

低能电子碰撞 $\text{He}^+(\text{e}, 2\text{e})$ 反应绝对 三重微分截面的理论研究^{*}

贾祥富

(山西师范大学物理系, 临汾 041004)

施启存 陈长进 陈 激 徐克尊

(中国科学技术大学近代物理系, 合肥 230026)

(1997 年 6 月 9 日收到; 1997 年 9 月 8 日收到修改稿)

利用 Berakdar 和 Briggs 对 BBK 波函数 Sommerfeld 参数的修正结果, 即考虑第三个粒子存在对两个粒子间相互作用的影响, 考虑了入射道的库仑相互作用及出射粒子的交换对称性, 计算了在共面等能分配几何情况下低能电子碰撞 $\text{He}^+(\text{e}, 2\text{e})$ 反应绝对三重微分截面. 结果表明, 入射道库仑场对较低的入射能量及小的碰撞参数的三重微分截面影响较大.

PACC: 3480D

1 引 言

在原子分子碰撞问题中, 电子与原子($\text{e}, 2\text{e}$)反应的研究已有很长时间, 取得了很大成就, 形成了一个崭新的前沿学科. 然而, 电子与离子($\text{e}, 2\text{e}$)反应无论是实验还是理论研究都很少. 因其在天体物理、等离子体物理、X 波段激光、核聚变等高新技术领域中有很强的应用背景, 已引起许多理论物理学家和实验物理学家的极大关注^[1]. 在这一领域, 最近的十几年研究较多的是电子碰撞离子电离和激发的总截面或能量微分截面^[1-4]. 我们知道, 最能具体反映这一过程动力学行为的是三重微分截面(TDCS). 尽管目前还未见这方面实验研究的报告, 现代测量技术与手段的不断提高使进行这种反应的实验研究已不是很遥远的事了. 在目前实验数据尚不完备的情况下, 更进一步增加了对这种反应进行理论研究的重要性. 在已有的理论工作^[5, 6]中, 文献[5]的电子碰撞类氢离子电离的末态波函数并未考虑电子间的关联效应, 也不满足三体库仑渐近边界条件. 而文献[6]的工作基于成功的理论^[7]模型, 提供了电子碰撞类氢离子($\text{e}, 2\text{e}$)反应较为可靠的 TDCS. 但由于仅适用于高度不对称几何的情况, 使对低能对称能量分享几何的应用受到限制. 电子碰撞 He^+ 的电离本质上是一个至今尚无法精确求解的连续态的三体问题, Brauner 等^[8]提出的具有对称形式的波函数(BBK 波函数)来描述这个三体库仑连续态, 是一较好的理论模型. 它有较为令人满意的特征, 其重要性已由 Berakdar 等^[9]详细阐述. 此模型的特点

^{*} 国家自然科学基金资助的课题.

是,在同一理论框架内处理所有末态粒子,详细地考虑了散射电子和敲出电子之间的关联效应,而且满足适当的三体库仑渐近边界条件(这些都是预言可靠电离截面的最重要的因素).对中高能以上的入射能量计算结果和实验结果符合得很好^[8].另一方面,由于渐近行为的能量无关性,致使低能情况也可给出有意义的结果或较好的定性说明^[10].尤其是最近 Berakdar 和 Briggs 对 BBK 波函数引入考虑第三个粒子存在对两个粒子之间相互作用强度影响的 Sommerfeld 参数后^[11],使得修正后的 BBK 波函数可以在入射粒子接近电离阈值时氢原子和氦原子在 $(e, 2e)$ 反应时的计算结果与实验结果符合得相当好.有效地改善了 BBK 波函数在低能时的不足.在我们前期工作^[12]的基础上,本文利用文献[11]提供的方法,考虑了入射道的库仑相互作用,计算了在共面等能分配几何情况下低能(电离阈值以上)电子碰撞 $\text{He}^+(e, 2e)$ 反应 TDCS. 因为现在的工作是处理低能碰撞,出射电子的交换效应也作了适当的考虑.

2 理论介绍

我们选择 He^+ 核为坐标系的原点,并设入射电子和 He^+ 的束缚电子的坐标分别为 $\mathbf{r}_1$ 和 $\mathbf{r}_2$. $(e, 2e)$ 反应体系 Hamiltonian 为(本文均使用原子单位)

$$H = H_0 - \frac{Z_t}{r_1} - \frac{Z_t}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} = H_i + V_i, \quad (1)$$

式中

$$H_i = H_0 - \frac{Z_t}{r_2} - \frac{Z_t - 1}{r_1}, \quad (2)$$

V_i 表示入射电子与靶离子的相互作用势

$$V_i = \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_1}, \quad (3)$$

$Z_t (=2)$ 为靶电荷数,在方程(1)中的总动能算符 $H_0 = -\frac{1}{2}\nabla_1^2 - \frac{1}{2}\nabla_2^2$, 电子间的相对坐标 $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. 初道波函数 Ψ_i 满足下述方程

$$\left[H_0 - \frac{Z_t}{r_2} - \frac{Z_t - 1}{r_1} \right] \Psi_i = E_0 \Psi_i. \quad (4)$$

其解 Ψ_i 可表示为类氢离子基态波函数 $\phi_1(\mathbf{r}_2)$ 与入射电子的库仑波函数 $F_C(\mathbf{k}_i, \mathbf{r}_1)$ 的乘积

$$\Psi_i = F_C(\mathbf{k}_i, \mathbf{r}_1) \phi_1(\mathbf{r}_2), \quad (5)$$

式中

$$\phi_1(\mathbf{r}_2) = \left(\frac{z_t^3}{\pi} \right)^{1/2} e^{-z_t r_2}, \quad (6)$$

其中 z 是 He^+ 基态参数,入射电子用库仑波来描述是因为入射电子和屏蔽的靶离子存在长程库仑相互作用.其形式可表示为

$$F_C(\mathbf{k}_i, \mathbf{r}_1) = (2\pi)^{-3/2} e^{\pi\alpha_i/2} \Gamma(1 - i\alpha_i) e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_1} {}_1F_1[i\alpha_i; 1; i(\mathbf{k}_i \mathbf{r}_1 - \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_1)]. \quad (7)$$

能量本征值

$$E_0 = \frac{1}{2} k_i^2 + \varepsilon_i = E_i + \varepsilon_i. \quad (8)$$

(7), (8) 式中 $\alpha_i = (z_i - 1)/k_i$, ε_i 是离子的束缚态能量, $\mathbf{k}_i$ 是入射电子动量, $\Gamma(\cdots)$ 是 Γ 函数, ${}_1F_1[\cdots]$ 是合流超几何函数.

末态波函数 Ψ_f^- 是三体问题薛定谔方程满足入射波边界条件的解. 本文使用的 BBK 近似波函数^[8]为

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

其中 $\mathbf{k}_{12} = \frac{1}{2}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$, 库仑部分波函数定义为

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

$$\alpha_1 = \frac{z}{k_1}, \quad \alpha_2 = \frac{z}{k_2}, \quad \alpha_{12} = -\frac{1}{k_{12}}, \quad (11)$$

其中 $\mathbf{k}_1$ 和 $\mathbf{k}_2$ 分别是散射电子和电离电子的动量, α_i ($i=1, 2, 12$) 为 Sommerfeld 参数. 这个波函数考虑了所有两体的库仑相互作用. 尽管这种近似在中高碰撞能量以上成功地描述了电离电子的角度分布^[8], 但是对低能碰撞给出的 TDCS 结果太小而并不能令人满意^[10]. 根据 Berakdar 和 Briggs 的意见, 如果两体库仑相互作用考虑了由于第三个粒子存在的屏蔽效应后, 则可改变这种情况^[11]. 注意现在研究的情况 $k_1 = k_2 = k$, 即用新的 Sommerfeld 参数来代替 α_i ($i=1, 2, 12$),

$$\beta_1 = \beta_2 = \frac{4z - \sin \theta}{4k}, \quad \beta_{12} = \frac{1 - \sin^2 \theta}{2k \sin \theta}. \quad (12)$$

我们称此时的 BBK 为 DSBBK. 上式中 $\theta = (\arccos \hat{\mathbf{k}}_1 \cdot \hat{\mathbf{k}}_2)/2$, 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, $\beta_{12} = 0$. 核处在两出射的电子连线之间, 电子-电子相互作用完全归结为一有效的电子-核相互作用. 当 θ 从 $\pi/2$ 减至零时, 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, 即未屏蔽的情况. 文献[11]的结果已经证明了这种考虑的正确性.

电子与离子 ($\text{e}, 2\text{e}$) 反应的 TDCS 定义为

$$\frac{d^3 \sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_2} = (2\pi)^4 \frac{k_1 k_2}{k_i} |T_{fi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_i)|^2, \quad (13)$$

其中离子的 ($\text{e}, 2\text{e}$) 反应跃迁矩阵元定义为

$$T_{fi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_i) = \langle \Psi_f^- | V_i | \Psi_i^+ \rangle. \quad (14)$$

此处 Ω_1 和 Ω_2 是散射电子和电离电子的立体角. E_2 是电离电子的出射能量. 如考虑出射电子的交换效应, 可引入交换算符,

$$P_{12} T_{fi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_i) = T_{fi}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_i), \quad (15)$$

单和三重态跃迁矩阵元为

$$T_s = (1 + P_{12}) T_{fi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_i) \quad (16)$$

和

$$T_t = (1 - P_{12}) T_{fi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_i), \quad (17)$$

从而, 考虑交换效应后的 TDCS 为

$$\frac{d^3 \sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_2} = (2\pi)^4 \frac{k_1 k_2}{k_i} \left(\frac{1}{4} |T_s|^2 + \frac{3}{4} |T_t|^2 \right). \quad (18)$$

将(5), (9)式代入(18)式, 进行必要的数学推导后, 可简化为一个关于实参数空间的三维积分^[12]. 最后应注意的是, 由碰撞体系的动量守恒, 靶核的反冲动量

$$\mathbf{k}_{\text{ion}} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, \quad (19)$$

可提供鉴别(e, 2e)过程的有关信息(已假设靶离子最初是静止的). 显然它是散射角度 θ_1 和敲出电子角度 θ_2 的函数.

3 结果及讨论

在对氢原子(e, 2e)反应^[10]进行必要的验证后, 以上述公式为基础, 针对共面对称几何和共面等能分配几何, 在中低能区完成了一些典型的数值计算, 计算过程中各物理量取原子单位, 按习惯约定所有角度以 $\mathbf{k}_0$ 为参考, 散射电子的散射角 θ_1 逆时针为正, 敲出电子的出射角度 θ_2 顺时针为正. 理论计算结果如图 1—图 5 所示.

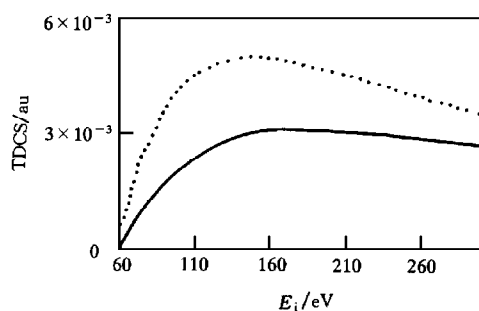


图 1 共面对称 He^+ 电子碰撞电离作为入射能量 E_i 函数的 TDCS $\theta_1 = \theta_2 = 45^\circ$. 实线表示现在的 TDCS, 点线表示入射电子用平面波描述的 TDCS

由图 1 可以看出, 入射粒子用库仑波或平面波对 TDCS 较为敏感, 入射道库仑场对截面的影响主要是对低能散射, 入射能量越低(大于电离能)影响越大. 这一点与文献[12]的结论是一致的.

为了表明类氢氢离子(e, 2e)反应与氢原子(e, 2e)反应的区别, 在图 2—4 中分别给出了入射能量为 108.8(两倍的电离阈能), 68 和 58.4 eV, 相应的出射电子能量对称分配($E_1 = E_2 = 27.2, 6.8$ 和 2.0 eV), 散射角 θ_1 分别固定为 $15^\circ, 30^\circ, 45^\circ$ 和 60° , 而敲出电子角度 θ_2 变化(取相对角度 $\theta_1 + \theta_2$ 为横坐标)的 TDCS. 图 2—图 4 中也包括了入射粒子的

库仑波用平面波代替, 末态仍用 DSBK 波函数表示的 TDCS, 以及入射粒子用库仑波或平面波, 末态用 BBK 波函数表示的 TDCS. 从这些图与文献[10]的图 2、图 3 比较可看出, 类氢氢离子的电离特征与氢原子的电离特征(明显的峰结构)基本相同, TDCS 随动量转移的增加而减小, 但由于散射体系入射道库仑场的影响, 存在一些明显的差别. TDCS 较原子情况大约减小一个数量级. 最近, Berakdar 和 Briggs^[13] 已经指出, 导致这些结构的起源主要是: (1) 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. (2) TDCS 中的峰出自于 binary 碰撞(入射电子和电离电子的碰撞, 峰近似地位于动量转移的方向)或二次 binary 碰撞(即束缚电子首先被入射电子散射, 然后又散射无限多次而离开靶核, 峰近似地位于动量转移相反的方向). (3) 在某些碰撞几何中, 各散射振幅之间的干涉效应导致极小甚至为零的 TDCS. 正如从图 2—图 4 中看到的, 在相对角度 0° 和 360° 附近截面为零, 直接来源于效应(1). 对 108.8 eV 的碰撞能量(对应图 2(a)), 在相对

出射电子角度 $\theta_1 + \theta_2 \simeq 90^\circ$ 时, 有一次级峰出现. 根据文献[10], 它主要来源于入射电子与束缚电子之间的 **binary** 碰撞, 束缚电子的初始动量分布决定了这个峰的分布形状. 对氢原子^[10] $(\text{e}, 2\text{e})$ 反应的实验结果已证明它的存在, 理论上也给予了成功的描述^[11]. 在相对出射电子角度 $\theta_1 + \theta_2 \simeq 210^\circ$ 处有一主峰, 对应于较小的电子-电子排斥作用, 峰的产生可解释为二次 **binary** 碰撞, 随着散射电子散射角度 θ_1 的增加(图 2(b)–(d)), 二次 **binary** 碰撞逐渐减弱, 这意味着大的散射角对应于小的碰撞参数, **binary** 碰撞起主要作用. 随着角度 θ_1 的增加, TDCS 的极小值向相对出射电子角度 $\theta_1 + \theta_2 = 180^\circ$ 移动(出射电子对应于极小的排斥作用), 且 TDCS 趋于零, 表明这样的碰撞过程, 是一个电子间相互作用(**binary**碰撞)不断增强的过程.

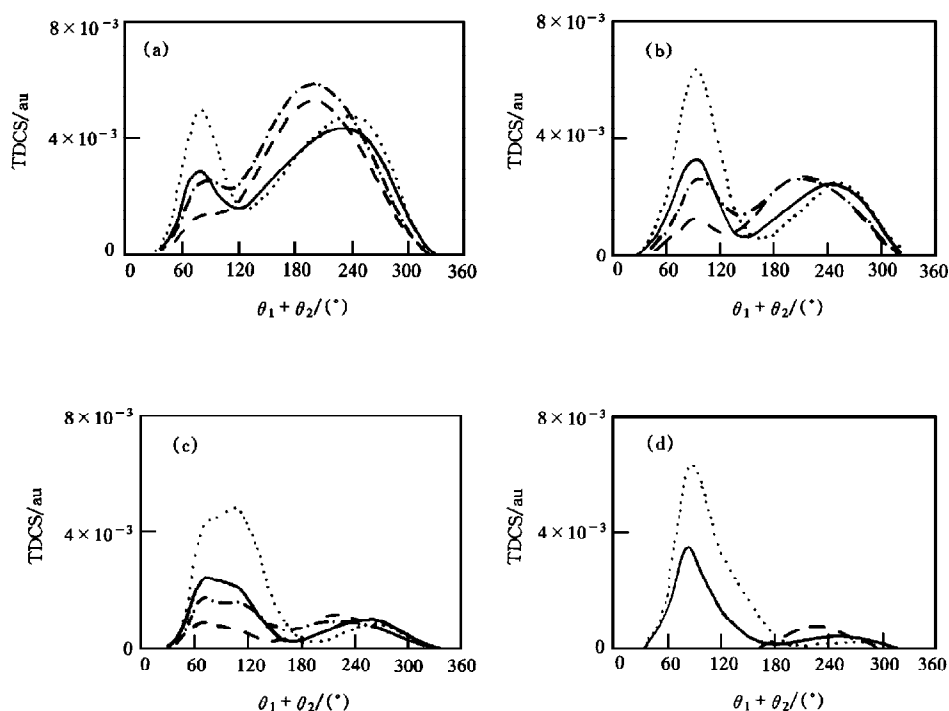


图 2 共面等能分配几何电子碰撞 He^+ 电离 TDCS 碰撞能量为 108.8 eV, 散射角: (a) $\theta_1 = 15^\circ$, (b) $\theta_1 = 30^\circ$, (c) $\theta_1 = 45^\circ$, (d) $\theta_1 = 60^\circ$. 敲出电子角度 θ_2 变化, 两出射电子能量 $E_1 = E_2 = 27.2$ eV. 所有理论曲线按两出射电子相对角度 $\theta_1 + \theta_2$ 画出. 实线表示入射电子用库仑波表示, 两出射电子使用 DSBBK(即 ICW-DSBBK)的结果; 虚线表示两出射电子用 BBK(即 ICW-BBK)计算的结果; 点线表示入射电子用平面波描述, 出射电子用 DSBBK(即 IPW-DSBBK)波函数描述的结果; 点划线表示出射电子用 BBK(即 IPW-BBK)描述的结果.

与以上分析类似, 随着入射粒子能量的减小(图 3, 图 4), 当散射角较小时(如图 3(a), 图 4(a))峰的位置在 $\theta_1 + \theta_2 \simeq 180^\circ$ 附近, 再次表明在这个峰处电子之间排斥效应的强烈影响. 当散射角 θ_1 增大时, 与上述情况类似, 即 **binary** 碰撞逐渐增强, 二次 **binary** 碰撞逐渐减弱(见图 3, 图 4).

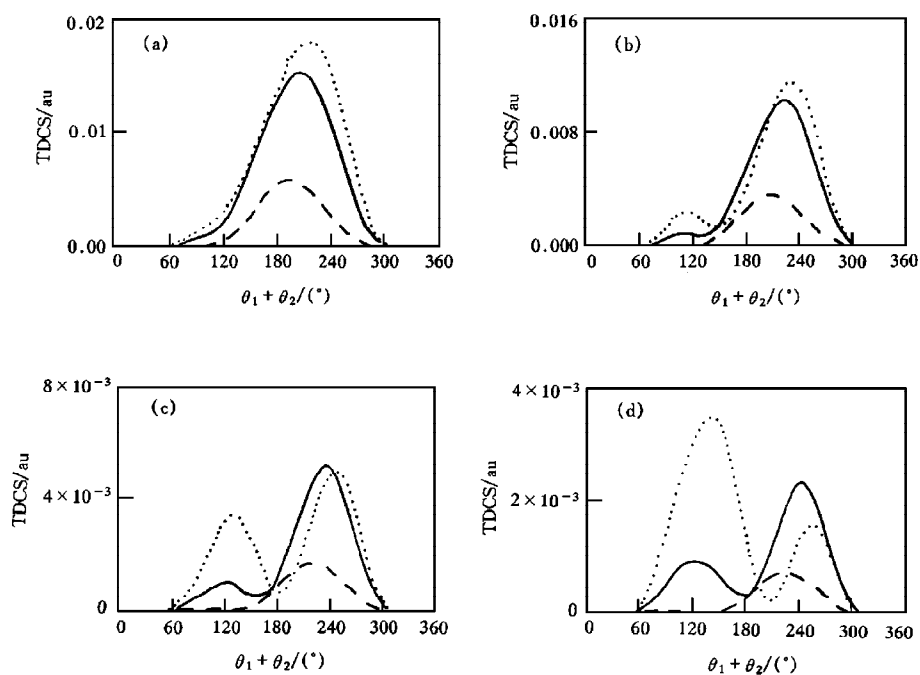


图3 电子碰撞 He^+ 电离 TDCS 入射电子能量为 68 eV, 两出射电子能量为 $E_1 = E_2 = 6.8$ eV, 其余图注同图2

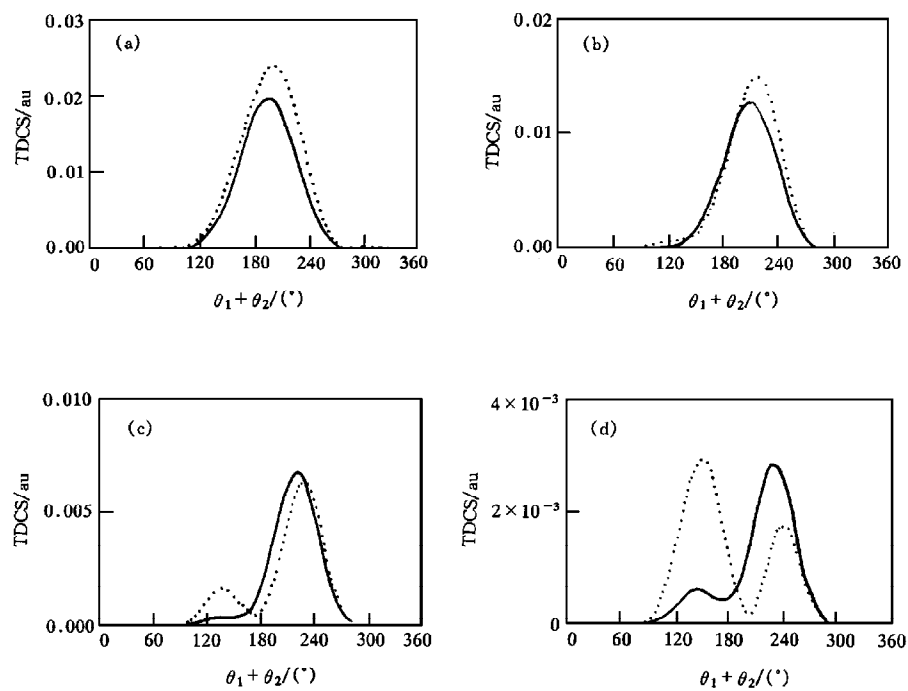


图4 电子碰撞 He^+ 电离 TDCS 入射电子能量为 58.4 eV, 两出射电子能量为 $E_1 = E_2 = 2$ eV, 其余图注同图2

应该注意到的是,入射电子用库仑波或平面波表示对 binary 碰撞的影响较大,而对二次 binary 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^[14]确认了在二次 binary 碰撞过程中核的参与,而 binary 碰撞在这种情况下有点“用词不当”^[15],因为敲出电子和靶核在初末态中都有较强的相互作用,此时考虑和不考虑初道的相互作用自然对靶核有较大的影响.图 5 是图 2(d)所述情况碰撞过程中根据 (19) 式靶核(He^{2+})随相对角度变化的反冲动量谱,可从另一角度说明这种理解的正确性.在 $\theta_1 + \theta_2 = 90^\circ$ 时,靶核有一极小的反冲动量(但不为零),对应的 binary 碰撞过程中,靶核(He^{2+})有着不能忽略的动量吸收,比氢原子低能散射时核的动量吸收大约两倍^[13].肯定了此过程靶核的重要参与.在 $\theta_1 + \theta_2 = 270^\circ$ (与极小值方向相反)时,靶核有一极大的反冲动量,表明核的最大动量吸收.对应于二次 binary 碰撞,与上述情况相符.

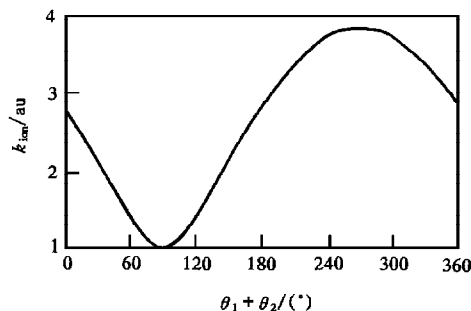


图 5 在图 2(d)条件下 He^{2+} 反冲动量的角度分布

从图 2—图 4 还不难看出,入射粒子能量较高时,4 种模型给出的 TDCS 几乎有相同的角度分布,而入射粒子能量较低时 TDCS 差别则较为明显.对于末态波函数使用 BBK 的结果,即未考虑第三个粒子对两个粒子之间相互作用的影响,显然其在低入射能量的结果是不可靠的^[8,10].应该强调的是,不论哪种情况,入射道用平面波来代替库仑波(即不考虑入射道库仑场的存在),尽管可给出近似的角度分布,然而它们所给出的 TDCS 的大小确有较大的差别.归纳起来主要是入射粒子能量越低,散射角度越大(对应于较小的碰撞参数),对 TDCS 的影响就越大.

由于目前文献中尚未见到关于电子碰撞 He^+ 电离的实验数据,我们期待未来的实验对本文结果的检验.

- [1] 孙永盛、郑绍唐、杜祥琬,核物理动态,12(4)(1995),6.
- [2] S.M. Younger, *Phys. Rev.*, **A24**(1981),1278; **A26**(1982),3177.
- [3] L.B. Golden, D.H. Sampson, *J. Phys. B*, **10**(1977),2229.
- [4] C.J. Fontes, D.H. Sampson, H.L. Zhang, *Phys. Rev.*, **A48**(1993),1975.
- [5] A. Roy, K. Roy, N.C. Sil, *J. Phys. B*, **15**(1982),1289.
- [6] R. Biswas, C. Sinha, *Phys. Rev.*, **A50**(1994),354.
- [7] C. Sinha, S. Tripathi, *J. Phys. B*, **24**(1991),3659.
- [8] M. Brauner, J.S. Briggs, H. Klar, *J. Phys. B*, **22**(1989),2265.
- [9] J. Berakdar, H. Klar, M. Brauner *et al.*, *Z. Phys.*, **D16**(1990),91.
- [10] M. Brauner, J.S. Briggs, H. Klar *et al.*, *J. Phys. B*, **24**(1991),657.
- [11] J. Berakdar, J.S. Briggs, *Phys. Rev. Lett.*, **72**(1994),3799.
- [12] Xiangfu Jia, Qicun Shi, Zhangjin Chen *et al.*, *Phys. Rev.*, **A55**(1997),1971.
- [13] J. Berakdar, J.S. Briggs, *J. Phys. B*, **29**(1996),2289.
- [14] J.S. Briggs, Comment., *At. Mol. Phys.*, **23**(1989),155.
- [15] M. Brauner, J.S. Briggs, *J. Phys. B*, **26**(1993),2451.

A THEORETICAL STUDY ON ABSOLUTE TRIPLE DIFFERENTIAL CROSS SECTIONS FOR NEAR-THRESHOLD $\text{He}^+ (e, 2e)$ REACTIONS

JIA XIANG-FU

(Department of Physics, Shanxi Normal University, Linfen 041004)

SHI QI-CUN CHEN ZHANG-JIN CHEN JI XU KE-ZUN

(Department of Modern Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026)

(Received 9 June 1997; revised manuscript received 8 September 1997)

ABSTRACT

A correlated three-body continuum wave function proposed by Brauner *et al.* has recently been modified further to allow for the three-body effects by introducing Sommerfeld parameters (Berakdar and Briggs), it is used to calculate the triple differential cross sections for electron impact ionization of He^+ in coplanar equal-energy sharing and symmetric geometry. The initial channel wave function involves a Coulomb wave function due to the long range Coulomb attraction between the incident electron and the screened ionic nucleus. Since the present work deals with symmetric collisions, the electron exchange effect between the two continuum electrons has been taken into account properly. It is shown that the initial channel Coulomb field play a major role in determining the triple differential cross sections at near-threshold incident energy and small impact parameter values.

PACC: 3480D