

文章编号: 1007- 4627(2002) 增刊- 0023- 03

Ag⁺ (4d¹⁰) 离子三重微分截面的研究^y

陈丽清, Y. Khajuria, 陈向军, 徐克尊

(中国科学院中国科技大学选键化学重点实验室, 中国科技大学近代物理系, 安徽 合肥 230027)

摘要: 用自旋平均静态交换势下的三体扭曲波波恩近似计算了 d 轨道电子(Ag⁺ (4d¹⁰)) 在共面非对称几何条件下的三重微分截面, 结果表明在高入射能的条件下, 随散射电子角度 θ_a 的增加, binary 峰和 recoil 峰分裂的个数都会增加, 电子的电离振幅会随之下降, d 电子的三重微分截面比 s, p 电子的复杂.

关键词: 三体扭曲波波恩近似; 共面非对称几何; binary 峰; recoil 峰

中图分类号: O562.1 文献标识码: A

1 引言

Ehrhardt 等^[1,2] 在共面非对称几何条件下改变被敲出电子的角度 θ_b, 固定其它碰撞参数, 测量出氦原子 He(2s²) 的三重微分截面(TDCS), 发现三重微分截面在 θ_b<0° 和 >0° 的角度范围内, 各有一个峰: binary 峰和 recoil 峰, 认为分别由入射电子与出射电子间两体碰撞和入射电子与核间反冲碰撞造成的. 还发现 binary 峰峰位随散射电子角度 θ_a 增加和散射电子能量 E_a 的减少而移向更高出射电子角度. 后又测量了 Ar(3p⁶) 的三重微分截面^[3], 同样也得到了 binary 峰与 recoil 峰. 在文献[1, 2] 中 s 电子两峰均为单峰, 但在文献[3] 中 p 电子的 binary 峰分裂成两个极大, recoil 峰较 He(2s²) 的窄, 但不分裂. Khajuria 等^[4] 用三体扭曲波波恩近似计算了 p 电子(Na⁺, K⁺) 在高入射能(E₀=1000 eV) 的三重微分截面, 发现 binary 峰与 recoil 峰均可分裂成两个, 同样也发现当 θ_a 增加, 两峰峰位会向更高 θ_b 角移动. 本工作也用了三体扭曲波波恩近似计算了 d 电子(Ag⁺ (4d¹⁰)) 在高入射能(E₀=1000 eV) 的三重微分截面, 首次发现 d 电子的 binary 峰与 recoil 峰分裂个数远多于 s 和 p 电子的, 峰形也比 s 和 p 电子的复杂.

2 理论

三重微分截面反映了电子与靶碰撞时发生的

(e, 2e) 碰撞, 也就是一个能量为 E₀、动量为 K₀ 的入射电子与靶粒子碰撞产生能量为 E₁、动量为 K₁ 的散射电子和能量为 E₂、动量为 K₂ 的碰出电子的这一反应发生的几率. 我们可认为这一碰撞是靶电子被入射电子激发电离的非弹性碰撞, 散射电子和碰出电子与靶粒子的相互作用势分别为远距离库吸引势 V₁ 和 V₂, 这里不考虑自旋轨道耦合. 用自旋平均静态交换势下的三体扭曲波波恩近似计算所得的三重微分截面:

$$\frac{d^3 \sigma}{d \Omega_1 d \Omega_2 dE_1} = N_{ee} (2\pi)^4 \frac{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2}{k_0} \sum_{\omega} (|f|^2 + |g|^2 - \text{Re}(f^* g)), \quad (1)$$

其中

$$N_{ee} = \frac{\gamma}{e^\gamma - 1}, \quad \gamma = \frac{2\pi}{|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2|}, \quad (2)$$

$$g \equiv \langle x^{(-)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_2) x^{(-)}(\mathbf{k}_2, \mathbf{r}_1) \cdot |V_{12}| x^{(+)}(\mathbf{k}_0, \mathbf{r}_1) \Psi_{nl} \rangle, \quad (3)$$

$$f \equiv \langle x^{(-)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1) x^{(-)}(\mathbf{k}_2, \mathbf{r}_2) \cdot |V_{12}| x^{(+)}(\mathbf{k}_0, \mathbf{r}_1) \Psi_{nl} \rangle, \quad (4)$$

其中 N_{ee} 是 Gamov 系数, 考虑了碰撞后相互作用, Σ 是对终态求和对初态求平均(Σ 是对终态求和,

^y 收稿日期: 2002-03-05; 修改日期: 2002-05-01

* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10134010, 19974040)

作者简介: 陈丽清(1977-), 女(汉族), 安徽安庆人, 硕士研究生, 从事原子分子物理研究.

ω 是对初态求平均), V_{12} 是入射电子与靶电子间的相互作用势 $\frac{1}{|r_1 - r_2|}$; ϱ 是入射电子与靶电子间的直接电离振幅, f 是入射电子与靶电子间的交换电离振幅, Ψ_{nl} 是靶的 nl 轨道的波函数, $x^{(+)}$ 表示处于靶离子自旋平均交换势下的入射电子, $x^{(-)}$ 表示处于终态靶离子自旋平均交换势下的电子. 自旋平均静态交换势为

$$V_E(r) = 0.5[E + V_D(r)] - 0.5\{[E + V_D(r)]^2 - 2\pi\varrho(r)\}^{\frac{1}{2}}, \quad (5)$$

直接扭曲势为

$$V_D(r) = \frac{\sum_{nl} dr' [u_{nl}(r')]^2}{r}, \quad (6)$$

3 计算结果与讨论

我们用以上方法计算了 d 电子($\text{Ag}^+ (4d^{10})$)在共面非对称几何条件下的三重微分截面(TDCS), 电子入射能 $E_0 = 1000$ eV, 固定 E_a , θ_a 和 E_b , 改变 θ_b , 计算结果见图 1.

图 1(a) 中 $E_a = 10$ eV, recoil 峰在 3 个不同的 θ_a 角度下始终分裂为两个, 而 binary 峰在 $\theta_a = 7^\circ$ 未分裂, $\theta_a = 8^\circ$ 分裂为两个, $\theta_a = 12^\circ$ 分裂为 3 个. 图 1(b) 中 $E_a = 100$ eV, recoil 峰在 $\theta_a = 12^\circ$ 分裂为两个, 在 $\theta_a = 18.4^\circ$ 分裂为 3 个, binary 峰在 $\theta_a = 12^\circ$ 分裂为 3 个, 在 $\theta_a = 18.4^\circ$ 分裂为 4 个. 可见当散射电子能量一定时, 随 θ_a 增加, binary 峰和 recoil 峰分裂的峰数都会增加, 且电子的电离振幅会随之下降. 图 1(c) 固定 $\theta_a = 5^\circ$, 在 $E_a = 10$ 和 20 eV 时, recoil 峰分裂为两个, binary 峰为单峰. 在 $E_a = 30$ eV 时, recoil 峰为单峰, binary 峰分裂为两个. 所以在 θ_a 一定时, binary 峰和 recoil 峰的分裂峰数的增减与电子的电离振幅随 E_a 的增加变化不同, 即不随 E_a 单方向变化.

由上可知, d 电子的峰形比 s 和 p 电子的复杂, 分裂的峰数要多于 s 和 p 电子的, 在某些碰撞参数下分裂峰数可达 4 个之多. H. Ehrhardt 等在文献 [3] 中曾解释 s 电子两峰不分裂和 p 电子的 binary 峰分裂为两个极大是由于 s 和 p 电子动量空间波函数形状的差别造成的—— p 电子动量空间波函数出现一个极大. 在 d 电子情况下, 它的波函数的形状比 s 和 p 电子的都要复杂, 所以 d 电子峰分裂情况也应该比 s 和 p 电子的复杂.

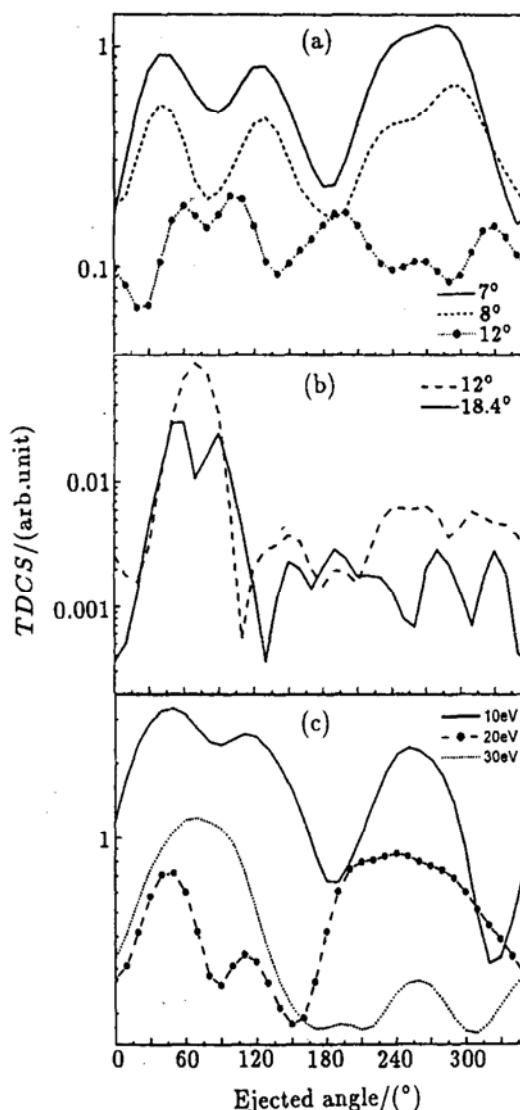


图 1 $\text{Ag}^+ (4d^{10})$ 在共面非对称条件下的 TDCS(参见文中所述)

参考文献

- [1] Ehrhardt H, Schulz M, Tekaat T, et al. Ionization of Helium: Angular correlation of the scattering and ejected electron [J]. Phys Rev Lett, 1969, 22: 89.
- [2] Ehrhardt H, Hesselbacher K H, Jung K, et al. Collisional Ionization

- of Helium by 250 eV Electrons: Experiments with completely determined kinematics [J]. J Phys B: Atom Mol Phys, 1972, 5: 2 107.
- [3] Ehrhardt H, Hesselbacher K H, Jung K, et al. Electron Impact Ionization of Argon: Measurement of triple differential cross sections [J].

- J Phys B: Atom Mol Phys, 1974, 7: 69.
[4] Khajuria Y, Tripathi D N. Geometry Effects on the (e, 2e) Triple

- Differential Cross Sections of Li^+ , Na^+ and K^+ [J]. Phys Rev, 1998, A59: 1 197.

Research of Triple Differential Cross Sections of Ag^+ ($4d^{10}$) *

CHEN Li-qing, Y. Khajuria, CHEN Xiang-jun, XU Ke-zun

(Department of Modern Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230027, China)

Abstract: The three-body distorted-wave Born approximations with spin-averaged static exchange potential have been used to calculate the electron-impact triple-differential ionization cross sections(TDCS) of $4d$ orbital (Ag^+ ($4d^{10}$)) in coplanar asymmetric geometry. At high incident energy($E_0 = 1\ 000$ eV), ionization amplitude of Ag^+ decreases with increase of scattered angle(θ_a) and the shape of the binary peak and recoil peak is more complicated than s - and p -electron: binary and recoil peaks of d -electron split into many small peaks. It may be caused by the difference in shape of wavefunction. The shape of the d -electron wavefunction is more complicated than that of the s and p electron wavefunctions.

Key words: three-body distorted-wave Born approximation; coplanar asymmetric geometry; binary peak; recoil peak

* Foundation item: National Natural Science Foundation of China (10134010, 19974040)