

非共面索末菲参量对三重微分截面的影响*

陈展斌¹⁾ 杨欢²⁾ 吴兴举²⁾ 张穗萌^{1)2)†}

1) (安徽师范大学物理与电子信息学院, 芜湖 241000)

2) (安徽皖西学院数理系, 原子与分子物理研究所, 六安 237012)

(2010年4月12日收到; 2010年9月5日收到修改稿)

考虑末通道 He⁺ 中剩余电子的屏蔽效应之后, 在非共面几何条件下利用 3 种不同的修正方案, 详细地比较并研究了不同索末菲参量在非共面双对称几何条件下对 He 原子 (e, 2e) 反应中三重微分截面所产生的影响. 讨论了产生这种影响的物理本质.

关键词: 非共面, 双对称几何条件, 三重微分截面, 索末菲参量

PACS: 34. 80. Dp

1. 引言

入射电子与靶粒子碰撞并敲出其中一个束缚电子, 从而产生两个出射电子的过程即为 (e, 2e) 反应^[1-9], 由于这种反应过程在天体物理、等离子体物理、X 射线激光、核聚变等领域具有重要的应用, 因此引起了许多理论和实验物理学家的广泛关注^[10-18]. 近几十年来, 对于电子入射碰撞原子的 (e, 2e) 电离过程, 人们从理论和实验两方面进行了广泛而深入的研究, 并且取得了丰硕的研究成果.

1989 年, Brauner, Briggs 和 Klar^[8] 为计算 H 原子的三重微分截面 (TDCS) 提出了 BBK 模型, 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之一. 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. 但是人们很快发现: 在低入射能时, BBK 模型的计算结果与实验结果出现了较大的偏差. 随后, Berakdar 等^[1] 在双对称几何条件下对 BBK 理论提出了修正方案, 修正后的 BBK 波函数在低能对称几何条件下, 使得 H 原子和 He 原子 (e, 2e) 反应时的计算结果与实验结果符合很好, 但是对于非对称几何条件, 理论计算结果与实验值符合得并不好. 为

此, Zhang^[11] 又从动量相关角度修正了索末菲参量, 得到了不同入射能和不同几何条件下电子离化原子的 TDCS, 这一修正完善了 Berakdar 等的工作.

这些年来, Murray 实验小组^[6,7,19] 给出了很多非共面条件下电子离化 He, Ne 等原子的 TDCS 的实验数据, 然而在非共面条件下所进行的理论计算却很少. BBK 模型作为一种成功的理论方法, 到目前为止, 几乎都是在共面几何条件下应用的^[9-14]. 在非共面几何条件下, BBK 模型, 尤其是修正后的 BBK 模型是否适用? 是否能对低能 (e, 2e) 过程给出很好的描述? 是否能对实验中出现的某些特殊情况给出比较合理的解释? 这些都成为我们关心的问题.

吴兴举等^[15] 采用修正前后的 BBK 理论分别计算了入射能 $E_i = 64.6$ eV 非共面双对称几何条件下, 电子入射离化 He 原子的 TDCS, 将计算结果与实验结果进行比较后发现, 在双对称几何条件下对 3C 波函数进行的索末菲参量修正是成功的. 但是, 其计算结果并不尽如人意. 比如: 当枪角 $\psi = 67.5^\circ$ 时, 出射道 3 粒子之间的动力学屏蔽 (DS3C) 理论计算结果的谷位与实验结果有偏离, 且理论得到的谷没有实验的深; 当枪角 $\psi = 90^\circ$ 时, 在 $\xi = 90^\circ$ 中间峰处 DS3C 计算结果明显低于实验数据, 理论和实验之间存在较大偏差. 因而, 有必要对 DS3C 模型作进

* 安徽省自然科学基金 (批准号: 03406203)、安徽省教育厅重大科研项目基金 (ZD2007002-1)、安徽省教育厅自然科学基金 (批准号: 2006KJ267B) 和安徽省高等学校拔尖人才专项基金 (批准号: 2003022) 资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: Smzhang@wxc.edu.cn

一步的完善.

本文在前期工作的基础上,在非共面双对称几何条件下,进一步考虑末通道剩余离子由于形变而产生的屏蔽效应,利用3种不同的有效核电荷函数修正了索末菲参量,并详细地比较和研究了索末菲参量的改变在非共面双对称几何条件下对TDCS所产生的影响,以及产生这种影响的物理本质.

2. 理论计算

下面将简要地介绍我们的计算方法,包括TDCS的计算、有效电荷的解析表达式和非共面几何条件下有关的实验室角度与相应的理论计算角度之间的转换关系.

2.1. TDCS 的计算

假设入射电子的动量为 \mathbf{k}_0 , 与 He 原子碰撞后散射电子和敲出电子的动量分别为 \mathbf{k}_1 和 \mathbf{k}_2 . 在原子单位中,这一电离过程的 TDCS 为

$$\sigma(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = (2\pi)^4 \frac{k_1 k_2}{k_0} |T_{fi}|^2, \quad (1)$$

其中 T_{fi} 为转换矩阵元,被定义为

$$T_{fi} = \langle \psi_f^- | V_i | \phi_i \rangle. \quad (2)$$

这里 ψ_f^- 和 ϕ_i 分别是 He 原子与入射电子组成的系统末态和初态的波函数, V_i 为入射电子和 He 原子靶在初通道的相互作用势,即

$$V_i = -\frac{2}{r_1} + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3|}, \quad (3)$$

其中 $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ 和 \mathbf{r}_3 分别为入射电子(散射电子)、敲出电子和束缚电子的位置矢量. 系统的初态波函数可取为入射电子波函数与基态 He 原子波函数的乘积,即

$$\phi_i(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_1} \varphi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3), \quad (4)$$

其中 $\varphi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ 为 He 原子基态波函数,它可写为两束缚电子波函数的乘积,即

$$\varphi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \varphi(\mathbf{r}_2)\varphi(\mathbf{r}_3). \quad (5)$$

束缚电子波函数可采用 Hartree-Fock 拟合解^[20], 即

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

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

$$\psi_f^-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \phi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\phi_{\text{ion}}(\mathbf{r}_3). \quad (7)$$

He⁺ 波函数可取为类氢离子波函数($Z=2$)

$$\phi_{\text{ion}}(\mathbf{r}_3) = \sqrt{\frac{8}{\pi}} e^{-2r_3}. \quad (8)$$

两个出射电子波函数 $\phi_f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ 由 BBK 波函数^[8] 给出,

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

其中常量 M 为

$$M = \frac{1}{(2\pi)^3} \exp\left[-\frac{\pi}{2}(\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_{12})\right] \times \Gamma(1 - i\alpha_1)\Gamma(1 - i\alpha_2) \times \Gamma(1 - i\alpha_{12}), \quad (10)$$

$$\chi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \prod_{j=1}^2 {}_1F_1[i\alpha_j; 1; -i(k_j r_j + \mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_j)] {}_1F_1[i\alpha_{12}; 1; -i(k_{12} r_{12} + \mathbf{k}_{12} \cdot \mathbf{r}_{12})]. \quad (11)$$

这里 ${}_1F_1$ 为合流超几何函数, $\alpha_j (j=1, 2, 12)$ 称为索末菲参量^[8], 它可表示为

$$\alpha_1 = -\frac{Z}{k_1}, \quad \alpha_2 = -\frac{Z}{k_2}, \quad \alpha_{12} = \frac{1}{2k_{12}}. \quad (12)$$

其中 $\mathbf{k}_{12} = \frac{1}{2}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$; 由上述 $\alpha_j (j=1, 2, 12)$ 得到的末态波函数称为 3C 函数. 3C 波函数中的 3 个库仑函数是彼此独立的, 它使得任何两粒子之间的相互作用并不因为第 3 个粒子的存在而受到影响.

文献[1, 2, 9, 11—14] 曾对 BBK 理论提出过各种不同的修正方案, 这些修正均是对索末菲参量的修正. 其中文献[11] 给出了任意几何条件下, 从动量相关角度修正的索末菲参量为

$$\beta_1 = -\frac{Z - \frac{2k_{12}k_1^2}{(k_1 + k_2)^3} \left[\frac{3 + \cos^2[4\xi(k_2)]}{4} \right]^2}{k_1}, \quad (13)$$

$$\beta_2 = -\frac{Z - \frac{2k_{12}k_2^2}{(k_1 + k_2)^3} \left[\frac{3 + \cos^2[4\xi(k_1)]}{4} \right]^2}{k_2}, \quad (14)$$

$$\beta_{12} = \frac{1 - \frac{4k_{12}^2}{(k_1 + k_2)^3} \left\{ k_1 \left[\frac{3 + \cos^2[4\xi(k_2)]}{4} \right] + k_2 \left[\frac{3 + \cos^2[4\xi(k_1)]}{4} \right] \right\}^2}{2k_{12}}, \quad (15)$$

其中

$$\xi(k_i) = \arccos \left[\frac{k_i}{\sqrt{k_1^2 + k_2^2}} \right]. \quad (16)$$

由上述 $\beta_i (i = 1, 2, 12)$ 得到的末态波函数称为 DS3C 函数. 在非共面双对称几何条件下, 上述 $\beta_i (i = 1, 2, 12)$ 简化为

$$\beta_1 = \beta_2 = -\frac{4Z - \sin\xi}{4k}, \quad (17)$$

$$\beta_{12} = \frac{1 - \sin^2\xi}{2k\sin\xi}, \quad (18)$$

其中 $k_1 = k_2 = k$, $\xi = \frac{\arccos(\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{k}_2)}{2}$ 为两个出射电子对入射方向的张角.

2.2. 有效电荷的解析表示

上述修正有一个明显的缺陷, 即把末通道中剩余 He⁺ 作“原子实”看待, 因此作用在两个出射电子上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, 它们与原子实之间强烈的库仑作用, 必然使剩余离子的电荷并不等于 1, 而应该与原子实的“形变”程度有关. 在低入射能时, 这种效应尤其明显^[21-24]. 基于这种考虑, 下面我们利用 3 种不同的屏蔽函数来描述这种“形变”效应. 把方程(17)中“原子实”的电荷 Z 换为有效电荷 Z^* , 即

$$\beta_1^* = \beta_2^* = -\frac{4Z^* - \sin\xi}{4k}. \quad (19)$$

为了满足边界条件, 新的索末菲参量必须满足^[23]

$$\beta_1^* + \beta_2^* + \beta_{12}^* = +\alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_{12}. \quad (20)$$

根据前人的工作经验, 我们采用 3 种不同的屏蔽函数来构建有效电荷 Z^* , 下面给出具体的方案.

1) Berakdar 等^[22] 曾经在共面几何条件下研究过上述问题, 引入的描述剩余离子扭曲效应的有效电荷为

$$Z_i^* = 1 + a \exp(-bE_i), \quad (21)$$

其中 $a = 0.5052$, $b = 2.5496$ 为由拟合的经验确定

的待定参量, $E_i (i = 1, 2)$ 是两电子出射的能量.

2) 张穗萌等^[21] 曾在共面非对称几何条件下也研究过上述问题, 通过导出一个屏蔽函数来描述低能电子入射电离 He 原子 (e, 2e) 反应中末态作用于两出射电子的剩余 He⁺ 的有效电荷, 给出的有效电荷的具体形式为

$$Z_i^* = Z_n - F_i(\xi), \quad (22)$$

其中 Z_n 为核电荷数, 屏蔽函数为

$$F_i(\xi) = \frac{Z_e}{(1 + q_i^2)^2}. \quad (23)$$

这里 Z_e 为剩余离子核外的电子数, $q_i = k_0 - k_i$ 为第 i 个出射电子的动量转移. q_i 可表示为

$$q_i = (k_i^2 + k_0^2 - 2k_i k_0 \cos\xi_i)^{1/2}, \quad (24)$$

其中 k_i 和 ξ_i 分别为第 i 个出射电子的动量和它对入射方向的张角.

3) 曾谨言^[24] 在讨论电子与原子碰撞的屏蔽效应时, 也曾经给出过有效电荷的解析表达式, 即

$$Z_i^* = Z_n - G_i(\theta), \quad (25)$$

其中屏蔽函数为

$$G_i(\theta) = \frac{1}{(1 + 4k_i^2 \sin^2\xi_i/2)^2}, \quad (26)$$

这里 Z_n 为核电荷数, $k_i (i = 1, 2)$ 是两电子出射的动量, ξ_i 为第 i 个出射电子对入射方向的张角.

据已有文献, 到目前为止, 还没有人用上述任何一种方案来描述非共面几何条件下作用于末态出射电子的剩余 He⁺ 的有效电荷.

2.3. 实验与理论计算角度之间的关系

为了计算非共面几何条件下电子入射电离 He 原子的 TDCS, 必须将实验中的枪角和散射角转化成理论计算中的散射角和方位角. 详细的推导我们已经在前期工作中完成^[25], 这里不再赘述. 下面直接给出将实验中的枪角 ψ 和散射角 ξ 转换成理论计算中的散射角 θ 和相对方位角 ϕ 的关系式^[26]

$$\cos\theta = \cos\xi \cos\psi, \quad (27)$$

$$\cot \frac{\phi}{2} = \cot\xi \sin\psi. \quad (28)$$

利用上述关系式,我们完成了非共面双对称几何条件下电子入射电离 He 原子($e, 2e$)反应中 TDCS 的理论计算,所用计算机程序在文献 [25] 的基础上修改而得到.

3. 结果与讨论

在下面的讨论中,我们将上述 DS3C 为末态波函数所计算的曲线结果记为 DS3C,相应的修正方案 (1), (2), (3) 的计算曲线分别记为 DS3C-1, DS3C-2, DS3C-3. 在前期的工作中^[15,25],我们曾讨论过 DS3C 模型与 3C 模型在非共面双对称几何条件下峰的位置、幅度的差异. 通过讨论可知,DS3C 模型得到的结果在低能、大枪角情况下虽然与实验值较好地符合,但在曲线形状和峰谷的大小上都存在着一些差异. 为了使 DS3C 模型更好地符合实验结果,我们用上述 3 种不同的屏蔽函数在大枪角入射情况下对 DS3C 模型进行修正.

图 1(a)–(e) 给出了不同入射能情况下,大枪角入射电子电离 He 原子 TDCS 的计算曲线和相应的实验结果^[7,26]. 由于 Murray 等^[26]对 He 原子 TDCS 进行的是相对测量,所以对图 1(a)–(d) 中相应的理论结果在 $\xi = 90^\circ$ 作了归一化处理;而文献 [7] 中对 He 原子 TDCS 进行的是绝对测量,所以对图 1(e) 中相应的理论结果没有作归一化处理.

首先,从峰的幅度上看. 在图 1(a)–(c) 中,实验结果出现一个明显的单峰,DS3C 曲线虽然也呈现出单峰,但在峰的两边太陡,明显地偏离了实验结果;修正后的 DS3C-1 和 DS3C-3 曲线都往峰的中间收缩,且随着枪角的增大收缩更加明显,与实验数据偏离也越远;DS3C-2 结果明显地改善了 DS3C 曲线与实验数据的符合程度. 随着枪角的增大,修正效果越来越明显,在 $\psi = 90^\circ$ 时尤为突出. 如图 1(c)–(e) 所示,在枪角固定在 90° 情况下,随着入射能的增加,实验数据给出的 $\xi = 90^\circ$ 附近峰的相对幅度逐渐减弱,而 $\xi = 45^\circ$ 和 $\xi = 135^\circ$ 附近峰的相对幅度逐渐增强,呈现出明显的规律性变化,并且图中 4 条理论曲线所呈现出的变化规律与实验数据相一致. 如图 1(d) 所示,当入射能为 44.6 eV 时,4 条理论曲线给出的 $\xi = 90^\circ$ 附近峰相对幅度基本相同,而在其余两峰处差异明显. DS3C-3 曲线在 $\xi = 45^\circ$ 和 $\xi = 135^\circ$ 处仅给出了峰的雏形,与实验数据相差较大;DS3C-1 曲线、DS3C-2 曲线以及 DS3C 曲

线在 $\xi = 45^\circ$ 和 $\xi = 135^\circ$ 处均给出了明显的峰谷结构,并且峰的相对幅度均强于实验数据所给出的峰的相对幅度. 总之,DS3C-1 曲线与实验数据符合更好,DS3C-2 曲线次之. 如图 1(e) 所示,当入射能为 64.6 eV 时,4 条理论曲线给出的 $\xi = 45^\circ$ 和 $\xi = 135^\circ$ 附近的峰相对幅度基本相同,而在 $\xi = 90^\circ$ 处存在的差异明显. 与实验数据相比,4 条理论曲线给出的 $\xi = 90^\circ$ 处峰的相对幅度明显偏低,并且 DS3C-1 结果与实验数据相差最大. 与 DS3C 结果相比,DS3C-2, DS3C-3 均不同程度地抬高了 $\xi = 90^\circ$ 处峰的相对幅度,从而与实验数据相符,其中 DS3C-3 曲线与实验数据更加符合,DS3C-2 曲线次之.

其次,从峰的分布上看. 如图 1(a)–(c) 所示,在入射能固定在 29.6 eV 时,随着枪角的增大,修正后 3 条曲线给出的峰位与 DS3C 曲线相差不远,都在实验结果附近,这说明末通道剩余离子屏蔽效应对峰的位置影响相对较小. 如图 1(c)–(e) 所示,在枪角固定在 90° 情况下,随着入射能的增加,4 条理论曲线在 $\xi = 90^\circ$ 处峰的分布上基本相同,而在 $\xi = 45^\circ$ 和 $\xi = 135^\circ$ 处峰在分布上的差异明显,随着入射能的增加,这种差异在逐渐减小,从而与实验数据相符. 我们尤其注意到,当入射能为 44.6 eV 时,DS3C-1 曲线所给出的 $\xi = 45^\circ$ 和 $\xi = 135^\circ$ 处峰的分布与实验数据更加符合,如图 1(d) 所示.

最后,从形成的谷上看. 如图 1(d) 所示,与实验数据相比,DS3C, DS3C-2, DS3C-3 理论曲线谷的深度稍浅,而 DS3C-1 理论曲线谷的深度与实验数据最为符合,DS3C-2 次之. 与 DS3C 结果相比,DS3C-1, DS3C-2, DS3C-3 理论曲线明显改善了谷的角分布,从而与实验数据趋于符合. 如图 1(e) 所示,当入射能增加到 64.6 eV 时,4 条理论曲线均呈现出了较深的谷. 其中 DS3C-3 结果谷的深度相对最浅,与实验数据最为符合;DS3C-2 次之;DS3C-1 结果谷的深度最深,与实验数据相差最大. 同时我们也注意到:与 DS3C 结果相比,DS3C-1, DS3C-2, DS3C-3 理论曲线也都明显改善了谷的角分布,从而与实验数据趋于符合. 这说明末通道剩余离子屏蔽效应对谷的分布存在着一定的影响.

总体而言,3 种索末菲参量的修正方案对 DS3C 模型都有一定影响,改善效果各有千秋. 从总体情况看,DS3C-2 与实验符合程度最好,DS3C-1 次之,DS3C-3 最差. 是什么原因导致了各种曲线之间的差异呢? 在非共面双对称几何条件下,由于高度对

称,因而 DS3C 和 3 种修正曲线之间的本质区别在于对索末菲参量的修正以及对两个出射电子之间的排斥作用对应的 Gamow 因子^[21] G 的修正上. 为此,下面分析修正前后有效电荷和 G 的变化规律.

由方程(19)可知,作用在两个出射电子上的有效电荷为

$$Z_{\text{eff}} = Z_{\text{eff}}^{(1)} = Z_{\text{eff}}^{(2)} = Z^* - \frac{\sin\xi}{4}, \quad (29)$$

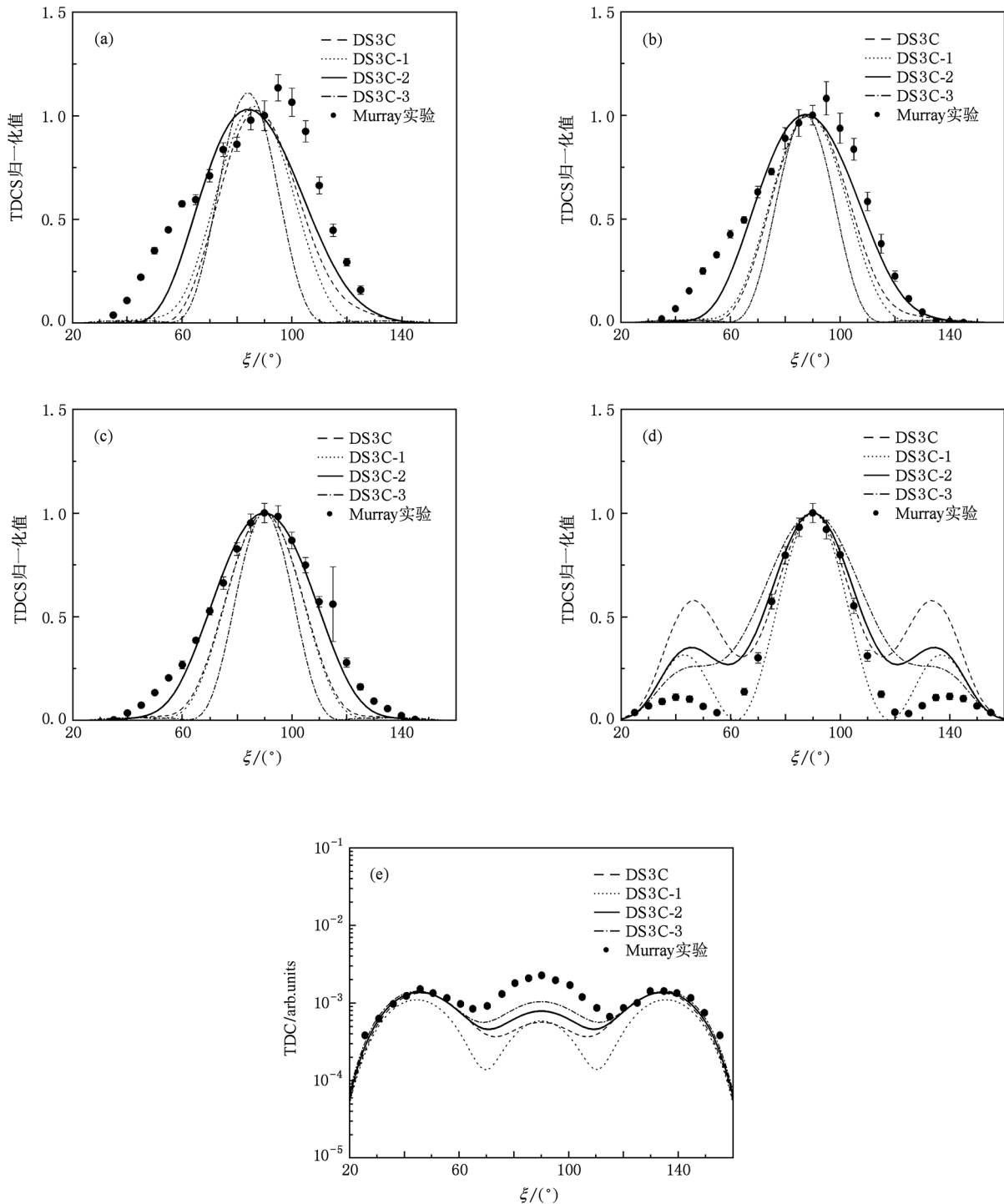


图1 非共面双对称几何条件下,不同入射能大枪角入射电子电离 He 原子的 TDCS 随出射电子散射角 ξ 的变化曲线 (a) $E_0 = 29.6 \text{ eV}, E_1 = E_2 = 2.5 \text{ eV}, \psi = 67.5^\circ$; (b) $E_0 = 29.6 \text{ eV}, E_1 = E_2 = 2.5 \text{ eV}, \psi = 80^\circ$; (c) $E_0 = 29.6 \text{ eV}, E_1 = E_2 = 2.5 \text{ eV}, \psi = 90^\circ$; (d) $E_0 = 44.6 \text{ eV}, E_1 = E_2 = 10 \text{ eV}, \psi = 90^\circ$; (e) $E_0 = 64.6 \text{ eV}, E_1 = E_2 = 20 \text{ eV}, \psi = 90^\circ$

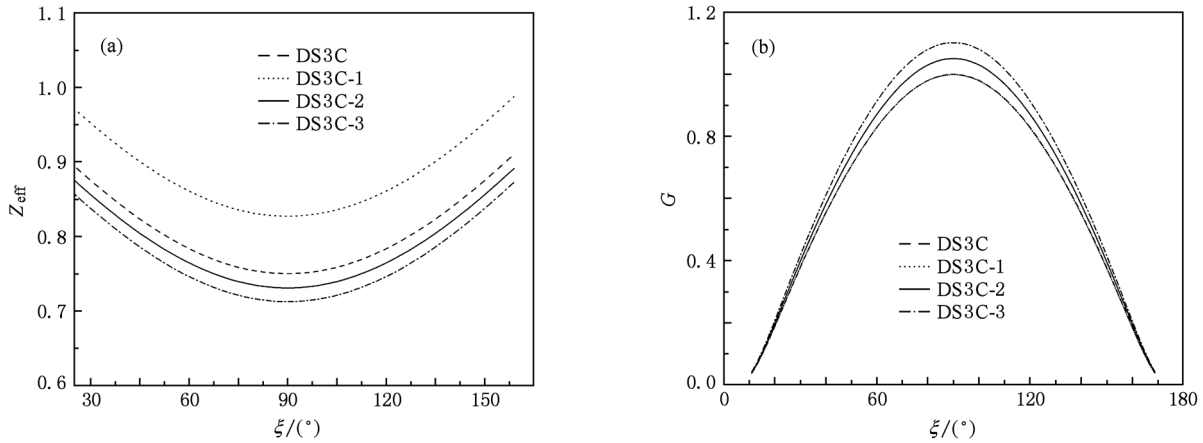


图2 图1(e)几何条件下有效电荷 Z_{eff} 和 G 随电子出射角 ξ 的变化 图标同图1. $E_0 = 64.6 \text{ eV}, E_1 = E_2 = 20 \text{ eV}, \psi = 90^\circ$ (a) $Z_{\text{eff}} - \xi$, (b) $G - \xi$

而两个出射电子之间的排斥作用对应的 G 为

$$G = \exp(-\pi\beta_{12}/2). \quad (30)$$

这里给出的有效电荷的大小描述了碰撞后两出射电子与剩余氦离子以及剩余氦离子内核与轨道电子之间屏蔽作用的强弱;而 G 更是给出了考虑各种屏蔽效应后两出射电子之间排斥作用的大小;为了更直观地反映上述3种不同修正之间的差异,我们在图2中给出了图1(e)几何条件下,修正前后各理论曲线的 G 以及作用在两出射电子上的有效电荷 Z_{eff} 随电子出射角的变化规律.

在图2(a), (b)中,4条计算曲线的有效电荷 Z_{eff} 和 G 都呈现出规律性的变化,其中DS3C曲线与DS3C-1曲线的 G 重合.图2(a)给出了有效电荷 Z_{eff} 随电子出射角 ξ 的变化规律.由图2(a)可见, ξ 从 0° 变化到 90° , 4条曲线给出的有效电荷都逐渐减小,在 $\xi = 90^\circ$ 时 Z_{eff} 达到最小值.这是因为 ξ 从 0° (即两电子沿同一方向出射)向 90° (即两电子沿相反方向出射)变化的过程中,末态两个出射电子和剩余靶核离子三体之间的各种关联效应不断变化,且当 $\xi = 90^\circ$ 时,核位于两出射电子连线的中间,此时,它们彼此间的屏蔽度达到最大,作用在两出射电子上的有效电荷 Z_{eff} 必然达到最小.由此可知,4条曲线均反映了末态连续电子间的动量关联效应,描述了第3个粒子存在对两体库仑波函数产生的影响,并表示了3个两体库仑相互作用彼此间的动力学屏蔽.

此外,在进一步考虑了末态靶核离子中剩余电子的屏蔽效应之后,图2(a)中各修正曲线的有效电荷 Z_{eff} 整体比DS3C曲线有不同程度的上升或下降.

比较各曲线在 $\xi = 90^\circ$ 处的行为,我们可清楚地看到:在DS3C和DS3C-1模型中,当 $\xi = 90^\circ$ 时,由(18)式可知索末菲参量 $\beta_{12} = 0$,而DS3C-2和DS3C-3的 β_{12}^* 由Rudge条件确定^[23],此时剩余靶核处在两出射电子连线正中间.换言之,出射的电子完全处在一个有效电荷为 $Z^* - 1/4$ 的核库仑场中.此时靶核实际的有效电荷 Z^* 的大小将对两个出射电子产生重大的影响,直接关系到TDCS截面最终的形成,在低入射能时,这种影响又尤为突出^[21-24].而我们所做的工作正是对靶核离子的有效电荷 Z^* 进行了不同程度的修正.

同时我们还注意到,各种修正也改变了两出射电子之间的关联作用.当 ξ 从 90° 减小到 0° 时,剩余靶核离子逐渐偏离两出射电子间的连线,两电子之间的相互作用逐渐增强,在 $\xi = 0^\circ$ 时达到最大.这种关联效应反映在图2(b)中: G 在 $\xi = 0^\circ$ (即两电子沿同一方向出射)达到最小值,对应于两出射电子之间最强的关联相互作用;在 $\xi = 90^\circ$ (两电子沿相反方向出射)达到最大值,对应于两出射电子之间微弱的关联作用.

结合图2(a), (b)以及图1(e)各曲线的变化规律不难发现:在非共面双对称几何条件下, G 越大,峰的幅度越高;而有效电荷 Z_{eff} 越大,峰的幅度越低.由此可见,在非共面双对称几何条件下,描述两个出射电子之间关联效应的 G 以及描述末态各粒子之间屏蔽效应的有效电荷 Z_{eff} 对最终的TDCS峰的幅度起着决定性的作用.这同时也是本文修正结果更接近实验数据的原因所在.

以上的讨论都是在枪角大于 67.5° 的几何条件

下进行的. 在小枪角情况下, 运用上述理论, 作者也做了大量的计算. 研究发现, 整体上修正后的理论曲线比未修正的理论曲线与实验结果符合的情况要好一些, 但是效果不是特别明显. 限于篇幅, 本文对小枪角入射没有给出相应的计算结果.

4. 结 论

本文在非共面双对称几何条件下, 利用 3 种不同的有效核电荷函数对 DS3C 模型中的索末菲参量

进行了修正, 详细比较和研究了索末菲参量的改变在非共面双对称几何条件下对 TDCS 所产生的影响以及产生这种影响的物理本质. 3 种索末菲参量的修正方案对 DS3C 模型都有一定影响, 改善效果各有千秋. 尽管我们利用 DS3C 模型在末通道的 3 种修正得到了与实验数据较为符合的理论曲线, 但是曲线的整体和实验数据仍然有一定的差别. 一方面可能是我们的修正函数给出的有效电荷比真实散射过程中的有效电荷偏高, 另一方面, 我们也忽略了初通道中库仑场的影响. 这些工作还有待于作进一步的研究和探讨.

- [1] Berakdar J, Briggs J S 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 3799
- [2] Chen Z J, Shi Q C, Zhang S M, Chen J, Xu K Z 1997 *Phys. Rev. A* **56** R2514
- [3] Zhou L X, Yan Y G 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 7619 (in Chinese) [周丽霞、燕友果 2008 物理学报 **57** 7619]
- [4] Wang X L, Feng H, Sun W G, Fan Q C, Zeng Y Y, Wang B 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 937 (in Chinese) [王小炼、冯 灏、孙卫国、樊群超、曾阳阳、王 斌 2010 物理学报 **59** 937]
- [5] Gao R J, Ge Z M 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 1702 (in Chinese) [高瑞军、葛自明 2010 物理学报 **59** 1702]
- [6] Murray A J, Read F H 1993 *Phys. Rev. A* **47** 3724
- [7] Murray A J, Read F H 1993 *J. Phys. B; At. Mol. Opt. Phys.* **26** L359
- [8] Brauner M, Briggs J S, Klar H 1989 *J. Phys. B; At. Mol. Opt. Phys.* **22** 2265
- [9] Zhang S M, Chen Z J, Shi Q C, Xu K Z 1997 *J. At. Mol. Phys.* **14** 457 (in Chinese) [张穗萌、陈长进、施启存、徐克尊 1997 原子与分子物理学报 **14** 457]
- [10] Berakdar J 1996 *Phys. Rev. A* **53** 2314
- [11] Zhang S M 2000 *J. Phys. B; At. Mol. Opt. Phys.* **33** 3545
- [12] Zhang S M 1999 *J. At. Mol. Phys.* **16** 527 (in Chinese) [张穗萌 1999 原子与分子物理学报 **16** 527]
- [13] Zhang S M, Wu X J 2001 *Acta Phys. Sin.* **50** 2137 (in Chinese) [张穗萌、吴兴举 2001 物理学报 **50** 2137]
- [14] Zhang S M 2003 *J. At. Mol. Phys.* **20** 247 (in Chinese) [张穗萌 2003 原子与分子物理学报 **20** 247]
- [15] Wu X J, Song J, Zhang S M 2006 *J. Anhui Norm. Univ. (Nat. Sci.)* **29** 127 (in Chinese) [吴兴举、宋 军、张穗萌 2006 安徽师范大学学报(自然科学版) **29** 127]
- [16] Liu Y B, Pang W N, Ding H B, Shang R C 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5121 (in Chinese) [刘义保、庞文宁、丁海兵、尚仁成 2005 物理学报 **54** 5121]
- [17] Liu J B, Wang Y, Zhou Y J 2007 *Chin. Phys.* **16** 72
- [18] Sun S Y, Jia X F, Shi W Q, Li X W 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 3458 (in Chinese) [孙世艳、贾祥富、师文强、李雄伟 2008 物理学报 **57** 3458]
- [19] Murray A J, Read F H, Bowring N J 1994 *Phys. Rev. A* **49** R3162
- [20] Byron J R F W, Joachain C J 1966 *Phys. Rev.* **146** 1
- [21] Zhang S M, Chen Z J, Xu K Z 1999 *Acta Phys. Sin.* **48** 453 (in Chinese) [张穗萌、陈长进、徐克尊 1999 物理学报 **48** 453]
- [22] Berakdar J, Briggs J S 1994 *J. Phys. B; At. Mol. Opt. Phys.* **27** 4271
- [23] Zhao Y, Liang W Z, Lin B 1994 *J. At. Mol. Phys.* **11** 289 (in Chinese) [赵 仪、梁万珍、林 波 1994 原子与分子物理学报 **11** 289]
- [24] Zeng J Y 1981 *Quantum Mechanics* (Beijing: Science Press) p362 (in Chinese) [曾谨言 1981 量子力学 (北京: 科学出版社) 第 362 页]
- [25] Gao K, Yang H, Wu X J, Zhang S M 2008 *J. At. Mol. Phys.* **25** 683 (in Chinese) [高 矿、杨 欢、吴兴举、张穗萌 2008 原子与分子物理学报 **25** 683]
- [26] Murray A J, Read F H, Bowring N J 1997 *J. Phys. B; At. Mol. Opt. Phys.* **30** 387

Influence of Sommerfeld parameters on triple differential cross section in non-coplanar geometry^{*}

Chen Zhan-Bin¹⁾ Yang Huan²⁾ Wu Xing-Ju²⁾ Zhang Sui-Meng^{1)2)†}

1) (College of Physics and Electrical Information, Anhui Normal University, Wuhu 241000, China)

2) (Institute of Atomic and Molecular Physics, Department of Mathematics and Physics, West Anhui University, Lu'an 237012, China)

(Received 12 April 2010; revised manuscript received 5 September 2010)

Abstract

The effective shield of residual electron in the final state of He^+ is further modified for $(e, 2e)$ processes on Helium. Three different amendments to the program are proposed in non-coplanar geometry. The effects of the Sommerfeld parameters on the triple differential cross section and the physical nature of these effects are considered.

Keywords: non-coplanar, doubly-symmetric geometry, triple-differential cross section, Sommerfeld parameter

PACS: 34. 80. Dp

^{*} Project supported by the Natural Science Foundation of Anhui Province, China (Grant No. 03406203), the Foundation for Major Research Program of Education Department of Anhui Province, China (Grant No. ZD2007002-1), the Natural Science Foundation of the Education Committee of Anhui Province, China (Grant No. 2006KJ267B), and the Foundation for Excellent Talents of Institute of Higher Education of Anhui Province, China (Grant No. 2003022).

[†] Corresponding author. E-mail: Smzhang@wxc.edu.cn