

# 激光辅助电子-原子碰撞 K-W 公式与第二玻恩近似\*

孙金锋 马二俊 江玉海 张胜海

(河南师范大学物理系, 新乡 453002)

(1999 年 1 月 7 日收到)

最近的 CO<sub>2</sub> 激光辅助电子-原子碰撞的测量结果与 K-W 公式存在着非常大的差异, 用玻恩近似理论对此进行了详细的研究. 结果表明第二玻恩近似结果与实验结果符合得比较好, K-W 公式的预言只相当于第一玻恩近似. 同时, 计算表明电子-原子间的极化势在激光辅助电子-原子散射过程中起着重要的作用.

PACC: 3480Q

## 1 引 言

Wallbank 等<sup>[1-3]</sup>曾报道了在小角度(约 10°) 散射下 CO<sub>2</sub> 激光辅助电子与 He 和 Ar 弹性散射截面的测量结果, 实验中入射电子的动能远大于激光光子能量, 因此 Kroll-Watson<sup>[4]</sup>的低频近似是适用的. K-W 近似是多年来用于分析和预言实验结果的理论方法, 其散射截面公式(简称 K-W 公式)为

$$\frac{d\sigma_{\text{KW}}^{(n)}}{d\Omega} = \frac{k_f(n)}{k_i} J_n^2(x) \frac{d\sigma_{\text{el}}(E_i, Q)}{d\Omega}, \quad (1)$$

其中贝塞尔函数  $J_n(x)$  的宗量  $x = (eE_0/\omega^2) \cdot Q$ ,  $E_0$  为空间均匀、线性极化、单色单模的电场  $E(t) = E_0 \sin(\omega t)$  的振幅, 散射前后电子的动量转移  $Q = k_f(n) - k_i$ . 由于在散射过程中电子可与激光场以量子化的形式( $n\hbar\omega$ ) 交换能量, 所以  $E_f = E_i \pm n\hbar\omega$ ,  $n > 0$  表示电子吸收光子,  $n < 0$  表示电子辐射光子. 对于小角度散射, 由于贝塞尔函数的宗量很小, K-W 公式预言的截面很小, 而实验结果要比其大几个到十几个数量级. Wallbank 等认为这种偏差可能是由于存在靶原子被激光场极化的效应, 但理论计算<sup>[5, 6]</sup>表明这种极化效应在相应的实验条件下可以忽略; Varró 等<sup>[7]</sup>曾提出了一种“原子集合势”作用模式, 得到了与实验较符合的结果, 但有学者分析<sup>[8, 9]</sup>认为 Varró 等的工作中有一个推证性错误, 使得集合作用多估了几个数量级. 本文利用第二玻恩近似(SBA)数值计算 CO<sub>2</sub> 激光辅助电子-氦原子散射的微分截面, 并与 K-W 公式和实验结果进行比较, 同时讨论 K-W 公式和实验结果存在差异的原因.

\* 河南省自然科学基金(批准号: 984052500)资助的课题.

## 2 理论方法

激光场被经典地处理为一空间均匀的线性极化单色单模的电场  $\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 \sin(\omega t)$ , 对应的矢势  $\mathbf{A}$  可表示为

$$\mathbf{A}(t) = \frac{\mathbf{E}_0}{\omega} \cos(\omega t). \quad (2)$$

对于自由-自由跃迁过程, 靶原子在碰撞过程中处于基态不变. 我们把原子视为没有内部结构的具有无限大质量的粒子, 氢原子与电子间的相互作用以等效势  $V(r)$  表示. 设电子电荷为  $-e$  ( $e > 0$ ), 质量为  $m$ , 则存在激光场时电子与原子散射问题的薛定谔方程可表示为

$$\left[ \frac{(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2}{2m} + V(r) \right] |\Psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle. \quad (3)$$

把矢势  $\mathbf{A}$  视为经典数, 且  $\mathbf{A} = \mathbf{A}(t)$  与  $\mathbf{r}$  无关. 作变换

$$|\Psi(t)\rangle = \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \frac{e^2}{2m} \mathbf{A}^2(t') dt'\right] |\Phi(t)\rangle. \quad (4)$$

消去  $\mathbf{A}^2(t)$  项, 有

$$\left[ \frac{p^2}{2m} + \frac{e}{m} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} + V(r) \right] |\Phi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Phi(t)\rangle, \quad (5)$$

其中  $\frac{e}{m} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$  描述入射电子与激光场的相互作用. 开始时 ( $t \rightarrow -\infty$ ) 电子和原子相距很远, 电子和原子间相互作用可不予考虑,  $V = 0$ , 此时(5)式变为

$$\left[ \frac{p^2}{2m} + \frac{e}{m} \mathbf{A} \cdot \mathbf{p} \right] |X_k(\mathbf{r}, t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |X_k(\mathbf{r}, t)\rangle. \quad (6)$$

上式描述在激光场中自由电子的非相对论运动, 其解就是 Volkov 解<sup>[10]</sup>

$$|X_k(\mathbf{r}, t)\rangle = \exp\left[i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - (\hbar k^2/2m)t - \alpha_0 \cdot \mathbf{k} \sin(\omega t)\right], \quad (7)$$

其中  $\alpha_0 = e\mathbf{E}_0/(m\omega^2)$ ,  $\mathbf{k}$  是电子的波矢,  $\mathbf{p}_j = \hbar\mathbf{k}_j$ ,  $E_j = \hbar^2 k_j^2/(2m)$  分别是电子的初态( $j = i$ )和末态( $j = f$ )动量和能量.

取 Volkov 态作为基函数, 则对应的滞留格林函数为

$$G_0^+(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = -\frac{i}{\hbar(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} X_k(\mathbf{r}, t) X_k^*(\mathbf{r}', t') u(t-t'), \quad (8)$$

这里  $u(x)$  是阶跃函数. 方程(5)可利用(8)式等价地表示成 Lippmann-Schwinger 方程的形式,

$$|\Phi_{k_0}^{(+)}(\mathbf{r}, t)\rangle = |X_{k_0}(\mathbf{r}, t)\rangle + \int dt' \int d\mathbf{r}' G_0^+(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') V(\mathbf{r}') |\Phi_{k_0}^{(+)}(\mathbf{r}, t)\rangle. \quad (9)$$

在激光场中运动的电子在原子势  $V(r)$  作用下从初动量  $\hbar\mathbf{k}_i$  跃迁到末动量  $\hbar\mathbf{k}_f$  的散射矩阵可表示为

$$S_{fi} = -\frac{i}{\hbar} \langle X_{k_f} | V | \Phi_{k_i}^{(+)} \rangle, \quad (10)$$

其中  $\Phi_{k_i}^{(+)}$  是方程(5)的解, 具有外行波边界条件,  $\langle \cdot \rangle$  表示对时间和所有空间坐标的

积分.

对方程(9)完成一次叠代后仅保留到第二项, 然后利用方程(7), (8), (10)可得出交换  $n$  个光子时 SBA 散射矩阵  $S_{fi}^{<2>}(n)$ ,

$$\begin{aligned} S_{fi}^{<2>}(n) &= S_{fi}^{(1)}(n) + S_{fi}^{(2)}(n) \\ &= -2\pi i \sum_n \delta(E_f - E_i + n\hbar\omega) T_{fi}^{<2>}(n), \end{aligned} \quad (11)$$

其中

$$\begin{aligned} S_{fi}^{(2)} &= -\frac{i}{\hbar} \int dt \int d\mathbf{r} \int dt' \int d\mathbf{r}' x_{k_i}^*(\mathbf{r}, t) V(\mathbf{r}) G_{k_q}^+(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') V(\mathbf{r}') x_{k_i}(\mathbf{r}', t') \\ &= -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^t dt' \int d\mathbf{k}_q \exp\left[ i \left[ \frac{(E_f - E_q)t}{\hbar} - (\mathbf{k}_f - \mathbf{k}_q) \cdot \alpha_0 \sin(\omega t) \right] \right] \tilde{V}(\mathbf{k}_{fq}) \\ &\quad \times \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\nu} T_{qi}^{(1)}(\nu) \exp\left[ i \left[ \frac{(E_q - E_i)t'}{\hbar} - \nu\omega t' \right] \right], \end{aligned} \quad (12)$$

$$\begin{aligned} T_{fi}^{<2>}(n) &= T_{fi}^{(1)}(n) + T_{fi}^{(2)}(n) \\ &= T_{fi}^{(1)}(n) + \frac{1}{(2\pi)^3} \sum_{\nu} \int d\mathbf{k}_q [E_i - E_q - \nu\hbar\omega + i0^+] J^{-1} T_{fq}^{(1)}(n - \nu) T_{qi}^{(1)}(\nu), \end{aligned} \quad (13)$$

这里

$$T_{\alpha\beta}^{(1)}(m) = J_m(\lambda_{\alpha\beta}) \tilde{V}(\mathbf{k}_{\alpha\beta}), \quad (14)$$

$$\mathbf{k}_{\alpha\beta} = \mathbf{k}_{\alpha} - \mathbf{k}_{\beta}, \quad \lambda_{\alpha\beta} = \alpha_0 \cdot \mathbf{k}_{\alpha\beta}, \quad (15)$$

$$E_{\alpha} = \hbar^2 k_{\alpha}^2 / 2m, \quad \alpha, \beta = i, q, f.$$

$\tilde{V}(\mathbf{k})$  表示对原子势  $V(\mathbf{r})$  的傅里叶变换. 电子-原子体系的相互作用可用定域光学模型势表示为

$$V(\mathbf{r}) = V_s(\mathbf{r}) + V_p(\mathbf{r}). \quad (16)$$

静电势  $V_s(\mathbf{r})$  利用 Hartree-Fock 原子波函数<sup>[11]</sup> 由原子电荷密度来计算. 不含任意参数的电子关联极化势  $V_p(\mathbf{r})$  具有形式<sup>[12]</sup>

$$V_p(\mathbf{r}) = -\frac{\alpha}{2(r^2 + r_-^2)^2}, \quad (17)$$

其中常数  $r_-$  按如下方式确定: 让  $V_p(0) = -\frac{\alpha}{2r_-^4} = V_{\text{corr}}(0)$ , 那么  $r_- = \left[ \frac{-\alpha}{2V_{\text{corr}}(0)} \right]^{1/4}$ ,  $V_{\text{corr}}(\mathbf{r})$  是 Perdew 等<sup>[13]</sup> 提出的近靶区电子关联极化势,  $\alpha$  是电子的极化率. 考虑到计算中所用激光强度为  $10^8 \text{ W/cm}^2$ , 等价的电场强度为  $E_0 \approx 5.3 \times 10^{-5} \text{ a.u.}$ , 在方程(16)中已忽略了激光场对靶原子的缀饰作用. 由于入射电子的能量  $E_i = 10.5 \text{ eV}$  比较大, 况且存在激光场时交换效应通常变小<sup>[14]</sup>, (16)式也未包含交换效应.

从(11)–(15)式可看出: 电子与原子势重复地相互作用, 在这样的相互作用之间电子以 Volkov 态自由地传播, 格林函数实际上就是一个传播子.  $T_{qi}^{(1)}(\nu)$  表示电子在原子势的作用下从初态动量  $\hbar\mathbf{k}_i$  变化到中间态动量  $\hbar\mathbf{k}_q$  的散射振幅, 在时间  $t'$  电子吸收  $\nu$  个光子,

$J_\nu(\lambda_{\mathbf{q}_i})$  就是该吸收过程的振幅.  $T_{\mathbf{q}_i}^{(1)}(n-\nu)$  表示电子在原子势的作用下从中间态动量  $\hbar\mathbf{k}_q$  变化到末态动量  $\hbar\mathbf{k}_f$  的散射振幅, 在时间  $t$  电子吸收  $n-\nu$  个光子,  $J_{n-\nu}(\lambda_{\mathbf{q}_i})$  就是该吸收过程的振幅. 总的效果是电子吸收  $n$  个光子, 在整个过程中, 由于电子受到原子势和光子场的作用,  $\mathbf{k}_i \neq \mathbf{k}_q \neq \mathbf{k}_f$ .  $n$  光子微分截面由以下公式给出:

$$\left[ \frac{d\sigma}{d\Omega} \right]^{(n)} = \frac{k_f(n)}{k_i} \left[ \frac{-m}{2\pi\hbar^2} \right]^2 |T_{\mathbf{q}_i}^{<2>}(n)|^2. \quad (18)$$

注意到方程(13)中的第一项  $T_{\mathbf{q}_i}^{(1)} = T_{\mathbf{q}_i}^B(n)$  正好是第一玻恩近似(FBA)振幅, 则由 FBA 得出的微分截面可表示为

$$\begin{aligned} \left[ \frac{d\sigma^B}{d\Omega} \right]^{(n)} &= \frac{k_f(n)}{k_i} \left[ \frac{-m}{2\pi\hbar^2} \right]^2 |T_{\mathbf{q}_i}^B(n)|^2 \\ &= \frac{k_f(n)}{k_i} J_n^2(\lambda_{\mathbf{q}_i}) \left[ \frac{d\sigma^B}{d\Omega} \right]_{\text{elastic}}, \end{aligned} \quad (19)$$

这里  $\left[ \frac{d\sigma^B}{d\Omega} \right]_{\text{elastic}} = \left[ \frac{-m}{2\pi\hbar^2} \tilde{V}(\mathbf{k}_{\mathbf{q}_i}) \right]^2$  是由 FBA 得出的没有激光场时弹性散射微分截面.

(19)式最早是由 Bunkin<sup>[15]</sup>等推出的.

比较(1)式和(19)式, 两者在形式上完全相同, 只是 K-W 公式中出现无场时精确弹性微分截面, 而在 FBA 公式中则为无场时 FBA 弹性微分截面. 两个公式对散射过程的动力学部分均借助于没有激光场时的弹性微分散射截面来表征, 激光辅助相对信号(指有无激光场时散射微分散射截面的比值)明显地表示为一个简单的解析函数  $J_n^2(\lambda_{\mathbf{q}_i})$ , 该函数仅依赖于激光场的极化方向和入射电子的动量转移, 但与原子势  $V(r)$  无关. 可是从方程(10) — (18), 我们能清楚地看出: 在 SBA 中散射过程的动力学部分已包含了“双散射”效应, 因此激光辅助相对信号不仅与激光场有关, 而且与原子势有关, 这种特性是与 Gelman<sup>[16]</sup>的微扰论一致的.

### 3 结果及讨论

估算二阶项  $T_{\mathbf{q}_i}^{(2)}(n)$  的主要困难是在贝塞尔函数中存在中间态波矢  $\mathbf{k}_q$  和对原子势的傅里叶变换, 而该变换的结果与中间态波矢  $\mathbf{k}_q$  有关,

$$\tilde{V}(\mathbf{k}_{\mathbf{q}_i}) = \frac{4\pi}{|\mathbf{k}_{\mathbf{q}_i}|} \int_0^\infty dr \sin(|\mathbf{k}_{\mathbf{q}_i} r|) r V(r). \quad (20)$$

从方程(13), (14), (20)能看出: 计算  $T_{\mathbf{q}_i}^{(2)}(n)$  事实上就是完成一个四重积分, 方程(20)中积分的上限实际上就是原子势  $V(r)$  的有效范围( $d$ ). 对氢原子, 当  $d$  取  $30a_0$  ( $a_0$  是玻尔半径)时, 该积分已经收敛.

我们选取激光场极化矢量( $\mathbf{E}_0$ )平行于入射电子的方向( $\mathbf{k}_i$ ), 用 SBA 计算在小角度情况( $0^\circ - 25^\circ$ )下激光辅助电子-氢原子散射单光子、双光子和三光子吸收的微分截面. 计算参数如下: 电子入射能量  $E_i = 10.5$  eV, 激光强度  $I = 1.0 \times 10^8$  W/cm<sup>2</sup>, 频率  $\omega = 0.117$  eV. 为了比较, 我们在同样条件下用 K-W 公式和 FBA 计算了微分截面, 这些结果连同 Wallbank 等的实验结果显示在图 1 和图 2 中. 从图中可看出, 与实验结果相比较, SBA 的

结果明显地比 K-W 公式和 FBA 的结果好. K-W 公式和 FBA 的结果比实验值小几个到十几个数量级, 原因是在小角度散射情况下贝塞尔函数的宗量很小, 而当  $x \rightarrow 0$  时,  $J_n(x) \rightarrow x^n (n \geq 1)$ . 但在 SBA 中第二项  $T_n^{(2)}(n)$  在第一次碰撞后要对极角进行积分, 即使对小角

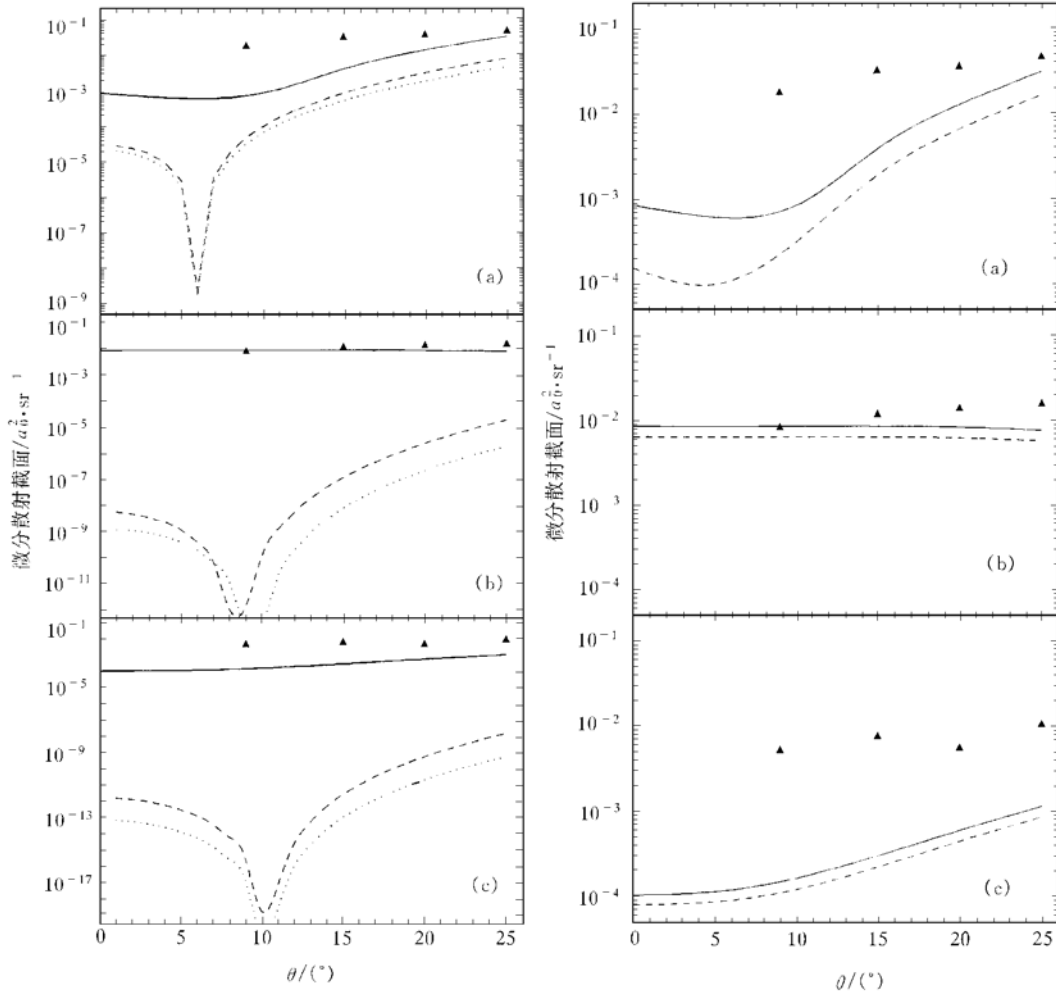


图1 激光辅助电子-氢原子散射的绝对微分截面 (a) 为单光子; (b) 为双光子; (c) 为三光子. —SBA 结果, ...FBA 结果, ---K-W 公式结果,  $\blacktriangle$  实验结果<sup>[3]</sup>

图2 SBA 结果 (a) 为单光子; (b) 为双光子; (c) 为三光子. —包括了极化势, ---仅考虑静电势

度散射, 出现在该积分中的贝塞尔函数可能是大的, 所以二阶振幅比较大, 成为主要项, 从图 1 中 SBA 和 FBA 的比较中可以清楚地看出这一点. 从图 1 还看出, 当散射角增大到超过  $10^\circ$  后, K-W 公式给出的结果逐渐增大到接近实验数据, SBA 和 K-W 公式间的差别在逐渐减小. 这表明 K-W 公式预言大角度时的微分截面是方便的和适当的, 但对于小角度散射, 该公式是不适用的.

从图 2 我们注意到: 电子-原子极化势在激光辅助电子-原子散射过程中起着重要的

作用, 包括了极化势的结果一般是只考虑静电势时结果的 2—3 倍, 且更接近于实验结果.

从图 1 我们能看出, FBA 的结果几乎与 K-W 公式的结果一致. 其物理解释是: 推导 K-W 公式的物理基础在于用 Volkov 基态(描述激光场中自由运动的电子)展开散射过程的 S-矩阵, 如果只保留第一项, 结果就是 FBA. Kroll 等已经证明, 在低频近似条件下, 整个玻恩级数形式上可以求和, 该过程忽略了光子交换的中间过程, 只考虑了光子的直接交换. 从这一点看, K-W 公式和 FBA 是一致的. 但另一方面, 由于在低频近似条件下对整个玻恩级数求和, 所以方程(1)的右边出现的是精确的弹性散射的微分截面, 所以 K-W 公式和 FBA 间还是有区别的.

由图 1 和图 2, 我们发现 SBA 的结果和实验结果之间仍存在着差异, SBA 的结果比实验结果稍小一些, 随着交换光子数的增加, 差别变大了. 对此可以给出的解释是: (1) 实验<sup>[3]</sup>仍有一些缺陷. Madsen 等<sup>[17]</sup>称在实验中入射电子的准直相当差, 散射电子的接收角相当宽. 但 Wallbank 等并没有说明在角定义中对应的不确定性, 只是称电子检测器的角分辨率是  $2^\circ$ , 在精确确定散射角时, 碰撞区的范围也会导致角度的不确定性. 在早期的具有一套类似装置的实验中, Weingarshofer 等<sup>[18]</sup>承认实验中散射角总的不确定性是  $8^\circ$ , 所有这些因素都导致实验结果变大. (2) 我们只考虑了空间均匀的线性极化激光场, 这是一种理想化的激光场, 所以我们并没有完全模拟实验的条件. (3) 计算中只考虑了玻恩级数的前两项, 尤其对于多光子交换过程, 高阶项可能起一定的作用. 尽管如此, 目前的 SBA 得到了令人比较满意的结果, 对小散射角情况下 K-W 公式与实验的矛盾给出了比较合理的解释.

总之, 用 SBA 计算的结果与实验基本符合. 这表明实验结果可以用 SBA 给予解释, 这与双散射的结果<sup>[19]</sup>是一致的.

- [ 1 ] B. Wallbank, J. K. Holmes, *Phys. Rev.*, **A 48**(1993), R2515.
- [ 2 ] B. Wallbank, J. K. Holmes, *J. Phys. B*, **27**(1994), 1221.
- [ 3 ] B. Wallbank, J. K. Holmes, *J. Phys. B*, **27**(1994), 5405.
- [ 4 ] N. M. Kroll, K. M. Watson, *Phys. Rev.*, **A8**(1973), 804.
- [ 5 ] S. Geltman, *Phys. Rev.*, **A51**(1995), R34.
- [ 6 ] S. Varró, F. Ehlötzky, *Phys. Lett.*, **A203**(1995), 203.
- [ 7 ] S. Varró, F. Ehlötzky, *J. Phys. B*, **28**(1995), L673.
- [ 8 ] A. S. Dickinson, *J. Phys. B*, **29**(1996), 1561.
- [ 9 ] F. Robicheaux, *J. Phys. B*, **29**(1996), 367.
- [ 10 ] D. M. Volkov, *Z. Phys.*, **94**(1935), 250.
- [ 11 ] E. Clementi *et al.*, *At. Data & Nucl. Data Tables*, **14**(1974), 177.
- [ 12 ] Xiarrzhou Zhang, Jir-feng Sun, Yur-fang Liu, *J. Phys. B*, **25**(1992), 1893.
- [ 13 ] J. P. Perdew, A. Zunger, *Phys. Rev.*, **B23**(1981), 5048.
- [ 14 ] F. Trombetta, C. J. Joachain, G. Ferrante, *J. Phys. B*, **19**(1986), 1081.
- [ 15 ] F. V. Bunkin, M. V. Fedorov, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, **49**(1965), 1215.
- [ 16 ] S. Geltman, *Phys. Rev.*, **A53**(1996), 3473.
- [ 17 ] L. B. Madsen, K. Tauldjerg, *J. Phys. B*, **28**(1995), 5327.
- [ 18 ] A. Weingarshofer *et al.*, *J. Phys. B*, **16**(1983), 1805.
- [ 19 ] Dejan B. Milošević, Fritz Ehlötzky, *J. Phys. B*, **30**(1997), 2999.

## LASER-ASSISTED ELECTRON-ATOM COLLISIONS: THE KROLL-WATSON FORMULA AND THE SECOND BORN APPROXIMATION\*

SUN JIN-FENG MA ER-JUN JIANG YU-HAI ZHANG SHENG-HAI

(*Department of Physics, Henan Normal University, Xinxiang 453002*)

(Received 7 January 1999)

### ABSTRACT

Recent measurements on CO<sub>2</sub>-laser-assisted electron-atom collisions have shown large inconsistencies with the Kroll-Watson formula. We use Born approximation theory to carry out a detailed study of the problem. The calculations have shown that the second Born approximation can give better results, as compared with experiments. The prediction of K-W formula is only equivalent to the first Born approximation. Meanwhile, it is found that the electron-atom polarization potential plays an important role in laser-assisted electron-atom scattering.

**PACC:** 3480Q

---

\* Project supported by the Natural Science Foundation of Henan Province, China (Grant No. 984052500).