

# 共面不对称条件下 Ar 原子 (e, 2e) 反应的三重微分截面

高瑞军 葛自明<sup>†</sup>

(华东理工大学理学院物理系, 上海 200237)

(2009 年 3 月 13 日收到; 2009 年 6 月 2 日收到修改稿)

采用修正的扭曲波玻恩近似(DWBA)方法, 计算了共面、大能量损失和小动量转移这一特殊几何条件下电子碰撞 Ar(3p<sup>6</sup>) (e, 2e)反应的三重微分截面. 理论方法对(e, 2e)反应过程近程极化势进行了修正, 并引入 Gamow 因子表示后碰撞相互作用(PCI). 将计算结果与实验结果、标准 DWBA 计算结果及 Gamow 因子修正后的 DWBA-G 计算结果进行了比较, 发现极化效应起着重要的作用.

**关键词:** 能量损失, 动量转移, 极化效应, 后碰撞相互作用

**PACC:** 3480D, 3450H

## 1. 引 言

电子碰撞原子分子及离子的(e, 2e)单电离过程为研究碰撞机理和结构测量开辟了全新的研究领域<sup>[1-3]</sup>. 一方面, 随着(e, 2e)的实验测量技术不断发展<sup>[4,5]</sup>, 包括大能量损失和小动量转移等新碰撞几何条件下(e, 2e)反应三重微分截面(TDCS)的测量数据越来越丰富; 另一方面, 近 20 多年来(e, 2e)碰撞机理的理论模型亦日趋成熟. 对于低能少电子体系的 H 和 He 原子的(e, 2e)反应, BBK 模型<sup>[6]</sup> (Brauner, Briggs 和 Klar), CCC 模型<sup>[7]</sup> (convergen close coupling) 以及引入有效索末菲参量修正后的 BBK 模型<sup>[8-10]</sup> 等理论方法取得了很大的成功; 对于中高能多电子体系如 Ar 原子等的(e, 2e)反应, 扭曲波冲量近似 (distorted wave impulse approximation)、扭曲波玻恩近似<sup>[11]</sup> (distorted wave Born approximation) 及修正的 DWBA 模型的理论研究亦十分成功<sup>[12,13]</sup>.

(e, 2e)碰撞动力学主要研究电子与靶粒子碰撞的机理以及碰撞过程中各粒子之间的复杂相互作用. 最近 Catoire 等人对 Ar 原子的 TDCS 在共面、大能量损失和小动量转移这一新的几何条件下进行了相对测量<sup>[14]</sup>, 得到了 TDCS 随敲出电子出射角

变化的实验数据. 2008 年, Kheifets 等人分别使用标准 DWBA 及 Gamow 因子修正后的 DWBA-G 方法对电子碰撞 Ar(3p<sup>6</sup>) 电离进行了理论研究<sup>[15]</sup>, 并与大能量损失、小动量转移共面非对称几何条件下三重微分截面的测量数据进行了比较. DWBA-G 方法的理论结果比标准 DWBA 有了改进, 但 binary 峰与 recoil 峰的峰值位置以及双峰幅度比值的理论计算结果与实验值的偏差依然存在. 对于多电子原子的(e, 2e)反应, 特别是靶原子近核的短程区有效极化效应、后碰撞相互作用(PCI)、电子与靶的非局域交换相互作用等弛豫过程一直是(e, 2e)反应理论研究的热点问题之一. 本文通过综合考虑 PCI 效应和极化作用修正后的 DWBA 对电子碰撞 Ar 原子电离进行了理论研究, 并对计算结果进行了分析与讨论.

## 2. 理论模型

考虑具有动量  $\mathbf{k}_0$  入射电子与靶原子发生碰撞, 散射电子和电离电子的动量分别为  $\mathbf{k}_1$  和  $\mathbf{k}_2$ , 相应的动能分别为  $E_1$  和  $E_2$ , 入射电子的动能为  $E_0$ . DWBA 理论计算的 TDCS 为 (使用原子单位,  $\hbar = m_e = e = 1$ )<sup>[11]</sup>

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1} = (2\pi)^4 \frac{k_1 k_2}{k_0}$$

<sup>†</sup> 通讯联系人. E-mail: geziming@ecust.edu.cn

$$\times \sum_{uv} (|f|^2 + |g|^2 - \text{Re}(r^* g)), \quad (1)$$

其中  $\sum_{uv}$  表示对末态简并态求和及对初态简并态求平均,  $\Omega_1, \Omega_2$  是接收动量为  $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$  两电子的立体角,  $f, g$  分别为直接电离振幅和交换电离振幅, 分别由下式给出:

$$f \equiv \langle \chi^{(-)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1) \chi^{(-)}(\mathbf{k}_2, \mathbf{r}_2) \times \left| \frac{1}{r_{12}} \chi^{(+)}(\mathbf{k}_0, \mathbf{r}_1) \phi_{nl} \right\rangle, \quad (2a)$$

$$g \equiv \langle \chi^{(-)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_2) \chi^{(-)}(\mathbf{k}_2, \mathbf{r}_1) \times \left| \frac{1}{r_{12}} \chi^{(+)}(\mathbf{k}_0, \mathbf{r}_1) \phi_{nl} \right\rangle, \quad (2b)$$

其中  $\chi^{(+)}$  是处于初态靶原子等效局域势下的入射电子扭曲波,  $\chi^{(-)}$  是处于终态靶离子等效局域势下的两出射电子的扭曲波, 且  $\chi^{(+)}$  和  $\chi^{(-)}$  都与  $\phi_{nl}$  正交.  $\phi_{nl}$  为靶的  $nl$  轨道波函数, 轨道波函数在坐标表象中的表示为

$$\langle \mathbf{r} | \phi_{nl} \rangle = r^{-1} u_{nl} Y_{LM}(\mathbf{r}), \quad (3)$$

直接扭曲势  $V_D$  为

$$V_D(r) = \sum_{nl} N_{nl} \int dr' [u_{nl}(r')]^2 / r_{>}, \quad (4)$$

其中  $r_{>}$  是  $r$  和  $r'$  中的较大者,  $N_{nl}$  是轨道  $nl$  的电子数. 等效局域的自旋静态平均交换势为

$$V_E(r) = 0.5(E + V_D(r) - \{[E + V_D(r)]^2 - 2\pi\rho(r)\}^{1/2}), \quad (5)$$

其中  $\rho(r)$  为电子的密度. DWBA 扭曲波  $\chi^{(+)}$  和  $\chi^{(-)}$  分波展开的径向分波函数  $u_L(k, r)$  可以通过解如下的微分方程得到:

$$\left( \frac{d^2}{d\xi^2} - \frac{L(L+1)}{\xi^2} - \frac{\eta}{\xi} - \frac{v(r) + v_{\text{pol}}}{E} + 1 \right) u_L(k, r) = 0, \quad (6)$$

其中相互作用势  $v(r)$  包括直接势  $V_D(r)$  和自旋静态平均交换势  $V_E(r)$ ,  $\xi = kr, \eta = -Z/k, E = k^2/2, v_{\text{pol}}$  是极化势, 其二次展开式为

$$V_{\text{pol}}(r_e)_{r_e \rightarrow \infty} \sim \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\alpha_l}{2r_e^{2l+2}}. \quad (7)$$

(7) 式在电子与靶距离很远时能够很好地描述它们之间的极化作用, 当它们之间的距离比较小时, (7) 式夸大了极化的作用, 特别是当电子趋近于力场的中心时, 由此得到的极化势趋于无穷大. Fazio 等人提出了一种修正的极化势<sup>[16]</sup>

$$V_{\text{pol}}^{\text{damp}}(r_e) = - \sum_{l=1}^{\infty} f_{2l+2}(r_e) \frac{\alpha_l}{2r_e^{2l+2}}, \quad (8)$$

其中

$$f_{2l+2}(r_e) = \frac{\int_0^{r_e} \rho_0(r_b) r_b^{2l+2} dr_b}{\int_0^{\infty} \rho_0(r_b) r_b^{2l+2} dr_b}. \quad (9)$$

此极化势能够对长程库仑力起到一个有效的短程极化衰减作用. 修正后的极化势  $V_{\text{pol}}^{\text{damp}}$  与未修正的极化势  $V_{\text{pol}}$  的理论曲线如图 1 所示, 在电子与靶距离很远时两种极化势的曲线几乎重合; 当电子离靶的距离变小时, 极化势  $V_{\text{pol}}$  变得越来越大; 当电子趋近于力场的中心时,  $V_{\text{pol}}$  趋于无穷大. 对于修正后的极化势  $V_{\text{pol}}^{\text{damp}}$ , 随着电子离靶距离的不断减小, 它的值先增大后减小; 当电子趋近于力场的中心时,  $V_{\text{pol}}^{\text{damp}}$  趋于零, 从而更好地描述 (e, 2e) 反应过程近靶区的极化效应.

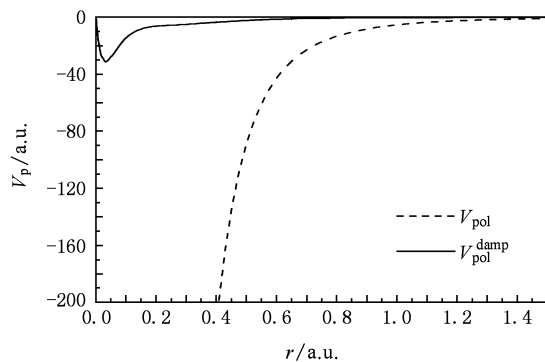


图 1 Ar(3p<sup>6</sup>) 的未修正极化势  $V_{\text{pol}}$  与近靶区短程极化衰减修正的极化势  $V_{\text{pol}}^{\text{damp}}$  随原子径向  $r$  变化的理论曲线

后碰撞相互作用 PCI 通过引入 Gamow 因子  $N_{ee}$  来实现,  $N_{ee}$  的表达式为<sup>[17]</sup>

$$N_{ee} = \frac{\gamma}{e^\gamma - 1}, \quad (10)$$

其中  $\gamma = 2\pi / |\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2|$ .

### 3. 结果与讨论

本文使用标准 DWBA, DWBA-G(DWBA<sub>1</sub>) 及考虑了 PCI 效应和近靶区衰减修正极化  $V_{\text{pol}}^{\text{damp}}$  后的 DWBA(DWBA<sub>2</sub>) 计算了电子碰撞 Ar(3p<sup>6</sup>) 电离的三重微分截面. 理论计算结果与实验结果进行了比较. 为了便于比较, 我们把标准 DWBA 方法、DWBA<sub>1</sub> 以及 DWBA<sub>2</sub> 的理论计算结果与实验结果在 binary 峰处进行归一化.

图 2 给出了快电子散射角为 6° 时共面、大能量

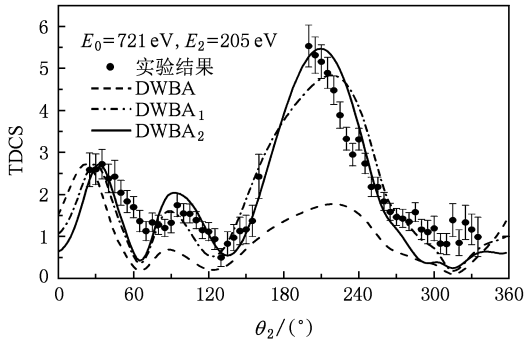


图2 共面、大能量损失小动量转移几何条件下电子电离 Ar ( $3p^6$ ) 原子 ( $e, 2e$ ) 的 TDCS 随慢电子出射角  $\theta_2$  变化的理论曲线 ( $\theta_1 = 6^\circ$ , 实心圆点: 实验数据<sup>[14]</sup>; 虚线: 标准 DWBA 理论计算结果; 虚点线: DWBA<sub>1</sub> 计算结果; 实线: 同时考虑极化势  $V_{\text{pol}}^{\text{damp}}$  和 Gamow 因子  $N_{\text{ec}}$  修正后的 DWBA<sub>2</sub> 的理论计算结果)

损失和小动量转移这一特殊几何条件下电子碰撞 Ar( $3p^6$ ) ( $e, 2e$ ) 反应的 TDCS, 入射电子能量为 721 eV, 对应的慢电子能量为 205 eV. 从图中可以看出标准 DWBA 的计算结果在双峰的位置以及双峰幅度的相对比值上与实验结果均存在明显的偏差; 只考虑 PCI 效应的 DWBA<sub>1</sub> 的计算结果在 binary 峰的位置以及双峰幅度的相对比值比标准 DWBA 的计算结果有明显的改进, 从双峰的位置上看, DWBA<sub>1</sub> 方法给出的 binary 峰理论值在  $30^\circ$  处, 比标准 DWBA 的  $22.5^\circ$  向实验峰值方向靠近了约  $7.5^\circ$ ; 从双峰幅度的比值上看, DWBA<sub>1</sub> 给出的 binary 峰与 recoil 峰幅度的比值为  $0.56:1.00$ , 明显比标准 DWBA 的  $1.54:1.00$  要好得多.

在 DWBA-G 基础上考虑近靶区衰减修正极化  $V_{\text{pol}}^{\text{damp}}$  的 DWBA<sub>2</sub> 计算的结果在双峰的位置、双峰幅度的相对比值上比 DWBA<sub>1</sub> 有了进一步的改进. recoil 峰的 DWBA<sub>2</sub> 理论值在  $210^\circ$ , 比 DWBA<sub>1</sub> 的  $217.5^\circ$  向实验峰值方向靠近了约  $7.5^\circ$ ; 从双峰幅度的相对比值上看, DWBA<sub>2</sub> 给出的 recoil 峰明显比 DWBA<sub>1</sub> 给出的 recoil 峰高, 更接近于 recoil 峰的实验值. 三种理论方法中, DWBA<sub>2</sub> 与 DWBA<sub>1</sub> 比较接近, 但与传统 DWBA 的差别十分明显, 说明对于入射电子能量为 721 eV, 慢电子能量为 205 eV 情形, DWBA<sub>2</sub> 与 DWBA<sub>1</sub> 中的 Gamow 因子的贡献很强, 而修正的极化势的贡献相对于 Gamow 因子要弱得多, 其原因主要是两个出射电子的能量分别为 205 eV 和 500 eV, 它们的共面非对称性比较小, Gamow 因子表示的 PCI 中角度关联效应较强, 电子对靶的极

化作用对 ( $e, 2e$ ) 反应 TDCS 的影响与 Gamow 因子的作用相比较小.

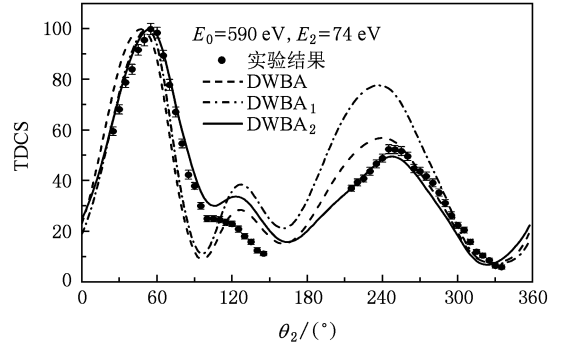


图3 共面、大能量损失小动量转移几何条件下电子电离 Ar ( $3p^6$ ) 原子 ( $e, 2e$ ) 的 TDCS 随慢电子出射角  $\theta_2$  变化的理论曲线 ( $\theta_1 = 6^\circ$ , 其他与图2同)

图3 给出了同样碰撞对称条件下快电子散射角为  $6^\circ$ , 入射电子能量为 590 eV, 对应的慢电子能量为 74 eV 时电子碰撞 Ar( $3p^6$ ) 电离的 TDCS. 从图中可以看出标准 DWBA 计算给出的计算结果不仅在双峰的位置、双峰幅度的相对比值上与实验结果存在明显的偏差, 而且在整个 TDCS 的形状上也与实验结果存在明显的偏差. 只考虑 PCI 效应的 DWBA<sub>1</sub> 的计算结果在 binary 峰的位置上比标准 DWBA 的计算结果有所改进, DWBA<sub>1</sub> 给出的 binary 峰在  $52.5^\circ$ , 比标准 DWBA 的  $47.5^\circ$  向实验峰值方向靠近了约  $5^\circ$ ; 但在双峰幅度的相对比值及整个 TDCS 的形状上并没有改进, DWBA<sub>1</sub> 给出的 binary 峰与 recoil 峰幅度的相对比值约为  $1.29:1.00$ , 比标准 DWBA 的理论计算值  $1.76:1.00$  偏离  $1.91:1.00$  的实验值更远.

DWBA<sub>2</sub> 方法的理论计算结果在双峰的位置、双峰幅度的相对比值以及整个 TDCS 的形状上比标准 DWBA 和 DWBA<sub>1</sub> 的理论计算结果都有明显改进: 从双峰的位置上看, DWBA<sub>2</sub> 给出的 binary 峰在  $55^\circ$ , 比 DWBA<sub>1</sub> 的  $52.5^\circ$  向实验峰值方向靠近了约  $2.5^\circ$ , binary 峰附近的 DWBA<sub>2</sub> 的理论值与实验测量值符合得非常好; DWBA<sub>2</sub> 给出的 recoil 峰在  $247.5^\circ$ , 比 DWBA<sub>1</sub> 理论值的  $236.5^\circ$  向实验峰值方向靠近了约  $11^\circ$ , 不仅 DWBA<sub>2</sub> 给出的双峰位置均与实验结果几乎重合; 而且 recoil 峰附近的 DWBA<sub>2</sub> 理论值与实验测量值符合得亦非常好. DWBA<sub>2</sub> 的 binary 峰与 recoil 峰幅度的相对比值为  $2.02:1.00$ , 十分接近实验的  $1.91:1.00$ . 三种理论方法中, DWBA<sub>2</sub>, DWBA<sub>1</sub>

与 DWBA 的差别与图 2 情形相比明显减小, 说明 Gamow 因子的贡献有所减弱, 这是因为对于入射电子能量为 590 eV, 慢电子能量为 74 eV 情形, 两个出射电子的能量分别为 74 eV 和 500 eV, 与图 2 情形相比, 它们的共面非对称性增大, Gamow 因子表示的 PCI 中角度的关联效应变小. 由于慢电子能量为 74 eV, 电子对靶的极化作用对 ( $e, 2e$ ) 反应 TDCS 的影响与 Gamow 因子的作用相比会相对增强.

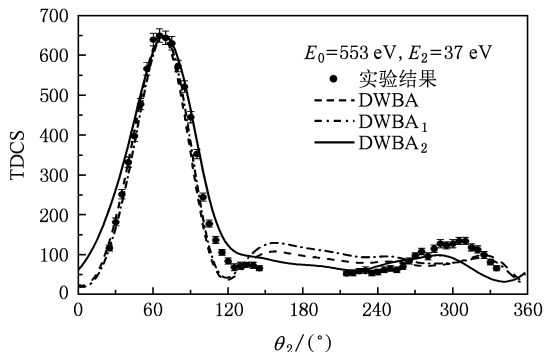


图 4 共面、大能量损失小动量转移几何条件下电子电离 Ar ( $3p^6$ ) 原子 ( $e, 2e$ ) 的 TDCS 随慢电子出射角  $\theta_2$  变化的理论曲线 ( $\theta_1 = 6^\circ$ , 其他与图 2 同)

本文还计算了同样碰撞对称条件下入射电子能量为 553 eV, 对应慢电子能量为 37 eV 时电子碰撞 Ar( $3p^6$ ) 电离的 TDCS, 理论计算如图 4 所示. 从图中可以看出, 标准 DWBA, DWBA<sub>1</sub> 及 DWBA<sub>2</sub> 给出的 TDCS 随慢电子出射角  $\theta_2$  变化理论曲线的整个形状颇为相似, 但在 recoil 峰的位置、binary 峰与 recoil 峰幅度的相对比值上均存在偏差. 在  $120^\circ$  附近, 标准 DWBA, DWBA<sub>1</sub> 理论计算的 TDCS 有一明显的极小值, 然后迅速上升, 而实验测量的 TDCS 在  $120^\circ$  附近处极小值并不明显, 也没有迅速上升趋势;

而且在  $150^\circ$ — $270^\circ$  的区间内, DWBA, DWBA<sub>1</sub> 理论值明显高于实验值. DWBA<sub>2</sub> 的理论计算结果在双峰位置、双峰幅度的相对比值及整个 TDCS 的形状上有所改进, 但从整个 TDCS 的形状上看, 特别是 recoil 峰附近, 理论计算与实验的偏差比较明显. 与图 2 和图 3 相比, DWBA<sub>2</sub>, DWBA<sub>1</sub> 与 DWBA 的差别不大说明 Gamow 因子的贡献明显减弱, 这是因为对于入射电子能量为 553 eV, 慢电子能量为 37 eV 情形, 两个出射电子的能量分别为 37 eV 和 500 eV, 它们的非对称性更大, Gamow 因子表示的 PCI 中角度关联效应明显变小; 电子与靶离子极化效应所起的作用对 ( $e, 2e$ ) 反应 TDCS 的影响与 Gamow 因子的作用十分接近; 同时, 由于慢电子能量为 37 eV, 约为 Ar 原子  $3p$  电子电离阈值的两倍多, 涉及到复杂原子的低能电子 ( $e, 2e$ ) 反应, 其电离动力学过程中靶的极化弛豫效应、非局域交换作用以及电子多次散射中的相干效应都将对 ( $e, 2e$ ) 反应的 TDCS 产生显著的影响, 还需要进一步的理论研究.

## 4. 结 论

采用修正的 DWBA 方法计算了共面、大能量损失和小动量转移这一特殊几何条件下电子碰撞 Ar ( $3p^6$ ) ( $e, 2e$ ) 反应的三重微分截面, 理论计算结果与实验结果及标准 DWBA 计算结果进行了比较, 无论从 binary 峰与 recoil 峰幅度的相对比值上, 还是在双峰的位置及 TDCS 随慢电子出射角变化理论曲线的整个形状上, 修正的 DWBA 的理论方法比标准的 DWBA 有明显的改善, 说明 PCI 效应和修正的极化势对于电子碰撞原子 ( $e, 2e$ ) 反应的 TDCS 理论计算起着重要作用.

[1] Lahmam-Bennani A 2002 *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **123** 365  
 [2] Harak B A D, Bartschat K, Martin N L S 2008 *Phys. Rev. Lett.* **100** 063201  
 [3] Palaniyappan S, DiChiara A, Chowdhury E, Falkowski A, Ongadi G, Huskins E L, Walker B C 2005 *Phys. Rev. Lett.* **94** 243003  
 [4] Catoire F, Staicu Casagrande E M, Nekkab M, Dal Cappello C, Bartschat K, Lahmam-Bennani A 2006 *J. Phys. B: At. Mol. Opt.* **39** 2827

[5] Takahashi M, Miyake Y, Watanabe N, Udagawa Y, Sakai Y, Mukoyama T 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 013201  
 [6] Brauner M, Briggs J S, Klar H 1989 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **22** 2265  
 [7] Bray I 1997 *Phys. Rev. Lett.* **78** 4721  
 [8] Berakdar J 1996 *Phys. Rev. A* **53** 2314  
 [9] Sun S Y, Jia X F, Shi W Q, Li X W 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3458 (in Chinese) [孙世艳、贾祥富、师文强、李雄伟 2008 物理学报 **57** 3458]

- [10] 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]
- [11] McCarthy I E 1995 *Aust. J. Phys.* **48** 1
- [12] Hu X Y, Zhou Y J 2008 *Phys. Lett. A* **372** 4809
- [13] Zhou L X, Yan Y G 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 7619 (in Chinese) [周丽霞、燕友果 2008 物理学报 **57** 7619]
- [14] Catoire F, Staicu Casagrande E M, Lahmam-Bennani A, Duguet A, Naja A, Ren X G, Lohmann B, Avaldi L 2007 *Rev. Sci. Instrum.* **78** 013108
- [15] Kheifets A S, Naja A, Staicu Casagrande E M, Lahmam-Bennani A 2008 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **41** 145201
- [16] Fazio D De, Gianturco F A, Rodriguez-Ruiz J A, Tang K T, Toennies J P 1994 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **27** 303
- [17] Ward S J, Macek J H 1994 *Phys. Rev. A* **49** 1049

## Triple differential cross sections of the ( $e,2e$ ) reaction for electron impact Ar in a coplanar asymmetric geometry

Gao Rui-Jun Ge Zi-Ming<sup>†</sup>

(Department of Physics, East China University of Science and Technology, Shanghai 200237, China)

(Received 13 March 2009; revised manuscript received 2 June 2009)

### Abstract

The triple differential cross section for  $\text{Ar}(3p^6)$  in the special geometry of coplanar large energy loss and close to minimum momentum transfer has been calculated with the modified distorted wave Born approximation (DWBA). The polarization interaction between the electron and the target, especially in the near-target region, and the post-collision interactions are included in the calculation. The theoretical results with modified DWBA are compared with the recent experimental data, the standard DWBA and DWBA-G. It is shown that the polarization are very important in the calculation of TDCS in coplanar asymmetric ( $e,2e$ ) reaction.

**Keywords:** energy loss, momentum transfer, polarization effect, post-collision interaction

**PACC:** 3480D, 3450H

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: geziming@ecust.edu.cn