

氢原子 ( $e, 2e$ ) 反应中二重微分截面的理论研究\*杨欢<sup>1)2)†</sup> 张穗萌<sup>2)</sup> 邢玲玲<sup>3)</sup> 吴兴举<sup>2)</sup> 袁好<sup>2)</sup>

1) (皖西学院基础实验中心, 六安 237012)

2) (皖西学院材料与化工学院原子与分子物理研究所, 六安 237012)

3) (皖西学院机械与电子工程学院, 六安 237012)

(2011年4月13日收到; 2011年10月13日收到修改稿)

用 BBK 模型和修正后的 BBK 模型, 计算了入射能为 15.6 eV, 17.6 eV, 25 eV, 40 eV 的电子入射电离氢原子的二重微分散射截面. 本文把计算结果与测量的实验结果进行比较, 分析了截面的结构, 系统研究了交换效应对截面的贡献.

关键词: DS3C 模型, 二重微分散射截面, 交换效应

PACS: 34.80.Dp, 34.50.Fa

## 1 引言

近年来, 电子入射单电离原子的 ( $e, 2e$ ) 反应作为原子与分子物理研究的一个热点, 在实验和理论研究两方面, 都不断得到国内、外学者的广泛关注<sup>[1-10]</sup>. 在理论研究中出现了许多新颖的理论方法, 其中由 Brauner, Briggs 和 Klar 提出的 BBK 模型<sup>[11]</sup> 是近年这一研究领域内公认的最佳模型之一. 初期的 BBK 模型考虑了三个独立两体库仑子系统的相互作用, 因而解表示为三个库仑波函数的乘积, 通常称这个解为 3C 波函数, 早期 BBK 模型又被称为 3C 模型. 随后 Berakdar 等人<sup>[12]</sup> 以及张穗萌所在理论小组<sup>[13]</sup> 针对 3C 模型在低入射能时的计算结果与实验测量结果不一致的缺点, 对 3C 波函数进行了修正, 由于这种修正表示了三个两体库仑相互作用彼此间的动力学屏蔽 (DS), 因此修正后的波函数称为 DS3C 波函数, 修正后的 BBK 模型又被称为 DS3C 模型, 使得 BBK 模型逐步走向完善.

电子入射单电离原子的 ( $e, 2e$ ) 反应中二重微

分散射截面 (DDCS) 对于等离子物理、天体物理和辐射物理的研究都有重要的意义, 同时 DDCS 也为我们提供了详细地比较理论和实验结果符合程度的有效方法, 有力的推动着理论研究的发展. 但是, 据我们所知: 目前有关 ( $e, 2e$ ) 反应 DDCS 的实验和理论研究的报道还相对较少<sup>[14-19]</sup>, 并且理论结果与实验结果的数据也相差较大. BBK 模型和 DS3C 模型作为氢原子和氦原子 ( $e, 2e$ ) 反应研究领域内公认的最佳模型, 主要被用于氢原子和氦原子 ( $e, 2e$ ) 反应中三重微分散射截面 (TDCS) 的理论研究<sup>[7-13,20]</sup>. 前一阶段, 在完成电子入射单电离 He 原子 DDCS 的理论推导和编程计算的基础上, 我们运用 BBK 模型和 DS3C 模型对氢原子 ( $e, 2e$ ) 反应中的 DDCS 进行了理论研究, 较好的解释了国外学者给出的电子入射单电离 He 原子 DDCS 的测量结果<sup>[21,22]</sup>. 氢原子作为最简单的靶原子, 一直是实验工作者和理论工作者关注的一个热点, 并且随着氢原子 ( $e, 2e$ ) 反应中 DDCS 实验研究的不断深入, 一些理论模型相继被运用于氢原子 ( $e, 2e$ ) 反应中 DDCS 的理论研究中<sup>[14,19]</sup>. 但是, 据我们所知, 目前尚未见运用 BBK 模型尤其是 DS3C 模型

\* 安徽省高等学校省级自然科学研究项目 (批准号: KJ2011B208)、安徽省教育厅重大科研项目基金 (批准号: ZD2007002-1)、六安市定向委托皖西学院市级研究项目 (批准号: 2010LW026)、安徽省教育厅自然科学研究重点项目 (批准号: KJ2012A275) 和安徽省高等学校省级优秀青年人才基金项目 (批准号: 2011SQRL147) 资助的课题.

† E-mail: hyang@wxc.edu.cn

对氢原子 (e, 2e) 反应中 DDCS 进行详细理论研究的报道.

本文在完成了氢原子 (e, 2e) 反应中二重微分散射截面的理论推导和程序编写的基础上, 用 3C 模型和 DS3C 模型对入射能分别为 15.6 eV, 17.6 eV, 25 eV, 40 eV 的几何条件下电子离化氢原子的二重微分散射截面进行了计算, 对截面的结构和交换效应进行了深入的分析 and 探讨.

## 2 理论计算

假设入射电子的动量为  $\mathbf{k}_0$ , 与 H 原子碰撞后散射电子和敲出电子的动量分别为  $\mathbf{k}_1$  和  $\mathbf{k}_2$ . 考虑两个出射电子的交换效应后, 这一 (e, 2e) 过程的 TDCS 为:

$$\begin{aligned} & \frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE} \\ &= (2\pi)^4 \frac{k_1 k_2}{k_0} \left[ \frac{3}{4} |f(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) - f(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1)|^2 \right. \\ & \quad \left. + \frac{1}{4} |f(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) + f(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1)|^2 \right], \quad (1) \end{aligned}$$

式中  $\Omega_1, \Omega_2$  是接收动量为  $k_1$  和  $k_2$  两个电子的立体角;  $f(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2)$  和  $f(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1)$  分别为直接散射振幅和交换散射振幅, 分别由下式给出:

$$f(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) = \left\langle \psi_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}^-(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | V_i | \psi_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right\rangle, \quad (2)$$

$$f(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1) = \left\langle \psi_{\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1}^-(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) | V_i | \psi_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \right\rangle, \quad (3)$$

$V_i$  是 H 原子初通道微扰相互作用势, 具体形式为:

$$V_i = -\frac{1}{r_1} + \frac{1}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \quad (4)$$

为了得到某一个出射电子的二重微分散射截面随出射角的变化, 可由方程 (1) 对另一个电子在全部角度范围内作积分而得到, 即:

$$(\text{DDCS})_1 = \frac{d^2\sigma}{d\Omega_1 dE} = \int \frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE} d\Omega_2 \quad (5)$$

或者

$$(\text{DDCS})_2 = \frac{d^2\sigma}{d\Omega_2 dE} = \int \frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE} d\Omega_1. \quad (6)$$

系统的初态波函数为入射电子波函数与靶原子波函数的乘积, 即:

$$\psi_{\mathbf{k}_0}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = (2\pi)^{-\frac{3}{2}} e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}_1} \phi_i(\mathbf{r}_2), \quad (7)$$

其中, 我们用平面波表示入射电子波函数;  $\phi_i(\mathbf{r}_2)$  表示氢原子基态波函数.

末态由两个出射电子与剩余  $\text{H}^+$  组成, 其波函数用 BBK 波函数表示:

$$\begin{aligned} & \psi_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \\ &= (2\pi)^{-3} e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2} C(\alpha_1, \mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1) \\ & \quad \times C(\alpha_2, \mathbf{k}_2, \mathbf{r}_2) C(\alpha_{12}, \mathbf{k}_{12}, \mathbf{r}_{12}), \quad (8) \end{aligned}$$

其中:

$$\begin{aligned} & C(\alpha_j, \mathbf{k}_j, \mathbf{r}_j) \\ &= \exp\left(-\frac{\pi}{2}\alpha_j\right) \Gamma(1 - i\alpha_j) {}_1F_1[i\alpha_j; \\ & \quad 1; -i(k_j r_j + \mathbf{k}_j \cdot \mathbf{r}_j)], \quad (9) \end{aligned}$$

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

$$\alpha_1 = -\frac{1}{k_1}, \quad \alpha_2 = -\frac{1}{k_2}, \quad \alpha_{12} = \frac{1}{2k_{12}}, \quad (10)$$

其中:  $\mathbf{k}_{12} = \frac{1}{2}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$ ; 由上述  $\alpha_i$  ( $i = 1, 2, 12$ ) 得到的末态波函数称为 3C 波函数<sup>[12]</sup>, 所以 BBK 模型又被称为 3C 模型.

文献 [13] 中在 Berakdar 工作的基础上, 从动量相关的角度入手所导出的任意几何条件下的索末菲参量为:

$$\beta_1 = -\frac{Z - \frac{2k_{12}k_1^2}{(k_1 + k_2)^3} \left[ \frac{3 + \cos^2[4\xi(k_2)]}{4} \right]^2}{k_1}, \quad (11)$$

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

$$\begin{aligned} \beta_{12} = & \frac{1}{2k_{12}} \left\{ 1 - \frac{4k_{12}^2}{(k_1 + k_2)^3} \left[ k_1 \left[ \frac{3 + \cos^2[4\xi(k_2)]}{4} \right] \right. \right. \\ & \left. \left. + k_2 \left[ \frac{3 + \cos^2[4\xi(k_1)]}{4} \right] \right]^2 \right\}, \quad (13) \end{aligned}$$

其中:

$$\xi(k_i) = \cos^{-1} \left[ \frac{k_i}{\sqrt{k_1^2 + k_2^2}} \right]. \quad (14)$$

由上述  $\beta_i$  ( $i = 1, 2, 12$ ) 得到的末态波函数称为 DS3C 波函数, 修正后的 BBK 模型又被称为 DS3C 模型. 而对索末菲参量的这种修正反映了末态波函数中的动量相关效应.

本文在考虑两个出射电子交换效应的基础上, 用 3C 模型和 DS3C 模型对入射能分别为 15.6 eV, 17.6 eV, 25 eV, 40 eV 几何条件下电子离化氢原子的 DDCS 进行了计算; 计算结果分别记为 3C, DS3C; 为了对交换效应进行研究, 我们还在上述

几何条件下同时给出了直接散射振幅和交换散射振幅单独生成截面, 相应结果分别记为 DIRECT, EXCHANGE.

### 3 结果与讨论

实验和理论结果如图 1、图 2、图 3 所示. 其中图 1 给出了入射能  $E_i = 15.6 \text{ eV}$ ,  $E_i = 17.6 \text{ eV}$  的几何条件下电子离化氢原子的 DDCS 随散射角  $\theta_1$  变化的关系曲线; 图 2 和图 3 分别给出了入射能  $E_i = 25 \text{ eV}$ ,  $E_i = 40 \text{ eV}$  的几何条件下电子离化氢原子的 DDCS 随散射角  $\theta_1$  变化的关系曲线.

#### 3.1 3C 模型和 DS3C 模型比较

如图 1(a) 所示, 当  $E_i = 15.6 \text{ eV}$ 、散射电子能量  $E_1 = 1.2 \text{ eV}$  时, 实验数据呈现较为明显的双峰结构. DS3C 模型给出的理论曲线呈现明显的双峰结构, 与实验数据一致, 但是截面的幅度, 尤其是向前峰 ( $\theta_1 = 0^\circ - 40^\circ$ ) 的幅度低于实验数据所给结果. 如图 1(b) 所示, 当  $E_i = 15.6 \text{ eV}$ ,  $E_1 = 1.8 \text{ eV}$

时, DS3C 模型给出的理论曲线仍然呈现双峰结构, 在截面的结构上与实验数据较为符合, 但是所给出的截面幅度远低于实验数据给出结果, 尤其是向前峰的幅度与实验数据相差较大. 如图 1(a), (b) 所示, 当入射能固定不变时, 随着散射电子能量的增加, 实验数据给出的向前峰相对幅度逐渐增加, 向后峰 ( $\theta_1 = 100^\circ - 180^\circ$ ) 相对幅度呈现递减趋势. DS3C 模型给出的向前峰相对幅度在随  $E_1$  的增加而逐渐递增, 向后峰相对幅度在随散射电子能量  $E_1$  的增加呈现递减趋势, 与实验数据呈现出相同的规律性; 但是 DS3C 模型与实验数据在向前峰幅度的差别在随  $E_1$  的增加而增大. 3C 模型在图 1(a)、图 1(b) 几何条件下给出的理论曲线并不呈现峰谷结构, 并且截面的幅度远远小于实验数据给出的结果, 与实验数据明显不符, 因此 3C 模型对于截面的描述是完全失败的. 如图 1(c) 所示, 当  $E_i = 17.6 \text{ eV}$ ,  $E_1 = 2 \text{ eV}$  时, DS3C 模型与实验数据所给出的截面均呈现双峰结构, 并且 DS3C 模型给出的理论曲线无论在峰谷的角分布上还是在截面的幅度上均与实验数据吻合的很好. 如图 1(d) 所示, 当  $E_1$  增加到  $3.75 \text{ eV}$  时, DS3C 模型给出了与

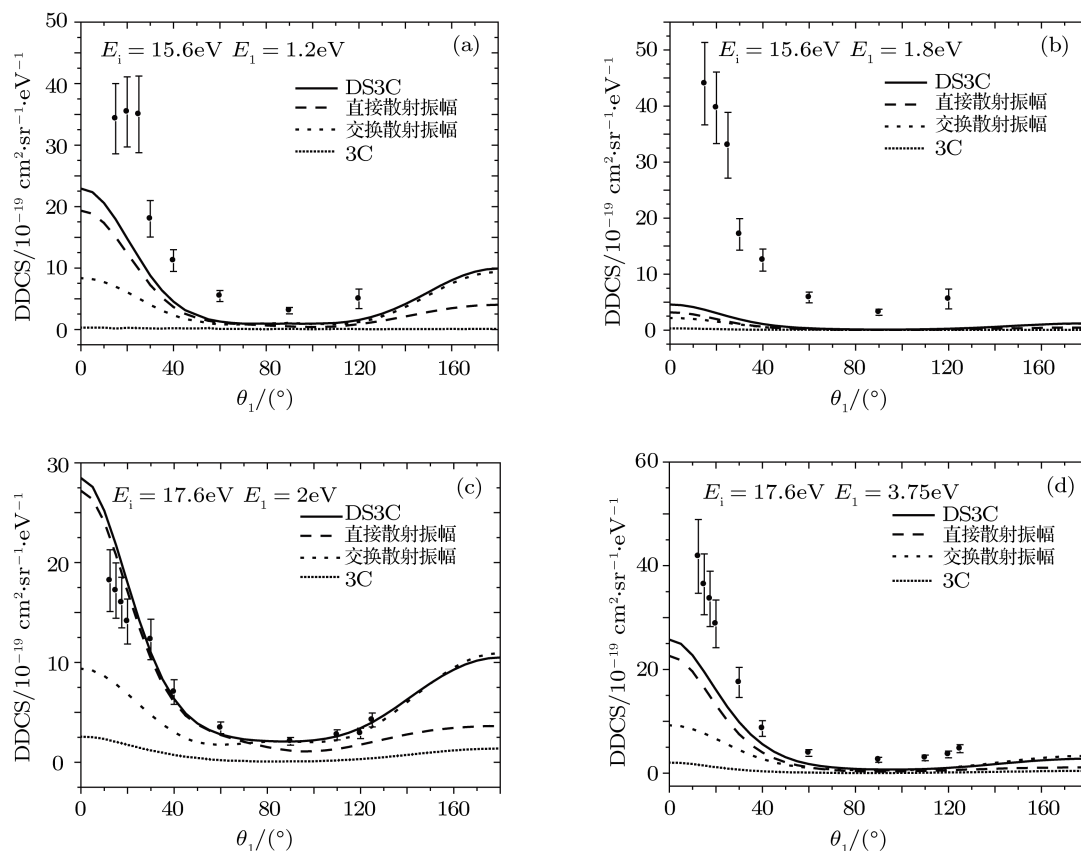


图 1 电子离化氢原子的 DDCS 随散射角  $\theta_1$  变化的关系曲线, 实心点为实验结果<sup>[17]</sup> (a)  $E_i = 15.6 \text{ eV}$ ,  $E_1 = 1.2 \text{ eV}$ ; (b)  $E_i = 15.6 \text{ eV}$ ,  $E_1 = 1.8 \text{ eV}$ ; (c)  $E_i = 17.6 \text{ eV}$ ,  $E_1 = 2 \text{ eV}$ ; (d)  $E_i = 17.6 \text{ eV}$ ,  $E_1 = 3.75 \text{ eV}$

实验数据相吻合的峰谷结构, 虽然此时 DS3C 模型给出的向前峰幅度低于实验数据所给结果, 但是与  $E_1 = 15.6$  eV, 尤其是  $E_1 = 1.8$  eV 几何条件相比, 此时 DS3C 模型与实验数据在整体上的吻合程度有了明显的改善. 如图 1(c), (d) 所示, 随着散射电子能量的增加, DS3C 模型给出的向前峰相对幅度在逐渐增强, 向后峰相对幅度在逐渐减弱, 与实验数据保持一致; 并且当  $E_1 = 17.6$  eV 时, DS3C 模型

与实验数据在向前峰的吻合程度在随  $E_1$  的增加而变差, 与  $E_1 = 15.6$  eV 时呈现相同的规律性. 3C 模型计算结果虽然在图 1(c)、图 1(d) 几何条件下开始给出了一定的峰谷结构, 但是所给截面的幅度在整体上与实验数据相差较大, 对于实验数据的描述仍然是失败的. 由此可见: 早期对 BBK 模型的修正对于氢原子 DDCS 的计算是十分有效的, 并且在阈值能量附近这种修正效果更加明显.

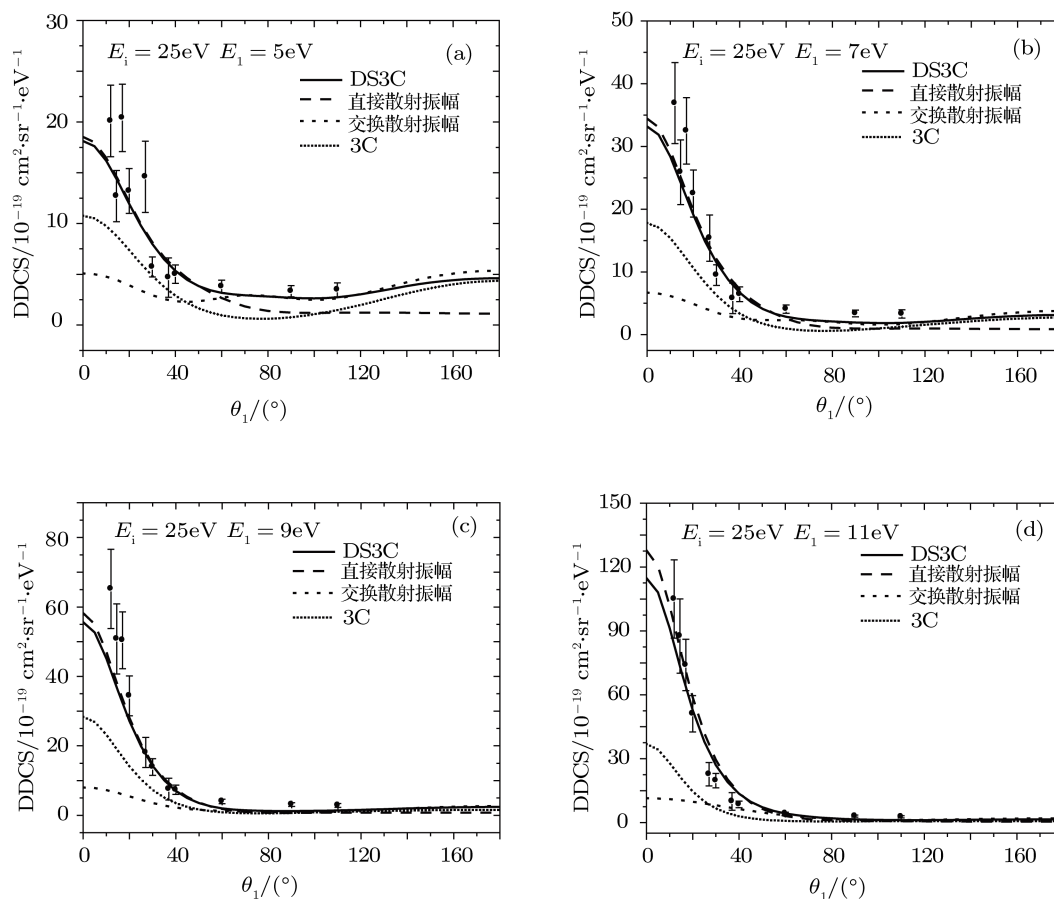


图 2  $E_i = 25$  eV, 电子电离氢原子的 DDCS 随散射角  $\theta_1$  变化的关系曲线, 实心点为实验结果<sup>[17]</sup>. 其中散射电子能量 (a)  $E_1 = 5$  eV; (b)  $E_1 = 7$  eV; (c)  $E_1 = 9$  eV; (d)  $E_1 = 11$  eV

如图 2 所示, 当  $E_1 = 25$  eV 时, DS3C 模型给出的理论曲线无论在截面的结构还是在截面的幅度上均与实验数据吻合的很好; 并且随着  $E_1$  的增加, 向前峰的相对幅度逐渐增加, 向后峰的相对幅度在递减, 与实验数据呈现出相同的规律性. 然而此时 DS3C 模型与实验数据在向前峰幅度的差别并不随  $E_1$  的增加而呈现出任何的规律性. 3C 模型虽然给出了与实验数据相吻合的截面结构, 但是截面幅度始终明显低于实验数据, 并且与实验数据在向前峰幅度的差别随  $E_1$  的增加而逐渐增大. 另外, 比较图 1、图 2 我们注意到: DS3C 模型计算结

果与实验数据在向前峰幅度的吻合程度在随入射能  $E_i$  的增加而逐渐提高.

如图 3(a) 所示, 当  $E_i = 40$  eV,  $E_1 = 2$  eV 时, DS3C 模型给出的理论曲线呈现三峰结构, 向后峰 ( $\theta_1 = 100^\circ - 180^\circ$ ) 幅度较高, 向前峰 ( $\theta_1 = 0^\circ - 40^\circ$ ) 和中间峰 ( $\theta_1 = 40^\circ - 100^\circ$ ) 幅度较低. 其中中间峰和向后峰与实验数据吻合的较好, 而向前峰的幅度明显低于实验数据, 并且两者相差较大. 如图 3(b) 所示, 当  $E_i = 40$  eV,  $E_1 = 5$  eV 时, DS3C 模型给出的理论曲线仍然呈现三峰结构, 其中中间峰和向后峰稍低于实验数据给出结果, 向前峰幅

度与实验数据相差较大. 如图 3(c) 所示, 当  $E_1$  增加到 10 eV 时, DS3C 模型给出的中间峰和向后峰能够与实验数据较好的吻合, 但是两者在向前峰的幅度上仍然存在较大差异. 我们尤其注意到: 上述 DS3C 模型与实验数据在向前峰幅度上的巨大差异与图 1、图 2 所反映的入射能越高, DS3C 模型与实验数据在向前峰幅度的吻合程度越好的规律性相背离. 为了对理论与实验之间的这种差异进行研究, 我们参考了在  $E_i = 40$  eV,  $E_1 = 2$  eV, 5eV, 10 eV 的几何条件下其他理论模型计算结果, 发现 ECS 模型 (exterior complex scaling model) 以

及在原子 (e, 2e) 反应研究领域内取得巨大成功的 CCC 模型 (convergent close-coupling model) 均给出了与本文 DS3C 模型相似的理论曲线, 并且与实验数据所给出的向前峰幅度同样存在较大差异 [17]. 由此我们怀疑上述差异可能是由于实验测量的不准确造成的, 关于这一点还有待于实验工作者在该几何条件下作进一步的测量, 以给出判决性评判. 如图 3(d) 所示, 当  $E_i = 40$  eV,  $E_1 = 15$  eV 时, DS3C 模型给出的理论曲线不仅在截面的峰、谷结构上, 而且在截面的幅度上都与实验数据几乎完全重合.

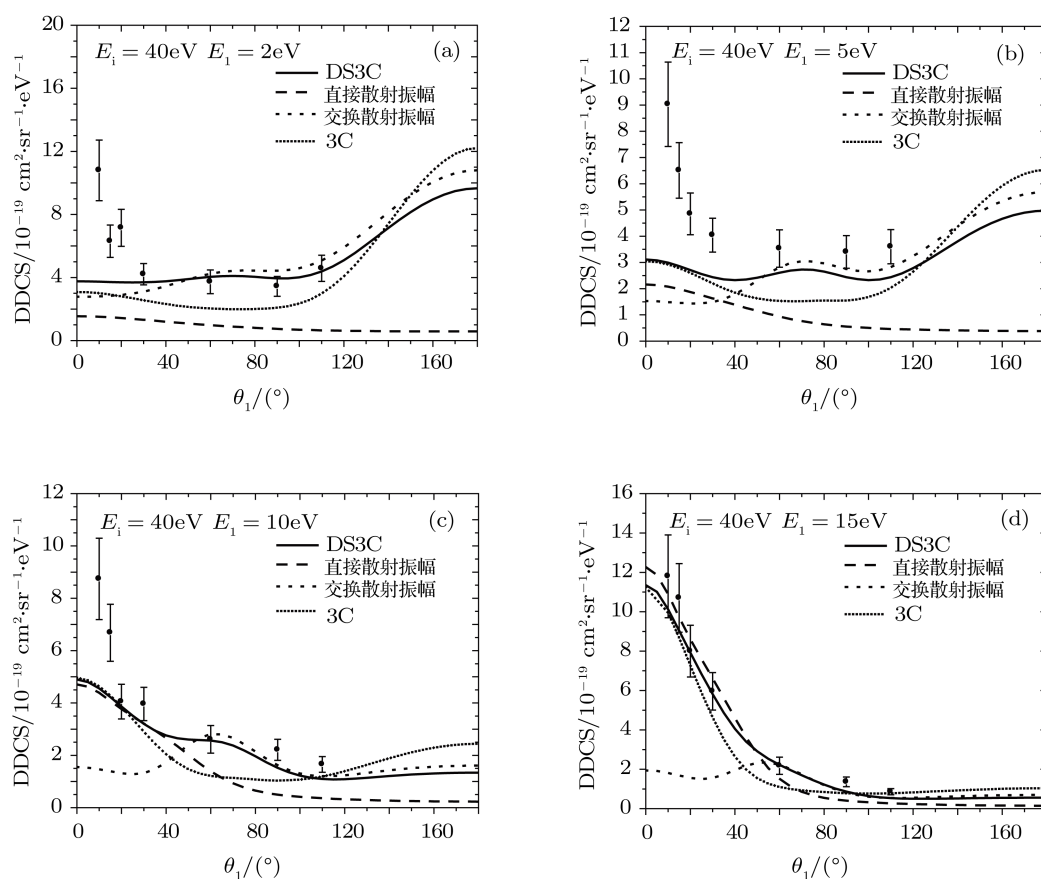


图 3  $E_i = 40$  eV, 电子离化氢原子的 DDCS 随散射角  $\theta_1$  变化的关系曲线, 实心点为实验结果 [17]. 其中散射电子能量 (a)  $E_1 = 2$  eV; (b)  $E_1 = 5$  eV; (c)  $E_1 = 10$  eV; (d)  $E_1 = 15$  eV

另外, 由图 3 可见, 入射能固定不变时, 随着  $E_1$  的增加, DS3C 模型给出的向前峰相对幅度在逐渐增大, 中间峰和向后峰的相对幅度在逐渐降低, 当  $E_1$  增加到 15 eV 时, 中间峰和向后峰几乎完全消失, 与实验数据给出的截面幅度变化规律相一致. 如图 3(a)—(c) 所示, 3C 模型在  $E_i = 40$  eV, 较低散射能 ( $E_1 \leq 10$  eV) 几何条件下仅给出了双峰结构, 始终没有给出中间峰, 并且在截面的幅度上

与实验数据相差较大; 随着  $E_1$  的增加, 向前峰的相对幅度呈现递增趋势, 向后峰的相对幅度呈现递减趋势, 与实验数据以及 DS3C 模型呈现出的规律性相吻合; 如图 3(d) 所示, 当  $E_1$  增加到 15 eV 时, 3C 模型给出的理论曲线无论在峰谷结构上还是截面幅度上都与实验数据以及 DS3C 模型结果均能较好的吻合.

综合图 1、图 2、图 3 可见: 随着入射能的降

低, DS3C 模型与 3C 模型给出的理论曲线在整体上的差别在逐渐增大. 这主要是因为末态三体之间的屏蔽效应在随入射能的减小而逐渐增强<sup>[9]</sup>, DS3C 模型通过引入有效索末菲参量对 3C 模型进行了修正, 而这种修正表示了末态三个两体库仑相互作用彼此间的动力学屏蔽, 从而使得 DS3C 模型对 3C 模型的修正效果在随入射能的降低而增强. 另外我们注意到: 在各种几何条件下, DS3C 模型给出的理论曲线在  $\theta_1 = 40^\circ - 180^\circ$  范围内与实验数据能够较好的吻合. 相比之下, 在  $\theta_1 = 0^\circ - 40^\circ$  范围内 DS3C 模型所给结果与实验数据存在一定差异; 尤其是在较低入射能时, 这种差异更加明显. 通过研究我们认为: 这可能是由于初通道短程效应的影响造成的, 在低入射能时初通道短程效应对截面有较强影响, 尤其是在阈值附近, 初通道短程效应的影响更加显著<sup>[23]</sup>. DS3C 模型用平面波表示入射电子波函数, 并没有考虑初通道入射电子与中性原子之间的短程相互作用效应, 从而导致较低入射能时 DS3C 模型所给截面与实验数据在  $\theta_1 = 0^\circ - 40^\circ$  范围内存在较大差异.

### 3.2 交换效应的理论研究

如图 1(a), (c) 所示, 考虑交换效应后的 DS3C 模型所给出的向前峰主要来自于直接散射幅的贡献, 而向后峰则主要由交换散射幅决定. DS3C 与直接散射幅单独生成截面 DIRECT 在向前峰和向后峰幅度上均存在一定的差异, 并且两者在向后峰幅度的差别要明显大于两者在向前峰幅度的差别. 由此可见, 在如此低的入射能下, 交换效应对截面幅度的影响是不可忽略的, 并且交换效应对向后峰幅度的影响更强. 由图 1(a), (b), 图 1(c), (d) 可见, 当入射能固定不变时, 随着  $E_1$  的增加, DS3C 与 DIRECT 在向后峰幅度上的差别在逐渐减小, 同时交换散射幅单独生成截面 EXCHANGE 所给出的向后峰也在随  $E_1$  的增加而逐渐减弱. 但是 DS3C 与 DIRECT 在向前峰幅度上的差别并不随  $E_1$  的增加而呈现规律性变化. 这些现象说明: 当入射能为 15.6 eV 和 17.6 eV 时, 交换效应对于向后峰幅度的影响在随散射电子能量的增加而递减; 交换效应对于向前峰幅度的影响始终存在, 但是这种影响并不随散射电子能量的增加呈现明显的规律性.

如图 2(a) 所示, 当入射能增加到 25 eV,  $E_1 =$

5 eV 时, DS3C 模型给出截面呈现明显的双峰结构, 并且向前峰仍然来自于直接散射幅的贡献, 而向后峰则由交换散射幅决定. DIRECT 结果仅给出了向前峰, 截面呈现明显的单峰结构. DS3C 与 DIRECT 所给出的向前峰几乎完全重合, 而两者在向后峰附近截面幅度上存在明显差异. 这说明, 当  $E_i = 25$  eV,  $E_1 = 5$  eV 时, 交换效应对向前峰幅度的影响较小, 对向后峰结构以及幅度均存在较强影响. 由图 2 可见, 随着  $E_1$  的增加, DS3C 与 DIRECT 在向前峰幅度上的差别在逐渐增大, 在向后峰附近截面幅度上的差别在逐渐减小, EXCHANGE 所给出的向后峰也在随  $E_1$  的增加而逐渐减弱. 由此可见: 当入射能增加到 25eV 时, 随着散射电子能量的增加, 交换效应对向前峰幅度的影响在增强, 对向后峰幅度的影响在逐渐减弱.

如图 3(a) 所示, 当入射能为 40 eV,  $E_1 = 2$  eV 时, DIRECT 结果仅给出了向前峰的雏形, 截面呈现明显的单峰结构, 与实验数据明显不符; DS3C 模型给出的理论曲线呈现三峰结构, 其中中间峰和向后峰来自于交换效应的贡献, 向前峰则由直接散射幅决定. DS3C 与 DIRECT 无论在截面的结构上还是幅度上均存在很大差异. 这说明, 此时交换效应对截面的幅度以及结构均存在较强影响, 并且这种影响是不可忽略的. 由图 3 可见, 随着  $E_1$  的增加, DS3C 与 DIRECT 在截面幅度以及结构上的差别在逐渐的减小, EXCHANGE 所给出的截面相对幅度也呈现递减趋势. 由此可见, 当入射能为 40 eV 时, 交换效应对截面的幅度以及结构的影响在随  $E_1$  的增加而减弱.

## 4 结论

本文用 3C 模型和 DS3C 模型对氢原子的 DDCS 进行了理论计算, 对截面的结构以及交换效应进行了系统的研究. 结果发现: 在本文各种几何条件下, DS3C 模型所给出的理论曲线均能与实验数据很好的符合, 而 3C 模型对于 DDCS 的描述基本上是失败的, 这说明 DS3C 模型对 3C 模型的修正对于氢原子的 DDCS 计算也是十分有效的, 并且入射能越低, 修正效果越明显. 交换效应对截面的影响, 尤其是对向后峰的影响始终是不可忽略的, 并且这种影响随着散射电子能量的降低而逐渐增强.

- [1] Ren X G, Senftleben A, Pflüger T, Dorn A, Bartschat K, Ullrich J 2010 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43** 35202
- [2] Gao R J, Gei Z M 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 1702 (in Chinese) [高瑞军, 葛自明 2010 物理学报 **59** 1702]
- [3] Sun S Y, Jia X F, Miao X Y, Zhang J F, Xie Y, Li X W, Shi W Q 2009 *Chin. Phys. B* **18** 2744
- [4] 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]
- [5] 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]
- [6] Dürr M, Dimopoulou C, Najjari B, Dorn A, Bartschat K, Bray I, Fursa D V, Chen Z J, Madison D H, Ullrich J 2008 *Phys. Rev. A* **77** 32717
- [7] Catoire F, Staicu-Casagrande E M, Nekkab M, Cappello C D, Bartschat K, Lahmam-Bennani A 2006 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **39** 2827
- [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] 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]
- [10] Yang H, Zhang S M, Wu X J 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 6938 (in Chinese) [杨欢, 张穗萌, 吴兴举 2009 物理学报 **58** 6938]
- [11] Brauner M, Briggs J S, Klar H 1989 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **22** 2265
- [12] Berakdar J, Briggs J S 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 3799
- [13] Zhang S M 2000 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **33** 3545
- [14] Isaacs W A, Baertschy M, Mccurdy C W, Rescigno T N 2001 *Phys. Rev. A* **63** 030704
- [15] Childers J G, James K E, Hughes M, Bray I, Baertschy M, Khakoo M A 2003 *Phys. Rev. A* **68** 030702
- [16] Bray I, Fursa D V, Stelbovics A T 2003 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **36** 2211
- [17] Childers J G, James K E, Bray I, Baertschy M, Khakoo M A 2004 *Phys. Rev. A* **69** 022709
- [18] Schow E, Hazlett K, Childers J G, Medina C, Vitug G, Bray I, Fursa D V, Khakoo M A 2005 *Phys. Rev. A* **72** 062717
- [19] Colgan J, Pindzola M S 2006 *Phys. Rev. A* **74** 012713
- [20] Chen Z J, Ni Z X, Shi Q C, Xu K Z 1998 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **31** 3803
- [21] Zhang S M, Wu X J, Sun R, Yang H, Gao K, Zhou J 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 6378 (in Chinese) [张穗萌, 吴兴举, 孙瑞, 杨欢, 高矿, 周军 2007 物理学报 **56** 6378]
- [22] Zhang S M, Wu X J, Sun R, Yang H, Gao K, Zhou J 2008 *J. At. Mol. Phys.* **25** 887 (in Chinese) [张穗萌, 吴兴举, 孙瑞, 杨欢, 高矿, 周军 2008 原子与分子物理学报 **25** 887]
- [23] Zhang S M, Zhang Y, Wu X J, Song J 2006 *J. At. Mol. Phys.* **23** 636 (in Chinese) [张穗萌, 张玉, 吴兴举, 宋军 2006 原子与分子物理学报 **23** 636]

# A theoretical study on double differential cross sections for (e, 2e) process of hydrogen\*

Yang Huan<sup>1)2)†</sup> Zhang Sui-Meng<sup>2)</sup> Xing Ling-Ling<sup>3)</sup> Wu Xing-Ju<sup>2)</sup> Yuan Hao<sup>2)</sup>

1) (*The Center of Basic Experiment, West Anhui University, Lu'an 237012, China*)

2) (*Institute of Atomic and Molecular Physics, School of Materials and Chemical Engineering, West Anhui University, Lu'an 237012, China*)

3) (*School of Mechanism and Electrical Engineering, West Anhui University, Lu'an 237012, China*)

(Received 13 April 2011; revised manuscript received 13 October 2011)

## Abstract

The double differential cross sections for electron impact ionization of hydrogen at incident energies of 15.6 eV, 17.6 eV, 25 eV and 40 eV are calculated by use of BBK model and modified BBK model. The results of the present work are compared with the absolute experimental data. The structure of the cross sections is analysed and the contributions of exchange effects to cross sections are discussed.

**Keywords:** DS3C model, double differential cross sections, exchange effects

**PACS:** 34.80.Dp, 34.50.Fa

---

\* Project supported by the Natural Science Research Program of the Higher Education Institutions of Anhui Province (Grant No. KJ2011B208), the Foundation for Major Research Program of Education Department of Anhui Province (Grant No. ZD2007002-1), the Municipal Level Research Program from Lu'an City Directive Entrusted to West Anhui University (Grant No. 2010LW026), the Key Research Program of the Higher Education Institutions of Anhui Province (Grant No. KJ2012A275) and the Foundation for Outstanding Young Scientists of the Higher Education Institutions of Anhui Province, China (Grant No. 2011SQRL147).

† E-mail: hyang@wxc.edu.cn