

电子碰撞下氢原子单离子化反应 三重微分散射截面的计算

张程华¹⁾ 邱 巍¹⁾ 辛俊丽¹⁾ 牛英煜¹⁾ 王晓伟²⁾ 王京阳²⁾

¹⁾ 辽宁大学物理系, 沈阳 110036)

²⁾ 中国科学院金属研究所, 沈阳材料科学国家(联合)实验室, 沈阳 110036)

(2002 年 11 月 14 日收到, 2003 年 1 月 3 日收到修改稿)

在共面非对称几何条件下, 利用能壳上跃迁矩阵元的后滞形式和双势公式, 对快电子碰撞下氢原子的单离子化, 提出了一个新的计算方法. 通过分解动能算符, 并且略去两电子的质心运动和相对运动的指数因子, 对快电子采用平面波的近似形式, 得到了库仑三体问题的近似解. 散射振幅可以表示成两个因子乘积的形式, 即结构散射因子 T_2 和关联因子 T_{12} . 采用渐近级数展开和最佳截断的方法讨论了 T_2 和 T_{12} 对三重微分散射截面的影响.

关键词: $(e, 2e)$ 反应, 三重微分截面, 二体峰值, 反冲峰值

PACC: 3480D, 3450H

1. 引言

电子碰撞下的原子单离子化是一个重要研究领域^[1-4]. 氢原子的 $(e, 2e)$ 反应含有相互作用和原子结构的大量信息. 尽管氢原子的单离子化是原子物理中最简单的三体相互作用问题, 但是由于长程的库仑作用和离子化反应中末态三体之间的关联问题, 使带电粒子与氢原子碰撞的单电离过程仍有许多难以克服和未解决的困难. 从理论的观点上看, 对于三体问题, 薛定谔方程不能精确求解. 对于整个离子化过程的正确描述需要知道入射粒子与靶电子和剩余离子之间的相互作用, 必须引进各种近似方法. 例如, 玻恩近似, 扭曲波方法, 收敛密耦近似和 BBK (M Brauner, J S Briggs and H Klar) 方法^[5-7]. 在 BBK 理论中, 入射道的波函数写成平面波与束缚波函数之积, 体系满足相互作用的精确波函数近似写成三个库仑函数之积, 其中两个电子之间的关联项只与两个电子的相对坐标和所对应的共厄动量有关, 然后利用跃迁矩阵元的超前形式 (prior form) 计算散射振幅和三重微分散射截面 (Triple differential cross section, TDCS). 在计算中, 利用波矢空间, 通常散射振幅可以表示一个三重积分. 在被积函数中含有高斯超几何函数. 在数值计算中, 所遇到的问题就是积分的收敛问题. 为了克服这一困难, 一般利用函数变换和将

高斯超几何函数写成对称形式, 但仍存在着不同项之间相消的困难.

为了克服上述困难, 本文从双势散射的跃迁矩阵元的后滞形式出发, 引进库仑扭曲波函数描述出射道状态. 对于满足出射边界条件的三体薛定谔方程将两电子之间相对运动进行分离变量^[8,9], 得到三体薛定谔方程的形式解. 入射能量为 $E_i = 150\text{eV}$, $E_2 = 3\text{eV}$ 的区域内, 获得了氢原子 $(e, 2e)$ 反应的理论公式. 在共面非对称几何条件下, 利用快电子平面波近似, 将跃迁矩阵元分解成两个因子的乘积, 其中一个因子 (T_2) 只与动量转移和束缚态结构参数有关, 而另一个因子 (T_{12}) 为出射道两电子的关联因子. 在给定的动力学参数和非共面几何条件下 T_2 是满足收敛条件的, 而 T_{12} 是发散的. 为了克服 T_{12} 发散的困难, 我们利用渐近级数的最佳截断的方法, 计算了氢原子 $(e, 2e)$ 的 TDCS, 得到的三重微分散射截面的 binary peak 和 recoil peak, 并与实验进行了比较.

2. 理论计算

氢原子 $(e, 2e)$ 反应的三重微分截面可以表示为

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_2} = (2\pi)^4 \frac{K_1 K_2}{K_0} |T_{fi}|^2, \quad (1)$$

这里 K_0 为入射电子的动量, K_1 和 K_2 为散射电子和碰出电子的动量. E_2 为碰出电子的能量, 而 Ω_1

和 Ω_2 分别为位于 (θ_1, φ_1) 和 (θ_2, φ_2) 方位的立体角, 其中 T_{fi} 为跃迁矩阵元 (on the energy shell). 利用双势公式的后滞形式 (post form)^[10, 11]

$$T_{fi} = \chi_b^{(-)} | V_i - W_f | \phi_a + \chi_b^{(-)} | W_f | \phi_a^{(+)} . \quad (2)$$

由于靶电子的束缚态与扭曲的连续态正交^[12], 即

$$\chi_b^{(-)} | V_i - W_f | \phi_a \equiv 0 , \quad (3)$$

所以有

$$T_{fi} = \chi_b^{(-)} | W_f | \phi_a^{(+)} , \quad (4)$$

$\chi_b^{(-)}$ 为出射道扭曲波函数, 满足方程

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} \right] \chi_b^{(-)} = E_b \chi_b^{(-)} , \quad (5)$$

而 $\phi_a^{(+)}$ 为三体薛定谔方程的解, 且满足方程

$$\left[-\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{2} \nabla_2^2 - \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} - \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right] \times \phi_a^{(+)} = E_a \phi_a^{(+)} . \quad (6)$$

为得到 $\Psi_a^{(+)}$ 将 (5) 式中的动能算符分为两部分

$$H = \frac{n-m}{n} \left(-\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{2} \nabla_2^2 \right) + \frac{m}{n} \left(-\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{2} \nabla_2^2 \right) - \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} - \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} , \quad (7)$$

$$\left[\frac{n-m}{n} \left(-\frac{1}{2} \nabla_1^2 - \frac{1}{2} \nabla_2^2 \right) - \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} \right] \times \Phi_a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E_a \Phi_a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \quad (8)$$

和

$$\left[\frac{m}{n} (\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + \frac{1}{r_{12}} \right] \psi^{(+)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_{12}) = E_{12} \psi^{(+)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_{12}) , \quad (9)$$

在入射道 $\Phi_a(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ 可以表示为

$$\Phi_a = \phi_{\text{基}}(\mathbf{r}_2) e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1} F_1(i\eta_1, 1; -[\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1 + \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1]) , \quad (10)$$

$$\psi^{(+)} = e^{i\mathbf{R} \cdot \mathbf{K}_R} e^{i(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{K}_{12}} F_1(i\alpha, 1; i\mathbf{k}_{12} \mathbf{r}_{12} - i\mathbf{k}_{12} \mathbf{r}_{12}) . \quad (11)$$

略去 $\psi^{(+)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_{12})$ 中的相因子, 则 $\phi_a^{(+)}$ 可以表示为

$$\Psi_a^{(+)} = \phi_{\text{基}}(\mathbf{r}_2) e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1} F_1(i\eta_1, 1; -[\mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1 + \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1]) F_1(i\alpha, 1; i\mathbf{k}_{12} \mathbf{r}_{12} - i\mathbf{k}_{12} \mathbf{r}_{12}) , \quad (12)$$

其中

$$\alpha = \frac{2}{|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2|} .$$

在入射电子动能为远大于离化能和在非对称几何条件下, 对快电子利用平面波代替库仑波, 略去交换效应应有

$$T_{fi} = 4\pi^2 T_2 T_{12} . \quad (13)$$

将合流超几何函数 ${}_1F_1(\alpha, 1; z)$ 写成积分形式

$${}_1F_1(\alpha, 1; z) = \frac{1}{2\pi i} \oint_c dt P(\alpha, t) e^z ,$$

其中

$$P(\alpha, t) = t^{i\alpha} (t-1)^{-i\alpha} ,$$

完成对坐标的积分

$$T_2 = \frac{1}{2\pi i} \oint_c P(\eta_2, t_2) X dt_2 ,$$

其中

$$X = \frac{\mathcal{X}(1 - i\mathbf{k}_2 t_2)}{(\beta - 2i\mathbf{k}_2 t_2 + \Delta^2 - 2\Delta \mathbf{k}_2 (1 - t_2) + k_2^2 - 2k_2^2 t_2)^{3/2}} ,$$

$$T_{12} = \frac{1}{2\pi i} \oint_c P(\alpha, t_{12}) \frac{1}{\Delta^2 - 2\Delta \cdot \mathbf{k}_{12} t_{12}} dt_{12} ,$$

$\Delta = \mathbf{k}_0 - \mathbf{k}_1$ 为快电子的动量转移,

$$\text{又} \quad \eta_2 = -\frac{1}{k_2} , \quad \beta = \frac{n}{n-m}$$

为氢原子基态的结构参数.

3. 结果与讨论

在入射能量 $E_i = 150\text{eV}$, 对慢电子的出射能量 $E_2 = 3\text{eV}$ 时, 我们计算了快电子的散射角度为 15° , 16° , 17° 时, 三重微分散射截面随慢电子出射角度变化而变化的关系.

图 1 采用了结构参数 $\beta = \frac{n}{n-m}$ 的方法, 并分别计算了 $\beta = 1.0, 1.1, 1.3, 1.5$ 时的 TDCS. β 取不同值时表示质心运动和两电子相对运动与体系散射能量的不同分配结果. $\beta = 1.0$ 时是所有的能量都提供作为散射能量的理想结果, 而 $\beta = 1.5$ 时, 也许就是与实际散射过程的最佳能量分配结果.

图 1 给出 θ_1 和 E_2 分别固定在 $\theta_1 = 16^\circ$ 和 $E_2 = 3\text{eV}$ 时, TDCS 随 θ_b 的变化关系, 图中同时给出了文献 [11] 的实验结果, 并且给出了不同结构参数对 TDCS 的影响.

从图中看到 TDCS 随 θ_b 的变化存在着两个明显的峰, 即 Binary 峰和 Recoil 峰. 结构参数主要影响 Binary 峰, 随 β 的增大 Binary 峰降低, 两个峰的位置分别在 Δ 和 $-\Delta$ 方向, 几乎与结构参数无关.

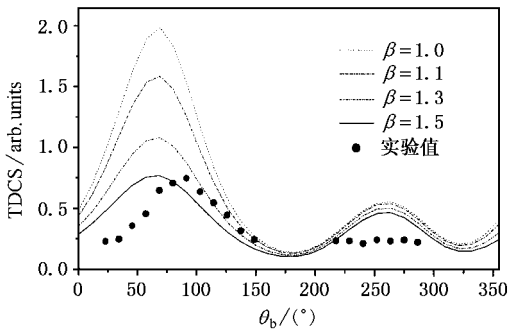


图1 入射能量 150eV, 散射能量 3eV, $\theta_1 = 16^\circ$ 时, 氢原子的 TDCS 随 θ_b 的变化关系, β 为不同的理论计算结果

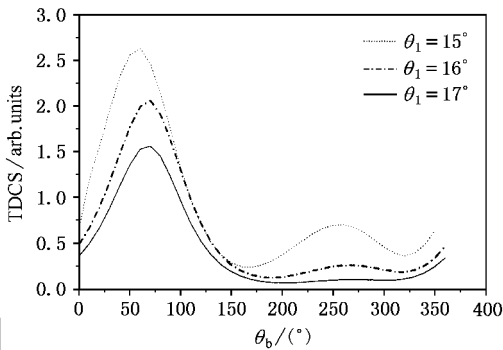


图2 入射能量 150eV, 散射能量 3eV, TDCS 随 θ_b 的变化关系

图2给出了入射能量为 150eV, $E_2 = 3\text{eV}$ 时 θ_1 分别为 15° , 16° 和 17° 时, TDCS 随 θ_b 的变化关系. 从图中看到, 对于 Binary 峰, 随着角度的增大, TDCS 的值明显下降, 而峰值的位置向 θ_b 增大的方向移动. 同时对于 Recoil 峰, 随着 θ_1 的增大, 峰值也下降, 但峰值的变化不明显.

图3给出了入射能量为 150eV, $E_2 = 3\text{eV}$, θ_1 为 16° 时, TDCS 随 θ_b 的变化关系. 图中给出了渐近公式的计算结果. 对 T_2 计算求和仍取 $n \rightarrow \infty$ 的极限. 对因子 T_{12} 利用了最佳截断只取有限项, 给出 $m = 3, 4, 5$ 的结果. 从图中看到求和所取的项不同, 对 TDCS 的 Recoil 峰影响非常大, 而 Binary 峰几乎与该求和无关. 仍取 $n \rightarrow \infty$ 的极限, 对于因子 T_{12} 在目前非对称几何条件下, 可以写成渐近级数形式. 而对于渐近级数, 有一个最佳截断多项式, 当 m 取不同的值, 代表求和项数不同. $m = 4$ 为最佳截断值. $m = 2$ 时, 求和项数少, 因此, 低于实验值. 随着 m 大于最佳值 ($m = 5, 6, \dots$), recoil 峰又明显增加.

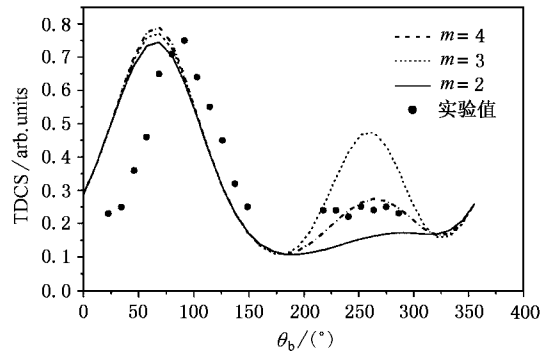


图3 入射能量 150eV, 散射能量 3eV, $\theta_1 = 16^\circ$ 时, TDCS 随 θ_b 的变化关系

综上所述, 在我们的理论中, 将散射振幅分解为两个因子, 一个是与 T_2 有关散射因子, 另一个是两电子的相关因子 T_{12} . T_2 这个因子主要影响 Binary 峰, 而 T_{12} 对 Recoil 峰的影响非常明显.

- [1] Zhang C H et al 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 2225 [in Chinese] 张程华等 2002 物理学报 **51** 2225
- [2] Zhang S M et al 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 453 [in Chinese] 张穗萌等 1999 物理学报 **48** 453
- [3] Zhang S M et al 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 2137 [in Chinese] 张穗萌等 2001 物理学报 **50** 2137
- [4] Ge Z M et al 2002 *Chin. Phys.* **11** 915
- [5] Ge Z M et al 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 519 [in Chinese] 葛自明等 2002 物理学报 **51** 519

- [6] Jones S and Madison D H 1993 *Phys. Rev. A* **48** R22
- [7] Berakar J, Brigy J S and Fursa D 1999 *J. Phys. B* **32** 895
- [8] Joachain C J 1975 *Quantum Collision Theory* (Amsterdam: North-Holland)
- [9] Chen C J 1998 *Chin. Phys.* **7** 167
- [10] Rudge MRH 2000 *J. Phys. B* **33** 1223
- [11] Shi Q C et al 1997 *J. Phys. B* **30** 2856
- [12] Brauner M, Briggs J S and Klar H 1989 *J. Phys. B* **22** 2265

The calculation of triple-differential cross sections of hydrogen atom single-ionization by electrons

Zhang Cheng-Hua¹⁾ Qiu Wei¹⁾ Xin Jun-Li¹⁾ Nu Ying-Yu¹⁾ Wang Xiao-Wei²⁾ Wang Jing-Yang²⁾

¹⁾(Department of Physics , Liaoning University , Shenyang 110036 , China)

²⁾(Shenyang National Laboratory for Materials Science , Institute of Metal Research , Chinese Academy of Sciences , Shenyang 110036 , China)

(Received 14 November 2002 ; revised manuscript received 3 January 2003)

Abstract

A simple model is proposed to study the ionization of the atomic hydrogen by fast electron impact in coplanar asymmetric geometry , making use of the post form of the energy shell transition matrix element and the two-potential formula. By virtue of dividing the full kinetic energy operator , we obtain an approximate solution of the three body problem through the canceling of the motion of two-electron mass and exponent factor of relative motion and the approximation of projectile plane wave. TDCS (triple differential cross section) is expressed by the product of two factors , the structure factor T_2 and correlation one T_{12} . In this article , the contribution of these factors is investigated using the method of asymptotic series and method.

Keywords : (e , 2e) reaction , triple-differential cross section , binary peak , recoil peak

PACC : 3480D , 3450H