

低能电子离化 He 原子($e, 2e$)反应中的 动力学屏蔽^{*}

张穗萌¹⁾ 陈长进²⁾ 徐克尊³⁾

¹⁾(六安师范专科学校物理系, 六安 237012)

²⁾(安徽大学物理系, 合肥 230039)

³⁾(中国科学技术大学近代物理系, 合肥 230026)

(1998 年 5 月 11 日收到; 1998 年 8 月 28 日收到修改稿)

在三体索末菲参量修正的基础上, 进一步对($e, 2e$)反应的末态 He^+ 中核外电子的有效屏蔽给出修正. 这种修正反映了末态四粒子间的动力学屏蔽. 并用修正后的索末菲参量计算了入射能量为 50 eV 时, 共面不对称几何条件下电子离化 He 原子的三重微分截面. 所得结果与 convergent close-coupling 理论结果及最新绝对测量的实验数据进行比较, 发现当敲出电子能量为 10 eV 时, 理论曲线更接近实验数据.

PACC: 3480D; 3450H

1 引 言

近年来, 随着($e, 2e$)实验的不断发展, ($e, 2e$)理论日趋成熟. Brauner, Briggs 和 Klar (BBK)模型的出现是($e, 2e$)理论的一个重要突破. 自从 1989 年 BBK 为计算 H 原子的三重微分截面(TDCS)提出 BBK 模型^[1]以来, 该模型得到了广泛应用, 被一致认为是处理三体问题的最佳方案^[2]. 由于 BBK 模型用严格的库仑波函数描述两个出射电子与两个电子之间的关联, 因此它不仅适用于不对称几何条件, 也适用于对称几何条件.

当然, BBK 模型在有些情况下也不尽如人意. 如低能($e, 2e$)反应中, BBK 模型得到的结果与实验数据之间存在较大偏差^[3]. 针对 BBK 模型的不足, 1994 年, Berakdar 等人在对称几何条件下对 BBK 模型提出了修正方案^[4]. 我们曾用这种修正计算了低能电子离化 He 原子的 TDCS, 对 Pochat 等人的实验结果给出了圆满的理论解释^[5]. 作为对 Berakdar 等人工作的补充, 1997 年我们提出了非对称几何条件下 BBK 模型的修正方案, 并进行了一些低能($e, 2e$)反应的理论计算^[6,7], 均得到与实验较符合的结果.

最近, Röder 等人在非对称几何条件下对入射能量为 50 eV 时, He 原子($e, 2e$)反应的 TDCS 做了绝对测量, 同时用 convergent close-coupling (CCC)理论进行了计算^[8]. 结果表明: 当敲出电子能量为 10 eV 时, 理论与实验偏差较大. 为此, 我们用修正后的 BBK 模型研究了这一过程, 发现理论与实验仍有较大偏差. 经深入研究发现, 当考虑了末通道 He^+

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 19634040)及安徽省教育委员会科研基金(批准号: JL97010)资助的课题.

中剩余电子对核的有效屏蔽之后,方能使理论计算与实验数据较好地符合.

2 理论计算

在原子单位中,考虑交换效应之后, $(e, 2e)$ 过程的 TDCS 由下式给出:

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE} = (2\pi)^4 \frac{k_1 k_2}{k_0} \times \left\{ \frac{3}{4} |f(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) - g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)|^2 + \frac{1}{4} |f(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) + g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)|^2 \right\}, \quad (1)$$

其中 $\mathbf{k}_0$, $\mathbf{k}_1$ 和 $\mathbf{k}_2$ 分别为入射电子、散射电子和敲出电子的动量; Ω_1 , Ω_2 为接收动量为 $\mathbf{k}_1$, $\mathbf{k}_2$ 两个电子的立体角; f 和 g 分别为直接散射振幅和交换散射振幅,两者之间关系为

$$g(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = f(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1). \quad (2)$$

直接散射振幅定义为

$$f(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \langle \Psi_f^- | -\frac{2}{r_1} + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|} | \Psi_i \rangle, \quad (3)$$

其中 $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$ 和 $\mathbf{r}_3$ 分别为入射电子 1、束缚电子 2, 3 的位置矢量; Ψ_i 和 Ψ_f^- 分别为 He 原子与入射电子组成的整个系统初态和末态的波函数.

在入射通道, Ψ_i 可取为入射电子波函数与基态 He 原子波函数的乘积, 即

$$\Psi_i = (2\pi)^{-3/2} \exp(i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_1) \phi_1, \quad (4)$$

其中用平面波表示入射电子波函数, ϕ_1 表示 He 原子基态波函数, 它可写成两个束缚电子波函数的乘积, 即

$$\phi_1 = \phi(\mathbf{r}_2) \phi(\mathbf{r}_3), \quad (5)$$

其中 $\phi(\mathbf{r})$ 可取为^[9]

$$\phi(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{1}{4\pi}} (g_a e^{-\lambda_a r} + g_b e^{-\lambda_b r}), \quad (6)$$

其中 $\lambda_a = 1.41$, $\lambda_b = 2.61$, $g_a = 2.60505$, $g_b = 2.08114$. 末态由两个出射电子与剩余 He^+ 组成, 其波函数可表示为

$$\Psi_f^- = \phi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \phi_{\text{ion}}. \quad (7)$$

He^+ 波函数 ϕ_{ion} 可取为类氢离子波函数

$$\phi_{\text{ion}} = \sqrt{\frac{8}{\pi}} e^{-2r_3}. \quad (8)$$

出射电子波函数 $\phi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ 由 BBK 波函数给出^[11]

$$\phi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = M \exp(i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1) \exp(i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2) \chi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (9)$$

其中

$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = & \prod_{j=1}^2 {}_1F_1[i\alpha_j; 1; -i(k_j r_j + \mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_j)] \\ & \times {}_1F_1[i\alpha_{12}; 1; -i(k_{12} r_{12} + \mathbf{k}_{12} \cdot \mathbf{r}_{12})]; \end{aligned} \quad (10)$$

常量 M 为

$$M = \exp[-\pi(\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_{12})/2] \Gamma(1 - i\alpha_1) \Gamma(1 - i\alpha_2) \Gamma(1 - i\alpha_{12}) / (2\pi)^3. \quad (11)$$

(10)式中 ${}_1F_1$ 为合流超几何函数;索末菲参量 $\alpha_1 = -Z/k_1$, $\alpha_2 = -Z/k_2$, $\alpha_{12} = 1/(2k_{12})$, 其中

$$k_{12} = \frac{1}{2}(k_1 - k_2). \quad (12)$$

由上述 α_i ($i=1, 2, 12$)得到的末态波函数 ϕ_i 称为3C函数^[4].

Berakdar 等人在考虑了末态三粒子间的动力学屏蔽(DS)之后,给出了对称几何条件下, $k_1 = k_2 = k$ 时新的索末菲参量为^[4]

$$\beta_1 = \beta_2 = -\frac{Z - \sin \xi/4}{k}, \quad \beta_{12} = \frac{1 - \sin^2 \xi}{2k \sin \xi}, \quad (13)$$

其中 $\xi = (\cos^{-1} \hat{k}_1 \cdot \hat{k}_2)/2$, 为两个出射电子对入射方向的张角. 由 β_i ($i=1, 2, 12$)得到的末态波函数 ϕ_i 称为DS3C函数^[4].

作为对 Berakdar 等人工作的补充, 1997 年我们导出了非对称几何条件下, DS3C 函数中的索末菲参量为^[6]

$$\beta_1 = -\frac{Z - \frac{k_1}{4k_{12}} \sin^2 \xi \left(1 - \frac{|k_1 - k_2|}{4k_{12}}\right)}{k_1}, \quad (14)$$

$$\beta_2 = -\frac{Z - \frac{k_2}{4k_{12}} \sin^2 \xi \left(1 - \frac{|k_1 - k_2|}{4k_{12}}\right)}{k_2}, \quad (15)$$

$$\beta_{12} = \frac{1 - \sin^2 \xi \left(1 - \frac{|k_1 - k_2|}{4k_{12}}\right)}{2k_{12}}. \quad (16)$$

容易看出: 当 $k_1 = k_2 = k$ 时, (14), (15)和(16)式化简为(13)式.

上述修正有一个明显的不足, 即把末通道中剩余 He^+ 作“原子实”看待, 因此两个出射电子感受到的剩余离子的电荷均取为 $Z=1$. 但在实际散射过程中, 对两个出射电子而言, He^+ 中的核外电子不可能将核的单位电荷全部屏蔽. 两个出射电子感受到的剩余离子的电荷应与 He^+ 中核外电子的屏蔽度有关. 基于这种考虑, 我们把(14)和(15)式中的 Z 换为 Z_i^* ($i=1, 2$), 即

$$\beta_1^* = -\frac{Z_1^* - \frac{k_1}{4k_{12}} \sin^2 \xi \left(1 - \frac{|k_1 - k_2|}{4k_{12}}\right)}{k_1}, \quad (17)$$

$$\beta_2^* = -\frac{Z_2^* - \frac{k_2}{4k_{12}} \sin^2 \xi \left(1 - \frac{|k_1 - k_2|}{4k_{12}}\right)}{k_2}. \quad (18)$$

β_{12}^* 由下列关系决定^[4]:

$$\beta_1^* + \beta_2^* + \beta_{12}^* = \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_{12}. \quad (19)$$

并把 Z_i^* 设计为

$$Z_i^* = Z_n - F_i(\theta), \quad (20)$$

其中 Z_n 为核电荷数; $F_i(\theta)$ 为第 i 个出射电子感受到的 He^+ 中剩余电子对核的屏蔽函数, 该函数可借助于剩余离子中核外电子的密度分布函数 $\rho(r)$ 的傅里叶变换求得

$$F_i(\theta) = \int \exp(i \mathbf{q}_i \cdot \mathbf{r}) \rho(r) d\mathbf{r}, \quad (21)$$

其中 $\mathbf{q}_i = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_i$ 为第 i 个出射电子的动量转移, 其大小为

$$q_i = (k_i^2 + k_0^2 - 2k_i k_0 \cos \theta_i)^{1/2}, \quad (22)$$

其中 k_i 和 θ_i 分别为第 i 个出射电子的动量和对入射方向的张角. 作为一个好的近似, 取 $\rho(r)$ 为指数分布

$$\rho(r) = \frac{Z_e}{8\pi} e^{-r}, \quad (23)$$

并满足

$$\int_0^\infty \rho(r) 4\pi r^2 dr = Z_e, \quad (24)$$

其中 Z_e 为剩余离子核外的电子数. 将(23)式代入(21)式, 并积分, 得

$$F_i(\theta) = \frac{Z_e}{(1 + q_i^2)^2}. \quad (25)$$

利用上述 β_i^* ($i=1, 2, 12$) 计算了入射能量为 50 eV 时, 电子入射离化 He 原子的 TDCS.

3 结果与讨论

在数值计算中, 我们继续延用文献[7]使用过的计算机程序, 只是以(20)式中的 Z_i^* ($i=1, 2$) 取代那里的 Z . 当电子入射能量为 50 eV 时, 对慢电子(即敲出电子)出射能量取 4 和 10 eV 两种情况, 分别进行了计算. 为了便于与实验结果及其他理论结果进行比较, 可将快电子(即散射电子)的散射角分别固定在 $\theta_1 = -20^\circ, -25^\circ, -30^\circ, -35^\circ$ 上, 计算 TDCS 随慢电子出射角 θ_2 的变化关系, 所得结果如图 1 和图 2 所示. 图 1 和图 2 不仅给出 Röder 等人的实验结果和他们用 CCC 理论得到的曲线^[8], 同时还给出未修正的 BBK 结果和用 DS3C 函数计算的结果. 此外, 为了揭示本文修正的一般规律, 在上述计算的基础上, 我们又增加了两种出射能量的纯理论计算. 图 3 给出 θ_1 固定在 -25° 上, 取 $E_2 = 8$ 和 12 eV 时, 分别用 DS3C 波函数和修正后的波函数得到的 TDCS 随 θ_2 的变化曲线.

图 1(a)–(d) 对应于敲出电子能量 $E_2 = 4$ eV, 且 θ_1 固定在不同角度时, TDCS 随 θ_2 的变化曲线. 由图 1 可见, 这种情况下, CCC 理论曲线与实验结果符合较好. 只是当 $\theta_2 = -30^\circ$ 和 -35° 时, 在 binary 峰的前沿, CCC 曲线出现了一个台阶, 这与实验和基本量子散射理论均不符合. 未修正的 BBK 曲线, 无论在 binary 峰, 还是在 recoil 峰, 都远远低于实验结果. 而 DS3C 曲线, 由于考虑了末态三粒子间的关联效应, 因此大大地改善了理论曲线与实验数据的符合程度. 但是它过高地估计了 binary 峰, 并且在峰的后沿形成很深的谷, 与实验仍有较大偏差. 经本文修正后, 曲线的 binary 峰有一定回落, 同时对 binary 峰的后沿也有所提升. 因此, 修正后的理论曲线与实验结果及 CCC 曲线基本一致.

图 2(a)–(d) 对应于敲出电子能量 $E_2 = 10$ eV 的情况. 此时 CCC 曲线只能对实验数

据的变化趋势给出定性的说明,数量值上相差甚大.它在 **binary** 峰和 **recoil** 峰都比实验低很多.在两峰之间, $\theta_2 = -100^\circ$ 附近,实验给出急剧下降的截面,而 CCC 曲线却缓慢下降,因此在结构变化上也偏离了实验.对索末菲参量修正后的 DS3C 曲线在结构变化上与实验一致,但它却给出了很强的 **binary** 峰,并且在 **binary** 峰的后沿得到了几乎为零的散射截面,也与实验偏差较大.经本文修正后,大大地降低了 **binary** 峰,同时对峰的后沿也有较大提升.因此,修正后的曲线在误差范围内与实验结果基本一致.尤其当快电子的散射角 θ_1 较小时,理论曲线与实验结果符合很好.

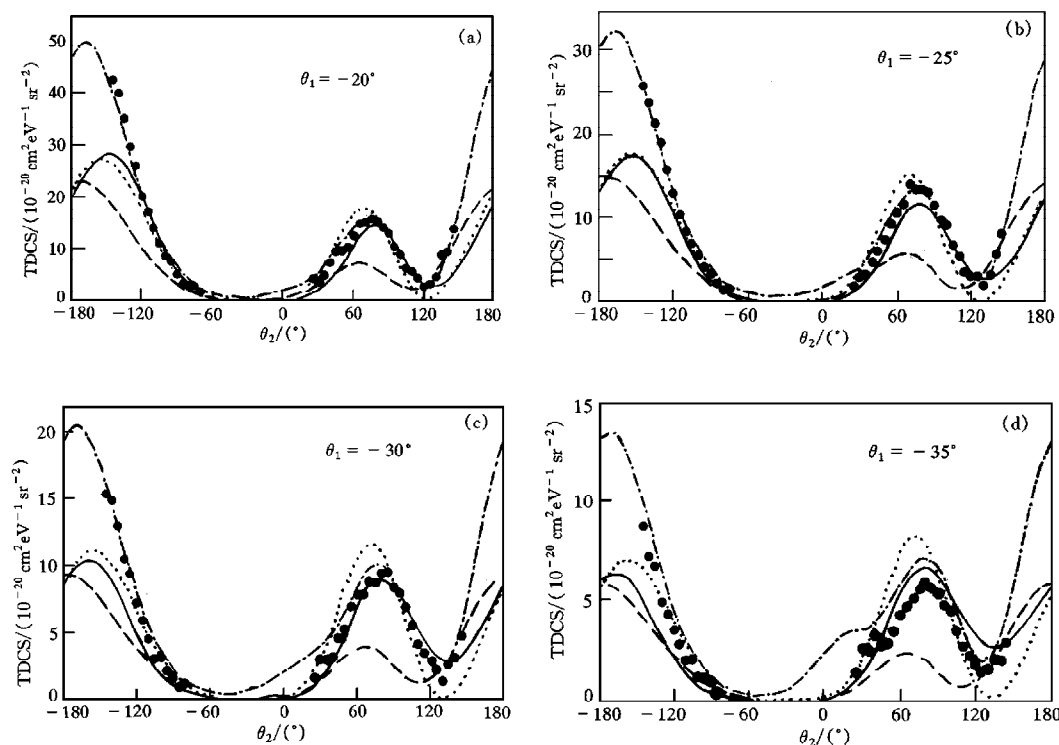


图 1 入射能量为 50 eV、射出电子能量为 4 eV,且 θ_1 固定共面不对称几何条件下电子离化 He 原子的 TDCS

●为实验值^[8],——为本文理论值,···为 DS3C 结果,---为 BBK 结果,--·--为 CCC(99)结果^[8]

图 3(a)和(b)分别对应于 $\theta_1 = -25^\circ$, $E_2 = 8$ 和 12 eV 时的纯理论计算曲线.由图 3 和图 1(b)、图 2(b)可见,当取定 $\theta_1 = -25^\circ$ 时,随慢电子出射能量从 4 增大到 12 eV,修正前后理论曲线的变化呈现明显的规律性,即修正前后曲线上各峰和谷的位置几乎相同,但 **binary** 峰和 **recoil** 峰的大小都明显下降,并且 **binary** 峰的改变量明显地大于 **recoil** 峰的改变量.对这些现象可从以下两个方面给出合理的物理解释.

一方面,本文修正的初衷就是试图通过屏蔽函数 $F_i(\theta)$ 给出一个更合理的末态有效电荷 Z_i^* ($i=1,2$),而末态库仑场的强弱对 **binary** 峰的高低将产生直接影响.这是因为 **binary** 峰产生于电子和电子的直接碰撞,因此只要有效电荷发生变化, **binary** 峰就会随之而变;而 **recoil** 峰起因于二重散射,即敲出电子首先被入射电子散射,接着又被靶核散射,

因此它几乎沿着与入射方向相反的方向出射. 在本文各图中, 相应的 **recoil** 峰约均出现在 $\theta_2 = -160^\circ$ 附近. 可见这种情况对应于内部散射区域, 不是边界区域. 而 BBK 模型以及本

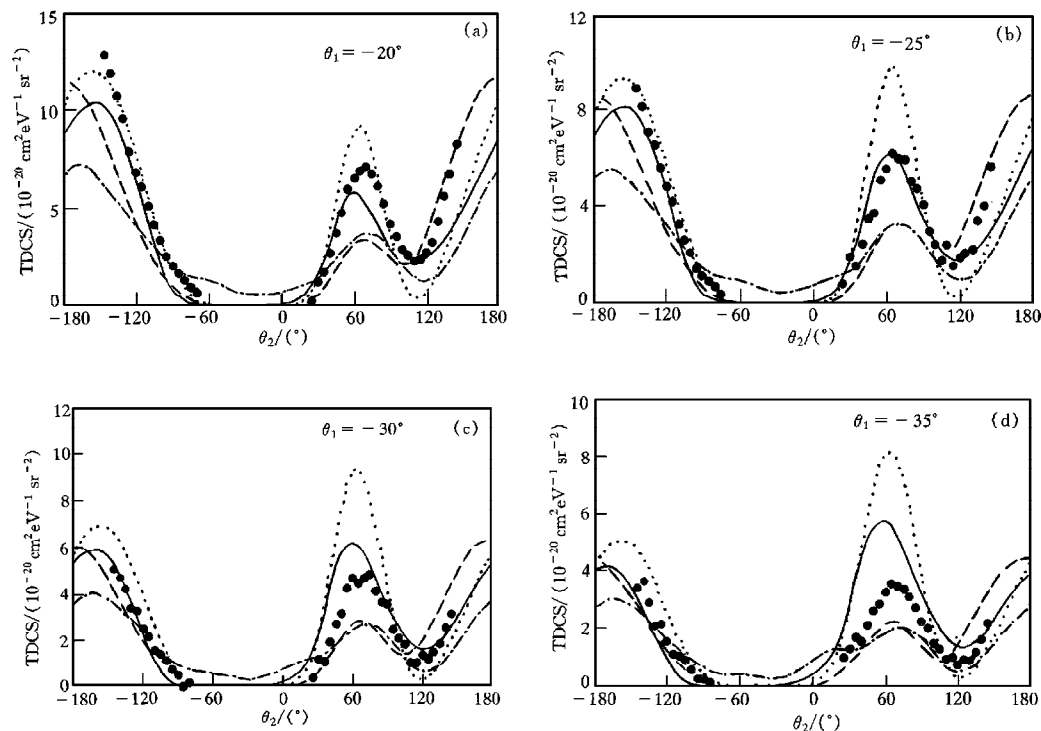


图 2 同图 1, 但敲出电子能量为 10 eV

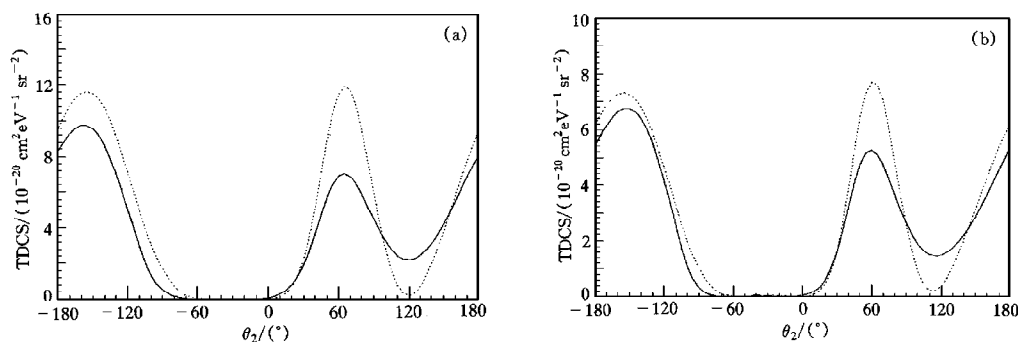


图 3 入射能量为 50 eV、敲出电子能量分别为 8 eV(a)和 12 eV(b), 且 $\theta_1 = -25^\circ$, 共面不对称几何条件下电子离化 He 原子 TDCS 的理论结果 —— 为本文结果, $\cdots$ 为 DS3C 结果

文的修正都是从考虑满足边界条件而得到的. 因此, 修正后 **binary** 峰的改变量大于 **recoil** 峰的改变量是预料之中的. 估计初通道中入射电子与靶核的短程相互作用, 可能会对 **recoil** 峰产生明显的影响. 我们正在做这方面的研究.

另一方面,注意到本文修正还间接地改变了两个出射电子之间的关联效应(即 Z_i^* ($i=1, 2$) 的改变通过(19)式对 β_{12}^* 产生影响). 在前期文献中^[5], 我们曾经指出:与两个出射电子之间的排斥作用对应的“Gamow”因子为 $\exp\left(-\frac{1}{2}\pi\beta_{12}^*\right)$, 它在低能电子入射时起重要作用. 为了讨论两个出射电子之间的关联对 TDCS 的影响, 图 4 给出入射能量为 50 eV, $\theta_1 = -25^\circ$, $E_2 = 8$ eV 时, 修正前、后的“Gamow”因子随 θ_2 的变化曲线.

由图 4 可见, 修正前后的“Gamow”因子在 $\theta_2 = -80^\circ$ — 10° 之间几乎重合, 而在 $\theta_2 < -80^\circ$ 和 $\theta_2 > 10^\circ$ 的范围内, 修正后的“Gamow”因子与修正前相比明显地下降, “Gamow”因子的这种变化趋势与修正后 TDCS 在相应范围内的变化方向一致. 由此可见, 两个出射电子之间的关联对 binary 峰和 recoil 峰的高低有重要影响. 可见本文给出的新的索末菲参量 β_i^* ($i=1, 2, 12$) 不仅反映了剩余电子对核的有效屏蔽, 而且将剩余电子与出射电子之间以及两个出射电子彼此间的关联效应也包含在其中. 因此从本质上而言, 修正后的索末菲参量反映了末态四粒子间的动力学屏蔽. 这便是本文结果更接近实验数据的原因所在.

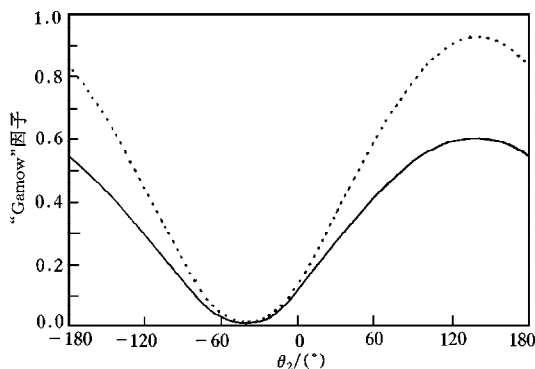


图 4 入射能量为 50 eV, 敲出电子能量为 8 eV, $\theta_1 = -25^\circ$ 时, “Gamow”因子随 θ_2 的变化曲线 ——为修正后的结果, ...为修正前的结果

感谢 Igor Bray 教授通过 e-mail 为本文提供了入射能量为 50 eV 时, 电子入射离化 He 原子 TDCS 的实验数据和 CCC 理论数据.

- [1] M. Brauner, J. S. Briggs, H. Klar, *J. Phys.*, **B22**(1989), 2265.
- [2] M. A. Copln, J. H. Moore, J. P. Doering, *Rev. Mod. Phys.*, **66**(1994), 985.
- [3] Zhang Sui-meng *et al.*, *Chinese Journal of Atomic and Molecular Physics*, **14**(1997), 457(in Chinese).
- [4] J. Berakdar, J. S. Briggs, *Phys. Rev. Lett.*, **72**(1994), 3799.
- [5] Zhang Sui-meng *et al.*, *Acta Physica Sinica*, **46**(1997), 2320(in Chinese).
- [6] Z. Chen, Q. Shi, S. Zhang *et al.*, *Phys. Rev.*, **A56**(1997), R2514.
- [7] Z. Chen, S. Zhang, Q. Shi *et al.*, *J. Phys.*, **B30**(1997), 4963.
- [8] J. Röder, H. Ehrhard, I. Bray *et al.*, *J. Phys.*, **B29**(1996), L67.
- [9] F. W. Byron, Jr., C. J. Joachain, *Phys. Rev.*, **146**(1966), 1.

DYNAMIC SCREENING OF THE $(e, 2e)$ PROCESSES FOR LOW-ENERGY ELECTRON IMPACT IONIZATION OF HELIUM^{*}

ZHANG SUI-MENG¹⁾ CHEN ZHANG-JIN²⁾ XU KE-ZUN³⁾

¹⁾ (Department of Physics, Lu'an Teacher's College, Lu'an 237012)

²⁾ (Department of Physics, Anhui University, Hefei 230039)

³⁾ (Department of Modern Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026)

(Received 11 May 1998; revised manuscript received 28 August 1998)

ABSTRACT

Based on the modified three-body Sommerfeld parameters, the effective shield of the residual electron in the final state of He^+ is further modified for $(e, 2e)$ processes. Such a modification represents a dynamic screening of the four bodies in the final state. The triple differential cross sections for electron impact ionization of atomic helium at an incident energy of 50 eV in the asymmetric geometry are calculated by use of the modified Sommerfeld parameters. The results were compared with those of the absolute measurements and the only existing theoretical results of the convergent close-coupling method. It was found that the present results give a better description for the experimental data at fixed ejected energy of 10 eV.

PACC: 3480D; 3450H

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 19634040), and by the Foundation of Education Commission of Anhui Province (Grant No. JL97010), China.