

氢原子($e + 2e$)反应中 BBK 模型非一阶效应的理论研究*

杨 欢¹⁾ 高 矿¹⁾ 吴兴举²⁾ 张穗萌^{1)†}

1) 安徽师范大学物理与电子信息学院, 芜湖 241000)

2) 安徽皖西学院数理系原子与分子物理研究所, 六安 237012)

(2007 年 6 月 20 日收到, 2007 年 7 月 4 日收到修改稿)

用 BBK 模型和修正后的 BBK 模型对入射能分别为 54.4 eV, 150 eV, 250 eV 时共面非对称几何条件下电子离子化氢原子的三重微分散射截面进行了计算, 并把结果与一级玻恩近似下的计算结果以及实验数据进行了比较, 对修正后的 BBK 模型中非一阶效应进行了分析和探讨. 发现该模型中的未态三体间的屏蔽包含了极强的非一阶效应的信息.

关键词: 非一阶效应, DS3C 模型, binary 峰, recoil 峰

PACC: 3480D, 3450H

1. 引 言

近年来, 各种几何条件下电子入射单电离氢原子和氦原子的($e + 2e$)反应在理论和实验研究上都取得了突破性的进展^[1-7]. 尤其是在理论研究中, 出现了许多新颖的理论方法, 如 born 近似方法、BBK 模型^[8]、DWBA 模型^[9]、CCC 模型^[10]. 其中在 1989 年由 Brauner 等^[8]提出的 BBK 模型是近年来这一研究领域内公认的最佳模型. 初期的 BBK 模型由于考虑了三个独立两体库仑子系统的相互作用, 因而解表示为三个库仑波函数的乘积, 通常称这个解为 3C 波函数^[11], 所以早期的 BBK 模型又被称为 3C 模型. 上个世纪 90 年代中期, Berakdar 等人^[11]针对 3C 模型在中等入射能的情况下其计算结果与实验很好地符合、低入射能时的计算结果却不能与实验完全一致的缺点, 在双对称几何条件下对 BBK 模型提出了修正方案, 即通过引入有效索末菲参量对 3C 波函数进行修正, 由于这种修正表示了三个两体库仑相互作用彼此间的动力学屏蔽(DS), 因此修正后的波函数称为 DS3C 波函数, 所以修正后的 BBK 模型又被称为 DS3C 模型. Berakdar 所在的理论小组, 在双对称几何条件下用 DS3C 模型计算了一些近阈值情况下电子离子化 H 原子和 He 原子的三重微分散射截面

(TDCS)所得结果均能与实验较好地符合. 2000 年, Zhang^[12]在 Berakdar 工作的基础上, 从动量相关的角度入手, 推导出了任意几何条件下的索末菲参量, 并且所得计算结果与实验结果符合得很好^[1, 12], 从而使得 BBK 模型逐步得到完善.

最近, 国外学者在完成了二阶理论编程之后, 对许多已经研究过的问题进行了重新计算^[13, 14], 并由此得出结论: 在($e + 2e$)反应的理论研究中, 高阶效应在许多情况下是十分明显的, 并且占有相当大的比重. 尽管在中、低入射能情况下 BBK 模型尤其是 DS3C 模型的计算结果与实验数据已经相当符合, 但是该模型中包含有多少非一阶效应, 精确到什么程度, 尚未进行过探讨. 本文在完成了一级玻恩近似(FBA)理论编程的基础上, 用 3C 模型和 DS3C 模型对入射能分别为 54.4 eV, 150 eV, 250 eV 时共面非对称几何条件下电子离子化 H 原子的 TDCS 进行了计算, 并把结果与一级玻恩近似下的计算结果以及 Ehrhardt 等^[15]的实验数据进行了比较, 对 DS3C 模型中的非一阶效应进行了分析和探讨.

2. 理论计算

2.1. Born 展开方法

假设入射电子的动量为 k_0 , 与 H 原子碰撞后散

* 安徽省教育厅重大科研项目基金(批准号: ZD2007002-1), 安徽省原子与分子物理重点学科基金, 安徽省教育厅自然科学基金(批准号: 2006KJ267B), 安徽省自然科学基金(批准号: 03406203), 安徽省高校拔尖人才专项基金(批准号: [2003]22)共同资助的课题.

† 通讯联系人, E-mail: hyang8068@yahoo.com.cn

射电子和敲出电子的动量分别为 \mathbf{k}_1 和 \mathbf{k}_2 . 那么在原子单位中这一(e 2e)过程的 TDCS 为

$$\text{TDCS}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = (2\pi)^3 \frac{k_1 k_2}{k_0} |T_{fi}|^2, \quad (1)$$

其中 T_{fi} 为转换矩阵元, 可写为

$$T_{fi} = \phi_f^- | T | \phi_i, \quad (2)$$

其中 T 算符由 Lippman-Schwinger 方程决定:

$$T = V_i + V_i G_0^{(+)} T. \quad (3)$$

Green 算符 $G_0^{(\pm)}$ 定义为

$$G_0^{(\pm)} = \frac{1}{E - H_i \pm i\epsilon}. \quad (4)$$

对(3)式进行迭代求解可得

$$T = V_i + V_i G_0^{(+)} V_i + V_i G_0^{(+)} V_i G_0^{(+)} V_i + \dots \quad (5)$$

将(5)式代入(2)式可以得到 T_{fi} 的 Born 展开式

$$T_{fi} = T_B^{(1)} + T_B^{(2)} + T_B^{(3)} + \dots \quad (6)$$

$$T_B^{(1)} = \phi_f^- | V_i | \phi_i, \quad (7)$$

$$T_B^{(2)} = \phi_f^- | V_i G_0^{(+)} V_i | \phi_i, \quad (8)$$

$$T_B^{(3)} = \phi_f^- | V_i G_0^{(+)} V_i G_0^{(+)} V_i | \phi_i, \quad (9)$$

对于一级玻恩近似, 转换矩阵元的具体形式为

$$T_{fi} = T_B^{(1)} = \phi_f^- | V_i | \phi_i, \quad (10)$$

ϕ_i 是系统的初态波函数, 可取为入射电子波函数与 H 原子基态波函数的乘积, 即

$$\phi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_1} \varphi(\mathbf{r}_2), \quad (11)$$

式中 $\varphi(\mathbf{r}_2)$ 为 H 原子基态波函数, 可表示为

$$\varphi(\mathbf{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} e^{-r_2}, \quad (12)$$

ϕ_f 则是以下薛定谔方程

$$\left(-\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{1}{r_2} \right) \phi_f = E_f \phi_f, \quad (13)$$

并且满足入射球面波边界条件的解, $E_f = E$ 是系统的总能量. Landau^[16]给出了 ϕ_f 的具体形式为

$$\begin{aligned} \phi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = & (2\pi)^{-3} e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2} \Gamma(1 - i\alpha_2) \\ & \times e^{-\frac{\pi}{2}\alpha_2} {}_1F_1[i\alpha_2; 1; \\ & -(\mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2 + \mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2)], \end{aligned} \quad (14)$$

$$\alpha_2 = -\frac{1}{k_2}. \quad (15)$$

由 Bethe 关系式

$$\int e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_1} \frac{d\mathbf{r}_1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} = \frac{4\pi}{K^2} \exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_2) \quad (16)$$

以及以下两式:

$$F(i\alpha; 1; iz) = \frac{1}{2\pi i} \oint_C t^{i\alpha-1} (t-1)^{-i\alpha} e^{zt} dt, \quad (17)$$

$$e^{-r} = -\frac{\partial}{\partial \lambda} \left(\frac{e^{-\lambda r}}{r} \right)_{\lambda=1}, \quad (18)$$

其中 C 为 t 复平面上包含 $t=0$ 和 $t=1$ 的封闭曲线.

最终可得一级玻恩近似下的转换矩阵元为

$$\begin{aligned} T_{fi} \approx & (2\pi)^{-9/2} \frac{4\pi}{K^2} \Gamma(1 + i\alpha_2) \\ & \times \exp\left(-\frac{\pi\alpha_2}{2}\right) M_1(\mathbf{K}, \mathbf{k}_2), \end{aligned} \quad (19)$$

$$M_1(\mathbf{K}, \mathbf{k}_2)$$

$$\begin{aligned} = & 16\sqrt{\pi} \exp\left[-\frac{i}{k_2} \ln V(\mathbf{q}, \mathbf{k}_2)\right] \\ & \times \left\{ \mathbf{K} \cdot \left[\mathbf{K} - \mathbf{k}_2 \left(1 + \frac{i}{k_2} \right) \right] \right\} \\ & \times \left\{ K^2 - (k_2 + i)^2 \left[(\mathbf{K} - \mathbf{k}_2)^2 + 1 \right] \right\}, \end{aligned} \quad (20)$$

其中

$$V(\mathbf{q}, \mathbf{k}_2) = \frac{K^2 - (k_2 + i)^2}{q^2 + 1}, \quad (21)$$

$$\mathbf{q} = \mathbf{K} - \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, \quad (22)$$

\mathbf{q} 为反冲动量.

2.2. BBK 模型

在文献[1, 7]以及[12]中均对 BBK 模型进行了详细地说明, 所以这里只简要地介绍该模型对 H 原子(e 2e)反应末态的描述.

末态由两个出射电子与剩余 H^+ 组成, 其波函数用 BBK 波函数表示

$$\begin{aligned} \psi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = & (2\pi)^{-3} e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2} \alpha(\alpha_1, \mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1) \\ & \times \alpha(\alpha_2, \mathbf{k}_2, \mathbf{r}_2) \alpha(\alpha_{12}, \mathbf{k}_{12}, \mathbf{r}_{12}) \end{aligned} \quad (23)$$

其中

$$\begin{aligned} \alpha(\alpha_j, \mathbf{k}_j, \mathbf{r}_j) = & \exp\left(-\frac{\pi}{2}\alpha_j\right) \Gamma(1 - i\alpha_j) \\ & \times {}_1F_1\left[i\alpha_j; 1; -(\mathbf{k}_j \mathbf{r}_j + \mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_j)\right] \end{aligned} \quad (24)$$

${}_1F_1$ 为合流超几何函数, α_j ($j=1, 2, 12$) 称为索末菲参量^[11], 它可表为

$$\alpha_1 = -\frac{1}{k_1}, \alpha_2 = -\frac{1}{k_2}, \alpha_{12} = \frac{1}{2k_{12}}, \quad (25)$$

其中 $k_{12} = \frac{1}{2}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$; 由上述 α_j ($j=1, 2, 12$) 得到的末态波函数称为 3C 波函数^[11].

文献[12]中在 Berakdar 工作的基础上, 从动量相关的角度入手所导出的任意几何条件下的索末菲参量为

$$\beta_1 = -\frac{Z - \frac{2k_{12}k_1^2}{(k_1+k_2)^3} \left[\frac{3 + \cos^2[4\xi(k_2)]}{4} \right]^2}{k_1}, \quad (26)$$

$$\beta_2 = -\frac{Z - \frac{2k_{12}k_2^2}{(k_1+k_2)^3} \left[\frac{3 + \cos^2[4\xi(k_1)]}{4} \right]^2}{k_2}, \quad (27)$$

$$\beta_{12} = \frac{1 - \frac{4k_{12}^2}{(k_1+k_2)^3} \left[k_1 \left[\frac{3 + \cos^2[4\xi(k_2)]}{4} \right] + k_2 \left[\frac{3 + \cos^2[4\xi(k_1)]}{4} \right] \right]^2}{2k_{12}}, \quad (28)$$

其中

$$\xi(k_i) = \cos^{-1} \left[\frac{k_i}{\sqrt{k_1^2 + k_2^2}} \right]. \quad (29)$$

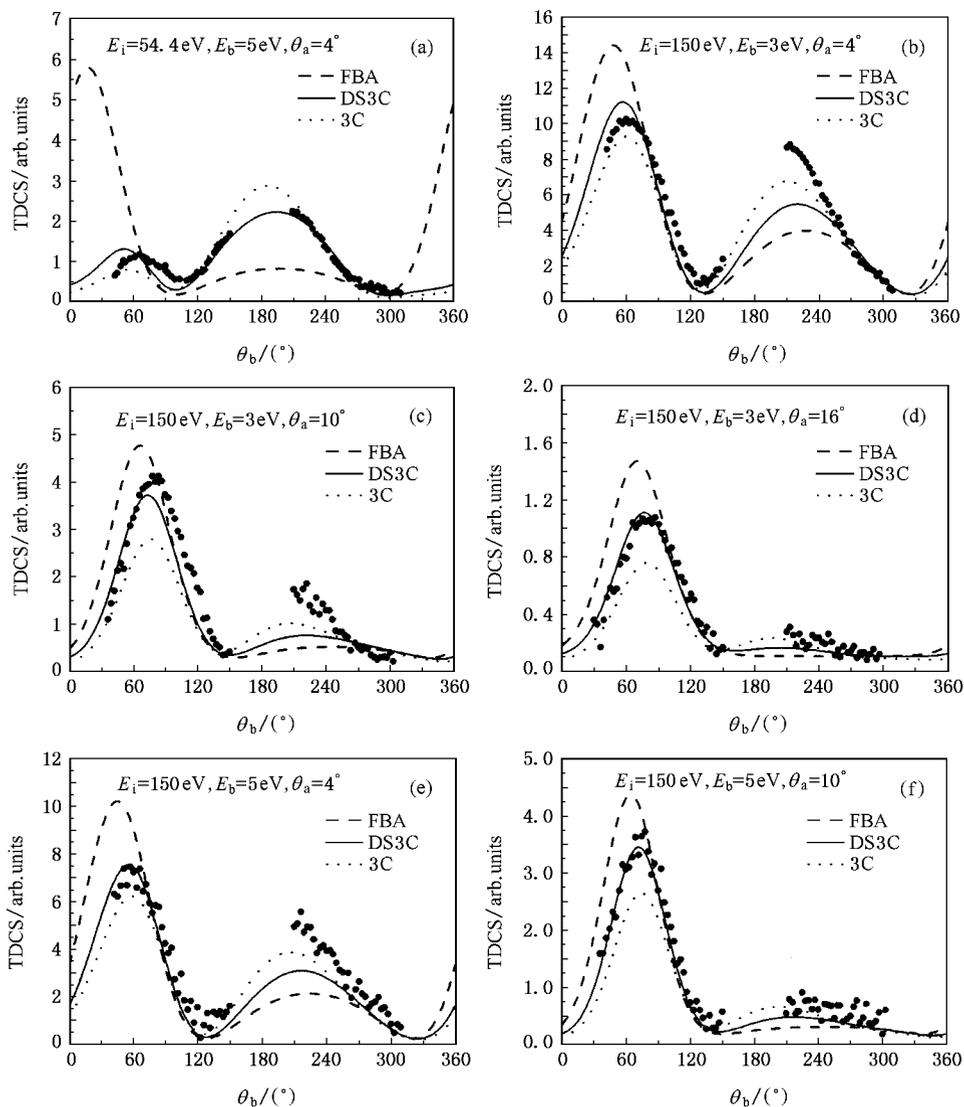
由上述 $\beta_i (i = 1, 2, 12)$ 得到的末态波函数称为 DS3C 波函数。

在电子入射能分别为 54.4 eV, 150 eV 和 250 eV 共面非对称几何条件下, 我们用上述的 3C, DS3C 为

末态波函数以及在一级玻恩近似下对电子离化 H 原子的 TDCS 分别进行了计算, 计算结果分别记为 3C, DS3C, FBA, 并把它们与 Ehrhardt 等^[15]的实验数据进行了比较。

3. 结果与讨论

实验和理论结果如图 1(a)–(f) 所示。在以下的



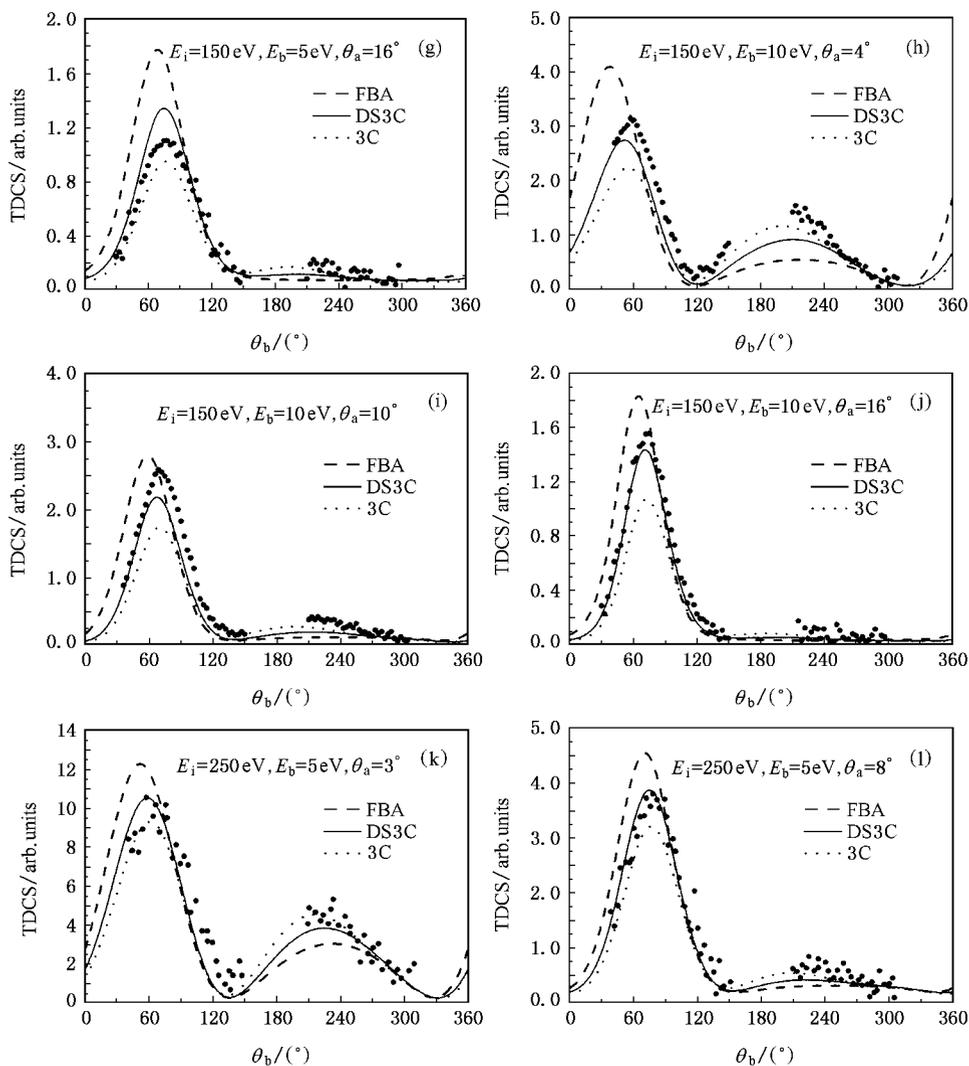


图1 $E_i = 54.4\text{ eV}, 150\text{ eV}, 250\text{ eV}$ 时共面非对称几何条件下电子离化 H 原子的 TDCS 随敲出电子出射角 θ_b 变化的关系曲线: — 为 DS3C 结果, - - - 为 FBA 结果, ... 为 3C 结果, 实心点为实验结果^[15]

分析中,我们把 FBA 给出的理论称为一阶效应,与之偏离的效应统称为非一阶效应。

3.1. 3C 模型和 DS3C 模型比较

由图 1(a)–(l) 可见,实验数据给出的 TDCS 随 θ_b 的变化曲线呈双峰结构,相对于 k_0 方向小于 90° 的散射峰为 binary 峰,而在该峰的反方向处出现的峰为 recoil 峰,并且 binary 峰的结构比较清晰,在入射能 E_i 和敲出电子能量 E_b 固定的情况下, recoil 峰的相对强度随着 θ_a 的增加而减小。由图中 3C 模型和 DS3C 模型给出的理论曲线可以看到两种模型均给出了与实验数据相符合的双峰结构,在入射能 E_i 和敲出电子能量 E_b 固定的情况下,理论曲线给出

的 recoil 峰相对强度同样随着 θ_a 的增加而减小,呈现出与实验数据相同的规律性。然而 3C 模型均给出了较弱的 binary 峰,并且在入射能为 150 eV , 散射角较小 ($\theta_a \leq 10^\circ$) 时 3C 模型同时给出了稍弱的 recoil 峰,尽管在上述情况下 DS3C 模型同样给出了稍弱的 recoil 峰,但是该模型却有效地提高了 binary 峰的强度,使之与实验数据符合得很好。所以与 3C 模型相比,DS3C 模型所得结果与实验数据更加符合,包含的非一阶效应也应更强。因此下面我们将着重对 DS3C 模型中非一阶效应进行深入地分析。

3.2. DS3C 模型非一阶效应综述

由图 1 可见,在各种几何条件下,DS3C 模型与 FBA 模型在 binary 峰幅度上均存在着一定的差别,

并且始终大于两者在 recoil 峰幅度上的差别,原因可以解释如下:我们早已知道初通道中入射电子与靶核的短程相互作用会对 recoil 峰产生明显地影响,而未态库仑场的强弱直接影响 binary 峰的强弱^[17,18].DS3C 模型与一级玻恩近似在对初通道的描述上是一致的:用平面波来描述入射电子,系统的初态波函数为入射电子波函数与 H 原子基态波函数的乘积.然而在对末通道的描述上两种模型则完全不同:一级玻恩近似用平面波描述散射电子,用库仑散射波描述敲出电子,它所反映的物理图象是敲出电子完全屏蔽了原子核对散射电子的影响,除短暂的碰撞外,入射电子大部分时间作自由运动,但敲出电子却在核的库仑作用下离开原子核,很显然这只能对末态给予粗略的描述,DS3C 模型中末态波函数用三个两体库仑波函数的乘积来表示,每一个库仑波函数对应于一对粒子之间的相互作用,并且通过对索末菲参量的修正进而表示了三个两体库仑相互作用彼此间的动力学屏蔽,非一阶效应尤为明显.正是 DS3C 模型与 FBA 模型在对末通道描述上的差异性以及对初通道描述上的一致性造成了两种模型在 binary 峰幅度上的差别大于在 recoil 峰幅度上的差别.

以下将对 DS3C 模型中包含的非一阶效应贡献与那一部分对应以及它们与电子入射能 E_i 、散射角 θ_a 和敲出电子能量 E_b 之间的关系分别进行详细地探讨.

3.3. 非一阶效应与入射能的关系

3.3.1. 非一阶效应与入射能关系概述

由图 1(a)可知,当 $E_i = 54.4$ eV 时 FBA 给出的双峰,尤其是 binary 峰,无论是在幅度上还是在角分布上都与实验数据相差很大,例如 FBA 给出的 binary 峰出现在 $\theta_b = 16^\circ$ 处,而实验数据给出的 binary 峰则出现在 $\theta_b = 60^\circ$ 处,两者的错位达到 44° .而造成这种 FBA 与实验数据巨大偏差的原因正是 $(e, 2e)$ 反应中非一阶效应所作的贡献.随着入射能 E_i 的增加, FBA 给出的双峰幅度和角分布与实验数据的符合程度也逐渐得到改善,如图 1(e)所示,当 $E_i = 150$ eV 时 FBA 给出的 binary 峰出现在 $\theta_b = 45^\circ$ 处,而实验数据给出的 binary 峰则出现在 $\theta_b = 57^\circ$ 处,两者的错位减小到 12° .这说明一级玻恩近似适用于高能电子入射时的 $(e, 2e)$ 反应,并且随着入射能的降低 $(e, 2e)$ 反应中非一阶效应的贡献趋于

增加.

3.3.2. DS3C 模型中非一阶效应与入射能的关系

如图 1(a)和图 1(e)所示,首先在双峰的幅度上,随着入射能 E_i 的增加,DS3C 模型给出的 binary 峰和 recoil 峰与 FBA 所给出的双峰之间的差别在不断减小;其次在双峰(尤其是 binary 峰)的角分布上,随着入射能 E_i 的增加, FBA 给出的 binary 峰依次出现在 $\theta_b = 16^\circ, 45^\circ$ 处, DS3C 模型给出的 binary 峰分别出现在 $\theta_b = 51^\circ, 55^\circ$ 处,与 FBA 在 binary 峰位置上的错位为 $35^\circ, 10^\circ$;与实验数据在 binary 峰位置上的错位为 $-9^\circ, -2^\circ$;可见这些错位均随着入射能 E_i 的增加而减小,呈现出明显的规律性.但是这种规律性到底对应于 DS3C 模型中那些部分的贡献呢?它们是否对应于非一阶效应?

在敲出电子能量 E_b 和散射角 θ_a 固定不变的情况下,随着入射电子能量 E_i 的增加,由能量守恒可知散射电子能量逐渐增大,以前的研究表明慢电子对剩余离子的屏蔽大于快电子对剩余离子的屏蔽^[19].在 DS3C 模型中敲出电子所感受到的有效电荷为

$$Z_{\text{eff}}^{(2)} = Z - \frac{2k_{12}k_2^2}{(k_1 + k_2)^3} \left[\frac{3 + \cos^2[4\xi(k_1)]}{4} \right]^2. \quad (30)$$

为此在图 2 中给出了敲出电子的能量 E_b 和散射角 θ_a 分别固定在 5 eV 和 4° ,入射能 E_i 分别取 54.4 eV 和 150 eV 时 $Z_{\text{eff}}^{(2)}$ 随敲出电子的出射角 θ_b 变化关系曲线.由图可知,随着入射能的增加,DS3C 模型中敲出电子所感受到的有效电荷 $Z_{\text{eff}}^{(2)}$ 在增加,即散射电子对剩余离子的屏蔽在减小,DS3C 模型中这种非一阶效应贡献逐渐减小,与 $(e, 2e)$ 反应中非一阶效应的变化呈现出相同的规律性,从而使得该模型与 FBA、实验结果无论在双峰幅度上还是在 binary 峰角分布上的差别均随着 E_i 的增加而减小.

3.4. 非一阶效应与散射角的关系

3.4.1. 非一阶效应与散射角关系概述

由图 1(b)—(d)(e)—(g)(h)—(j)以及(k)和(1)可见, FBA 均给出了较强的 binary 峰,并且随着散射角 θ_a 的增加, FBA 与实验数据在 binary 峰幅度上始终存在着明显的差别;两者在 recoil 峰幅度上的差别在逐渐减小.

如图 1(b)—(d)所示,当敲出电子的能量固定在 3 eV 时,随着散射角的增加,实验数据给出的

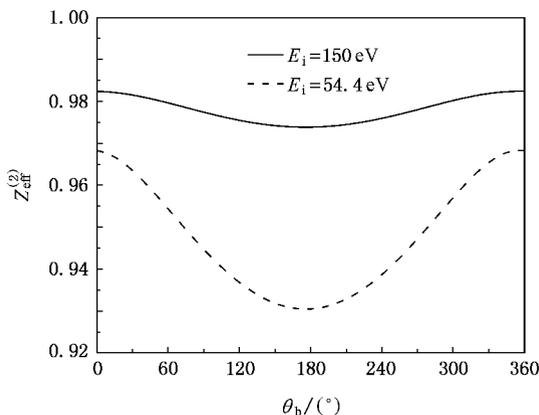


图 2 $E_b = 5 \text{ eV}$, $\theta_a = 4^\circ$, $E_i = 54.4 \text{ eV}$, 150 eV 时 DS3C 模型中敲出电子所感受到的有效电荷 $Z_{\text{eff}}^{(2)}$ 随敲出电子出射角 θ_b 变化的关系曲线

binary 峰依次出现在 $\theta_b = 60^\circ, 78^\circ, 87^\circ$ 处, FBA 给出的 binary 峰依次出现在 $\theta_b = 48^\circ, 66^\circ, 70^\circ$ 处, 两者的错位分别为 $12^\circ, 12^\circ, 17^\circ$. 如图 1(e)–(g) (h)–(j) 所示, 当敲出电子的能量分别固定在 5 eV 和 10 eV 时, 随着散射角的增加, 实验数据与 FBA 在 binary 峰处的错位分别为 $12^\circ, 14^\circ, 9^\circ$ 和 $20^\circ, 10^\circ, 10^\circ$, 可见两者在 binary 峰角分布上的差别并不随散射角的增加而呈现规律性的变化.

由此可见 ($e, 2e$) 反应中在 binary 峰附近非一阶效应的贡献始终存在, 且不随 θ_a 的增加而呈现规律性的变化, 而在 recoil 峰附近非一阶效应随 θ_a 的增加而逐渐减弱.

3.4.2. DS3C 模型中非一阶效应与散射角的关系

首先在双峰的幅度上, 由图 1(b)–(d) (e)–(g) (h)–(j) 以及 (k) 和 (l) 可见, DS3C 模型给出的 binary 峰均低于 FBA 给出的 binary 峰, 从而与实验数据相符合. 随着散射角 θ_a 的增加, DS3C 模型与 FBA 在 binary 峰幅度上始终存在着明显的差别, 两者在 recoil 峰幅度上的差别却在逐渐减小, 并与实验数据趋于符合. 这又是什么原因造成的呢? 通过仔细研究发现: 在图 1(b)–(d) 中, 当 $\theta_a = 4^\circ, 10^\circ, 16^\circ$ 时, 在 DS3C 模型给出的 recoil 峰处两个出射电子的夹角依次为 $\theta_{\text{ab}} = 144^\circ, 148^\circ, 170^\circ$, 即随着散射角 θ_a 的增加, 两个出射电子越趋于沿相反的方向出射, 彼此间的相互作用, 即非一阶效应不明显并且渐弱, 所以随着散射角 θ_a 的增加, DS3C 模型与 FBA 在 recoil 峰幅度的差别逐渐减小, 并且与实验数据符合得越好; 在 DS3C 模型给出的 binary 峰处两个出射电

子的夹角依次为 $\theta_{\text{ab}} = 61^\circ, 84^\circ, 93^\circ$, 虽然随着散射角 θ_a 的增加, 两个出射电子的夹角逐渐增大, 但是夹角始终较小, 彼此间的相互作用不可忽略, 非一阶效应始终比较明显, 所以随着散射角 θ_a 的增加, 该模型与 FBA 在 binary 峰幅度上始终存在着明显的差别. 在图 1(e)–(g), 图 1(h)–(j) 以及图 1(k) 和 (l) 中均呈现上述结果.

其次我们研究双峰 (尤其是 binary 峰) 的角分布与散射角的变化关系. 如图 1(b)–(d) 所示, 入射能 E_i 和敲出电子的能量 E_b 分别固定在 150 eV 和 3 eV , 散射角 θ_a 分别取 $4^\circ, 10^\circ, 16^\circ$ 时, FBA 给出的 binary 峰依次出现在 $\theta_b = 48^\circ, 66^\circ, 70^\circ$ 处, DS3C 模型给出的 binary 峰分别出现在 $\theta_b = 57^\circ, 74^\circ, 77^\circ$ 处, 与 FBA 在 binary 峰位置上的错位分别为 $9^\circ, 8^\circ, 7^\circ$, 可见这种错位随着散射角 θ_a 的增加而减小. 在图 1(e)–(g) 图 1(h)–(j) 以及图 1(k) 和 (l) 中理论结果同样存在上述规律性. 产生这种规律性变化的原因可以解释如下.

在 DS3C 模型中散射电子所感受到的有效电荷为

$$Z_{\text{eff}}^{(1)} = Z - \frac{2k_{12}k_1^2}{(k_1 + k_2)^3} \left[\frac{3 + \cos^2[4\xi(k_2)]}{4} \right]^2. \quad (31)$$

在图 3 中给出了入射能 E_i 和敲出电子的能量 E_b 分别固定在 150 eV 和 3 eV , 散射角 θ_a 分别取 $4^\circ, 10^\circ, 16^\circ$ 时 $Z_{\text{eff}}^{(1)}$ 随敲出电子的出射角 θ_b 变化关系曲线. 由图可见, $Z_{\text{eff}}^{(1)}$ 并不为零, 并且随着 θ_a 的增加, 在 binary 峰处 $Z_{\text{eff}}^{(1)}$ 在逐渐减小, 也就是说敲出电子并没有完全屏蔽原子核对散射电子的影响, 并且这种屏蔽作用在随 θ_a 的增加而增大, DS3C 模型中所包含的这种非一阶效应逐渐减弱, 正因如此使得该模型与 FBA 在 binary 峰处的错位随着散射角 θ_a 的增加而减小.

3.5. 非一阶效应与敲出电子能量的关系

3.5.1. 非一阶效应与敲出电子能量关系概述

如图 1(b) (e) (h) (c) (f) (i) 以及图 1(d), (g) (j) 所示, 当散射角分别固定为 $4^\circ, 10^\circ, 16^\circ$ 时, 随着敲出电子能量的增加, FBA 和实验数据在 binary 峰位置上的错位分别为 $12^\circ, 12^\circ, 20^\circ$; $12^\circ, 14^\circ, 10^\circ$; $17^\circ, 9^\circ, 10^\circ$, 可见这种错位并不随着 E_b 的增加而呈现规律性变化. 另外 FBA 与实验数据给出的双峰在

幅度上的差别同样也不随着敲出电子能量的增加而呈现出一定的规律性.可见($e, 2e$)反应中所包含的非一阶效应不可忽略,但受 E_b 的影响较小.

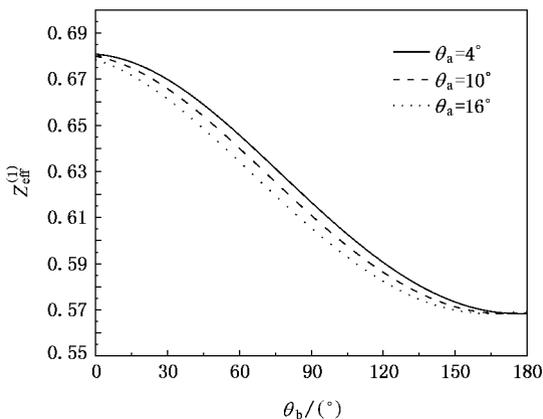


图3 $E_i = 150$ eV, $E_b = 3$ eV, $\theta_a = 4^\circ, 10^\circ, 16^\circ$ 时 DS3C 模型中散射电子所感受到的有效电荷 $Z_{\text{eff}}^{(1)}$ 随敲出电子出射角 θ_b 变化的关系曲线

3.5.2. DS3C 模型中非一阶效应与敲出电子能量的关系

首先在双峰的幅度上,如图 1(b)(e)(h); (c)(f)(i)和图 1(d)(g)(j)所示,DS3C 模型与 FBA 以及实验数据之间在双峰幅度的差别上都不随

着敲出电子能量的增加而呈现出明显的规律性变化.

固定入射能 E_i 为 150 eV, 当散射角分别固定为 $4^\circ, 10^\circ, 16^\circ$ 时, 随着敲出电子能量的增加, DS3C 模型给出的 binary 峰与 FBA 给出的 binary 峰位置之间的错位分别为 $9^\circ, 10^\circ, 14^\circ, 8^\circ, 8^\circ, 9^\circ$ 和 $7^\circ, 6^\circ, 6^\circ$. 与实验数据给出的 binary 峰位置之间的错位则分别为 $3^\circ, 2^\circ, 6^\circ, 4^\circ, 6^\circ, 1^\circ$ 以及 $10^\circ, 3^\circ, 4^\circ$. 由此可见 DS3C 模型中非一阶效应的贡献同样不随 E_b 的增加而呈现出规律性变化.

4. 结 论

本文对 3C 模型和 DS3C 模型给出的共面非对称几何条件下电子离化 H 原子的 TDCS 与一级玻恩近似给出的计算结果进行了比较和分析, 系统地研究了 DS3C 模型中非一阶效应与入射能、散射角以及敲出电子能量的关系, 发现该模型中末态三体间的屏蔽以及两个出射电子所感受到的有效电荷包含了极强的非一阶效应的信息, 且在低能和小散射角时尤为明显, 并随入射能 E_i 和散射角 θ_a 的增加而呈现规律性变化, 但是该模型中的非一阶效应与敲出电子能量 E_b 之间的关系却并不明显.

[1] Zhang S M, Wu X J 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 2137 (in Chinese) [张穗萌、吴兴举 2001 物理学报 **50** 2137]

[2] Chen Z J, Xu K Z 2001 *Chin. Phys.* **10** 290

[3] Zhang C H, Qiu W, Xin J L, Liu Y Y, Wang X W, Wang J Y 2003 *Chin. Phys.* **12** 1395

[4] Ge Z M, Zhou Y J, Lv Z W, Wang Z W 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 519 (in Chinese) [葛自明、周雅君、吕志伟、王治文 2002 物理学报 **51** 519]

[5] Zhang C H, Qiu W, Xin J L, Liu Y Y, Wang X W, Wang J Y 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 2449 (in Chinese) [张程华、邱魏、辛俊丽、刘英煜、王晓伟、王京阳 2002 物理学报 **52** 2449]

[6] Catoire F, Staicu-Casagrande E M, Nekkab M, Cappello C D, Bartschat K, Lahmam-Bennani A 2006 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **39** 2827

[7] Yang H, Gao K, Zhang S M 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5202 (in Chinese) [杨欢、高矿、张穗萌 2007 物理学报 **56** 5202]

[8] Brauner M, Briggs J S, Klar H 1989 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **22** 2265

[9] McCarthy I E, Zhang X 1989 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **22** 2189

[10] Roder J, Ehrhardt H, Bray I, Fursa D V, McCarthy I E 1996 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **29** L67

[11] Berakdar J, Briggs J S 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 3799

[12] Zhang S M 2000 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **33** 3545

[13] Chen Z J, Madison D H, Whelan C T, Walters H R J 2004 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **37** 1

[14] Chen Z J, Madison D H 2005 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **38** 4195

[15] Ehrhardt H, Jung K, Konth G, Schlemmer P 1986 *Z. Phys.* **D 1** 3

[16] Landau L D, Lifschitz E M 1965 *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory* (London: Pergamon)

[17] Zhang S M, Chen Z J, Xu K Z 1999 *Chin. J. Mol. Atom. Phys.* **16** 243 (in Chinese) [张穗萌、陈长进、徐克尊 1999 原子与分子物理学报 **16** 243]

[18] Zhang S M, Chen Z J, Xu K Z 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 453 (in Chinese) [张穗萌、陈长进、徐克尊 1999 物理学报 **48** 453]

[19] Zhang S M, Chen Z J, Xu K Z 1998 *Chin. J. Mol. Atom. Phys.* **15** 386 (in Chinese) [张穗萌、陈长进、徐克尊 1998 原子与分子物理学报 **15** 386]

A theoretical study on non-first-order effects of BBK model in the (e^+e^-) process for hydrogen *

Yang Huan¹⁾ Gao Kuang¹⁾ Wu Xing-Ju²⁾ Zhang Sui-Meng^{1)†}

¹⁾ College of Physics and Electrical Information , Anhui Normal University , Wuhu 241000 , China)

²⁾ Institute of Atomic and Molecular Physics , Department of Mathematics and Physics , West Anhui University , Lu 'an 237012 , China)

(Received 20 June 2007 ; revised manuscript received 4 July 2007)

Abstract

The triple differential cross sections for electron impact ionization of hydrogen at incident energies of 54.4 , 150 and 250eV in the coplanar asymmetric geometry are calculated by use of BBK model and modified BBK model. The present results are compared with the results of first order approximation and experimental measurements. The non-first-order effects of modified BBK model are analysed and discussed. It is found that screening of three bodies in the final state conveys rich information of the non-first-order effects.

Keywords : non-first-order effects , DS3C model , binary peak , recoil peak

PACC : 3480D , 3450H

* Project supported by the Foundation for Major Research Program of Education Department of Anhui Province(Grant No. ZID2007002-1) , by the Key Subject Foundation of Atomic and Molecular Physics of Anhui Province , by the Natural Science Foundation of Education Commission of Anhui Province (Grant No. 2006KJ267B) , by the Natural Science Foundation of Anhui Province (Grant No.03406203) , and by the Foundation for University Talented Persons of Anhui Province , China (Grant No.[2003]022) .

† Corresponding author. E-mail : hyang8068@yahoo.com.cn