

镁原子碰撞激发微分截面和 Stokes 参数的理论研究*

刘丽娟 颌录有[†] 陈展斌 蒋军 董晨钟

(西北师范大学物理与电子工程学院, 甘肃省原子分子物理与功能材料重点实验室, 兰州 730070)

(2011 年 10 月 24 日收到; 2012 年 2 月 21 日收到修改稿)

基于相对论扭曲波理论方法, 并利用新发展的处理极化电子碰撞激发的计算程序 REIE06, 系统计算了中性镁原子基态 $3s^2\ ^1S_0$ 到激发态 $3s3p\ ^1P_1$, $3s4p\ ^1P_1$ 的电子碰撞激发微分截面和角关联 (Stokes) 参数, 计算过程中系统地考虑了相对论效应、电子关联效应等. 部分计算结果与已有的实验和理论结果进行了比较, 得到了较好的一致性.

关键词: 电子碰撞激发, 微分截面, Stokes 参数, 相对论扭曲波理论

PACS: 31.15.am, 34.80.Dp

1 引言

近年来, 随着电子 - 光子符合测量技术^[1-3]、超弹散射实验技术^[4-6] 以及电子束离子阱实验技术^[7-9] 的发展, 电子 - 原子 (离子) 碰撞激发过程中涉及磁量子数能级的动力学参数, 如磁量子数能级间的积分、微分散射截面、激发态原子辐射光子的极化度^[2,3] 以及激发态原子电子云的排列 (alignment) 和取向参数 (orientation)^[10,11] 等方面的研究已成为当前实验和理论研究的热点. 在这些研究中, 由于入射电子的自旋分量不对称, 与靶原子的碰撞各向异性, 碰撞激发后靶原子中的电子在各个磁量子数能级上的分布不均匀, 从而导致激发态原子退激发辐射出极化的光谱. 因此, 通过对靶原子退激发辐射光子极化参数 (Stokes 参数)^[12,13] 的研究, 可以提供更为详细的原子内部结构以及散射过程中的动力学信息^[10,14].

镁原子最外层有两个 3s 价电子, 是较简单的碱土金属原子, 在实验上易于操作. 它不仅能够检验理论正确与否, 还可以为研究电子与其他原子分子的碰撞提供可资借鉴的思路. 在过去的三十年里,

人们对电子与镁原子的碰撞激发过程进行了大量的研究. 实验方面, 1978 年 Williams 和 Trajmar^[15] 测量了入射电子能量分别为 10, 20, 40 eV 时激发态 $3\ ^3P$, $3\ ^1P$, $3\ ^1D$, $4\ ^1S$, $4\ ^1P$ 的碰撞激发总截面和角微分散射截面; 1989 年 Mitroy 和 Carthy^[16] 测量了 10, 20, 40, 100 eV 时激发态 $3s3p\ ^1P$, $3s4p\ ^1P$, $3s3d\ ^1D$, $3s4s\ ^1S$ 的角微分散射截面以及小角散射时 $3s3p\ ^1P$ 的 Stokes 参数; 2003, 2005 年 Brown 等^[2,3] 利用极化电子 - 光子同步测量方法测量了入射电子能量分别为 20, 40 eV 时 $3s3p\ ^1P$, 3P 态的微分截面和相关的 Stokes 参数; 2006 年 Filipovic 等^[17] 测量了 10—100 eV 范围内 $3s3p\ ^1P_1$ 的广义振子强度、微分截面和总截面; 2008 年 Predojevic 等^[18] 在 Brown 等^[3] 工作的基础上测量了镁原子激发态 $3s3d\ ^1D_2$, $3s4s\ ^1S_0$, $3s4p\ ^1P_1$ 的微分截面, 近期又测量了 $3s3p\ ^3P_1$ 在不同入射电子能量下的微分截面^[19]. 理论方面, 利用不同理论方法, 如密耦合理论 (CCC)^[2,20]、一阶多体理论 (FOMBT)^[21]、B-spline R 矩阵法^[22] 以及相对论扭曲波近似法 (RDW)^[23-25] 等对镁原子基态 $3s^2\ ^1S_0$ 到较低激发态 $3s3p$, $3s3d$ 以及较高激发

* 国家自然科学基金 (批准号: 10875017, 10876028, 10964010, 91126007) 和甘肃省高等学校科研业务费专项基金资助的课题.

[†] E-mail: xiely@nwnu.edu.cn

态 $3s4l$ ($l = s, p, d, f$) 的碰撞激发总截面、微分截面和 Stokes 参数等进行了广泛的研究. 然而, 就镁原子的碰撞激发而言, 目前不同实验结果之间以及实验测量和理论计算之间仍存在偏差, 这一点在镁原子较高激发态 $3s4l$ ($l = s, p, d, f$) 中尤为明显 [22].

本文利用我们小组发展的处理极化电子与原子 (离子) 非弹性碰撞的相对论扭曲波计算程序 REIE06 [26–28], 系统计算了入射电子能量分别为 10, 20, 40, 60, 80 eV 时镁原子基态 $3s^2 1S_0$ 到激发态 $3s3p^1 P_1$, $3s4p^1 P_1$ 的微分截面和 Stokes 参数, 并分析了其随散射角和入射电子能量的变化规律. 同时, 将计算结果与已有的实验数据和其他理论结果进行了详细比较.

2 理论方法

2.1 电子碰撞激发微分截面

考虑一个具有能量 ε_i , 自旋分量为 m_{s_i} 的入射电子与具有 N 电子的非极化靶原子发生非弹性碰撞, 使靶原子从初态 (J_i, M_i) 激发到末态 (J_f, M_f), 电子碰撞激发的微分截面可以表示为

$$\frac{dQ}{d\Omega} = \frac{1}{2J_i + 1} \sum_{M_i, M_f} \frac{1}{2} \sum_{m_{s_i}, m_{s_f}} |B_{m_{s_i} m_{s_f}}^{m_{s_i}}|^2, \quad (1)$$

其中, J 为总角动量, M 为其 Z 轴分量, i, f 分别表示碰撞激发的初态、末态, $B_{m_{s_i} m_{s_f}}^{m_{s_i}}$ 是碰撞激发振幅, 表示为

$$\begin{aligned} B_{m_{s_i} m_{s_f}}^{m_{s_i}} = & \frac{2a_0\pi^{1/2}}{k_i} \sum_{\substack{l_i, j_i, m_i, m_{l_i} \\ l_f, j_f, m_f, m_{l_f}}} \sum_{J, M} (i)^{l_i - l_f} (2l_i + 1)^{1/2} \\ & \times \exp[i(\delta_{k_i} + \delta_{k_f})] Y_{l_f}^{m_{l_f}} \\ & \times C \left(l_i \frac{1}{2} m_{l_i} m_{s_i}; j_i m_i \right) \\ & \times C \left(l_f \frac{1}{2} m_{l_f} m_{s_f}; j_f m_f \right) \\ & \times C (J_i j_i M_i m_i; JM) \\ & \times C (J_f j_f M_f m_f; JM) T(\gamma_i, \gamma_f), \end{aligned} \quad (2)$$

式中, a_0 为玻尔半径, $C \left(l \frac{1}{2} m_l m_s; jm \right)$ 和 $C (J_t j M_t m; JM)$ 为 C-G 系数, J 为碰撞体系 (电子 + 靶) 的总角动量量子数, m_{s_i} , l_i , j_i , m_{l_i} 分别为连续电子自旋、轨道和总角动量及其轨道 Z 分量的角动量量子数, k_i 为入射电子的相对论波

数 $k_i^2 = \varepsilon \left[1 + \frac{\alpha^2}{4} \varepsilon \right]$ (ε 的单位为 Rydbergs, α 为精细结构常数), δ_{k_i} 和 δ_{k_f} 分别为初、末态连续电子的库仑相移, $T(\gamma_i, \gamma_f)$ 为与 M 量子数无关的散射矩阵元, 可写为

$$\begin{aligned} T(\gamma_i, \gamma_f) = & \langle \gamma_f J_f, \varepsilon_f \kappa_f; J | \\ & \times \sum_{p, qp < q} \frac{1}{r_{pq}^{N+1}} |\gamma_i J_i, \varepsilon_i \kappa_i; J \rangle, \end{aligned} \quad (3)$$

其中, $|\gamma_i J_i, \varepsilon_i \kappa_i; J \rangle$ 和 $\langle \gamma_f J_f, \varepsilon_f \kappa_f; J |$ 分别表示靶原子和连续电子构成的 $N + 1$ 电子碰撞体系初、末态的波函数. 碰撞体系初、末态的波函数为连续电子与靶原子波函数乘积构成的反对称化的耦合波函数, 表示为 [26]

$$\begin{aligned} |\gamma_t J_t, \varepsilon \kappa; J \rangle = & \frac{1}{(N + 1)^{1/2}} \sum_{P=1}^{N+1} (-1)^{N+1-P} \\ & \times \sum_{M_t, m} C (J_t j M_t m; JM) \\ & \times |\alpha (P_t J_t M_t) \rangle |\varepsilon \kappa m \rangle, \end{aligned} \quad (4)$$

式中, $|\alpha (P_t J_t M_t) \rangle$ 为靶原子波函数 ($t = i$ 为初态, $t = f$ 为末态), $|\varepsilon \kappa m \rangle$ 为连续电子波函数. 目前理论中, 靶原子波函数的描述采用了多组态 Dirac-Fock 理论方法 [29–31]. 其中, 任意一个原子态波函数 $|\alpha (P_t J_t M_t) \rangle$ 由具有相同宇称 P_t , 总角动量 J_t 和总角动量磁分量 M_t 的组态波函数线性组合而成, 即

$$|\alpha (P_t J_t M_t) \rangle = \sum_{r=1}^{n_c} C_r(\alpha) |\Gamma_r (P_t J_t M_t) \rangle, \quad (5)$$

式中 n_c 为组态波函数的个数, $C_r(\alpha)$ 为组态混合系数, $|\Gamma_r (P_t J_t M_t) \rangle$ 为组态波函数, 其由单电子的 Dirac 自旋轨道波函数构成的 N 阶 Slater 行列式线性组合而成 [29]. 目前理论中, 靶态能级和波函数的计算采用了国际上广泛使用的原子结构计算程序包 GRASP92 [30].

相对论理论框架下, 连续电子的 Dirac 自旋轨道波函数可以表示为

$$|\varepsilon \kappa m \rangle = \frac{1}{r} \begin{bmatrix} P_{\varepsilon k}(r) \chi_{\kappa m}(\theta, \phi) \\ i Q_{\varepsilon k}(r) \chi_{-\kappa m}(\theta, \phi) \end{bmatrix}, \quad (6)$$

其中, ε 为电子的动能, $\chi_{\kappa m}(\theta, \varphi)$ 为自旋球谐函数, $P_{\varepsilon \kappa}$ 和 $Q_{\varepsilon \kappa}$ 分别为连续电子径向波函数的大、小

分量, 其满足耦合的 Dirac 方程 [32]

$$\begin{aligned} & \left(\frac{d}{dr} + \frac{\kappa}{r} \right) P_{\varepsilon k}(r) \\ & - \left(2c - \frac{\varepsilon}{c} + \frac{Y(r)}{cr} \right) Q_{\varepsilon k}(r) \\ & = -\frac{\chi^{(P)}(r)}{r}, \\ & \left(\frac{d}{dr} - \frac{\kappa}{r} \right) Q_{\varepsilon k}(r) \\ & + \left(-\frac{\varepsilon}{c} + \frac{Y(r)}{cr} \right) P_{\varepsilon k}(r) \\ & = \frac{\chi^{(Q)}(r)}{r}, \end{aligned} \quad (7)$$

其中 $Y(r)$ 为与径向波函数有关的直接势能函数, $\chi^{(P)}(r)$ 和 $\chi^{(Q)}(r)$ 为包含交换势贡献的非奇次项 [32]. 目前理论中, 利用已有的靶态波函数来获得直接势能函数, 并通过迭代自洽场方法 [33] 求解 (7) 式, 可以得到包含电子直接效应和交换效应的连续电子波函数, 连续电子波函数的归一化则采用了 WKB 近似方法 [34].

2.2 电子碰撞激发 Stokes 参数

假设入射电子沿 x 方向, 入射电子与散射电子构成散射平面, 光谱的测量垂直于散射平面, 即沿着 Z 轴方向, 则线形 Stokes 参数 P_1, P_2 及圆形 Stokes 参数 P_3 可表示为 [2,3]

$$P_1 = \frac{I_z(0^\circ) - I_z(90^\circ)}{I_z(0^\circ) + I_z(90^\circ)}, \quad (8)$$

$$P_2 = \frac{I_z(45^\circ) - I_z(135^\circ)}{I_z(45^\circ) + I_z(135^\circ)}, \quad (9)$$

$$P_3 = \frac{I(RHC) - I(LHC)}{I(RHC) + I(LHC)}, \quad (10)$$

其中, $I_z(\alpha)$ 是 Z 轴方向线极化光的极化轴与入射电子方向夹角为 α 时线极化光的强度, $I(RHC)$ 和 $I(LHC)$ 分别为右旋和左旋圆极化光的强度.

电子碰撞激发后靶原子周围电子云的形状通常用形状参数 P_l ($P_l = \frac{l-w}{l+w}$, l, w 分别为电子云的长度与宽度) 和方向参数 γ (电子云对称轴与入射电子方向的夹角) 来描述 [10], P_l 和 γ 可以由 P_1, P_2 来确定, 即

$$P_l = \sqrt{P_1^2 + P_2^2}, \quad (11)$$

$$\gamma = 0.5 \arg(P_1 + P_2). \quad (12)$$

碰撞激发取向参数 L_\perp 描述了散射过程中垂直于散射平面的角动量转移, 反映了磁量子能级 ($\pm M$) 上电子的非均匀分布, L_\perp 与 P_3 的关系为

$$L_\perp = -P_3. \quad (13)$$

实验上, 通过对上述相关物理量的测量可以得到电子-原子碰撞激发 Stokes 参数及其激发态原子电子云排列和取向参数, 理论的处理则需要计算态多极和散射振幅 [35] 进而得到上述物理量. 相对论扭曲波近似下有关态多极、散射振幅以及 Stokes 参数的计算文献 [36, 37] 已经给出了详细的描述.

3 结果与讨论

对于中性镁原子, 基态与第一激发态以及各激发态之间的耦合都比较强, 为了较好地描述靶态, 理论计算中需要详细考虑电子关联效应. 表 1 给出了计算镁原子 $3s^2 \ ^1S_0 \rightarrow 3s3p \ ^1P_1$ 和 $3s^2 \ ^1S_0 \rightarrow 3s4p \ ^1P_1$ 碰撞激发过程中微分截面和 Stokes 参数包括的关联组态, 同时也给出了目

表 1 计算镁原子 $3s^2 \ ^1S_0 \rightarrow 3s3p \ ^1P_1, 3s4p \ ^1P_1$ 的 DCSs, Stokes 参数选取的关联组态及相关的激发能

能级	选取的组态	本文激发能/eV	NIST ^[39] /eV
$3s^2 \ ^1S_0$	$3s^2, 3s4s, 3s5s, 3p^2, 3p4p,$ $3p5p, 3d^2, 4s^2, 4p^2, 4d^2$	0	0
$3s3p \ ^1P_1$	$3s3p, 3s4p, 3s5p, 3p3d, 3p4s, 3p4d, 3p5s,$ $3d4p, 4s4p, 4s5p, 4p4d, 4p5s$	4.4284	4.3458
$3s4p \ ^1P_1$	$3s3p, 3s4p, 3s5p, 3p3d, 3p4s, 3p4d,$ $3p5s, 3d4p, 4s4p, 4s5p, 4p4d, 4p5s,$ $3d4f, 3d5p, 4d5p, 3p5d, 4p5d, 3p6s,$ $4p6s, 5p6s, 3s6p, 4s6p$	6.2811	6.1182

前的激发能和 NIST^[38] 的实验数据. 具体计算中, 为了获得比较精确的靶态波函数和能级, 我们利用 GRASP92 计算程序包^[30], 对碰撞激发初、末靶态波函数进行了独立优化. 从表中可以看出, 目前计算的激发能与 NIST 数据符合得较好, 偏差均小于 2%.

3.1 $3s3p\ ^1P_1$ 碰撞激发微分截面及 Stokes 参数

图 1(a)—(d) 给出了入射电子能量分别为 10, 20, 40, 60 eV 时镁原子 $3s^2\ ^1S_0 \rightarrow 3s3p\ ^1P_1$ 的电子碰撞激发微分截面. 为了便于比较, 同时也给出 Filipovic 等^[17]、Brunger 等^[39] 和 Brown 等^[2,3] 的实验测量结果以及 Zatsarinny 等^[22] 37 态 B 样条 R 矩阵 (BSR37), Filipovic 等^[17] RDW 方法以及 Fursa 等^[20] 109 态 CCC109 的计算结果.

如图 1(a) 所示, 当入射电子能量为 10 eV 时, 目前的理论曲线与实验数据^[2,17,38] 以及 BSR37^[22], CCC109^[20] 的理论结果随散射角的变化趋势基本一致. 在大于 60° 散射角范围内, 目前结果比实验

结果大, 而 BSR37, CCC109 的理论结果却比实验数据小; 在整个散射角范围内, 我们的结果和 Filipovic 等^[17] RDW 的结果与实验结果比较, 发现目前的计算与实验测量值符合得更好. 图 1(b), (c) 分别给出了入射电子能量为 20, 40 eV 时的微分截面, 可以看出 20 eV 时, 在 70° 和 150° 散射角附近各实验和理论结果均出现了两个明显的极小值, 而 40 eV 时两个极小值出现在 60° 和 120° 散射角附近. 对 20 eV 和 40 eV 的微分截面而言, 虽然不同实验结果之间的偏差较大, 但所有的理论结果均处于不同实验结果之间. 本文的计算结果与 BSR37, CCC109 的理论结果在小角散射范围内符合得很好, 在大角散射范围内却大于上述理论结果, 但与 Filipovic 等^[17] 和 Brown 等^[2] 的最新实验结果符合得比较好. 图 1(d) 为入射电子能量为 60 eV 时的微分截面, 可以看到: 在小于 70° 的散射角范围内, 目前结果与 Filipovic 等^[17] 的实验结果具有较好的一致性; 随着散射角的增大, 目前结果与文献^[17] 多组态基态 (MCGS) 关联模型下 RDW 的计算结果基本重合, 但两种理论结果都比实验测量结果偏大.

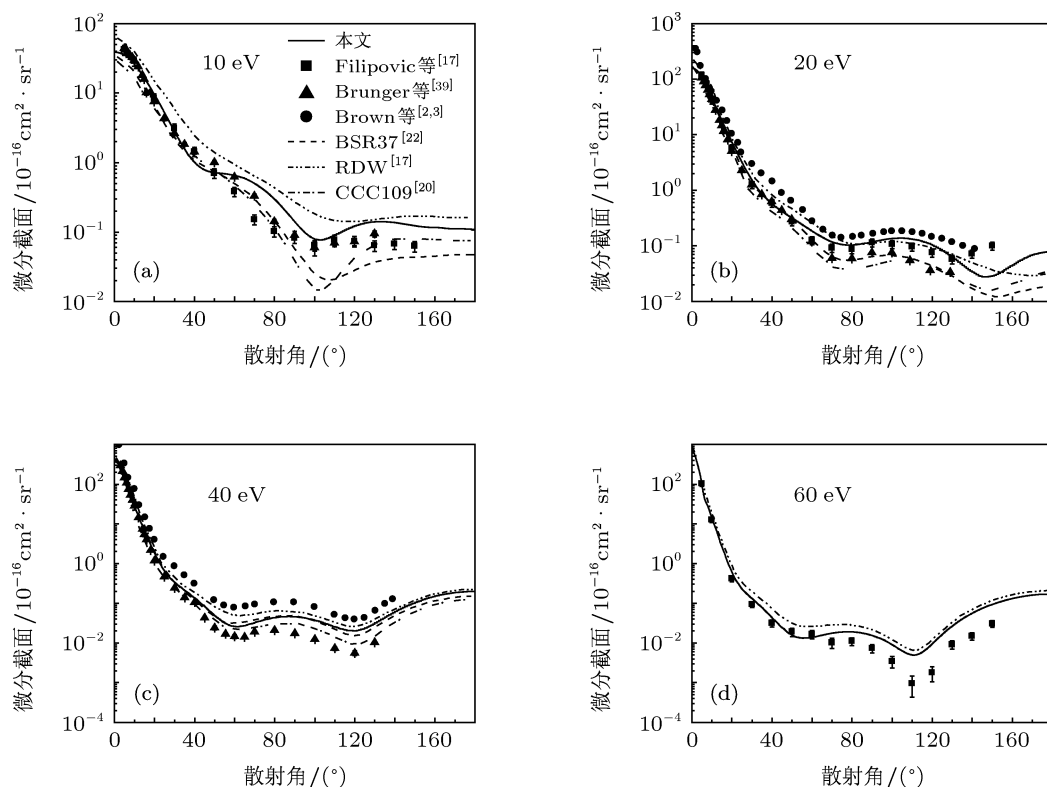


图 1 镁原子 $3s3p\ ^1P_1$ 激发态的微分截面 (a)—(d) 分别对应入射电子能量为 10, 20, 40, 60 eV

图 2(a)—(e) 给出了入射电子能量为 20 eV 时 $3s^2\ ^1S_0 \rightarrow 3s3p\ ^1P_1$ 的碰撞激发 Stokes 参数 P_1 , P_2 , P_3 以及描述电子云形状和方向的参数 P_l , γ

随散射角变化的曲线. 为了便于比较, 图中同时给出了 Brown 等^[2] 的实验结果以及已有的 CCC^[2], RM9^[2], RDW^[24] 方法计算的结果.

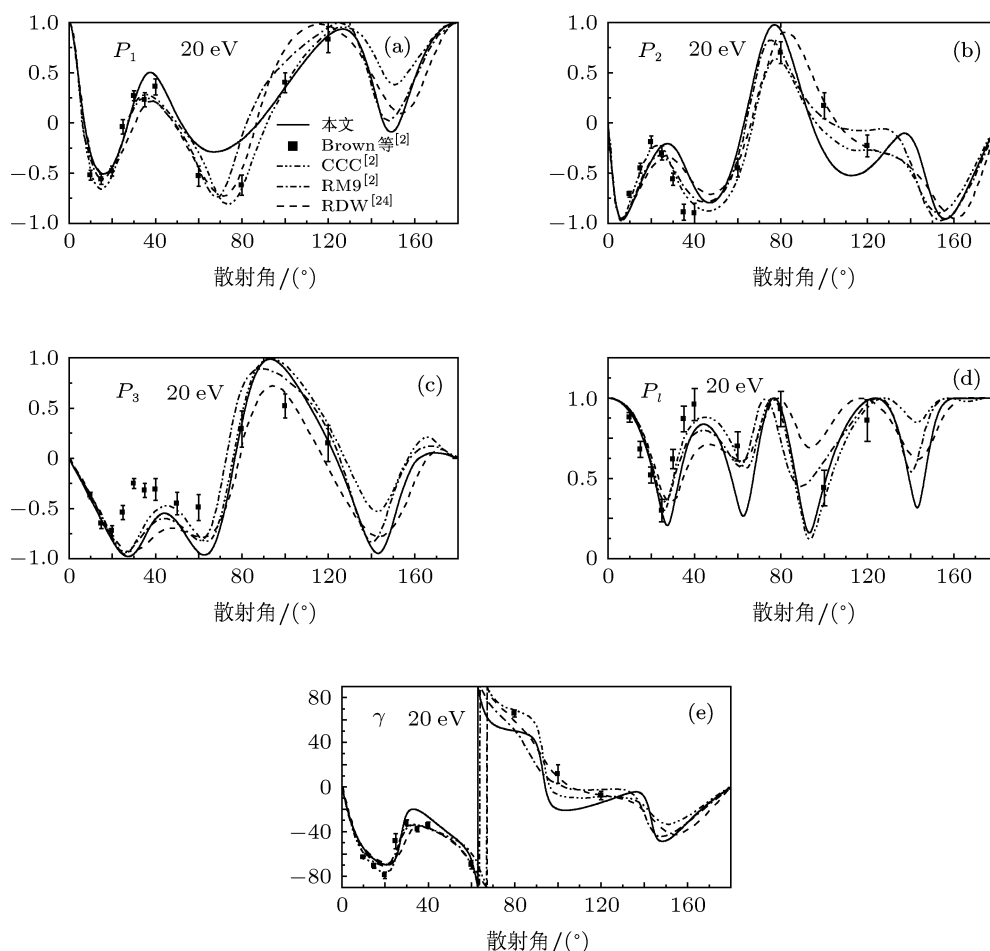


图 2 (a)—(e) 镁原子 $3s3p\ ^1P_1$ 态的 Stokes 参数 P_1 , P_2 , P_3 和参数 P_l , γ

对于线形 Stokes 参数 P_1 , 如图 2(a) 所示, 除了在 60° 到 80° 散射角之间, 目前计算与其他理论及实验结果有较大偏差之外, 在其他散射角处各理论结果与实验测量值之间均符合的比较好; 对于 Stokes 参数 P_2 , 如图 2(b) 所示, 在小于 80° 散射角范围内, 所有理论结果之间均具有较好的一致性, 并与实验值符合得比较好, 而散射角大于 80° 范围, 各理论结果之间存在较大的偏差; 对于圆形 Stokes 参数 P_3 , 如图 2(c) 所示, 在大角散射范围内我们的计算结果与实验数据以及其他理论结果符合得比较好, 但在 20° — 60° 散射角范围各理论结果普遍偏小于实验结果; 对于形状参数 P_l , 如图 2(d) 所示, 在整个散射角内各曲线的变化趋势基本一致, 除 60° 散射角范围外, 总体上目前计算结果与实验测量结果符合得更好; 图 2(e) 中给出了方向参数 γ ,

可以看出在大于 70° 散射角范围内, 我们的理论曲线随散射角的变化幅度要比其他理论曲线的大, 而 60° 散射角附近曲线的突然改变说明方向参数对线形 Stokes 参数 P_1 , P_2 符号的变化非常敏感.

3.2 $3s4p\ ^1P_1$ 碰撞激发微分截面及 Stokes 参数

图 3(a)—(d) 给出了入射电子能量分别为 20, 40, 60, 80 eV 时, 镁原子 $3s^2\ ^1S_0 \rightarrow 3s4p\ ^1P_1$ 的电子碰撞激发微分截面, 同时图中也给出了 Williams 等^[15] 和 Predojevic 等^[18] 的实验测量结果以及 Zatsarinny 等^[22] 37 态 B 样条 R 矩阵理论 (BSR37) 和 Sharma 等^[25] RDW 理论的计算结果.

如图 3(a) 所示, 当入射电子能量为 20 eV 时,

目前结果与实验数据在整个散射角范围内符合得比较好, 而其他理论曲线在大角散射时均偏离实验结果. 图 3(b), (c) 分别给出了入射电子能量为 40, 60 eV 时的微分截面, 可以看出, 目前结果与以往 BSR37^[22], RDW^[25] 理论的计算结果基本符合; 在 60° 和 120° 散射角附近, 实验结果出现了两个极小值, 各理论计算均重现了这一结构, 然而, 在大于 10° 散射角范围, 各理论结果普遍大于实验测量值, 且这种实验和理论之间的偏差在 60 eV 时比 40 eV 更为明显. 图 3(d) 给出了入射电子能量为 80 eV 时我们的计算结果, 结合图 3(a), (b), (c) 不难发现: 各微分截面在结构上整体相似, 但随着入射电子能量的增大, 极小值的大小和出现的位置均发生了变化并呈现出截面逐渐减小, 位置向小散射角移动的趋势.

图 4(a)—(e) 给出了 20—60 eV 能量范围镁原子较高激发态 $3s4p\ ^1P_1$ 的 Stokes 参数 P_1, P_2, P_3

以及电子云的形状参数 P_l 和方向参数 γ . 对于这一激发态, 目前没有相关的实验和理论数据可供比较. 随着入射电子能量的不断增大, 从图 4(a)—(e) 可以看出, P_1, P_2, P_3 和 γ 的曲线变化基本一致, 普遍有向小散射角移动的趋势. 20 eV 与 60 eV 的结果比较, 两者包括形状、极大和极小位置的差别非常明显, 在图中很容易区分, 这种差别在 P_3 中最大. 对于形状参数 P_l , 当入射电子能量为 20 eV 时, 在 80° 和 140° 散射角附近分别出现了一个很明显的谷和峰, 随着入射电子能量的增大峰和谷逐渐变小. 另外, 我们也注意到当入射电子能量从 30 eV 变化到 60 eV 过程中, 在 60° 和 130° 散射角附近也出现了明显的低谷, 其随入射电子能量的变化呈现出了一定的规律性. 整体而言, 对于激发态 $3s4p\ ^1P_1$, 其碰撞激发角关联参数 P_1, P_2, P_3, P_l 及 γ 在低能时随入射电子能量的变化要比高能时敏感.

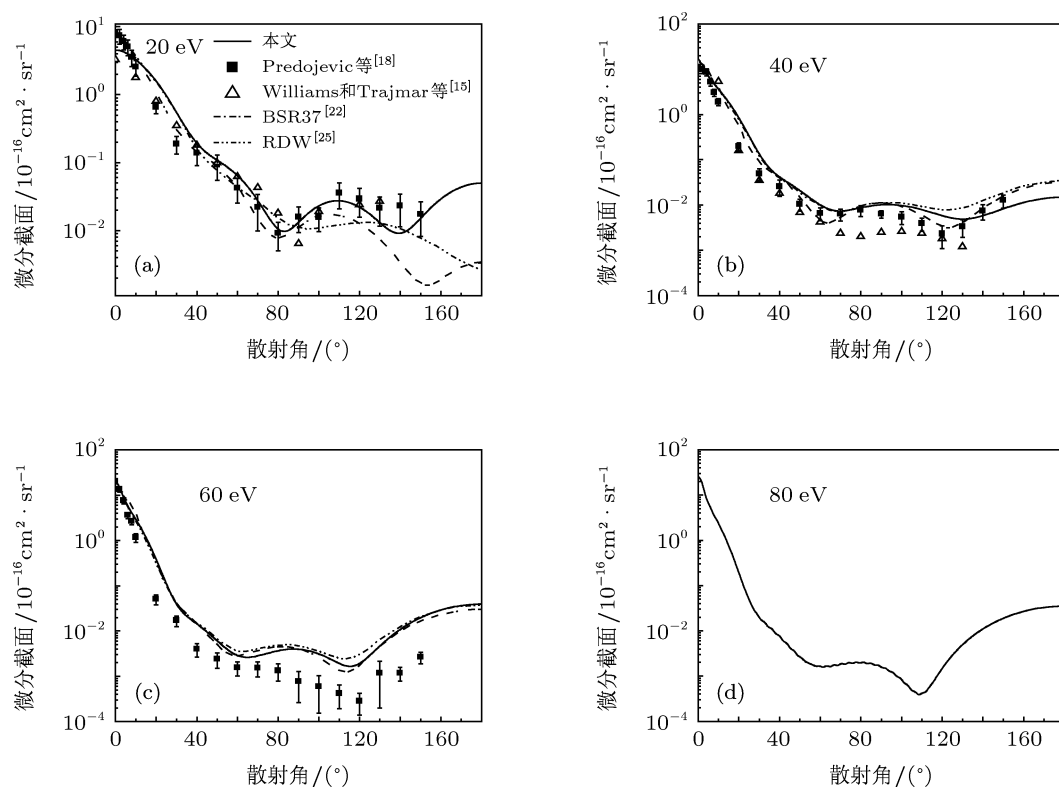
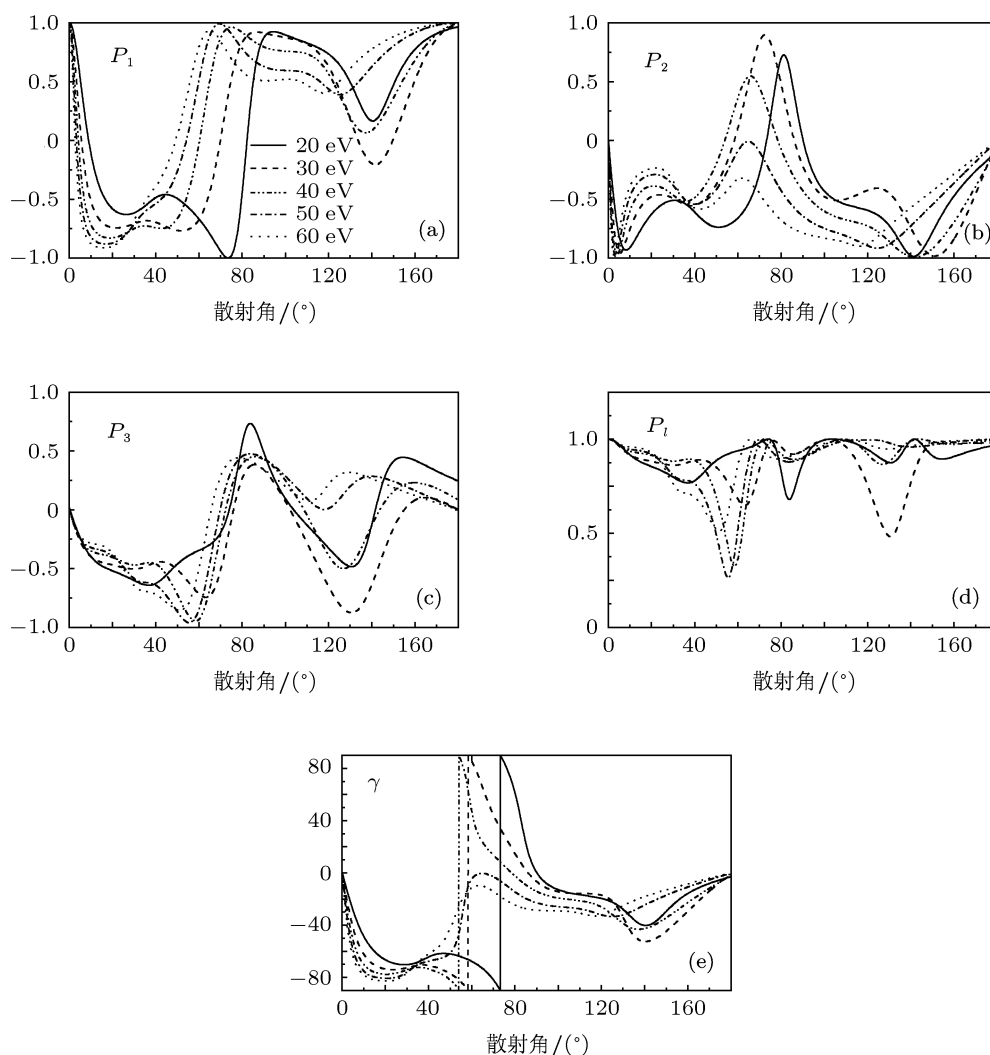


图 3 镁原子 $3s4p\ ^1P_1$ 激发态的微分截面 (a)—(d) 分别对应入射电子能量为 20, 40, 60, 80 eV


 图4 (a)—(e) 镁原子 $3s4p\ ^1P_1$ 激发态的 Stokes 参数 P_1, P_2, P_3 和参数 P_t, γ

4 结论

本文在基于全相对论扭曲波理论方法的基础上, 利用新发展的处理极化电子-原子(离子)碰撞激发过程的程序包 REIE06, 系统计算了镁原子基态 $3s^2\ ^1S_0$ 到激发态 $3s3p\ ^1P_1, 3s4p\ ^1P_1$ 的微分截面和 Stokes 参数, 分析了其曲线结构并与实验数据和其他理论结果进行了比较. 研究表明: 对于镁原子激发态 $3s3p\ ^1P_1, 3s4p\ ^1P_1$ 的微分截面, 当入射电子能量小于 40 eV (约为 $3s3p\ ^1P_1$ 激发能的 9 倍) 时,

目前 RDW 的理论计算与实验测量以及其他理论计算符合得比较好, 而大于 60 eV (约为 $3s3p\ ^1P_1$ 激发能 13 倍) 以后, 尽管理论和实验曲线变化趋势基本一致, 但只有在小角散射范围内它们符合得比较好, 而在大角散射范围内偏差较大. 这种偏差需要其他理论和实验研究进一步检验; 对于激发态 $3s3p\ ^1P_1, 3s4p\ ^1P_1$ 的 Stokes 参数 P_1, P_2, P_3 及电子云形状和方向参数 P_t, γ , 其角分布依赖于入射电子能量的变化要比微分截面敏感且随入射电子能量的增大, 呈现出向小散射角移动的趋势.

- [1] King G C M, Adams A, Read F H 1972 *J. Phys.* B **5** L254
- [2] Brown D O, Crowe A, Fursa D V, Bray I, Bartschat K 2005 *J. Phys.* B **38** 4123
- [3] Brown D O, Cvejanovic D, Crowe A 2003 *J. Phys.* B **36** 3411
- [4] Hermann H W, Hertel I V, Reiland W, Stamatovic A, Stoll W 1977 *J. Phys.* B **10** 251
- [5] Hanne G F, Szymtkowski C Z, Wiel M 1982 *J. Phys.* B **15** L109
- [6] Percival A K, Jhumka S, Hussey M, James A 2011 *J. Phys.* B **44** 105203
- [7] Marrs R E, Levine M A, Knapp D A, Henderson J R 1988 *Phys. Rev. Lett.* **60** 1715
- [8] Henderson J R, Beiersdorfer P, Bennett C L, Chantrenne S, Knapp D A, Marrs R E, Schneider M B, Wong K L, Doschek G A, Seely J F, Brown C M, Lavilla R E, Dubau J, Levine M A 1990 *Phys. Rev. Lett.* **65** 705
- [9] Yatsurugi J, Watanabe E, Ohashi H, Sakaue H A, Nakamura N 2011 *Phys. Scr.* **T144** 014031
- [10] Andersen N, Bartschat K 2001 *Polarization, Alignment, and Orientation in Atomic Collision* (New York: Springer)
- [11] Andersen N, Gallagher J W, Hertel I V 1988 *Phys. Rep.* **165** 1
- [12] Batelaan H, Eck J, Heideman H G M 1988 *J. Phys.* B **21** L741
- [13] Saxena S, Mukhtav K, Srivastava R 2004 *Pramana. J. Phys.* **63** 977
- [14] Liu Y B, Pang W N, Ding H B, Shang R C 2005 *Acta Phys. Sin.* **54** 5121 (in Chinese) [刘义保, 庞文宁, 丁海兵, 尚仁成 2005 物理学报 **54** 5121]
- [15] Williams W, Trajmar S 1978 *J. Phys.* B **11** 2021
- [16] Mitroy J, McCarthy I E 1989 *J. Phys.* B **22** 641
- [17] Filipovic D M, Predojevic B, Sevic D, Pejcev V, Marinkovic B P, Srivastava R, Stauffer A D 2006 *Int. J. Mass. Spectrom.* **251** 66
- [18] Predojevic B, Pejcev V, Filipovic D M, Sevic D, Marinkovic B P 2008 *J. Phys.* B **41** 015202
- [19] Predojevic B, Pejcev V, Filipovic D M, Sevic D, Tomcik B, Marinkovic B P 2011 *J. Phys.* B **44** 055208
- [20] Fursa D V, Bray I 2001 *Phys. Rev. A* **63** 032708
- [21] Meneses G D, Pagan C B, Machado L E 1990 *Phys. Rev. A* **41** 4740
- [22] Zatsarinny O, Bartschat K, Gedeon S, Gedeon V, Lazur V, Nagy E 2009 *Phys. Rev. A* **79** 052709
- [23] Xie L Y, Zhang Z Y, Dong C Z, Jiang J 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 6249 (in Chinese) [颜录有, 张志远, 董晨钟, 蒋军 2008 物理学报 **57** 6249]
- [24] Kaur S, Srivastava R, McEachran R P, Stauffer A D 1997 *J. Phys.* B **30** 1027
- [25] Sharma L, Srivastava R, Stauffer A D 2008 *Phys. Rev. A* **78** 014701
- [26] Jiang J, Dong C Z, Xie L Y, Wang J G, Yan J 2007 *Chin. Phys. Lett.* **24** 691
- [27] Yang N X, Jiang J, Xie L Y, Dong C Z 2008 *Acta Phys. Sin.* **57** 2888 (in Chinese) [杨宁选, 蒋军, 颜录有, 董晨钟 2008 物理学报 **57** 2888]
- [28] Yang N X, Jiang J, Xie L Y, Dong C Z 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 918 (in Chinese) [杨宁选, 蒋军, 颜录有, 董晨钟 2010 物理学报 **59** 918]
- [29] Grant I P 2007 *Relativistic Quantum Theory of Atoms and Molecules* (Springer)
- [30] Parpia F A, Fischer C F, Grant I P 1996 *Comput. Phys. Commun.* **94** 249
- [31] Fritzsche S, Fischer C F, Dong C Z 2000 *Comput. Phys. Commun.* **124** 340
- [32] Dyall K G, Grant I P, Johnson C T, Parpia F A, Plummer E P 1989 *Comput. Phys. Commun.* **55** 425
- [33] Perger W F, Cai Z, Beck D R 1991 *J. Phys.* B **24** 4863
- [34] Ong W, Russek A 1978 *Phys. Rev. A* **17** 120
- [35] Bartschat K, Blum K, Hanne G F, Kessler J 1981 *J. Phys.* B **14** 3761
- [36] Srivastava R, Blum K, McEachran R P, Stauffer A D 1996 *J. Phys.* B **29** 3513
- [37] Kaur S, Srivastava R, McEachran R P, Stauffer A D 1998 *J. Phys.* B **31** 157
- [38] <http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/levels.form.html>
- [39] Brunger M J, Riley J L, Scholten R E, Teubner P J O 1988 *J. Phys.* B **21** 1639

A theoretical study on electron impact excitation differential cross sections and Stokes parameters of Mg atom*

Liu Li-Juan Xie Lu-You[†] Chen Zhan-Bin Jiang Jun Dong Chen-Zhong

(Key Laboratory of Atomic and Molecular Physics and Functional Materials of Gansu Province, College of Physics and Electronic Engineering, Northwest Normal University, Lanzhou 730070, China)

(Received 24 October 2011; revised manuscript received 21 February 2012)

Abstract

Differential cross sections (DCSs) and Stokes parameters for electron impact excitation of $3s3p\ ^1P_1$, $3s4p\ ^1P_1$ states in magnesium are calculated by using the fully relativistic distorted-wave (RDW) program REIE06. In the calculations, the relativistic effects and electron correlations are considered systematically. The results are analyzed and compared with available experimental data and theoretical calculations, and they are in good agreement with each other.

Keywords: electron impact excitation, DCSs, Stokes parameters, RDW method

PACS: 31.15.am, 34.80.Dp

* Project supported by National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10875017, 10876028, 10964010, 91126007) and the Scientific Research Foundation of the Higher Education Institutions of Gansu Province of China.

[†] E-mail: xiely@nwnu.edu.cn