

用模型势方法研究正电子与稀有气体的弹性散射^y

孙志红

(甘肃工业大学基础科学系, 甘肃 兰州 730050)

摘要: 用模型势方法和 STO 波函数系统地计算了低能正电子与 He, Ne, Ar, Kr, Xe 和 Rn 惰性气体原子在非弹性阈值以下的散射角分布, 计算结果与已有的理论和实验数据吻合. 通过对算得的大量微分截面(散射角从 20° 到 160°)的数据进行分析, 总结出了低能正电子与惰性气体原子弹性散射的规律.

关键词: 模型势; 微分截面; 稀有气体原子

中图分类号: O562 **文献标识码:** A

1 引言

电子与原子分子碰撞的研究被广泛应用在天体物理、化学反应、晶体缺陷和激光等离子体等许多领域. 在正电子与原子的碰撞中, 正电子与惰性气体散射是人们关注较多的课题, 它引起许多实验和理论物理学家的兴趣, 因为它的数学处理较为简单, 适合检验理论模型和计算方法.

正电子被氦、氖、氙原子弹性散射的总截面理论与实验数据较多^[1]. 正电子与惰性气体原子散射角分布的研究相对较少, 实验上 Coleman 等人测量了能量为 2.2, 3.4, 6.7 和 8.7 eV 正电子与 Ar 在 20° - 60° 之间散射微分截面, 理论上仅有 Khan 等^[2, 3], Datta 等^[3] 和 Nakanishi 等^[4] 用含参模型势方法分别计算了正电子与 He, Ar 原子在投射能量为 3.0, 5.0, 12.0 和 15.0 eV 的散射微分截面, Dou 等测量了能量为 6.67 和 10.0 eV 正电子与 Kr 散射微分截面; Smith 等人测量了能量为 5.0 eV 正电子与 Xe, Ar 原子散射微分截面以及能量分别为 13.6 和 6.67 eV 正电子与 Ne, Kr 原子散射微分截面; 理论上 Wadehra 等^[5] 对 e⁺-Ne(能量为 13.6 eV), e⁺-Ar(能量为 5 和 8.7 eV) e⁺-Kr(能量为 6.67 eV) 和 e⁺-Xe(能量为 5 eV) 散射微分截面进行了计算. 在非弹性阈值以下正电子与 He 的弹性散射只有理论计算值, 没有实验数据; 对正电子与 Rn 的弹性散射既

无理论计算值也无实验数据. 对低能正电子被 He, Ne, Ar, Kr, Xe 和 Rn 惰性气体原子散射角分布的系统研究较少, 对其散射规律缺乏深入地探讨.

本文用无参模型势方法^[6] 计算了低能正电子与 He, Ne, Ar, Kr, Xe 和 Rn 惰性气体原子在小于最低非弹性阈值(对正电子散射 He, Ne, Ar, Kr 和 Xe 的非弹性阈值分别是 17.8, 14.8, 9.0, 7.2 和 5.3)^[5] 下的散射角分布, 并与已有的理论和实验数据进行了比较. 通过对算得的大量微分截面(散射角从 20° 到 160°)的数据进行分析, 总结出了低能正电子与惰性气体原子弹性散射的规律.

2 理论计算方法

我们用模型势法来处理低能正电子与原子弹性散射, 描写入射正电子与原子散射的薛定谔方程为:

$$\left| \frac{1}{2} \nabla^2 + E - V(r) \right| \Psi(r) = 0, \quad (1)$$

这里 $E = (1/2)k^2$ 是入射正电子能量, $V(r)$ 是系统的相互作用势, 正电子与原子散射总模型势可以表示为

$$V(r) = V_s(r) + V_{\text{pol}}(r), \quad (2)$$

$V_s(r)$ 是正电子与原子相互作用库仑势, $V_{\text{pol}}(r)$ 是极化相关势. 在此采用 STO 波函数^[7] 可计算出静电势:

^y 收稿日期: 2002 - 03 - 12; 修改日期: 2002 - 06 - 13

* 基金项目: 甘肃工业大学校基金资助项目

作者简介: 孙志红(1965-), 女(汉族), 河南安阳人, 硕士, 副教授, 从事光学检测、原子分子物理研究.

$$V_s(r) = \sum_{nl} S_{nl} e^{2\xi_{nl}r} \left| \frac{1}{r} + \sum_{k=1}^{2n} (2\xi_{nl})^k r^{(k-1)} \left| \frac{2n(k-1)! - k!}{2n(k-1)!k!} \right| \right|, \quad (3)$$

其中 S_{nl} 是靶原子 (nl) 壳层电子数, ξ_{nl} 是 (nl) 壳层屏蔽因子. 极化势 $V_{pol}(r)$ 用 Khara 等^[2] 提出的形式:

$$V_{pol}(r) = -\frac{\alpha}{2r^4} W(y), \quad (4)$$

$$W(y) = 1 - e^{-2y} (1 + 2y + 2y^2 + \frac{4}{3}y^3 + \frac{2}{3}y^4 + \frac{4}{27}y^5),$$

其中 $y = \frac{r}{\bar{r}}, \bar{r} = \frac{1}{Z} \sum_{n,l} N_l \bar{r}_{nl}, \quad (5)$

Z 为原子总电子数, N_l 为 (nl) 壳层电子数, \bar{r}_{nl} 为相应电子轨道平均半径, 它可由原子波函数 φ_{nl} 计算出来. 即

$$\bar{r}_{nl} = \int \varphi_{nl}^* r \varphi_{nl} d\tau, \quad (6)$$

而 α 为靶电子极化率, 对 He, Ne, Ar, Kr, Xe 和 Rn^[8] 原子分别为 1.382 9, 2.665, 11.07, 16.737, 27.263, 42.514 (a_0^3). 把 STO 波函数代入 (6) 式并结合 (5) 式可计算出 He, Ne, Ar, Kr, Xe 和 Rn 各原子的平均半径 \bar{r} .

用计算得到的相互作用势 $V(r)$ 代入方程 (1), 将 $\varphi(r)$ 用分波展开法可得:

$$\left| \frac{d^2}{dr^2} + k^2 - 2V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right| f_l(r) = 0, \quad (7)$$

$f_l(r)$ 是径向波函数, 其渐近形式为

$$f_l(r) \sim \frac{1}{k} \sin(kr - \frac{1}{2}\pi + \delta_l), \quad (\text{当 } r \rightarrow \infty) \quad (8)$$

δ_l 是相应第 l 分波相移, 通过散射振幅可计算出散射微分截面:

$$f(\theta) = \frac{1}{k} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta). \quad (9)$$

3 计算结果

从图 1 可以看出, e^+ -He 散射微分截面, 当入射正电子能量 $E = 5.0$ eV 时, 在散射角 60° 方向附近微分截面出现一极小值; 当 $E = 12.0$ eV 时, 微分截面在 40° 方向附近出现极小值. 图中也给出了 Khan 与 Datta 等人的理论散射截面, 通过比较可以看出, 微分截面极小值出现的位置与本文计算值完

全一致, 散射微分截面随散射角变化曲线与本文的结果吻合得较好.

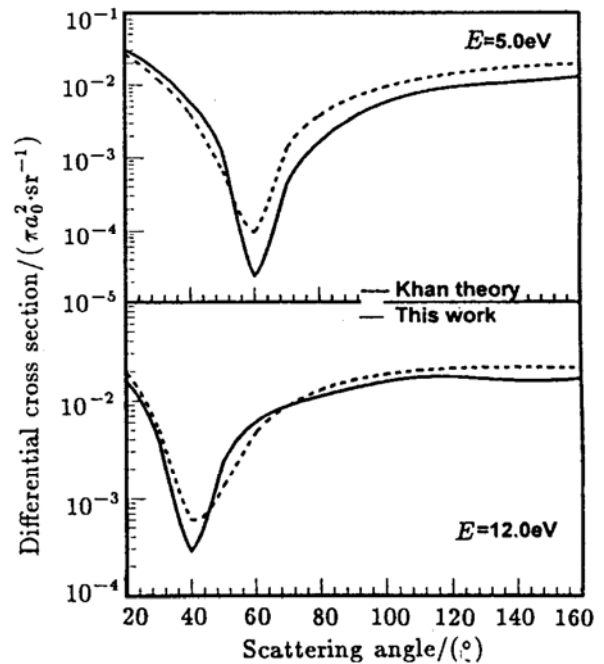


图 1 e^+ -He 在入射能量为 5.0 和 12.0 eV 散射微分截面

由图 2 可看出 e^+ -Ar 散射微分截面, 当入射正电子能量 $E = 5.0$ eV 时, 在散射角 50° 方向附近微分截面出现一极小值; 当 $E = 8.7$ eV 时, 微分截面在 40° 方向附近出现极小值. 图中也给出了 Wadehra 等人的理论计算与 Smith 等人的实验数据. 通过比较可以看出, 散射微分截面随散射角变化曲线与本文的结果吻合较好.

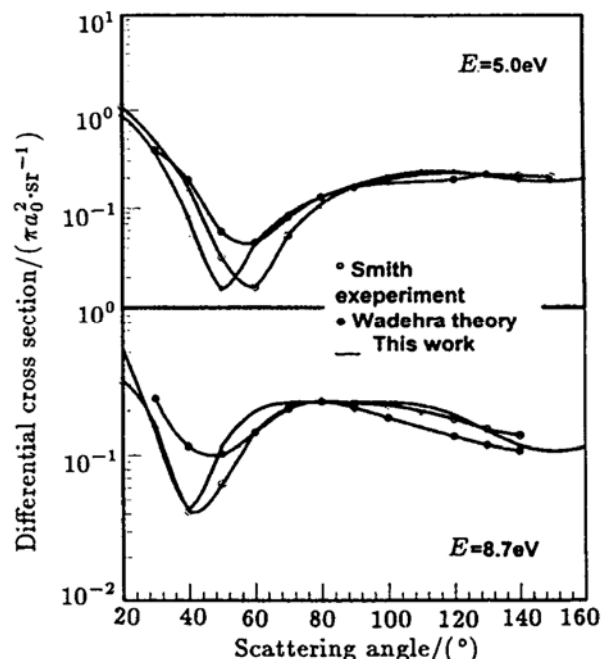


图 2 e^+ -Ar 在入射能量为 5.0 和 8.7 eV 散射微分截面

由图 3 可以看出, e^+ -Kr 散射微分截面在入射

正电子能量由 2.0 eV 变化到 7.0 eV 时, 散射微分截面极小值出现的位置由散射角 100° 附近变化到 50° 附近.

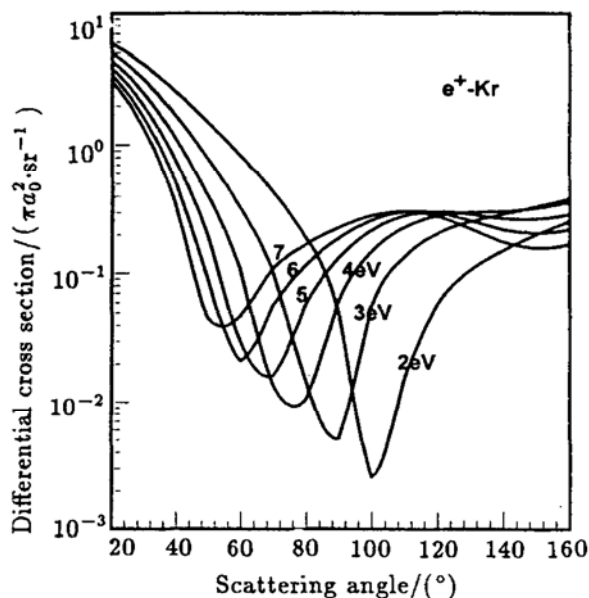


图3 正电子入射能量分别为 2, 3, 4, 5, 6 和 7 eV 时 e^+ -Kr 的散射微分截面

图 4 给出了 e^+ -He, e^+ -Ne, e^+ -Ar, e^+ -Kr, e^+ -Xe, e^+ -Rn 散射微分截面. 由图可见当入射正电子能量相同时(入射正电子能量 $E=5.0$ eV), 微分截面随散射角变化的曲线均有一极小值, 该极小值总是按 He, Ne, Ar, Kr, Xe 和 Rn 顺序由小到大排列.

4 总结

计算结果表明: (1) 低能正电子与惰性气体原

子散射微分截面均有一极小值, 且极小值出现的位置随入射正电子能量的增加向小角度方向移动; (2) 当入射正电子能量相同时, 低能正电子与稀有气体原子散射微分截面随角度变化曲线形状相似, 曲线的位置按 He, Ne, Ar, Kr, Xe 和 Rn 顺序由低向高排列.

整个计算过程中, 采用模型势法和 STO 波函数, 不包含任何不确定参数, 与所取得的理论和实验数据符合较好, 计算过程较简单, 结果可靠, 对实验和理论有一定的指导意义.

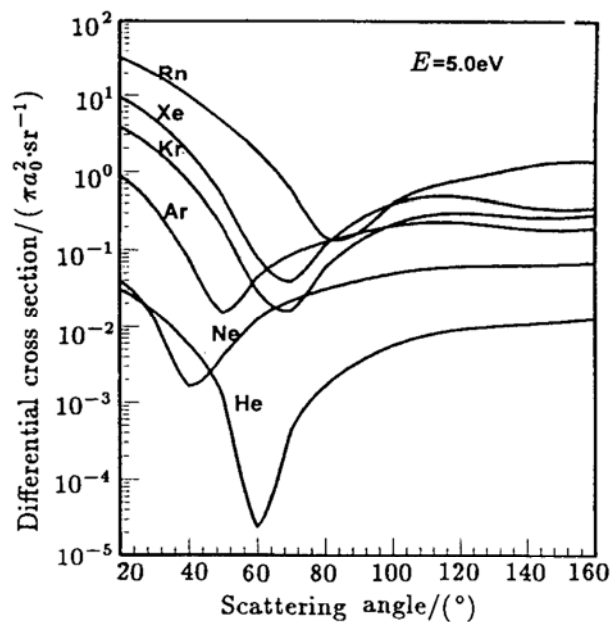


图4 当入射正电子能量为 $E=5.0$ eV 时, e^+ -He, e^+ -Ne, e^+ -Ar, e^+ -Kr, e^+ -Xe, e^+ -Rn 散射微分截面

参 考 文 献:

- [1] Ghosh A S, Sil N C, Mandal P. Positron-atom and Positron-molecule Collisions[J]. Phys Rep, 1982, **87**(7): 315.
- [2] Khan P, Datta S K, Ghosh A S, *et al.* Elastic Scattering with the Use of the Model Potential Method[J]. Phys Rev, 1984, **A29**(6): 3 129.
- [3] Datta S K, Mandal S K, Khan P, *et al.* Elastic e^+ -Ar Scattering with the Use of the Model Potential Method[J]. Phys Rev, 1985, **A32**(1): 633.
- [4] Nakanishi H, Schrader D M. Polarization Potentials for Positron and Electron-atom System[J]. Phys Rev, 1986, **A34**(3): 1 810.
- [5] Wadehra J M, Reid D, *et al.* Low-energy Differential Scattering of Electrons and Positrons from Noble Gases[J]. Phys Rev, 1994, **A50**(6): 4 859.
- [6] 陈其峰, 李 溪等. 低能正电子与氖和氩弹性散射总截面和动量转移截面的计算[J]. 原子与分子物理学报, 1991, **8**(3): 1 961.
- [7] 颜达予. 结构化学[M]. 贵阳: 贵州出版社, 1983, 143.
- [8] Johnson W R, Dietmar Kolb, Huang K N, *et al.* Susceptibilities and Xielding Factors For Closed-shell Ions of the He, Ne, Ar, Ni, Kr, Pb, and Xe Isoelectronic Sequences[J]. Atomic Data and Nuclear Data Tables, 1983, **28**(2): 333.

Study on Low-energy Differential Scattering of Positrons from Noble Gases with the Model-potential Method*

SUN Zhi-hong

(Department of Basic Science, Gansu University of Technology, Lanzhou 730050, China)

Abstract: Calculations of differential cross sections for positrons scattering from ground-state He, Ne, Ar, Kr, Xe, and Rn at energies below the lowest inelastic thresholds by using model potential method and STO wave function are presented. The calculated differential cross-section curves agree quite well with available experimental and other theory's cross sections. The regularity of the angular distributions of the elastic scattering has been obtained by analyzing the numerical results of the differential cross sections at the range of scattering angle of 20° to 160° .

Key words: model potential; differential cross section; rare-gas atom

* **Foundation item:** Scientific Research Foundation of Gansu University of Technology