

电子与氖原子在 10—100 eV 能量范围内的散射截面

金石琦 徐至展

(中国科学院上海光学精密机械研究所强激光开放研究实验室, 上海 201800)

(1997 年 9 月 1 日收到)

研究了电子与氖原子在 10—100 eV 能量范围内的碰撞, 给出散射从基态到 $n \leq 4$ 各态的微分散射截面。

PACC: 3480; 3480B

1 引言

电子与原子和离子的碰撞是原子与分子物理学中很重要的研究课题之一。许多原子与分子物理学家对其十分感兴趣。其研究内容主要是实验测量和理论计算这些过程的散射截面。研究对象从简单的电子与氢原子碰撞到与多电子原子的碰撞。理论计算方法从玻恩近似、扭曲波方法、闭耦合方法等直到最近广泛运用的收敛闭耦合方法^[1-6]。对称和准对称闭合壳层系统散射电子具有较高的跃迁概率^[7]。电子与高 Z 离子碰撞可导致双电子复合过程发生^[8]。本文研究电子与氖原子对称闭合壳层系统碰撞。碰撞过程及相关的散射参数对进一步研究高温等离子体、受控核聚变等都很有价值。

2 理论模型

解决电子与原子碰撞整个体系的薛定谔方程为

$$H\Psi = E\Psi, \quad (1)$$

其中哈密顿量可写为

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{10} \nabla_i^2 - \sum_{i=1}^{10} \frac{10}{r_i} + \sum_{i < j}^{10} \frac{1}{|r_i - r_j|}. \quad (2)$$

(2) 式等号右端第一项是电子动能, 第二项是电子与原子核的相互作用能, 第三项是两电子之间的相互作用能。(1) 式中的能量包括入射电子的能量 $\frac{1}{2} k_0^2$ 和原子的能量 E_0 ,

$$E = \frac{1}{2} k_0^2 + E_0, \quad (3)$$

波函数 Ψ 在 r 趋于无穷远时满足如下渐近条件:

$$\Psi_{n\text{LMS}} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} e^{i\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{r}} \psi_{\alpha_0 S_z 0} + \sum_{\alpha S_z} \frac{e^{i\mathbf{k}_\alpha \cdot \mathbf{r}}}{r} \psi_{\alpha S_z} f(\theta), \quad (4)$$

其中 α 为所有量子数的一种简单表示方法, 即 $\alpha \equiv (n, L, M, S)$, S_z 是自旋投影, n 为主量子数, L 是角量子数, M 是角量子数的投影, S 为自旋量子数. (4) 式中的 α 求和包括开通道. $f(\theta)$ 是散射球面波函数的散射振幅.

根据能量守恒原理

$$\frac{1}{2} k_0^2 + E_0 = \frac{1}{2} k_\alpha^2 + E_\alpha, \quad (5)$$

其中 E_0 和 E_α 是原子的能级. 随着散射角的增大接收装置接收到的入射电子平面波信号将会减少直至可以忽略.

当电子与氖原子碰撞时, 氖原子从初态 $|i\rangle$ 跃迁到末态 $|f\rangle$ 的微分散射截面为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{k_f}{k_i} \left| \langle \alpha^f S^f | f | \alpha^i S^i \rangle \right|^2. \quad (6)$$

散射振幅 $f(\theta)$ 可由波函数 Ψ 满足 (4) 式的边界条件求解方程 (1) 得出. (1) 式中的波函数在描述电子与原子构成的体系时, 可用下式表示^[9]:

$$\Psi = \sum_{i=1}^N [\psi_i(r_1) F_i(r_2) \pm \psi_i(r_2) F_i(r_1)] + \sum_k C_k \phi_k, \quad (7)$$

其中 ψ_i 是原子的初态波函数, F_i 是渐近连续态波函数, ϕ_k 是由于用切断无限求和引起的不准确性而引入的修正波函数, C_k 是展开系数.

3 数值分析与结论

根据第二节的理论模型, 我们计算了电子与氖原子碰撞的微分散射截面. 入射电子能量为 10—100 eV. 图 1(a)—(d) 分别为入射电子能量 5, 10, 18 和 20 eV.

氖原子作为靶其低能级 ($n \leq 4$) 的间隔从 0.1 至 67.1 eV 不等. 选上述几种入射电子能量计算微分散射截面另一方面是为了与文献[5]中的电子与氦原子碰撞收敛闭耦合方法加以比较. 入射电子能量为 18 和 20 eV 的微分散射截面较文献[5]中电子与氦原子碰撞的微分散射截面低一个数量级. 电子与氖原子碰撞把大部分能量传递给靶氖原子, 使靶原子中的电子打到高激发态, 然后以光子形式辐射能量. 而入射电子丢失了大部分能量后, 剩余能量不能维持电子达到接收器处, 致使碰撞后散射截面降低.

图 2 和图 3 是我们计算的入射电子能量为 30 eV, 从不同激发态 $n \leq 4$ 得到的微分散射截面.

与文献[5]中的图 2 相比, 在激发态 $n=3$ 时 (单重态, 如图 3(c) 所示) 氖原子与氦原子对电子散射的规律及微分散射截面数量级相同. 三重态的差别很大. 氖原子与氦原子虽然都是闭合壳层原子, 但氖原子比氦原子多 8 个电子, 氖原子的核外 10 个电子尤其是最外层的 6 个 p 电子之间的相互作用对入射电子的散射有很大的影响. 三重态与单重态跃迁的竞争要弱些. 由图 3(a), (b) 和 (c) 显示三重态高角动量的跃迁竞争则比其低角动量要强些, 如图 3(d) 所示.

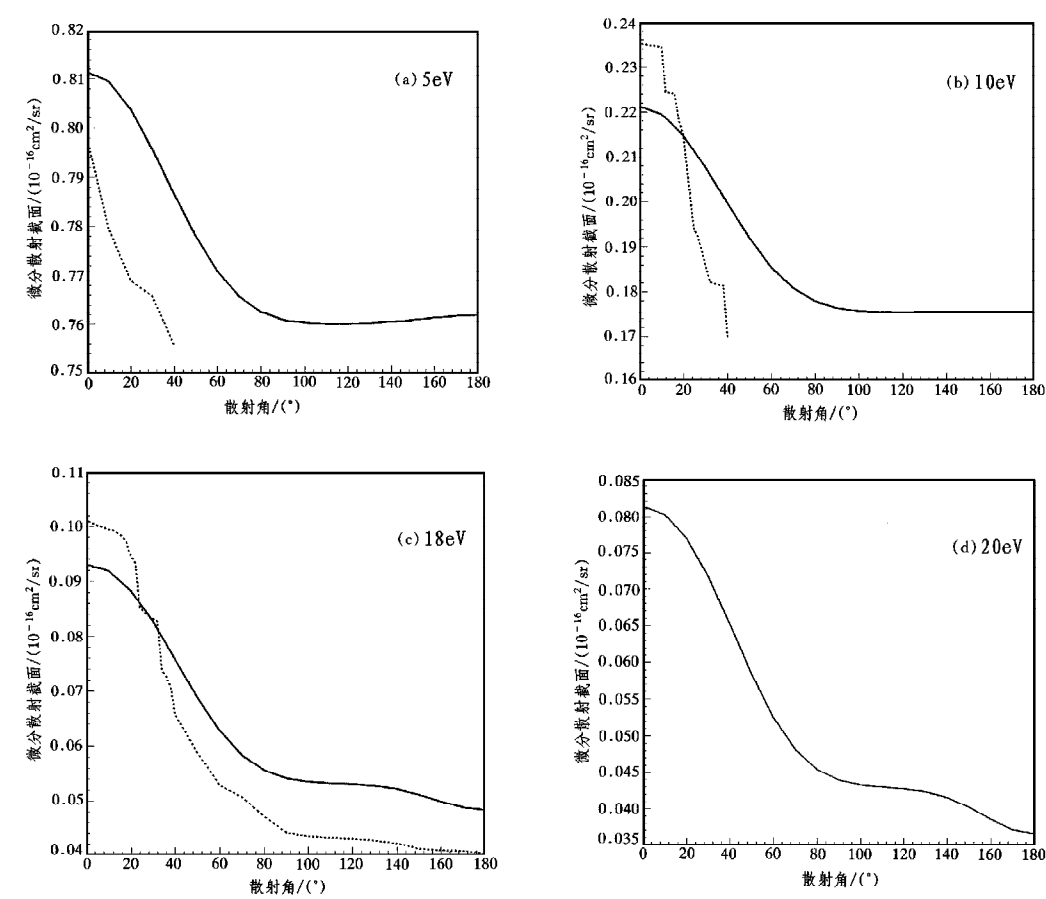


图 1 不同入射电子能量的氖原子散射电子的微分散射截面 ——为本文工作模型结果；
.....为扭曲波近似结果

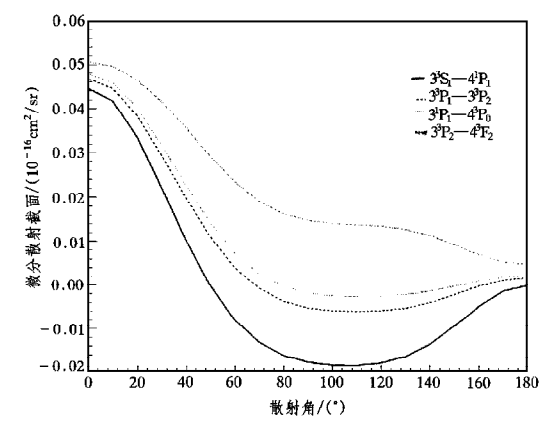


图 2 入射电子能量为 30 eV 氖原子散射电子的微分散射截面

图 4 至图 9 是电子入射能量在 10 与 100 eV 之间从不同角度的电子与氖原子碰撞散射截面. 靶氖原子的态包括 s, p, d 分波的贡献. 入射电子能量位于 $60 \text{ eV} < E_e < 70 \text{ eV}$ 之间时, 散射出现共振结构, 在大角度方向由于微分散射截面下降共振结构明显些. 在大角

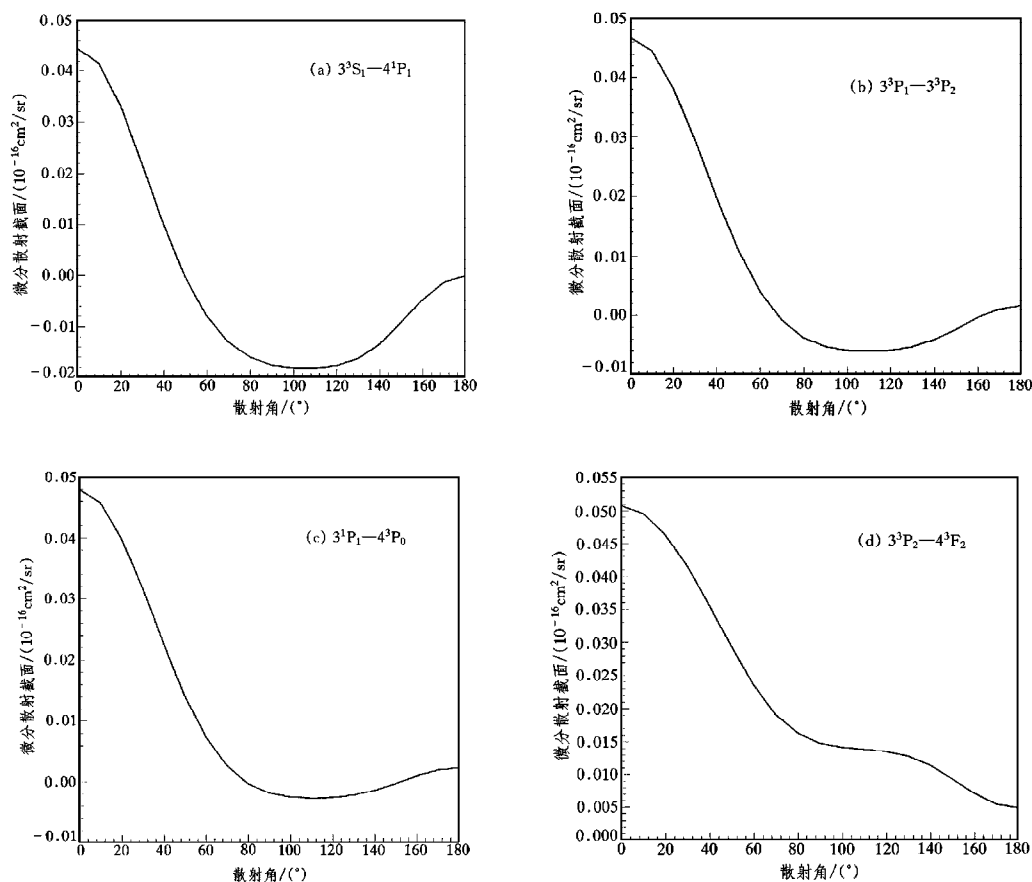


图 3 入射电子能量为 30 eV 氖原子散射电子的微分散射截面

度方向几乎没有入射电子平面波出现, 散射截面比在小角度散射时下降许多, 在共振区电子被散射到大角度方向增强, 散射截面会反弹出现波峰. 我们认为出现共振峰是入射电子能量可以电离靶氖原子中的一个内壳层电子, 剩余能量还可使入射电子经散射后到达接收装置. 当入射电子能量继续增大, 运行速度很快时, 入射电子波函数在碰撞区域还没有来得及与靶原子波函数耦合相互作用时已经运行到碰撞作用区域外. 散射截面随入射电子能量增加跃过共振峰后下降.

小角度(图 4 所示 30°)的散射截面比大角度散射截面(图 9 所示 150°)要大一个数量级. 即使在共振结构峰值处大角(150°)的散射截面也比小角(30°)散射小得多.

总之, 我们讨论了入射电子能量在 10 至 100 eV 之间的电子与氖原子的碰撞规律. 在引言中我们提到的几种方法, 其中玻恩方法对于入射粒子能量很高时, 散射截面主要集中

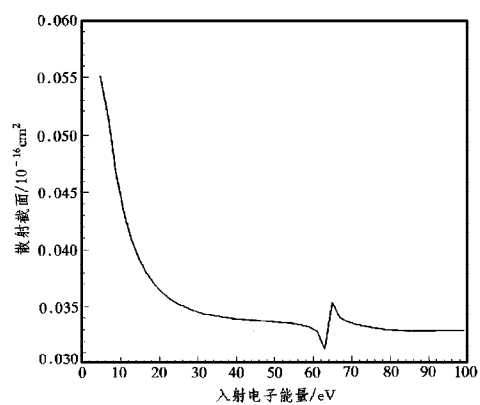


图 4 电子与氖原子在 30°碰撞的散射截面

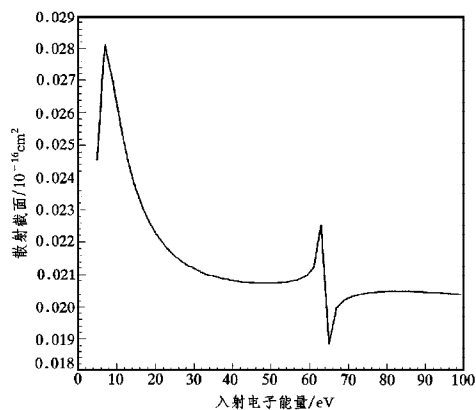


图 5 电子与氖原子在 45°碰撞的散射截面

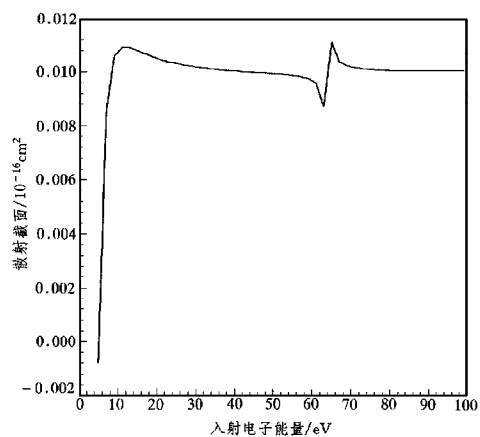


图 6 电子与氖原子在 60°碰撞的散射截面

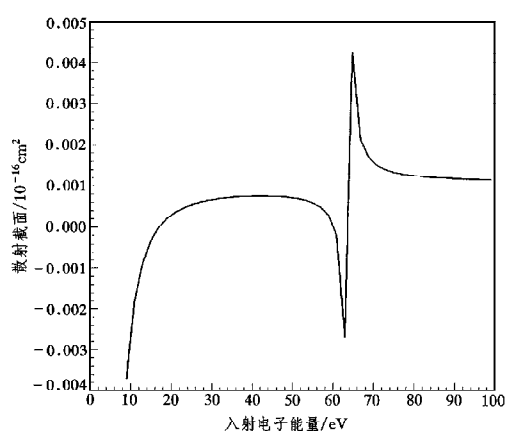


图 7 电子与氖原子在 90°碰撞的散射截面

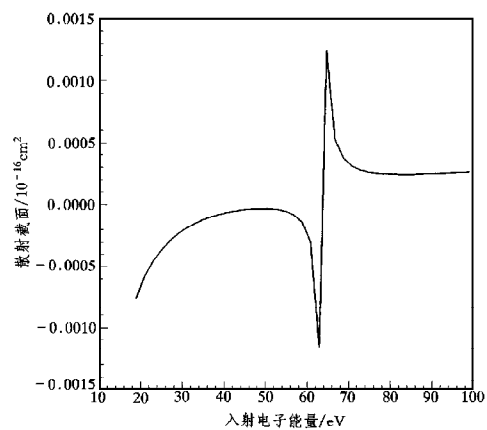


图 8 电子与氖原子在 120°碰撞的散射截面

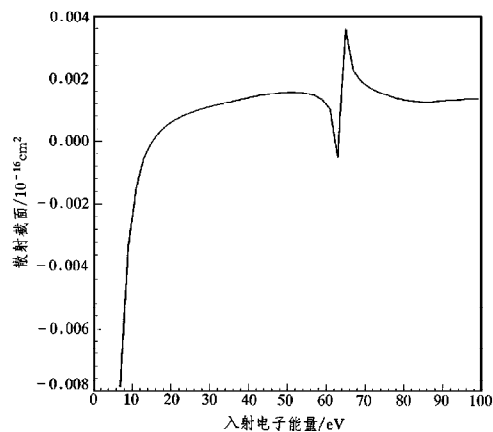


图 9 电子与氖原子在 150°碰撞的散射截面

在小角度范围内不显著为零. 在入射粒子能量很高时, 势场的影响可以看成微扰, 在一级近似下玻恩方法就有较好的结果. 在低能时误差很大, 玻恩方法不适用. 扭曲波方法是基于这样一种近似: 在初始态与最后态之间的耦合是弱的, 且与其它态的耦合也是弱的. 这个近似可使我们从解一组耦合速率方程简化为解单个的微分方程. 在哈密顿量中引进扭曲势 U , $H = H_0 + H'$, 其中 $H' = \sum_{i=1}^N \frac{2}{r_{ri, N+1}} - U$ 作为微扰处理. 闭耦合方法^[10]其方程根据靶态包含连续的完备集上展开, 忽略了连续态在阈上电离导致过高估计散射截面的贡献. 收敛闭耦合方法(CCC)不仅可以用在玻恩近似高能区域, 在中间能量区及低能区域都有较好的近似结果^[11].

- [1] Klaus Bartschat and Igor Bray, *Phys. Rev.*, **A54**(1996), 1723.
- [2] Igor Bray, *Phys. Rev.*, **A49**(1994), 1066.
- [3] Klaus Bartschat and Igor Bray, *Phys. Rev.*, **A54**(1996), R1002.
- [4] Igor Bray and Dmitry V. Fursa, *Phys. Rev.*, **A54**(1996), 2991.
- [5] Dmitry V. Fursa and Igor Bray, *Phys. Rev.*, **A52**(1995), 1279.
- [6] Igor Bray, Dmitry V. Fursa and Ian E. McCarthy, *Phys. Rev.*, **A51**(1995), 500.
- [7] S. Kita and N. Shimakura, *Phys. Rev.*, **A55**(1997), 3504.
- [8] Jin Shiqi, Teng Huaguo, Xu Zhizhan, *Science in China*, **A27**(1997), 475.
- [9] G. F. Drukaver, *Collisions of Electrons with Atoms and Molecules* (Plenum Press, New York and London, 1987), p. 121.
- [10] Igor Bray, Andnis T. Stelbovics, *Phys. Rev. Lett.*, **69**(1992), 53.
- [11] Igor Bray, *Phys. Rev.*, **A49**(1994), R1.

ELECTRON-NEON SCATTERING AT 10—100 eV

JIN SHI-QI XU ZHI-ZHAN

(Laboratory for High Intensity Optics, Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics,
Academia Sinica, Shanghai 201800)

(Received 1 September 1997)

ABSTRACT

We have studied the electron-neon scattering in the range of projectile energies from 10 to 100 eV, presented the differential cross sections of scattering from the ground state to $n \leq 4$ states.

PACC: 3480; 3480B