

量子计算正三角形腔内的氢负离子光剥离截面

刘志刚 刘伟龙 赵海军

Quantum calculations for photodetachment cross sections of  $H^-$  in an equilateral triangle cavity

Liu Zhi-Gang Liu Wei-Long Zhao Hai-Jun

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 163202 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.163202

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.163202>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I16>

---

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

外电场中金属表面附近里德堡氢原子的动力学行为

Dynamical properties of Rydberg hydrogen atom interacting with a metal surface and an electric field

物理学报.2013, 62(20): 203401 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.203401>

氢负离子在磁场和金属面附近电子通量分布的研究

Photodetached electron flux of H in magnetic field near a metal surface

物理学报.2013, 62(12): 123201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.123201>

氢负离子在变形球面附近的光剥离

Photodetachment of H near a deform sphere

物理学报.2013, 62(4): 043201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.043201>

氢负离子在磁场和电介质表面附近光剥离的研究

Photo-detachment of hydrogen negative ion in a magnetic field near a dielectric surface

物理学报.2012, 61(6): 063202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.063202>

## 量子计算正三角形腔内的氢负离子光剥离截面\*

刘志刚 刘伟龙 赵海军†

(山西师范大学物理与信息工程学院, 大分子研究中心, 临汾 041000)

(2015年3月12日收到; 2015年4月20日收到修改稿)

用传统量子力学方法研究了横截面为正三角形的腔内氢负离子光剥离, 得到了光剥离截面随能量变化的解析表达式. 该公式还给出了剥离截面的阈值行为. 进一步研究发现, 当氢负离子处于正三角形一角附近时, 用量子力学方法得到的结果与氢负离子处于 $60^\circ$ 角域内时使用闭合轨道理论得到的结果一致.

**关键词:** 光剥离, 正三角形腔, 闭合轨道理论

**PACS:** 32.80.Gc, 34.35.+a, 31.15.xg

**DOI:** 10.7498/aps.64.163202

## 1 引言

1987年, Bryant小组<sup>[1]</sup>给出了静电场中氢负离子光剥离截面的实验结果, 指出处于匀强静电场中氢负离子的光剥离截面随入射光子能量变化呈振荡形式; 1988年, Du和Delos<sup>[2]</sup>利用量子方法得到一个光剥离截面公式, 这一理论工作与Bryant的实验符合得非常好. 同时, Rau和Wong<sup>[3]</sup>利用坐标系变换理论(frame transformation theory)解释光剥离截面的振荡; 后来, Du<sup>[4]</sup>利用闭合轨道理论也给出了对于该问题的解释. 这些研究引起了对各种场环境中的负离子光剥离过程的兴趣, 大量相关的理论工作见诸报道<sup>[5-8]</sup>, 理论研究主要采用Du的闭合轨道理论与Rau使用的坐标变换理论.

最近, 界面环境对负离子光剥离的影响引起了较多的兴趣<sup>[9]</sup>. 例如: 利用量子方法与闭合轨道理论研究电场和弹性界面附近氢负离子的光剥离过程, 研究表明光剥离截面随入射光子能量呈尖锐的不规则台阶状<sup>[10]</sup>; 利用闭合轨道理论研究金属界面附近氢负离子的光剥离问题<sup>[11,12]</sup>. 弹性界面对氢负离子光剥离影响的相关研究也有较多的报道, 如单个界面附近<sup>[13,14]</sup>、平行界面内<sup>[15,16]</sup>、弹性界

面与金属球面之间<sup>[17]</sup>、角域内<sup>[18]</sup>以及矩形腔、圆形腔内等<sup>[19,20]</sup>. 这些研究大多采用闭合轨道理论.

本文使用传统的量子力学方法研究正三角形腔内氢负离子的光剥离过程. 在正三角形腔内, 剥离后电子末态可视为在 $z$ 方向的运动是自由运动, 在 $x, y$ 平面内视为正三角形二维无限深势阱问题. 关于正三角形无限深势阱的能量本征值问题受到了许多关注<sup>[21-24]</sup>. 在坐标表象中, 根据Richens<sup>[21]</sup>的计算方法以及负离子在 $z$ 方向的运动是无限自由的, 可得出正三角形腔内氢负离子的波函数. 我们利用量子方法进一步计算了正三角形腔内氢负离子沿三个偏振方向的光剥离截面, 发现光剥离截面随能量的变化也呈振荡形状. 我们可以设想, 如果取氢负离子距一个角域顶点较近, 那么该顶角所对的边对光剥离的影响就可忽略. 这就与角域内氢负离子的光剥离相类似. 于是, 我们对开放角域内氢负离子的光剥离研究做进一步的处理<sup>[18]</sup>. 取氢负离子距角域顶点较近, 腔角为 $\pi/3$ . 通过一系列计算可得出五个闭合轨道长度以及五条闭合轨道所对应的光剥离截面的振荡, 则角域内距顶点较近的负离子的光剥离截面为自由空间光剥离截面 $\sigma_0$ 加上五条闭合轨道所对应振荡的叠加. 同时与正三角形腔边长值取得较大的光剥离截面进行

\* 国家自然科学基金(批准号:10804066)、山西省自然科学基金(批准号: 2009011004)和山西省高等学校优秀青年学术带头人支持计划资助的课题.

† 通信作者. E-mail: [hjzhao@163.com](mailto:hjzhao@163.com)

比较, 发现两者能很好地对应.

## 2 正三角行腔内氢负离子的光剥离截面

正三角形腔横截面如图 1 所示. 氢负离子位于正三角形腔内, 令正三角形边长为  $l$ , 以氢负离子所处位置为原点建立直角坐标系,  $x$  坐标轴与三角形一边(底边)平行. 令与底边相对的顶角的坐标为  $(-a, -b)$ , 那么  $a$  和  $b$  就可以用来表示氢负离子在正三角形内的相对位置了. 同时我们也可以使用图中所示的  $\rho$  和  $\beta$  来表示氢负离子在正三角形内的相对位置.  $(a, b)$  与  $(\rho, \beta)$  之间有如下简单关系:

$$\begin{aligned} a &= \frac{l}{2} - \rho \cos(\beta), \\ b &= \frac{\sqrt{3}l}{2} - \rho \sin(\beta). \end{aligned} \quad (1)$$

氢负离子光剥离截面公式为

$$\sigma = \frac{2\pi^2}{c} \int 2E_p |\langle \Psi_f | \mathbf{D} | \Psi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E) df, \quad (2)$$

其中,  $c$  为真空中的光速;  $E_p = E + E_b$  为入射光子能量,  $E$  是光剥离后电子的动能,  $E_b = k_b^2/2$  是束缚能;  $\mathbf{D}$  为偶极算符, 如果入射光为沿  $x$  轴、 $y$  轴和  $z$  轴的线偏振光,  $\mathbf{D}$  分别等于  $x$ ,  $y$  和  $z$ ;  $\Psi_i$  是光剥离作用前氢负离子的初态波函数, 可写成单电子的近似形式  $\Psi_i(\mathbf{r}) = B_0 e^{-k_b/2/r}$  [2], 这里的  $B_0 = 0.31522$  是归一化系数;  $\Psi_f$  是光剥离电子后的末态波函数,  $\Psi_f$  归一化满足  $\langle \Psi_f | \mathbf{D} | \Psi_f \rangle = \delta(f - f')$ ,  $f$  用来标记末态, 公式中的  $\int df$  意味着对所有的末态求和.

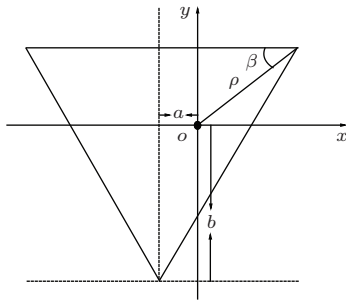


图 1 氢负离子位于正三角形腔中的示意图

Fig. 1. Schematic illustration of the negative hydrogen ion inside a tube cavity with an equilateral triangle section.

当剥离电子吸收光子能量脱离氢原子对它的束缚后, 我们可以把它近似为腔中的自由粒子. 这

时哈密顿量为  $H = p^2/2 + V(\mathbf{r})$ , 其中

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0 & \begin{cases} -\frac{l}{2} - a < x < \frac{l}{2} - a, \\ -b < y < \frac{\sqrt{3}}{2}l - b \\ \left(-\frac{l}{2} < a < 0, \right. \\ \left. -\sqrt{3}a < b < \frac{\sqrt{3}}{2}l\right), \\ -\frac{l}{2} - a < x < \frac{l}{2} - a, \\ -b < y < \frac{\sqrt{3}}{2}l - b \\ \left(0 \leq a < \frac{l}{2}, \right. \\ \left. \sqrt{3}a < b < \frac{\sqrt{3}}{2}l\right). \end{cases} \\ \infty & \end{cases} \quad (3)$$

利用 Richens 曾给出的二维正三角形无限深势阱中能量本征值和对应的波函数, 可以很容易地得到末态能量本征值和末态波函数. 能量本征值为

$$E_{m,n} = \frac{8\pi^2}{9l^2} (m^2 + n^2 - mn) + \frac{1}{2} p_z^2, \quad (4)$$

其中,  $m$  和  $n$  为任意正整数且  $m \geq 2n$ . 当  $m > 2n$  时, 有两个能量简并的本征态

$$\begin{aligned} \Psi_{m,n}^{(1)} = X & \left\{ \sin \left[ \frac{2\pi}{3l} (2m - n)(x + a) \right] \right. \\ & \times \sin \left[ \frac{2\pi n}{\sqrt{3}l} (y + b) \right] \\ & - \sin \left[ \frac{2\pi}{3l} (2n - m)(x + a) \right] \\ & \times \sin \left[ \frac{2\pi m}{\sqrt{3}l} (y + b) \right] \\ & - \sin \left[ \frac{2\pi}{3l} (m + n)(x + a) \right] \\ & \times \sin \left[ \frac{2\pi(m - n)}{\sqrt{3}l} (y + b) \right] \left. \right\} \\ & \times \frac{1}{\sqrt{2\pi}} [\cos(p_z z) + i \sin(p_z z)], \quad (5) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Psi_{m,n}^{(2)} = X & \left\{ \cos \left[ \frac{2\pi}{3l} (2m - n)(x + a) \right] \right. \\ & \times \sin \left[ \frac{2\pi n}{\sqrt{3}l} (y + b) \right] \\ & - \cos \left[ \frac{2\pi}{3l} (2n - m)(x + a) \right] \\ & \times \sin \left[ \frac{2\pi m}{\sqrt{3}l} (y + b) \right] \\ & + \cos \left[ \frac{2\pi}{3l} (m + n)(x + a) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times \sin \left[ \frac{2\pi(m-n)}{\sqrt{3}l}(y+b) \right] \Big\} \\ & \times \frac{1}{\sqrt{2\pi}} [\cos(p_{z0}z) + i \sin(p_{z0}z)]. \quad (6) \end{aligned}$$

当  $m = 2n$  时, 能量本征态为

$$\begin{aligned} \Psi_{2n,n}^{(0)} = & \frac{X}{\sqrt{2}} \left\{ 2 \cos \left[ \frac{2\pi n}{l}(x+a) \right] \sin \left[ \frac{2\pi n}{\sqrt{3}l}(y+b) \right] \right. \\ & \left. - \sin \left[ \frac{4\pi n}{\sqrt{3}l}(y+b) \right] \right\} \\ & \times \frac{1}{\sqrt{2\pi}} [\cos(p_{z0}z) + i \sin(p_{z0}z)]. \quad (7) \end{aligned}$$

以上波函数中的  $X = \sqrt{16/9\sqrt{3}l^2}$ . 把初态波函数和末态波函数代入剥离截面公式, 经过直接的推导可以得到不同偏振情况下的剥离截面公式.

用  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  和  $\sigma_z$  分别表示偏振方向为  $x$ ,  $y$  和  $z$  轴正方向时对应的剥离截面. 它们可以写成下面的形式:

$$\begin{aligned} \sigma_x = & \sigma_0 \frac{\pi^3}{3l^2} \frac{1}{E^{\frac{3}{2}}} X^2 \left\{ \sum_{m,n} \left\{ \cos \left[ \frac{2\pi}{3l}(2m-n)a \right] \right. \right. \\ & \times \sin \left( \frac{2\pi n}{\sqrt{3}l}b \right) (2m-n) \\ & - \cos \left[ \frac{2\pi}{3l}(2n-m)a \right] \sin \left( \frac{2\pi n}{\sqrt{3}l}b \right) (2n-m) \\ & - \cos \left[ \frac{2\pi}{3l}(m+n)a \right] \sin \left[ \frac{2\pi(m-n)}{\sqrt{3}l}b \right] \\ & \left. \times (m+n) \right\}^2 \left[ E - \frac{8\pi^2}{9l^2}(m^2+n^2-mn) \right]^{-1/2} \\ & + \frac{1}{3} \sum_{m,n} \left\{ -\sin \left[ \frac{2\pi}{3l}(2m-n)a \right] \right. \\ & \times \sin \left( \frac{2\pi n}{\sqrt{3}l}b \right) (2m-n) \\ & + \sin \left[ \frac{2\pi}{3l}(2n-m)a \right] \sin \left( \frac{2\pi n}{\sqrt{3}l}b \right) (2n-m) \\ & - \sin \left[ \frac{2\pi}{3l}(m+n)a \right] \sin \left[ \frac{2\pi(m-n)}{\sqrt{3}l}b \right] \\ & \left. \times (m+n) \right\}^2 \left[ E - \frac{8\pi^2}{9l^2}(m^2+n^2-mn) \right]^{-1/2} \\ & + 6 \sum_n \left[ \sin \left( \frac{2\pi n}{l}a \right) \sin \left( \frac{2\pi n}{\sqrt{3}l}b \right) n \right]^2 \\ & \times \left[ E - \frac{8\pi^2}{3l^2}n^2 \right]^{-1/2} \Big\}, \quad (8) \\ \sigma_y = & \sigma_0 \frac{\pi^3}{l^2} \frac{1}{E^{\frac{3}{2}}} X^2 \left\{ \sum_{m,n} \left\{ \sin \left[ \frac{2\pi}{3l}(2m-n)a \right] \right. \right. \\ & \times \cos \left( \frac{2\pi n}{\sqrt{3}l}b \right) n - \sin \left[ \frac{2\pi}{3l}(2n-m)a \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & \times \cos \left( \frac{2\pi m}{\sqrt{3}l}b \right) m - \sin \left[ \frac{2\pi}{3l}(m+n)a \right] \\ & \times \cos \left[ \frac{2\pi(m-n)}{\sqrt{3}l}b \right] (m-n) \Big\}^2 \\ & \times \left[ E - \frac{8\pi^2}{9l^2}(m^2+n^2-mn) \right]^{-1/2} \\ & + \frac{1}{3} \sum_{m,n} \left\{ \cos \left[ \frac{2\pi}{3l}(2m-n)a \right] \right. \\ & \times \cos \left( \frac{2\pi n}{\sqrt{3}l}b \right) n \\ & - \cos \left[ \frac{2\pi}{3l}(2n-m)a \right] \cos \left( \frac{2\pi m}{\sqrt{3}l}b \right) m \\ & + \cos \left[ \frac{2\pi}{3l}(m+n)a \right] \cos \left[ \frac{2\pi(m-n)}{\sqrt{3}l}b \right] \\ & \left. \times \frac{2\pi}{3l}(m-n) \right\}^2 \\ & \times \left[ E - \frac{8\pi^2}{9l^2}(m^2+n^2-mn) \right]^{-1/2} \\ & + \frac{2}{3} \sum_n \left[ \cos \left( \frac{2\pi n}{l}a \right) \cos \left( \frac{2\pi n}{\sqrt{3}l}b \right) n \right. \\ & \left. - \cos \left( \frac{4\pi n}{\sqrt{3}l}b \right) n \right]^2 \left( E - \frac{8\pi^2}{3l^2}n^2 \right)^{-1/2} \Big\}, \quad (9) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_z = & \sigma_0 \frac{3\pi}{2} \frac{1}{E^{\frac{3}{2}}} X^2 \left\{ \sum_{m,n} \frac{1}{3} \left\{ \sin \left[ \frac{2\pi}{3l}(2m-n)a \right] \right. \right. \\ & \times \sin \left( \frac{2\pi n}{\sqrt{3}l}b \right) - \sin \left[ \frac{2\pi}{3l}(2n-m)a \right] \\ & \times \sin \left( \frac{2\pi m}{\sqrt{3}l}b \right) - \sin \left[ \frac{2\pi}{3l}(m+n)a \right] \\ & \left. \times \sin \left[ \frac{2\pi(m-n)}{\sqrt{3}l}b \right] \right\}^2 \\ & \times \left[ E - \frac{8\pi^2}{9l^2}(m^2+n^2-mn) \right]^{1/2} \\ & + \frac{1}{3} \sum_{m,n} \left\{ \cos \left( \frac{2\pi}{3l}(2m-n)a \right) \right. \\ & \times \sin \left( \frac{2\pi n}{\sqrt{3}l}b \right) \\ & - \cos \left( \frac{2\pi}{3l}(2n-m)a \right) \sin \left( \frac{2\pi m}{\sqrt{3}l}b \right) \\ & + \cos \left[ \frac{2\pi}{3l}(m+n)a \right] \sin \left[ \frac{2\pi(m-n)}{\sqrt{3}l}b \right] \Big\}^2 \\ & \times \left[ E - \frac{8\pi^2}{9l^2}(m^2+n^2-mn) \right]^{1/2} \\ & + \frac{1}{6} \sum_n \left[ \sin \left( \frac{4\pi n}{\sqrt{3}l}b \right) - 2 \cos \left( \frac{2\pi n}{l}a \right) \end{aligned}$$

$$\times \sin\left(\frac{2\pi n b}{\sqrt{3}l}\right)\left[E - \frac{8\pi^2}{3l^2}n^2\right]^{1/2}, \quad (10)$$

其中,  $\sigma_0$  是无场时氢负离子的散射截面,

$$\sigma_0 = \frac{16\pi^2\sqrt{2}B_0^2}{3c} \frac{E^{3/2}}{(E_b + E)^3} [7];$$

$\sum_{m,n}$  中  $m$  和  $n$  为所有满足  $E - \frac{8\pi^2}{9l^2}(m^2 + n^2 - mn) \geq 0$  的整数;  $\sum_n$  中  $n$  为所有满足  $E - \frac{8\pi^2}{3l^2}n^2 \geq 0$  的整数.

### 3 结果与讨论

(8)—(10) 式给出了剥离截面入射光子能量的变化. 我们令三角形边长取  $200a_0$ ,  $a_0$  为玻尔半径. 不失一般性, 令  $a = l(2 - \sqrt{2})/4$ ,  $b = l(2\sqrt{3} - \sqrt{2})/4$ , 这样, 对应的  $\rho$  和  $\beta$  分别为  $l/2$  和  $\pi/4$ . 图 2 给出了不同偏振情况下剥离截面随能量的变化曲线.

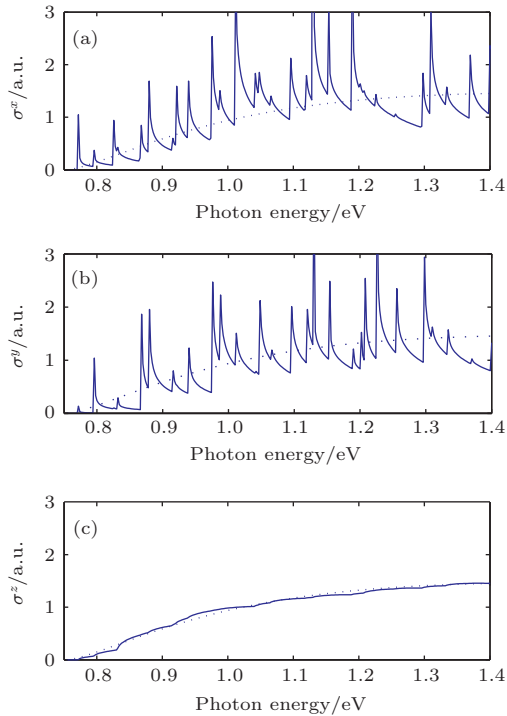


图 2 氢负离子位于正三角形腔中, 光剥离截面随能量的变化, 为方便比较, 自由空间中剥离截面随能量的变化也由点线给出 (a) 入射光子为  $x$  偏振情况; (b) 入射光子为  $y$  偏振情况; (c) 入射光子为  $z$  偏振情况

Fig. 2. The photodetachment cross section of the negative hydrogen ion inside the equilateral triangle cavity. The photodetachment cross section in free field is also given by the dashed line. The laser is linearly polarized in the  $x$ -axis direction (a), the  $y$ -axis direction (b), and the  $z$ -axis direction (c).

从图 2 中可以看出, 对于  $x$  和  $y$  偏振情况, 入射光子能量等于阈值  $E_{th}$  时, 剥离截面发生跃变, 突然增加, 然后随着能量增加缓慢下降, 直到下一能量阈值时又发生跃迁. 整体表现为在  $\sigma_0$  上下剧烈振荡. 对于  $z$  偏振情况, 即入射光子偏振方向垂直于管状腔横截面时, 当入射光子能量等于阈值  $E_{th}$  时, 剥离截面发生跃变, 等于阈值  $E_{th}$  时, 剥离截面随着能量增加缓慢增加后缓慢下降, 直到下一能量阈值时又重复该过程. 整体表现为在  $\sigma_0$  上下轻微振荡. 从 (8)—(10) 式可以看出, 阈值  $E_{th} = \frac{8\pi^2}{9l^2}(m^2 + n^2 - mn)$ ,  $x$  和  $y$  偏振的阈值附近行为为  $\Delta\sigma \propto (E - E_{th})^{-1/2}$ , 而  $z$  偏振的阈值附近行为为  $\Delta\sigma \propto (E - E_{th})^{1/2}$ .

### 4 与角域内的闭合轨道理论结果的比较

文献 [18] 曾给出角域中负离子光剥离截面的闭合轨道理论公式. 如果我们将三角形腔的边长值取的较大、同时  $\rho$  相对较小时, 本文讨论的情况趋近于角域情况. 闭合轨道理论认为, 光剥离后的出射电子受到外界的影响返回到原子附近与出射电子干涉会在剥离截面中贡献一个相应的振荡. 出射电子受到外界的影响返回到原子附近构成闭合轨道. 在一个角内会产生 5 个闭合轨道, 如图 3 所示.

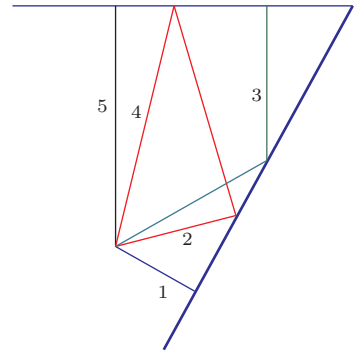


图 3 (网刊彩色) 氢负离子位于  $\pi/3$  的角域中, 光剥离电子的闭合轨道示意图, 图中的数字用来标记轨道

Fig. 3. (color online) The five closed orbits inside a  $\pi/3$  wedge. The index numbers are written near the closed orbits.

在图 3 中有 5 条闭合轨道. 闭合轨道 1 从原子出发被右侧的边界反射回原子附近; 闭合轨道 2 从原子出发被右侧的边界反射后又被上边界反射回原子附近; 闭合轨道 4 和 2 路线相同但是传播方向相反; 闭合轨道 3 从原子出发被右侧的边界反射后

又被上边界反射然后沿原路返回原子附近; 闭合轨道5从原子出发被上边界反射回原子附近.

利用文献[18]中的(13)式可以得出这5条闭合轨道所对应的光剥离截面中的振荡. 光剥离截面即为自由空间光剥离截面 $\sigma_0$ 加上所有这5条闭合

轨道所对应的振荡的叠加. 图4给出了 $x$ 偏振和 $y$ 偏振情况下5条轨道所对应的振荡的图像, 同时也对这些振荡的叠加与三角形腔的边长值取的较大、同时 $\rho$ 相对较小时三角形腔内的光剥离截面进行了比较.

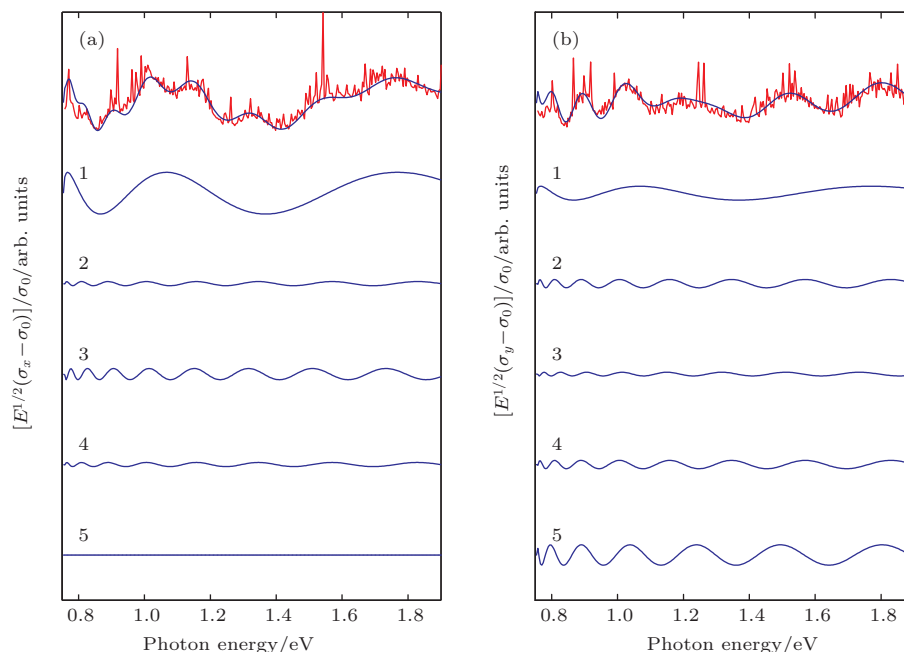


图4 (网刊彩色) 顶端的图像为氢负离子位于正三角形腔中靠近一角时的光剥离截面(用红色的细实线表示, 注意到我们已经去掉了自由空间光剥离部分并乘以标度因子)和氢负离子位于 $\pi/3$ 角域中时的光剥离截面(用蓝色的粗实线表示)的比较, 下面的5条曲线分别为5个闭合轨道各自对光剥离中振荡的贡献

Fig. 4. (color online) The top panel displays the oscillating part of the cross section when the negative hydrogen ion is placed near a corner of the equilateral triangle (with red thin solid lines, noticed that we have removed photodetachment in the free field and multiplied the scale factor) and in the open cavity with an opening angle of  $\pi/3$  (with blue heavy line). The oscillatory contribution associated with each closed orbit is displayed below from closed orbits 1 to 5.

和图2中的 $\rho$ 和 $\beta$ 取值一样, 仍然分别为 $100a_0$ 和 $\pi/4$ . 取三角形边长为 $l = 1000a_0$ , 图4中的最顶端的图像为光剥离截面的振荡部分, 可以看到角域情况闭合轨道理论结果和负离子靠近三角形一角时的量子结果符合得很好. 图4也给出了每一条闭合轨道所对应的振荡. 三角形腔中量子结果中的更为精细的振荡来自于更长的闭合轨道, 这些闭合轨道在三角形趋近于角域时将消失. 三角形腔内的闭合轨道理论研究将是我们接下来工作所要考虑的问题.

## 参考文献

[1] Bryant H C, Mohagheghi A, Stewart J E, Donahue J B, Quick C R, Reeder R A, Yuan V V, Hummer C R,

Smith W W, Cohen S, Reinhardt W P, Overman L 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 2412

- [2] Du M L, Delos J B 1988 *Phys. Rev. A* **38** 5609  
 [3] Rau A, Wong H 1988 *Phys. Rev. A* **37** 632  
 [4] Du M L 2004 *Phys. Rev. A* **70** 055402  
 [5] Peters A D, Delos J B 1993 *Phys. Rev. A* **47** 3036  
 [6] Du M L 1989 *Phys. Rev. A* **40** 1330  
 [7] Du M L 2006 *Eur. Phys. J. D* **38** 533  
 [8] Yang G C, Mao J M, Du M L 1999 *Phys. Rev. A* **59** 2053  
 [9] Rous P J 1999 *Phys. Rev. Lett.* **83** 5086  
 [10] Yang G C, Zheng Y Z, Chi X X 2006 *Phys. Rev. A* **73** 043413  
 [11] Zhao H J, Du M L 2009 *Phys. Rev. A* **79** 023408  
 [12] Wang D H, Yu Y J, Wang H R 2009 *Chin. Opt. Lett.* **7** 176  
 [13] Yang G C, Zheng Y Z, Chi X X 2006 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **39** 1855  
 [14] Afaq A, Du M L 2007 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **40** 1309

- [15] Yang G C, Rui K K, Zheng Y Z 2009 *Physica B* **404** 1576  
 [16] Wang D H, Ma X G, Wang M S, Yang C L 2007 *Chin. Phys.* **16** 1307  
 [17] Li S S, Wang D H 2014 *Chin. Phys. B* **23** 023402  
 [18] Zhao H J, Du M L 2011 *Phys. Rev. E* **84** 016217  
 [19] Wang D H, Li S S, Wang Y H, Mu H F 2012 *J. Phys. Soc. Jpn.* **81** 114301  
 [20] Wang D H, Liu S, Li S S, Wang Y H 2013 *Chin. Phys. B* **22** 073401  
 [21] Richens P J, Berry M V 1981 *Physica D* **2** 495  
 [22] Li W K, Blinder S M 1987 *J. Chem. Educ.* **64** 130  
 [23] Li W K, Blinder S M 1985 *J. Math. Phys.* **26** 2784  
 [24] Lin S L, Gao F, Hong Z P, Du M L 2005 *Chin. Phys. Lett.* **22** 9

## Quantum calculations for photodetachment cross sections of $H^-$ in an equilateral triangle cavity\*

Liu Zhi-Gang Liu Wei-Long Zhao Hai-Jun<sup>†</sup>

(Center for Molecules Research, School of Physics and Information Science, Shanxi Normal University, Linfen 041000, China)

( Received 12 March 2015; revised manuscript received 20 April 2015 )

### Abstract

In this paper, the photodetachment cross section of negative hydrogen ion inside a tube cavity with an equilateral triangle cross section is investigated by the traditional quantum approach. Then the analytic formulas each as a function of photon energy having been derived, some interesting oscillations in the photodetachment cross section are shown from the numerical illustrations. The formulas indicate that the oscillations are related to the positions of the ion and the photon polarization. The polarization of photons being perpendicular to the normal direction of the triangle, the cross sections apparently display large amplitude sawtooth-shaped oscillations, while being parallel to the normal direction of the triangle, oscillations are still present and observable from the quantum calculations, although the amplitudes of the oscillations are rather small. The subtle effect is also observed in the quantum theory for photodetachment in an electric field. The formulas also reveal threshold behaviors in the photodetachment cross sections. The threshold is expressed as  $E_{\text{th}} = \frac{8\pi^2}{9l^2}(m^2 + n^2 - mn)$ , where  $l$  is the length of the triangle side,  $n$  and  $m$  are for all integers with  $m \geq 2n$ . When the polarization of photons is perpendicular to the normal direction of the triangle and the energy of the detached electron is above each threshold, the threshold behavior is  $\Delta\sigma \propto (E - E_{\text{th}})^{-1/2}$ . When the polarization of photons is parallel to the normal direction of the triangle and the energy of the detached electron is above each threshold, the threshold behavior is  $\Delta\sigma \propto (E - E_{\text{th}})^{1/2}$ . Furtherly, if the negative hydrogen ion is placed near one corner of the equilateral triangle, the quantum results show agreement with those from the closed-orbit theory when the negative hydrogen ion is in a wedge with an opening angle of 60 degrees. If that occurs, the five sinusoidal oscillations, each of which will correspond to one closed orbit, can be extracted from the photodetachment cross sections. These five closed orbits are definitely the orbits when the negative hydrogen ion is in a wedge with an opening angle of 60 degrees.

**Keywords:** photodetachment, equilateral triangle cavity, closed orbit theory

**PACS:** 32.80.Gc, 34.35.+a, 31.15.xg

**DOI:** 10.7498/aps.64.163202

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10804066), the Natural Science Foundation of Shanxi Province of China (Grant No. 2009011004), and the Shanxi Provincial Foundation for Leaders of Disciplines in Science, China.

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: [hjzhao@163.com](mailto:hjzhao@163.com)