

光学势在 $(e, 2e)$ 反应动力学过程的作用*

胡小颖¹⁾ 周雅君^{2)†}

1) (长春大学理学院, 长春 130022)

2) (吉林大学原子与分子物理研究所, 长春 130012)

(2009 年 7 月 6 日收到; 2009 年 7 月 28 日收到修改稿)

将光学势包含到畸变波 Bohn 近似(DWBA)方法的畸变势中,修正了 DWBA 理论. 计算了共面高非对称动力学条件下 Ar 原子 2p 壳层的三重微分截面,并与标准的 DWBA 计算得到的结果进行了比较. 计算结果表明,光学势在 Ar (2p) 的电离过程中起着重要的作用.

关键词: 光学势, 畸变波 Bohn 近似, 三重微分截面

PACC: 3480B

1. 引 言

近些年来,电子-原子碰撞的 $(e, 2e)$ 反应已经成为碰撞理论中的热门话题^[1-5]. 在过去的 20 年中,众多的理论和实验工作者都致力于 $(e, 2e)$ 反应的研究工作,但他们的工作主要集中在外壳层电离的 $(e, 2e)$ 反应以及一般共面非对称动力学条件下原子的价电子和内壳层电子轨道的电离,尤其是对于轻原子靶的研究^[6]. 对于内壳层的电离而言,由于其电离截面非常小,碰撞过程更为复杂,所以直到近些年实验技术才对内壳层 $(e, 2e)$ 反应有了精确的描述^[7,8].

1992 年, Zhang 等^[7]报道了 Ne 原子的 1s 壳层和 Ar 原子 $n=2$ 壳层的理论计算和实验测量结果. 他们利用畸变波 Bohn 近似(DWBA)方法和使用 Hartree-Fock 轨道给出了同实验非常一致的相对微分截面数据. 1997 年,澳大利亚学者 Cavanagh 等^[9]在共面非对称动力学条件下对 Ar(2p)的 $(e, 2e)$ 反应微分截面也进行了测量和理论计算, DWBA 的计算结果与实验符合得非常好. 这表明包含了多重散射效应的 DWBA 方法对于描述以上一般共面非对称动力学条件下的 $(e, 2e)$ 反应是具有非常大的优势的.

但是,在共面高非对称动力学条件下^[10-14],采

用 DWBA 方法得到的计算结果与实验测量却显示了很大的差别^[15], DWBA 理论不能完美地描述实验现象,这就对理论工作提出了挑战,要求我们在理论上要有进一步的发展. 本文中,在 DWBA 研究工作的基础上,对 DWBA 理论进行了修正,通过动量空间光学势方法^[16,17]将极化作用考虑到 $(e, 2e)$ 反应过程中来,分别利用 DWBA 和修正后的 DWBA (MDWBA) 方法计算了两组动力学条件下的三重微分散射截面,并同实验结果进行了比较. 通过计算发现, MDWBA 方法同标准的 DWBA 方法相比,能够更为准确地描述此等动力学条件下的三重微分反应截面,与实验结果能够更好地符合,这证明极化作用在碰撞过程中是非常重要的,同时也说明我们对理论的修改是成功的.

2. DWBA 理论

$(e, 2e)$ 反应的 Schrödinger 方程为^[18]

$$[E - \{K_1 + K_2 + H_1(\xi) + V_1(E_1; x_1, \xi) + V_2(E_2; x_2, \xi) + \nu'(\mathbf{r})\}] \psi(x_1, x_2, \xi) = 0, \quad (1)$$

这里,我们用下标 1 和 2 表示入射电子和被电离电子, ξ 表示原子的其他束缚电子坐标的集合, K_1 和 K_2 为电子 1 和 2 的动能算符, H_1 是离子的 Hamilton 算符, V_1 和 V_2 分别为电子 1 和 2 与离子之间 Columb 相互作用, 两电子 Columb 势 ν' 依赖于相对

* 国家自然科学基金(批准号:10647104)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: xiaoying-hu@tom.com

的坐标 \mathbf{r} , E 为散射体系的总能量.

对于靶为中性原子的 $(e, 2e)$ 反应, 初通道为处于束缚态 μ 的靶原子和一个处于连续态 ϕ_μ^+ 的入射自由电子, 靶的 Schrödinger 方程为:

$$[\varepsilon_\mu - (K_2 + H_1 + V_2)] |\mu\rangle = 0. \quad (2)$$

这里, $|\mu\rangle$ 为靶原子束缚态的波函数, ε_μ 为对应靶束缚态 $|\mu\rangle$ 的能量, 靶体系的本征态 $|\mu\rangle$ 可以向独立粒子模型的 Slater 基做展开:

$$|\mu\rangle = \sum_{\alpha} a_{\alpha}^{(\mu)} |\alpha\rangle, \quad (3)$$

$a_{\alpha}^{(\mu)}$ 为展开系数, 波函数 $|\alpha\rangle$ 为乘积波函数, 其交换反对称通过交换势给予考虑. ET (electron-target) 体系(1)中的波函数 ψ 可以向原子束缚态波函数 $|\mu\rangle$ 做多通道展开:

$$|\psi(x_1, x_2, \xi)\rangle = \sum_{\mu} \phi_{\mu}(x_1) |\mu\rangle, \quad (4)$$

将方程(4)代入方程(1), 并且用波函数 $\langle\mu|$ 左乘方程(1)求积分, 可得电子同靶相互作用的耦合方程

$$[E - \varepsilon_{\mu} - K_1 - V_{\mu\mu}] \phi_{\mu} = \sum_{\nu \neq \mu} V_{\mu\nu} \phi_{\nu}. \quad (5)$$

这样我们可以构建耦合势 $V_{\mu\nu}$. 它是非局域势 $V_1 + u'$ 的矩阵元, 其中, u' 包含一个两电子交换项.

$$V_{\mu\nu}(x_1) = \langle\mu| V_1 + u' | \nu\rangle. \quad (6)$$

对于电子从靶态 $|\lambda\rangle$ 的弹性散射, 定义光学模型势为

$$\bar{V}_{\lambda} = V_{\lambda\lambda} + V_{\lambda\nu}(E - \varepsilon_{\mu} - K_1 - V_{\mu\lambda})^{-1} V_{\mu\lambda}. \quad (7)$$

下面我们讨论 $(e, 2e)$ 反应末态, 对于 EI (electron-ion) 体系, 类似于初态作相似的定义. $(e, 2e)$ 反应末通道为单洞离子态 $|f\rangle$ 和分别处于连续态 ϕ_{μ}^- 和 ϕ_{ν}^- 的散射电子以及被电离电子. 离子的 Schrödinger 方程为

$$[\varepsilon_f - H_1] |f\rangle = 0, \quad (8)$$

$|f\rangle$ 为靶的单洞离子态波函数, ε_f 为态 $|f\rangle$ 对应的能量. 因为 $(e, 2e)$ 反应使离子处于一系列本征态的其中一个态, 因此, 我们可以通过耦合其中一个单洞态 φ_j^{\dagger} 和靶的独立粒子模型下的 Slater 基 $|\beta\rangle$ 对离子进行处理,

$$\begin{aligned} |f\rangle &= \sum_{j\beta} t_{j\beta}^{(f)} [\varphi_j^{\dagger} \times |\beta\rangle]_r, \\ &\equiv \sum_{j\beta} t_{j\beta}^{(f)} C_{j\beta} \varphi_j^{\dagger} |\beta\rangle. \end{aligned} \quad (9)$$

$t_{j\beta}^{(f)}$ 是离子波函数的展开系数, 耦合的组态是具有耦合系数 $C_{j\beta}$ 的乘积组态的线形组合. 这就保证使基组态和本征态 $|f_r\rangle$ 属于相同离子点群的不可约表象 \mathbf{r}, \mathbf{j} 和 β 表示表象中的矢量. EI 态 $|\mu\rangle$ 的多通道

展开为

$$|\mu\rangle = \sum_{j'} \phi_{j'}^{(\mu)}(x_2) |f'\rangle, \quad (10)$$

根据方程(3)和(9), 可得 EI 态 $|\mu\rangle$ 与单洞靶态 $|f\rangle$ 的关系为

$$\phi_{j'}^{(\mu)} = \sum_{j\beta} t_{j\beta}^{(f)*} C_{j\beta} \varphi_j a_{\beta}^{(\mu)}. \quad (11)$$

将靶离子态波函数 $|f\rangle$ 展开式(9)代入离子的 Schrödinger 方程(8), 由方程(10)和(11)可以得到相应被电离电子的耦合方程

$$[E - \varepsilon_f - K_2 - V_{ff}] \phi_{j'}^{(\mu)} = \sum_{j'' \neq j'} V_{j''j'} \phi_{j''}^{(\mu)}. \quad (12)$$

EI 体系的光学模型势可以定义为:

$$\bar{V}_f = V_{ff} + V_{j''j'}(E - \varepsilon_f - K_2 - V_{j''j''})^{-1} V_{j''j'}. \quad (13)$$

对于 $(e, 2e)$ 反应, 我们最关心的是两个通道, 即初通道和末通道, 因此, 我们可以把 ET 的耦合方程(5)截断成两个通道 $|\mu\rangle$ 和 $|\nu\rangle$, 可得如下方程:

$$\begin{aligned} [E - \varepsilon_{\mu} - K_1 - V_{\mu\mu}] \phi_{\mu} \\ = V_{\mu\nu} \phi_{\nu} + V_{\mu\sigma} \phi_{\sigma}, \quad (\sigma \neq \nu), \end{aligned} \quad (14)$$

$$\begin{aligned} [E - \varepsilon_{\nu} - K_1 - V_{\nu\nu}] \phi_{\nu} \\ = V_{\nu\mu} \phi_{\mu} + V_{\nu\sigma} \phi_{\sigma} \quad (\sigma \neq \mu), \end{aligned} \quad (15)$$

$$\begin{aligned} [E - \varepsilon_{\rho} - K_1 - V_{\rho\rho}] \phi_{\sigma} \\ = V_{\rho\mu} \phi_{\mu} + V_{\rho\nu} \phi_{\nu} \quad (\rho\sigma \neq \mu\nu), \end{aligned} \quad (16)$$

解方程(14)–(16)得:

$$[E - \varepsilon_{\mu} - K_1 - \bar{V}_{\mu\mu}] \phi_{\mu} = \bar{V}_{\mu\nu} \phi_{\nu}, \quad (17a)$$

$$[E - \varepsilon_{\nu} - K_1 - \bar{V}_{\nu\nu}] \phi_{\nu} = \bar{V}_{\nu\mu} \phi_{\mu}, \quad (17b)$$

其中

$$\begin{aligned} \bar{V}_{\mu\nu} &= V_{\mu\nu} + V_{\mu\rho}(E - \varepsilon_{\rho} - K_1 - V_{\rho\rho})^{-1} V_{\rho\nu}; \\ \rho\sigma &\neq \mu\nu, \\ &= \langle\mu| V_1 + \nu' | \nu\rangle + \sum_{\rho\sigma \neq \mu\nu} \langle\mu| V_1 + \nu' | \rho\rangle \\ &\times \left\langle \rho \left| \frac{1}{E - \varepsilon_{\rho} - K_1 - V_1 - \nu'} \right| \sigma \right\rangle \\ &\times \langle \sigma | V_1 + \nu' | \nu\rangle. \end{aligned} \quad (18)$$

在本文中, 我们通过动量空间光学势方法^[16,17]将极化作用考虑到 $(e, 2e)$ 反应过程中来, 根据(17)和(18)式可得基态通道满足的方程如下:

$$\begin{aligned} [E - K - V_{\mu\mu}^{(\pm)} - V_{\nu\nu}^{(\pm)}(E - \varepsilon_{\nu} \\ - K - V_{\nu\nu}^{(\pm)})^{-1} V_{\nu\mu}^{(\pm)}] |\phi_{\mu}^{(\pm)}\rangle = 0, \end{aligned} \quad (19)$$

根据等效局域近似方法, 方程(19)第三项的对角元 $V_{\mu\mu}^{(\pm)}$ 为弹性散射的直接 Coulomb 势和交换 Coulomb 势, 方程(19)第四项为动量空间的复极化势 W ^[16,17]. 它的实部表示的是非弹性通道的虚激发,

也就是极化作用;虚部代表的是非弹性通道的实激发,也就是入射通道电子的吸收.在弱耦合近似条件下,其具体表达式如下:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{q}'\alpha | W | \alpha \mathbf{q} \rangle &= \int d^3 k' \int d^3 k \left(1 - \frac{1}{2} P_r \right) \\ &\times \langle \mathbf{q}'\alpha | \nu | \phi_\alpha^{(-)}(\mathbf{k}_\zeta) \mathbf{k}_\zeta \rangle \\ &\times \frac{1}{E^{(+)} - \frac{1}{2}(k'^2 + k^2)} \\ &\times \langle \mathbf{k}, \phi_\alpha^{(-)}(\mathbf{k}_\zeta) | \nu | \alpha \mathbf{q} \rangle. \end{aligned} \quad (20)$$

\mathbf{k}' 和 \mathbf{k} 分别为碰撞前后两个电子的相对动量, E 为入射电子的能量, P_r 为空间交换算符, ϕ_α 为与 α 正交的Columb波函数, \mathbf{k}_ζ 和 \mathbf{k}_ζ 分别是 \mathbf{k}' 和 \mathbf{k} 中的大向量和小向量.通过利用McCarthy等^[15,16]的耦合通道光学势方法来求解动量空间的矩阵元 $\langle \mathbf{q}'\alpha | W | \alpha \mathbf{q} \rangle$,得到动量空间的复极化势,将 W 转化到坐标空间,取复极化势实部,就可以得到我们所需要的极化势部分.

3. 结果与讨论

本文中,我们计算了共面高非对称条件下Ar原子2p壳层的三重微分散射截面(TDCS).为了便于和实验进行比较,我们将Taouil等^[13]以及Stefani等^[14]采取的动力学参量作为计算条件,两组动力学参量具体数值见表1.

表1 动力学参量

	第一组	第二组
入射电子能量 E_0/eV	8256	5720
出射快电子能量 E_f/eV	8000	5461
出射慢电子能量 E_s/eV	7	10
快电子散射角($^\circ$)	1.5	0.5
动量转移/a. u.	0.5	0.75

入射能量为8256 eV时Ar原子2p壳层的TDCS计算结果如图1所示.虚线为标准DWBA的计算结果,实线为加入光学势修正后Ar(2p)的TDCS,空心三角代表Stefani等^[14]实验结果.由图1可以看出,我们利用MDWBA方法计算的结果比标准DWBA方法得到的结果更接近于实验的事实.这证明在共面高非对称动力学条件下,极化作用在碰撞过程中起着非常重要的作用,非常有必要将其考虑到碰撞过程中来.MDWBA的计算结果给出二次峰的位置在慢速被电离电子的极角 60° 处,反冲峰的位置在慢电子极角的 230° 处,反冲峰与二次峰的

比值大约为1.25:1.而实验的双峰比值为1.4:1, DWBA的计算结果为1:1.从以上结果可以看出, MDWBA计算的双峰的比值与实验符合得更好,也证明了我们的修正是成功的,极化作用在Ar原子2p壳层的碰撞过程中起着重要的作用.

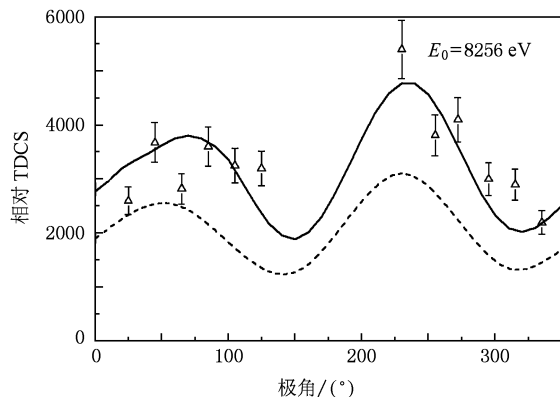


图1 Ar原子2p壳层相对TDCS $E_0 = 8256 \text{ eV}$, $E_s = 7 \text{ eV}$, $\theta_f = 1.5^\circ$; 空心三角为Stefani等^[14]的实验结果,虚线为标准DWBA计算结果,实线为MDWBA计算结果

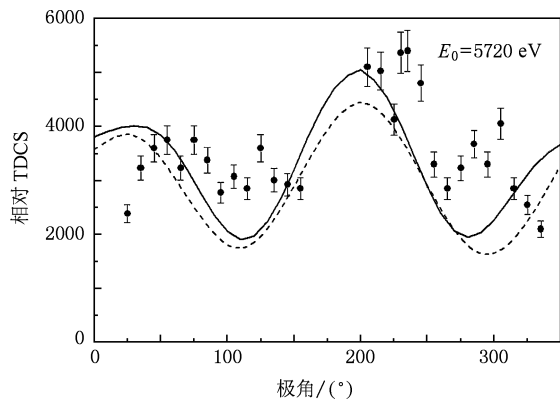


图2 Ar原子2p壳层相对TDCS $E_0 = 5720 \text{ eV}$, $E_s = 10 \text{ eV}$, $\theta_f = 0.5^\circ$; 实心黑点为Taouil等^[13]的实验结果,虚线为标准DWBA计算结果,实线为MDWBA计算结果

图2是对应于入射电子能量为5720 eV时理论与实验结果,图中两条曲线所代表的意义与图1相同,其中实心黑点是Taouil等^[13]的实验值.从图2可以看出,MDWBA的计算结果给出二次峰的位置在慢速被电离电子的极角 45° 处, DWBA二次峰的位置在慢速被电离电子的极角 20° 处,而实验给出的峰值位置在 60° 附近. DWBA和MDWBA反冲峰位置均在慢电子极角的 200° 处,实验测量结果为 230° . MDWBA的反冲峰与二次峰的比值大约是

1.25:1, 实验的双峰比值为 1.4:1, DWBA 的计算结果为 1.1:1. 相对于实验测量结果, 理论计算中二次峰和反冲峰的位置均向小角部分偏移, 反冲峰大约移动了 30° ; DWBA 二次峰偏移 40° 左右, MDWBA 的二次峰偏移 15° 左右. 尽管理论计算结果与实验结果仍存在一定偏差, 但修正后的计算结果所显示的双峰比值和位置均给出了比 DWBA 更令人满意的结果.

我们认为: 在这两种共面高非对称动力学条件下, 由于快电子的能量非常高, 其与靶离子极其束缚电子的相互作用时间非常短, 并且强度较弱; 但对应于内壳层极慢速被电离电子的能量非常低, 极慢速被电离电子的能量与 Ar 原子 2p 壳层电子的电离阈值 249 eV 的比值约为 1:25 和 1:35, 慢电子类似于从靶的内部‘游离’出来, 快速散射电子的散射角又非常小, 所以, 慢电子与靶及其电子的近核短程相互作用非常强, 这就要求我们对短程相互作用有一个准确的描述. 对于入射电子以及快电子, 由于其能量非常高, 它们与靶及其电子的相互作用非常小, 波函数近似于平面波, 畸变效应很小. 但慢电子的能量极低, 所以对于整个反应来说, 畸变效应还是很明显的, 这一点可以通过与平面波 Bohn 近似的计算结果比较得到证实. 所以, 采用 DWBA 方法对于反应三重微分截面的计算还是存在较大优势的. 但 DWBA 的理论结果显示双峰几乎是对称的, 而 MDWBA 理论计算的结果使双峰的比值得到了很大的改善, 显示了一个较大的反冲峰, 与实验结果更为接近. 这说明较大的反冲峰正是来自于极慢速被电离电子与靶及其电子在近核区域的短程相互作用. 其物理机制为一个双重散射过程, 是由间接碰撞电离产生的, 正是由于有核参与了碰撞过

程, 使得内壳层束缚电子被电离为慢电子之后又与更深内壳层的离子实和外壳层束缚电子发生了二次碰撞, 形成了较大的反冲峰.

从上面的讨论可以看出, 虽然 DWBA 方法将畸变效应考虑到碰撞过程中来, 但单纯的考虑畸变效应并不能完全解释实验现象. 因此, 在 DWBA 的基础上, 我们又将通过动量空间光学势方法将极化作用考虑到 $(e, 2e)$ 反应过程中来, 同 DWBA 计算结果相比, MDWBA 对于计算结果有了很大的改善. 尽管修正后的计算结果有所改善, 但理论计算同实验测量之间仍然存在很大的差别, 如: 理论计算不能完全解释实验中二次峰和反冲峰中存在的某些复杂结构, 并且无论是双峰的位置还是比值, 理论与实验还都存在很大的偏差. 一方面, 可能是由于实验条件比较苛刻, 而我们为了处理问题方便, 在计算中对靶采用了单组态的 Hartree-Fock 波函数, 没有将组态相互作用考虑进来; 另一方面, 高一阶的电子-电子相互作用没有被包含在 DWBA 方法之中, 而在 $(e, 2e)$ 实验中, 这些相互作用被证明是非常重要的.

4. 结 论

我们分别利用 DWBA 和 MDWBA 方法计算了两组共面高非对称条件下 Ar 原子 2p 壳层三重微分截面. 计算结果表明, 光学势的引入在一定程度上改善了计算结果. 但理论计算与实验结果还存在一定偏差, 在今后的工作中, 我们将进一步考虑高一阶的电子-电子相互作用, 并准备采用多组态 Hartree-Fock 波函数来描述靶的状态, 以提高同实验事实的符合程度.

[1] Wu X L, Gou B C, Liu Y D 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 0048 (in Chinese) [吴晓丽、苟秉聪、刘义东 2004 物理学报 **53** 0048]
 [2] 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]
 [3] Shen G X, Wang R K, Linghu R F, Yang X D 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 3827 (in Chinese) [沈光先、汪荣凯、令狐荣锋、杨向东 2009 物理学报 **58** 3827]
 [4] Bowring N J, Read F H, Murray A J 1999 *J. Phys. B* **32** L57
 [5] Lahmann B, Wellenstein H F, Cppello C D, Rouault M, Duguet A 1983 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **16** 2219
 [6] Bellm S, Lower J, Bartschat K 2006 *Phys. Rev. Lett.* **96** 223201

[7] Zhang X, Whelan C T, Walters H R J, Allan R J, Bickert P, Hink W, Schonberger S 1992 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **25** 325
 [8] Takahashi M, Miyake Y, Watanabe N, Udagawa Y, Sakai Y, Mukoyama T 2007 *Phys. Rev. Lett.* **98** 013201
 [9] Cavanagh S, Lohmann B 1997 *J. Phys. B* **30** L231
 [10] Haynes M A, Lohmann B 2000 *J. Phys. B* **33** 4711
 [11] Lohmann B, Cavanagh S 1995 *Can. J. Phys.* **74** 743
 [12] Rioual S, Rouvellou B, Pochat A, Rasch J, Walters H R J 1997 *J. Phys. B* **30** L475
 [13] Taouil L, Duguet A, Lahman B, Rasch J, Whelan C T, Walters H R J 1999 *J. Phys. B* **32** L5

- [14] Stefani G L, Avaldi, Lahmam B, Duguet A 1986 *J. Phys. B* **19** 3787 *Phys. Rev. A* **15** 2173
- [15] Stevenson M A, Lohmann B 2006 *Phys. Rev. A* **73** 020701. [17] Mazeve S, McCarthy I E, Zhou Y 1996 *J. Phys. B* **29** 1901
- [16] McCarthy I E, Noble C J, Phillips B A, Tunbull A D 1977 [18] Weigold E, McCarthy I E 1978 *Adv. At. Mol. Phys.* **14** 127

Optical model potential effect in (e,2e) collisions of argon*

Hu Xiao-Ying¹⁾ Zhou Ya-Jun^{2)†}

1) (College of Science, Changchun University, Changchun 130022, China)

2) (Institute of Atomic and Molecular Physics, Jilin University, Changchun 130012, China)

(Received 6 July 2009; revised manuscript received 28 July 2009)

Abstract

We modify the distorted wave Bohn approximation method (DWBA) by introducing optical model potential into the distorted potential of DWBA in this paper. The triple differential cross section of the argon 2p orbital in a coplanar asymmetric geometry has been calculated, calculations using the modified DWBA method show that the optical model potential effects play an important role in the ionization of the argon 2p shell.

Keywords: optical model potential, distorted wave Bohn approximation, triple differential cross section

PACC: 3480B

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10647104).

† Corresponding author. E-mail: xiaoying-hu@tom.com