

Li^+ 低能 ($\text{e}, 2\text{e}$) 反应角分布

贾祥富 杨 威

(山西师范大学物理系, 信息网络中心, 临汾 041004)

(1998 年 3 月 23 日收到)

利用修正的 BBK 理论, 考虑入射道的库仑相互作用及出射电子的交换对称性, 在共面-等能分享-垂直角度碰撞几何中, 分别计算了能量为 79.6, 105.6, 227.6 和 375.6 eV 的入射电子碰撞 $\text{Li}^+(1s^2)(\text{e}, 2\text{e})$ 反应三重微分截面 (TDCS). 结果表明: 在接近阈能的碰撞中, 两出射电子连线平行于入射电子方向时, TDCS 最大; 两出射电子连线垂直于入射电子方向时, TDCS 最小; 入射电子能量达 5 倍的电离阈能时, 主要为单次双体碰撞, 而且入射道库仑场对决定低能碰撞的 TDCS 起着重要作用.

PACC: 3480D; 3450H

1 引 言

早在 80 年代初期, 离子的 ($\text{e}, 2\text{e}$) 反应问题就已成为许多原子物理学家感兴趣的课题之一^[1]. 尽管至今尚无这方面实验结果的报道, 但随着近年来原子 ($\text{e}, 2\text{e}$) 反应实验与理论的日趋成熟, 离子 ($\text{e}, 2\text{e}$) 反应理论研究最近又有了较大进展. Biswas 和 Sinha 基于他们成功的理论模型^[2]提供了电子碰撞类氢、类氢离子 ($\text{e}, 2\text{e}$) 反应的三重微分截面 (简称 TD-CS)^[3]. 由于这种模型对碰撞几何的特殊要求, 使其进一步应用受到了很大限制. 为了处理任意几何条件下的碰撞问题, 本文第一作者和其合作者们已将 BBK 模型^[4]推广到了电子离子碰撞的新体系^[5], 并得到了一些新的理论结果^[6-9]. 本文在这些工作的基础上来研究电子碰撞 $\text{Li}^+(1s^2)(\text{e}, 2\text{e})$ 反应问题. 应该指出的是, 离子 ($\text{e}, 2\text{e}$) 反应与原子 ($\text{e}, 2\text{e}$) 反应的主要区别是作为靶的离子在入射道增加了对入射电子的长程库仑力的作用, 文献[5, 8, 9]计算结果都表明初道库仑场对 TDCS 的主要影响是集中在低入射能量范围. 所以区别于文献[3, 9], 我们的计算仅限于慢 (与玻尔速度相比) 入射电子, 考虑入射道电子与离子靶的库仑相互作用及出射道的交换效应, 出射电子在共面等能分配、固定相对角度 (即两出射电子互相垂直) 几何条件下, 计算了电子碰撞 $\text{Li}^+(1s^2)(\text{e}, 2\text{e})$ 反应 TDCS, 并对结果进行了一些必要的讨论. 除特别说明外, 本文使用原子单位 (a. u.).

2 理论模型

电子碰撞 $\text{Li}^+(1s^2)(\text{e}, 2\text{e})$ 反应 TDCS 定义为

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_2} = (2\pi)^4 \frac{k_1 k_2}{k_i} |T_{fi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_i)|^2, \quad (1)$$

其中 $\mathbf{k}_1$, $\mathbf{k}_2$ 和 $\mathbf{k}_i$ 分别为散射电子、电离电子和入射电子的动量, Ω_1 和 Ω_2 为散射电子和电离电子的立体角, E_2 为电离电子的出射能量. $(e, 2e)$ 反应跃迁矩阵元定义为

$$T_{fi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_i) = \langle \Psi_f^-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) | -\frac{(z_i - 1)}{r_1} + \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{13}} | \Psi_i^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) \rangle, \quad (2)$$

其中 $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$, $r_{13} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|$, $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$ 和 $\mathbf{r}_3$ 分别为入射电子、散射电子和 $\text{Li}^{2+}(1s)$ 的束缚电子关于靶核的位置矢量, z_i 为靶核电荷数, Ψ_i^+ 和 Ψ_f^- 分别为入射道和出射道波函数. 如考虑出射电子的交换效应, 可引入交换算符

$$P_{12} T_{fi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_i) = T_{fi}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_i). \quad (3)$$

单态和三重态跃迁矩阵元分别为

$$T_s = (1 + P_{12}) T_{fi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_i), \quad T_t = (1 - P_{12}) T_{fi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_i), \quad (4)$$

从而, 考虑交换效应后的 TDCS 为

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_2} = (2\pi)^4 \frac{k_1 k_2}{k_i} \left(\frac{1}{4} |T_s|^2 + \frac{3}{4} |T_t|^2 \right), \quad (5)$$

因为入射电子和靶离子存在长程库仑相互作用, 所以初态波函数 Ψ_i^+ 为入射电子的库仑波函数

$$F_c(\mathbf{k}_i, \mathbf{r}_1) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\pi\alpha_i/2} \Gamma(1 - i\alpha_i) e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_1} {}_1F_1[i\alpha_i; 1; i(\mathbf{k}_i \mathbf{r}_1 - \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_1)] \quad (6)$$

和类氢离子 $\text{Li}^+(1s^2)$ 基态波函数 $\phi_i(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = (\lambda^3/\pi) \exp[-\lambda(r_2 + r_3)]$ 的乘积

$$\Psi_i^+(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = F_c(\mathbf{k}_i, \mathbf{r}_1) \phi_i(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3), \quad (7)$$

其中 $\alpha_i = (z_i - 2)/k_i$, $\lambda = (z_i - 1) + 0.6875$, ${}_1F_1$ 为合流超几何函数, Γ 为伽马函数.

末态是由两个出射电子与 $\text{Li}^{2+}(1s)$ 组成, 波函数 $\Psi_f^-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ 由类氢离子 $\text{Li}^{2+}(1s)$ 波函数 $\phi_{\text{ion}}(\mathbf{r}_3) = (z_f^3/\pi)^{1/2} \exp(-z_f r_3)$, ($z_f = 3$), 和描述两出射电子的 BBK 波函数 $\Psi_{\text{BBK}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ 组成, 可表为

$$\Psi_f^-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_{\text{BBK}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \phi_{\text{ion}}(\mathbf{r}_3) + \Psi_{\text{BBK}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3) \phi_{\text{ion}}(\mathbf{r}_2)], \quad (8)$$

其中 BBK 波函数为^[4]

$$\Psi_{\text{BBK}}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (2\pi)^{-3} e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2} C(\alpha_1, \mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1) C(\alpha_2, \mathbf{k}_2, \mathbf{r}_2) C(\alpha_{12}, \mathbf{k}_{12}, \mathbf{r}_{12}). \quad (9)$$

库仑部分波函数定义为

$$C(\alpha, \mathbf{k}, \mathbf{r}) = e^{\frac{1}{2}\pi\alpha} \Gamma(1 + i\alpha) {}_1F_1[-i\alpha; 1; -i(kr + \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})], \quad (10)$$

其中 $\mathbf{k}_{12} = (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)/2$, α_i ($i = 1, 2, 12$) 为 Sommerfeld 参数. 根据 Berakdar 理论^[11], 一般情况下 α_i 为较复杂的空间坐标的函数, 在共面等能几何条件下 (即 $k_1 = k_2 = k$) 可表为如下简单形式^[10]:

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \frac{4z - \sin\theta}{4k}; \quad \alpha_{12} = \frac{1 - \sin^2\theta}{2k\sin\theta}, \quad (11)$$

其中 $\theta = (\cos^{-1} \hat{\mathbf{k}}_1 \cdot \hat{\mathbf{k}}_2)/2$, 变化从 $\pi/2$ (两电子沿相反方向出射) 到零 (两电子沿同一方向出射), 当 $\theta = \pi/2$ 时, $\alpha_{12} = 0$, 核处在两出射的电子连线之间, 电子完全处在一有效电荷为

$z=1/4$ 的核库仑场中. 当 θ 从 $\pi/2$ 减小到零时, 核逐渐偏离电子间的连线, 电子之间的相互作用逐渐增强, 在 $\theta=0$ 时达到最大. 从本质上而言, (11) 式不仅反映了末态连续电子间的动量关联效应, 而且描述了第三个粒子存在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(DS). 文献[10, 12, 13]的结果已经证明了这种考虑的正确性. 所以此时的 BBK 我们称为 DSBK. 将(7)和(8)式代入(5)式, 经过复杂的数学推导后, 可简化为一个关于实参数空间的三维积分^[5].

3 结果和讨论

为了对理论结果进行具体分析, 基于以上公式, 我们对电子碰撞 $\text{Li}^+(1s^2)(e, 2e)$ 反应做了一些典型的数值计算. 计算过程中, 我们选择共面, 出射电子等能分享, 垂直碰撞几何, 即 $\mathbf{k}_1$, $\mathbf{k}_2$ 和 $\mathbf{k}_i$ 在同一平面, $k_1 = k_2 = k$, 及 $\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{k}_2 = 0$. 取靶核为极点, $\mathbf{k}_i$ 为极轴方向, 按习惯约定, 所有夹角以次为参考, 散射电子的散射角 θ_1 顺时针为正, 敲出电子的出射角 θ_2 逆时针为正. 计算结果如图 1(a)–(d) 所示. 径向方向代表 TDCS, 极角代表敲出电子

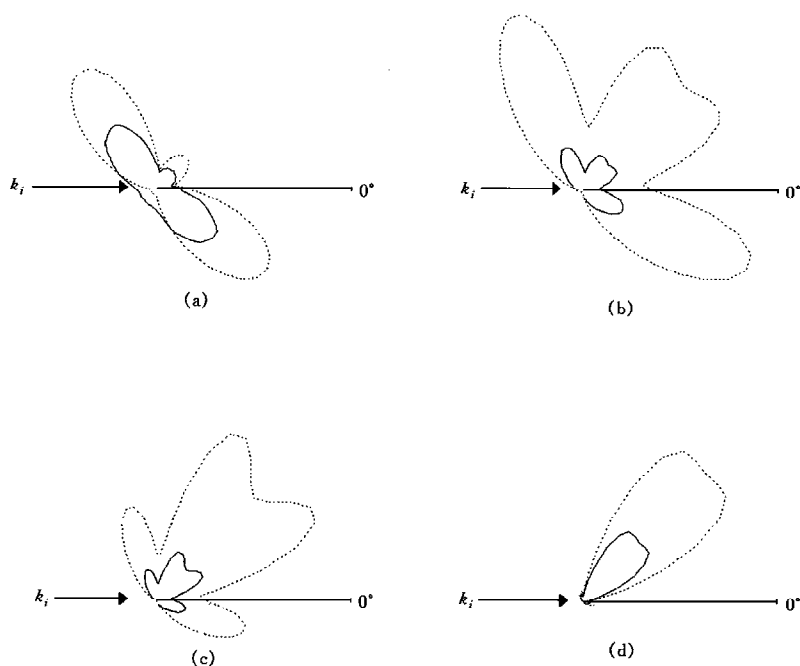


图1 (a)–(d)共面-等能分享-垂直角度几何, 入射能量 E_i 分别为(a)79.6 eV, (b)105.6 eV, (c)227.6 eV, (d)375.6 eV 的电子碰撞 $\text{Li}^+(1s^2)$ 电离 TDCS. 径向为 TDCS, 极角为敲出电子角度 θ_2 , 极轴方向为入射电子方向. 实线为本文理论结果, 点线为入射电子的库仑波用平面波代替的结果

角度 θ_2 . 碰撞能量(注意 Li^+ 的电离阈能为 75.6 eV)从 79.6 eV(两出射电子能量 $E_1 = E_2$

$= 2 \text{ eV}$) 增加到 375.6 eV ($E_1 = E_2 = 150 \text{ eV}$). 结果表明, TDCS 关于角度 $\theta = 45^\circ$ 是对称的, 角分布随入射能量的提高由互为反向的双叶极大值过度为 45° 轴上的单叶极大值。

Berakdar 和 Briggs 曾经指出了导致 $(e, 2e)$ 反应结构的机制^[10], 主要有下面四种效应: (i) 单次双体碰撞 (single-binary collision, SB), 即入射电子直接和靶粒子中束缚电子碰撞, 电离后沿动量转移 $\mathbf{q} = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_1$ 方向出射. (ii) 二次双体碰撞 (double-binary collision, DB), 即入射电子和束缚电子碰撞后散射出去, 但束缚电子并未被直接敲出, 而是被靶核的多次弹性散射后沿 $\mathbf{q}$ 的反方向出射. 对低能碰撞, 两种效应在现在的碰撞几何中都有较好的体现. (iii) 当两出射电子相对速度很小时, 库仑态密度 (CDS) 因子导致 TDCS 为零. 对本文固定的入射能量和碰撞几何, CDS 为常量. (iv) 跃迁矩阵元 T_{fi} 中各散射振幅之间的干涉效应导致极小甚至为零的 TDCS. 本文将指出的另一种效应是入射道库仑场在低入射能量区对 TDCS 的重要影响.

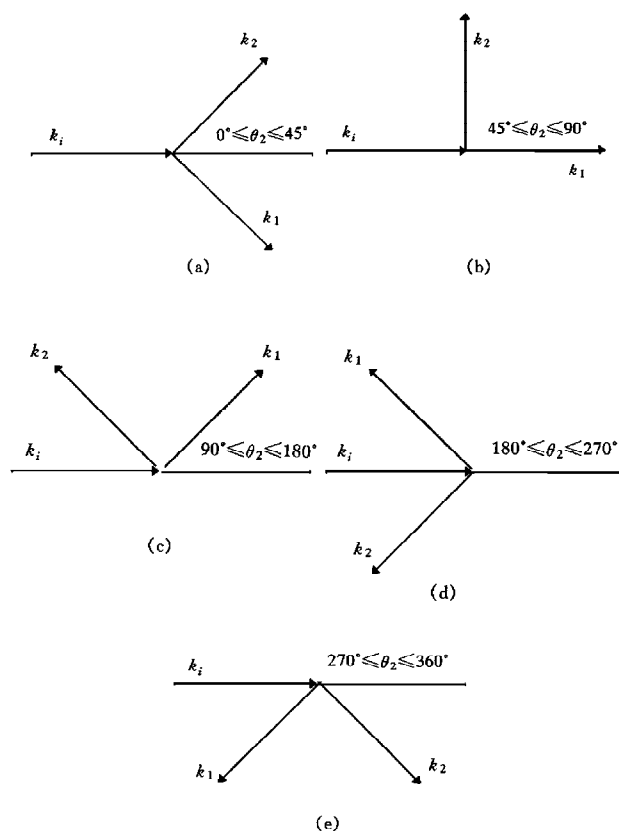


图 2 (a) — (e) 共面-等能分享-垂直角度几何中, 两电子出射方向及有关结构示意图

根据这些效应, 可从理论上解释和分析本文的计算结果, 对接近电离阈能的入射能量 79.6 eV , (如图 1(a) 实线) 在 $\theta_2 > 90^\circ$ 有两个极大值, 近似地位于 135° 和 315° (方向相反). 对应于图 2(c), (e) 所描述的结构. 在 $\theta_2 = 45^\circ$ 有一小峰, 对应于 SB 碰撞, 是图 2(a), (b) 的极限情况. 在 225° 处, 对应于图 2(d) 的结构, 是 DB 碰撞. 随着入射能量的提高, 双叶极大

的夹角不断减小, $\theta_2 = 45^\circ$ 的小峰不断加强. 在入射能量为 375.6 eV 时(图 1(d)), 敲出电子的出射集中在 $\theta = 45^\circ$ 轴附近. 而在大于 90° 的方向几乎没有或很少有电子出射. 说明随着入射能量的增加, 大于 90° 的出射电子几率不断减少, SB 碰撞逐渐加强, 表明入射能量增加时动量转移的一种趋势, 使得电子被限制在向前散射. 因此, 从图 1 和图 2 不难看出, 对接近电离阈能的电子-离子碰撞, 两出射电子的连线与入射电子方向平行时 TDCS 最大, 两出射电子的连线与入射电子方向垂直时 TDCS 最小. 碰撞能量增加到 5 倍的电离阈能时, 主要是 SB 碰撞, 而出射电子间的连线垂直于入射电子方向, TDCS 最大. 角度分布紧靠 45° 左右, 类似于 δ 函数分布, 这实际上是由于束缚电子的初始动量分布随着入射电子能量的增加变得越来越不重要, 电子和电子的碰撞越来越像经典粒子间的碰撞. 这些结论支持文献[8, 12, 14]理论与实验的结果.

实际上, 从碰撞过程中靶核的反冲动量 k_{ion} 与散射角的依赖关系也可说明图 1 的碰撞过程. 假设最初靶核是静止的, 由动量守恒关系: $k_{\text{ion}} = k_i - k_1 - k_2$ 知, 它是角度 θ_2 的函数. 从反冲动量谱图 3 可看出: k_{ion} 在 $\theta_2 = \theta_{12}/2 = 45^\circ$ 处对各入射能量都表现为极小的反冲动量(或动量吸收), 从其对称性知电子出射绕其对称分布, 因碰撞过程此时受核的影响最小, 根据效应(i), 这应归于 SB 碰撞. 入射能量越低, 靶核的动量吸收就越大, 核对 SB 碰撞的影响就大. 但值得注意的是, 即使入射能量接近电离阈能(79.6 eV)时, SB 碰撞也能被看见(图 1(a)). 入射能量越高, 靶核的动量吸收越小, SB 碰撞就越典型(图 1(e)). 而在 $\theta_2 = \theta_{12}/2 = 225^\circ$ 处, 对各入射能量都有一范围较宽的极大反冲动量(或动量吸收), 即出射电子绕其对称向后散射. 与前述相反, 碰撞过程在此方向受核的影响最大, 根据效应(ii), 这应归于 DB 碰撞. 形成这个较宽峰的一个简单原因是, 入射电子在和靶电子经历一次 binary 碰撞后, 通过任意角度和靶粒子相互作用而散射出去.

应该注意到的是, 如果忽略入射道库仑场的影响, 即入射电子用平面波表示时, 给出的截面尽管与现在的结果有相同的角度分布(如图 1(a)–(d)中点线所示), 大小确有较大的差别, 主要表现在对 SB 碰撞的影响较大, 而对 DB 碰撞的影响较小. 这主要是在低能碰撞时, 有较小的出射电子速度, 虽然 Briggs^[15] 确认了在 DB 碰撞过程中核的影响, 而 SB 碰撞在这种情况下有点“用词不当”^[16]. 因为敲出电子和靶核在初末态中都有较强的相互作用, 电子与电子在这种背景下碰撞, 很显然, 考虑和不考虑初道的这种相互作用自然对其有较大的影响. 另一方面, 从(6)式可看出, 库仑场影响 TDCS 大小, 主要是入射库仑波的归一化因子

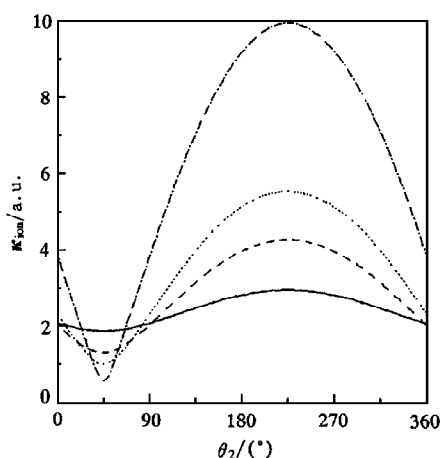


图 3 在图 1 各入射能量条件下 $\text{Li}^{2+}(1s)$ 反冲动量的角度分布. 纵坐标为核的反冲动量 k_{ion} , 横坐标为敲出电子角度 θ_2 . 实线、虚线、点线和点划线分别对应于入射能量为 79.6 , 105.6 , 227.6 和 375.6 eV 的 k_{ion} .

$$\left| \exp\left(\frac{\pi}{2k_i}\right) \Gamma\left(1 - \frac{i}{k_i}\right) \right|^2 = \frac{2\pi}{k_i} \frac{1}{1 - \exp\left(\frac{-2\pi}{k_i}\right)},$$

可以看出入射能量越高,库仑场对 TDCS 的影响就越小.当入射能量足够高时,它趋于 1,说明入射电子用平面波表示就是一好的近似.然而,入射能量越低(大于靶离子的电离能),这个因子就越大,表明库仑场对 TDCS 的影响就越大.这与文献[3, 5, 8, 9]的结论是一致的.所以我们认为,在这种情况下,入射电子用平面波代替库仑波给出的 TDCS 是不合理的.

本文的数值计算是在山西师范大学信息网络中心计算机上完成的,作者衷心感谢该中心全体同志给予本工作的支持.同时,本文第一作者对周作霄教授和中国科学技术大学陈澈、徐克尊教授给予的指导与关心深表谢意.

- [1] A. Roy, K. Roy, N. C. Sil, *J. Phys.*, **B15**(1982), 1289; *Phys. Lett.*, **95A**(1983), 63.
- [2] C. Sinha, S. Tripathi, *J. Phys.*, **B24**(1991), 3659.
- [3] R. Biswas, C. Sinha, *Phys. Rev.*, **A50**(1994), 354; *J. Phys.*, **B28**(1995), 1311.
- [4] M. Brauner, J. S. Briggs, H. Klar, *J. Phys.*, **B22**(1989), 2265.
- [5] X. Jia, Q. Shi, Z. Chen *et al.*, *Phys. Rev.*, **A55**(1997), 1971.
- [6] Z. Chen, Q. Shi *et al.*, *Phys. Rev.*, **A56**(1997), R2514.
- [7] Q. Shi, Z. Chen *et al.*, *J. Phys.*, **B30**(1997), 2859.
- [8] Jia Xiang-fu, Shi Qi-cun, Chen Zhang-jin *et al.*, *Acta Physica Sinica*, **47**(1998), 412(in Chinese).
- [9] Q. Shi, Z. Chen, J. Chen *et al.*, *J. At. Mol. Phys.*, **14**(1997), 539(in Chinese).
- [10] J. Berakdar, J. S. Briggs, *Phys. Rev. Lett.*, **72**(1994), 3799.
- [11] J. Berakdar, *Phys. Rev.*, **A53**(1996), 2314.
- [12] J. Berakdar, J. S. Briggs, *J. Phys.*, **B29**(1996), 2289.
- [13] J. Berakdar, J. S. Briggs, *J. Phys.*, **B27**(1994), 4271.
- [14] M. Brauner, J. S. Briggs *et al.*, *J. Phys.*, **B24**(1991), 657.
- [15] J. Berakdar, J. S. Briggs, H. Klar, *J. Phys.*, **B26**(1993), 285.
- [16] M. Brauner, J. S. Briggs, *J. Phys.*, **B26**(1993), 2451.

ANGULAR DISTRIBUTIONS IN THE LOW-ENERGY $(e, 2e)$ REACTION OF Li^+

JIA XIANG-FU YANG WEI

(*Department of Physics, Network Information Center, Shanxi Normal University, Linfen 041004*)

(Received 23 March 1998)

ABSTRACT

Based on the BBK theory, triple differential cross sections (TDCS) have been calculated for ionization of $\text{Li}^+(1s^2)$ by electron impact. A coplanar, equal-energy, fixed-relative angle kinematics is chosen and the particular case where the scattered and ionized electrons emerge perpendicular to each other is emphasized. The incoming electron state is considered by a Coulomb wave from the long-range attraction between the incident electron and the screened ionic nucleus or approximated by a plane wave. It is shown that the maximum probability for emission near threshold is a configuration in which the interelectronic vector is aligned along the beam direction and the minimum probability when this vector is perpendicular to the beam, and that the initial channel Coulomb field plays a major role in determining the TDCS at near threshold energy.

PACC: 3480D; 3450H