

104-109

电子碰撞 $\text{Li}^+(1s)$ 电离的三重微分截面

贾祥富 梁景辉[▽] 潘念东
(山西师范大学物理系 临汾 041004)

0562.5

摘要 利用修正的BBK理论, 考虑入射道的库仑相互作用及出射道电子的交换对称性, 在共面-等能分享-垂直角度碰撞几何中, 计算了能量分别为85.6、105.6、227.6和375.6 eV 的入射电子碰撞 $\text{Li}^+(1s)$ 电离的三重微分截面. 讨论了干涉效应、关联效应及入射道库仑场对截面的影响.

关键词 ~~靶~~ 电离 三重微分截面
分类号 O562.5

电子碰撞 锂靶 理论模型

1 引言

电子与离子碰撞电离截面不仅是当前聚变研究迫切需要的原子物理数据, 而且在天体物理、等离子体物理及 X 射线激光等高新技术领域有极强的应用背景. 近几年, 实验与理论的研究大多集中在电离总截面和能量微分截面的测量与计算^[1]. 然而, 电子与离子碰撞单电离的三重微分截面更详细地反映了这个过程的运动学性质, 但文献上目前还未见到这方面的实验研究报告. 随着现代测量技术与手段的不断提高, 我们相信进行这种反应的实验研究并不是很遥远的未来. 现在或许是先从理论上进行详细计算与研究的适当时机. 随着近年来原子(e, 2e)反应实验与理论的日趋成熟, 离子(e, 2e)反应理论研究最近又有了较大进展. Biswas 和 Sinha 基于他们成功的理论模型^[2]提供了电子碰撞类氢、类氦离子(e, 2e)反应的三重微分截面(简称 TDCS)计算模型^[3]. 由于这种模型对碰撞几何的特殊要求, 使其进一步的应用受到了很大限制. 为了处理任意几何条件下的碰撞问题, 本文第一作者和其合作者们已将 Braunner-Briggs-Klar (BBK) 模型^[4]推广到了电子与离子碰撞的新体系^[5], 并得到了一些

新的理论结果^[6~10]. 应该指出的是, 离子电离反应与原子电离反应的主要区别是在入射道增加了靶离子对入射电子的长程库仑力的作用. 文献[5、8和10]计算结果都表明, 入射道库仑场对 TDCS 的主要影响是集中在低入射能量范围, 所以区别于文献[3和10], 本文研究电子碰撞 $\text{Li}^+(1s)$ 电离的三重微分截面时, 计算仅限于慢(与玻尔速度相比)入射电子. 同时考虑入射道电子与靶离子的库仑相互作用及出射道的交换效应, 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)几何条件下, 计算了电子碰撞 $\text{Li}^+(e, 2e)$ 反应的 TDCS, 并研究了关联效应、干涉效应及入射道库仑场对截面的影响.

2 理论模型

在原子单位(u)中, 将电子碰撞 $\text{Li}^+(1s)$ 电离的跃迁矩阵元定义为

$$\begin{aligned} T_n(k_1, k_2, k_3) &= \langle \psi_f^- | \frac{1}{r_{12}} + \frac{1}{r_{13}} - \frac{(z_1 - 1)}{r_1} | \psi_i^+ \rangle \\ &= T_{ee} + T_{eb} + T_{en}, \end{aligned} \quad (1)$$

其中 k_1 、 k_2 和 k_3 分别是散射、电离和入射电子的动量; $r_{12} = |r_1 - r_2|$, $r_{13} = |r_1 - r_3|$, r_1 、 r_2 和 r_3 分别是入射、散射和 Li^{2+} 的束缚电子关

于靶核的位置矢量; z_1 是靶核电荷数, Ψ_i^+ 和 Ψ_f^- 分别是初末道波函数; T_{ee} 、 T_{eb} 和 T_{en} 分别为入射电子与敲出电子、束缚电子和靶核相互作用的散射矩阵元. 如果入射电子和靶离子是非极化的, 而且对终态自旋不作观测, 又由于出射电子的不可区分性, TDCS 是单态散射矩阵元 T_s 和三重态散射矩阵元 T_t 的统计平均, 考虑了出射电子的交换效应后, TDCS 可定义为

$$TDCS = (2\pi)^4 \frac{k_1 k_2}{k_1} \left\{ \frac{1}{4} |T_s|^2 + \frac{3}{4} |T_t|^2 \right\}, \quad (2)$$

单态和三重态跃迁矩阵元分别为

$$\begin{aligned} T_s &= T_n(k_1, k_2, k_1) + T_n(k_2, k_1, k_1) \\ T_t &= T_n(k_1, k_2, k_1) - T_n(k_2, k_1, k_1). \end{aligned} \quad (3)$$

因为入射电子和靶离子存在长程库仑相互作用, 所以初态波函数 Ψ_i^+ 是入射电子的库仑波函数

$$\begin{aligned} F_i(k_1, r_1) &= (2\pi)^{-3/2} e^{i\alpha_1/2} \Gamma(1 - i\alpha_1) \\ &\quad e^{i\alpha_1 r_1} {}_1F_1[i\alpha_1; 1; i(k_1 r_1 - k_1 \cdot r_1)] \end{aligned} \quad (4)$$

和类氢离子 Li^+ 基态波函数 $\Phi_0(r_2, r_3) = (\lambda^3/\pi) \exp[-\lambda(r_2 + r_3)]$ 的乘积

$$\Psi_i^+(r_1, r_2, r_3) = F_i(k_1, r_1) \Phi_0(r_2, r_3), \quad (5)$$

其中 $\alpha_1 = (z_1 - 2)/k_1$, $\lambda = (z_1 - 1) + 0.6875$, ${}_1F_1$ 是合流超几何函数, Γ 是伽马函数.

末态是由两个出射电子与 Li^{2+} 组成, 波函数 $\Psi_f^-(r_1, r_2, r_3)$ 可近似取为类氢离子 Li^{2+} 波函数 $\Phi_{10n}(r_3) = (z_f^3/\pi)^{1/2} \exp(-z_f r_3)$ ($z_f = 3$) 和描述两出射电子的 BBK 波函数 $\Psi_{\text{BBK}}(r_1, r_2)$ 组成. 对低出射电子速度, 还应考虑敲出电子和剩下的束缚电子的交换对称性, 可表为

$$\begin{aligned} \Psi_f^-(r_1, r_2, r_3) &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\Psi_{\text{BBK}}(r_1, r_2) \Phi_{10n}(r_3) + \\ &\quad \Psi_{\text{BBK}}(r_1, r_3) \Phi_{10n}(r_2)], \end{aligned} \quad (6)$$

其中 BBK 波函数^[5]为

$$\begin{aligned} \Psi_{\text{BBK}}(r_1, r_2) &= (2\pi)^{-3} e^{i\alpha_1 r_1} e^{i\alpha_2 r_2} \\ &\quad \prod_{i=1}^2 e^{i\alpha_i/2} \Gamma(1 + i\alpha_i) {}_1F_1 \\ &\quad [-i\alpha_i; 1; -i(k_i r_i + k_i \cdot r_i)], \end{aligned} \quad (7)$$

其中 $k_{12} = (k_1 - k_2)/2$, α_i ($i = 1, 2, 12$) 为 Sommerfeld 参数, $\alpha_1 = z/k_1$, $\alpha_2 = z/k_2$, $\alpha_{12} = -1/2k_{12}$. 对中高入射能量来说, 它们正确地描述了远场处两体库仑相互作用^[6]. 而对较低的入射能量, 两体相互作用受到第 3 个粒子的影响变得重要. 按照 Berakdar 理论^[11], 一般情况下 α_i 是较复杂的空间坐标和动量的函数, 在共面等能几何条件下 (即 $k_1 = k_2 = k$) 可表示为如下简单形式^[12]:

$$\begin{aligned} \alpha_1 = \alpha_2 &= \frac{4z - \sin\theta}{4k}, \\ \alpha_{12} &= \frac{1 - \sin^2\theta}{2k \sin\theta}, \end{aligned} \quad (8)$$

式中 $\theta = \cos^{-1}(\hat{k}_1 \cdot \hat{k}_2)/2$, 从 $\pi/2$ (两电子沿相反方向出射) 到零 (两电子沿同一方向出射) 变化. 当 $\theta = \pi/2$ 时, $\alpha_{12} = 0$, 靶核在两出射的电子连线之间, 电子完全处在一有效电荷为 $z - 1/4$ 的核库仑场中. 当 θ 从 $\pi/2$ 减小到零时, 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. 对 Sommerfeld 参数的这种修正, 反应了末态波函数中的动量关联效应. 从本质上来说, 它描述了由于第 3 个粒子的存在而对两体库仑波函数的影响, 从而表示了 3 个两体库仑相互作用彼此间的动力学屏蔽 (DS) 效应, 其正确性已被文献 [12、13 和 14] 的结果所证明, 所以, 将此时的 BBK 波函数称为 DSBBK. 按照 (5) 式和 (6) 式计算 (2) 式中的 TDCS 时,

可采用与文献[5和8]大体相同的方法, 此处从略.

3 结果和讨论

基于上节公式(2), 选择共面、出射电子等能分享和垂直碰撞几何, 即 k_1 、 k_2 和 k_i 在同一平面, $k_1 = k_2 = k$ 及 $k_1 \cdot k_2 = 0$, 并取靶核为极点, k_i 为极轴方向. 我们对电子碰撞 $\text{Li}^+(1s)$ 电离反应做了一些典型的数值计算, 碰撞能量 (Li^+ 的电离阈能为 75.6 eV) 从 85.6 eV (两出射电子能量 $E_1 = E_2 = 2$ eV) 增加到 375.6 eV ($E_1 = E_2 = 150$ eV), 计算结果如图 1 所示. 图中径向表示 TDCS, 极角 θ_2 表示敲出电子角度, 极轴方向为入射电子方向 k_i . 对入射能量 375.6 eV, 在 $\theta_2 = 45^\circ$ 时, TDCS = 0.001 8 u.

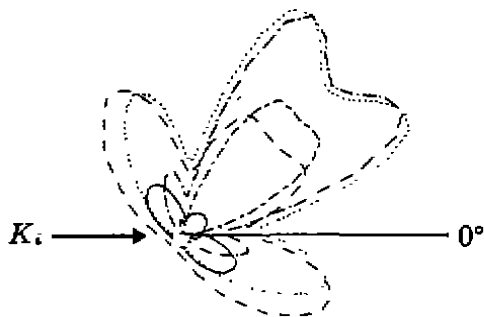


图 1 在共面、等能分配和垂直角度几何中, 电子碰撞 $\text{Li}^+(1s)$ 电离 TDCS 的角度分布

入射能量 E_i 分别为 85.6 eV —、105.6 eV ---、145.6 eV ...、227.6 eV -·- 和 375.6 eV - - -.

从图 1 中可以看出, 在各入射能下, TDCS 都是以 $\theta_2 = 45^\circ$ 的轴为对称的, 大于 90° 时的两极大值, 先是随着入射能量的增加而增加, 在入射能量增加到 145.6 eV 时, 则开始迅速减小, 并且两峰与对称轴方向的夹角不断减小. 小于 90° 时的峰, 随着入射能量的增加而增加, 且峰在不断变窄. 有关这些角度分布的特征, 可从图 2 和图 3 得到说明. 假设最初靶核是静止的, 由动量守恒关系可知, 碰

撞过程中靶核的反冲动量

$$k_{\text{ion}} = k_i - k_1 - k_2$$

且是角度 θ_2 的函数. 从图 2 可看出, k_{ion} 在

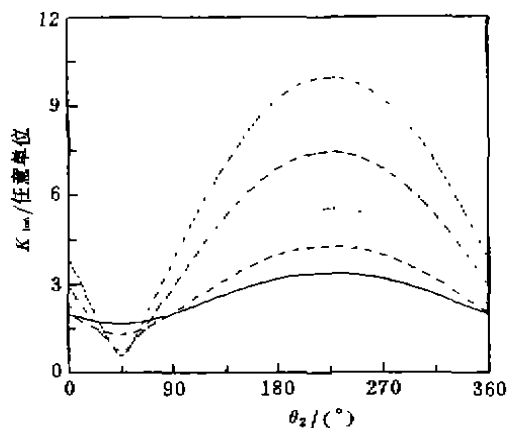


图 2 Li^{++} 离子在图 1 各入射能量条件下反冲动量 k_{ion} 的角度分布
— 为 85.6 eV, --- 为 105.6 eV, 为 145.6 eV, -·- 为 227.6 eV 和 - - - 为 375.6 eV.

$\theta_2 = \theta_{12}/2 = 45^\circ$ 处对各入射能量都表现为极小 (或动量吸收). 从关于 45° 处的对称性可知, 电子出射的几率绕其对称分布, 因碰撞过程此时受核的影响最小, 可认为是一次两体碰撞 (SB)^[2], 即入射电子直接和电离电子碰撞, 进而敲出电离电子, 靶核可被近似地看作一旁观者. 入射能量越低, 靶核的动量吸收就越大, 对 SB 碰撞的影响就越大. 但值得注意的是, 即使入射能量接近电离阈能 (85.6 eV) 时, 也能看见 SB 碰撞 (图 1). 入射能量越高, 靶核的动量吸收就越小, SB 碰撞就越典型. 而在 $\theta_2 = \theta_{12}/2 = 225^\circ$ 处, 对各入射能量都有一范围较宽的极大反冲动量 (或动量吸收), 即出射电子绕其对称向后散射. 与前述相反, 碰撞过程在此方向受核的影响最大, 可认为是二次两体碰撞 (DB)^[2], 即入射电子和束缚电子碰撞后散射出去, 但束缚电子并未被直接敲出, 而是被靶核的多次弹性散射后出射. 入射能量越高, 反射动量 k_{ion} 此时就越大, 整个碰撞过程中核的影响就越大, DB

碰撞就越典型. 同时在图示的能量范围内, 对应的 k_{ion} 谱表明大于 90° 时, DB 碰撞是主要的, 小于 90° 时, 则 SB 是主要的. 入射能量越低, k_{ion} 曲线越趋于平坦, 就越不易区分 SB 与 DB 碰撞.

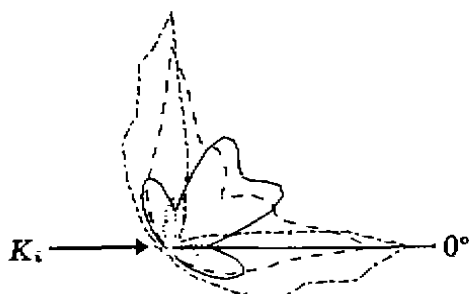


图3 散射振幅对 TDCS 的贡献
 $E_i = 145.6 \text{ eV}$. 非干涉的独立贡献
 T_e ---, T_m -·-·-, T_b ····; 干涉和——

图3所示是(1)式中各散射振幅对 TDCS 非干涉的独立贡献, 及干涉和(实线). 可以看出当 θ_2 在 $0^\circ \sim 90^\circ$ 之间时, 电子与电子碰撞的散射振幅 T_{ee} 是 TDCS 的主要贡献者, 电子与靶核碰撞的散射振幅 T_{en} 及电子与靶离子中束缚电子碰撞的散射振幅 T_{eb} 的贡献并不明显, 正是上边谈到的 SB 碰撞. θ_2 大于 90° 时, T_{en} 对截面的贡献较大. 另外的计算也表明, 入射能量越低, T_{en} 的贡献就越大, 可归于 DB 碰撞. 而在 θ_2 为 0° 和 90° 时, 3 个散射振幅对截面的贡献都是极大的, 而 T_{ee} 、 T_{en} 和 T_{eb} 的强烈干涉使得 TDCS 在此处却为极小. 整个 TDCS 的角度分布正是这种干涉的结果.

从图1还可看出, 对接近电离阈能的入射能量 85.6 eV (如图1实线), 在 $\theta_2 > 90^\circ$, TDCS 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, 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, 是一优惠的辐射方向. 在 $\theta_2 = 45^\circ$ 处的小峰, 对应于 SB 碰撞. 在 225° 处, 是 DB 碰撞. 随着入射能量的提高, 双叶极大的夹角不断减小, $\theta_2 = 45^\circ$

的峰不断加强. 在入射能量为 375.6 eV 时, 敲出电子的出射集中在 $\theta = 45^\circ$ 轴附近. 而在大于 90° 的方向几乎没有或很少有电子出射. 说明随着入射能量的增加, 大于 90° 的出射电子几率不断减少, SB 碰撞逐渐加强. 表明入射能量增加时动量转移的一种趋势, 使得电子被限制在向前散射. 因此, 对接近电离阈能的电子-离子碰撞, 两出射电子间的连线与入射电子方向平行时, TDCS 最大, 垂直时, TDCS 最小. 碰撞能量增加到5倍的电离阈能时, 主要是 SB 碰撞, 而出射电子间的连线垂直于入射电子方向, TDCS 最大, 角度分布紧靠 45° 左右, 类似于 δ 函数分布, 实际上是由于束缚电子的初始动量分布随入射电子能量的增加变得越来越不重要, 电子和电子的碰撞越来越象经典粒子间的碰撞. 这些结论支持了文献[9, 13 和 15]理论与实验结果.

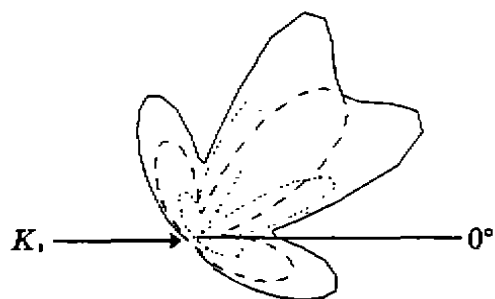


图4 单态散射振幅 T_0 (---)(已乘因子 $1/4$)和三重态散射振幅 T_1 (····)(已乘因子 $3/4$)对 TDCS (入射能量 $E_i = 145.6 \text{ eV}$) 的独立贡献
 实线(TDCS)代表它们的统计平均.

图4是我们就单态 T_0 和三重态 T_1 散射对截面 TDCS 贡献的计算结果. θ_2 大于 90° 时, 它们有类似的角度分布, 两叶极大. 三重态散射的角度分布呈蝴蝶状; 在 $\theta_2 = 45^\circ$ 时, TDCS 为零, 这是碰撞体系空间波函数反对称性的必然结果. 单态散射在此处为一极大, 所以 SB 碰撞主要是单态散射的贡献. 可见, 当碰撞能量超出3倍的电离阈能 (174.4 eV) 时, 电子碰撞电离几乎只产生自旋为零

的等能双电子反对称态. 而在 $\theta_2 = 45^\circ$ 处, TDCS 的极小, 则是单态和三重态散射统计平均的结果. 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^[3]. 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.

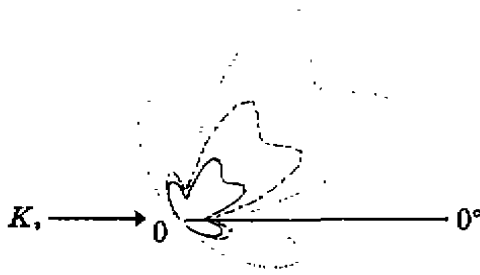


图5 同图 1 的几何条件, 对入射能量 $E_1 = 145.6 \text{ eV}$ 的 TDCS
 ---和- -分别表示入射电子用平面波表示(即入射道不考虑库仑场的存在)和出射道不考虑电子间关联的 TDCS, 实线表示现在的 TDCS.

图 5 中给出了入射道库仑场和出射道电子间关联对 TDCS 的影响. 如果忽略入射道库仑场, 即入射电子用平面波表示时, 给出的截面尽管与现在的结果有基本相同的角度分布, 大小却有较大的差别, 主要表现在对 SB 碰撞的影响较大, 而对 DB 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^[16] 确认了在 DB 碰撞

过程中核的影响, 而 SB 碰撞在这种情况下有点“用词不当”^[17]. 因为敲出电子和靶核在初末态中都有较强的相互作用, 电子与电子在这种背景下碰撞, 考虑和不考虑初道的这种相互作用自然对其有较大的影响. 另一方面, 从(4)式可看出, 库仑场影响 TDCS 的大小, 主要是入射库仑波的归一化因子

$$\left| \exp\left(\frac{\pi}{2k_1}\right) \Gamma\left(1 - \frac{i}{k_1}\right) \right|^2 = \frac{2\pi}{k_1} \frac{1}{1 - \exp\left(\frac{-2\pi}{k_1}\right)}. \quad (9)$$

计算结果表明, 入射能量越高, 库仑场对 TDCS 的影响就越小. 当入射能量足够高时, 它趋于 1, 说明入射电子用平面波表示就是一好的近似. 然而, 入射能量越低(大于靶离子的电离能), 这个因子就越大, 表明库仑场对 TDCS 的影响也就越大, 这与文献[3、5、8和 10]的结论是一致的. 对于出射道电子间关联, 主要是体现在(7)式和(8)式中的 Sommerfeld 参数的表述. 如果不考虑这种关联, 则只需在(7)式中取 $a_1 = z/k_1$, $a_2 = z/k_2$ 和 $a_{12} = 0$. 图 5 中的点划线表示在这种情况下对 TDCS 的计算结果. 对其它入射能量的计算都表明, 在低入射能量区, 它给出了太大的 TDCS. 所以我们认为, 在上述两种情况下和在较低的碰撞能量时, 入射道的库仑场及出射道电子间的关联效应, 对决定散射截面的大小与形状是很重要的.

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 Sinha C, Tripathi S. Electron Impact Ionization of Atomic Hydrogen. J Phys, 1991, B24(16): 3 659~3 668
- 3 Biswas R, Sinha C. Electron-impact Ionization of a Hydrogenic Ion. Phys Rev, 1994, A50(1): 354~359; Triple Differential Cross Sections for Ionization of Helium-like Lithium by Electron Impact. J Phys, 1996, B28(7): 1 311~1 320
- 4 Brauner M, Briggs J S, Klar H. Triply-differential Cross Sections for Ionization of Hydrogen Atoms by Electrons and Positrons. J Phys, 1989, B22(14): 2 265~2 287
- 5 Jia X, Shi Q, Chen Z et al. Triple Differential Cross Sections for Electron-impact Ionization of He+. Phys Rev, 1997, A55(3): 1 971~1 975

- 6 Chen Z, Shi Q, Chen J *et al.* Effective Sommerfeld Parameters in the Three-body Coulomb Continuum Problem. *Phys Rev*, 1997, A56, R2 514
- 7 Shi Q, Chen Z, Chen J *et al.* Influence of Nuclear Charges for Electron Impact Ionization of Hydrogenic Ions. *J Phys*, 1997, B30, 2 859
- 8 贾祥富, 施启存, 陈长进等. 低能电子碰撞 $\text{He}^+(e, 2e)$ 反应绝对三重微分截面的理论研究. *物理学报*, 1998, 47(3), 411~418
- 9 贾祥富, 潘念东, 陈长进等. 中低能入射电子与氦离子碰撞的 $(e, 2e)$ 反应三重微分截面. *原子核物理评论*, 1998, 15(1), 26~30
- 10 Shi Q, Chen Z, Chen J *et al.* Triple Differential Cross Sections for Electron Impact Ionization of Li^+ . *原子与分子物理学报*, 1997, 14(4), 539~546
- 11 Berakdar J. Approximate Analytical Solution of the Quantum-mechanical Three-body Coulomb Continuum Problem. *Phys Rev*, 1996, A53(4), 2 314~2 326
- 12 Berakdar J, Briggs J S. Three-body Coulomb Continuum Problem. *Phys Rev Lett*, 1994, 72(24), 3 799~3 802
- 13 Berakdar J, Briggs J S. Interplay of Exchange and Collisional Ionization Mechanisms in $(e, 2e)$ Processes. *J Phys*, 1996, B29(11), 2 289~2 303
- 14 Berakdar J, Briggs J S. Interference Effects in $(e, 2e)$ -Differential Cross Sections in Doubly Symmetric Geometry. *J Phys*, 1994, B27(18), 4 271~4 280
- 15 Brauner M, Briggs J S, Klar H *et al.* Triple Differential Cross Section for Ionization of Hydrogen Atoms by Electrons: the Intermediate and Threshold Energy Regions. *J Phys*, 1991, B24(3), 657~ 673
- 16 Berakdar J, Briggs J S, Klar H. Scaling Behaviour of the Triply Differential Cross Section for the Ionization of Atomic Hydrogen. *J Phys*, 1993, B26(2), 285~296
- 17 Brauner M, Briggs J S. Structure in Differential Cross Sections for Positron and Electron Impact Ionization of Hydrogen. *J Phys*, 1993, B26(15), 2 451~2 461

Triple Differential Cross Sections for Ionization of $\text{Li}^+(1s)$ by Electron Impact

Jia Xiangfu Liang Jinghui Pan Niandong

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

Abstract Based on revised BBK theory, triple differential cross sections (TDCS) have been calculated for ionization of $\text{Li}^+(1s)$ by electron impact. A coplaner, equal-energy, fixed-relative angle kinematics are chosen and the particular case where the scattered and ionized electrons emerge perpendicular to each other is emphasized. The incoming electron state is considered by a Coulomb wave from the long range attraction between the incident electron and the screened ionic nucleus or approximated by a plane wave. The electron exchange effect between the two continuum electrons has been taken into account properly. Correlation and coherence between electron-ionized electron, electron-proton and electron-bound electron are identified and the influences on TDCS are discussed.

Key words Li^+ target ionization triple differential cross section

Classifying number O562.5