

共面不对称条件下 He 和 Ar 原子($e, 2e$)反应 过程中的极化效应和后碰撞相互作用

周丽霞[†] 燕友果

(中国石油大学(华东)物理科学与技术学院, 东营 257061)

(2008 年 5 月 3 日收到; 2008 年 8 月 8 日收到修改稿)

采用修正后的扭曲波玻恩近似(DWBA)理论, 计算了共面不对称几何条件及大能量转移和小动量转移条件下的 He($1s^2$)、Ar($3p^6$) 和 Ar($2p^6$) ($e, 2e$) 反应三重微分截面. 将理论计算结果与实验结果及由 Brauner, Briggs 和 Klar 提出的 BBK 方法、标准的 DWBA 理论计算结果进行了比较, 发现在共面不对称几何条件及大能量转移和小动量转移条件下, 极化效应和后碰撞相互作用在 He($1s^2$)、Ar($3p^6$) 和 Ar($2p^6$) 原子靶 ($e, 2e$) 反应过程中起着重要的作用.

关键词: ($e, 2e$) 反应, 极化效应, 后碰撞相互作用, 共面不对称几何条件

PACC: 3480D, 3450H

1. 引 言

($e, 2e$) 电子碰撞电离就是入射电子与靶粒子碰撞后被散射, 同时将靶粒子中的某个电子敲出的过程. 通过对散射电子和电离电子的能量和动量的同时测量能够获取靶粒子结构信息以及碰撞过程的动力学信息. 30 年来, 实验工作者进行了大量电子碰撞原子内外壳层电离动力学的研究^[1-3], 这些实验结果提供了大量研究电子与原子发生 ($e, 2e$) 反应的动力学信息, 同时也为检验理论计算方法的准确性提供了可靠的数据. 在理论上, 发展了扭曲波玻恩近似 (distorted wave Born approximation, 简记为 DWBA)^[4]、Brauner, Briggs 和 Klar 提出的 BBK 方法^[5]、收敛密耦合 (convergent close-coupling, 简记为 CCC) 理论^[6] 等模型. BBK 方法在处理低能 ($e, 2e$) 反应过程中取得了成功, 但是这种方法只能处理氢、氦及类氢、类氦离子等简单的靶粒子^[7,8]. 最为成功的是 CCC 理论, 但这种理论方法计算繁琐, 计算量很大. 较简单且应用广泛的是 DWBA 理论, 这种方法能够较好地描述中高能电子入射和大动量转移条件下各种原子外壳层电离的 ($e, 2e$) 反应三重微分截面^[9], 包含极化和后碰撞相互作用 (PCI) 后能够有效地改善低能电子入射和内层电离理论计算与实验结果的符合程度^[10,11].

实验和理论上对 He 和 Ar 原子靶的 ($e, 2e$) 反应动力学研究已进行过多次^[1,10-14], 实验条件一般选择大动量转移条件以获得较大的三重微分截面. 近期 Staicu-Casagrande 等^[15] 报道了利用高探测效率 ($e, 2e$) 反应实验装置对 He 和 Ar 原子靶进行新的实验研究, 实验条件首次选择了大能量转移和小动量转移条件. 文献 [15] 在实验上测量了 He($1s^2$), Ar($3p^6$) 和 Ar($2p^6$) ($e, 2e$) 反应的三重微分截面, 理论计算采用标准的 DWBA 理论以及 BBK 方法, 理论计算与实验结果之间存在一些差异. 本文采用包含极化和 PCI 的 DWBA 理论做了进一步研究, 通过理论计算结果与文献 [15] 实验结果的比较, 研究了极化效应和 PCI 在电子与 He 和 Ar 原子靶碰撞 ($e, 2e$) 反应过程中所起的作用.

2. 理 论

能量为 E_0 , 动量为 k_0 的入射电子与靶粒子发生碰撞, 两出射电子的能量和动量分别为 E_1, k_1 和 E_2, k_2 , DWBA 理论计算给出反应的三重微分截面为^[4]

$$\frac{d^3\sigma^{DWBA}}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1} = (2\pi)^4 \frac{k_1 k_2}{k_0} \sum_{av} [|f|^2 + |g|^2 - \text{Re}(f^* g)]. \quad (1)$$

[†] E-mail: zhoulx@upc.edu.cn

这里 \sum_{av} 表示对末态简并态求和及对初态简并态求平均,

$$f = \chi^{(-)}(k_1, r_1) \chi^{(-)}(k_2, r_2) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \chi^{(+)}(k_0, r_0) \phi_{nl}, \quad (2)$$

$$g = \chi^{(-)}(k_1, r_2) \chi^{(-)}(k_2, r_1) \left| \frac{1}{r_{12}} \right| \chi^{(+)}(k_0, r_0) \phi_{nl}, \quad (3)$$

式中 ϕ_{nl} 为靶的 nl 轨道波函数, $\chi^{(+)}$ 是处于靶原子等效局域基态势下的入射电子扭曲波, $\chi^{(-)}$ 是处于末态靶离子等效局域基态势下的两出射电子的扭曲波, $\chi^{(+)}$ 和 $\chi^{(-)}$ 都与 ϕ_{nl} 正交.

等效的局域基态势为直接势 V_D 和交换势 V_E 之和. 直接扭曲势 V_D 可表示为^[4]

$$V_D(r) = \sum_{nl} N_{nl} \int dr' [u_{nl}(r')]^2 / r_{>}, \quad (4)$$

式中 $r_{>}$ 是 r 和 r' 中的较大者, N_{nl} 是轨道 nl 的电子数. 修正的半经典交换势 V_E 可表示为^[16]

$$V_E(r) = 0.5 \left\{ E - V_D(r) + \frac{3}{10} [3\pi^2 \rho(r)]^{2/3} \right\} - 0.5 \left\{ \left[E - V_D(r) + \frac{3}{10} [3\pi^2 \rho(r)]^{2/3} \right]^2 + 4\pi \rho(r) \right\}^{1/2}, \quad (5)$$

式中 $\rho(r)$ 为电子密度. 因此等效的局域基态势(扭曲势)为

$$V_{00}(r) = V_D(r) + V_E(r). \quad (6)$$

修正后的 DWBA 理论考虑了 PCI 和极化效应. (1)式乘以 Gamow 因子 M_{ee} 考虑 PCI, M_{ee} 与文献[17]中相同. 因而 $(e, 2e)$ 反应的三重微分截面为

$$\frac{d^3 \sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1} = M_{ee} \frac{d^3 \sigma^{DWBA}}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_1}. \quad (7)$$

(6)式中再加进极化势 V_{pol} ^[18] 考虑极化效应. 极化势 V_{pol} 表示为

$$V_{pol} = -f_2(r) \frac{\alpha_1}{12r^4}, \quad (8)$$

式中 α_1 为原子的极化率, 对 He 原子和 Ar 原子, α_1 分别为 1.39 和 11.1^[19], $f_2(r)$ 是与 r 有关的衰减因子^[20],

$$f_2(r) = \frac{\int_0^r \rho(r_b) r_b^4 dr_b}{\int_0^\infty \rho(r_b) r_b^4 dr_b}. \quad (9)$$

3. 结果及讨论

图 1(a)(b)和(c)分别给出共面不对称几何条件下 $\text{He}(1s^2)$, $\text{Ar}(3p^6)$ 和 $\text{Ar}(2p^6)(e, 2e)$ 反应的实验及理论的三重微分截面. 散射电子能量 $E_a = 500$ eV, 敲出电子能量 $E_b = 205$ eV. 将入射电子方向定为 0° , 散射电子固定在 $\theta_a = -6^\circ$, 敲出电子角度 θ_b 的范围是 $0^\circ - 360^\circ$, 入射电子和两出射电子共处同一平面. 图 1 中的理论计算和实验结果已按最佳符合进行了归一, 图中点线和点划线分别为 Staicu-Casagrande 等^[15] 利用 BBK 方法和标准的 DWBA(即文献[15]中的 DWBA2, 不含极化和 PCI)理论的计算结果, 实线和虚线分别为本文采用包含极化及 PCI 和只包含 PCI 的 DWBA 理论计算结果.

共面不对称几何条件下, 低角度($\theta_b < 180^\circ$)的单次两体碰撞(binary)峰对应于电子-电子之间的两体碰撞, 高角度($\theta_b > 180^\circ$)的两次两体碰撞(recoil)峰来自于入射电子、原子核以及轨道电子发生的三体两次碰撞, 即电子首先与轨道电子相碰, 被碰出的电子又与核发生了碰撞^[20].

从图 1(a)中可以看到, $\text{He}(1s^2)$ 实验的三重微分截面给出较高的单次两体碰撞峰, 两次两体碰撞峰表现为一个平坦的区域. 文献[15]中的 BBK 方法理论计算给出了两个峰, 其中单次两体碰撞峰峰位与实验结果相比明显偏向小角度, 两次两体碰撞峰的强度则高于实验结果, 标准的 DWBA 理论计算的单次两体碰撞峰峰位也偏向小角度. 我们给出的经过极化和 PCI 修正的 DWBA 理论计算结果与实验结果比较后表明, 考虑 PCI 后, DWBA 理论的单次两体碰撞峰的强度和峰位与实验结果符合很好, 但会造成两次两体碰撞峰区域强度较实验结果略微偏高, 而极化效应对反应过程的影响不大.

图 1(b)为 $\text{Ar}(3p^6)(e, 2e)$ 反应的实验及各种理论计算的三重微分截面. 从图 1(a)可以看到, 实验结果给出三个峰, 单次两体碰撞峰分裂成了两个峰, 两次两体碰撞峰未分裂. BBK 方法理论计算结果仅给出一个峰, 标准的 DWBA 理论计算得到的第一个峰强度远大于实验结果. 本文得到的经过

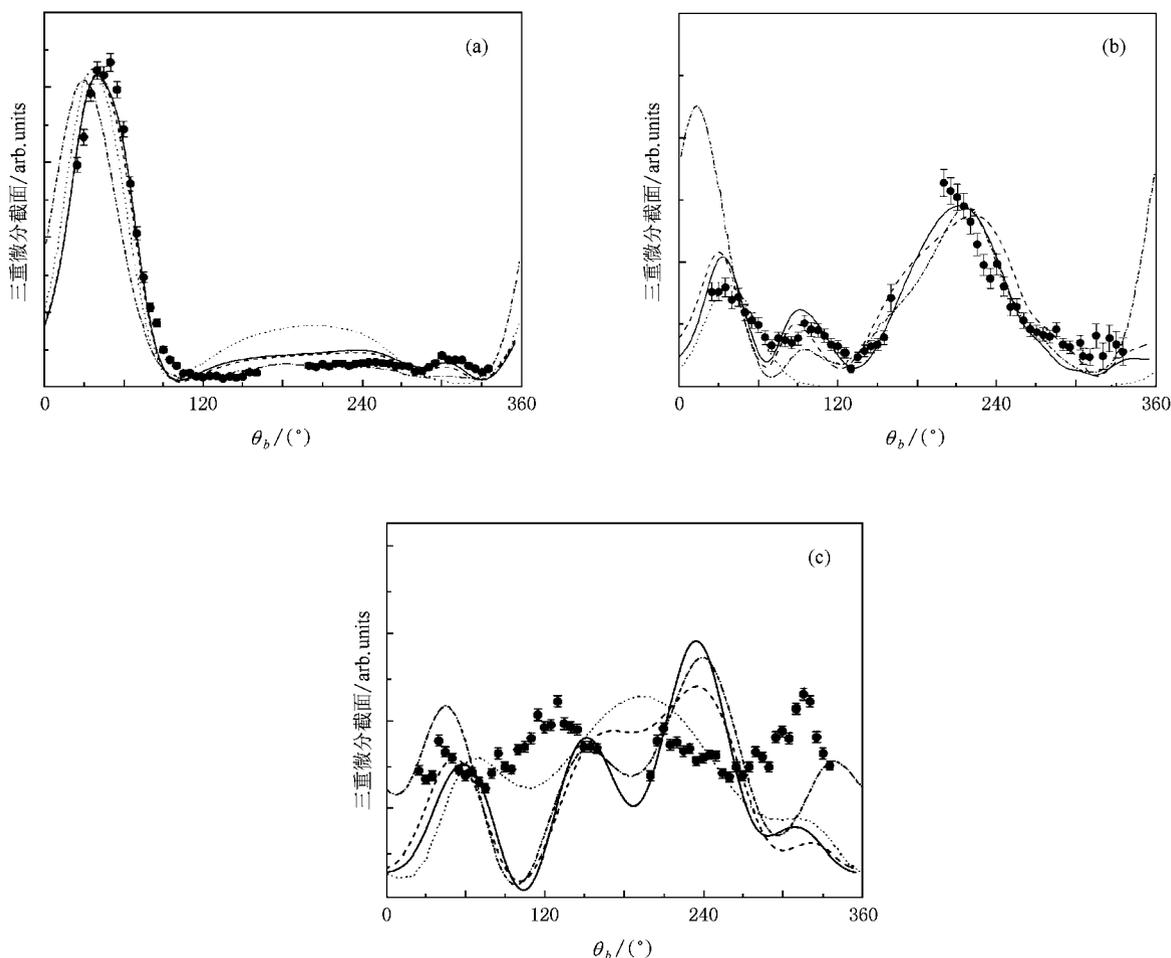


图 1 共面不对称几何条件下 $\text{He}(1s^2)$, $\text{Ar}(3p^6)$ 和 $\text{Ar}(2p^6)$ ($e, 2e$) 反应三重微分截面. 散射电子能量 $E_a = 500$ eV, 敲出电子能量 $E_b = 205$ eV, 快电子固定在 $\theta_a = -6^\circ$. 数据点为文献 [15] 中的实验值, 点线为文献 [15] 中的 BBK 方法计算结果, 点划线为文献 [15] 中的 DWBA 结果, 虚线为包含 PCI 的 DWBA 结果, 实线为包含极化和 PCI 的 DWBA 结果. (a) $\text{He}(1s^2)$ ($e, 2e$) 反应三重微分截面, (b) $\text{Ar}(3p^6)$ ($e, 2e$) 反应三重微分截面 (c) $\text{Ar}(2p^6)$ ($e, 2e$) 反应三重微分截面

PCI 修正的 DWBA 理论结果也给出三个峰, 与实验结果相比, 单次两体碰撞峰的第一个峰峰位偏向小角度, 两次两体碰撞峰的峰位又偏向大角度. 而包含极化和 PCI 的 DWBA 理论计算结果与实验结果符合较好.

图 1(c) 给出 $\text{Ar}(2p^6)$ ($e, 2e$) 反应的实验及理论的重微分截面. 从图 1(c) 可以看出, 实验的单次两体碰撞峰和两次两体碰撞峰均分裂成两个, 共四个峰. 从图 1(c) 还可以看出, 所有的理论计算结果均与实验结果差别较大. BBK 方法理论计算只给出三个峰, 其他的理论计算都给出了四个峰. 从峰位和强度上看, 包含极化和 PCI 的理论计算结果与实验结果符合最好.

4. 结 论

采用包含了 PCI、极化和 PCI 的 DWBA 理论计算了共面不对称几何条件下 $\text{He}(1s^2)$, $\text{Ar}(3p^6)$ 和 $\text{Ar}(2p^6)$ ($e, 2e$) 反应的重微分截面, 理论计算结果与文献 [15] 给出的实验结果及 BBK 方法和标准的 DWBA 理论计算结果进行了比较. 总之, 包含极化和 PCI 的 DWBA 理论计算结果与实验结果符合最好. 这表明在共面不对称几何条件及大能量转移和小动量转移条件下, 极化效应和 PCI 在电子碰撞 $\text{He}(1s^2)$, $\text{Ar}(3p^6)$ 和 $\text{Ar}(2p^6)$ 电离过程中起着重要的作用.



- [1] Murray A J , Bowring N J , Read F H 2000 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **33** 2859
- [2] Haynes M A , Lohmann B , Prideaux A , Madison D H 2003 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **36** 811
- [3] Murray A J , Read F H 2000 *Phys. Rev. A* **63** 012714
- [4] McCarthy I E 1995 *Aust. J. Phys.* **48** 1
- [5] Berakdar J , Briggs J S 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 3799
- [6] Bray I 2000 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **33** 581
- [7] Yang H , Gao K , Wu X J , Zhang S M 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 1640 (in Chinese) [杨 欢、高 矿、吴兴举、张穗萌 2008 物理学报 **57** 1640]
- [8] Yang H , Gao K , Zhang S M 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 5202 (in Chinese) [杨 欢、高 矿、张穗萌 2007 物理学报 **56** 5202]
- [9] Whelan C T , Allan R J , Walters H R J , Zhang X 1993 (e , 2e) and Related Processes (Dordrecht : Kluwer Academic) pp1—32
- [10] Wu X J , Chen X J , Shan X , Chen L Q , Xu K Z 2004 *Chin. Phys.* **13** 1857
- [11] Hu X Y , Zhou Y J , Ke Y Q , Nan G J 2005 *Phys. Lett. A* **334** 192
- [12] Rioualy S , Rouvellouy B , Pochaty A , Rasch J , Walters H R J 1997 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **30** L475
- [13] Khajuria Y , Chen L Q , Chen X J , Xu K Z 2002 *Phys. Rev. A* **65** 042706
- [14] Chen Z J , Madison D H 2005 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **38** 4195
- [15] Staicu-Casagrande E M , Catoire F , Naja A , Ren X G , Lahmam-Bennani A , Nekkab M , Dal Cappello C , Bartschat K , Whelan C T 2007 *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* **161** 27
- [16] Gianturco F A , Scialla S 1987 *J. Phys. B : At. Mol. Phys.* **20** 3171
- [17] Rasch J , Whelan C T , Allan R J , Lucey S P , Walters H R J 1997 *Phys. Rev. A* **56** 1379
- [18] Rioualy S , Pochatt A , Geicbart F , Allant R J 1995 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **28** 5317
- [19] Bransden B H 1970 *Atomic Collision Theory* (New York : Benjamin) p223
- [20] Gianturco F A , Tang K T , Toennies J P , De Fazio D , Rodriguez-Ruiz J A 1995 *Z. Phys. D* **33** 27

Polarization effect and post-collisional interaction in (e , 2e) reaction process for He and Ar in coplanar asymmetric geometry

Zhou Li-Xia[†] Yan You-Guo

(College of Physics Science and Technology , China University of Petroleum (East China) , Dongying 257061 , China)

(Received 3 May 2008 ; revised manuscript received 8 August 2008)

Abstract

The (e , 2e) triple differential cross sections for He(1s²), Ar(3p⁶) and Ar(2p⁶) have been calculated using the modified distorted wave Born approximation (DWBA) in coplanar asymmetric geometry. The kinematics employs large energy transfer and is close to minimum momentum transfer. The theoretical results have been compared with those of the experiment , the Brauner , Briggs and Klar (BBK) method and the standard DWBA calculation. It is shown that the polarization and post-collisional interaction effects are very important in coplanar asymmetric (e , 2e) reaction with special kinematics for He(1s²), Ar(3p⁶) and Ar(2p⁶).

Keywords : (e , 2e) reaction , polarization effect , post-collisional interaction , coplanar asymmetric geometry

PACC : 3480D , 3450H

[†] E-mail : zhoulx@upc.edu.cn