

# 共面双对称几何条件下电子碰撞 Na 原子单电离的三重微分截面\*

孙世艳 贾祥富<sup>†</sup> 苗向阳 李霞 马晓艳

(山西师范大学物信学院, 山西师范大学大分子科学研究中心, 临汾 041004)

(2011年5月15日收到; 2011年8月22日收到修改稿)

应用参数化的最佳有效势方法, 推广三体库仑波模型 (3C) 及动力学屏蔽的三体库仑波模型 (DS3C 模型) 于 Na 原子, 计算了共面双对称几何条件下, 电子碰撞 Na 原子单电离的三重微分截面 (TDCS), 与最近 Murray 的测量数据、Hitawala 等人的扭曲波近似 (DWBA) 及考虑极化的扭曲波近似 (DWBAP) 的理论结果进行了比较. 发现, DWBA 在低入射能量反映了实验结果, 而 3C 计算在低入射能量时失效, DS3C 计算对其有所改善. 入射能量较高时 DS3C 及 3C 结果的角度分布优于 DWBA, 能够较好地定性描述上述碰撞过程. 说明对于共面双对称几何条件下的电子碰撞多电子原子单电离过程, 出射道三粒子间的动力学关联效应是比较强的.

**关键词:** 动力学屏蔽, 单电离, 三重微分截面

**PACS:** 34.80.Dp

## 1 引言

电子碰撞原子、分子中最基本的 (e, 2e) 实验和理论研究对于原子分子物理 (获取靶粒子的结构信息及内部的相互作用)、天体物理、等离子体物理以及表面物理等领域都有着重要的意义. 随着 (e, 2e) 测量实验技术的发展, 大大刺激着 (e, 2e) 反应的理论研究. 对于电子碰撞简单原子 (氢原子, 类氢原子, 氦原子, 类氦原子等) 的单电离反应, 无论是实验还是理论研究都相对成熟<sup>[1-4]</sup>, 而电子碰撞多电子原子单电离反应过程的研究也有了一定的进展. 实验上, 2003 年, Murray<sup>[5]</sup> 使用 (e, 2e) 技术首次在共面对称几何条件下对低中能电子碰撞基态钙原子 (e, 2e) 过程进行了测量. 2005 年, Murray<sup>[6]</sup> 又得到了一些碱金属和稀土金属原子 Na, Mg, K 和 Ca 在共面双对称几何条件下微分截面的实验数据. 理论上对这些新的实验结果的研究还很有限, 主要是扭曲波玻恩近似<sup>[7,8]</sup> (distorted wave Born approximation, DWBA) 和收敛密

耦方法<sup>[9]</sup> (convergent close-coupling method, CCC). 而 Brauner 等人<sup>[2]</sup> 的三体库仑波 (3C) 模型及 Berakdar 和 Briggs<sup>[10]</sup> 动力学屏蔽的三体库仑波模型 (DS3C) 在处理中低能入射 H, He 原子单电离过程时取得了一定的成功, 受到国内外原子分子物理学工作者的广泛关注. 但是目前还没有 3C 或 DS3C 模型对电子碰撞多电子原子电离的计算结果对这一问题的检验, 本文选择碱金属原子 -Na 作为研究对象, 采用能够描述 Na 原子基态波函数和入射电子与靶的相互作用的参数化的最佳有效势<sup>[11]</sup> (parametrized optimized effective potential, POEP), 将 3C 理论处理方法以及考虑出射道三粒子之间的动力学屏蔽 (DS) 效应后的 3C 模型 (DS3C 模型) 应用到了 Na 原子 3S 轨道单电离问题的研究, 考查这两种模型处理多体问题的能力, 计算了共面双对称几何条件下, 中低能电子入射 Na 原子 3S 轨道单电离的三重微分截面 (TDCS), 并将其所得结果与 Hitawala 等人<sup>[7]</sup> 利用 DWBA 方法及考虑极化效应的 DWBA 理论及 Murray 等

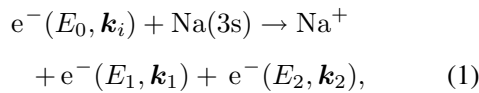
\* 山西省自然科学基金 (批准号: 20051008, 2010011009) 和山西省高校科技研究开发项目 (批准号: 20111011) 资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: jiaxf@sxnu.dns.edu.cn

人<sup>[6]</sup>的测量结果进行了比较,研究了末态三体库仑系统之间的动力学屏蔽(DS)效应对TDCS的影响.发现,在较高能入射时,3C尤其DS3C模型能够较好地解释实验结果,甚至优于DWBA结果.但在低能入射情况下,该理论与实验之间在大散射角存在明显的偏差,其原因应该是电离电子与靶离子(原子实中的束缚电子)复杂相互作用及强关联效应的影响.

## 2 理论介绍

考虑如下单电离过程



设入射电子的动量为 $\mathbf{k}_i$ ,与处于基态的Na原子碰撞后,散射电子和电离电子的动量分别为 $\mathbf{k}_1$ 和 $\mathbf{k}_2$ .这一过程的重微分截面(TDCS)可表为(除特别说明外本文使用原子单位)

$$\text{TDCS} = (2\pi)^4 \frac{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}{\mathbf{k}_i} |T_{fi}|^2, \quad (2)$$

其中跃迁矩阵元可表为

$$T_{fi} = \langle \psi_f^-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | V_i | \psi_i^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle, \quad (3)$$

$\psi_f^-$ ,  $\psi_i^+$ 分别为体系的末、初态波函数, $\mathbf{r}_1$ 和 $\mathbf{r}_2$ 分别为入射电子和束缚电子的位置矢量. $V_i$ 为入射电子和Na原子靶在初通道的相互作用势,即

$$V_i = \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + V_2, \quad (4)$$

$V_2$ 为参数化的最佳有效势<sup>[11]</sup>,代表入射电子与碱金属离子实之间的相互作用,

$$V_2 = -\frac{1}{r_1} \left[ Z - N + 1 + (N-1) \sum_i c_i r_1^{n_i} e^{-b_i r_1} \right], \quad (5)$$

其中 $Z$ 为原子核电子数, $N$ 为原子中的束缚电子数, $n_i$ 是正整数, $c_i, b_i$ 为变分参数,可在文献[11]中找到.从方程(5)可以看出,这种有效势满足短程( $r_1 \rightarrow 0, V_2 \rightarrow -\frac{Z}{r_1}$ )和长程( $r_1 \rightarrow \infty, V_2 \rightarrow -\frac{Z - (N-1)}{r_1}$ )渐近行为.

初态波函数 $\psi_i^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ ,可表为具有动量 $\mathbf{k}_i$ 的平面波与Na原子3S态波函数的乘积,

$$\psi_i^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_1} \phi_i(\mathbf{r}_2). \quad (6)$$

波函数 $\phi_i(\mathbf{r}_2)$ 用Slater-type基函数<sup>[12]</sup>来表示

$$\phi_i(\mathbf{r}_2) = \sum_i a_i N_i(\alpha_i, n_i) \times r_2^{n_i-1} e^{-\alpha_i r_2} Y_{lm}(\Omega_2), \quad (7)$$

其中 $N_i(\alpha_i, n_i) = \frac{(2\alpha_i)^{n_i+(1/2)}}{\sqrt{(2n_i)!}}$ , $n_i$ 为轨道量子数, $a_i, \alpha_i$ 为展开常数因子,在文献[11]中均已给出. $Y_{lm}(\Omega_2)$ 为球谐函数,由于本文中只讨论电子碰撞Na原子基态(3S)的单电离,因此 $Y_{00} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}$ .

对末态,我们把电离后的靶离子实 $\text{Na}^+$ 看作一个点电荷,则出射的两个电子与靶离子实 $\text{Na}^+$ 简化为一个三体问题,考虑三个两体库仑相互作用彼此间的动力学屏蔽效应(DS3C),即第三个粒子的存在而对两体库仑波函数产生的影响,体系的末态波函数 $\psi_f^-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ 可表为

$$\psi_f^-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = N e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2} \prod_{j=1}^2 {}_1F_1[i\alpha_j; 1; -i(k_j r_j + \mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_j)] {}_1F_1[i\alpha_{12}; 1; -i(k_{12} r_{12} + \mathbf{k}_{12} \cdot \mathbf{r}_{12})], \quad (8)$$

$\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \mathbf{k}_{12} = \frac{1}{2}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$ , ${}_1F_1[a, b, c]$ 是合流超几何函数. $N$ 是归一化因子.索末菲参数 $\alpha_j$ 表达式见文献[10].

若不考虑任意两体间的相互作用因第三个粒子的存在而受到的影响(3C),索末菲参数为表为文献[2]中的形式.

## 3 结果与讨论

按习惯约定,相对于入射电子方向,我们选择散射电子的散射角逆时针为正,敲出电子的出射角顺时针为正,因此在共面双对称几何条件下(散射角等于敲出角 $\theta_1 = \theta_2 = \theta$ ,两出射电子等能量分享),散射电子和敲出电子分别位于入射电子方向两侧出射.按照(2)式,我们计算了能量分别为11.1, 15.1, 20.1, 25.1, 35.1, 45.1, 55.1和65.1 eV的入射电子碰撞基态Na原子3S轨道单电离反应的TDCS,结果如图1所示.由于数据范围变化较大,我们选择对数坐标,以便看出TDCS的变化细节.为了便于比较,图中还给出了Hitawala等人<sup>[7]</sup>的DWBA结果,考虑极化的DWBA理论结果及Murray<sup>[6]</sup>的测量结果.为了研究三体动力学关联或屏蔽效应,

我们也给出了 3C 的计算结果. 相对实验数据和理论计算结果均在  $\theta = 45^\circ$  处作了归一化处理.

从图可以看出实验结果随入射能量的演化趋势, 低能入射时有一宽度大约  $90^\circ$  的宽峰 (binary peak), 在散射角大于  $90^\circ$  时, 有一不太明显的很难

称之为峰的弱峰 (recoil peak)(见图 1(a)—(d)). 当入射能量增大时宽峰逐渐变窄, 弱峰向小角度方向移动变得相对平坦而无结构 (见图 1(e)—(h)). 除了 3C 在低能入射情况下, DS3C, DWBA 及 DWBAP 结果均在不同程度上反映了这些定性质.

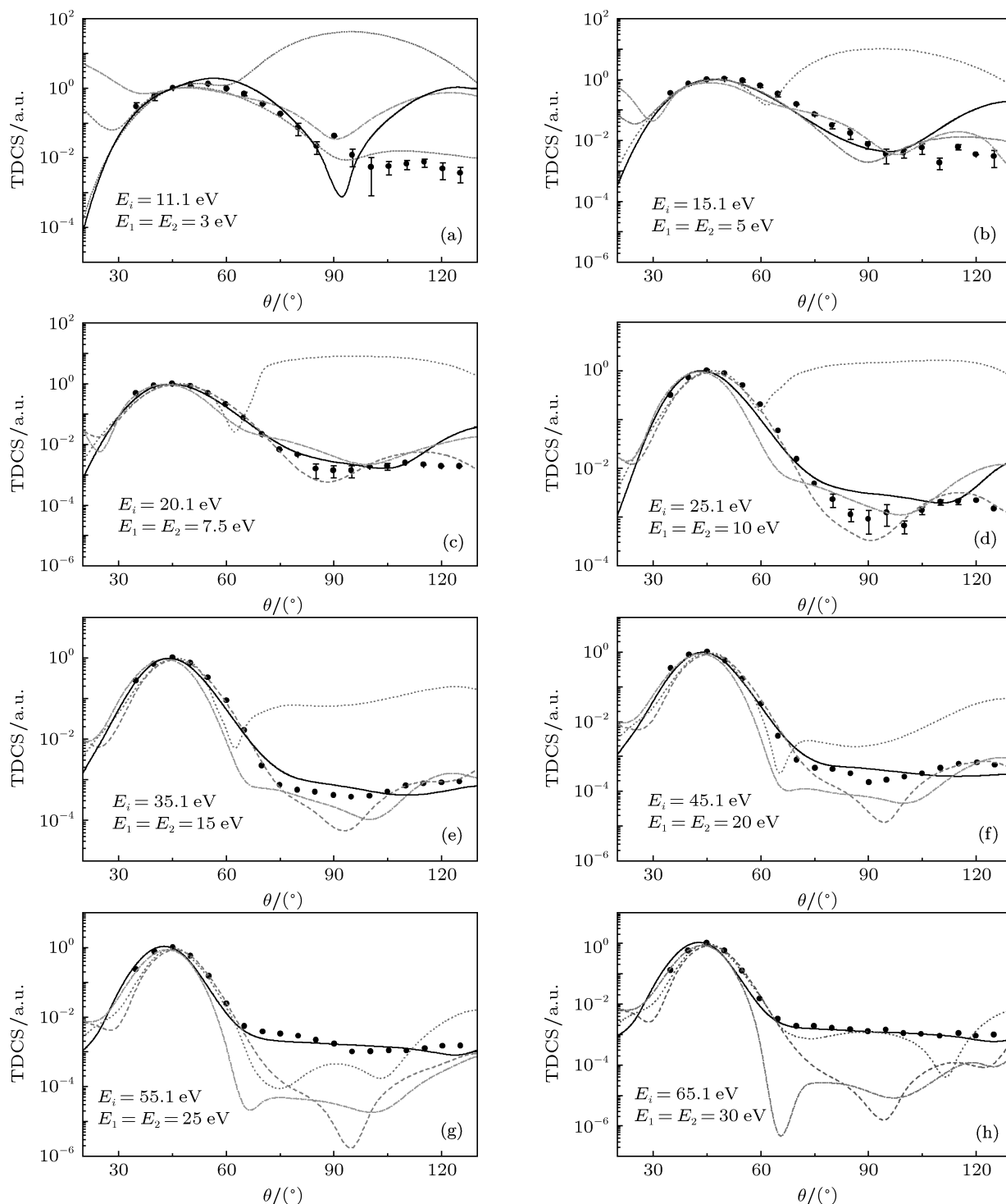


图 1 共面双对称几何条件下, 能量分别为 (a) 11.1 eV, (b) 15.1 eV, (c) 20.1 eV, (d) 25.1 eV, (e) 35.1 eV, (f) 45.1 eV, (g) 55.1 eV 和 (h) 65.1 eV 的电子碰撞 Na 原子单电离的 TDCS (实线为 DS3C 结果; 点线为 3C 结果; 虚线为 Hitawala 等人的 DWBA 计算结果 [7]; 点划线为 DWBAP 结果 [7]; 带误差棒的黑点为 Murray 等人的实验数据 [6])

仔细地比较各种理论与实验结果,可以看出不同理论处理本文问题的能力. 低能入射时(图 1(a)—(d)), DWBA 和 DWBAP 理论与实验结果符合得较好,但在小角方向上, DWBA 的变化趋势是散射角逐渐减小时, TDCS 迅速增大. 实际上,在这种双对称几何条件下,按照量子理论等能量的两个电子不可能同时出射在向前方向. 随着入射能的增加(图 1(e)—(h)), DWBA 结果不仅低估了出射角约等于  $90^\circ$  的散射截面,而且在后散射区,实验上给出的截面变得平坦, DWBA 结果仍呈现三峰结构,严重偏离了实验结果,考虑极化势效应的 DWBAP 结果也没能改善与实验的符合程度. 这意味着 DWBA 对问题的处理还需要进一步考虑高阶效应.

从图 1(a)—(f) 中可以看出,对于较低的入射能, 3C 模型在出射角约  $45^\circ$  时给出了正确 binary 峰位置,但在散射角大于  $60^\circ$  时过高地给出了截面的相对大小, recoil 峰甚至高于 binary 峰,与实验结果严重偏离. 其原因应该是 3C 波函数不能正确反映出射电子与剩余靶离子之间较强的动力学关联及相互作用. 因而,在较低入射能量情况下 3C 模型失效. 然而,随着入射能量的增加,从图 1(e)—(h) 中可以看出,尽管在后散射方向也出现了不正确的峰结构,但这种情况还是随着入射能量的增加得到不断改善(尤其是当入射能量达到  $65.1\text{ eV}$  时),甚至优于 DWBA 结果. 表明出射电子与剩余靶离子之间的动力学关联及相互作用不断减弱,所以 3C 模型更适合于高能碰撞.

对我们的 DS3C 结果,从图可以看出,散射角趋于零时,不像 DWBA, TDCS 趋于零. 在整个能量范围大大改善了 3C 结果,更加提高了与实验数据的符合程度,不仅很好描述了  $45^\circ$  散射角处的 binary 峰,而且在较高入射能量时,大散射角处的 TDCS 几乎与实验结果一致,并优于 DWBA. 不足的是在低入射能量情况下偏离实验结果,出现了较强的后散射峰. 可能的原因是:电子低能碰撞 Na 电离时,出射电子与剩余靶离子(原子实)之间存在一定的

动力学关联、多体相互作用、极化或电离电子与束缚电子的交换效应等,正确处理这些效应,目前仍然是理论工作者的一个艰巨任务.

回顾 3C 模型在求解 (e, 2e) 反应中末态三体系统波函数的 Schrödinger 方程时,仅考虑了两个两体库仑子系统间的相互作用,而没有考虑任意两体间的相互作用因第三个粒子的存在而受到的影响. 当入射粒子能量比较低时,末态三体间的动力学屏蔽(也就是出射电子间的动量关联效应或三体相互作用)十分明显. 而 DS3C 波函数对 3C 波函数的修正正好在一定程度上反映了末态波函数中的这种效应,本质上说,它描述了由于第三个粒子的存在而对两体库仑波函数产生的影响,从而表示了三个两体库仑相互作用彼此间的动力学屏蔽. DS3C 比 3C 更好地描述了实验结果,正是基于 3C 和 DS3C 的这种区别,表明对于共面双对称几何条件下的电子碰撞 Na 原子单电离过程,出射道三粒子间的动力学关联效应是比较强的.

## 4 结论

对于共面双对称几何条件下的电子碰撞 Na 原子 3S 轨道单电离过程, DS3C 模型计算结果改善了 3C 结果在低能入射时出现的失效情形,整体上与实验符合得很好,在中高能入射的情况下, DS3C 理论结果与实验结果的符合程度也优于 3C 和 DWBA 结果,原因是 DS3C 理论对刻画三个两体之间库仑相互作用的索末菲参量进行了修正,考虑了出射道三粒子之间的动力学屏蔽效应,即第三个粒子的存在对两体库仑波函数产生的影响.

虽然 DS3C 模型计算结果整体上与实验符合得较好,但与实验仍存在一些偏差,能量较低时, DS3C 模型给出的 recoil 峰高于实验结果且向大角方向偏移. 造成这些不足可能的原因是出射电子与剩余靶离子(原子实)之间存在多体相互作用、极化或电离电子与束缚电子的交换效应等共同作用的结果.

- [1] Pochat A, Zhang X, Whelan C T, Walters H R 1993 *Phys. Rev. A* **47** R3483
- [2] Brauner M, Briggs J S, Klar H 1989 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **22** 2265
- [3] Bray I, Stelbivics A T 1992 *Phys. Rev. A* **46** 6995
- [4] Van Wyngaarden W L, Walters H R 1986 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **19** 929
- [5] Murray A J, vejanovic D C 2003 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **36** 4875
- [6] Murray A J 2005 *Phys. Rev. A* **72** 1
- [7] Hitawala U, Purohit G, Sud K K 2008 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **41** 035205
- [8] Srivastava M K, Chauhan R K, Srivastava R 2006 *Phys. Rev. A* **74** 064701
- [9] Bray I, Fursa D V, Stelbivics A T 2008 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **41** 215203
- [10] Berakdar J, Briggs J S 1994 *Phys. Rev. Lett.* **24** 72
- [11] Sarsa A, Galvez F J, Buendia E 2004 *At. Data Nucl. Data Tables* **88** 163
- [12] Sahoo S, Das R, Sil N S, Mukherjee S C, Roy K 2000 *Phys. Rev. A* **62** 022716

# Triply differential cross-sections for single ionization of sodium by electron impact in doubly symmetric geometry\*

Sun Shi-Yan Jia Xiang-Fu<sup>†</sup> Miao Xiang-Yang Li Xia Ma Xiao-Yan

(Centre for research of Molecule Science, School of Physics and Information Engineering, Shanxi Normal University, Linfen 041004, China)

(Received 15 May 2011; revised manuscript received 22 August 2011)

## Abstract

Dynamically screened three-Coulomb-wave model (DS3C) is used to study the single ionization of the 3*S* orbital of sodium by electron impact. Triply differential cross-sections (TDCSs) are calculated in doubly symmetric geometry at excess energies of 6, 10, 15, 20, 30, 40, 50 and 60 eV using a parameterized optimized effective potential. Comparisons are made between recently experimental data and theoretical predictions of the three-Coulomb wave function (3C) approach and distorted-wave Born approximation (DWBA). The angular distribution of the present TDCS is found to qualitatively reproduce the reported experimental data. It is shown that dynamically screened effects are important in this geometry.

**Keywords:** dynamically screening effects, single ionization, triply differential cross section

**PACS:** 34.80.Dp

\* Project supported by the Natural Science Foundation of Shanxi Province (Grant Nos. 20051008, 2010011009), and the Technology Program of Shanxi Provincial Education Department (Grant No. 20111011).

<sup>†</sup> E-mail: jiaxf@sxnu.dns.edu.cn