

# 非谐振区 $e\text{-He}^+$ 散射的位相移动

曾 氏 勇    何 志 贤

(福建师范大学物理系, 福州 350007)

(1994 年 3 月 15 日收到)

使用组态相互作用理论详细分析 He 的双重激发自电离态, 以及第一电离阈值附近非谐振区  $e\text{-He}^+$  散射的位相移动, 这种位相移动反映了非谐振区内电子—电子短程相互作用。获得了单重态和三重态的 S, P, D 分波的高精度位相移动, 与现有理论计算结果相比, 符合得很好。

PACC: 3120T

## 1 引 言

最近几年, 对 He 的第一电离阈值与第二电离阈值之间的连续态, 即双重激发自电离态的研究, 引起了人们的兴趣和关注, 其目的是为了定性乃至定量地分析电子-电子之间的相互作用。在靠近第二电离阈值的谐振区域内, 电子-电子之间的相互作用着重于远程作用, 其谐振特性可由谐振能量及宽度等谐振参数表征。在第一电离阈值附近的非谐振区域内, 电子-电子之间的相互作用着重于短程作用, 可以通过  $e\text{-He}^+$  散射的位相移动进行分析。实验上则是通过观测光致电离过程进行检验的。

早期进行这方面实验的是 Madden 和 Codling<sup>[1]</sup>; 近几年, Morgan 和 Ederer<sup>[2]</sup> 进行的低于第二电离阈值的光致电离实验, 有助于我们了解双重激发自电离态; 由束箔光谱实验<sup>[3]</sup>及电子俘获实验<sup>[4]</sup>也得到有关这个连续态的定量光谱信息。

理论上, 近几年来已使用各种不同的方法研究双重激发自电离态。在计算第一电离阈值附近非谐振区域的  $e\text{-He}^+$  散射位相移动方面, Shimamura 的变分法<sup>[5]</sup>; McGreevy 和 Stewart 的多体微扰法<sup>[6]</sup>; Oppenheimer 等的束缚态方法<sup>[7]</sup>以及 Khan 等的极化轨道方法<sup>[8]</sup>都得到较好的结果。Oza 构造三种特性不同的基组, 使用紧耦合的方法, 获得了相当高精度的单重态和三重态的 S, P, D 分波位相移动, 与实验结果符合得很好<sup>[9]</sup>。

本文使用最近几年发展起来的一种理论, 即组态相互作用理论, 详细分析 He 的双重激发自电离态, 以及第一电离阈值附近非谐振区  $e\text{-He}^+$  散射的位相移动, 并利用一组 B-spline 构成的近乎完全的有限基函数进行计算, 同样获得了相当高精度的单重态和三重态的 S, P, D 分波位相移动, 与 Oza 的理论计算结果相比, 符合得很好, 确实令人满意。

## 2 基本理论方法

### 2.1 能级及其相应的波函数

$N$  个电子的非相对论的哈密顿量(用原子单位制)为

$$H_{nr}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr_i^2} - \frac{Z}{r_i} - \frac{1}{2} \frac{l_i^2}{r_i^2} \right) + \sum_{i<j}^N \frac{1}{r_{ij}} \quad (1)$$

每个电子的波函数可写为

$$u_\alpha(\mathbf{r}_\mu, s_{x\mu}) = \frac{X_{n_l}(r_\mu)}{r_\mu} Y_{lm_l}(\theta_\mu, \phi_\mu) \sigma_{m_l}(s_{x\mu}), \quad (2)$$

式中  $\alpha \equiv (n, l, m_l, m_s)$ 。对双价原子来说, 里面  $(N-2)$  个电子组成, 稳定的原子实, 闭合壳层; 外面两个价电子, 其组态为  $(n_i l_i, n_j l_j)$ , 进行 L-S 耦合, 总角动量为  $L$ , 总自旋角动量为  $S$ , 整个原子的波函数为  $\Phi_{n_i l_i n_j l_j}^A(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$ , 它可以通过角动量耦合系数及 Slater 行列式按 (2) 式的单电子波函数展开。具体详见文献 [10, 11]。这里,  $\Lambda \equiv (L, S, M_L, M_S)$ 。(2) 式中径向波函数  $X(r)$  满足下列方程:

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 X(r)}{dr^2} + V(r)X(r) = \epsilon X(r). \quad (3)$$

对内价电子, 使用 frozen-core Hartree-Fock (缩写为 FCHF) 近似, 其势能为  $V_{fc}^i(r)$ ; 对外价电子, 使用 screening Hartree-Fock (缩写为 SCHF) 近似, 其势能为  $V_{sc}^i(r)$ 。径向波函数  $X(r)$  按一组阶数为  $k$ , 总数为  $n$ , 定义在  $r=0$  及  $r=R$  之间的 B-spline 函数展开。这是一组近乎完全的有限基函数, 它包括限制在有限半径  $R$  范围内负能量(束缚态)和正能量(连续态)的轨道。

$$X(r) = \sum_{i=1}^n c_i B_i(r), \quad (4)$$

其边界条件为

$$r=0 \text{ 处, } X(r)=0; B_1=1, B_i=0, i=2, 3, \dots, n; \quad (5)$$

$$r=R \text{ 处, } X(r)=0; B_n=0, B_i=0, i=1, 2, \dots, n-1. \quad (6)$$

为了求解原子的能级及其相应的波函数, 必须计算矩阵元  $\langle \Phi_{n_i l_i n_j l_j}^A | H_{nr} | \Phi_{n_i l_i n_j l_j}^A \rangle$ , 为此, 进行如下处理, 设

$$n_i' = n_i, l_i' = l_i, l_j' = l_j, \quad (7)$$

由此组成  $n_i l_i l_j$  组态系列, 通过计算<sup>[10, 11]</sup>可得

$$\langle \Phi_{n_i l_i n_j l_j}^A | H_{nr} | \Phi_{n_i l_i n_j l_j}^A \rangle = \delta_{n_i n_j} (\epsilon_{n_i l_i} + \epsilon_{n_j l_j}). \quad (8)$$

这说明相应于  $n_i l_i l_j$  组态系列的子哈密顿矩阵是对角化的, 只有不同组态系列之间才存在不为零的非对角矩阵元, 这就大大简化了总哈密顿矩阵的对角化工作, 所求出的能量  $E_{n_i l_i n_j l_j}^A$  实际上是能级  $n_i l_i n_j l_j^{s+1} L$  的能量与电离阈值之差, 这个电离阈值相应于把这两个价电子都移掉的能量, 可设置为零, 因此  $E_{n_i l_i n_j l_j}^A$  为负值, 单位为 Ry。

原子组态之间的相互作用反映了电子之间的相互作用。可以通过增加组态系列, 改

变计算基组的数量,考察能量  $E_{n_i l_i n_j l_j}^A$  的变化,从而定量分析这种相互作用。相应的波函数为

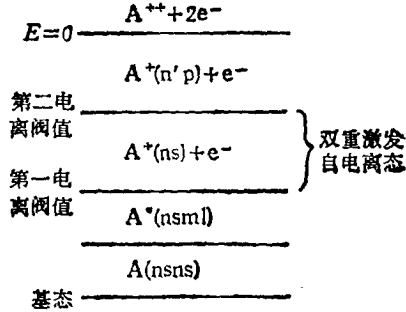
$$\Psi_{\frac{1}{2}}^A = \sum_{n_i l_i n_j l_j} c_{n_i l_i n_j l_j}^A \Phi_{n_i l_i n_j l_j}^A, \quad (9)$$

显然,  $|c_{n_i l_i n_j l_j}^A|^2$  就是组态  $(n_i l_i, n_j l_j)$  在  $\Psi_{\frac{1}{2}}^A$  状态中所占有的概率。

## 2.2 双重激发自电离态

如图 1 所示,对于一系列双重激发自电离态  $n_i l_i n_j l_j I_i^{2s+1} L$  来说,它们收敛到高于第一电离阈值之上的  $n_i l_i$  系列极限,其波函数为

$$\Psi_{\frac{1}{2}}^A = \left( \sum_{m'l'} + \int d\varepsilon \right) a_{m(\varepsilon)l}(E) \phi_{n_i m(\varepsilon)l}^A + \sum_{\mu} b_{\mu}(E) \Phi_{\mu}^A, \quad (10)$$



式中  $\mu$  标志双重激发组态  $(n_i l_i, n_j l_j)$  占主要优势,第一个求和表示束缚-束缚  $nsm'l$  和束缚-连续  $nse'l$  组态的联合贡献。这些组态形成背景开通道;第二个求和表示双重激发束缚部分的贡献。代入(1)式,计算矩阵元

$$\langle \Phi_{\mu}^A | H_{nr} | \Phi_{\nu}^A \rangle = \delta_{\mu\nu} E_{\mu}^A, \quad (11)$$

$$\langle \Phi_{\mu}^A | H_{nr} | \phi_{nsm(\varepsilon)l} \rangle = V_{\mu,sm(\varepsilon)l}, \quad (12)$$

$$\langle \phi_{nsm'l} | H_{nr} | \phi_{nsm'l} \rangle = \delta_{mm'} (I_{ns} + \varepsilon_{ml}), \quad (13)$$

$$\langle \phi_{nsm'l} | H_{nr} | \phi_{nse'l} \rangle = 0, \quad (14)$$

$$\langle \phi_{nse'l} | H_{nr} | \phi_{nse'l} \rangle = \delta(\varepsilon - \varepsilon') (I_{ns} + k^2), \quad (15)$$

式中  $E_{\mu}^A$  为相应于  $\Phi_{\mu}^A$  的能量本征值,  $I_{ns}$  为相应  $ns$  系列极限的能量,  $V_{\mu,sm(\varepsilon)l}$  为相互作用矩阵元,被电离的电子动能  $\varepsilon$  (单位为 Ry) 为

$$\varepsilon = k^2 = E_{\mu}^A + I_{ns}. \quad (16)$$

按 Fano<sup>[21]</sup> 理论方法,双重激发束缚态部分与相应于电离的背景开通道之间的相互作用由一个二阶微扰贡献来表示,然而,在背景开通道中能级较低的部分,这种相互作用仍然相当强,以致二阶微扰失去意义,为了克服这个困难,我们在第一个求和中把这部分除出去,因此修正后的双重激发束缚态部分与保留下来的背景开通道之间的相互作用又可以按通常二阶微扰方法适当考虑之。

利用(1)和(10)–(16)式可以推导出<sup>[21]</sup>

$$a_{m'l}(E) = \frac{1}{E - (I_{ns} + \varepsilon_{ml})} \sum_{\mu} b_{\mu}(E) V_{\mu,sm'l}, \quad (17)$$

$$a_{s'l}(E) = \left\{ \frac{1}{E - (I_{ns} + \varepsilon_{ml})} z(E) \delta[E - (I_{ns} + \varepsilon)] \right\} \sum_{\mu} b_{\mu}(E) V_{\mu,sm'l}. \quad (18)$$

系数  $b_{\mu}(E)$  满足方程

$$\sum_{\mu'} U_{\mu\mu'}(E) b_{\mu'}(E) + z(E) \sum_{\mu'} W_{\mu\mu'}(E) b_{\mu'}(E) = (E - E_{\mu}^A) b_{\mu}(E), \quad (19)$$

$$U_{\mu\mu'}(E) = \sum_{m_l} \frac{V_{\mu,m_l} V_{m_l,\mu'}}{E - (I_{m_l} + \varepsilon_{m_l})} + \int d\varepsilon \frac{V_{\mu,\varepsilon l} V_{\varepsilon l,\mu'}}{E - (I_{m_l} + \varepsilon)}, \quad (20)$$

$$W_{\mu\mu'}(E) = V_{\mu,\varepsilon_0 l} V_{\varepsilon_0 l,\mu'}, \quad (21)$$

矩阵  $U$  就是(10)式中第一项与第二项之间相互作用的二阶微扰贡献;  $W$  表示组态相互作用的强度;  $\varepsilon_0 = k_0^2 = E - I_{m_l}$ .

这里涉及到  $z(E)$ , 必须适当通过一个么正矩阵  $A_{\mu\mu}$ , 重对角化矩阵  $U'$ , 即

$$U'_{\mu\mu'}(E) = U_{\mu\mu'}(E) + \delta_{\mu\mu'} E_{\mu\mu}^A. \quad (22)$$

由此可导出

$$\frac{1}{z(E)} = \sum_r \frac{|V'_{\varepsilon_0 l, r}(E)|^2}{E - \varepsilon_r(E)}, \quad (23)$$

$$V'_{\varepsilon_0 l, r}(E) = \sum_{\mu} V_{\mu, \varepsilon_0 l}(E) A_{r\mu}(E), \quad (24)$$

$\varepsilon_r(E)$  能量值就是由重对角化矩阵  $U'$  所求得的.

### 2.3 位相移动

上述计算所用的径向波函数  $X_{s_l}$ , 在  $r \rightarrow \infty$  时可表示为

$$X_{s_l}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \left[ \frac{1}{\pi k} \right]^{1/2} \sin \left[ kr + \frac{Z_c}{k} \ln(2kr) - \frac{1}{2} l\pi + \delta_c + \Delta_l \right], \quad (25)$$

$\delta_c$  为库仑函数相应的位相移动,  $\Delta_l$  即为短程相互作用所产生的散射位相移动. 它与函数  $z(E)$  之间的关系为<sup>[2]</sup>

$$\Delta_l(E) = -\arctan \left[ \frac{\pi}{z(E)} \right]. \quad (26)$$

## 3 计算结果与讨论

### 1. 单电子能量及径向波函数的选值

$$r_{\min} = 5.000 \times 10^{-3}, \quad r_{\max} = 90.00$$

第一节点的  $r$  值为:  $r_s = 1.000 \times 10^{-3}, r_p = 3.000 \times 10^{-3}, r_d = 8.000 \times 10^{-3}, r_f = 2.000 \times 10^{-2}, r_g = 3.500 \times 10^{-2}$ , 以上单位均为  $a_0$ .

#### B-spline 的选值

S 分波为  $n_s = 70, n_p = 28, n_d = 25, n_f = 21, n_g = 21$ ;

P 分波为  $n_s = 31, n_p = 70, n_d = 25, n_f = 21, n_g = 21$ ;

D 分波为  $n_s = 28, n_p = 29, n_d = 70, n_f = 21, n_g = 21$ .

$k$  均为 13,  $R$  均为  $90a_0$ .

### 2. 原子能量及波函数的选值

参与计算的主导组态系列

<sup>1,3</sup>S 为  $1ss-1s(1-70)s, 2ss-2s(2-70)s, 2pp-2p(2-29)p, 3dd-3d(3-27)d$ ;

<sup>1,3</sup>P 为  $1sp-1s(2-71)p, 2sp-2s(2-71)p, 2ps-2p(3-31)s, 2pd-2p(3-27)d$ ;

<sup>1,3</sup>D 为  $1sd-1s(3-72)d, 2pp-2p(2-30)p, 2pf-2p(4-24)f, 3dd-3d(3-72)d$ .

表1 非谐振 e-He<sup>+</sup> 散射位相移动

<sup>1</sup> S		<sup>3</sup> S		<sup>1</sup> P		<sup>3</sup> P		<sup>1</sup> D		<sup>3</sup> D	
电子能量	位相移动	电子能量	位相移动	电子能量	位相移动	电子能量	位相移动	电子能量	位相移动	电子能量	位相移动
0.00935	0.43510	0.00664	0.93096	0.01098	-0.03920	0.00959	0.21454	0.00881	0.00655	0.00879	0.00915
0.02828	0.43347	0.02510	0.92876	0.02989	-0.03962	0.02825	0.21561	0.02682	0.00672	0.02681	0.00951
0.05013	0.43162	0.04651	0.92621	0.05165	-0.04007	0.04976	0.21679	0.04763	0.00691	0.04761	0.00992
0.07480	0.42959	0.07074	0.92335	0.07615	-0.04054	0.07404	0.21808	0.07114	0.00712	0.07112	0.01037
0.10220	0.42740	0.09773	0.92018	0.10335	-0.04102	0.10099	0.21946	0.09729	0.00735	0.09726	0.01088
0.13230	0.42506	0.12742	0.91673	0.13317	-0.04150	0.13058	0.22090	0.12604	0.00759	0.12601	0.01142
0.16504	0.42260	0.15976	0.91299	0.16560	-0.04196	0.16277	0.22239	0.15736	0.00784	0.15732	0.01200
0.20040	0.42004	0.19473	0.90898	0.20060	-0.04239	0.19753	0.22391	0.19123	0.00810	0.19118	0.01263
0.23836	0.41740	0.23230	0.90471	0.23815	-0.04279	0.23485	0.22545	0.22764	0.00838	0.22758	0.01329
0.27889	0.41469	0.27246	0.90019	0.27825	-0.04314	0.27470	0.22698	0.26656	0.00867	0.26650	0.01398
0.32198	0.41193	0.31519	0.89542	0.32086	-0.04343	0.31707	0.22849	0.30800	0.00896	0.30792	0.01471
0.36762	0.40915	0.36047	0.89042	0.36599	-0.04366	0.36196	0.22996	0.35193	0.00927	0.35184	0.01546
0.41580	0.40637	0.40830	0.88519	0.41362	-0.04382	0.40935	0.23140	0.39836	0.00959	0.39826	0.01625
0.46650	0.40359	0.45866	0.87974	0.46375	-0.04390	0.45924	0.23278	0.44728	0.00993	0.44716	0.01708

0.51972	0.40084	0.51155	0.87409	0.51637	-0.04388	0.51161	0.23410	0.49868	0.01029	0.49855	0.01793
0.57545	0.39815	0.56696	0.86824	0.57147	-0.04377	0.56648	0.23534	0.55255	0.01066	0.55241	0.01880
0.63369	0.39551	0.62489	0.86221	0.62905	-0.04356	0.62382	0.23650	0.60891	0.01104	0.60875	0.01970
0.69442	0.39296	0.68532	0.85601	0.68911	-0.04325	0.68364	0.23756	0.66773	0.01144	0.66756	0.02061
0.75765	0.39050	0.74826	0.84965	0.75164	-0.04283	0.74593	0.23854	0.72903	0.01186	0.72883	0.02154
0.82336	0.38815	0.81370	0.84315	0.81663	-0.04230	0.81070	0.23942	0.79279	0.01230	0.79258	0.02249
0.89156	0.38594	0.88163	0.83653	0.88409	-0.04165	0.87793	0.24021	0.85901	0.01277	0.85878	0.02346
0.96223	0.38387	0.95206	0.82980	0.95401	-0.04088	0.94764	0.24091	0.92770	0.01326	0.92745	0.02444
1.03538	0.38197	1.02497	0.82296	1.02639	-0.03998	1.01980	0.24151	0.99884	0.01380	0.99857	0.02544
1.11100	0.38024	1.10038	0.81604	1.10123	-0.03895	1.09443	0.24201	1.07244	0.01436	1.07216	0.02645
1.18910	0.37869	1.17826	0.80903	1.17852	-0.03780	1.17152	0.24241	1.14850	0.01498	1.14820	0.02748
1.26966	0.37734	1.25863	0.80195	1.25826	-0.03652	1.25107	0.24272	1.22702	0.01566	1.22669	0.02852
1.35268	0.37617	1.34148	0.79479	1.34046	-0.03511	1.33309	0.24294	1.30799	0.01639	1.30764	0.02958
1.43816	0.37513	1.42681	0.78749	1.42511	-0.03358	1.41755	0.24306	1.39141	0.01719	1.39104	0.03064
1.52611	0.37404	1.51462	0.77987	1.51221	-0.03193	1.50448	0.24307	1.47728	0.01805	1.47690	0.03170
1.61654	0.37240	1.60493	0.77146	1.60175	-0.03021	1.59387	0.24294	1.56560	0.01900	1.56520	0.03276
1.70950	0.36847	1.69777	0.76074	1.69375	-0.02853	1.68571	0.24257	1.65636	0.02004	1.65596	0.03381
1.80511	0.35859	1.79329	0.74381	1.78821	-0.02720	1.78003	0.24168	1.74958	0.02116	1.74917	0.03481
1.90327	0.34649	1.89140	0.72380	1.88515	-0.02687	1.87683	0.23961	1.84524	0.02237	1.84483	0.03572
2.00557	0.28267	1.99331	0.66260	1.98464	-0.02968	1.97619	0.23446	1.94335	0.02356	1.94294	0.03641

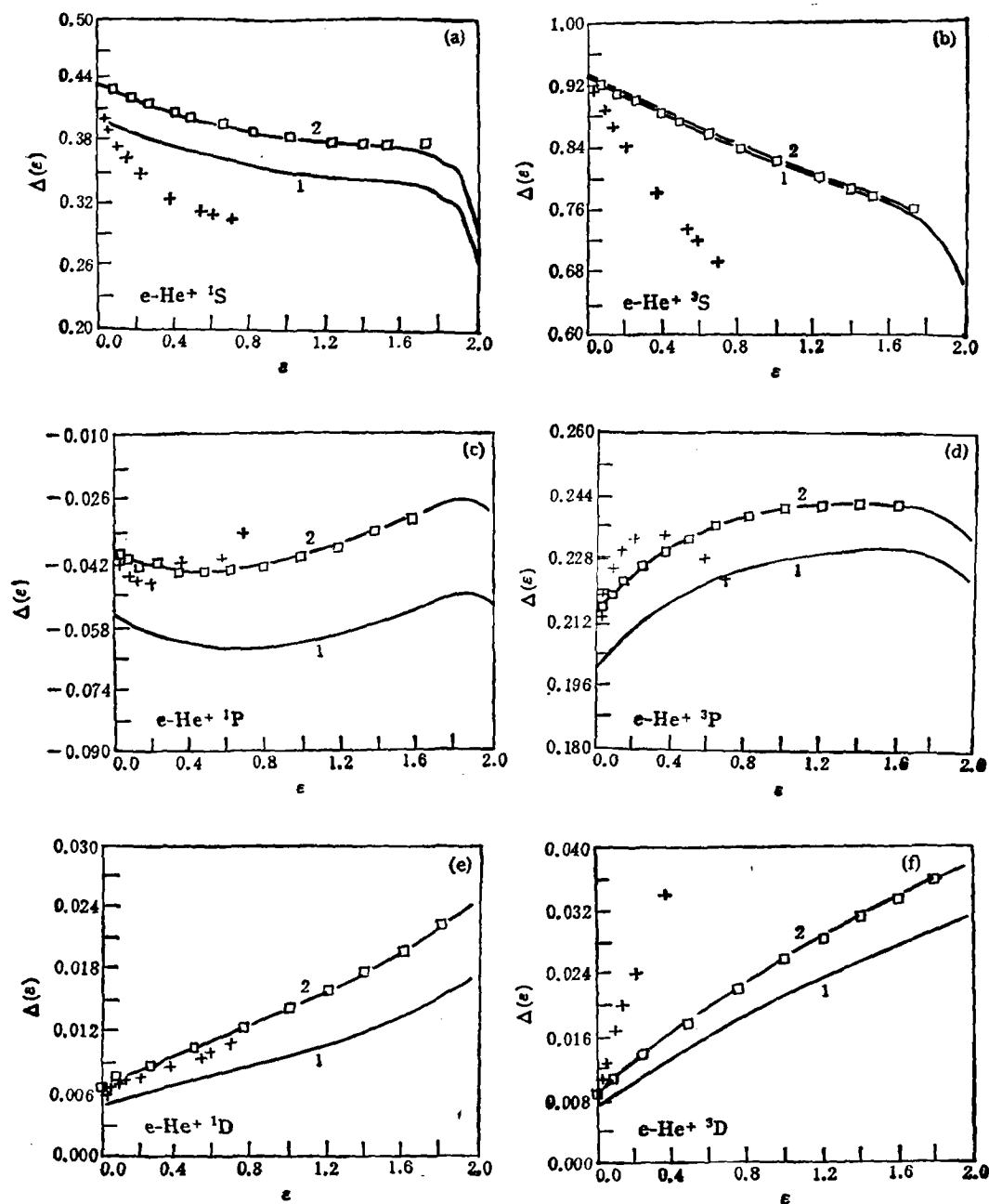


图2 非谐振  $e\text{-He}^+$  散射位相移动  $\square$  为 Oza 理论计算结果;  $+$  为 Khan 等人理论计算结果;  
曲线 1 为仅考虑主导组态系列; 曲线 2 为考虑多组态系列

### 3. 非谐振 $e\text{-He}^+$ 的散射位相移动

表 1 列出单重态和三重态的 S, P, D 分波的高精度位相移动。图 2 则绘出各分波位相移动随电离电子能量的变化曲线。图 2 中, 方形标志  $\square$  是 Oza 理论计算的结果。叉形标志  $\times$  则是 Khan 等理论计算的结果。除此之外, 文献 [6] 和 [7] 也列出  $^1P$ , 文献 [5] 也

列出  $1^3S$  的理论计算结果,如图 2 所示,我们的理论计算结果与 Oza 用紧耦合方法获得高精度的结果符合得非常好。这说明我们的基本理论方法是正确的,但有一定的范围。计算结果表明,电离电子能量超过  $2Ry$  之后,与包括 Oza 在内的各种理论计算结果偏差较大(图中没有列出),并呈现出某种振荡的特性。

4. 原子组态之间的相互作用直接影响了  $e\text{-He}^+$  散射的位相移动。图 2 中标志“1”的曲线仅考虑主导组态系列,标志“2”的曲线则考虑多组态系列,大都为几十至一百左右的组态系列。显然,由于组态系列的增加,位相移动随之增加。但这种影响有强弱不同,对  $^3S$  分波,这种影响弱得多,对  $1^3P$  分波,这种影响就比较强。另外,这里所涉及的电子组态都是束缚—束缚型或束缚—连续型,也就是说,内价电子处于负能量束缚态轨道。至于连续—连续型的组态,对非谐振的散射位相移动的贡献。计算表明是可以忽略不计的。

- [1] R. P. Madden and K. Colding, *Astrophys. J.*, **141** (1965)364; *Phys. Rev. Lett.*, **10** (1963), 518.
- [2] H. D. Morgan and D. L. Ederer, *Phys. Rev.*, **A29** (1984),1901.
- [3] H. Cederquist, M. Kisielinski and S. Mannervik, *J. Phys. B*, **16** (1983), L479.
- [4] P. L. Pepmiller, P. Richard, J. Newcomb, J. Hal and T. R. Dillingham, *Phys. Rev.*, **A31** (1985),734.
- [5] I. Shimamura, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **31** (1971),217.
- [6] E. McGreevy and A. L. Stewart, *J. Phys.*, **B10**(1977),L527.
- [7] M. Oppenheimer, H. Doyle and A. Dalgarno, *Chem. Phys. Lett.*, **32**(1975),6.
- [8] P. Khan, M. Darshan, A. S. Ghosh and C. Falcon, *Phys. Rev.*, **A26**(1982),1401.
- [9] D. H. Oza, *Phys. Rev.*, **A23** (1986),824.
- [10] 曾民勇,福建师范大学学报(自然科学版),8(1992),45.
- [11] 曾民勇、何志贤,原子与分子物理学报,10(1993),2744.
- [12] U. Fano, *Phys. Rev.*, **124**(1961),1866.

## $e\text{-He}^+$ SCATTERING PHASE SHIFTS IN THE NONRESONANT REGION

ZENG MIN-YONG HE ZHI-XIAN

(Department of Physics, Fujian Teachers University, Fuzhou 350007)

(Received 15 March 1994)

### ABSTRACT

The double excited autoionization states of the He atom and the  $e\text{-He}^+$  scattering phase shifts in the nonresonant region near the first ionization threshold are examined in detail, using a simple configuration-interaction approach. The phase shifts reflect the short-range electron-electron correlations. The S, P and D partial wave phase shifts of high accuracy are obtained for both the singlet and the triplet spin states. The excellent agreement between the present calculation and existing theoretical results.

**PACC:** 3120T