

电子-光子符合散射实验中受激原子态 电荷云分布的研究^{*}

刘义保¹⁾²⁾ 庞文宁¹⁾ 丁海兵¹⁾ 尚仁成¹⁾

¹⁾ (清华大学物理系, 北京 100084)

²⁾ (东华理工学院物理系, 抚州 344000)

(2004 年 12 月 21 日收到 2005 年 3 月 11 日收到修改稿)

根据电子原子碰撞受激态退激偶极辐射的电子-光子符合实验的一般性理论, 采用扭曲波近似方法, 计算了电子与碱金属钠原子碰撞退激辐射光子的 Stokes 参数. 引入取向和排列参数, 用以描述受激态电荷云的分布, 得到了与已有实验数据一致的结果.

关键词: 取向, 排列, Stokes 参数, 电子-光子符合测量

PACC: 3450, 3480D

1. 引 言

散射实验是量子物理学中非常重要的实验. 量子物理学基础研究仍然集中在动力学系统的对称性和不变性. 对于特定的受电子激发的原子态, 选定参考系或参考轴, 测定靶原子集合的态多极, 就可以揭示这种激发态电荷云分布的发射和转动的对称性. 选定散射平面对称性, 探测与散射电子符合的辐射光子, 可以获得原子激发态的取向和排列^[1]. 本文先描述电子-原子碰撞中受激态电荷云分布的特征参数, 即取向和排列参数, 在自然系, 采用扭曲波玻恩近似(DWBA)方法, 以电子与碱金属钠原子碰撞为例, 讨论 $S \rightarrow P$ 受激跃迁, 计算受激原子态的取向和排列参数, 得到了与已有实验数据比较一致的结果.

2. 电子-光子符合实验测量参数的描述

在电子-原子的非弹性散射中, 靶在磁量子分布上可能是不均匀的. 一般而言, 这将导致受激原子态电荷云的取向和排列. 用符合的方法探测散射电子和退激偶极辐射光子, 实验中只测量辐射光子的偏振参数, 不测量散射电子. 通过测量辐射光子的

Stokes 参数(P_1, P_2, P_3)就可以描述受激态电荷云的分布^[2]. 其中取向参数 $L = -P_3$, 定义为磁量子($\pm M$)上的非均匀分布, 表征了散射过程中角动量的转移. 排列参数定义原子态电荷云对称轴的排列角, 表示相同磁量子态的非均匀分布, 表征电荷云的形状和相对大小, 参见图 1. 这里, k_{in} 和 k_{out} 分别为电子入射和散射方向; $L_{\perp}$ 为取向参数, 当转移的角动量与 Z 轴同方向时取正值, 反之为负; γ 代表排列参数, 是受激态电荷云对称轴与入射方向的夹角.

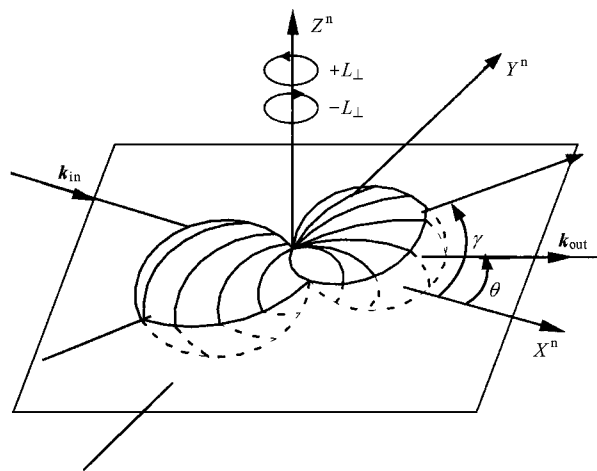


图 1 受激原子 P 态电荷云分布示意图

^{*} 国家自然科学基金重点项目(批准号: 50134010)资助的课题.

电子-光子符合实验装置和定义 Stokes 参数的坐标系统可参照文献[1], 其中

$$P_1 \equiv \frac{I(0^\circ) - I(90^\circ)}{I(0^\circ) + I(90^\circ)}, \quad (1)$$

$$P_2 \equiv \frac{I(45^\circ) - I(135^\circ)}{I(45^\circ) + I(135^\circ)}, \quad (2)$$

$$P_3 \equiv \frac{I_r - I_l}{I_r + I_l} = -\frac{I_+ - I_-}{I_+ + I_-}, \quad (3)$$

式中, $I(\theta)$ ($\theta = 0^\circ, 45^\circ, 90^\circ, 135^\circ$) 表示所探测受激态退激偶极辐射光子偏振化方向与 X 轴成 θ 夹角时的偏振光强, I_r 和 I_l 分别为所探测的辐射光子右旋光强和左旋光强. 在电子-原子碰撞中, 以 $S \rightarrow P$ 激发跃迁为例, 偶极跃迁辐射与受激原子态之间存在关联^[2-4], 选择如图 1 的自然参照系 (X^n, Y^n, Z^n), 有如下关系:

$$P_1 = D_1 \cos 2\gamma, \quad (4)$$

$$P_2 = D_1 \sin 2\gamma, \quad (5)$$

$$P_3 = -L_\perp, \quad (6)$$

式中, D_1 定义为极化度 (degree of linear polarization),

$$D_1 \equiv \sqrt{P_1^2 + P_2^2} = \sqrt{1 - P_3^2} = \sqrt{1 - L_\perp^2}. \quad (7)$$

相应的排列角为

$$\gamma = \frac{1}{2} \tan^{-1} \frac{P_2}{P_1}. \quad (8)$$

3. 参数的理论计算

根据密度矩阵理论, 可用态多极 (state multipole) $\langle T(J)_{KQ}^+ \rangle$ 表示量子态 $|\alpha J\rangle$ (α 表示除 J 外的其他量子数的集合) 靶原子集合^[5-7],

$$\langle T(J)_{KQ}^+ \rangle = \sum_M (-1)^{J-M} (JM', J-M \mid KQ) \times \langle JM' | \rho | JM \rangle, \quad (9)$$

式中, $K \leq 2J$, $-K \leq Q \leq K$. 选择自然参照系, 坐标轴的选取参见图 1. 在方位角 (Θ, Φ) 方向上探测到的受激态 J 态退激到 J_f 态偶极辐射光子 Stokes 参数的强度为

$$I_{P_1}(\Theta, \Phi) = \frac{G(\omega)}{\gamma} |\langle J_f \parallel r \parallel J \rangle|^2 \frac{2(-1)^{J+J_f}}{3(2J+1)^{1/2}} \times \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & 2 \\ J & J & J_f \end{matrix} \right\} \left\{ \left[\text{Re} \langle T(J)_{22}^+ \rangle \right. \right. \\ \times (1 + \cos^2 \Theta) \cos 2\Phi + \text{Re} \langle T(J)_{21}^+ \rangle \\ \times \sin 2\Theta \cos \Phi + \sqrt{\frac{3}{2}} \langle T(J)_{20}^+ \rangle \sin^2 \Theta \left. \right] \\ \left. - [\text{Im} \langle T(J)_{22}^+ \rangle (1 + \cos^2 \Theta) \sin 2\Phi \right. \\ \left. + \text{Im} \langle T(J)_{21}^+ \rangle \sin 2\Theta \sin \Phi \right\}, \quad (10)$$

$$I_{P_2}(\Theta, \Phi) = \frac{G(\omega)}{\gamma} |\langle J_f \parallel r \parallel J \rangle|^2 \frac{2(-1)^{J+J_f}}{3(2J+1)^{1/2}} \times \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & 2 \\ J & J & J_f \end{matrix} \right\} [\text{Re} \langle T(J)_{22}^+ \rangle 2 \cos \Theta \sin 2\Phi \\ + \text{Re} \langle T(J)_{21}^+ \rangle 2 \sin \Theta \cos \Phi] \\ + [\text{Im} \langle T(J)_{22}^+ \rangle 2 \cos \Theta \cos 2\Phi \\ + \text{Im} \langle T(J)_{21}^+ \rangle \sin \Theta \cos \Phi], \quad (11)$$

$$I_{P_3}(\Theta, \Phi) = -\frac{G(\omega)}{\gamma} |\langle J_f \parallel r \parallel J \rangle|^2 \frac{2(-1)^{J+J_f}}{3(2J+1)^{1/2}} \times \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & 2 \\ J & J & J_f \end{matrix} \right\} [\text{Im} \langle T(J)_{11}^+ \rangle 2 \sin \Theta \sin \Phi \\ - \text{Re} \langle T(J)_{11}^+ \rangle 2 \sin \Theta \cos \Phi \\ + \sqrt{2} \langle T(J)_{10}^+ \cos \Theta \rangle], \quad (12)$$

式中, $G(\omega)$ 是包含跃迁频率 ω 的常数, $\langle J \parallel r \parallel J_f \rangle$ 是从 Wigner-Eckart 定理得到的约化径向偶极矩阵元, $\{\}$ 表示 $6J$ 符号.

以电子与钠原子散射激发跃迁 $1S \rightarrow 1P^0$ 为例, 选择 $\Theta = 0, \Phi = 0$ 探测方向, 即垂直散射平面的方向. 根据 DWBA 方法^[8,9], 用薛定谔方程描述连续电子, 用 Roothaan-Hartree-Fock 波函数描述束缚电子, 靶原子的电荷云分布和静电势都是非相对论的.

对于电子与碱金属原子散射, 入射粒子与靶的相互作用可以由文献[8]给出 (以里德伯参量 R 为单位),

$$V(0, 1) = -\frac{2Z_p}{r_{01}} + \frac{2Z_p Z_n}{r_0}. \quad (13)$$

这里, Z_p 是入射粒子的电荷, Z_n 是核电荷, r_{01} 是入射粒子与原子中电子之间的距离. 对于非弹性散射到束缚激发态的直接作用振幅 f^{dir} 和交换作用振幅 f^{exch} 分别为

$$f^{\text{dir}} = -2Z_p \left\langle \chi_f^-(0) \psi_f \left| \frac{1}{r_{01}} \right| \psi_i(1) \chi_i^+(0) \right\rangle, \quad (14)$$

$$f^{\text{exch}} = -2Z_p \left\langle \chi_f^-(0) \psi_f(1) \left| \frac{1}{r_{01}} \right| \psi_i(0) \chi_i^+(1) \right\rangle \\ + 2Z_p Z_n \left\langle \chi_f^-(0) \left| \frac{1}{r_0} \right| \psi_i(0) \right\rangle \langle \psi_f(1) \mid \chi_i^+(1) \rangle, \quad (15)$$

式中, ψ_i 和 ψ_f 是分立原子的反对称始末原子波函数, χ_i^+, χ_f^- 为入射和散射电子的扭曲波函数, 波函数括号中的 0 和 1 分别代表入射电子和靶原子中的外壳层电子. 可以用直接作用振幅和交换作用振幅

表示一阶扭曲波振幅,即

$$T_1^S = f^{dir} + (-1)^S f^{exch}, \tag{16}$$

式中,下标‘1’表示一阶近似,上标 $S = 0, 1$ 分别表示了电子与准单电子原子散射末道的单态和三态散射.

电子与钠原子散射,入射电子的入射能为 10 eV,钠原子由 S 态激发到 P 态,不考虑精细结构效应.先计算钠原子被散射激发的复振幅,然后计算各阶态多极,再计算对应 P 态的 Stokes 参数及其表征电荷云分布的取向和排列参数随散射角的变化.电子与钠原子散射激发跃迁的截面见图 2; Stokes 参数见图 3.图 4、图 5 分别为钠原子 P 态电荷云取向和排列随散射角的变化.图 6 是钠原子受激 P 态退激辐射光子的线性极化度.

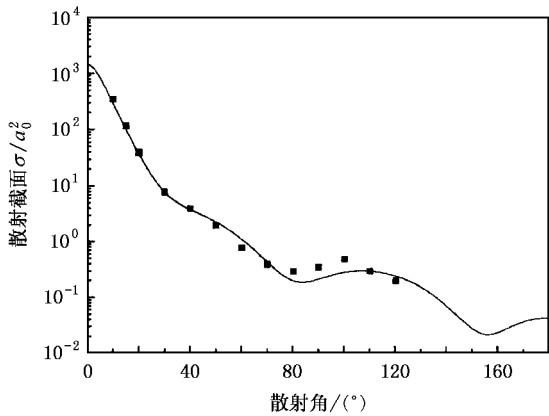


图 2 入射能为 10 eV 的电子与钠原子散射微分截面(以玻尔半径的平方 a_0^2 为单位)的理论与实验^[10]的比较
——理论值,■实验值

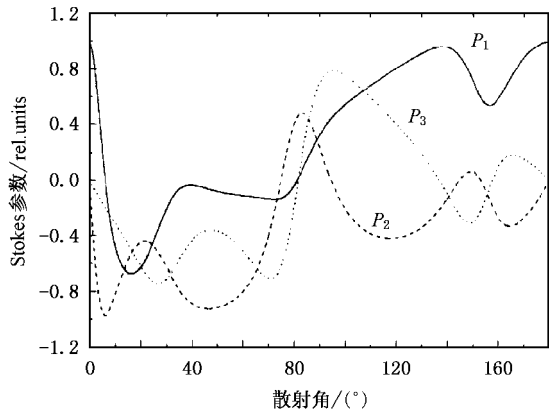


图 3 被电子散射激发跃迁 $S \rightarrow P$ 态退激偶极辐射光子的 Stokes 参数随散射角的分布

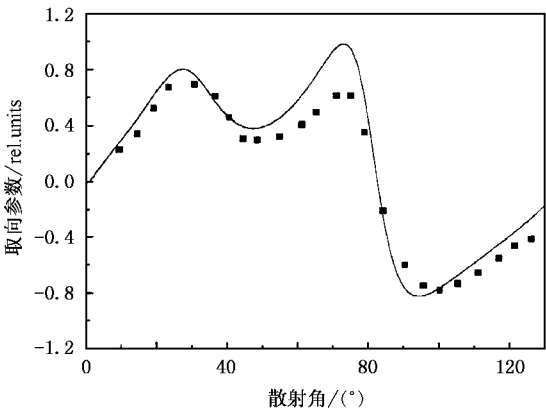


图 4 钠原子受激态电荷云取向参数随散射角的分布并与实验测量^[11]的比较 ——理论值,■实验值^[11]

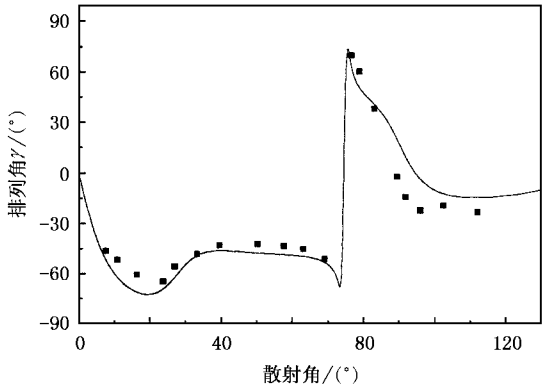


图 5 钠原子受激 P 态的电荷云排列角随散射角的分布 ——理论值,■实验值^[11]

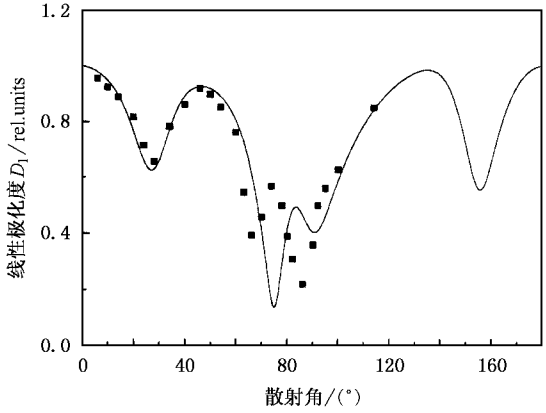


图 6 钠原子受激态电荷云线性极化度随散射角的分布 ——理论值,■实验值^[11]

4. 结果和讨论

上述理论计算中,我们没有考虑入射连续电子束的轨道和自旋相互作用,也没有考虑靶原子电子的精细结构相互作用,即把钠原子的激发跃迁近似为 $3^1S \rightarrow 3^1P^0$,采用 DWBA(参见(16)式).入射粒子束用薛定谔方程描述,用 Roothaan-Hartree-Fock 波函数描述束缚电子,没有考虑相对论效应.Stokes 参数的理论计算没有相应的实验数据比较.图 2 是 10 eV 入射电子与钠原子的散射截面,小角度散射理论与实验符合较好,但是较大角度的散射截面与实验值符合不是很好,这也影响了描述受激态电荷云的取向参数和排列角在小角度散射下的分布与实验一致性,大角度散射时偏差较大,特别是反映受散射激发的钠原子 P 态的电荷云线极化度(偏振度)在小于 60° 时,理论与实验符合较好,大于 60° 时,理论与实验的变化趋势都产生了较大的分歧.图 3 和图 4 具体反映了电子与钠原子散射激发过程中,受激原子态电荷云的变化以及入射电子挤压电荷云,产生电子角动量的转移情况.按经典或半经典理论^[2,3],电子受势场作用,入射电子轨道偏移,产生角动量变化传递给靶原子,称为产生正

的原子取向 $L_\perp$.从图 3 可以看出在小角度(小于 30°), $L_\perp > 0$,随着散射角增大,角动量的转移增大.然而,当散射角大于 30° 时,取向参数虽然仍取正值,但不是递增关系;当大于约 80° 时,取向参数却取负值.这与经典的理论是不符合的,这个过程非常复杂,只能用量子力学阐明.当然,本文的近似计算有较大的局限性,只考虑了一级 DWBA,而且电子与钠原子之间的相互作用势只考虑了静电势和电子的交换作用,忽略了连续入射电子自旋-轨道角动量的耦合,忽略了入射电子运动形成的电场对靶原子电荷云的极化以及这种电荷云密度的变化反过来对入射电子和闭壳层电子的影响.

总之,用原子受激态取向参数和排列角可以描述相应的散射激发过程以及受激态电荷云分布变化.当然,要详细精确地描述电子与钠原子碰撞过程及电荷云分布的变化,还有待更深入研究.由于取向和排列以及辐射光子的 Stokes 参数都是实验可观测,这能为原子、离子和分子碰撞过程和结构信息的研究开辟新的有效途径.

感谢德国 Muenster 大学物理研究所 G. F. Hanne 教授、C. Herting 博士和清华大学物理系车兴来博士的帮助.

- [1] Andersen N, Bartschat K 2000 *Polarization, Alignment, and Orientation in Atomic Collisions* (New York: Springer)
- [2] Hanne G F 1984 *Comment. At. Mol. Phys.* **14** 163
- [3] Andersen N, Hertel I V 1986 *Comment. At. Mol. Phys.* **16** 1
- [4] Andersen N, Gallagher J W, Hertel I V 1988 *Phys. Rep.* **180** 1
- [5] Bartschat K, Blum K, Hanne G F *et al* 1981 *J. Phys. B* **14** 3761
- [6] Blum K 1986 *Density Matrix Theory and Applications* (2nd ed) (New York: Plenum Press)
- [7] Liu Y B, Pang W N, Shang R C *et al* 2004 *Prog. Phys.* **24** 138

- (in Chinese) [刘义保、庞文宁、尚仁成等 2004 物理学进展 **24** 138]
- [8] Bartschat K 1996 *Computational Atomic Physics* (New York: Springer)
- [9] Gao J F, Cheng H X, Shang R C *et al* 1998 *Acta Phys. Sin.* **47** 1606 (in Chinese) [高君芳、程鸿兴、尚仁成等 1998 物理学报 **47** 1606]
- [10] Srivastava S K, Vuskovic L 1980 *J. Phys. B* **13** 2633
- [11] McClelland J J, Kelley M H, Celotta R J 1989 *Phys. Rev. A* **40** 2321

Distribution of electron clouds in the excited atomic state in electron-photon coincidence scattering experiment^{*}

Liu Yi-Bao¹⁾²⁾ Pang Wen-Ning¹⁾ Ding Hai-Bing¹⁾ Shang Ren-Cheng¹⁾

¹⁾ (Department of Physics, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

²⁾ (Department of Physics, East China Institute of Technology, Fuzhou 344000, China)

(Received 21 December 2004 ; revised manuscript received 11 March 2005)

Abstract

Based on the general theory of the electron-photon coincidence experiment, the Stokes parameters of an excited atomic state were calculated with the distorted wave Born approximation. According to the correlation between experiment and theory, the distribution of electron clouds in an excited atomic state can be described by their orientation and alignment parameters. The values obtained are in agreement with the results of the experiments.

Keywords : orientation, alignment, Stokes parameters, electron-photon coincidence

PACC : 3450, 3480D

^{*} Project supported by the Key Program of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10134010).