

电子碰撞 Ne 和类 Ne 离子电离的三重微分截面理论研究

周丽霞 张燕 燕友果

Theoretical studies of triple differential cross sections for electron impact ionization with neon and neon-like ions

Zhou Li-Xia Zhang Yan Yan You-Guo

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, **66**, 203401 (2017) DOI: 10.7498/aps.66.203401

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.203401>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2017/V66/I20>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

高能脉冲 C^{6+} 离子束激发 Ni 靶的 K 壳层 X 射线

K-shell X-ray emission from high energy pulsed C^{6+} ion beam impacting on Ni target

物理学报.2017, 66(14): 143401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.143401>

电子垂直入射电离氦原子碰撞机理的理论研究

A theoretical study on collision mechanisms for low energy electron impact ionization of helium in the perpendicular geometry

物理学报.2017, 66(7): 073401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.66.073401>

Cd^{+} 离子 $5s^2S_{1/2} \rightarrow 5p^2P_{3/2}$ 电子碰撞激发截面和退激辐射光子极化度的理论研究

Theoretical study on electron-impact excitation cross section and polarization for $5s^2S_{1/2} \rightarrow 5p^2P_{3/2}$ of Cd

物理学报.2015, 64(23): 233401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.233401>

共面双对称条件下电子碰撞 Ar 原子单电离的一阶扭曲波 Born 近似

First-order distorted wave Born approximation for single ionization of Ar by electron impact in a coplanar doubly symmetric geometry

物理学报.2014, 63(15): 153401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.153401>

共面不对称条件下低能电子碰撞电离 Ar(3p) 的三重微分截面

Triple differential cross section for the ionization of Ar(3p) by low-energy electron impact in the coplanar asymmetric geometry

物理学报.2013, 62(18): 183401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.183401>

电子碰撞Ne和类Ne离子电离的三重微分截面理论研究*

周丽霞[†] 张燕 燕友果

(中国石油大学(华东)理学院, 青岛 266580)

(2017年4月28日收到; 2017年7月13日收到修改稿)

采用扭曲波玻恩近似理论计算了共面对称几何条件下类Ne离子2p轨道电子在不同出射电子能量下的(e, 2e)反应三重微分截面, 出射电子能量分别为3, 5, 7.5, 10, 15, 20, 30和50 eV. 计算结果表明, 随着出射电子能量的增大和核电荷数Z的增大, 三重微分截面的幅度逐渐减小. 除Ne以外, 对其他离子, 在出射电子角度为150°附近出现了一个新的结构, 对比不同出射电子能量时的(e, 2e)反应三重微分截面, 发现这个结构的幅度随着出射电子的能量先增大后减小, 文中用一种两次两体碰撞过程对这些现象进行了解释.

关键词: (e, 2e) 反应, 扭曲波玻恩近似, 三重微分截面, 两次两体碰撞

PACS: 34.80.Dp, 34.50.Fa

DOI: 10.7498/aps.66.203401

1 引言

电子碰撞原子分子的单次电离过程即(e, 2e)反应是电子与原子分子碰撞最基本的过程之一. 实验上通过符合测量被电离电子和散射电子获得(e, 2e)反应的三重微分截面(TDCS), 这一过程满足能量守恒和动量守恒, 所以通过研究不同几何条件下的TDCS可获得(e, 2e)反应中的各种动力学和靶粒子结构的重要信息. (e, 2e)反应的TDCS的实验数据能够为研究气体放电及天体的准确物理模型提供重要依据, 也能够为理论工作者提供电子和靶粒子碰撞的机理以及碰撞过程中各粒子之间的相互作用的重要信息.

早期(e, 2e)反应的实验研究主要集中在简单的原子如H和He, 对共面对称几何条件、共面不对称几何条件、不共面对称几何条件等各种几何条件下的H和He原子的(e, 2e)反应进行了大量研究^[1-5], 这些实验结果为理论方法的发展提供了重要的数据, 理论上发展出了Brauner-Briggs-Klar方

法^[1,2]、扭曲波玻恩近似理论方法(DWBA)^[3]、收敛密耦合理论(CCC方法)等^[4,5], 这些理论方法的计算结果能够很好地与实验结果相符合. 近期对(e, 2e)反应的实验研究开始转向更复杂的靶粒子, 如Ne, Ar, Kr, Xe, Na, Mg, Ca, K等^[6-11], 这些实验结果对理论方法提出了新的考验, 特别是在低能电子入射的情况下, 理论计算与实验结果存在较大差异, 研究发现在考虑后碰撞相互作用和极化效应后, 理论计算结果能更好地与实验结果相符合. 在对Xe原子的研究中, Panajotovic等^[9]和Ren等^[10]分别研究了Xe原子5p轨道和4d轨道的精细结构的(e, 2e)反应TDCS, 并与DWBA理论计算进行了比较. Panajotovic等^[9]发现在反应过程中出射电子与靶原子轨道电子之间的自旋交换扭曲波效应非常明显. Ren等^[10]测量了不同入射电子能量下4d_{5/2}与4d_{3/2}的TDCS, 发现4d_{5/2}与4d_{3/2}的TDCS比率依赖于p电子动量, 这一结果说明反应过程中Xe原子4d轨道的相对论效应十分明显.

除了这些较复杂的靶粒子外, 离子靶的(e, 2e)

* 中央高校基本科研业务费(批准号:15CX05059A)资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: zhoulx@upc.edu.cn

反应也是一个研究的热点方向,但由于离子靶源密度太低,电子碰撞电离实验难以开展,因此相关理论研究具有重要意义,相关理论研究包括类H离子和若干金属离子(e, 2e)反应的TDCS^[12-15]. Khajuria等^[13]和Chen等^[14]发现碱金属离子(e, 2e)反应TDCS的binary峰在某些条件下会分裂为两个,他们用p电子动量空间密度分布解释了碱金属离子binary峰的分裂. 在我们以往的工作中,研究了共面不对称几何条件下电子碰撞类Ne离子(Ne, Na⁺, Mg²⁺, Al³⁺和Si⁴⁺) 2s轨道^[16]和共面对称几何条件下Ag⁺的4p, 4s轨道的(e, 2e)反应三重微分截面^[17],均发现了一些新结构,并用电子的多次散射对其进行了解释.

本文研究了共面对称几何条件下电子碰撞Ne和类Ne离子2p轨道的(e, 2e)反应,采用DWBA理论,并考虑反应过程中的后碰撞相互作用(PCI),出射电子能量为3, 5, 7.5, 10, 15, 20, 30和50 eV. 本文提出了一种新的两次两体碰撞过程.

2 理 论

能量为 E_0 , 动量为 k_0 的入射电子与靶粒子发生碰撞, 散射电子和被电离电子的能量和动量分别为 E_1, k_1 和 E_2, k_2 . DWBA理论计算给出反应的TDCS为^[18]

$$\frac{d^3\sigma^{DWBA}}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1} = (2\pi)^4 \frac{k_1 k_2}{k_0} \sum_{av} [|f|^2 + |g|^2 - \text{Re}(f^*g)], \quad (1)$$

其中,

$$f = \left\langle \chi^{(-)}(k_1, r_1) \chi^{(-)}(k_2, r_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \chi^{(+)}(k_0, r_0) \psi_{nl} \right\rangle, \quad (2)$$

$$g = \left\langle \chi^{(-)}(k_1, r_2) \chi^{(-)}(k_2, r_1) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \chi^{(+)}(k_0, r_0) \psi_{nl} \right\rangle, \quad (3)$$

\sum_{av} 表示对末态简并态求和及对初态简并态求平均, ψ_{nl} 为靶的 nl 轨道波函数, $\chi^{(+)}$ 是处于靶原子等效局域基态势下的入射电子扭曲波, $\chi^{(-)}$ 是处于末态靶离子等效局域基态势下的两出射电子的扭曲波, $\chi^{(+)}$ 和 $\chi^{(-)}$ 都与 ψ_{nl} 正交.

等效的局域基态势为直接势 V_D 和交换势 V_E

之和. 直接扭曲势 V_D ^[18]为

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

$r_{>}$ 是 r 和 r' 中的较大者, N_{nl} 是轨道 nl 的电子数. 修正的半经典交换势 V_E 为^[19]

$$V_E(r) = 0.5 \left\{ E - V_D(r) + \frac{3}{10} [3\pi^2 \rho(r)]^{2/3} \right\} - 0.5 \left\{ [E - V_D(r) + \frac{3}{10} [3\pi^2 \rho(r)]^{2/3}]^2 + 4\pi \rho(r) \right\}^{1/2}, \quad (5)$$

其中 $\rho(r)$ 为电子密度. 因此等效的局域基态势(扭曲势)为

$$V_{00}(r) = V_D(r) + V_E(r). \quad (6)$$

对(1)式乘以Gamow因子 M_{ee} , 考虑PCI^[20],

$$M_{ee} = \frac{\pi \exp(-\pi/k_3)}{k_3 [1 - \exp(-\pi/k_3)]} \times |{}_1F_1(-iV, 1, -2ik_3 r_{3ave})|^2, \quad (7)$$

$$V = -1/|k_1 - k_2|,$$

$$k_3 = |k_1 - k_2|/2,$$

$$r_{3ave} = \frac{\pi^2}{16\varepsilon} \left(1 + \frac{0.627}{\pi} \sqrt{\varepsilon \ln \varepsilon} \right),$$

$$\varepsilon = (k_1^2 + k_2^2)/2. \quad (8)$$

则(e, 2e)反应的TDCS为

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1} = M_{ee} \frac{d^3\sigma^{DWBA}}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1}. \quad (9)$$

3 结果与讨论

采用扭曲波玻恩近似理论计算了共面对称几何条件下Ne和类Ne离子2p轨道(e, 2e)反应的重微分截面, 如图1所示. 图1(a)—图1(e)分别给出了Ne, Na⁺, Mg²⁺, Al²⁺和Si⁴⁺的(e, 2e)反应的重微分截面, 其2p轨道电离能 E_i 分别为21.6, 47.3, 80.1, 120.0和166.8 eV^[21], 采用的出射电子能量分别为3, 5, 7.5, 10, 15和20 eV.

从图1中可以看出, 对所有靶粒子, 随着出射电子能量的下降, (e, 2e)反应三重微分截面在幅度上逐渐降低. 比较不同靶粒子同一出射能量时的(e, 2e)反应三重微分截面, 发现随着核电荷数 Z 的增大, 三重微分截面的幅度也在逐渐下降. 图1(a)中, 当出射电子能量为20 eV时, Ne原子的2p轨道

(e, 2e) 反应三重微分截面在 $\theta \approx 8^\circ$ 附近出现了一个肩膀, Rioualt 等 [22] 对 Ne 的 2p 和 2s 轨道 (e, 2e) 反应三重微分截面的实验和理论研究中也曾经发现过这个结构, 他们认为由于入射电子进入 Ne 原子作用区域后会引起 Ne 原子的极化, 这导致了弹性散射概率的增加, 因此入射电子与靶粒子发生了一次弹性散射, 然后又与轨道电子碰撞发生 (e, 2e) 反应形成了 $\theta \approx 8^\circ$ 附近的结构. 但这个结构并未

在其他类 Ne 离子的 (e, 2e) 反应三重微分截面中出现, 如图 1(a)—图 1(e) 所示, 可见对其他类 Ne 离子, 这种两次两体碰撞过程是不易发生的.

除 Ne 原子外, 对于其他离子的 (e, 2e) 反应三重微分截面, 另一个结构出现在 $\theta \approx 150^\circ$, 如图 1(b)—图 1(e) 所示, 在出射电子能量小于 7.5 eV 时, 这个结构尚未出现; 但当出射电子能量大于等于 7.5 eV 时, 这个结构开始显现, 并且随着能量的

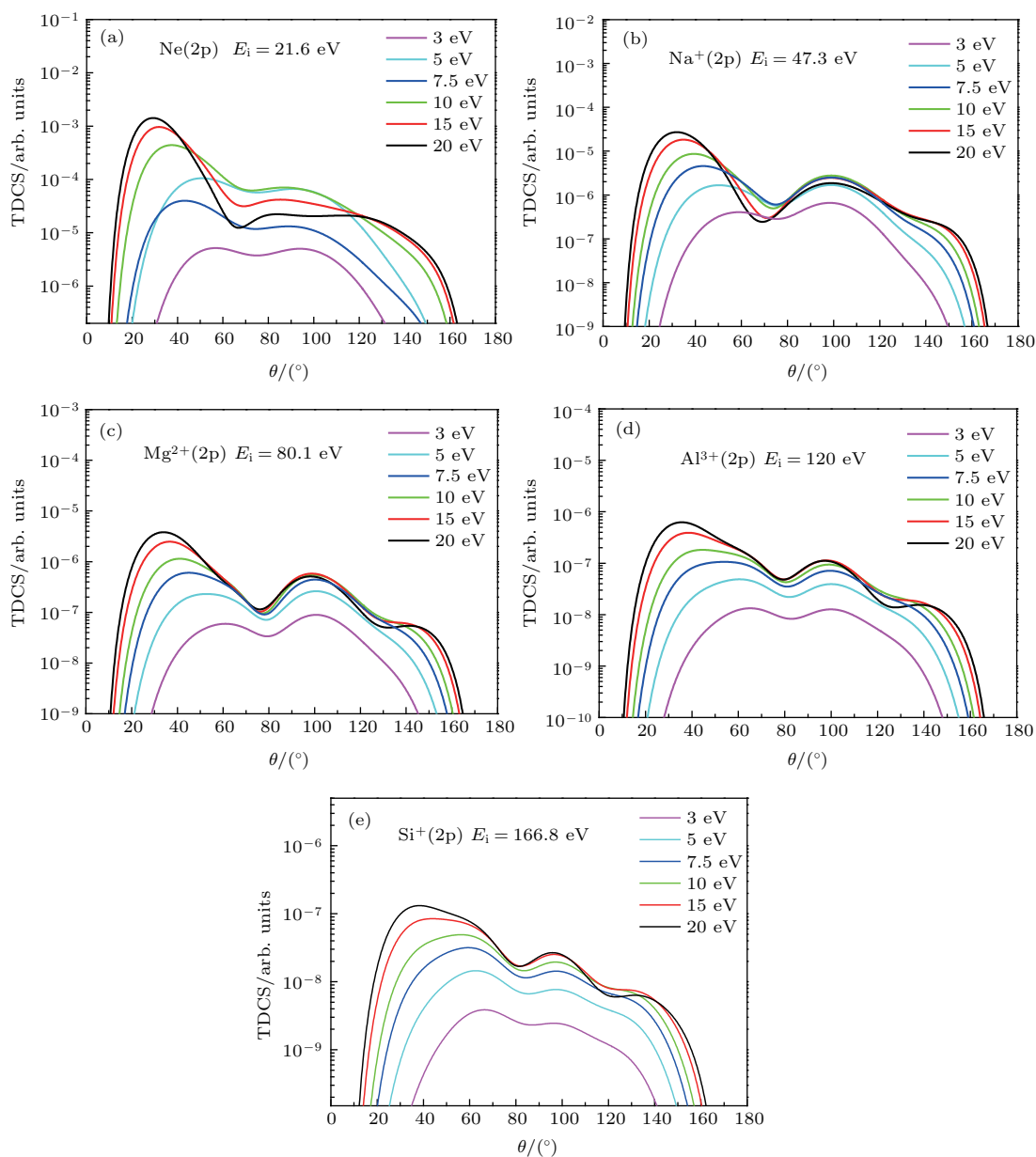


图 1 (网刊彩色) 采用扭曲波玻恩近似理论计算得到的共面对称几何条件下 Ne 和类 Ne 离子 2p 轨道的 (e, 2e) 反应三重微分截面 图中各曲线表示出射电子能量分别为 3, 5, 7.5, 10, 15 和 20 eV 时的 (e, 2e) 反应三重微分截面, E_i 表示轨道电子电离能

Fig. 1. (color online) DWBA theory calculation of (e, 2e) triple differential cross sections of Ne and neon ions 2 p orbital under coplanar symmetric geometry. The lines in figures present (e, 2e) triple differential cross sections with outgoing electron energy of 3, 5, 7.5, 10, 15 and 20 eV, respectively. E_i represents ionization energy of orbital electron.

增加这个结构变得越来越明显, 从一个小肩膀逐渐改变形成峰. 这个结构的出现, 我们认为是发生了一种新的两次两体碰撞过程, 该过程如图 2 所示, 入射电子先与靶粒子中的轨道电子发生 (e, 2e) 反应将轨道电子敲出, 同时自己被散射, 两个电子沿着与入射电子方向对称的方向出射, 然后两个出射电子被靶离子弹性散射, 沿着后向散射方向 θ 出射.

为了证实我们对 $\theta \approx 150^\circ$ 处新结构的解释, 将本文中的计算结果与文献 [23] 对电子碰撞 Ne 原子

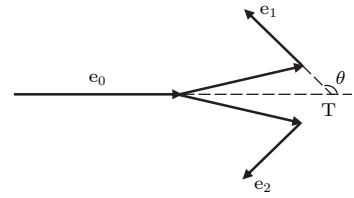


图 2 一种新的两次两体碰撞过程, 入射电子与轨道电子碰撞发生 (e, 2e) 反应, 然后出射电子又与靶粒子发生弹性散射
Fig. 2. A schematic of new kind of double-binary collision process, the incident electron impacts with orbital electron, then outgoing electrons are elastically scattered by the target ion.

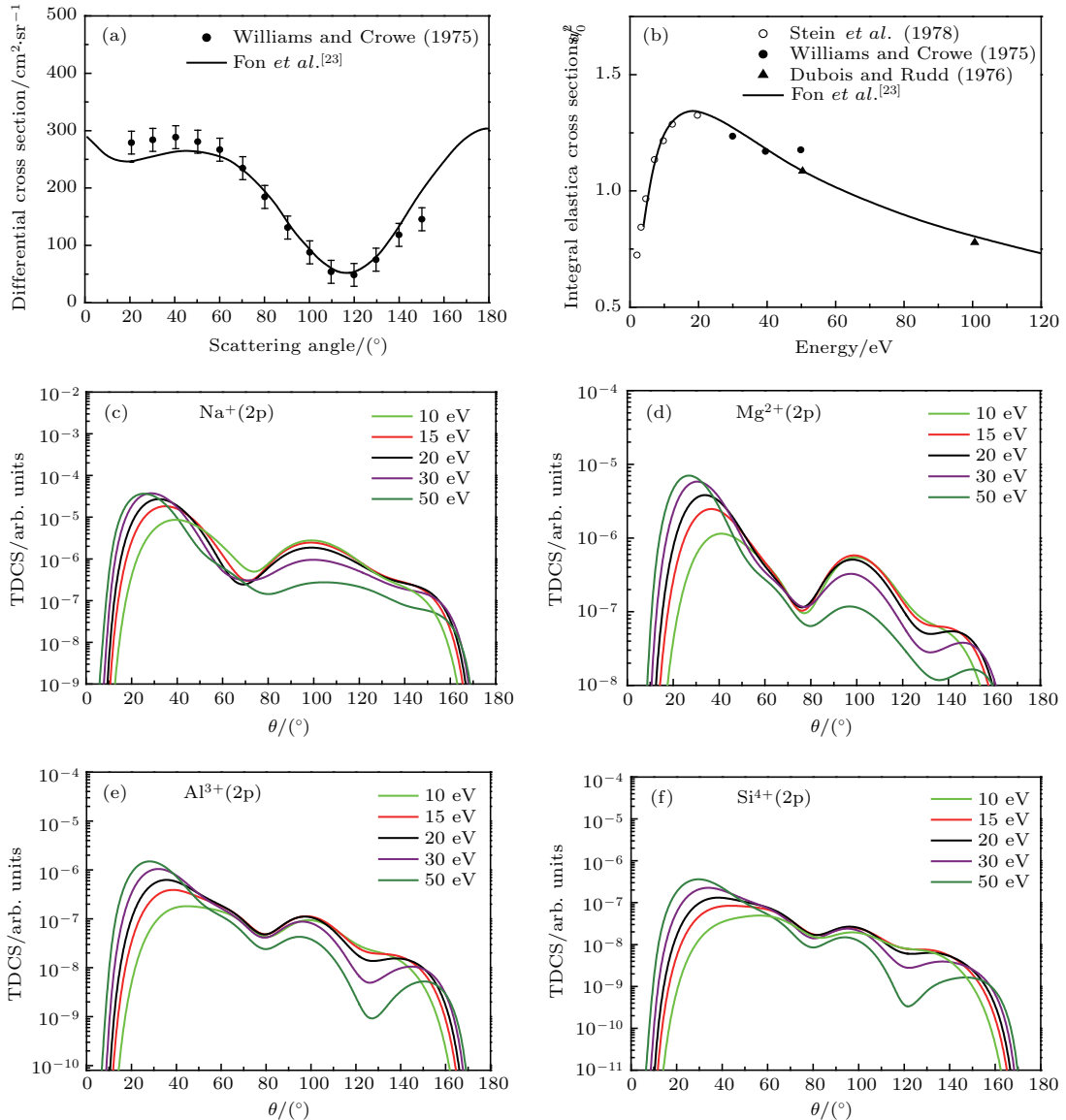


图 3 (网刊彩色) (a) 不同出射角度时电子与 Ne 原子弹性碰撞的散射截面, 电子能量为 20 eV [23]; (b) 不同能量的电子与 Ne 原子弹性碰撞的散射截面 [23]; (c)–(f) 电子碰撞 $\text{Na}^+(2p)$, $\text{Mg}^{2+}(2p)$, $\text{Al}^{3+}(2p)$ 和 $\text{Si}^{4+}(2p)$ (e, 2e) 反应三重微分截面, 出射电子能量分别为 10, 15, 20, 30 和 50 eV

Fig. 3. (color online) (a) Elastic-scattering differential cross sections of the Ne atoms at different outgoing electron angles, the electron energy is 20 eV [23]; (b) elastic-scattering differential cross sections of the Ne atoms at different injecting electron energy [23]; (c)–(f) (e, 2e) triple differential cross sections of $\text{Na}^+(2p)$, $\text{Mg}^{2+}(2p)$, $\text{Al}^{3+}(2p)$ and $\text{Si}^{4+}(2p)$, the outgoing electron energy are 10, 15, 20, 30 and 50 eV, respectively.

弹性散射的实验和理论结果进行了对比分析. 图3(a)是Williams等和Fon等^[23]的实验和理论结果,他们研究了入射电子能量在20 eV时,不同散射角度下电子碰撞Ne的弹性散射截面.从图中可以看出,弹性散射截面随着散射角度的增加先减小后增大,在散射角度为120°—150°范围内,实验和理论结果均表明弹性散射截面随着出射角度的增加单调上升.这与我们的计算结果相符,类Ne离子(e, 2e)反应的TDCS均在出射角度 $\theta \approx 5^\circ$ 出现了新的结构,即在 $\theta \approx 5^\circ$ 处敲出电子和散射电子与靶离子发生弹性散射的概率较大.文献^[23]中还给出了前人对不同能量的入射电子与Ne原子发生弹性散射的实验和理论研究结果,如图3(b)所示.从图中可以看出,在电子能量小于20 eV时,弹性散射截面随着电子能量的增加而急剧增大,当电子能量大于20 eV时,弹性散射截面开始减小.因此我们又计算了Na⁺, Mg²⁺, Al³⁺和Si⁴⁺的2p轨道在出射电子能量为30 eV和50 eV时(e, 2e)反应三重微分截面,与出射电子能量为10, 15和20 eV时的(e, 2e)反应三重微分截面进行比较,如图3(c)—图3(f),均发现当出射电子能量从10 eV增大到20 eV时, $\theta \approx 150^\circ$ 处的峰幅度也在增大,当电子能量从20 eV增大到50 eV时, $\theta \approx 150^\circ$ 处的峰幅度开始减小了,这与图3(b)中前人的实验和理论结果相符合.以上分析均表明我们对 $\theta \approx 5^\circ$ 的新结构的解释是合理的.

4 结 论

我们采用扭曲波玻恩近似理论计算了共面对称几何条件下类Ne离子2p轨道电子在不同出射电子能量下的(e, 2e)反应三重微分截面.发现随着出射电子能量的增大和核电荷数Z的增大,(e, 2e)反应三重微分截面在逐渐减小.另外,除Ne以外的其他离子,在出射电子角度 $\theta \approx 5^\circ$ 处出现了一个新的结构,并且这个结构的幅度随着出射电子的能量先增大后减小,我们用一种两次两体碰撞过程对这些现象进行了解释,即入射电子先与轨道电子发生(e, 2e)反应,出射电子再与靶离子发生弹性散射,

我们的解释能够很好地与前人电子碰撞Ne原子弹性散射的实验和理论结果相符合.

参考文献

- [1] Brauner M, Briggs J S, Klar H 1989 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **22** 2265
- [2] Chen Z J, Ni Z X, Shi Q C, Xu K Z 1998 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **31** 3803
- [3] Roder J, Rasch J, Jung K, Whelan Colm T, Ehrhardt H, Allan R J, Walters H R J 1996 *Phys. Rev. A* **53** 225
- [4] Bray I, Fursa D V, Kheifets A, Stelbovics A T 2002 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **35** R117
- [5] Bray I, Fursa D V, Roder J, Ehrhardt H 1997 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **30** L101
- [6] Naja A, Staicu Casagrande E M, Lahmam-Bennani A, Nekkab M, Mezdari F, Joulakian B, Chuluunbaatar O, Madison D H J 2007 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **40** 3775
- [7] Stevenson M A, Lohmann B 2008 *Phys. Rev. A* **77** 032708
- [8] Haynes M A, Lohmann B, Prideaux A, Madison D H 2003 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **36** 811
- [9] Panajotovic R, Lower J, Weigold E 2006 *Phys. Rev. A* **73** 052701
- [10] Ren X G, Ning C G, Deng J K, Su G L, Zhang S F, Huang Y R 2006 *Phys. Rev. A* **73** 042714
- [11] Murray A J 2005 *Phys. Rev. A* **72** 062711
- [12] Shi Q C, Chen Z J, Chen J, Xu K Z 1997 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **30** 2859
- [13] Khajuria Y, Chen L Q, Chen X J, Xu K Z 2002 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **35** 93
- [14] Chen L Q, Chen X J, Wu X J, Shan X, Xu K Z 2005 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **38** 1371
- [15] Khajuria Y, Tripathi D N 1999 *Phys. Rev. A* **59** 1197
- [16] Zhou L X, Yan Y G 2014 *Chin. Phys. B* **23** 053402
- [17] Zhou L X, Yan Y G 2012 *Chin. Phys. B* **21** 093401
- [18] McCarthy I E 1995 *Aust. J. Phys.* **48** 1
- [19] Gianturco F A, Scialla S 1987 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **20** 3171
- [20] Ward S J, Macek J H 1994 *Phys. Rev. A* **49** 1049
- [21] Yin Y J 1988 *Physical Chemistry Concise Manuals* (Beijing: Higher Education Press) p364 (in Chinese) [印永嘉 1988 物理化学简明手册 (北京: 高等教育出版社) 第364页]
- [22] Rioualt S, Pochat A, Gelebart F, Allan R J, Whelan C T, Walters H R J L 1995 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **28** 5317
- [23] Fon W C, Berrington K A 1981 *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **14** 323

Theoretical studies of triple differential cross sections for electron impact ionization with neon and neon-like ions*

Zhou Li-Xia[†] Zhang Yan Yan You-Guo

(College of Physics Science and Technology, China University of Petroleum, Qingdao 266580, China)

(Received 28 April 2017; revised manuscript received 13 July 2017)

Abstract

Electron impact single ionization of atom or molecule, the so-called (e, 2e) reaction, is one of the basic collision processes between electron and atom or molecule. The triple differential cross section (TDCS) of the collision process can provide important data for gas discharge, celestial bodies, and electron-target interaction.

A large number of experimental and theoretical studies of (e, 2e) reactions on atom targets have been carried out under different geometric conditions, such as coplanar symmetric geometry, coplanar asymmetric geometry, non-coplanar symmetric geometry, etc. However, few experimental researches of (e, 2e) reaction on ion target have been reported due to the low target source density. The difference in TDCS between atomic target and ionic target can provide more information about the (e, 2e) reaction. Thus the relevant researches on ionic targets are of significance.

In this paper, adopting distorted-wave Born approximation (DWBA), the TDCSs of 2p orbital for Ne and neon-like ions are calculated at different outgoing electron energies (3, 5, 7.5, 10, 15, 20, 30, and 50 eV) under the condition of coplanar symmetric geometry. The results indicate that the TDCSs decrease with the increase of outgoing electron energy and nuclear charge number Z . Except Ne, the TDCSs of other ions present a new structure at an outgoing electron angle of about 150° . The intensity of the new structure increases with the increase of the outgoing electron energy in a region of 10–20 eV, while it decreases with the increase of the outgoing electron energy in a region of 20–50 eV.

We propose a kind of double-binary collision process to rationalize the new structure. The incident electron ionizes the target atom and the following two outgoing electrons exit in the directions symmetric with respect to the incident electron direction. Then these two outgoing electrons are elastically scattered by the target ions and emitted in the backward directions. In order to confirm this explanation, we compare our calculation results with the previously reported experimental and theoretical results of elastic scattering between electron and Ne. Previous research results show that the elastic scattering cross section has a large intensity at a scattering angle of $\sim 150^\circ$, and it reaches the largest intensity at an outgoing electron energy of 20 eV. These structural features are consistent with our calculated results, implying that our proposed process is reasonable.

Keywords: (e, 2e) reaction, distorted wave Born approximation, triple differential cross sections, double-binary collision

PACS: 34.80.Dp, 34.50.Fa

DOI: 10.7498/aps.66.203401

* Project supported by the Fundamental Research Funds for the Central University, China (Grant No. 15CX05059A).

[†] Corresponding author. E-mail: zhoulx@upc.edu.cn