

广义振子强度矩阵元节线的规律

全晓民 杨 力 李家明¹⁾

(中国科学院物理研究所)

1988年7月12日收到

本文分析了从初态 $n'l$ 到末态 $n'l'$ (包括连续态) 的广义振子强度矩阵元节线的规律 (个数和位置)。利用我们提出的分区标度的方法, 从氢原子广义振子强度节线的规律出发, 通过简单的标度得到了多电子原子广义振子强度节线在高动量转移区的规律。在低动量转移区, 还讨论了由于初态和末态量子数亏损的差 $\Delta\mu$ 对广义振子强度节线所产生的影响; $\Delta\mu > 0$ 的节线几何结构与 $\Delta\mu < 0$ 的节线几何结构完全不相同。

一、引 言

电子与原子碰撞的微分散射截面可以写为 (本文一律采用原子单位)

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{2\varepsilon}{q^2} \frac{k_f}{k_i} f(\varepsilon, q, T). \quad (1)$$

这里 ε 为能量转移, $q = k_f - k_i$ 为动量转移, k_i, k_f 分别为入射电子的动量和散射电子的动量。 $T = k^2/2$ 为入射电子的动能。 $f(\varepsilon, q, T)$ 为有效广义振子强度。它一般为 ε, q 和 T 的函数。当入射电子能量 T 很高时 (Born 近似适用), $f(\varepsilon, q, T)$ 趋于广义振子强度 $f(\varepsilon, q)$, 而与 T 无关^[1]。根据多通道量子数亏损理论 (MQDT)^[2,3], 相同 l 分波的无数个激发态 (即里德堡态) 和相应的连续态形成一个通道。引入广义振子强度密度 $df(\varepsilon, q)/d\varepsilon$ (以下简称 $df/d\varepsilon$)。对到分立态的跃迁 $df/d\varepsilon = f(\varepsilon, q)N_n^2$, N_n^2 为跃迁末态的态密度^[4]。可将分立态的 $df/d\varepsilon$ 视为能量的连续函数, 则 $df/d\varepsilon$ 为能量转移和动量转移的连续函数, $df/d\varepsilon = 0$ 所决定的根 ($\{q_i\}$) 在 ε - q 平面上的点, 定义为节点; 对连续末态 $df/d\varepsilon = 0$ 所决定的根 ($\{q_i\}$) 在 ε - q 平面上形成曲线。这些曲线与对应的节点延拓形成广义振子强度的节线。它在实验和理论分析中具有重要的意义。例如, 在实验中由节点可以决定微分散射截面极小处的方向。在计算原子与离子各种碰撞激发总截面时, 涉及到原子和离子广义振子强度乘积的积分^[5]。节线的分析有助于了解被积函数的特点及确定积分的重要范围。广义振子强度密度 $df/d\varepsilon$ 可以写为^[6]

$$\frac{df}{d\varepsilon} = \frac{1}{2L+1} \frac{1}{q^2} \left(\sum_{\lambda} \frac{2C_{\lambda}^2}{2\lambda+1} |T_{\lambda}(\varepsilon, q)|^2 \right), \quad (2)$$

式中 L 为原子初态的总轨道角动量, λ 为球谐函数的阶数, C_{λ}^2 为角度积分因子, 单电子径向积分为

$$T_{\lambda}(\varepsilon, q) = \int R_{n_l}(r) j_{\lambda}(qr) R_{n'l'}(r) r^2 dr. \quad (3)$$

1) 中国高等科学技术中心(世界实验室)理论物理分中心。

这里末态的径向波函数 $R_{nl}(r)$ 都采用能量归一. 对分立态, 它与态归一相差一个因子 N_l^2 . 显然, 从 (2) 式可以看出 $df/d\varepsilon$ 的节线取决于 $T_l(\varepsilon, q)$ 矩阵元的节线. 因此本文着重分析 $T_l(\varepsilon, q)$ 矩阵元的节线规律.

$T_l(\varepsilon, q)$ 矩阵元的节点与初、末态的径向波函数乘积的节点位置有关. 在原子内区, 波函数的节点位置取决于原子势及电子动能两个方面. 对于上述某一特定的末通道, 轨道能量高的能态, 轨函数的节点主要取决于电子动能, 其位置因电子动能不同而显著变化. 轨道能量低的能态(轨道能量小于几个 au), 轨函数的节点主要取决于原子势; 这时各能态轨函数的节点位置几乎是一样的(见图 1(a) 和图 2). 因此可以总结该能域范围的 $T_l(\varepsilon, q)$ 矩阵元的节线规律.

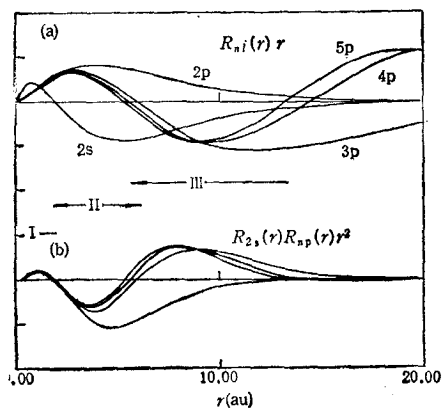


图 1

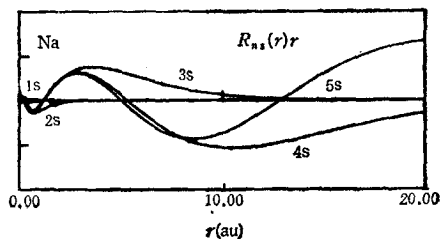


图 2

二、 T_l 矩阵元的节线规律

根据 T_l 矩阵元的定义, 首先分析氢原子 T_l 矩阵元的特点, 然后讨论一般原子的问题.

1. 氢原子

图 1(a) 中, 给出氢原子 2s, 2p, 3p, 4p, 5p 的径向波函数(注: 这里 2p, 3p, 4p, ..., 5p 形成 p 通道). 图 1(b) 展示出径向波函数的乘积 $r^2 R_{2i} R_{np}(n = 2, 3, 4, 5)$. 由它可以看出, $np(n > 2)$ 径向波函数与 2s 径向波函数乘积的形状基本一致. 即随着末态主量子数 n 的增大, 2s, np 径向波函数乘积的节点稳定在 2s 的节点 $a_1 = 2.0$ 和 3p 的节点 $a_2 = 6.0$ 处. 这正是在初态波函数 2s 的有效积分区域内初、末态波函数节点数的总和. 而 2s, 2p 径向波函数乘积的节点只有一个为 a_1 . 所有只要分析 $2s \rightarrow 2p$ 和 $2s \rightarrow 3p$ 的 T_l 节点规律, 就可总结得到 $2s \rightarrow p$ 通道的节线规律.

T_l 矩阵元的被积函数为振荡的球贝塞耳函数 $j_l(qr)$ 和 $r^2 R_{2i} R_{np}$ 的乘积. 当 q 大时, $j_l(qr)$ 积分权重于小 r 处, 当 q 小时, 权重大于 r 处. 在图 1(b) 中, 当 q 大时, $j_l(qr)$ 积分权重于 I 区, 积分值为正; 当 q 小时, 权重于 III 区, 积分值亦为正(末态 2p 除外). 当

q 取其适当的中间值时, $j_\lambda(qr)$ 积分权重于 II 区, 积分值为负. 因此, $2s \rightarrow 3p$ 的跃迁, T_λ 有两个节点; 其个数等于初、末态径向波函数乘积的节点个数. 并且 T_λ 节点 ($\{q_i\}$) 的位置与初、末态径向波函数乘积的节点位置 ($\{a_i\}$) 有关. 以氢原子 $2s \rightarrow 3p$ 为例, $qr = A = 2.1$ (此时 $j_1(A)$ 为极大值), 可作为判断方程 (3) 中被积函数的重要区域. 对于一定的 q 值, 其重要积分区域可预期在 $r \approx A/q$ 附近. 对于 $2s \rightarrow 3p$ 跃迁, T_λ 的两个节点 ($q_i, i = 1, 2$) 可简单地由下列表达式来估算:

$$q_i = \frac{A}{a_i}. \quad (4)$$

估算的结果为 $q_1 = 0.35, q_2 = 1.05$; 相应的理论计算结果为 $q_1 = 0.37, q_2 = 1.08$.

对于一般 $nl \rightarrow n'l'$ 的跃迁, $T_\lambda(\varepsilon, q)$ 的节点的形成可根据其被积函数的特性分为两类.

第一类: 与初、末态径向波函数乘积的节点有关.

初态 nl 的径向波函数有 $n - l - 1$ 个节点, 末态 $n'l'$ 径向波函数在初态 nl 径向波函数有效区域内有 $n'' - l' - 1$ 个节点, 这里 $n'' = \min\{\max(l' + 1, n + 1), n'\}$. 这些节点 $\{a_i\}$ 随着末态主量子数的增加是稳定的.

其径向波函数乘积应有 $N = n - l - 1 + n'' - l' - 1$ 个节点. 根据波函数节点的一级近似表达式^[2], nl 的径向波函数的第 j 个节点位置为

$$a_{nl,j} = \frac{\pi^2}{8} (j + l + 0.25)^2. \quad (5)$$

这样初、末态径向波函数共有 $M = n - \max\{l, l'\} - 1$ 个点相互‘重合’. 但由于二阶修正 $\Delta_{n\lambda j}$, 它们实际上是分开的. 波函数乘积的节点按 r 由小到大排列为: 先是 $|l - l'|$ 个节点, 然后为 M 对‘近重合’节点, 最后是 $n'' - n$ 个节点. 总共有 N 个节点. 波函数乘积应有 $N + 1$ 个正负相间的波包. 其中 M 对‘近重合’点间形成的波包较小. 随着 q 的不同 $j_\lambda(qr)$ 权重于不同的空间, 而使得 $T_\lambda(q)$ 积分值正负相间. 当 $j_\lambda(qr)$ 权重于 M 个小波包时, T_λ 的绝对值较小, 在其附近的两节点很靠近. 这样一对节点, 称为‘共厄节点’. 例如, $3s \rightarrow 4p$ 跃迁的 T_λ 矩阵元的节点按 q 由小到大排列为^[10]: 首先是由大 r 区积分而形成的 $|n - n''| = 1$ 个节点 $q_1 = 0.161$, 接着为一对共厄节点 $q_2 = 0.440$ 和 $q_3 = 0.590$, 最后是由小 r 区积分而形成的 $|l - l'| = 1$ 个节点 $q_4 = 1.181$. 其节点总数 ($N = 4$) 与初、末态径向波函数乘积的节点总数相同. 当 $l = l', \lambda = 0$ 时, T_λ 原应有 N 个节点. 但当 $n \approx n'$ 时, $q = 0$ 是其中之一, 应当扣除. 故只有 $N - 1$ 个节点, 这种情况下仅有 $n - l - 1$ 对共厄节点. 例如, $2s \rightarrow 3s$ 跃迁, $N = 3$, 而实际只有一对共厄节点为 0.799 和 1.076. 而当 $n = n'$ 时, 仍然有 N 个节点. 例如, $3s \rightarrow 3s$ 跃迁, $N = 4$, 有二对共厄节点, 即 0.285, 0.385 和 0.895, 1.155. 另外, 当 $l = l'$ 时, 二阶修正 $\Delta_{n\lambda j}$ 减弱, 一对共厄节点将更为靠近. 当 $l \geq 3$ 时, 将出现部分共厄节点成对消失或合为一点的现象. 例如, 当 $l = l' = 4, \lambda = 2$ 时, 二对共厄节点消失; $\lambda = 4$ 时, 一对共厄节点消失.

第二类: 由于 $j_\lambda(qr)$ 的振荡而产生的. 随着 q 的继续增大, $j_\lambda(qr)$ 完全权重于小 r 区. 在该区, 初、末态波函数乘积恒为正. T_λ 积分可写为

$$T_{\lambda} = \int r^{\nu} e^{-\alpha r} j_{\lambda}(qr) dr = \left(-\frac{d}{d\alpha}\right)^{\nu-\lambda-1} \left[\frac{(2q)^{\lambda} \cdot \lambda!}{(q^2 + \alpha^2)^{\lambda+1}} \right], \quad (6)$$

式中 $\nu = l + l' + 2$. 由此可见: 当 $l + l' > \lambda$ 时, 将产生额外的节点, 其个数为 $(l + l' - \lambda)/2$.

因此, 当不存在共厄节点成对消失时, $nl \rightarrow n'l'$ 跃迁 T_{λ} 的总节点数为

$$N = n - l - 1 + n'' - l' - 1 + (l + l' - \lambda)/2 - (1 - \delta_{nn'})\delta_{ll'}\delta_{\lambda 0}. \quad (7)$$

这里 $n'' = \min\{\max(l' + 1, n + 1), n'\}$. 当有部分共厄节点成对消失时, $nl \rightarrow n'l'$ 跃迁的 T_{λ} 矩阵元按 q 由小到大的分布情形如下: 首先是 $|n - n'| = l$ 个节点; 然后为 M 个振荡的波谷, 其中未与 q 轴相交的波谷数即为消失的共厄节点对数; 接着是

$$|l - l'| = J$$

个节点; 最后是在小 r 区, 因 j_{λ} 的振荡而形成的 $(l + l' - \lambda)/2 = K$ 个高 q 节点. 这里 $l + 2M + J + K = N$ 与 (7) 式相符合.

2. 多电子原子

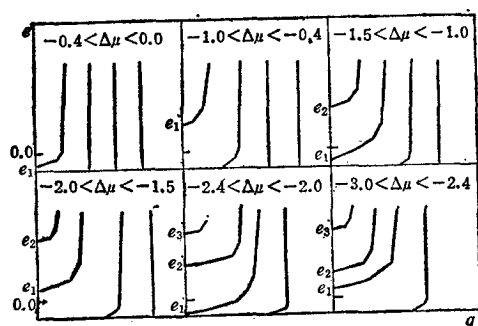
对多电子原子体系, 单电子轨函数(量子数为 nl) 的节点数仍然为 $n - l - 1$, 但节点的位置 $\{a_i\}$ 与氢原子不同. 如图 2 所展示的 Na 原子 $1s, 2s, 3s, 4s$ 等径向波函数, 可以看出:

1) 一个通道在小距离内它们的径向波函数(采用能量归一)的图形基本是一致的. 前几个节点的位置基本重合. 2) 在相互作用区之内的径向波函数的节点 $\{a_i\}$ 可以由氢原子径向波函数的节点 $\{a_i^H\}$ 标度来决定, 即 $a_i = a_i^H / Z_i^*$, Z_i^* 为对应壳层的有效电荷 Z^* , 可以通过理论计算求得^[9,10]. 例如图 2 所示, s 通道第一个节点由 $1s$ 的有效 Z_1^* , 第二个节点由 $2s$ 的有效 Z_2^* 等等来进行标度. 对相互作用区之外的径向波函数节点的位置则由量子数亏损来描述, 即波函数的节点相对于库仑波函数的相移. 根据波函数的特点, 可以分析多电子原子的 T_{λ} 节线的规律. (1) 对于大 q 区, T_{λ} 矩阵元的积分贡献主要在小 r 区, T_{λ} 节点位置可由小 r 区初、末态径向波函数乘积的节点决定, 即由 $q_i = q_i^H \times Z^*$ 标定. 由于在原子内区各能态轨函数的节点位置几乎相同, 因此在大 q 区 T_{λ} 节线基本上是平行于 ϵ 轴的直线. (2) 对于小的 q 区, T_{λ} 矩阵元的积分贡献主要在大 r 区. 量子数亏损的差使在大 r 区的初、末态波函数相对地移入或移出, 致使 T_{λ} 的节线的形状和位置在小 q 区产生很大的变化. 这时 T_{λ} 的节线总数可修正为

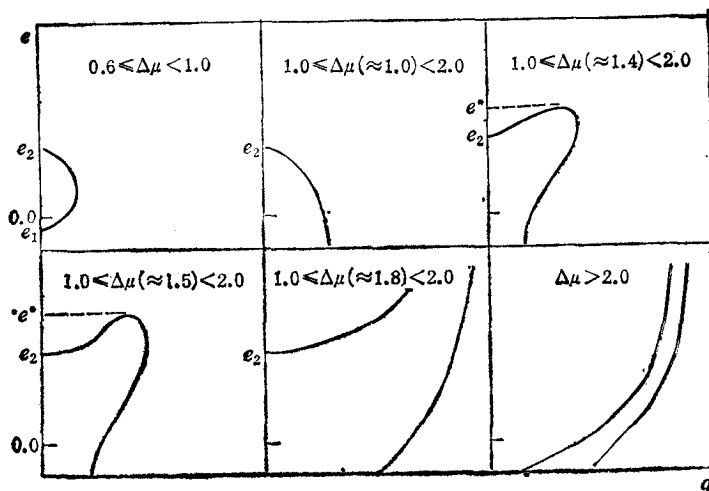
$$N = n - l - 1 + n'' - l' - 1 + (l + l' - \lambda)/2 - (1 - \delta_{nn'})\delta_{ll'}\delta_{\lambda 0} + M_{\lambda}(\epsilon, \Delta\mu). \quad (8)$$

修正函数 $M_{\lambda}(\Delta\mu, \epsilon)$ 为量子数亏损差 $\Delta\mu$ 和末态轨道能 ϵ 的函数. 当 $q \rightarrow 0$ 时, 光学允许的广义振子强度趋于光学振子强度, 而光学禁戒的广义振子强度趋于零. 因此, 我们将讨论偶极跃迁时 ($\lambda = 1$) 的修正函数 $M_1(\Delta\mu, \epsilon)$. 在原子自洽势的基础上, 计算了 He, Li, Na, K, Rb, Cs, Ba, Fr, U, 原子的各种跃迁, 其初、末态量子数亏损之差的范围为 $-3.0 < \Delta\mu < 3.0$. 通过分析发现:

(a) 由低分波向高分波的跃迁. $\Delta\mu < 0.0$, 意味着末态波函数在大 r 区相对地移出初态波函数的有效积分区域. 因此, 节线数的修正 $M_1(\Delta\mu, \epsilon) \leq 0$. 由图 3(a) 可以



(a)



(b)

图 3

看到: 在大 q 区, 这时以内区积分为主。这时末态波函数随能量变化不大, 因此节线是平行于 e 轴的直线。随着 q 的减小, 节线自上而下地弯向 e 轴。在 $q \approx 0.0$ 区域, 最内侧节线随着能量的减小, 一条或几条节线迅速地弯向 e 轴并与之相交。在这些交点的下方, 相应的节线数减少:

(1) $-1.0 < \Delta\mu < 0.0$ 时, 仅最内侧一条节线与 e 轴相交于 e_1 。因此在 $e > e_1$ 时, $M_1(\Delta\mu, e) = 0$; 而 $e < e_1$ 时, $M_1(\Delta\mu, e) = -1$ 。(2) 当 $-2.0 < \Delta\mu < -1.0$ 时, 最内侧两条节线与 e 轴相交 ($e_2 > e_1$)。所以, $e > e_2$ 时,

$$M_1(\Delta\mu, e) = 0; e_1 < e < e_2$$

时, $M_1(\Delta\mu, e) = -1$; $e < e_1$ 时, $M_1(\Delta\mu, e) = -2$ 。(3) $-3.0 < \Delta\mu < -2.0$ 时, 最内侧三条节线与 e 轴相交。因而, $e < e_1$ 时, $M_1(\Delta\mu, e) = -3$; $e_1 < e < e_2$ 时, $M_1(\Delta\mu, e) = -2$; $e_2 < e < e_3$ 时, $M_1(\Delta\mu, e) = -1$; $e > e_3$ 时, $M_1(\Delta\mu, e) = 0$ 。因为节线与 e 轴的交点对应于光学振子强度密度的零点。因此, 对应于不同的 $\Delta\mu$ 区域, 光学振子强度密度分别有一, 二, 三个零点^[11]。这些零点位置对应着光的吸收窗口。

(b) 高分波向低分波跃迁。 $\Delta\mu > 0.0$ 意味着在初态波函数的有效积分区域内有更

多部分的末态波函数(多于 $n'' - l' - 1$ 个节点)移入。因此,节线修正函数

$$M_1(\Delta\mu, e) > 0.0.$$

这些增加的节线最靠近 e 轴,且常呈特殊的形状(见图 3(b)).

(1) $0.0 < \Delta\mu < 0.6$ 时,无任何节线增加, $M_1(\Delta\mu, e) = 0$. (2) $0.6 < \Delta\mu < 1.0$ 时,有一条附加节线。但它的两端与 e 轴相交 ($e_1 < 0 < e_2$),形成一个“鼓包”。因此,当 $e < e_1$ 或 $e > e_2$ 时, $M_1(\Delta\mu, e) = 0$; 而当 $e_1 < e < e_2$ 时, $M_1(\Delta\mu, e) = 1$. 该节线与 e 轴的交点 e_1, e_2 随 $\Delta\mu$ 的增大分别沿 e 轴向上,向下移动(间距增大)。结果使得在 $\Delta\mu \approx 1.0$ 附近,下方交点不复存在 ($e_1 < \text{初态轨道能}$),最内侧节线变为下方开口的“鼓包”。(3) $1.0 < \Delta\mu < 1.5$ 时,上方交点 e_2 继续上升。与之同时,“鼓包”向上凸起,其顶点能量记为 e^* 。因此,当 $e < e_2$ 时, $M_1(\Delta\mu, e) = 1$; $e_2 < e < e^*$ 时,

$$M_1(\Delta\mu, e) = 2; e > e^*$$

时, $M_1(\Delta\mu, e) = 0$ 。在 $\Delta\mu \approx 1.5$ 附近, e_2 升到最高点 ($e_2 \approx 1.5$ Hartree), 然后 e_2 随 $\Delta\mu$ 的增大 ($1.5 < \Delta\mu < 2.0$) 迅速下降,并在 $\Delta\mu \approx 2.0$ 附近消失。与之同时,“鼓包”继续迅速向上凸起,即顶点能量 e^* 迅速增大。并在 $\Delta\mu \approx 2.0$ 附近演变两条向上伸展的节线。在我们所考虑的能域内,形成了两条节线。(4) $\Delta\mu > 2.0$ 时,原来的“鼓包”完全变为两条节线,即增加了两条节线 $M_1(\Delta\mu, e) = 2$ 。另一方面,当 $q \rightarrow 0$ 时, T_1 对应于电偶极矩阵元(或光学振子强度)。由于上面的讨论可以看到,电偶极矩阵元在 $0.6 < \Delta\mu < 1.0$ 区域有两个零点;而在 $1.0 < \Delta\mu < 1.5$ 区域只有一个零点,且该零点能量随 $\Delta\mu$ 的增大而增加;在 $1.5 < \Delta\mu < 2.0$ 区域亦只有一个零点,但该零点的能量随 $\Delta\mu$ 的增大而减小。当 $\Delta\mu > 2.0$ 时,偶极矩阵元没有零点,这与已有的结论^[11]相符合。

三、讨 论

在总结了 T_1 矩阵元的节线规律之后,根据(2)式我们可以更好地分析广义振子强度的分布。广义振子强度一般涉及多项 λ 的求和。通常,当 λ 增加时, T_λ 值减小。但是对某些特殊情况,广义振子强度只涉及一项 T_λ 。例如 s 通道到 p 通道的跃迁,只有 $T_1(\varepsilon, q)$ 这一项。还有,在多电子体系的跃迁过程里,由于角动量耦合而产生的选择定则将限制 T_λ 项数。例如类氦离子 $2p^6 \rightarrow 2p^5 3p$ 的跃迁,初态原子光谱项为 $^1S_0$, 末态原子光谱项根据 jl 耦合,其总角动量 J 可为 $0, 1, 2, 3$ 。根据选择定则, $0 \rightarrow 0$ 跃迁的广义振子强度只有 T_0 项,而 $0 \rightarrow 2$ 跃迁只涉及 T_2 项。这里讨论的 $0 \rightarrow 0$ 单极跃迁正是电子碰撞形成类氦离子 $2p^5 3p$ 和 $2p^5 3s$ 能级布局反转的主要激发过程。首次实现的 X 射线自发辐射放大激射,正是在类氦离子工作介质中进行的^[12,13]。

[1] M. Inokuti, *Rev. Mod. Phys.*, **43**(1971), 279.

[2] 李家明,物理学报,**29**(1980),419.

[3] M. J. Seaton, *Rep. Prog. Phys.*, **46**(1983), 167.

[4] 李家明,物理学报,**32**(1983),84.

[5] 全晓民、李家明,物理学报,**36**(1987),773.

[6] 田伯刚、李家明,物理学报,**33**,(1984),1401.

[7] Handbook of Mathematical Functions (AMS 55), Edited by M. Abramowitz and I. A. Stegun, (1970) p. 457.

- [8] I. Shimamura, *J. Phys. Soc (Japan)*, **30**(1971), 824.
- [9] 董 骐、李家明, *物理学报*, **35**(1986), 1634.
- [10] C. C. Lu, T. A. Carlson *et al.*, *Atomic data*, **3**(1971), 16.
- [11] 梁晓玲、李家明, *物理学报*, **34**(1985), 1479.
- [12] D. L. Matthew *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **54**(1985), 110.
- [13] T. N. Lee, E. A. Mclean, R. C. Elton, (*Phys. Rev. Lett.*, **59**(1987), 1185.

NODAL-CURVE OF MATRIX ELEMENT FOR GENERALIZED OSCILLATOR STRENGTH DENSITY

TONG XIAO-MIN YANG LI LI JIA-MING

(*Institute of Physics, Academia Sinica*)

ABSTRACT

Generalized oscillator strength density from an initial atomic state nl to final states $n'l'$ or $\epsilon'l'$ forming a final channel is a function of the energy transfer ϵ and the momentum transfer q . We report our study on the nodal curves in the ϵ - q plane, where the matrix element for the generalized oscillator strength density vanishes. For high momentum transfer, the positions of the nodal curves can be obtained by scaling the hydrogenic results. For low momentum transfer, the nodal curves depend strongly on the difference of the quantum defects $\Delta\mu$ of the initial and final channels; the topology of the nodal curves for $\Delta\mu > 0$ is completely different from the topology for $\Delta\mu < 0$.