arXiv:2304.00956v1 [physics.atom-ph] 3 Apr 2023

电离阈值以上2电子伏特至120电子伏特范围内，氪在垂直平面中的 (e, 2e) 微分截面测量

Andrew James Murray 和 Joshua Rogers*Photon Science Institute, Department of Physics and AstronomyUniversity of Manchester, Manchester, M13 9PL, UK（日期：2023年4月4日）

本文介绍了氪的新 (e, 2e) 微分截面测量结果，测量在垂直平面内进行；在该平面中，入射电子束与散射电子和出射电子相互垂直，这些电子确定了探测平面。在电离势（IP）以上30电子伏特至120电子伏特的入射能量下获得了新的数据；实验配置为探测能量相等的散射电子和出射电子。研究结果与此前在电离势以上2电子伏特至50电子伏特范围内的测量结果，以及该能量范围内不同模型的计算结果进行了比较。新实验验证了此前测量的结果。此外，研究还将结果与近期在相同运动学条件下获得的氩数据进行了比较，以突出观察到的相似之处和差异。

I. 引言

在近期的一篇论文中， [1]详细介绍了氩靶的电子碰撞电离微分截面（DCS）。实验在垂直于入射电子动量 $\mathbf{k_0}$, 的平面内探测相互作用后散射和出射的电子，如图1所示。动量为$\mathbf{k_1}$ 和$\mathbf{k_2}$ 的出射电子以等能量符合测量，采用半球形电子分析器在探测平面内转动进行探测。在此平面内，只有相互夹角 ϕ具有意义。

这项氩研究的结果证实了先前的实验数据 [2], , 后者发现实验结果与Whelan及其合作者进行的计算 [3]存在显著差异。这种差异在高于电离势（IP）约50电子伏特处尤为明显。所采用的模型包括非相对论扭曲波玻恩近似（DWBA）计算，其中考虑或忽略碰撞后相互作用（±PCI），以及平面波近似（PWA）。PCI通过伽莫夫因子 [4] 纳入计算，也通过引入Ward-Macek因子 [5]加以考虑。这两种因子都近似描述了PCI的影响；研究发现，在这些运动学条件下，采用它们会过度补偿电子-电子斥力的影响。氩的实验数据还进一步扩展至高于电离

在 [1]，中允许今后检验不同的模型。

在 [2]中介绍的对氪低能实验数据的比较，也在 [3] 中进行了。与氩的研究相比，扭曲波玻恩近似-PCI计算对氪的符合程度更好，尤其是在高于电离势50电子伏特的入射能量下。不同靶的这些计算结果之间的差异因此表明，有必要进一步全面测量截面对氪进行测量，既是为了核查 [2] 中的数据，也是为了将测量范围扩展到更高能量。

本文介绍了这些实验的结果，并将其与 [2] 的先前数据以及 [3] 中的计算进行了比较。原始研究的能量范围为高于电离势 2电子伏特至 50电子伏特。本文详述的新测量将此范围扩展至高于电离势 120电子伏特。由于这种几何构型下符合计数率极低，无法进一步扩展该范围。我们重复了 [2] 在高于电离势 30、40 和 50电子伏特入射能量下的部分微分截面测量，并将其与新测量进行了比较。在这些能量下，两组数据集结果一致。

在所有这些研究中，微分截面都不是在绝对标度上测量的。因此，选取相互夹角 $\phi = 180°$ 作为归一化点。由于出射电子是在对称几何构型下探测的（即 $\theta_1 = \theta_2$, 见图 1），对所有入射束角度 ψ 而言，这都是一个共同的角度。在此处对数据进行归一化后，便可直接比较不同几何构型范围内的实验结果与计算，如 [6, 7]中所述。

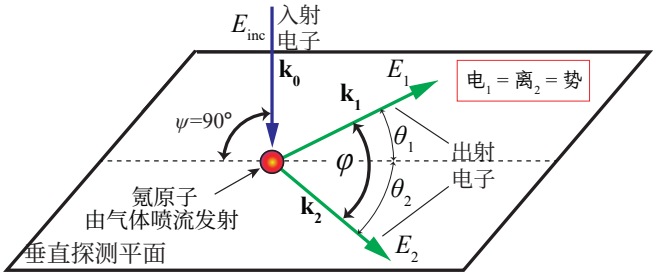

图 1. 垂直平面散射几何构型。

在本研究中，所探测电子的能量被设定为相等，因此 $E_1 = E_2 = E$。入射电子能量遂设定为 $E_{inc} = 2E+$ 电离势。随后测定了一个 (e, 2e) 微分截面，它取决于

* andrew.murray@manchester.ac.uk, joshua.rogers@manchester.ac.uk

能量和相互夹角 ϕ。

在垂直平面几何构型中，电离反应对多阶散射过程高度敏感 [8, 9]，因此可用于有力检验包含这些效应的、更复杂的理论。在本文考察的能量下，纳入靶极化和碰撞后相互作用也很重要，这对计算提出了更高要求。随着入射能量增加，这些效应会减弱。因此，本文所呈现的微分截面测量覆盖了更宽的能量范围，应有助于系统地考察这些效应的贡献。

[3, 8]所述扭曲波玻恩近似模型的优势在于，通过用平面波替换畸变波，可以将不同的相互作用过程分别开启或关闭。这使得研究不同的潜在散射机制成为可能。在垂直平面内，这些模型表明，在 $\phi = 180°$处出现的峰源于束缚电子的动量与入射电子的动量相匹配，因此两个电子沿相反方向离开相互作用区域 [10]。Madison及其合作者 [8] 进一步指出，在 ϕ= 180°处出现的峰也包含 *triple* 散射的贡献：入射电子先弹性散射进入垂直平面，随后与束缚电子发生二体碰撞。之后，该电子从靶弹性散射，并以180°的相互夹角射出。在 $\phi = 90°$和270°附近出现的峰被认为是由电子弹性散射进入垂直平面后再发生二体碰撞所致。请注意，由于绕入射电子束方向具有旋转对称性，$\phi \leq 90°$处的微分截面与 $\phi \geq 90°$处的测量结果互为镜像。

这些对不同碰撞机制的半经典描述颇具吸引力，因为它们直观地解释了相关过程。事实证明，这些描述成功地说明了较轻靶原子的电离过程；然而，要模拟较重原子的微分截面，则需要完整的量子计算。因此，本文提供的补充实验数据对于深入理解相关散射机制具有重要意义。

由于在垂直平面内从该靶获得的符合计数率极低，这些实验颇具挑战性。计数率约为 0.5 Hz 至低于 0.01 Hz，具体取决于相互夹角和入射能量。(e, 2e) 谱仪因此采用计算机控制，并运用优化技术消除长时间测量中可能出现的漂移；这类测量需要持续较长时间才能积累足够的符合数据。这些控制和优化技术此前已有详细描述 [11, 12]。

曼彻斯特的 (e, 2e) 谱仪采用未选能电子枪，可产生能量范围为 5 电子伏特至 300 电子伏特、宽度约为 0.6 电子伏特的电子束。电子束以零束流角进入相互作用区，其笔形束角约为 2°，电子分析器采用三元件静电变焦透镜，将从相互作用区逸出的电子引导至半球形能量选择器。通过调节选择器的通行能量，可控制能谱仪的整体分辨率；通行能量通常设定为与电子枪的分辨率相匹配。气体喷流将原子引入相互作用区（图 1 未示出）。能谱仪安装在大型 μ 金属密闭腔室内，腔室抽至基压～ 6 x 10^{-7} Torr。注入气体喷流时，压强升至 2 x 10^{-5} Torr。有关该能谱仪的更多详情，请参见 [1] 及其中的参考文献。

这些新实验历时 10 个月，以积累本文所呈现的数据。将气体喷流调节至向相互作用区输送靶原子后，调节入射电子束电流，使每个分析器中的散射电子计数率保持在 5 至 10 kHz 之间。随后，将分析器设定为在 $\phi = 70°$ 至 290° 之间扫描，扫描范围受其物理尺寸限制。每个角度下的透镜电压均由系统自动优化，以使探测到的电子计数率最大化。随后，根据该能量和角度下事件的探测概率，累积符合计数 1,500 至 5,000 秒。接着将分析器移至新的角度，并重复这一过程。

探测平面沿一个方向完成扫描后，分析器便反向移动。在给定能量下，最多对整个平面进行了 20 次扫描。随后，将每个角度下的测量值归一化至固定的采集时间，并取其平均值；均值的标准误差即为所报告的不确定度。然后将这些数据重新归一化至 1，

ϕ= 180°，如上所述。

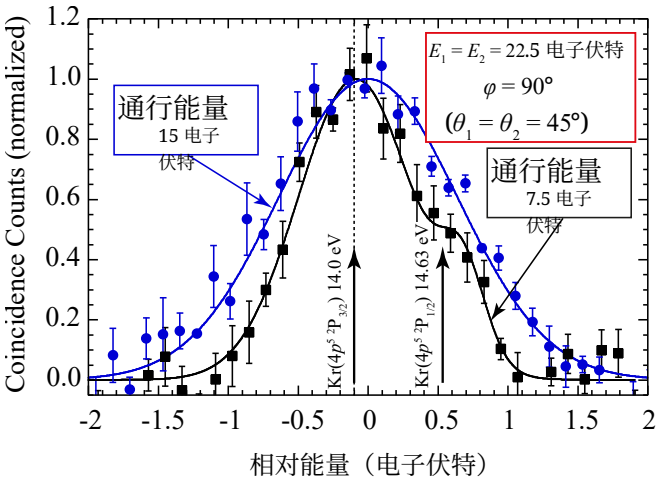

图 2. 氪的结合能谱，出射能量设为 $E_1 = E_2 = 22.5$ 电子伏特，相互夹角为 $\phi = 90°$（$\theta_1 = \theta_2 = 45°$）。图中显示了分析器通能分别设为 15 电子伏特和 7.5 电子伏特时的归一化数据。在 7.5 电子伏特时，刚好可以分辨出不同芯态的贡献。

所有稀有气体靶（氦除外）的最外层价电子层均已填满，包含 6 p 个电子。氪的基态为 $[\mathrm{Ar}]3d^{10}4s^{2}4p^{6}\ {}^{1}\mathrm{S}_{0}$ 态，其中 $[\mathrm{Ar}]$ 是闭合的氩电子排布。因此，通过电子碰撞电离移除一个最外层电子后，芯态中会剩下五个 p 电子，其总角动量不为零。这会产生两种可能的离子实态，即 $4p^{5}\ {}^{2}\mathrm{P}_{3/2}$ 态和 $4p^{5}\ {}^{2}\mathrm{P}_{1/2}$ 态。 $^{2}\mathrm{P}_{3/2}$ 芯态的结合能最低，为 14.0 电子伏特；而 $^{2}\mathrm{P}_{1/2}$ 芯态的结合能高出 ~ 0.63 电子伏特 [13]。

由于入射电子束的分辨率约为 0.6 电子伏特，因此可以通过降低探测器的通行能量，使能谱仪的分辨率主要由入射电子束的分辨率决定，从而估算不同芯态的相对贡献。图 2 展示了这项研究的结果，出射电子在 $\phi = 90°$（$\theta_1 = \theta_2 = 45°$）处被探测，且选定的能量为 $E_1 = E_2 = 22.5$ 电子伏特。

图 2 中的符合数据分别是在 7.5 电子伏特和 15 电子伏特的通行能量下获得的。分辨率较高的 7.5 电子伏特数据表明，在这些运动学条件下，电离至 $4p^{5}\ {}^{2}\mathrm{P}_{1/2}$ 芯态的贡献约为电离至$4p^{5}\ {}^{2}\mathrm{P}_{3/2}$ 芯态贡献的一半。由于在这种几何构型下获得的符合计数率非常低，实际上无法在较高分辨率下运行，因此本文所呈现的所有数据均是在 15 电子伏特的通行能量下采集的。因此，将这些结果与理论进行比较时，需要同时考虑两个通道的电离。

II. 电离势以上2至120电子伏特的微分截面

采用15电子伏特的分析器通能，图3展示了氪电离的测得微分截面，入射能量范围为电离势以上2至120电子伏特。电子枪角度设为 $\psi = 90°$，相互夹角 ϕ 则以10°为步长调整。图3还重现了 [2] （2010年数据）的结果，以便比较新的测量结果与先前数据。

该图展示了相对截面如何从电离势以上2电子伏特的低入射能量变化至电离势以上120电子伏特的高能量。图中还重现了 [3]中的计算结果（如有），以便比较理论与实验。不含后碰撞相互作用（PCI）的扭曲波玻恩近似计算以蓝色曲线表示，标记为DWBA-PCI。采用伽莫夫因子计入后碰撞相互作用的计算以红色曲线表示，标记为DWBA+PCI；平面波计算以绿色曲线表示，标记为PWA。图中还列出了电离势以上以下入射能量对应的计算结果：(c) 10电子伏特、(e) 20电子伏特、(f) 30电子伏特、(g) 40电子伏特和(i) 50电子伏特。

DWBA-PCI模型在较高能量下与数据最为吻合。在这些运动学条件下，由于出射电子之间存在等能量的碰撞后相互作用，微分截面必须在 $\phi = 0°$和 $\phi = 360°$处为零。这种效应的重要性在数据中显而易见。然而，DWBA-PCI模型无法再现这一条件，因此在低角度和高角度处偏离数据。在高于电离势10电子伏特的最低能量下，该模型在所有角度均无法模拟数据，如图3(c)所示。

在 DWBA+PCI 计算中使用伽莫夫因子纳入 PCI，产生的影响显然过强，因为它无法很好地再现数据。Ward Macek 因子造成的变化相较于实验也过大，因此为清晰起见，此处不再展示 [3]。不过，纳入 PCI 可确保截面在 $\phi = 0°$ 和 $\phi = 360°$ 处为零，这符合要求。DWBA+PCI 模型对峰值位置的预测较为准确；然而，以 $\phi = 180°$ 处的共同点归一化后， $\phi = 90°$ 和 $\phi = 270°$ 附近的峰值幅度过小。

对于此处展示的所有能量，平面波近似都无法很好地符合数据。这表明，将相互作用中额外的复杂性纳入计算十分重要，正如上文所述，在较低能量下尤其如此。由于预期 PWA 模型会随着能量升高而更加准确 [14], ，未来与更高能量下新数据的比较或许会显示出更好的一致性。

本研究获得了45电子伏特处的新结果，以及电离势以上从55电子伏特到120电子伏特范围内的结果，如图3(h)和(j)–(o)图所示。因此，图3所示的完整数据集详尽展现了氪在垂直平面内的微分截面从近阈值到高能量的演变。在观测到的最低能量 $E_1 = E_2 = 1$ 电子伏特处，微分截面呈现相对宽阔的结构，并在约 $\phi = 120°$和 $\phi = 240°$处出现小峰。这与较轻的稀有气体靶氦和氖的测量结果形成对比：在相似的运动学条件下，两者均在 $\phi = 180°$处呈现一个大峰 [15–22]。由于出射电子的能量相等，能量越低，后碰撞相互作用的影响就越显著。这会增强背对背信号，即电子向相反方向射出（也就是处于 $\phi = 180°$）。根据Wannier的描述 [23]，在近阈值处，后碰撞相互作用预计会主导所有其他碰撞过程。

值得注意的是，对于氪、氩和氙，在这一低能量区间内，微分截面在 $\phi = 180°$ 处并不像氦和氖那样出现显著的主峰，也不符合 Wannier模型的预测。这些靶在该角度处均呈现“双峰”结构，并形成局部 $minimum$ ，而不是最大值。由于氖的价电子层中也有p-电子，这种差异可能源于这些较重靶更为复杂的电子结构。还需要在这一能量区间内开展进一步的理论研究，以解释这些差异。

随着入射能量超过阈值区域，双峰结构逐渐增强；当能量达到高于 IP 15 电子伏特时（图 3(d)），开始出现一个较小的中心峰。在高于 IP 15 电子伏特至 40 电子伏特之间，可观察到三峰结构。当 $E_1 = E_2 = 10$ 电子伏特时，所有峰的幅度相近。侧

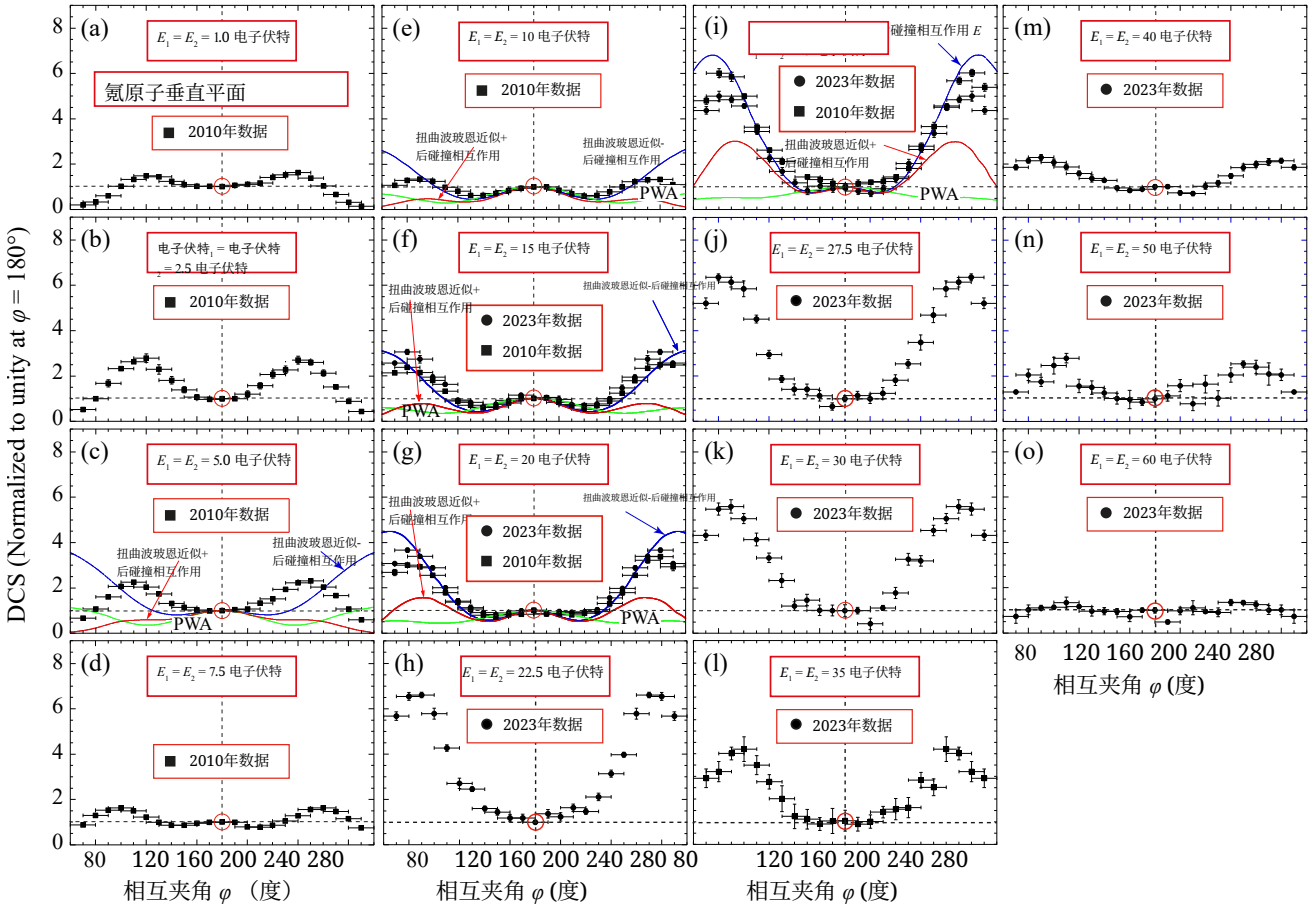

图3. 氪在垂直平面内的微分截面随能量的变化，从 (a) 高于电离势 2电子伏特到 (o) 高于电离势 120电子伏特。测量值在 $\phi = 180°$处归一化为 1。黑色方块表示的数据来自 2010 [2] 中进行的测量。实心黑圆表示的数据是新的测量结果。图中还以实线给出了 [3] 的计算结果，详见第二节。

峰的幅度随后迅速增大，超过中心峰，直到高于 IP 45 电子伏特时，中心峰消失。随着能量增加，剩余侧峰的幅度随后缓慢减小，直到高于 IP 120电子伏特时，微分截面在较宽的角度范围内基本均匀。这种模式与该几何构型下稀有气体氩和氙在较高能量时的情况相似 [1, 17]。目前尚不清楚微分截面为何会变得平坦，因此还需要进一步计算来解释这些结果。

A. 氩与氪峰值比的比较

鉴于氩和氪的理论与实验之间存在明显差异，考察截面测量值之比如何随能量变化颇有意义。由于微分截面的峰值出现在约 $\phi = 90°$处，因此可以比较该角度处的数据（以 $\phi = 180°$处的共同点为基准归一化）随能量的变化。这个比值同时受到 90°测量不确定度以及该测量不确定度的影响——即在 $\phi = 180°$处的测量不确定度。后者的不确定度较大，因为该角度处的截面非常小，符合计数率往往不到每 100 秒 1 次。因此，需要长时间累积数据以降低这些不确定度，如上文所述。

图4展示了在获得数据的能量范围内，对氩和氪进行这项分析的结果。图中还给出了三种不同的 [3] 计算结果以供比较。对于该靶，氩的测量范围为高于电离势 5电子伏特至 200电子伏特。氪的结果范围则限于高于电离势 2电子伏特至 120电子伏特；但为了便于比较，两者采用相同的能量刻度呈现。

值得注意的是，这些靶的比值测量总体结构相似。两种情况下，在阈值附近都能看到一个小峰，随后大幅上升，并且两组测量的峰值都出现在高于电离势约50电子伏特处。之后比值缓慢下降，在 ∼1.9处达到一个值：氩在 $E_1 = E_2$ =100电子伏特时为该值，氪在 $E_1 = E_2 = 60$ 电子伏特时为 ∼1.1。这些比值的不确定度在峰值处最大，

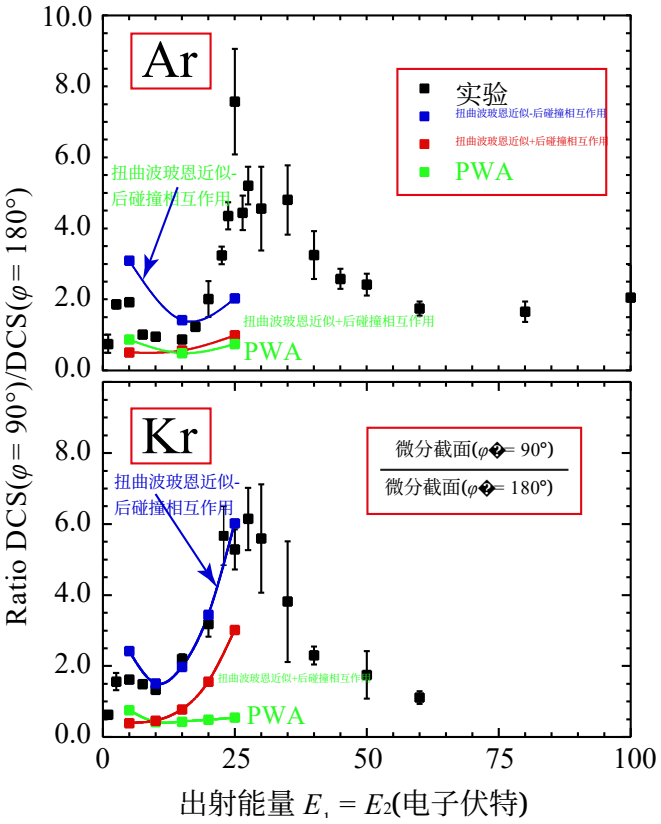

图4. 氩和氪在 $\phi = 90°$处的微分截面与 $\phi = 180°$处的微分截面之比测量值，取自图3中的测量结果及 [1]。此外，还以实线给出了 Whelan 及其合作者的扭曲波玻恩近似-后碰撞相互作用、扭曲波玻恩近似+后碰撞相互作用和扭曲波计算结果 [3] ，以供比较。

这是由于$\phi = 180°$处测量的不确定度较大。不过，在相同能量范围内，两组数据都呈现出类似的结构。

来自 [3] 的理论计算仅适用于高于电离势10电子伏特至50电子伏特的能量范围；图4中的曲线展示了这些计算结果，以突出其随能量的变化。正如预期，平面波近似和扭曲波玻恩近似+后碰撞相互作用计算结果对这两种靶原子的数据拟合均不理想。扭曲波玻恩近似-后碰撞相互作用计算结果未能反映氩的数据趋势，但与氪的结果非常吻合，最低能量处除外。这种吻合或许只是偶然，但这些比较表明，不同计算结果之间的差异值得进一步研究。

III. 总结与结论

本文报告了 Kr 的电离截面测量，能量范围为从电离势以上 2电子伏特至电离势以上 120电子伏特，涉及 $4^2P_{(1/2,3/2)}$ 离子态。这些态在本次实验中无法分辨。对结合能谱的进一步分析（如图 2 所示）表明，两种态都会对截面产生贡献，因此在与理论进行比较时都需要予以考虑。所有测量均在垂直平面内进行，并选取能量相等的探测到的电子。数据以相对尺度呈现，各能量下均将 $\phi = 180°$ 处的微分截面设为 1。

我们还将测量结果与 [3] 采用扭曲波玻恩近似和PWA模型所得的理论计算进行了比较。通过伽莫夫因子纳入后碰撞相互作用，但发现与数据相比，这种处理带来的修正过大。鉴于后碰撞相互作用在这一区间十分重要，未来模型必须采用更精细的方法处理后碰撞相互作用。研究发现，在这一能量范围内，平面波近似模型对于该靶而言并非良好的近似，尽管它在较高入射能量下表现良好。

对于氪，扭曲波玻恩近似-后碰撞相互作用模型在 $\phi = 90°$至 $\phi = 180°$之间与比值测量结果高度吻合。然而，如图4所示，该模型与氩的测量结果不符。这表明应重新审视这些计算，以理解这种差异。

随着能量升高，较高能量下的微分截面测量结果逐渐呈现宽阔平坦的结构， $\phi = 90°$和270°附近的旁瓣幅度则逐渐减小。此处所示最高能量下宽阔、无明显特征的截面，在其他靶的相近能量下也曾观察到，包括氩、氙和CH_4 [24]。因此，该区域的微分截面可能由运动学而非靶结构决定。

希望本文对 Kr 微分截面的全面综述有助于电离过程模型的开发与改进，使其能够更准确地描述这一重要能量区间内发生的相互作用。

IV. 致谢

我们谨此感谢工程与物理科学研究委员会（EPSRC）通过资助项目 EP/W003864/1 和 EP/V027689/1 提供经费。支持本文所报告研究结果的数据可通过上述联系邮箱向作者索取，并已公开提供。

[1] M. Patel and A. J. Murray，氩 (e, 2e) 垂直平面内微分截面的测量，范围从高于电离阈值 5 至 200 电子伏特，物理评论-

卷 A **105**，042815（2022）。[2] K. L. Nixon、A. J. Murray 和 C. Kaiser，《垂直平面内稀有气体的低能（e, 2e）研究》，《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》**43**，085202（2010）。[3] F. K. Miller、H. R. J. Walters 和 C. T. Whelan，《能量共享（e, 2e）碰撞：垂直平面内惰性气体的电离》，《物理评论A》**91**，012706（2015）。[4] G. Gamow，《原子核量子理论》，《物理学杂志》**51**，204（1928）。[5] S. J. Ward 和 J. H. Macek，《带电碎片连续态的波函数》，《物理评论A》**49**，1049（1994）。[6] A. J. Murray 和 F. H. Read，《氦（e, 2e）微分截面从共面几何向垂直平面几何的演变：散射角和能量对称》，《物理评论A》**47**，3724（1993）。[7] A. J. Murray 和 F. H. Read，《氦（e, 2e）电离过程的新颖探索》，《物理评论快报》**69**，2912（1992）。[8] O. Al-Hagan、C. Kaiser、D. Madison 和 A. J. Murray，《带电粒子电离的原子和分子特征》，《自然·物理》**5**，59（2009）。[9] X. Ren、A. Senftleben、T. Pfl¨uger、A. Dorn、J. Colgan、M. S. Pindzola、O. Al-Hagan、D. H. Madison、I. Bray、D. V. Fursa 和 J. Ullrich，《追踪 H_2 和 He 在整个立体角范围内绝对（e, 2e）截面中的多重散射模式》，《物理评论A》**82**，032712（2010）。[10] X. Zhang、C. T. Whelan 和 H. R. J. Walters，《能量共享（e, 2e）碰撞——垂直平面内氦的电离》，《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》**23**，L173（1990）。[11] A. J. Murray、B. C. H. Turton 和 F. H. Read，《实时计算机优化电子能谱仪》，《科学仪器评论》**63**，3346（1992）。[12] M. Patel、A. Sakaamini、M. Harvey 和 A. J. Murray，《采用 Arduino 和 LabVIEW 接口的电子能谱仪实验控制系统》，《科学仪器评论》**91**，103104（2020）。[13] A. Kramida、Y. Ralchenko、J. Reader 和 NIST ASD团队，《NIST原子光谱数据库》（版本 5.10），[在线]。网址：https://physics.nist.gov/asd [2023, 3月 31]。美国国家标准与技术研究院。

ogy，美国马里兰州盖瑟斯堡。（2022）。[14] E. Weigold 和 I. McCarthy，*Electron Momentum Spectroscopy* 2012（施普林格科学与商业媒体，）。[15] A. J. Murray 和 F. H. Read，氖从共面几何构型到垂直平面几何构型的低能（e, 2e）微分截面测量，《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》**33**，L297（2000）。[16] K. L. Nixon 和 A. J. Murray，氩（e, 2e）微分截面从共面几何构型到垂直几何构型的映射，《物理评论A》**85**，022716（2012）。[17] M. Patel、M. Harvey、A. Sakaamini 和 A. J. Murray，氩（e, 2e）微分截面在中间能区从共面几何构型到垂直平面的演变，《物理评论A》**105**，032818 2022（）。[18] A. J. Murray、F. H. Read 和 N. J. Bowring，低能对称（e, 2e）微分截面测量的参数化，《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》**30**，387（1997）。[19] N. J. Bowring、A. J. Murray 和 F. H. Read，氦近阈值双对称（e, 2e）测量，《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》**30**，L671（1997）。[20] T. J. Hawley-Jones、F. H. Read、S. Cvejanovic、P. Hammond 和 G. C. King，氦近阈值电子碰撞电离中垂直平面内角关联的测量，《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》**25**，2393（1992）。[21] P. Selles、A. Huetz 和 J. Maseau，氦近阈值电子碰撞电离中电子-电子角关联分析，《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》**20**，5195（1987）。[22] P. Selles、J. Mazeau 和 A. Huetz，两个电子的 Po态和De态的 Wannier理论，《物理学杂志B：原子、分子与光学物理》**20**，5183（1987）。[23] G. H. Wannier，电子使原子或离子单电离的阈值定律，《物理评论》**90**，817（1953）。[24] M. Harvey、A. Sakaamini、M. Patel、S. Amami、D. Madison 和 A. J. Murray，甲烷电子碰撞电离从共面几何构型到垂直平面的三重微分截面测量，《化学物理杂志》**151**，194305（2019）。