

中低能入射电子与氦离子碰撞的(e, 2e)反应三重微分截面*

贾祥富 潘念东

(山西师范大学物理系 临汾 041004)

陈长进 徐克尊

(中国科学技术大学近代物理系 合肥 230026)

摘要 利用 Berakdar 和 Briggs 对 BBK 波函数 Sommerfeld 参数的修正结果(即考虑第三个粒子存在对两个粒子间相互作用的影响),并考虑了入射道的库仑相互作用及出射电子的交换对称性,计算了在共面-等能分享-固定相对角度几何情况下,入射能量分别为:58.4、68、81.6、108.8 和 174.4 eV 的 $\text{He}^+(e, 2e)$ 反应三重微分截面. 结果表明,在较低碰撞能量散射中,入射道库仑场对两体碰撞起主要作用.

关键词 He^+ 靶 (e, 2e) 反应 三重微分截面

分类号 O562.5

1 引言

近年来,人们从理论和实验两方面对电子碰撞原子电离(e, 2e)过程进行了广泛的研究,取得了很大成就. 然而,对电子与离子(e, 2e)反应,无论是实验还是理论,研究的还很少. 因为它是原子物理中非常重要的一个基本过程,在天体物理、等离子体物理、X 光激光、核聚变等高新技术领域中具有极强的应用背景,已引起了许多理论物理学家和实验物理学家的极大关注^[1]. 近十几年里,人们在这一领域研究较多的是电子碰撞引起离子电离和激发的总截面或能量微分截面^[1~3]. 众所周知,最能详细反映这一过程动力学行为的是三重微分截面(以后简称 TDCS). 尽管目前文献上还没有这方面的实验研究报告,但相信现代测量技术与手段的不断提高,将使进行这种反应的实验研究已不是很遥远的事了. 所以,现在或许是从理论上进行详细计算与研究的适当时机. 在已有的理论工作^[4,5]中,文献[4]并未考虑在电子碰撞类氢离子电离的末态波函数中电子间的关联效应,不满足三体库仑渐近边界条件. 而献文[5]的工作基于成功的理论^[6]模型,提供了电子碰撞类氢离子(e, 2e)反应较为可靠的 TDCS. 但由于

仅适应于高度不对称几何情况,而使低能对称能量分享几何的应用受到了限制. 电子碰撞 He^+ 的电离机制是一个到目前为止还无法精确求解的连续态三体问题, Brauner 等人提出了用具有对称形式的波函数来描述这个三体库仑连续态^[7](以后简称为 BBK 波函数). 得到了比较满意的结果,其重要性已由 Berakdar 等人^[8]详细阐述. 此模型的突出特点是,在同一理论框架内处理所有末态粒子,详细地考虑了入射电子和敲出电子之间的关联效应,而且满足适当的三体库仑渐近边界条件,这些都是预言可靠电离截面的最重要的因素. 对中高能以上的入射能量计算结果和实验结果符合得很好^[7]. 另一方面,由于渐近行为的能量无关性,致使低能情况也可给出有意义的结果或较好的定性说明^[9]. 尤其是最近 Berakdar 的出色工作^[10],修正了第三个粒子存在对两个粒子之间相互作用强度影响的 Sommerfeld 参数后,使修正后的 BBK 波函数可在入射粒子接近阈能时,氢原子和氦原子在(e, 2e)反应时的计算结果与实验结果符合得相当好^[11~13],同时也有效地改善了 BBK 波函数在低能时的不足. 本研究小组在前期工作^[14]的基础上,利用文献[11~13]的

* 国家自然科学基金资助课题.
1997 - 09 - 18 收稿.

理论工作,考虑入射道离子靶的库仑相互作用及出射道的交换效应,选择出射电子在共面等能分配、固定相对角度(即两出射电子互相垂直)的几何条件下,计算了低能(电离阈能以上)电子碰撞 He⁺(e, 2e)反应的三重微分截面.并对结果进行了一些必要的讨论.

2 理论模型

电子与离子(e, 2e)反应的 TDCS 定义为

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_2} = (2\pi)^4 \frac{k_1 k_2}{k_i} |T_{fi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_i)|^2, \quad (1)$$

此处 \mathbf{k}_1 、 \mathbf{k}_2 和 \mathbf{k}_i 分别是散射电子、电离电子和入射电子的动量. Ω_1 和 Ω_2 是散射电子和电离电子的立体角, E_2 是电离电子的出射能量. 离子的(e, 2e)反应跃迁矩阵元定义为

$$T_{fi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_i) = \langle \Psi_f^- | V_i | \Psi_i^+ \rangle, \quad (2)$$

V_i 表示入射电子与靶离子的相互作用势

$$V_i = \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_1}, \quad (3)$$

其中, $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, \mathbf{r}_1 和 \mathbf{r}_2 是入射电子和散射电子相对于靶离子的位置矢量.

如考虑出射电子的交换效应,可引入交换算符

$$P_{12} T_{fi}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_i) = T_{fi}(\mathbf{k}_2, \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_i). \quad (4)$$

单态和三重态跃迁矩阵元分别为

$$\begin{aligned} T_s &= (1 + P_{12}) T_{fi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_i), \\ T_t &= (1 - P_{12}) T_{fi}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_i), \end{aligned} \quad (5)$$

从而,考虑交换效应后的 TDCS 为

$$\begin{aligned} \frac{d^3\sigma}{d\Omega_1 d\Omega_2 dE_2} &= (2\pi)^4 \frac{k_1 k_2}{k_i} \left(\frac{1}{4} |T_s|^2 + \right. \\ &\quad \left. \frac{3}{4} |T_t|^2 \right). \end{aligned} \quad (6)$$

考虑散射体系的初态波函数 Ψ_i^+ 是类氢离子基态波函数 $\Phi_i(r_2)$ 和入射电子的库仑波函数 $F_c(\mathbf{k}_i, \mathbf{r}_1)$ 的乘积

$$\Psi_i^+ = F_c(\mathbf{k}_i, \mathbf{r}_1) \Phi_i(r_2), \quad (7)$$

其中,入射电子用库仑波来描述是因为入射离子和屏蔽的靶离子存在长程库仑相互作用,其形式可表示为

$$F_c(\mathbf{k}_i, \mathbf{r}_1) = (2\pi)^{-3/2} e^{\pi\alpha_i/2} \Gamma(1 - i\alpha_i) e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_1} \cdot$$

$$F_1[i\alpha_i; 1; i(k_i r_1 - \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{r}_1)], \quad (8)$$

其中, $\alpha_i = (z-1)/k_i$, z 是靶核电荷数.

末态波函数 Ψ_f^- 是三体问题薛定谔方程满足入射波边界条件的解. 本文使用如下经 Berakdar^[13] 等人修正后的 BBK 近似波函数^[7]

$$\begin{aligned} \Psi_f^- &= (2\pi)^{-3} e^{i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{r}_1} e^{i\mathbf{k}_2 \cdot \mathbf{r}_2} C(\alpha_1, \mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1) \cdot \\ &\quad C(\alpha_2, \mathbf{k}_2, \mathbf{r}_2) C(\alpha_{12}, \mathbf{k}_{12}, \mathbf{r}_{12}), \end{aligned} \quad (9)$$

式中, $\mathbf{k}_{12} = (\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)/2$. 库仑部分波函数定义为

$$\begin{aligned} C(\alpha, \mathbf{k}, \mathbf{r}) &= e^{\pi\alpha/2} \Gamma(1 + i\alpha) F_1[-i\alpha; 1; \\ &\quad -i(kr + \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})], \end{aligned} \quad (10)$$

其中 $\alpha_i = \alpha_i(k_1, k_2, k_{12})$ ($i=1, 2$ 和 12) 为 Sommerfeld 参数. 在等能情况下, $k_1 = k_2 = k$, 则有 $\alpha_1 = z_1/k_1 = z_2/k_2 = \alpha_2$ 和 $\alpha_{12} = z_{12}/2k_{12}$, 对类氢离子有

$$\begin{aligned} z_{12}(k_1, k_2) &= (1 - \sin^2\theta \alpha^{\cos\theta}) \alpha^{\sin\theta(0.5+0.127)}, \\ z_1 = z_2 &= -z + \frac{1 - z_{12}}{4\sin\theta}, \end{aligned} \quad (11)$$

此时将 BBK 称为 DSBBK. 因子 $a = E/(E + 0.5)$, 而 E 是以原子单位表示的入射电子超出电离能的能量, $\theta = (\cos^{-1} \hat{\mathbf{k}}_1 \cdot \hat{\mathbf{k}}_2)/2$, 变化从 $\pi/2$ (两电子沿相反方向出射) 到零度 (两电子沿同一方向出射). 当 $\theta = \pi/2$ 时, $\alpha_{12} = 0$. 核处在两出射电子的连线之间, 电子-电子相互作用完全归结为有效电子与核的相互作用. 当 θ 从 $\pi/2$ 减小到零度时, 核逐渐偏离电子间的连线, 电子之间的相互作用逐渐增强, 在 $\theta=0$ 时达到最大, 即未屏蔽的情况. 文献^[13] 的结果已经证明了这种考虑的正确性.

将(7)和(9)式代入(6)式,进行必要的数学推导后,可简化为一个关于实参数空间的三维积分^[14]. 最后应注意的是,由碰撞体系的动量守恒,靶核的反冲动量

$$\mathbf{k}_{ion} = \mathbf{k}_i - \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2. \quad (12)$$

可提供鉴别(e, 2e)过程的有关信息(已假设靶离子最初是静止的). 显然,它是散射角度 θ_1 和敲出电子角度 θ_2 的函数.

3 结果和讨论

以上述公式为基础,已经对电子碰撞 $\text{He}^+(e, 2e)$ 反应做了一些典型的数值计算. 计算过程中,选择共面、出射电子等能分享和固定相对出射角度的碰撞几何,即 $k_1 = k_2$ 和 $k_1 \cdot k_2 = 0$. 取 k_i 为极轴方向,所有夹角以次为参考,散射电子的散射角 θ_1 顺时针为正,敲出电子的射角度 θ_2 逆时针为正. 计算结果如图

1 所示. 径向方向代表 TDCS,极角代表敲出电子的角度. 碰撞的能量(注意 He^+ 的电离能为 54.4 eV)从 58.4 eV ($E_1 = E_2 = 2$ eV)增加到 174 eV ($E_1 = E_2 = 60$ eV). 结果表明,TD-CS 关于出射电子角度 $\theta = 45^\circ$ 是对称的,角分布随入射能量的提高由双纽线过渡为单叶线,对称轴上的 TDCS 也在不断增加.

最近, Berakdar 和 Briggs^[13] 已经指出了

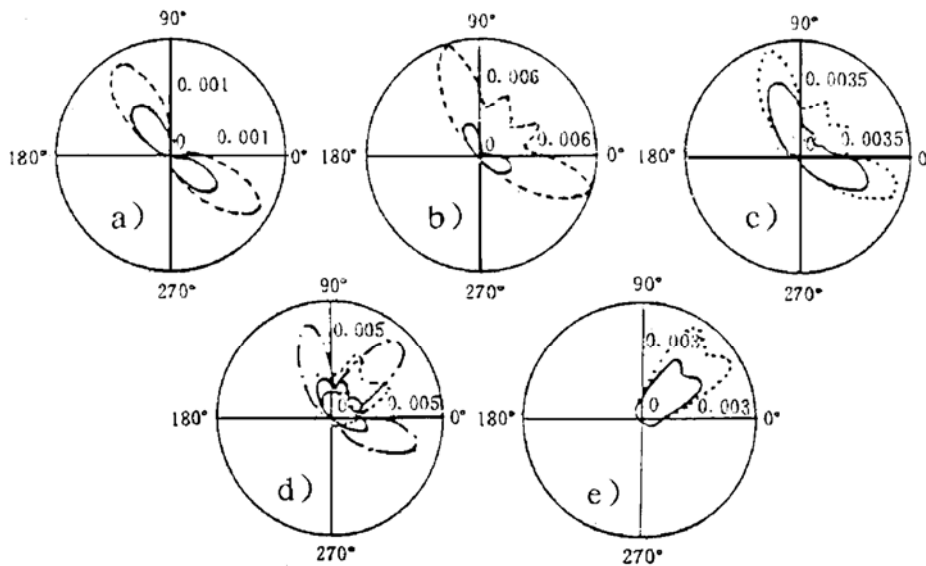


图 1 共面-等能分配-固定相对角度几何,入射能量 E_i 分别为(a) 58.4 eV, (b) 68.0 eV, (c) 81.6 eV, (d) 108.8 eV, (e) 174.4 eV 的电子碰撞 He^+ 的电离 TDCS. 实线代表本文理论计算结果,点线代表用平面波代替入射电子在初道的库仑波的结果,点划线表示单态散射的 TDCS,短划线表示三重态射的 TDCS

导致这些结构变化的原因,大体可将其归结为下面四种效应:(1)入射电子和靶离子之间的两体碰撞,核为旁观者;(2)入射电子、电离电子和靶离子之间的二次两体碰撞(这两种效应在现在的碰撞几何条件下有较好的体现);(3)当两出射电子的相对速度很小时,库仑态密度(CDS)因子导致 TDCS 为零.对本文固定的入射能量,CDS 不依赖于两电子的出射角度;(4)对在某些碰撞几何中,各散射振幅之间的干涉效应导致极小甚至为零的 TDCS. 另外,根据文献[13],不考虑自旋观测的 TDCS 的某些结构,则上述出自于单态和三重态散射的不同比率.

根据这些效应,从本文的计算结果不难

看出,对接近电离阈能的入射能量 58.4 eV (如图 1a),在 $\theta > 90^\circ$ 处有两个极大值,近似地位于 135° 和 315° (方向相反). 对现在选定的碰撞几何条件,则表示在接近阈能时的碰撞中,两出射电子之间的连线与入射电子方向平行时,是一优先的辐射方向. 在 $\theta = 45^\circ$ (对应于两体碰撞)和 225° (二次两体碰撞)有两极小值. 随着入射能量的提高,两极大值不断靠近. 表明当入射能量超出 178.4 eV 时(如图 1),敲出电子沿 $\theta = 45^\circ$ 出射的几率趋于最大,而在大于 90° 的方向几乎没有电子出射. 同时,从图 1 可看出,随着入射能量的增加,大于 90° 的出射电子几率不断减少,两体碰撞 ($\theta_2 = 45^\circ$) 逐渐加强,这表明了入射能量增加

时,沿入射方向动量转移的一种趋势,使得电子向前辐射不断增强.

在图 1 中也给出了单态(点划线)和三重态(长短划线)散射对截面的贡献,对其它图示情况类似计算的也表明,两体碰撞主要是单态散射的贡献,三重态散射在 $\theta_2 = 45^\circ$ 处消失. 值得一提的是,对氢原子情况,三重态散射乘以大于 1 的因子后,与实验结果符合得很好^[13]. 所以在统计平均中,单态和三重态散射的不同权重决定了 TDCS 的分布形状.

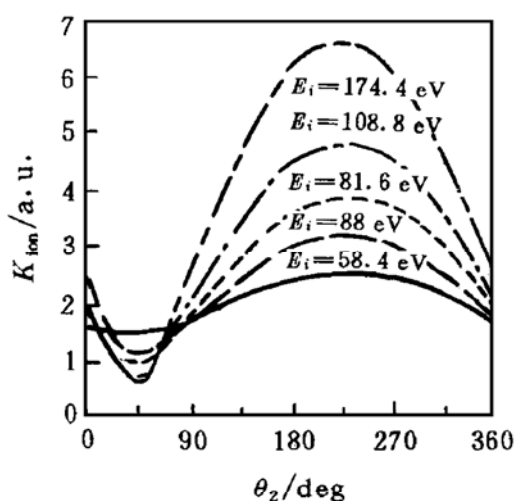


图 2 在图 1 各入射能量条件下 He^{++} 反冲动量的角度分布,纵坐标为核的反冲动量 K_{ion} ,各条曲线上方的能量对应于相应的入射能量

应该注意到是,从图 1 可以看出,入射电子用库仑波或平面波表示对两体范围的影响较大,而对二次两体碰撞的影响较小. 这主要是在低能碰撞时,有较小的出射电子速度,虽然 Briggs^[15]确认了在二次两体碰撞过程中核的参与,而两体碰撞在这种情况下有点用词不当^[16]. 因为敲出电子和靶核在初末中都有较强的相互作用,此时靶核并不能保持“旁观”初道的作用考虑与否,自然对其有较大的影响. 图 2 是图 1 所述情况碰撞过程中靶核(He^{++})随出射角度变化的反冲动量谱,可从另一角度说明这种理解的正确性. 在 $\theta = 45^\circ$ 时,靶核有一极小的反冲动量,在对应的两体

碰撞过程中,靶核(He^{++})有着不能忽略的动量吸收,入射能量越低,动量吸收越大. 通常,比氢原子低能散射时核的动量吸收约大两倍^[13],说明两体碰撞过程中靶核的影响. 在 $\theta = 225^\circ$ (与极小值方向相反)时,靶核有一极大的反冲动量,表明核的最大动量吸收. 能量越高,吸收越大,对应于典型的二次两体碰撞. 应该强调的是,入射道用平面波来代替库仑波(即不考虑入射道库仑场的存在). 从图可看出,尽管可给出近似相同的角度分布,然而它们所给出的 TDCS 的大小确有较大的差别. 显然,入射道用平面波来代替库仑波(即忽略靶离子的库仑场),其结果是不合理的. 由此可见,低能碰撞对这种库仑场的影响主要是两体碰撞.

由于目前文献上还没有关于电子碰撞 He^+ 电离的实验数据. 我们期待着未来实验对本文结果的检验.

本文前两名作者对周作胥教授给予的指导和帮助深表感谢.

参 考 文 献

- 1 孙永盛,郑绍唐,杜祥琬. 热等离子体内原子物理研究概况与原子分子数据的联合研制. 核物理动态,1995,12(4):6~10
- 2 方渡飞. 类氢离子的电子碰撞电离微分截面. 物理学报,1992,41(5):745~749
- 3 Fontes C J, Sampson D H et al. Phys Rev, 1993, A48: 1975
- 4 Roy A, Roy K, Sil N C. Triple Differential Cross Sections for Electron Impact Ionization of He^+ . J Phys, 1982, B15(8):1289~1292
- 5 Biswas R, Sinha C. Electron-impact Ionization of a Hydrogenic Ion. Phys Rev, 1994, A50(1):354~359
- 6 Sinha C, Tripathi S. Electron Impact Ionization of Atomic Hydrogen. J Phys, 1991, B24(16):3659~3668
- 7 Brauner M. Triply-differential Cross Sections for Ionization of Hydrogen Atoms by Electrons and Positrons. J Phys, 1989, B22(14):2265~2287
- 8 Berakder T. Z Phys, 1990, D16:91
- 9 Brauner M. Triply Differential Cross Section for Ionization of Hydrogen Atoms by Electrons; the Intermediate

- and Threshold Energy Regions. *J Phys*, 1991, B24(3): 657~673
- 10 Berakdar J. Approximate Analytical Solution of the Quantum-mechanical Three-body Coulomb Continuum Problem. *Phys Rev*, 1996, A53(4):2314~2326
- 11 Berakdar J, Briggs J S. Three-body Coulomb Continuum Problem. *Phys Rev Lett*, 1994, 72(24):3799~3802
- 12 Berakdar J, Briggs J S. Interference Effects in $(e, 2e)$ -differential Cross Sections in Doubly Symmetric Geometry. *J Phys*, 1994, B27(18):4271~4280
- 13 Berakdar J, Briggs J S. Interplay of Exchange and Collisional Ionization Mechanisms in $(e, 2e)$ Processes. *J Phys*, 1996, B29(11):2289~2303
- 14 Jia Xiangfu. Triple Differential Cross Sections for Electron-impact Ionization of He^+ . *Phys Rev*, 1997, A55(3):1971~1975
- 15 Berakdar J. Scaling Behaviour of the Triply Differential Cross Section for the Ionization of Atomic Hydrogen. *J Phys*, 1993, B26(2):285~296
- 16 Brauner M, Briggs J S. Structure in Differential Cross Sections for Positron and Electron Impact Ionization of Hydrogen. *J Phys*, 1993, B26(15):2451~2461

Triple Differential Cross Sections for Near-threshold $\text{H}^+(e, 2e)$ Reactions

JIA Xiangfu PAN Niandong

(*Department of Physics, Shanxi Normal University, Linfen 041004*)

CHEN Changji Xu Kezun

(*Department of Modern Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026*)

Abstract A correlated three-body continuum wavefunction proposed by Brauner et al has been recently modified further to allow for three-body effects by introducing Sommerfeld parameters (Berakdar and Briggs). The triple differential cross sections for electron impact ionization of He^+ in coplanar equal-energy sharing and fixed-relative angle geometry are calculated. The initial channel wavefunction involves a Coulomb wavefunction due to the long range Coulomb attraction between the incident electron and the screened ionic nucleus. Since the present work deals with symmetric collisions, the electron exchange effect between the two continuum electrons has been taken into account properly. It is shown that the initial channel Coulomb field plays a major role in single binary collision in determining the triple differential cross sections at near-threshold incident energy.

Key Words He^+ target $(e, 2e)$ reaction triple differential cross sections