

西安交通大学电子与信息工程学院研究生课程  
《等离子体电子学》

第四章 气相和表面的基本过程（1）

主讲人：王洪广

2017-04-26

# 气相和表面的基本过程 (1)

## ● 基本过程

### □ 气相中

- 电子、离子、快中性粒子与注入气体原子/分子的碰撞
- 带电粒子之间的碰撞
- 激发态粒子之间的碰撞
- 自由基与气体原子/分子之间的碰撞
- 离子与气体原子/分子之间的反应
- 光子与气体原子/分子之间的反应

### □ 表面

- 碰撞发射
- 热发射
- 化学反应

- 基本过程是形成等离子体集体效应基础
- 电子碰撞尤其重要，产生新的电子、离子及化学活性粒子

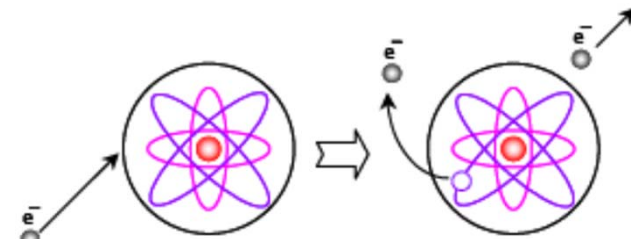


Fig. 3. Electron impact ionization.

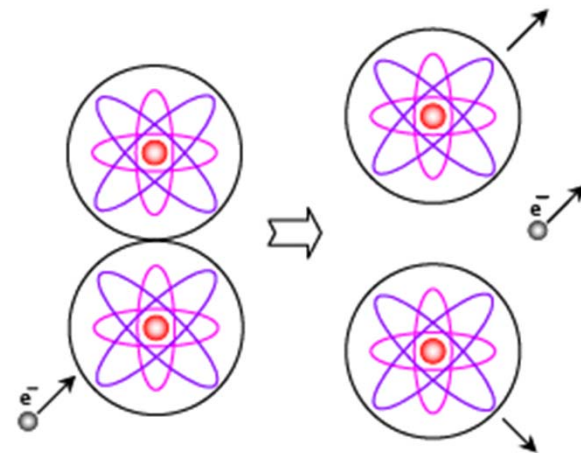


Fig. 5. Electron impact dissociation.

# 气相和表面的基本过程（1）

## ● 基本过程的分析方法和范围

□ 气相碰撞在低温等离子体中起主导作用（强电离等离子体中，带电粒子之间碰撞占主导），以下为本课程讨论的相关粒子能量范围

■ 电子碰撞：能量范围较宽

■ 离子和快中性粒子的散射碰撞：实际等离子体，能量范围较窄

■ 离子与中性粒子相关反应：室温

■ 气体类型对放电特性的影响非常显著

□ 分析碰撞的基本方法

■ 经典碰撞理论（在某些情况下仍然很有用）

■ 量子散射理论（量子效应在碰撞过程中极短的时间段中发生）

# 气相和表面的基本过程 ( 1 )

## ● 粒子与波

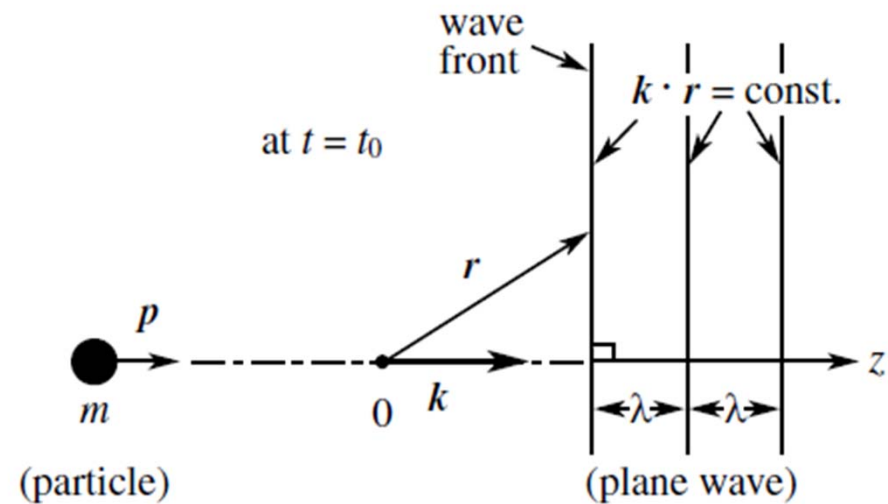
### □ 粒子的表示方法

#### ■ 经典力学

- 质量  $m$
- 能量  $\varepsilon$
- 动量  $p$
- 牛顿力学  $p = \sqrt{2m\varepsilon}$

#### ■ 量子力学

- 物质波 ( 德布罗意波 )
- 能量 : 与角频率相关  $\varepsilon = \hbar\omega$
- 动量 : 与平面波数相关  $p = \hbar k$ .
- 平面波表示  $\Phi(\mathbf{r}, t) = A_0 \exp[j(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)]$ ,



$$\Delta r \cdot \Delta p \geq \frac{h}{2\pi} (= \hbar),$$

海森堡不确定性原理 ( 测不准原理 )

- $\Delta r$  : 坐标不确定度
- $\Delta p$  : 动量不确定度
- $h$  : 普朗克常数,

# 气相和表面的基本过程 (1)

## ● 粒子与波 (续)

□ 量子力学表示法-德布罗意波长的计算

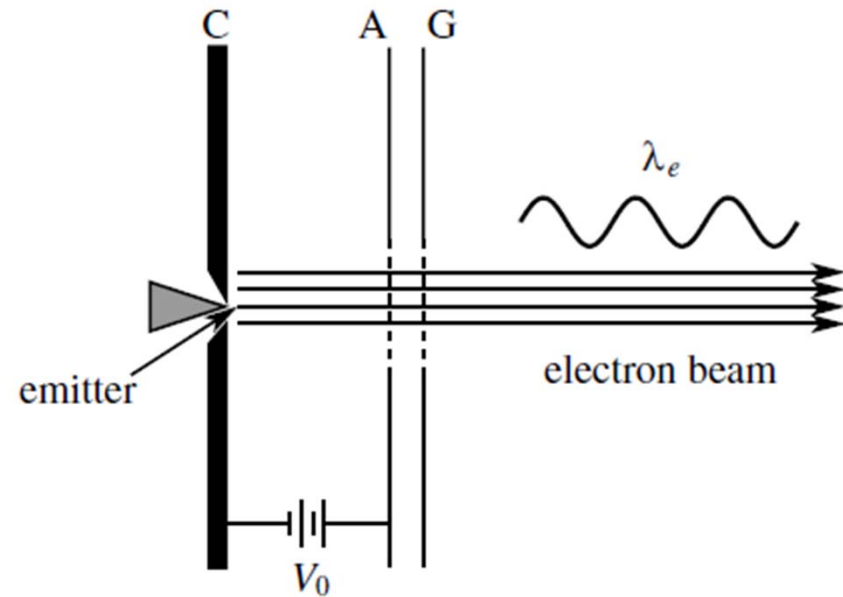
■ 电子能量=位能  $\varepsilon = eV_0$

$$\varepsilon = p^2/2m = eV_0.$$

$$p = \hbar k = \frac{h}{2\pi} \cdot \frac{2\pi}{\lambda_e} = \frac{h}{\lambda_e}.$$

$$\lambda_e = \frac{h}{(2meV_0)^{1/2}}$$

$$= \frac{6.63 \times 10^{-34}}{(2 \times 9.11 \times 10^{-31} \times 1.6 \times 10^{-19} \times V_0)^{1/2}} = \left( \frac{1.50}{V_0[\text{V}]} \right)^{1/2} [\text{nm}].$$



# 气相和表面的基本过程 ( 1 )

## ● 粒子与波 ( 续 )

### □ 量子力学表示法-色散关系

#### ■ 自由空间平面波的频率与波数之间的关系

$$\mathbf{H}\Phi(r, t) = j\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(r, t), \quad \text{薛定谔方程}$$

$$\mathbf{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_r^2 + V(r, t), \quad \text{哈密顿算子}$$

自由空间中： $V=0$

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Phi(r, t) = \hbar \omega \Phi(r, t).$$

$$\omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}. \quad \text{色散关系}$$

# 气相和表面的基本过程 (1)

## ● 粒子与波 (续)

### □ 量子力学表示法-局部孤立的粒子群和波包

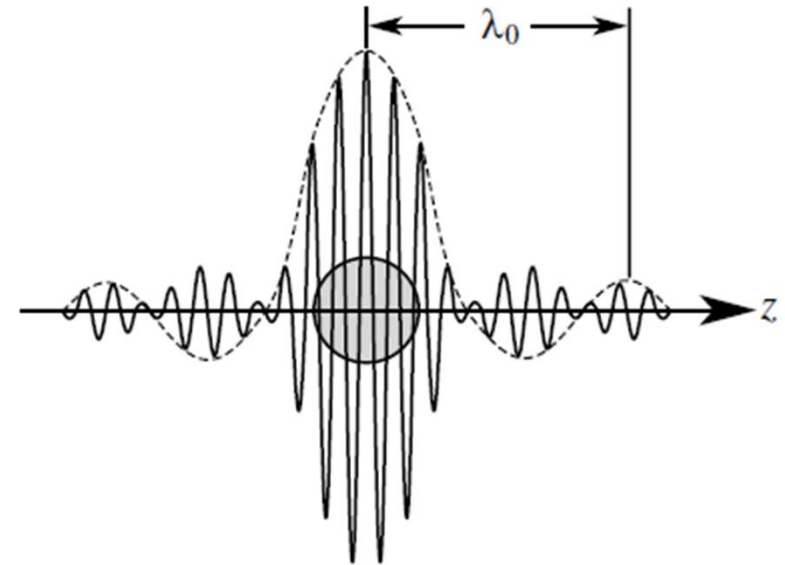
#### ■ 自由空间平面波的频率与波数之间的关系

(z方向传播的波包)

$$\begin{aligned}\Phi(z, t) &= \sum_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} \Phi(z, t; k) \\ &= \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} A(k) \exp[j(kz - \omega t)] dk.\end{aligned}$$

boundaries ( $k_0 \pm \Delta k$ ).

$$(k - k_0) = \xi \ll k_0$$



$$\omega = \omega(k - k_0) \quad (\text{泰勒展开})$$

$$= \omega_0 + \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_0 (k - k_0) + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2\omega}{dk^2} \right|_0 (k - k_0)^2 + \dots,$$

$$\begin{aligned}\Phi(z, t) &= \int_{-\Delta k}^{\Delta k} A(k) \exp\left(j(k_0 + \xi)z - j\left(\omega_0 + \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_0 \xi\right)t\right) d\xi \\ &\sim A(k_0) \exp[j(k_0 z - \omega_0 t)] \int_{-\Delta k}^{\Delta k} \exp\left(j\left(\xi z - \left. \frac{d\omega}{dk} \right|_0 \xi\right)t\right) d\xi.\end{aligned}$$

# 气相和表面的基本过程 ( 1 )

## ● 粒子与波 ( 续 )

□ 量子力学表示法-局部孤立的粒子群和波包

$$\Phi(z, t) = \int_{-\Delta k}^{\Delta k} A(k) \exp\left(j(k_0 + \xi)z - j\left(\omega_0 + \frac{d\omega}{dk}\bigg|_0 \xi\right)t\right) d\xi$$
$$\sim A(k_0) \exp[j(k_0 z - \omega_0 t)] \int_{-\Delta k}^{\Delta k} \exp\left(j\left(\xi z - \frac{d\omega}{dk}\bigg|_0 \xi\right)t\right) d\xi.$$

$$\int_{-\Delta k}^{\Delta k} \exp(ja\theta) d\theta = \frac{e^{ja\Delta k} - e^{-ja\Delta k}}{ja} = \frac{2 \sin(a \Delta k)}{a}$$

$$\Phi(z, t) \sim 2A(k_0) \frac{\sin\left(\left(z - \frac{d\omega}{dk}\bigg|_0 t\right) \Delta k\right)}{z - \frac{d\omega}{dk}\bigg|_0 t} \exp[j(k_0 z - \omega_0 t)]. \quad (\text{波包函数})$$



# 气相和表面的基本过程 (1)

## ● 粒子与波 (续)

□ 量子力学表示法-局部孤立的粒子群和波包

$$\Phi(z, t) \sim 2A(k_0) \frac{\sin\left(\left(z - \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_0 t\right) \Delta k\right)}{z - \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_0 t} \exp[j(k_0 z - \omega_0 t)].$$

$$V_g = \frac{dz}{dt} = \left.\frac{d\omega}{dk}\right|_0, \quad \omega(k) = \frac{\hbar k^2}{2m}.$$

群速度  
等于经典速度

$$V_g = \left.\frac{d}{dk} \left(\frac{\hbar k^2}{2m}\right)\right|_0 = \frac{\hbar k_0}{m}.$$

$$V_p = \frac{dz}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\omega_0 t}{k_0}\right) = \frac{\omega_0}{k_0}.$$

相速度

$$V_p = \frac{1}{k_0} \frac{\hbar k_0^2}{2m} = \frac{\hbar k_0}{2m} = \frac{V_g}{2}.$$

# 气相和表面的基本过程 ( 1 )

## ● 碰撞与截面

### □ 二体碰撞近似

- 低温 ( 弱电离 ) 等离子体中 , 多体碰撞概率较低
  - 与平均自由程、平均自由时间相比 , 二体碰撞为短程、快速过程
  - 等离子体物理过程可以近似为 : 自由运动过程 + 碰撞 ( 输运 )
  - 自由运动过程中 , 不考虑碰撞
  - 碰撞发生在瞬间 ( 电子-中性粒子碰撞 :  $10^{-16}\text{s}$  ) , 粒子所受外力作用和位置变化可忽略
  - 量子力学角度 : 德布罗意波长远小于平均自由程
- 库仑力作用主要表现为多体、长程作用 , 用电磁场来描述

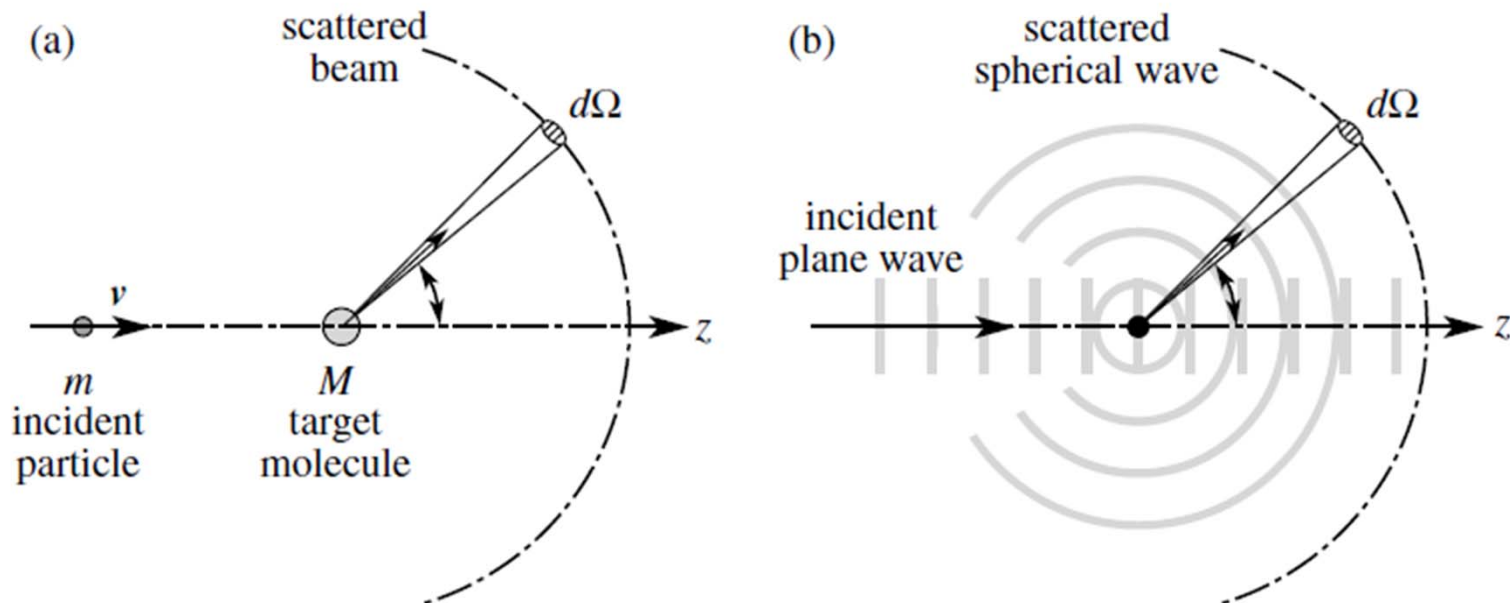
# 气相和表面的基本过程 ( 1 )

## ● 碰撞与截面 ( 续 )

### □ 二体碰撞的两种描述方法

■  $d\Omega$ : 微分立体角

- 经典力学方法：轻粒子 $m$ 与重粒子 $M$ 碰撞后，落到微分立体角 $d\Omega$ 的概率为 $\sigma(\theta, \varphi, \varepsilon)d\Omega$  ( 确定的速度、路径和微分碰撞截面 $\sigma$  )
- 量子力学方法：平面波的球面散射，结果为入射平面波与散射球面波的和



# 气相和表面的基本过程 ( 1 )

## ● 碰撞与截面 ( 续 )

### □ 碰撞中的守恒定律

#### ■ 动量守恒

$$mv' + MV' = mv + MV,$$

#### ■ 能量守恒

$$\varepsilon_{kin} = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}MV^2 = \frac{1}{2}(m + M)v_g^2 + \frac{1}{2}\mu_r v_r^2,$$

$$v_g = \frac{mv + MV}{m + M} \quad v_r = v - V. \quad \mu_r = \frac{mM}{m + M}.$$

- $v', V'$  : 碰撞前的电子、中性粒子速度
- $v, V$ : 碰撞后的电子、中性粒子速度
- $v_g$ : 质心速度
- $v_r$ : 相对速度
- $\mu_r$ : 约化质量

# 气相和表面的基本过程 ( 1 )

## ● 碰撞与截面 ( 续 )

### □ 碰撞中的守恒定律

#### ■ 实验室坐标系

$$\varepsilon_{kin} = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}MV^2 = \frac{1}{2}(m + M)v_g^2 + \frac{1}{2}\mu_r v_r'^2$$



$$\frac{1}{2}\mu_r v_r'^2 = \frac{1}{2}\mu_r v_r^2 + \varepsilon_{R'}$$

#### ■ 质心坐标系

- $\varepsilon_R > 0$ : 第一类碰撞, 总动能转化为非弹性过程的内能
- $\varepsilon_R < 0$ : 第二类碰撞, 非弹性过程释放能量转化为动能
- $\varepsilon_R = 0$ : 弹性碰撞

■  $\varepsilon_R$ : 能量损失

# 气相和表面的基本过程 ( 1 )

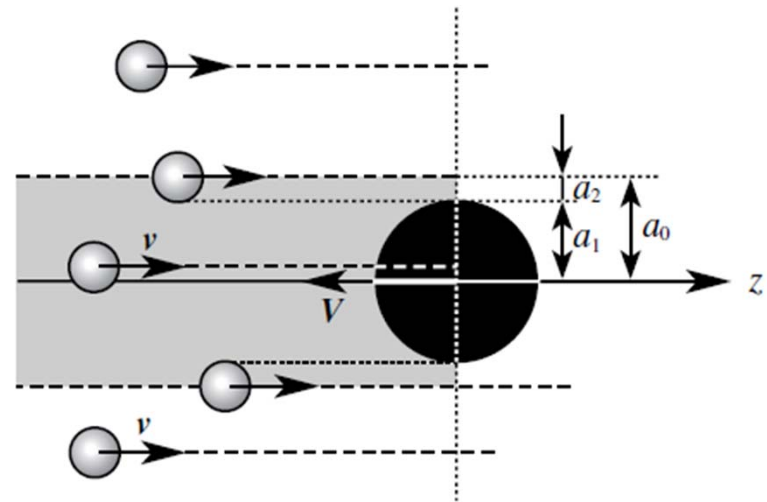
## ● 碰撞与截面 ( 续 )

### □ 碰撞截面定义

#### ■ 硬球模型 :

#### ■ 硬球模型的适应条件

- 入射粒子密度足够低, 以致入射粒子间的碰撞可忽略
- 靶粒子密度足够低, 以致入射粒子一次不会同时与两个以上靶粒子碰撞



有效碰撞截面： $\pi(a_1 + a_2)^2$

# 气相和表面的基本过程 (1)

## ● 碰撞与截面 (续)

### □ 微分碰撞截面和积分碰撞截面

- 微分碰撞截面 (具有面积的单位), 包含所有的碰撞类型

$$dn \propto nN ds/r^2,$$



$$ds/r^2 = d\Omega (= \sin\theta d\theta d\phi).$$

$$dn = \sigma(\theta, \phi; \varepsilon) nN d\Omega.$$



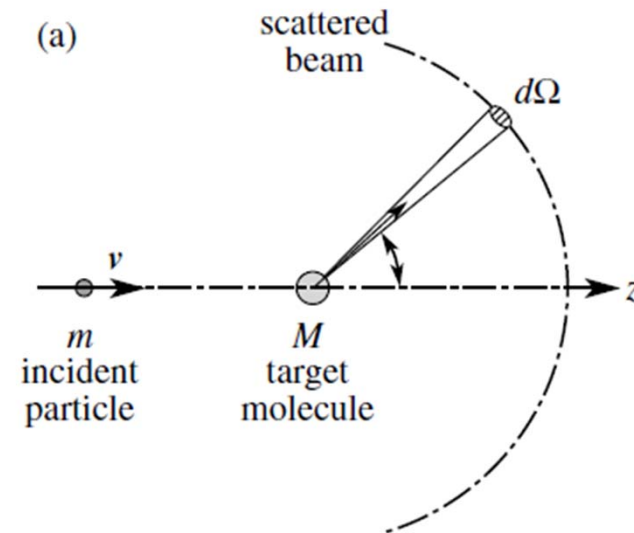
轴对称、勒让德多项式展开

$$\sigma(\theta; \varepsilon) = \frac{1}{4\pi} \sum_0^{\infty} (2n+1) Q_n(\varepsilon) P_n(\cos\theta),$$

- 积分碰撞截面

$$Q_n(\varepsilon) = 2\pi \int_0^{\pi} \sigma(\theta; \varepsilon) P_n(\cos\theta) \sin\theta d\theta.$$

定义: 密度为 $n$ 、动能为 $\varepsilon$ 的入射粒子, 与密度为 $N$ 的靶粒子碰撞, 散射后落到距离球心 $r$ 处球面面元 $dS$ 内的粒子数



- $dS$ : 面元
- $d\Omega$ : 立体角

微分碰撞截面多项式展开的系数

# 气相和表面的基本过程 ( 1 )

## ● 碰撞与截面 ( 续 )

### □ 几类重要的积分碰撞截面碰撞截面

- Total cross section

$$Q_0(\varepsilon) = \int \sigma(\theta, \phi; \varepsilon) d\Omega = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta; \varepsilon) \sin \theta d\theta;$$

- Momentum transfer cross section 动量转移碰撞碰撞

$$\begin{aligned} Q_m(\varepsilon) (= Q_0 - Q_1) &= \int (1 - \cos \theta) \sigma(\theta; \varepsilon) d\Omega \\ &= 2\pi \int_0^\pi (1 - \cos \theta) \sigma(\theta; \varepsilon) \sin \theta d\theta; \text{ and} \end{aligned}$$

- Viscosity cross section 粘性碰撞

$$\begin{aligned} Q_v(\varepsilon) \left( = \frac{2}{3} (Q_0 - Q_2) \right) &= \int (1 - \cos^2 \theta) \sigma(\theta; \varepsilon) d\Omega \\ &= 2\pi \int_0^\pi (1 - \cos^2 \theta) \sigma(\theta; \varepsilon) \sin \theta d\theta. \end{aligned}$$

theory. For inelastic collisions with threshold energy  $\varepsilon_j$ , the definitions are the same except that the momentum transfer cross section is defined as

$$Q_m(\varepsilon) = 2\pi \int_0^\pi \left( 1 - \sqrt{1 - \frac{\varepsilon_j}{\varepsilon}} \cos \theta \right) \sigma(\theta; \varepsilon) \sin \theta d\theta, \text{ 非弹性碰撞动量转移碰撞截面}$$



# 气相和表面的基本过程 ( 1 )

- 碰撞与截面 ( 续 )

- 碰撞截面举例 ( 注意数量级 )

using the Bohr radius (i.e., the first Bohr orbit of  $\hat{H}$ ),  $a_0 = 0.529 \times 10^{-8} \text{cm}$  as

**玻尔半径**  $[a_0^2] = 0.280 \times 10^{-16} \text{cm}^2$  4.29a)

The effective cross section of a Bohr radius is then given as

**有效碰撞截面**  $[\pi a_0^2] = 0.880 \times 10^{-16} \text{cm}^2$  4.29b)

In the case of photon scattering, it is common to use the “barn”

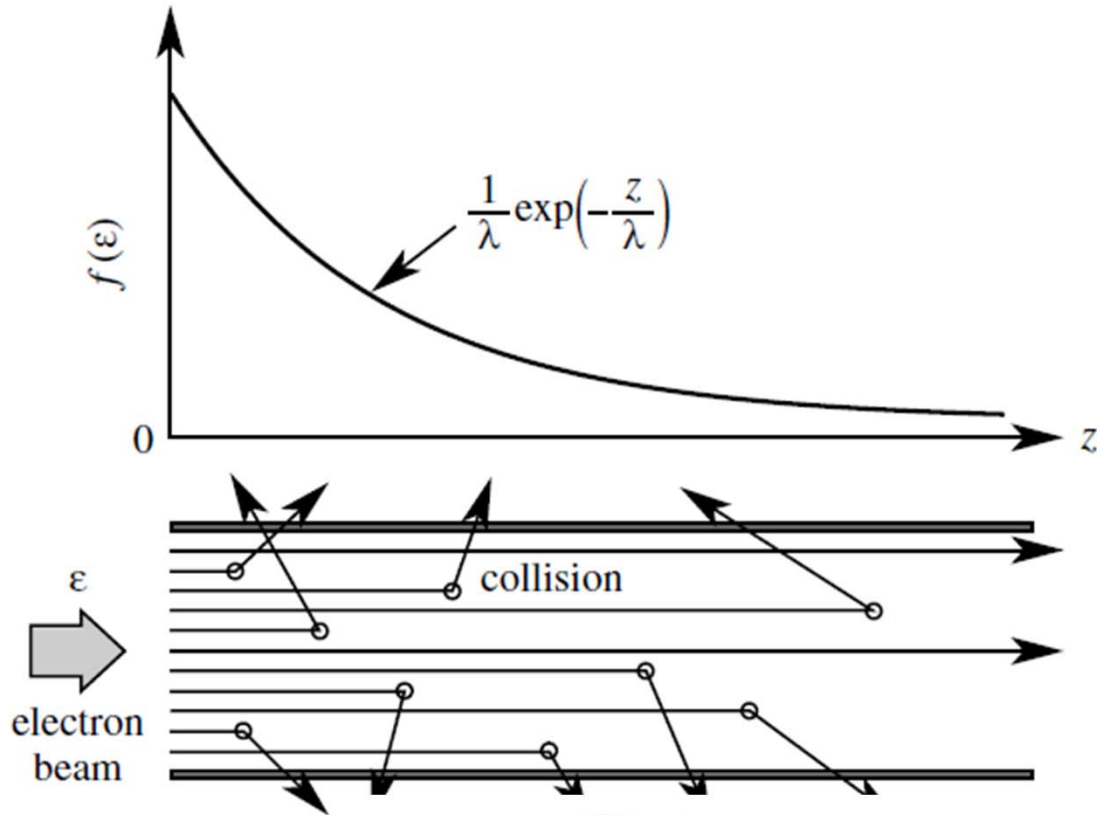
**光子散射截面**  $[barn] = 10^{-24} \text{cm}^2$  4.29c)

# 气相和表面的基本过程 (1)

## ● 碰撞与截面 (续)

### □ 自由程的分布

- 一束电子从  $z=0$  处以动能  $\varepsilon$  入射到靶粒子中
- 分布函数与  $\varepsilon$  相关
- 分布函数可以用来计算碰撞概率



$$\{F(z + dz) - F(z)\} = c\{1 - F(z)\} dz,$$

$$\ln\{1 - F(z)\} = -cz \quad \text{or} \quad F(z) = 1 - \exp(-cz).$$

$$f(z) = \left(\frac{dF(z)}{dz}\right) c \exp(-cz).$$

$$\langle \lambda \rangle = \frac{\int_0^\infty z f(z) dz}{\int_0^\infty f(z) dz} = \frac{1}{c}$$

$$f(z; \varepsilon) = \frac{1}{\langle \lambda(\varepsilon) \rangle} \exp\left(-\frac{z}{\langle \lambda(\varepsilon) \rangle}\right),$$

# 气相和表面的基本过程 ( 1 )

## ● 碰撞与截面 ( 续 )

□ 碰撞的实验室坐标系表示、质心坐标系表示之间的关系 ( 弹性碰撞 )

■ 动能守恒的质心坐标系表示

$$(|v - V| = |v' - V'| = |v_r|).$$

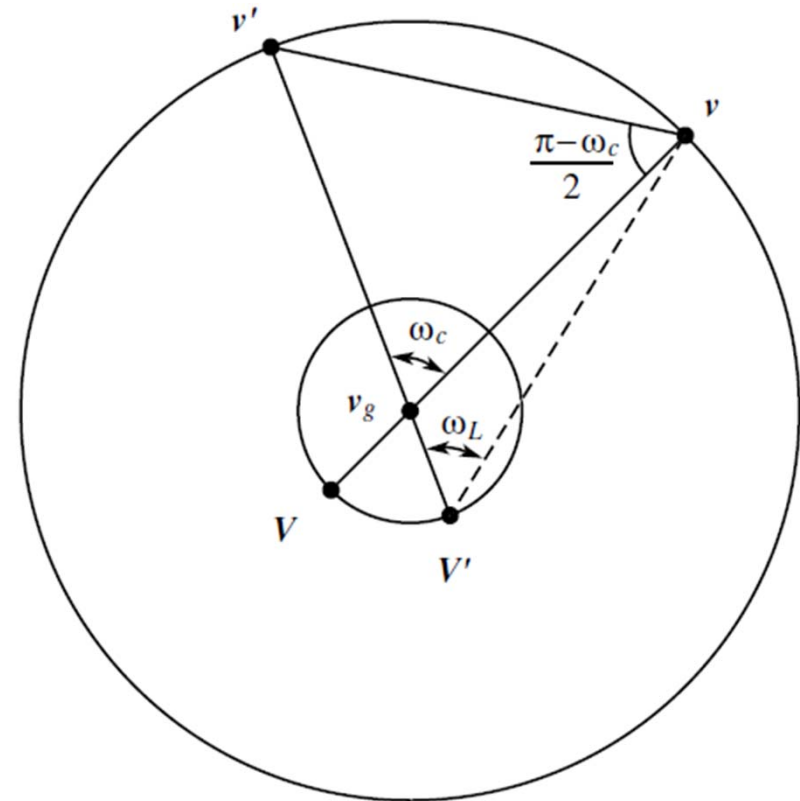
■ 速度关系

$$v = v_r M / (m + M)$$

$$V = v_r m / (m + M),$$

■ 散射角为  $\omega_c$  的等效三角  $[v_g, v', v]$

■ 实验室坐标系散射三角  $[V', v', v]$ ,



$$v_r = v - V.$$

$$\frac{\overline{v'v}}{\sin \omega_c} = \frac{M v_r / (m + M)}{\sin[(\pi - \omega_c) / 2]'} \quad \frac{\overline{v'v}}{\sin \omega_L} = \frac{v_r}{\sin[\pi - \omega_L - (\pi - \omega_c) / 2]}.$$

# 气相和表面的基本过程 ( 1 )

## ● 碰撞与截面 ( 续 )

### □ 碰撞中的守恒定律

#### ■ 动量守恒

$$mv' + MV' = mv + MV,$$

#### ■ 能量守恒

$$\varepsilon_{kin} = \frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}MV^2 = \frac{1}{2}(m + M)v_g^2 + \frac{1}{2}\mu_r v_r^2,$$

$$v_g = \frac{mv + MV}{m + M} \quad v_r = v - V. \quad \mu_r = \frac{mM}{m + M}.$$

- $v', V'$  : 碰撞前的电子、中性粒子速度
- $v, V$ : 碰撞后的电子、中性粒子速度
- $v_g$ : 质心速度
- $v_r$ : 相对速度
- $\mu_r$ : 约化质量

# 气相和表面的基本过程 (1)

## ● 碰撞与截面 (续)

□ 碰撞的实验室坐标系表示、质心坐标系表示之间的关系

■ 碰撞截面之间的关系

$$\frac{\overline{v'v}}{\sin \omega_c} = \frac{Mv_r/(m+M)}{\sin[(\pi - \omega_c)/2]}, \quad \frac{\overline{v'v}}{\sin \omega_L} = \frac{v_r}{\sin[\pi - \omega_L - (\pi - \omega_c)/2]}$$

$$\tan \omega_L = \frac{\sin \omega_c}{(m/M) + \cos \omega_c}, \quad \cos \omega_L = \frac{(m/M) + \cos \omega_c}{\{1 + 2(m/M) \cos \omega_c + (m/M)^2\}^{1/2}}$$

$$\sigma_L(\omega_L; \varepsilon) d\Omega_L \equiv \sigma_c(\omega_c; \varepsilon) d\Omega_c$$

$$\sigma_L(\omega_L; \varepsilon) = \sigma_c(\omega_c; \varepsilon) \frac{d \cos \omega_c}{d \cos \omega_L} \quad \text{同一事件的两种表达式, 相等粒子数}$$

$$= \sigma_c(\omega_c; \varepsilon) \frac{\{1 + 2(m/M) \cos \omega_c + (m/M)^2\}^{3/2}}{1 + (m/M) \cos \omega_c}$$

# 气相和表面的基本过程 (1)

## ● 碰撞与截面 (续)

### □ 能量转移

#### ■ 弹性碰撞的能量转移

$$\frac{\varepsilon_M}{\varepsilon'_m} = \frac{MV^2/2}{mv'^2/2} = \frac{M}{mv'^2} \left( \frac{2mv'}{m+M} \cos \omega_L \right)^2$$

$$= \frac{4mM}{(m+M)^2} \cos^2 \omega_L.$$

#### ■ 非弹性碰撞的能量转移

$$v = \frac{1}{m+M} \left\{ mv' \cos \theta_L \pm \sqrt{\frac{m}{M} [mMv'^2 \cos^2 \theta_L - 2(m+M)\Delta\varepsilon]} \right\}$$

$\Delta\varepsilon$ : 非弹性碰撞所需的转换能量

$$V = \frac{1}{m+M} \left[ mv' \cos \omega_L \pm \sqrt{v'^2(M^2 - m^2 \sin^2 \omega_L) - 2(m+M)\frac{M}{m}\Delta\varepsilon} \right]$$

发生非弹性碰撞的最小入射速度/动能

$$\frac{1}{2}mv'^2 = \frac{(m+M)M}{M^2 - m^2 \sin^2 \omega_L} \Delta\varepsilon, \quad \xrightarrow{\text{对心碰撞}} \quad \varepsilon'_m = \frac{m+M}{M} \Delta\varepsilon. \quad \xrightarrow{\quad} \quad \begin{aligned} \varepsilon'_m &= 2\Delta\varepsilon & (m = M) \\ \varepsilon'_m &= \Delta\varepsilon. & (m \ll M) \end{aligned}$$

# 气相和表面的基本过程 (1)

## ● 经典碰撞理论

### □ 给定散射角的碰撞参数 (瞄准距离)

#### ■ 参数关系

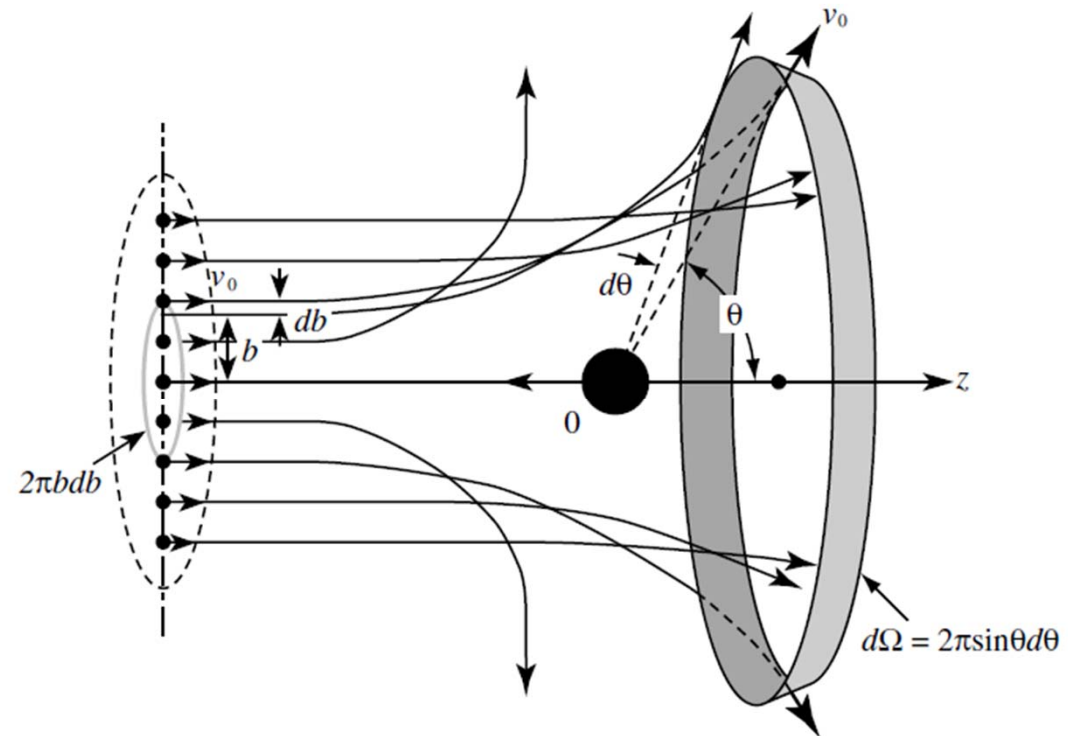
$$b = b(\theta)$$

#### ■ 微分碰撞截面

$$\sigma(\theta) = 2\pi b db / d\Omega$$

$$= b(\theta) \left| \frac{db(\theta)}{d\theta} \right| \frac{d\theta}{\sin\theta d\theta}$$

$$= \frac{1}{\sin\theta} b(\theta) \left| \frac{db(\theta)}{d\theta} \right|$$



$$d\Omega = 2\pi \sin\theta d\theta$$

# 气相和表面的基本过程 (1)

## ● 经典碰撞理论 (续)

### □ 经典力学中的散射(考虑原子核库仑力)

#### ■ 角动量守恒 (质心坐标系)

$$L = \mu v_0 b = \mu (r d\xi/dt) r = \mu v'_0 b'$$

入射角动量

库仑力作用区角动量

$$E = \mu v_0^2/2 = \mu \left\{ \frac{(dr/dt)^2}{\text{径向}} + r^2 \frac{(d\xi/dt)^2}{\text{角向}} \right\} / 2 + V(r)$$

$$= \mu v_0'^2/2,$$

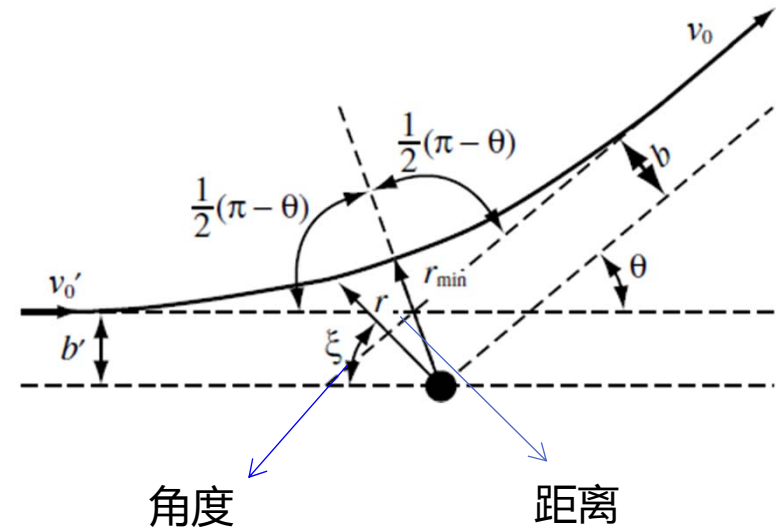
$$v_0 = v'_0, \quad b = b'.$$

$$d\xi/dt = L/\mu r^2, \quad dr/dt = (d\xi/dt)(dr/d\xi) = (L/\mu r^2)(dr/d\xi),$$

$$E = \mu \left\{ (L/\mu r^2)^2 (dr/d\xi)^2 + r^2 (L/\mu r^2)^2 \right\} / 2 + V(r)$$

$$= \{ L^2 / 2\mu r^4 \} \{ (dr/d\xi)^2 + r^2 \} + V(r).$$

具有相互作用势 $V(r)$ 的经典散射示意图  
(球对称)



$$(dr/d\xi)^2 = \{ 2\mu r^4 / L^2 \} \{ E - V(r) \} - r^2.$$

散射轨迹方程



# 气相和表面的基本过程 (1)

## ● 经典碰撞理论 (续)

### □ 经典力学中的散射

#### ■ 轨迹方程 ( $r \sim \xi$ )

$d\xi/dr < 0$ , 入射粒子接近靶粒子

$d\xi/dr > 0$ , 入射粒子远离靶粒子

轨迹具有对称性, 可只分析前半段

$$(dr/d\xi)^2 = \{2\mu r^4/L^2\}\{E - V(r)\} - r^2.$$

$$L = \mu v_0 b$$

$$\frac{L^2}{2\mu r^2} + V(r) = \frac{\mu v_0^2 b^2}{2r^2} + V(r) = V_{\text{eff}}(r),$$

$$\frac{d\xi}{dr} = \pm \frac{1}{\left[\frac{2\mu r^4}{L^2}\{E - V(r)\} - r^2\right]^{1/2}}.$$

$$\int_0^{(\pi-\theta)/2} d\xi = \int_{\infty}^{r_{\min}} -\left[\frac{2\mu r^4}{L^2}\{E - V(r)\} - r^2\right]^{-1/2} dr$$

$$(\pi - \theta)/2 = \int_{r_{\min}}^{\infty} \left[\frac{2\mu r^4}{L^2}\{E - V(r)\} - r^2\right]^{1/2} dr.$$

$$u = 1/r.$$

$$(\pi - \theta)/2 = \int_0^{u_{\max}} \left[\frac{2\mu}{L^2}\{E - V(1/u) - u^2\}\right]^{-1/2} du;$$

距离靶粒子最近的切点处  $(2\mu/L^2)\{E - V(1/u_{\max})\} - u_{\max}^2 = 0.$

# 气相和表面的基本过程 (1)

## ● 经典碰撞理论 (续)

### □ 经典力学中的散射

#### ■ 硬球模型的参数关系

$$(\pi - \theta)/2 = \int_0^{u_{\max}} [(1/b^2)\{1 - V(1/u)/E\} - u^2]^{-1/2} du;$$

$$\{1 - V(1/u_{\max})/E - b^2 u_{\max}^2\} = 0.$$



$$V(r) = \begin{pmatrix} \infty & (r \leq r_0) \\ 0 & (r > r_0) \end{pmatrix}, \quad r_{\min} = r_0 = 1/u_{\max}$$

$$(\pi - \theta)/2 = \int_0^{1/r_0} [(1/b^2) - u^2]^{-1/2} du$$

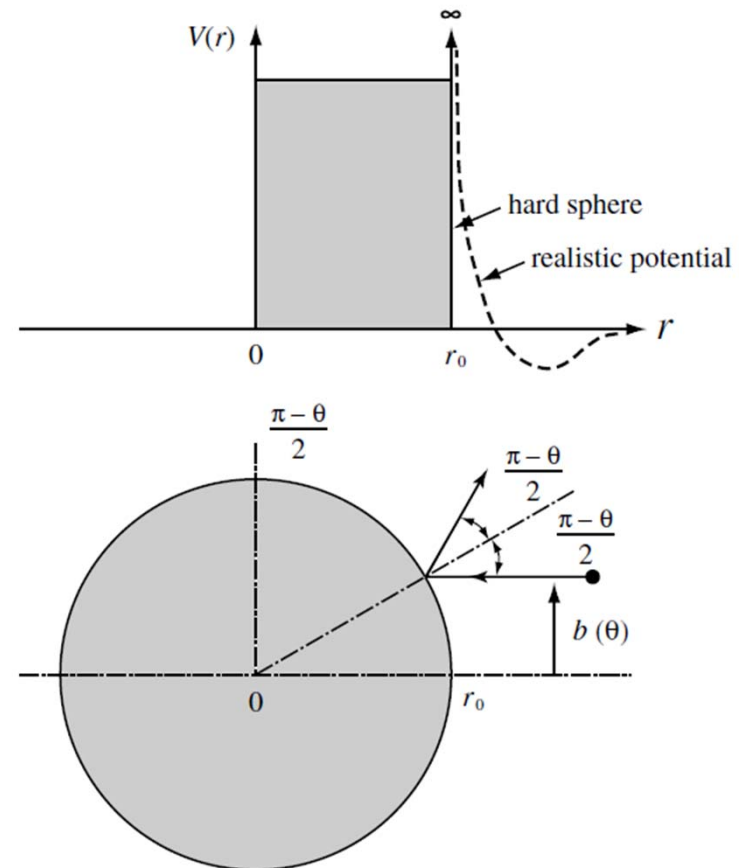
$$= \sin^{-1}[u/(1/b)]_0^{1/r_0} = \sin^{-1}[b/r_0]; \quad (b \leq r_0)$$

$$= \text{no collision}; \quad (b > r_0).$$



$$\theta(b) = 2 \cos^{-1}(b/r_0) \quad (b < r_0)$$

$$= 0 \quad (b > r_0).$$



# 气相和表面的基本过程 (1)

## ● 经典碰撞理论 (续)

### □ 经典力学中的散射

- 根据参数关系推导微分碰撞截面和总碰撞截面

$$\begin{aligned}\theta(b) &= 2 \cos^{-1}(b/r_0) \quad (b < r_0) \\ &= 0 \quad (b > r_0).\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}\sigma(\theta) &= (1/\sin \theta)b(\theta)|db(\theta)/d\theta| \\ &= (1/\sin \theta)r_0 \cos(\theta/2) |-(r_0/2) \sin(\theta/2)| \\ &= r_0^2 \sin \theta / (4 \sin \theta) = r_0^2/4,\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}Q_0 &= \int \sigma(\theta) d\Omega = \int (r_0^2/4) \sin \theta d\theta d\phi \\ &= (r_0^2/4) 4\pi = \pi r_0^2.\end{aligned}$$

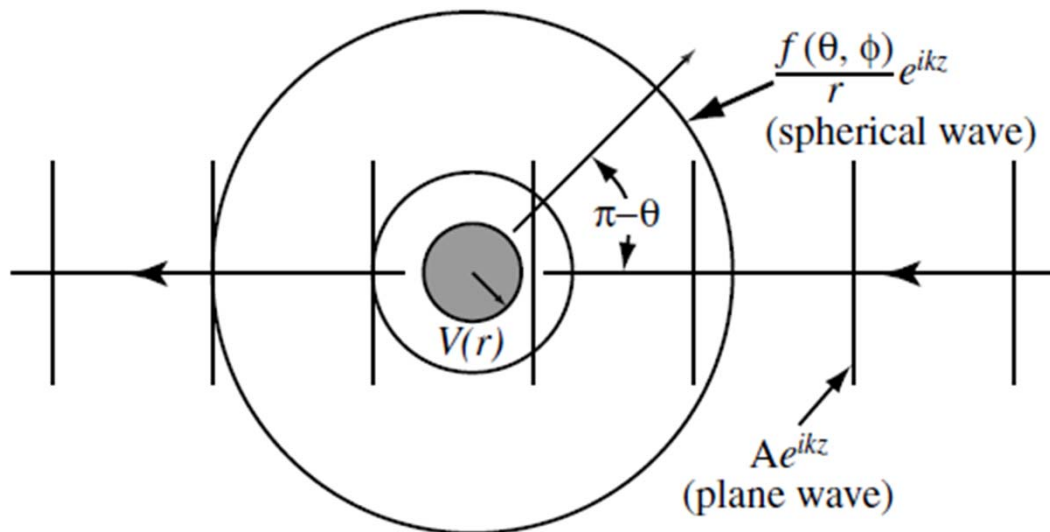
硬球模型下的总碰撞截面

# 气相和表面的基本过程 ( 1 )

## ● 散射的量子理论

### □ 以量子理论来看待碰撞的三个主要条件

- 以平面波来描述入射粒子
- 入射粒子的总能量为正
- 散射粒子的位置远离开射中心，该处相互作用势可以忽略



碰撞可以分为三个阶段：

- 入射
- 散射势作用下
- 散射后

# 气相和表面的基本过程 (1)

## ● 散射的量子理论 (续)

### □ 碰撞的三阶段

- 入射 (接近散射势作用)  
- 平面波

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)],$$



谐波形式

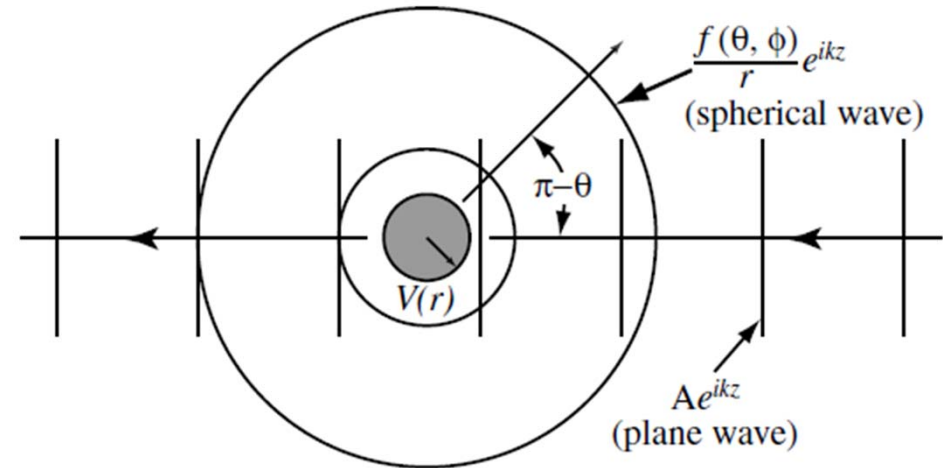
$$\Psi(z) = \exp(ikz).$$

- 散射势作用下 (满足薛定谔方程)

$$-(\hbar^2/2\mu)\nabla^2\Psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{r}) = E\Psi(\mathbf{r}).$$

- 散射后 (远离散射势)

$$\Psi(\mathbf{r}) = \exp(ikz) + \frac{f(k; \theta, \phi)}{r} \exp(ikr).$$



入射：z方向传播的平面波

散射后：平面波与散射球面波之和

散射幅度  
为零表示无散射

# 气相和表面的基本过程 ( 1 )

## ● 散射的量子理论 ( 续 )

### □ 微分散射截面

- 定义：落入散射角为  $(\theta, \phi)$  的面元  $dS$  的概率

$$\Delta n/n = \sigma(k; \theta, \phi) d\Omega.$$

$$\begin{aligned} \Delta n/n &= \left| \frac{f(k; \theta, \phi)}{r} \exp(ikr) \right|^2 dS \cdot \frac{1}{|\exp(ikz)|^2} \\ &= |f(k; \theta, \phi)|^2 \frac{dS}{r^2}. \end{aligned}$$

$$\sigma(k; \theta, \phi) = |f(k; \theta, \phi)|^2.$$

?

Differential Scattering Cross Section  $\sigma(\theta)$     待求问题：f()函数

# 气相和表面的基本过程 (1)

## ● 散射的量子理论 (续)

### □ 微分散射截面

#### ■ 薛定谔方程

- 散射后的波函数是薛定谔方程在无限远处的解

$$-(\hbar^2/2\mu)\nabla^2\Psi(r) + V(r)\Psi(r) = E\Psi(r).$$

$$\Psi(r) = R(r)Y(\theta, \phi).$$

$$\Psi(r) = R(r)P_l(\cos\theta).$$

轴对称系：勒让德多项式

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \left( \frac{2\mu E}{\hbar^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2} \left[ V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} \right] \right) R(r) = 0.$$

$$R(r) = u(r)/r,$$

变换

$$V_{\text{eff}}^l(r) = V(r) + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2}.$$

有效势 相互作用势 离心力

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + V_{\text{eff}}^l(r) u(r) = E u(r).$$

# 气相和表面的基本过程 ( 1 )

## ● 散射的量子理论 ( 续 )

### □ 微分散射截面

#### ■ 薛定谔方程求解

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2 u(r)}{dr^2} + V_{eff}^l(r) u(r) = E u(r).$$

$$V_{eff}^l \rightarrow 0 \quad \text{when } r \rightarrow \infty$$

$$u(r) \rightarrow A \sin(kr) + B \cos(kr) \\ \rightarrow A \sin(kr + \eta_l - l\pi/2); \text{ at } r \rightarrow \infty.$$

散射造成相移

无散射时,  $u(r)$ 即为入射波

$$R(r) = u(r)/r,$$

$$R(r) = (1/kr) \sin(kr - l\pi/2 + \eta_l) \quad \text{at } r \rightarrow \infty,$$



# 气相和表面的基本过程 ( 1 )

## ● 散射的量子理论 ( 续 )

### □ 微分散射截面

#### ■ 薛定谔方程求解

$$R(r) = (1/kr) \sin(kr - l\pi/2 + \eta_l) \quad \text{at } r \rightarrow \infty,$$



$$\Psi(r) = R(r) P_l(\cos \theta).$$

$$\Psi(r) = \sum_l A_l R(r) P_l(\cos \theta) \quad \text{通解}$$

$$\sim \sum_l A_l (1/kr) \sin(kr - l\pi/2 + \eta_l) P_l(\cos \theta) \quad (\text{at } r \rightarrow \infty)$$

$$\sim \sum_l A_l (1/2ikr) \{ \exp[i(kr - l\pi/2 + \eta_l)] - \exp[-i(kr - l\pi/2 + \eta_l)] \} P_l(\cos \theta) \quad (\text{at } r \rightarrow \infty).$$

# 气相和表面的基本过程 ( 1 )

## ● 散射的量子理论 ( 续 )

### □ 微分散射截面

- 薛定谔方程求解 ( 入射平面波的球面波展开 )

$$f(x) = \sum_l a_l P_l(x) \quad \text{and} \quad a_l = \frac{(2l+1)}{2} \int_{-1}^1 f(t) P_l(t) dt,$$



$$\exp(ikz) = \exp(ikr \cos \theta)$$

$$= \sum_l P_l(\cos \theta) \frac{(2l+1)}{2} \int_{-1}^1 \exp(ikrt) P_l(t) dt \quad t = \cos \theta$$

(Rayleigh formula)

$$= \sum_l P_l(\cos \theta) \frac{2l+1}{2} 2i^l j_l(kr).$$

$$j_l(x) = (1/2i^l) \int_{-1}^1 \exp(ixt) P_l(t) dt, \quad \rightarrow \quad j_l(x) = (\pi/2x^l)^{1/2} J_{l+1/2}(x) \\ \sim (1/x) \cos(x - (2l+1)\pi/2) \quad (\text{at } x \rightarrow \infty).$$

球Bessel函数的渐近形式

# 气相和表面的基本过程 ( 1 )

## ● 散射的量子理论 ( 续 )

### □ 微分散射截面

- 散射平面波的渐近形式

$$\begin{aligned} & \exp(ikz)_{r \rightarrow \infty} \\ & \sim \sum_l (2l+1) i^l (1/kr) \sin(kr - l\pi/2) P_l(\cos \theta) \\ & \sim \sum_l \frac{(2l+1) i^l}{2ikr} \left( \exp \left[ i \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right) \right] - \exp \left[ -i \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right) \right] \right) P_l(\cos \theta) \end{aligned}$$



$$\begin{aligned} \Psi(r) - \exp(ikz) &= \sum_{l=0} A_l R(r) P_l(\cos \theta) - \sum_l P_l(\cos \theta) \frac{2l+1}{2} 2i^l j_l(kr) \\ &\sim \sum_{l=0} A_l \frac{1}{2ikr} \left( \exp \left[ i \left( kr - \frac{l\pi}{2} + \eta_l \right) \right] - \exp \left[ -i \left( kr - \frac{l\pi}{2} + \eta_l \right) \right] \right) P_l(\cos \theta) \\ &\quad - \sum_l \frac{(2l+1) i^l}{2ikr} \left( \exp \left[ i \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right) \right] - \exp \left[ -i \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right) \right] \right) P_l(\cos \theta) \\ &\sim \sum_{l=0} P_l(\cos \theta) \left( \frac{1}{2ikr} \exp \left[ i \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right) \right] [A_l \exp(i\eta_l) - (2l+1) i^l] \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2ikr} \exp \left[ -i \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right) \right] [A_l \exp(-i\eta_l) - (2l+1) i^l] \right) \text{ (向外传播部分) } \end{aligned}$$

~~$$- \frac{1}{2ikr} \exp \left[ -i \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right) \right] [A_l \exp(-i\eta_l) - (2l+1) i^l] \text{ (at } r \rightarrow \infty). \text{ (4.70)}$$~~

$$A_l = (2l+1) i^l \exp(i\eta_l).$$

# 气相和表面的基本过程 ( 1 )

## ● 散射的量子理论 ( 续 )

### □ 微分散射截面

#### ■ 散射平面波的渐近形式

$$\begin{aligned} & \frac{f(k; \theta)}{r} \exp(ikr) \\ & \sim \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{2ikr} \exp \left[ i \left( kr - \frac{l\pi}{2} \right) \right] [(2l + 1)i^l \exp(2i\eta_l) - (2l + 1)i^l] P_l(\cos \theta) \\ & \sim \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{2ik} \exp \left( -\frac{il\pi}{2} \right) i^l (2l + 1) \{ \exp(2i\eta_l) - 1 \} P_l(\cos \theta) \frac{\exp(ikr)}{r}, \quad (4.71) \end{aligned}$$



$$f(k; \theta) = \frac{1}{2ik} \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) \{ \exp(2i\eta_l) - 1 \} P_l(\cos \theta)$$


# 气相和表面的基本过程 ( 1 )

## ● 散射的量子理论 ( 续 )

### □ 微分散射截面

#### ■ 微分散射截面和积分散射截面

$$\begin{aligned}\sigma(\theta) &= |f(k; \theta)|^2 \\ &= \frac{1}{k^2} \left| \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2} \{ \exp(2i\eta_l) - 1 \} P_l(\cos \theta) \right|^2.\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}Q_0 &= \int \sigma(\theta) d\Omega \\ Q_0(\varepsilon) &= \int |f(k; \theta)|^2 d\Omega \\ &= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sin^2 \eta_l.\end{aligned}$$

# 气相和表面的基本过程 ( 1 )

- 散射的量子理论 ( 续 )

$$Q_0(\varepsilon) = \int |f(k; \theta)|^2 d\Omega$$
$$= \frac{4\pi}{k^2} \sum_{l=0} (2l + 1) \sin^2 \eta_l.$$



$$V(r) = +V_0 \quad r \leq r_0$$
$$= 0 \quad r > r_0.$$

$$V_0(r) \rightarrow \infty$$

$$Q_0 = 4\pi r_0^2$$

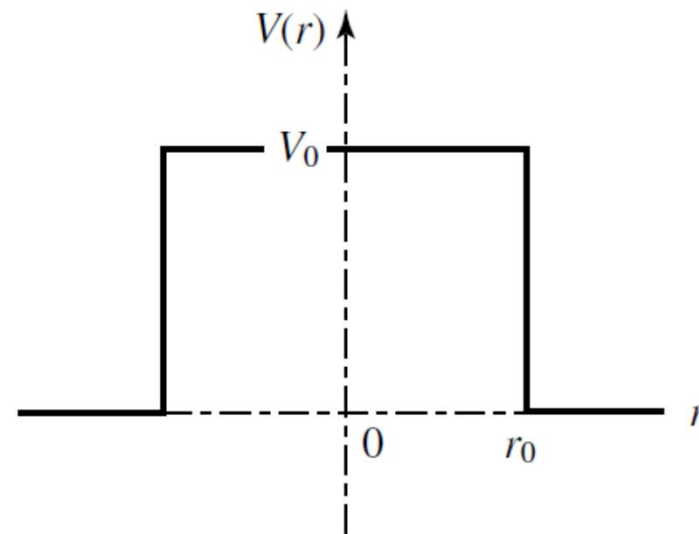


FIGURE 4.15

The profile of the spherical repulsive potential.

# 《等离子体电子学》

## 第四章 气相和表面的基本过程(1)

本章待续

下一节：气相和表面的基本过程(2)

课件下载：<ftp://202.117.18.164/incoming/PE2017/> 

(在“幻灯片放映”模式中时单击该箭头)