

广义振子强度密度

田 伯 刚 李 家 明

(中国科学院物理研究所)

1983 年 9 月 23 日收到

提 要

根据 Born 近似,可以计算高能电子碰撞激发的总截面和微分截面。微分截面是和所谓的广义振子强度成正比的。电子碰撞过程可将靶原子或离子激发至无数的束缚态、自电离态和对应的连续态,多通道量子数亏损理论能够统一地处理这些激发态。因此可以定义每单位激发能内的广义振子强度为广义振子强度密度。本文以 Li 原子为例,总结其广义振子强度密度随激发能量和动量转移而变化的规律,并和最近精确的实验结果进行了比较,明确了 Born 近似的适用范围。

一、引 言

电子-原子散射和电子-离子散射的截面是重要的物理数据,在许多应用方面都需要这类数据。关于电子-离子碰撞激发过程,文献[1]提出了一种计算总截面的理论方法:在电子的低能区域,利用多通道量子数亏损理论,可以从精确的能谱数据中推算出电子碰撞激发截面,同时也可用于检验低能碰撞激发截面数据。在电子的高能区域,利用 Born 近似-Bethe 理论来计算电子碰撞激发截面。对于中间能域可以用内插法得到平均激发截面。本文将根据 Born 近似计算高能电子碰撞激发的微分截面,同时探索电子碰撞激发到各种束缚态以至对应的连续态的规律。

当电子速度较快以致 Born 近似可以应用时,“态-态”跃迁的微分截面正比于所谓“广义振子强度”^[2],如果对于束缚-束缚跃迁和束缚-连续跃迁,统一地定义每单位激发能内的广义振子强度为广义振子强度密度,则按照多通道量子数亏损理论^[1,3,4],广义振子强度密度应是激发能的连续函数。本文以 Li 原子为例,考虑电子-Li 原子碰撞激发过程。Li 原子的基态是一个闭合壳层加一个价电子。目前我们所考虑的靶原子激发都是这一个价电子的激发。在非相对论原子自洽场^[5](即所谓 Hartree-Slater 自洽场)层次上,用基态组态的自洽势描述这一被激发的价电子所感受到的有效势是比较好的。如果要得到更精确的结果,就需要超越自洽的层次,如组态相互作用的方法。本文计算了 ($2^2S \rightarrow \epsilon s^2S$)、($2^2S \rightarrow \epsilon p^2P$) 和 ($2^2S \rightarrow \epsilon d^2D$) 三类激发的广义振子强度密度,总结了广义振子强度密度随激发能量和动量转移而变化的规律。

总结广义振子强度密度的规律后,将有助于掌握大量的电子碰撞激发截面数据;具体地说:对于激发到很高激发态的微分截面及总截面,实验测量或直接的理论计算都会有些困难。而根据广义振子强度密度的规律,这些微分截面或总截面完全可以从广义振子

强度密度的内插而精确地求得。

最后,本文将理论计算结果与最近精确的实验^[6]做了比较。一般地说,理论计算的误差主要来自两方面:即对靶原子的描述和由于入射电子与靶原子相互作用引起的入射波的畸变。对第一个方面,如前面所讨论的,在非相对论自洽场层次上可以较好地描述靶原子。(例如: 2S 态电离阈值的理论计算与实验值之差小于 2%)。由此可以考虑第二个方面的影响:对于微分截面,当电子动能大于 150eV 时,理论计算与实验值符合较好。对于总截面,当电子动能大于 100eV 时,理论计算与实验值就已经符合得较好了。由此可以明确 Born 近似的适用范围。

二、理论方法

考虑一个电子-原子散射体系,入射电子动能为 T , 动量为 $\hbar\mathbf{k}$, 靶原子初态为 $|i\rangle$, 能量为 E_i , 散射后, 电子动能为 T' , 动量为 $\hbar\mathbf{k}'$, 靶原子激发到末态 $|f\rangle$, 能量为 E_f 。则

$$\text{能量转移 } \Delta E = T - T' = E_f - E_i,$$

$$\text{动量转移 } \hbar\mathbf{Q} = \hbar\mathbf{k} - \hbar\mathbf{k}'.$$

当入射电子速度较快以致 Born 近似的条件可以适用时,微分截面可以写为^[2](以下用原子单位)

$$d\sigma = \frac{\pi}{T} \cdot \frac{f(\Delta E, Q)}{\Delta E} \cdot d \ln Q^2. \quad (1)$$

这里,对于束缚-束缚跃迁, $d\sigma$ 为一般的“态-态跃迁”微分截面, 末态波函数为“态归一”的, 即 $\langle f|f\rangle = 1$ 。而对于束缚-连续跃迁, $d\sigma$ 应为每单位激发能内的微分截面, 末态波函数为能量归一的。 $f(\Delta E, Q)$ 即所谓“广义振子强度”

$$f(\Delta E, Q) = \frac{2 \cdot \Delta E}{Q^2} \cdot \left| \langle f | \sum_{j=1}^N e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_j} | i \rangle \right|_{\text{初态平均末态求和}}^2 \quad (2)$$

被激发的靶原子可能处于不同的激发态。当其总角动量和宇称保持为一定时, 这类激发态包括分立态、自电离态和连续态, 可以在多通道量子数亏损理论中得到统一的处理^[3,4]; 当波函数采用能量归一时, 按照多通道量子数亏损理论, 波函数从束缚态到连续态都是激发能的连续函数, 所以其矩阵元也是能量转移的连续函数。关于束缚态的归一, 能量归一与态归一之间相差一个 N_n 因子; 其平方即所谓“态密度”^[3], 在单通道的情况下(如碱金属), 由文献[3], 方程(10)有

$$N_n^2 = (n - \mu_n)^2 + \left(\frac{d\mu_n}{d\varepsilon} \right) \varepsilon_n \quad (3)$$

这里 n 为主量子数; μ_n 为量子数亏损; ε_n 为轨道能。

由此, 对束缚-束缚跃迁及束缚-连续跃迁, 可以统一地定义广义振子强度密度,

$$\frac{df(\Delta E, Q)}{d\varepsilon},$$

为每单位激发能内的广义振子强度; 则对于束缚-束缚跃迁, 有关系式

$$\frac{df(\Delta E, Q)}{d\varepsilon} = N_n^2 \cdot f(\Delta E, Q). \quad (4)$$

在自洽层次上计算广义振子强度密度时, 首先由 Hartree-Slater 自洽场方法求出基态组态的自洽势 $V(r)$, 然后在这一自洽势中求解被激发电子的初、末态径向波函数

$$\left(-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V(r) - \epsilon\right) P_{el}(r) = 0, \quad (5)$$

得到单电子波函数, 再用单电子波函数构成原子的单组态波函数^[9], 代入广义振子强度密度表达式中, 得到

$$\frac{df(\Delta E, Q)}{d\epsilon} = \frac{2}{(2l+1)} \cdot \frac{\Delta E}{Q^2} \sum_{\lambda} \frac{|T_{\lambda}(\Delta E, Q)|^2 C_{\lambda}^2}{(2\lambda+1)}, \quad (6)$$

其中

$$\begin{aligned} T_{\lambda}(\Delta E, Q) &= (2\lambda+1) \sqrt{(2l+1)(2l'+1)} \begin{pmatrix} l' & \lambda & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \langle \epsilon l' | j_{\lambda}(Qr) | nl \rangle; \\ &= \int_0^{\infty} P_{\epsilon l'}(r) j_{\lambda}(Qr) P_{nl}(r) dr; \end{aligned}$$

而 P_{nl} , $P_{\epsilon l'}$ 为被激发电子的初、末态单电子径向波函数, $P_{\epsilon l'}$ 为能量归一的。

$$C_{\lambda}^2 = (2L'+1)(2l+1)\omega \cdot |G_{\alpha_0 S_0 L_0}^{\alpha S L}|^2 \cdot \left\{ \begin{matrix} L & \lambda & L' \\ l' & L_0 & l \end{matrix} \right\}^2;$$

$nl\alpha^{2S+1}L$ 为初态量子数组; $\epsilon l'(\alpha_0^{2S_0+1}L_0)\alpha'^{2S'+1}L'$ 为末态量子数组; ω 为被激发次壳层的电子占据数;

$G_{\alpha_0 S_0 L_0}^{\alpha S L} = \langle l'^{-1}\alpha_0 S_0 L_0 | l' \alpha S L \rangle$ 为部分根源系数 (coefficients of fractional parentage); 对类氢和碱金属原子, $C_{\lambda}^2 = 1$ 。

从广义振子强度的数据, 可以得到总截面为^[2]

$$\sigma = \frac{\pi}{T \cdot \Delta E} \int_{\ln Q_{\min}^2}^{\ln Q_{\max}^2} f(\Delta E, Q) d \ln Q^2. \quad (7)$$

三、结果与讨论

以 Li 原子为例, 这是一个单通道的问题。我们考虑由基态 $1s^2 2s^2 S$ 向 $\epsilon s^2 S$, $\epsilon p^2 P$ 和 $\epsilon d^2 D$ 三个通道的激发。这里 ϵ 为轨道能。当 $\epsilon < 0$ 时, 为束缚态, 其束缚能量为

$$\epsilon_n = -\frac{1}{2 \cdot (n - \mu_a)^2},$$

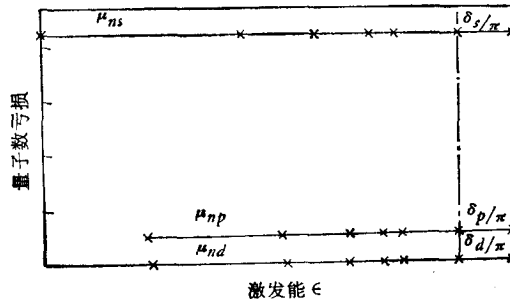


图 1

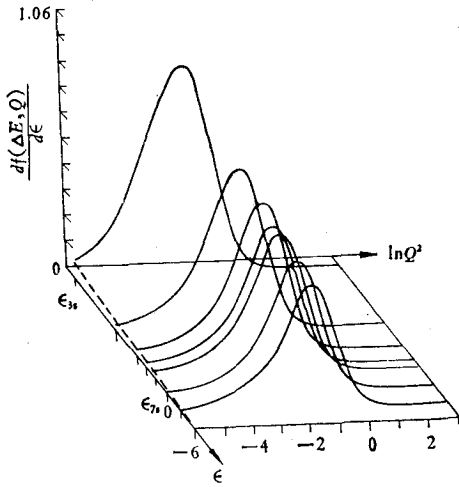


图 2

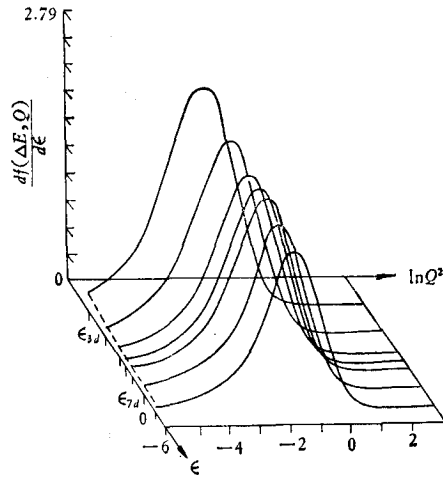


图 3

而 μ_α 即所谓量子数亏损。 $\epsilon > 0$ 时，为连续态，由于短程相互作用而导致的相移为 δ_α ，在阈值处， δ_α/π 应和 μ_α 连续地联接。图 1 为 Li 原子 es^2S ， ep^2P 和 ed^2D 三个通道的量子数亏损；可以看到：在这三个通道内量子数亏损随激发能 ϵ 的变化是非常平滑、缓慢的，有时几乎就是常数。对于激发态的量子数亏损，完全可以用内插得到。当 n 较大时， μ_α 只要有两位有效数字的精度，轨道能就非常精确了。

对这三个通道，我们计算了每个通道激发的广义振子强度密度。图 2 为 es^2S 通道激发的广义振子强度密度，图 3 为 ed^2D 通道激发的广义振子强度密度。可以看到，在这两个通道中，广义振子强度密度不仅是动量转移 Q 的光滑、连续的函数，而且也是激发能的光滑、连续的函数。在阈值附近，广义振子强度密度随激发能的变化是比较缓慢的；如果在 ϵ_{7s} ， ϵ_{7d} 与阈值之间内插广义振子强度密度，是可以保证一定的精度的。

图 4 为 ep^2P 通道激发的广义振子强度密度和光学振子强度密度。初看起来，广义振子强度密度随激发能的变化似乎比其他两个通道剧烈些，实际上这是由于矩阵元 $T_\lambda(\Delta E,$

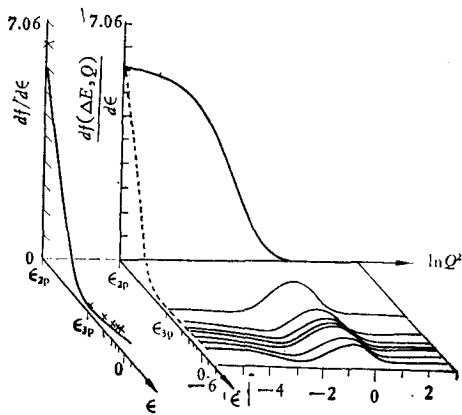


图 4

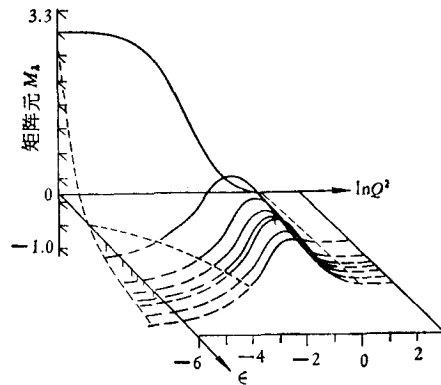


图 5

Q) 在 ϵ_{2p} 与 ϵ_{3p} 之间改变符号所致. 当动量转移 Q 趋于零时, 广义振子强度密度应趋于光学振子强度密度 $df/d\epsilon$; 所以在图 4 的左边也画出了光学振子强度密度. 从光学振子强度密度随 ϵ 的变化也可以看到矩阵元在 ϵ_{2p} 与 ϵ_{3p} 之间变号的特征. 因此我们又在图 5 中展示 $\epsilon p^2 P$ 通道的矩阵元

$$\sqrt{\Delta E} \cdot \frac{T_\lambda(\Delta E, Q)}{Q} \equiv M_\lambda,$$

而 $\lambda = 1$. 可以清楚地看到, M_λ 仍是 Q 和 ϵ 的光滑、连续的函数, 在阈值附近, M_λ 的变化仍是比较缓慢的, 所以在 $\epsilon p^2 P$ 通道, 可以直接内插 M_λ , 再由第二节的(6)式就可以求得广义振子强度密度. 仔细地分析图 5 可以看到: 当 Q 由小变大时, 矩阵元 M_λ 出现变号 ($\epsilon \geq \epsilon_{3p}$), 在 $(\epsilon, \ln Q^2)$ 平面上这种变号点的轨迹即所谓节线 (即图 5 中的短虚线). 对应的广义振子强度就出现零点. 当 Q 再变大时, 矩阵元 M_λ 又出现变号 ($\epsilon \geq \epsilon_{2p}$), 在 $(\epsilon, \ln Q^2)$ 平面上就出现第二条节线. 对应的广义振子强度就会出现如图 6 中小图所示的谷及第二峰 (广义振子强度密度第二峰值约为 $1.5 \times 10^{-5} \text{a.u.}$, 其值甚小). 由截面与广义振子强度的关系

$$\frac{d\sigma}{dQ} = \frac{2}{\Delta E} \cdot \left(\frac{k_f}{k_i}\right) \cdot \frac{f(\Delta E, Q)}{Q^2}, \quad (8)$$

微分截面也会出现相应的谷及第二峰; 表 1 是 $2^2S \rightarrow 2^2P$ 激发微分截面的谷及第二峰在 $T = 150\text{eV}$, 200eV 时, 对应的角度和第二峰值.

表 1

电子动能 $T(\text{eV})$	谷的角度	第二峰的角度	第二峰值 (cm^2/sr)
150	$35^\circ 20'$	$43^\circ 38'$	2.44×10^{-22}
200	$30^\circ 28'$	$37^\circ 30'$	2.45×10^{-22}

由于 $f(\Delta E, Q)$ 与电子动能 T 无关, 对不同 T , 谷及第二峰对应的 Q 值相同, 而 (k_f/k_i) 是随 T 增大而增大的, 当 T 趋于无穷时, (k_f/k_i) 趋于 1. 所以 T 增大时微分截面的第二峰值也增大, 但对应的角度变小. 在这些角度, 目前还没有实验值^[6], 希望实验工作者能进行检验. 对于另外两个通道, $\epsilon s^2 S$ 和 $\epsilon d^2 D$, 广义振子强度密度也存在如上所述的谷及第二峰, 但由于其峰值较小, 在图 2, 图 3 中无法画出.

在图 6 中画出了 $2^2S \rightarrow 2^2P$ 激发的有效广义振子强度 $f(\Delta E, Q)$. 根据文献[6]的微分截面实验值, 可得到所谓“有效广义振子强度” f^{AG}

$$f^{\text{AG}}(T, \Delta E, Q) = \frac{\Delta E}{2} \cdot \left(\frac{k_i}{k_f}\right) \cdot Q^2 \cdot \frac{d\sigma}{dQ}, \quad (9)$$

也在图 6 中画出.

这里 f^{AG} 是入射电子动能 T 的函数. 当 T 变大时, 有效广义振子强度 f^{AG} 应趋于广义振子强度而和 T 无关. 在图 6 中, 当 $T = 10\text{eV}$ 时, 有效广义振子强度 f^{AG} 在小 Q 时低于理论计算的广义振子强度 $f(\Delta E, Q)$, 在大 Q 时则高于 $f(\Delta E, Q)$. 当 T 变大时, f^{AG} 逼近理论计算的 $f(\Delta E, Q)$, 当 $T \geq 150\text{eV}$ 后, 实验值与理论计算符合较好. 图 7 画出了 $2^2S \rightarrow 2^2P$ 激发的总截面. 从图 6, 7 可以明确 Born 近似的适用范围: 当 $T \geq 150\text{eV}$ 时, Born 近

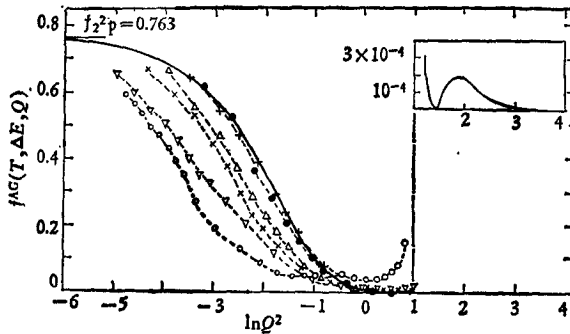


图6 ○为10eV; ▽为20eV; ×为60eV; △为100eV;
+为150eV; □为200 eV;实线为理论计算

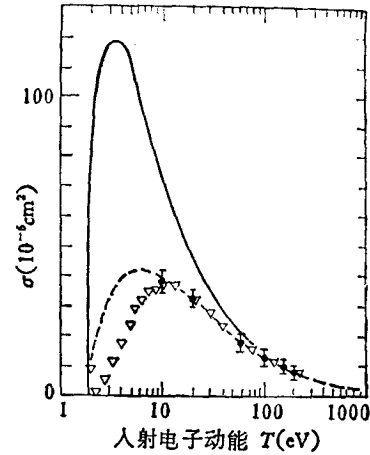


图7 实线为本文计算结果;虚线
为实验值^[6]; ▣为实验值^[6]; ▽为
Glauber 计算值^[6]

似较好; $T = 100\text{eV}$ 时, 微分截面的结果差些, 而总截面就比较好些 (误差小于实验误差)。

以上广义振子强度密度的计算是建立在非相对论原子自洽场层次上的, 即使将来在超越自洽的层次上, 以上所讨论的广义振子强度密度随激发能和动量转移变化的规律在定性上是不会改变的; 在定量上, 节线及峰值可能有所修正。

感谢本所计算技术实验室以及中国科学院计算中心同志们的帮助。

参 考 文 献

- [1] 李家明, 物理学报, **29**(1980), 419.
- [2] M. Inokuti, *Rev. Mod. Phys.*, **43** (1971), 279.
- [3] 李家明, 物理学报, **32**(1983), 84.
- [4] M.J. Scaton, *Rep. Prog. Phys.*, **46**(1983), 167.
- [5] 李家明、赵中新, 物理学报, **30**(1981), 105.
- [6] L. Vušković, S. Trajmar and D.F. Register, *J. Phys. B*, **15**(1982), 2517.

GENERALIZED OSCILLATOR STRENGTH DENSITY

TIAN BO-GANG LI JIA-MING

(Institute of Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

The total cross section and differential cross section of high-energy electron impact excitation can be calculated with Born approximation. The differential cross section is proportional to the so called generalized oscillator strength. The target atom or ion may be excited to infinite bound states, auto-ionizing states and adjoint continuum states which can be treated in an unified manner by Multichannel Quantum Defect Theory. Thus, we can define the generalized oscillator strength density as the strength per unit excitation energy. Taking the lithium atom as an example, we present here a summary of the variations of the generalized oscillator strength density with respect to excitation energy as well as momentum transfer. Comparing with recent accurate experimental data, the validity of Born approximation is discussed.