4 \frac{k_a k_b}{k_i} |T_{fi}|^2. \quad (1)$$

若考虑两个出射电子的交换效应, 则相应的 TDCS 为

$$\begin{aligned} \text{TDCS}(k_a, k_b) = (2\pi)^4 \frac{k_a k_b}{k_i} \left\{ \frac{3}{4} |f(k_a, k_b)|^2 \right. \\ \left. - |f(k_b, k_a)|^2 + \frac{1}{4} |f(k_a, k_b) \right. \\ \left. + f(k_b, k_a)|^2 \right\}, \quad (2) \end{aligned}$$

式中 $f(k_a, k_b)$ 和 $f(k_b, k_a)$ 分别为直接散射振幅和

* 安徽省重点科研项目基金(批准号 2000095)和安徽省教育委员会自然科学基金(批准号 99JL0210)资助的课题.

交换散射振幅.(1)式中的转换矩阵元 T_{fi} 被定义为

$$T_{fi}(k_a, k_b) = \Psi_{k_a, k_b}^-(r_a, r_b) | V_i | \Psi_{k_i}(r_a, r_b), \quad (3)$$

式中 r_a 和 r_b 分别为入射电子 a 和束缚电子 b 的位置矢量. 初态 $\Psi_{k_i}(r_a, r_b)$ 为具有动量为 k_i 的入射平面波与基态 H 原子波函数的乘积. 初通道微扰势 V_i 表为

$$V_i = V_{ee} + V_{en} = \frac{1}{|r_a - r_b|} + \frac{-1}{r_a}. \quad (4)$$

为了分析末态中不同相互作用对总截面的贡献, 把 T 矩阵元写成两项之和, 即入射电子与束缚电子的散射幅 T_{ee} 和入射电子与核的散射幅 T_{en} 之和. 具体形式为

$$T_{fi} = T_{ee} + T_{en} = \Psi_{k_a, k_b}^- | V_{ee} | \Psi_{k_i} + \Psi_{k_a, k_b}^- | V_{en} | \Psi_{k_i}. \quad (5)$$

末态波函数具有如下形式:

$$\Psi_{k_a, k_b}^-(r_a, r_b) = (2\pi)^{-3} \exp[i(k_a \cdot r_a + k_b \cdot r_b)] \cdot \alpha(\alpha_a, k_a, r_a) \alpha(\alpha_b, k_b, r_b)$$

$$\cdot \alpha(\alpha_{ab}, k_{ab}, r_{ab}), \quad (6)$$

式中

$$\alpha(\alpha, k, r) = \Gamma(1 - i\alpha) \exp\left(-\frac{1}{2}\pi\alpha\right) F_1 \left[i\alpha; 1; -i(kr + k \cdot r) \right]. \quad (7)$$

(6)式中 $\alpha(j = a, b, ab)$ 称为索末菲参量^[6], 它们通常是动量相关的. 假如认为三体系统由彼此独立的三个两体子系统组成, 而不考虑任一两体子系统受第三粒子的影响, 则末态波函数表示为三个两体库仑波的乘积(简称为 3C). 这种情况下索末菲参量取为 $\alpha_a = -1/k_a$, $\alpha_b = -1/k_b$, $\alpha_{ab} = 1/(2k_{ab})$. 在此基础上, 如果进一步考虑三个两体子系统彼此间的动力学屏蔽, 便得到 DS3C 波函数. 此时的索末菲参量可以有多种不同的取法^[9-11]. 我们前期的研究表明^[12] 索末菲参量的取值对总截面的大小和形状有着十分重要的影响. 文献[8]中作者用不同形式的索末菲参量得到的截面与实验比较发现: 文献[9]给出的索末菲参量有明显的不足之处. 为此, 本文选取文献[8]给出的形式:

$$\alpha_a = -\frac{Z - \frac{2k_{ab}k_a^2}{(k_a + k_b)^2} \left[\frac{3 + \cos^2[4\xi(k_b)]}{4} \right]^2}{k_a}, \quad (8)$$

$$\alpha_b = -\frac{Z - \frac{2k_{ab}k_b^2}{(k_a + k_b)^2} \left[\frac{3 + \cos^2[4\xi(k_a)]}{4} \right]^2}{k_b}, \quad (9)$$

$$\alpha_{ab} = \frac{1 - \frac{4k_{ab}^2}{(k_a + k_b)^2} \left[k_a \left(\frac{3 + \cos^2[4\xi(k_b)]}{4} \right) + k_b \left(\frac{3 + \cos^2[4\xi(k_a)]}{4} \right) \right]^2}{2k_{ab}}, \quad (10)$$

式中

$$\xi(k) = \cos^{-1}\left(\frac{k}{\sqrt{k_a^2 + k_b^2}}\right). \quad (11)$$

在以下的研究中, 为了揭示出射电子角分布的规律, 将根据需要分别取 T_{ee} , T_{en} 以及两者之和为 T 矩阵元, 并以上述 3C 和 DS3C 为末态波函数, 对不同几何条件下的 TDCS 进行讨论. 理论计算中继续沿用文献[7]使用过的计算机程序.

3 结果与讨论

这里将对不同几何条件下, 出射电子的角分布进行研究. 首先找出角分布的规律, 进而从微观机理上分析影响角分布的原因. 在以下计算中, 约定所有

角度以 k_i 为参考, 散射电子的散射角 θ_a 和敲出电子的出射角 θ_b 均取逆时针方向为正.

3.1 理论与实验的比较及角分布的规律

为了揭示角分布的规律, 图 1 至图 3 中分三种情况分别进行计算. 在有实验数据的情况下, 尽可能选取与实验相一致的几何条件进行研究. 纵观各图可见, 入射能 E_i , 散射角 θ_a 和敲出电子能量 E_b 进行不同搭配时, TDCS 随敲出电子出射角 θ_b 的变化曲线均呈现出双峰结构. 相对于 k_i 方向小于 90° 处的散射峰产生于入射电子与束缚电子的直接碰撞, 故称为“binary”峰, 而沿此峰反向处出现的峰是束缚电子被入射电子碰撞后, 又被核反弹而出射的, 故称

为“recoil”峰^[13]. 本节先对这两个峰随 E_i, θ_a 和 E_b 的变化规律进行讨论, 在下一部分, 再对影响这两个

峰的位置和本质的原因作详细研究.

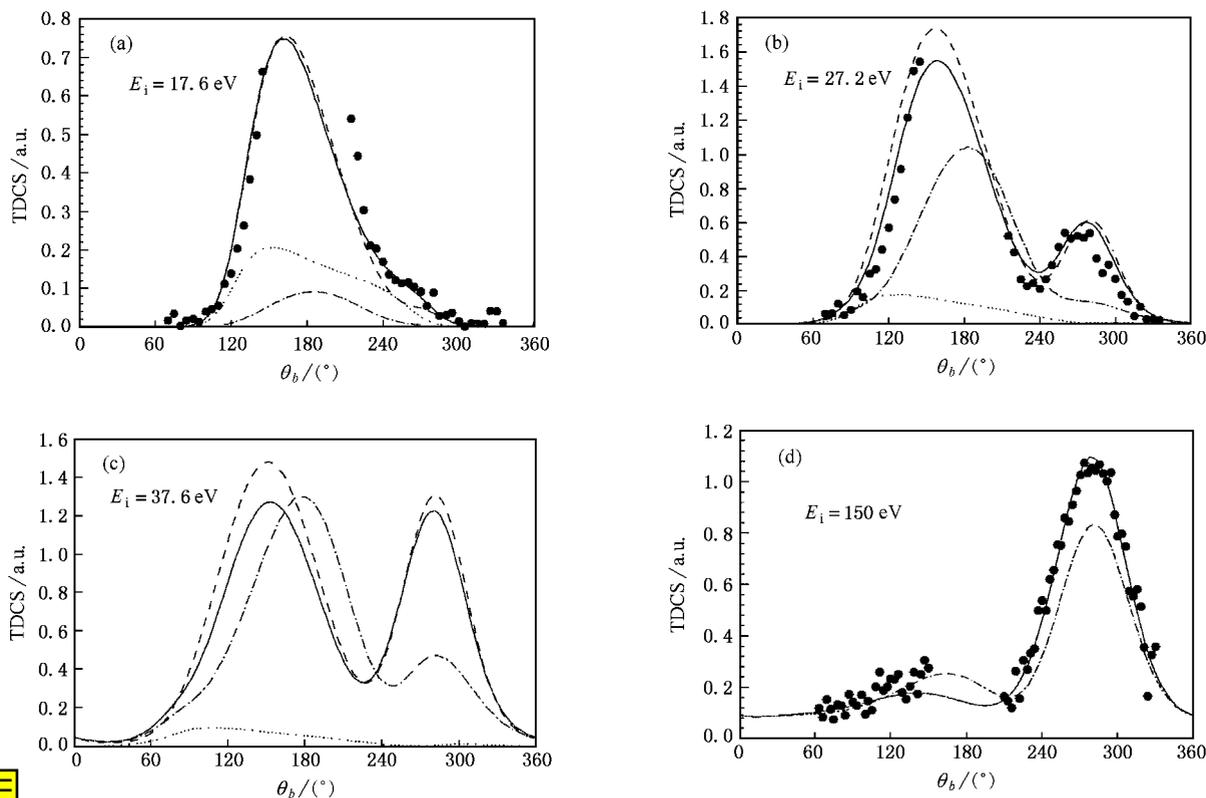


图 1 不同入射能量时电子入射离化 H 原子的 TDCS 图(a)(b)(c)对应于 $\theta_a = 20^\circ, E_b = 2eV$; 图(d)对应于 $\theta_a = 16^\circ, E_b = 3eV$. ●为实验数据^[1,2,4], —为 DS3C 结果; - -为 3C 结果, ····为直接散射幅截面, - ····为交换散射幅截面

图 1(a)–(c)给出 θ_a 和 E_b 分别固定在 $\theta_a = 20^\circ, E_b = 2eV$, 且 $E_i = 17.6, 27.2$ 和 $37.6eV$ 时, TDCS 随 θ_b 的变化关系. 图 1(d)给出 $\theta_a = 16^\circ, E_b = 3eV$, 且 $E_i = 150eV$ 时的计算结果. 各图中同时给出以 3C 和 DS3C 为末态波函数时的理论曲线及文献 [1, 2, 4] 的实验结果. 由图可见: 当 θ_a 和 E_b 固定时, E_i 从阈值附近的低能到 10 倍阈值以上的中等入射能这一范围内变化时, DS3C 曲线均能对实验给出较好的理论解释. 而 3C 曲线给出的截面无无论在大小上还是在形状上, 都严重地偏离了实验结果. 各图中双峰的变化也有很强的规律性. 当 $E_i = 17.6eV$ 时, 理论和实验给出的截面似乎仅呈现出单峰 (见图 1(a)). 不难发现: 在 $\theta_b = 240^\circ - 300^\circ$ 之间, 理论和实验都给出了一个“小平台”, 这便是 binary 峰的雏形. 随 E_i 的增大, 这一峰明显地显露出来, 并随之而增大, recoil 峰却随 E_i 的增大而减小, 当 $E_i = 150eV$ 时, recoil 峰已降到了几乎消失的程度. 仔细观察各峰的位置不难发现: 随 E_i 的增大, 两峰相对于 k_i 方向的

偏角在增大. 此外, 图 1(a)–(c)还给出直接散射幅和交换散射幅单独生成的截面. 发现交换幅的贡献随 E_i 的增大而减小.

图 1(a)–(d)给出 E_i 和 E_b 分别固定在 54.4 和 $5eV, \theta_a = 4^\circ, 10^\circ, 16^\circ$ 和 23° 时, TDCS 随 θ_b 的变化曲线. 图中同时给出以 3C 和 DS3C 为末态波函数时的理论曲线及 Brauner 等人的实验测量结果^[3]. 由图可见: 除少数地方外, DS3C 曲线继续与实验结果较好地符合, 而 3C 曲线给出的峰、谷结构, 在位置上与 DS3C 和实验结果大致相同, 但大小上却相差较大. 纵观各图可以发现: 两峰的大小随 θ_a 的增大而减小, 大角度散射对应的概率较小. 两峰的相对高度随 θ_a 的增大也发生了变化, binary 峰相对增大, recoil 峰相对减小. 随 θ_a 从 4° 增大到 23° , recoil 峰的高度下降到 1/10! 与图 1 相似, 随 θ_a 的增大, 两峰的位置也向着偏离 k_i 的方向变化. 另外需要指出的是: 这种几何条件下, 交换效应的影响很小, 所以图中没有给出直接和交换幅单独生成的截面.

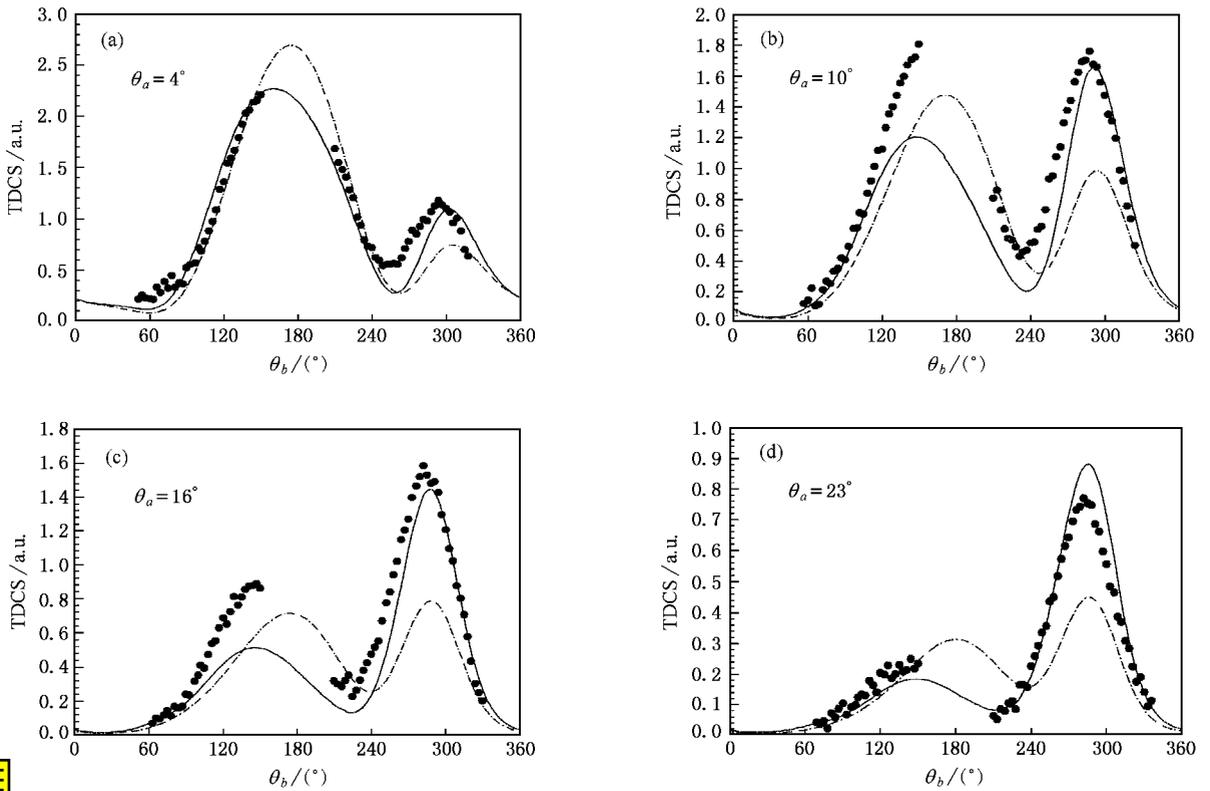


图2 同图1,但 $E_i = 54.4\text{eV}$, $E_b = 5\text{eV}$ 不同散射角时电子入射电离 H 原子的 TDCS 实验测量由 Brauner 等人^[3]完成

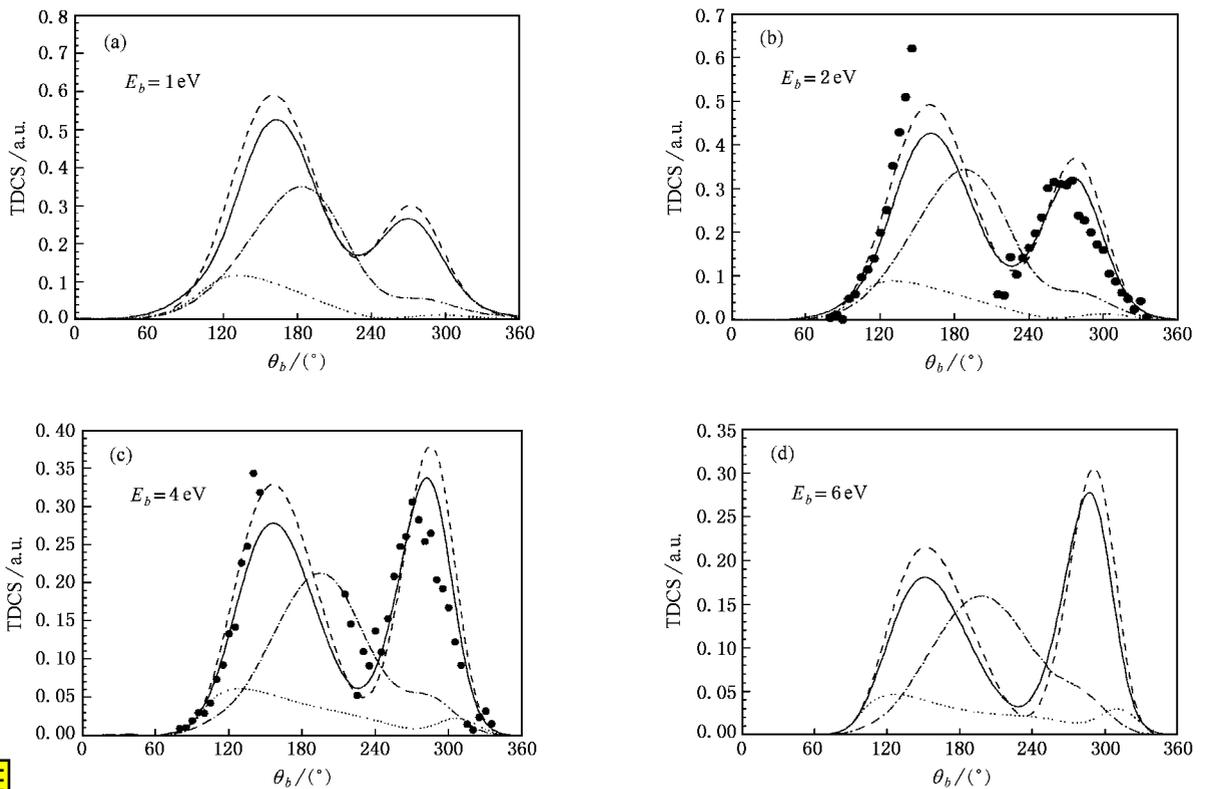


图3 同图1,但 $E_i = 27.2\text{eV}$, $\theta_a = 30^\circ$ 不同敲出能时电子入射电离 H 原子的 TDCS 实验测量由 Berakdar 等人^[2]完成

图 3(a)–(d) 给出 $E_i = 27.2 \text{ eV}$, $\theta_a = 30^\circ$, 且 $E_b = 1, 2, 4$ 和 6 eV 时, TDCS 随 θ_b 的变化曲线. 在有实验数据的情况下, 再次看到 DS3C 曲线与 Berakdar 等人的实验结果较好地一致. 与图 1 和图 2 不同, 在图 3(a)–(d) 中, 3C 曲线几乎给出相同形状的截面, 且明显地与实验结果不符. 可见 3C 曲线对 E_i 和 θ_a 的变化较敏感, 而与剩余能在两个出射电子之间的分配几乎无关. 由图可见: 当 E_i 和 θ_a 固定时, 随 E_b 的增大, binary 峰的大小几乎不变, 而 recoil 峰不断减小, 所以相对而言, binary 峰在上升, recoil 峰在下降. 两峰的位置变化与前两种情形不同, 随 E_b 的增大, 两峰均向 k_i 方向靠拢. 此外, 在这种几何条件下, 交换效应对总截面有一定的影响, 且随 E_b 的增大, 交换幅的相对大小有所增加, 但总截面的大小和形状主要是由直接散射幅决定的.

3.2 影响角分布的原因

本节将对影响上述角分布中双峰位置和大的本质原因作进一步的探讨.

为了对双峰的位置及变化规律进行研究, 定义靶的动量转移为 $q \equiv k_i - k_a$, 又设 ($e, 2e$) 反应中核的反冲动量为 k_{ion} , 则由动量守恒可得

$$k_{\text{ion}} = k_i - k_a - k_b = q - k_b. \quad (12)$$

由 (12) 式可见, 假如敲出电子 b 沿着 q 方向出射, 则它吸收了所有的动量转移, 此时核获得的反冲动量 k_{ion} 最小. 换言之, 这时核只是作为一个“旁观者”而没有参与碰撞. 我们期待着经典的 binary 峰应该出现在这个方位上, 这时应有 $\theta_b = \theta_q \equiv \cos^{-1} \hat{k}_i \cdot \hat{q}$. 由此容易推知: 当核获得最大的反冲动量时, 应该出现经典的 recoil 峰, 这时敲出电子沿着与 q 相反的方向出射, 亦即 $\theta_b = \theta_q - 180^\circ$. 由此可见: 由 (12) 式作出不同几何条件下 k_{ion} 随 θ_b 的变化曲线, 对于分析双峰的位置十分有益. 为此, 在图 4(a) 至 (c) 中分别示出对应于图 1 至图 3 中所给几何条件下 k_{ion} 随 θ_b 的变化曲线.

由图 4 可见, 在各种几何条件下, k_{ion} 随 θ_b 的变化曲线均出现一个峰、谷结构, 这正好与图 1 至图 3 中 recoil 峰和 binary 峰的位置相对应. 在图 4(a) 中, 当 $E_i = 17.6, 27.2, 37.6$ 和 150 eV 时, k_{ion} 的极小点出现的位置, 亦即动量转移 q 与入射方向之间的夹角 θ_q 依次为 $350^\circ (-10^\circ)$, $330^\circ (-30^\circ)$, $317^\circ (-43^\circ)$ 和 $290^\circ (-70^\circ)$. 可见, 随 E_i 的增大, q 与入射方向之间

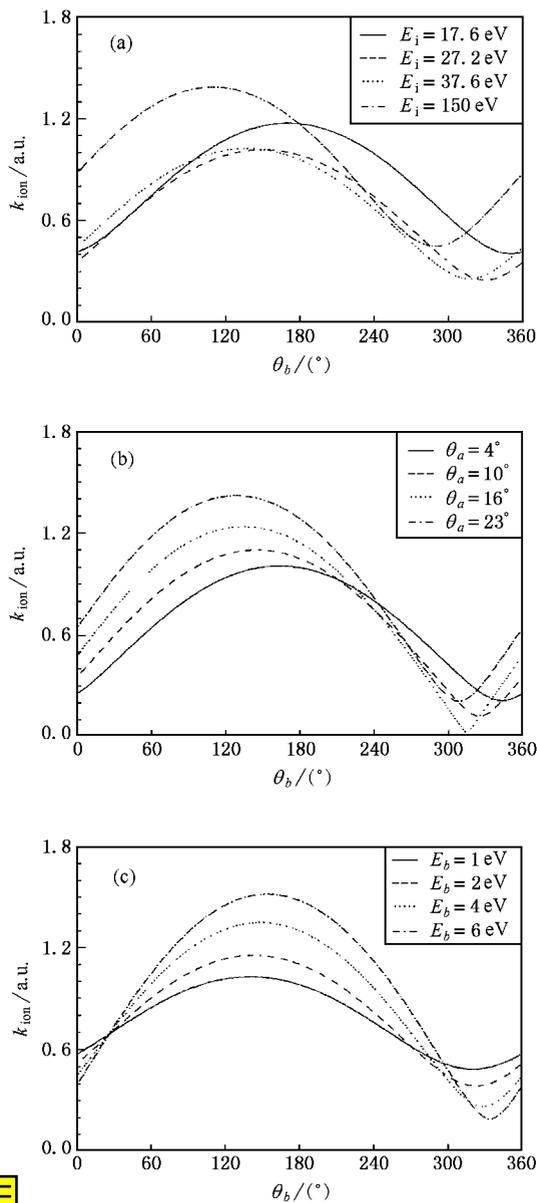


图 4 不同几何条件下 k_{ion} 随 θ_b 的变化曲线. 图 (a) 至图 (c) 分别与图 1 至图 3 所给几何条件相对应.

的夹角 $\theta_q = \cos^{-1} \hat{k}_i \cdot \hat{q}$ 亦增大. 这与图 1 中 binary 峰随 E_i 的变化方向一致, 这正好印证了 binary 峰与 k_{ion} 的极小点相对应. 在图 4(b) 中, 当 $\theta_a = 4^\circ, 10^\circ, 16^\circ$ 和 23° 时, k_{ion} 的极小点 (θ_q) 依次为 $344^\circ (-16^\circ)$, $325^\circ (-35^\circ)$, $315^\circ (-45^\circ)$ 和 $309^\circ (-51^\circ)$. 这种变化与图 2 中 binary 峰的位置随 θ_a 的变化方向也一致. 在图 4(c) 中, 当 $E_b = 1, 2, 4$ 和 6 eV 时, k_{ion} 的极小点 (θ_q) 依次为 $320^\circ (-40^\circ)$, $323^\circ (-37^\circ)$, $329^\circ (-31^\circ)$ 和 $334^\circ (-26^\circ)$, 即随 E_b 的增大, q 与 k_i 的夹角在减小, 这再次与图 3 中 binary 峰的位置变化方向相符.

合.以上事实表明,本文对 binary 峰和 recoil 峰形成机理的理论解释合理.但是,仔细比较 k_{ion} 的峰、谷点和相应几何条件下 recoil 峰和 binary 峰的准确位置,发现两者并不完全一致,亦即在所有情形下 binary 峰和 recoil 峰并不准确地出现在相应的 q 与 $-q$ 方向,都向着偏离 k_i 的方向错位.以图 1 中 binary 峰为例:当 $E_i = 27.2\text{eV}$ 时, binary 峰出现在 276° 处,与 q 方向(330°)错位达 54° 之多!而当 E_i 增大到 150eV 时, binary 峰出现在 280° 处,与 q 方向(290°)错位只有 10° .可见这种错位随 E_i 增大而减小.对这种现象可从以下两个方面加以解释.首先,在所有情形下, k_{ion} 在 θ_q 处出现极小,但并不为零.这就意味着在形成 binary 峰的碰撞中,核也获得了一定大小的动量,并不完全是电子与电子的碰撞;其次,在末通道,由于两个出射电子间的排斥作用,推动了敲出电子向远离 k_i 的方向发生错位.当 E_b 固定时,两个电子之间排斥力的大小随 E_i 增大而减小^[13].图 1(b)和(d)中 binary 峰的错位情况正是对这种解释的一个有力佐证.

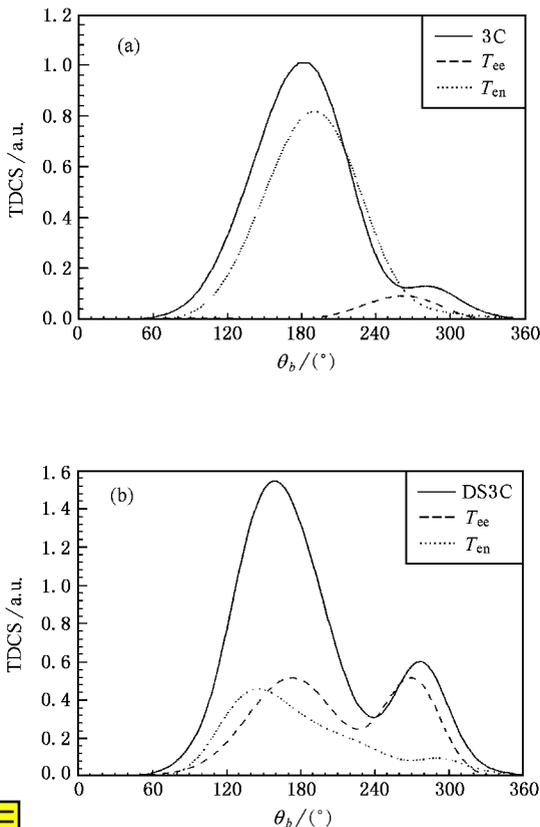


图 5 $E_i = 27.2\text{eV}$, $\theta_a = 20^\circ$, $E_b = 2\text{eV}$ 时, T 矩阵元分别取为 T_{ee} , T_{en} 和 T_{ii} 时, TDCS 随 θ_b 的变化曲线

由上节的讨论可知:使用不同模型(3C 和 DS3C)进行计算时,峰的大小对不同几何条件的反应比它们的位置更加敏感.事实上,截面的实际形状是由三体耦合决定的,三体相互作用通过不同散射幅的不同权重控制了干涉花样.为了考察不同散射幅对各峰的控制作用,取图 2(b)中所给的几何条件进行研究.图 3(a)和(b)分别给出以 3C 和 DS3C 为末态波函数时,入射电子与束缚电子的散射幅 T_{ee} 和入射电子与核的散射幅 T_{en} 单独生成的截面以及合成的总截面.

由图 5 可见, T_{ee} 和 T_{en} 的主峰分别定位在 binary 峰和 recoil 峰附近.这意味着 binary 峰主要来源于电子与电子的散射,而 recoil 峰则主要由出射电子与核的散射给出.图 3(a)中 T_{ee} 很小, T_{en} 相对较大,所以合成后的 3C 曲线在 recoil 峰处出现了一个单峰,而在 binary 峰处仅仅出现了一个“小平台”,从而导致了 3C 曲线与实验不符.可见 3C 模型的失败归结为幅值 T_{ee} 和 T_{en} 权重的不恰当,后者起了支配作用.图 3(b)中由于考虑了三个两体子系统彼此间的动力学屏蔽,所以 T_{ee} 和 T_{en} 的曲线都有较大的改变. T_{ee} 给出一个双峰结构,两个峰基本上位于总截面的 binary 峰和 recoil 峰处. T_{en} 的主峰仍然在靠近 recoil 峰处,但它在 binary 峰处也出现了一个次峰,从而使 DS3C 曲线与实验结果较好地符合.最后需要指出的是各种不同几何条件下,两峰大小的变化完全是 T_{ee} 和 T_{en} 的不同权重导致了不同的干涉花样.对此,作者作了大量的计算,限于篇幅,本文没有给出相应的计算结果.

4 结 论

本文系统地研究了共面不对称几何条件下,测量参数 E_i , E_b , θ_a 进行不同搭配时电子入射离化 H 原子的 TDCS.研究表明:不同几何条件下截面均呈现出双峰结构.在 E_i , E_b , θ_a 中,任意两个参数固定,而另一参数增大时, binary 峰相对高度增加,而 recoil 峰相对减小.两峰的位置与核的反冲动量 k_{ion} 有直接关系,并受末态两个电子之间排斥力大小的影响.两峰的大小取决于 T_{ee} 和 T_{en} 的不同权重.此外,在非对称几何条件下,不论入射能高低,交换效应都不重要.

- [1] J. Röder *et al.* , *Phys. Rev.* , **A53**(1996) , 225 .
- [2] J. Berakdar *et al.* , *J. Phys.* , **B29**(1996) , 6203 .
- [3] M. Brauner *et al.* , *J. Phys.* , **B24**(1991) , 657 .
- [4] H. Ehrhardt *et al.* , *Z. Phys.* , **D1**(1986) , 3 .
- [5] S. M. Zhang , *Acta Phys. Sin.* , **49**(2000) , 690 (in Chinese] 张穗萌 物理学报 **49**(2000) , 690] .
- [6] S. M. Zhang *et al.* , *Z. Phys.* , **D41**(1997) , 171 .
- [7] S. M. Zhang *et al.* , *Acta Phys. Sin. (Overseas Edition)* , **8**(1999) , 496 .
- [8] S. M. Zhang , *J. Phys.* , **B33**(2000) , 3545 .
- [9] Z. Chen , Q. Shi , S. Zhang *et al.* , *Phys. Rev.* , **A56**(1997) , R2514 .
- [10] Z. J. Chen , *Acta Phys. Sin. (Overseas Edition)* , **7**(1998) , 167 .
- [11] Z. J. Chen *et al.* , *Chin. Phys.* , **10**(2001) , 290 .
- [12] S. M. Zhang *et al.* , *Acta Phys. Sin.* , **48**(1999) , 453 (in Chinese] 张穗萌等 物理学报 **48**(1999) , 453] .
- [13] J. Berakdar *et al.* , *J. Phys.* , **B32**(1999) , 895 .

A THEORETICAL STUDY ON ELECTRON ANGULAR DISTRIBUTIONS FOR $(e, 2e)$ PROCESSES ON HYDROGEN*

ZHANG SUI-MENG WU XING-JU

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

(Received 17 May 2001 ; revised manuscript received 17 June 2001)

ABSTRACT

In this work the triple differential cross sections for electron impact ionization of atomic hydrogen at different energies are calculated by use of 3C and DS3C models. The structure of the cross sections is analysed. It is seen that the angular distribution basically consists of two peaks which can be assigned to the binary and recoil peaks. The shape and position of the two peaks depend sensitively on the detection geometry and the energy shared between the two electrons. Furthermore , the final-state electron-electron repulsion contributes significantly to the form of the observed angular distributions. For different collision geometry , the three-body interactions will control the interference pattern of various scattering amplitudes by different weighting between these amplitudes. In addition , the direct and exchange amplitudes are also considered.

Keywords : angular distribution , binary peak , recoil peak

PACC : 3480D , 3450H

* Project supported by the Foundation for Key Research Program of Anhui Province , China(Grant No.2000095) , and the Natural Science Foundation of Education Commission of Anhui Province , China(Grant No.99JL0210) .