

等电子系列离子的广义振子 强度密度之标度关系

潘 晓 川 李 家 明

(中国科学院物理研究所)

1984年9月3日收到

提 要

利用 Born 近似可以计算高能电子与原子或离子碰撞激发的微分截面和总截面。微分截面正比于广义振子强度。电子碰撞过程可将靶原子或离子激发到无数个束缚态以及相应的连续态。量子亏损理论能够统一处理这些激发态；因此可定义广义振子强度密度——即每单位激发能内的广义振子强度。我们计算了 Li 的等电子系列 Li , Be^+ , B^{++} , C^{3+} , Ne^{7+} , Na^{8+} , K^{16+} 等从基态到 S, P, D, F 通道的激发的广义振子强度密度,总结了类 Li 等电子系列离子的广义振子强度密度的标度关系。

一、引 言

电子与原子、离子的碰撞激发和电离截面是重要的物理数据,许多方面都需要这些数据。例如,在受控核聚变的研究中,这些数据可以作为诊断等离子体的重要信息。当电子入射动能很高,以致 Born 近似适用时,靶原子或离子的“束缚—束缚”跃迁的微分截面正比于“广义振子强度”^[1]。根据多通道量子亏损理论 (MQDT)^[3-5],能将“束缚—束缚”和“束缚—连续”的跃迁统一在一个通道内考虑,相应地定义“广义振子强度密度”^[2],它在通道中是激发能和动量转移的连续函数,文献 [2] 总结了 Li 原子 S, P, D 通道的广义振子强度密度随激发能 ϵ 和动量转移 Q 的变化规律。我们在自洽层次上计算了各种类 Li 离子 (Li , Be^+ , B^{++} , C^{3+} , Ne^{7+} , Na^{8+} , K^{16+}) 从基态 ($1s^2 2s^2 S$) 到 S, P, D, F 通道激发的广义振子强度密度,(如果需要更精确的结果,可进行超越自洽层次的理论计算,例如用组态相互作用的方法),总结了类 Li 离子的广义振子强度密度随原子序 Z 变化的规律,即重整化广义振子强度密度 $\frac{d}{d\epsilon} f(\Delta\bar{E}, \bar{Q})$ 在约化激发能 ϵ 和约化动量转移 $\bar{Q}$ 为变数的空间中的标度关系。 $\left(\frac{d}{d\epsilon} f(\Delta\bar{E}, \bar{Q}), \epsilon, \bar{Q}\right)$ 的意义将在第二节中说明。

总结了各种类 Li 离子的重整化广义振子强度密度 $\frac{d}{d\epsilon} f(\Delta\bar{E}, \bar{Q})$ 的标度关系后,有助于系统地掌握不同类 Li 离子的大量的电子碰撞激发和电离截面数据,即可以掌握任一类 Li 离子从基态激发到无数个里德堡态和相应的连续态的微分截面及总截面。在第三节中,我们还将讨论如何推广到其它原子或离子的高能电子碰撞激发过程。

二、类 Li 离子广义振子强度密度之标度关系

在一个高能电子与原子或离子散射体系中,原子或离子从初态 $|i\rangle$ 被激发到末态 $|f\rangle$ 单位立体角内的微分截面^[1-2]为

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 2 \frac{k'}{k} \cdot \frac{f(\Delta E, Q)}{\Delta E \cdot Q^2} \quad (1)$$

方程(1)采用原子单位, $\bar{k}, \bar{k}'$ 为入射电子的初末态动量, $\mathbf{Q} = (\mathbf{k}' - \mathbf{k})$ 是动量转移, ΔE 是能量转移. 其中 $f(\Delta E, Q)$ 就是广义振子强度^[1]:

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

当末态 $|f\rangle$ 为束缚态时(即里德堡态), 一般采用态归一. 多通道量子亏损理论可以统一地处理无穷多个束缚态、自电离态和连续态^[3-5]. 如果束缚的末态 $|f\rangle$ 采用能量归一, 则能量归一和态归一之间相差一个归一因子 $N_n^{[4]}$. 这时定义广义振子强度密度

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

为单位激发能内的广义振子强度^[2]. 对于类 Li 等电子系列最外层电子的激发, 形成单通道; 这时广义振子强度密度为

$$\frac{d}{d\varepsilon} f(\Delta E, Q) = N_n^2 f(\Delta E, Q) \quad (3)$$

其中 $N_n^2 = [(n - \mu)^2 + (d\mu/d\varepsilon)]/q^2$, 就是“态密度”因子; n 是激发末态的主量子数; μ 是量子数亏损; ε_n 是末态的轨道能; $q = Z - 2$, 为原子的电离度加一. 这些无数个束缚末态形成一个里德堡系列. 该里德堡系列与相应的连续态形成一个通道. 当末态是连续态时, 该通道的双重微分电离截面为 $\frac{d^2\sigma}{d\Omega d\varepsilon}$, 即每单位激发能内在 (θ, φ) 方向单位立体

角内的微分截面, 它与广义振子强度密度 $\frac{d}{d\varepsilon} f(\Delta E, Q)$ 成正比. 广义振子强度密度在整个通道中是随激发能 ε 和动量转移 Q 连续变化的^[2], 在以 ε, Q 为变数的空间中形成一个光滑曲面. 我们在自洽层次上计算广义振子强度密度, 即用 Hartree-Slater 自洽场方法^[6], 求出原子或离子基态组态的自洽势 $V(r)$, 在这个势中求解激发电子的初、末态径向波函数, 然后求出方程(2)中的矩阵元.

在讨论等电子系列广义振子强度密度的“标度关系”前, 将分析一下类 H 离子存在的标度关系. 对于类 H 离子, 由于其相互作用势是纯粹的库仑势, 通过薛定谔方程的解的形式, 可以解析地得到类 H 离子的一些标度关系, 例如 $\langle r^n \rangle \propto Z^{-n}$, $\langle r^{-n} \rangle \propto Z^n$ 等等; 对于其广义振子强度密度, 在对激发能 ε 、动量转移 Q 和能量转移 ΔE 作如下标度后:

$$\bar{\varepsilon} = \varepsilon/Z^2, \quad \Delta \bar{E} = \Delta E/Z^2, \quad \bar{Q} = Q/Z \quad (4)$$

所有类 H 离子相应通道的重整化广义振子强度密度 $\frac{d}{d\bar{\varepsilon}} f(\Delta \bar{E}, \bar{Q})$ 完全相等; 在以约化激发能 $\bar{\varepsilon}$ 和约化动量转移 $\bar{Q}$ 为变数的空间中, 各种类 H 离子的重整化广义振子强度密度

$$\frac{d}{d\bar{\epsilon}} f(\Delta\bar{E}, \bar{Q})$$

曲面完全重合在一起了——即所谓的标度关系。

我们计算了类 Li 等电子系列从基态 ($1s^2 2s^2 S$) 到 S, P, D, F 通道的激发的广义振

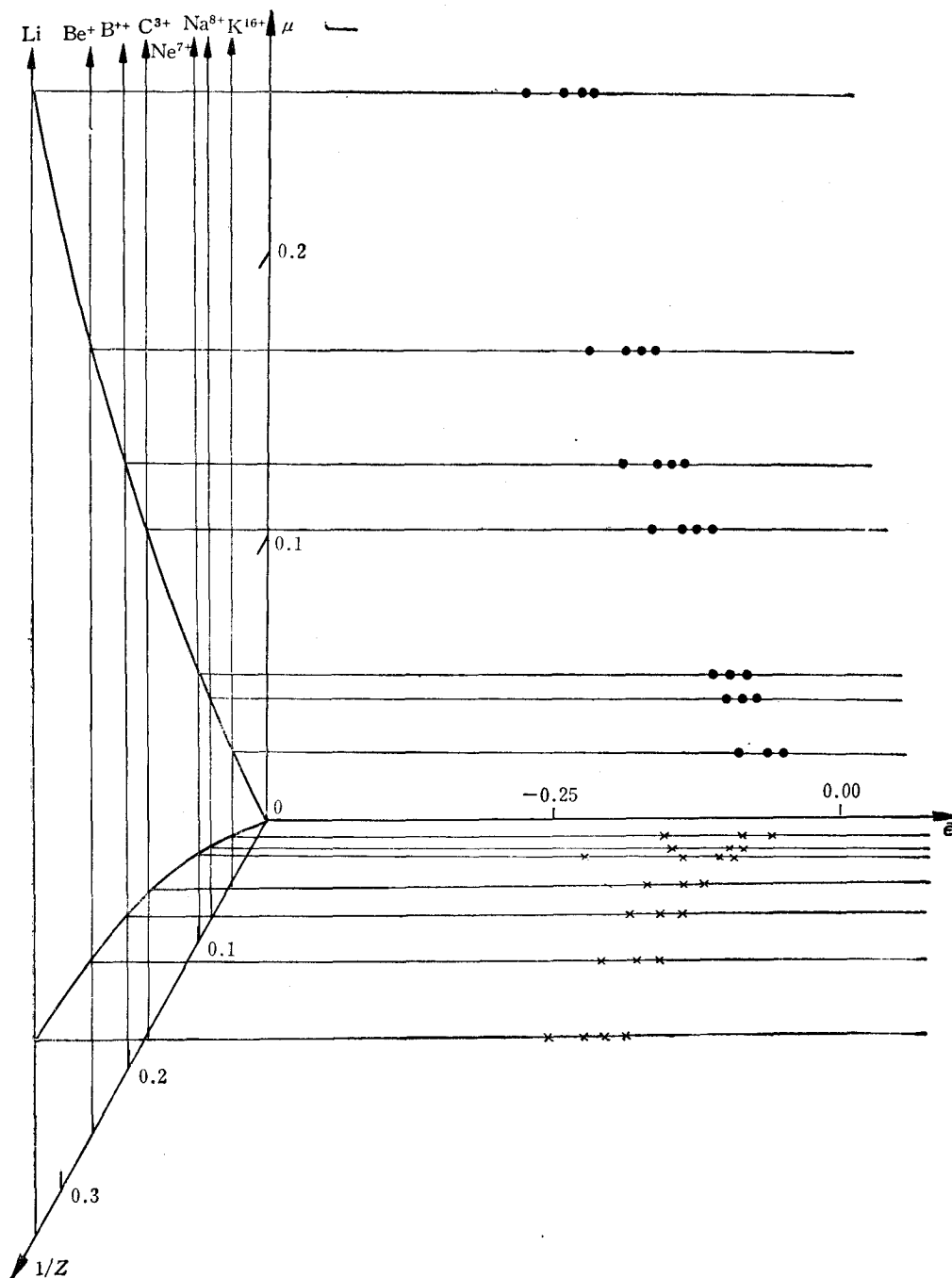


图1 其中●表示S通道；×表示P通道

子强度密度, 探索了各种类 Li 离子相应通道的广义振子强度密度的标度关系. 对于类 Li 等电子系列, 由于存在短程多电子非库仑作用的影响, 所以没有类 H 离子那样完全解析的标度关系. 对于末态通道, 短程非库仑作用的影响由量子数亏损 μ 反应出来. 图 1 给出了类 Li 等电子系列 S, P 通道的量子数亏损, D, F 通道的量子数亏损非常小, 图 1 中没有画出来. 图 1 表明, 随着原子序 Z 和角动量 l 的增加, 量子数亏损趋于零, 短程非库仑作用的影响趋于零; 每个通道中, μ 随激发能 ε 的变化非常平缓, 几乎是一个常数. 所以, 可定义约化激发能 $\bar{\varepsilon} = \varepsilon/q^2$; 约化能量转移 $\Delta\bar{E} = \Delta E/q^2$. 从方程 (2) 知道, 基态波函数对矩阵元的贡献是主要的, 所以我们选取基态的有效原子序 Z_{eff} (由轨道能求得, 即轨道能 $\varepsilon_n = -Z_{\text{eff}}^2/2n^2$) 作动量转移 Q 的标度参数而定义约化动量转移 $\bar{Q} = Q/Z_{\text{eff}}$, 从而得到类 Li 离子的重整化广义振子强度密度 $\frac{d}{d\bar{\varepsilon}} f(\Delta\bar{E}, \bar{Q})$. 进一步分析方程 (2), 其中还有一个因子正比于 q^2/Z_{eff}^2 , 所以还要将重整化广义振子强度密度 $\frac{d}{d\bar{\varepsilon}} f(\Delta\bar{E}, \bar{Q})$ 乘上这个效正因子 (Z_{eff}^2/q^2) . $(Z_{\text{eff}}^2/q^2) \cdot \frac{d}{d\bar{\varepsilon}} f(\Delta\bar{E}, \bar{Q})$ 是 $\bar{\varepsilon}, \bar{Q}$ 的连续变化的函数, 在以 $\bar{\varepsilon}, \bar{Q}$ 为变数的空间中, 它形成光滑变化的曲面. 我们将探索各种类 Li 离子的这些光滑曲面之间的标度关系——即它们应几乎重叠在一起. 下面我们将在 $\bar{\varepsilon}, \bar{Q}$ 空间中任取一断面来展示和分析各种类 Li 离子 $(Z_{\text{eff}}^2/q^2) \cdot \frac{d}{d\bar{\varepsilon}} f(\Delta\bar{E}, \bar{Q})$ 曲面的重叠情况. 例如在图 2 中各种类 Li 离子的 $(Z_{\text{eff}}^2/q^2) \cdot \frac{d}{d\bar{\varepsilon}} f(\Delta\bar{E}, \bar{Q})$ 断面分别为各条曲线, 这些曲线的重叠情况就反映

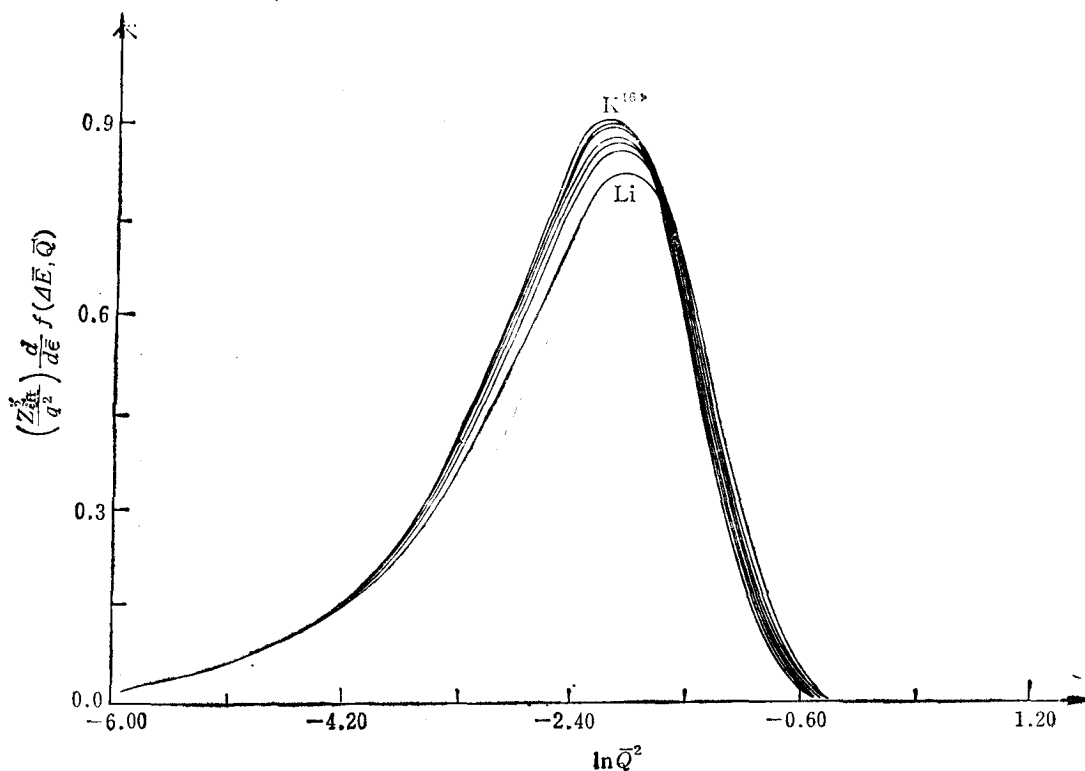


图 2 S 通道的断面图, 图中各曲线从下至上依次为 Li, Be⁺, B⁺⁺, C³⁺, Ne⁷⁺, Na⁸⁺, K¹⁶⁺ 离子的曲线. $\bar{\varepsilon} = 0.0$

了其标度特性。

我们先分析 S, D, F 通道; P 通道的情况有些特殊,下面将单独讨论. 图 2, 3, 4 分别展示了 S, D 和 F 通道 $\varepsilon = 0$ 的断面上的重叠情况. 图中每条曲线代表一种类 Li 离子. 我们看到,它们基本重叠在一起了,表现出了很好的标度特性. 但是由于类 Li 离子有短程非库仑作用的影响,图 2, 3, 4 中的曲线并未象类 H 离子那样完全重合,还有一些小的差异. 仔细分析方程 (2) 中矩阵元的积分,其被积函数是初态波函数、末态波函数和球 Bessel 函数的乘积, $\bar{Q}$ 确定该矩阵元的主要积分贡献区间; 由于短程非库仑作用的影响,初态和末态波函数在非库仑作用区外(即作用域外)都是具有一定向内相移 $\pi\mu$ 的库仑波函数,这里 μ 为相应量子数亏损. 当考虑到这些因素对矩阵元积分的影响后,就能够理解图 2, 3, 4 中存在的细小变化. 例如,在 F 通道时(见图 4),其末态波函数由于离心势的作用无法穿透到作用域内区,其量子数亏损 $\mu_l = 0$ 反映这种情况. 当原子序增加时,从图 1 可知: 初态 ($1s^2 2s^2 S$) 的量子数亏损变小,则其波函数向内相移变小;矩阵元的被积函数由于初态波函数与末态波函数的重叠增加而增大,因此 F 通道的重整化广义振子强度密度随 Z 增大而变大,最后趋于饱和——与类 H 离子相似.

P 通道的广义振子强度密度随激发能变化有节线^[2]. 图 5 给出了类 Li 离子的第一节线图. (广义振子强度密度还有其它一些节线,因为不重要,没有画出). 我们看到,随着

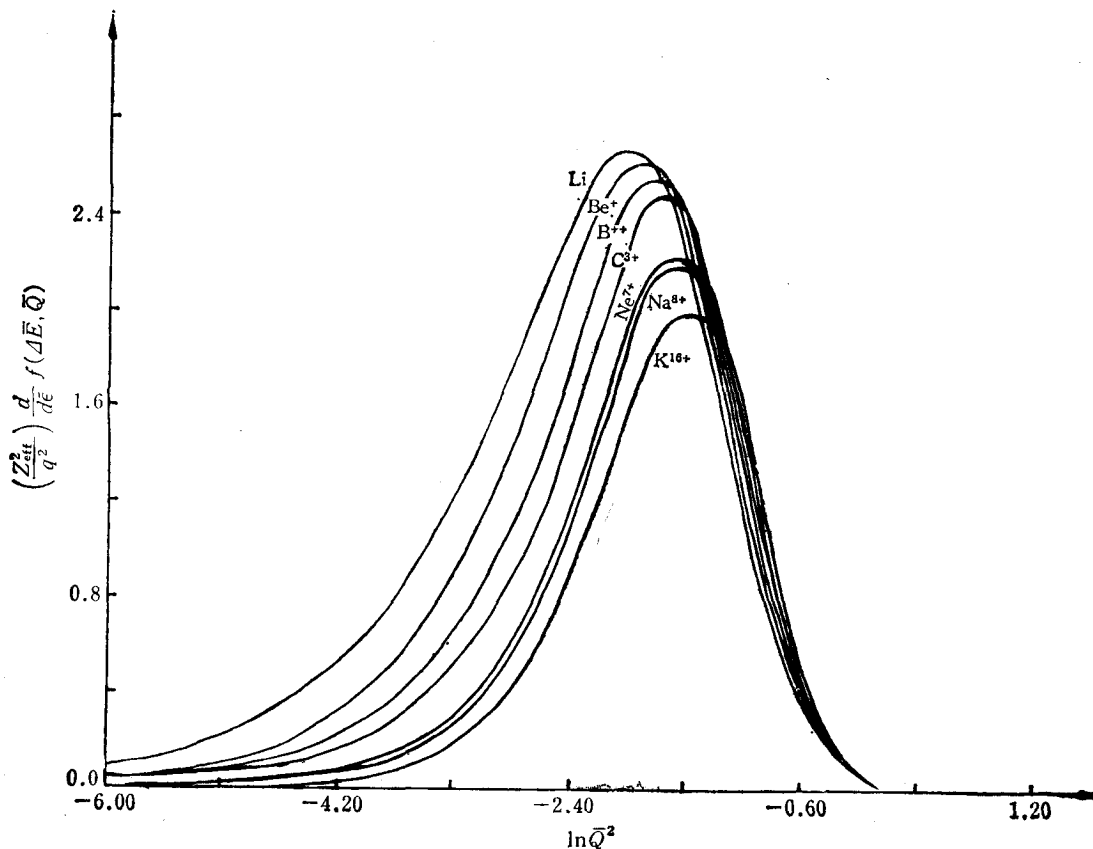
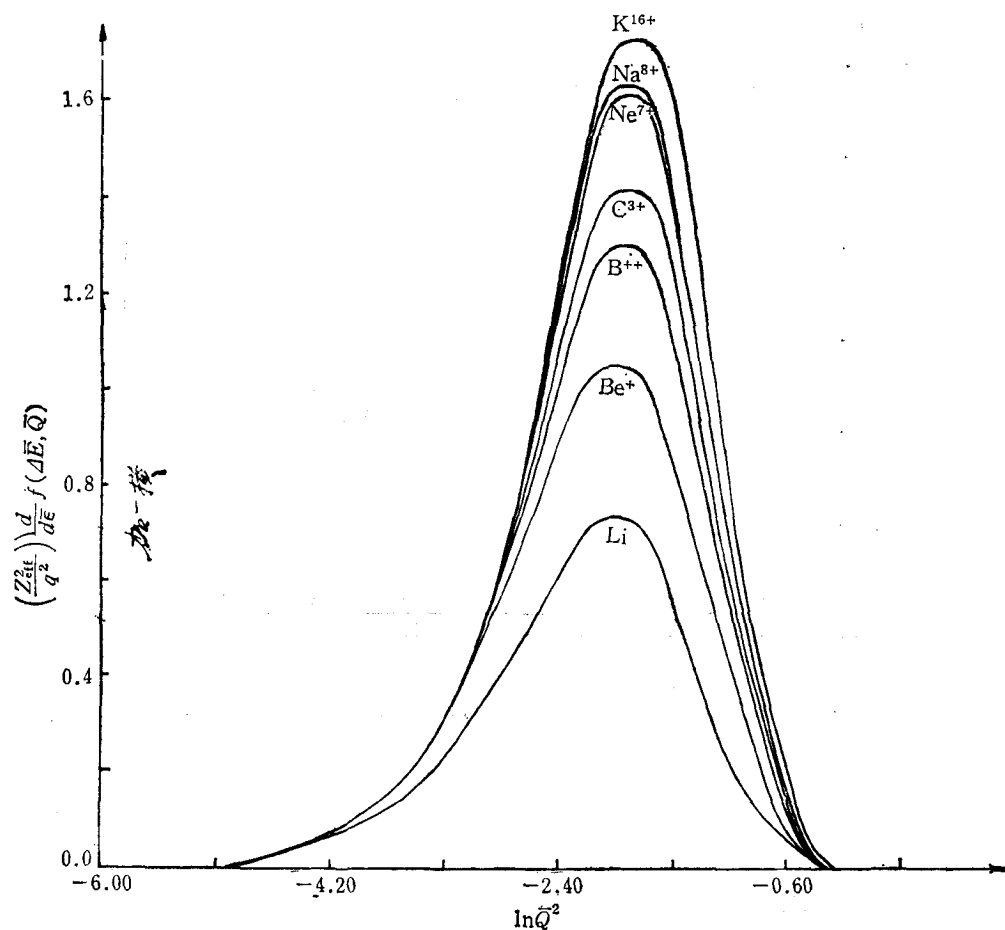


图 3 D 通道的断面图, $\varepsilon = 0.0$

图4 F通道的断面图, $\bar{\epsilon} = 0.0$

Z 的增加,短程非库仑作用影响的减小,节线位置朝大 $\bar{Q}$ 方向移动,并且各种类 Li 离子的节线趋于重叠. 图6给出了P通道 $(Z_{eff}^2/q^2) \cdot \frac{d}{d\bar{\epsilon}} f(\Delta E, \bar{Q})$ 曲面在 $\bar{\epsilon}=0$ 时的断面图. 随着 Z 的增加,零点朝大 $\bar{Q}$ 方向移动并趋于重合,广义振子强度密度的分布主要集中在“软碰撞”(小 $\bar{Q}$ 值)区域,相当于“虚光子”或碰撞参数较大的散射过程,而在“硬碰撞”(大 $\bar{Q}$ 值)区域的部分趋于零,表现出类H离子广义振子强度密度分布的趋势. 理论上可以证明: 对于光学允许跃迁的通道,其广义振子强度密度 $\frac{d}{d\bar{\epsilon}} f(\Delta E, \bar{Q})$ 在 $\bar{Q} \rightarrow 0$ 时趋于光学振子强度密度 $\frac{d}{d\bar{\epsilon}} f$. 类 Li 离子从基态 ($1s^2 2s^2 S$) 到 P 通道的光学跃迁是允许跃迁. 图7给出了P通道动量转移很小时的重整化广义振子强度密度——近似于重整化光学振子强度密度分布. 在激发态 $2p, 3p$ 之间,类 Li 离子的重整化光学振子强度密度 $\frac{d}{d\bar{\epsilon}} f$ 有一个极小值. 当 Z 很高后,基态激发到 $2p$ 和 np ($n \geq 3$) 态的重整化光学振子强度密度 $\frac{d}{d\bar{\epsilon}} f$ 分别按 Z^{-1} 和 Z^0 规律变化. 因此, Z 增加而非库仑作用部分的影响变小,类 Li 离子 P 通道

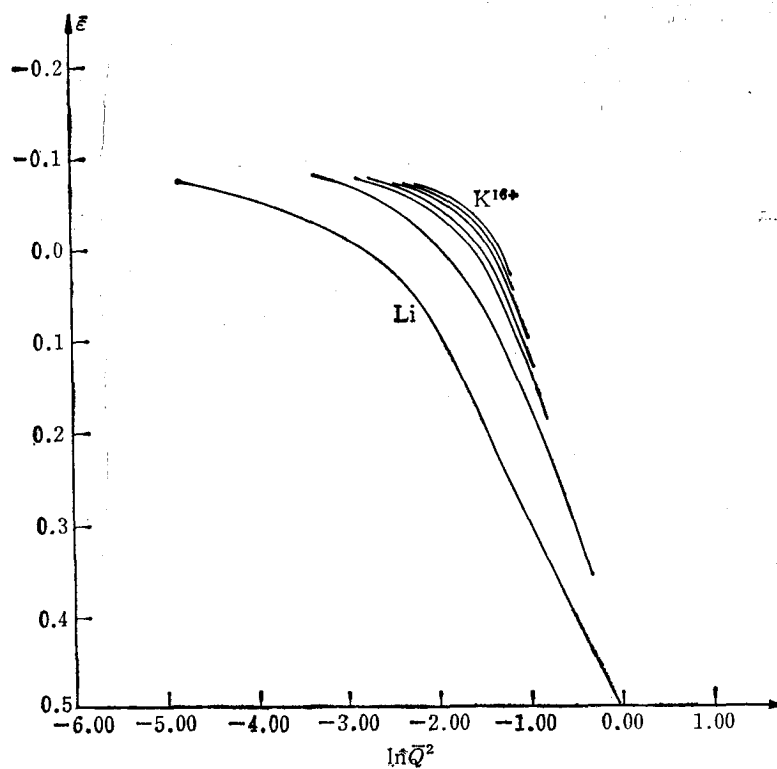


图5 P通道的第一节线图。其中曲线从左到右依次为 Li, Be⁺, B⁺⁺, C³⁺, Ne⁷⁺, Na⁸⁺, K¹⁶⁺ 的第一节线

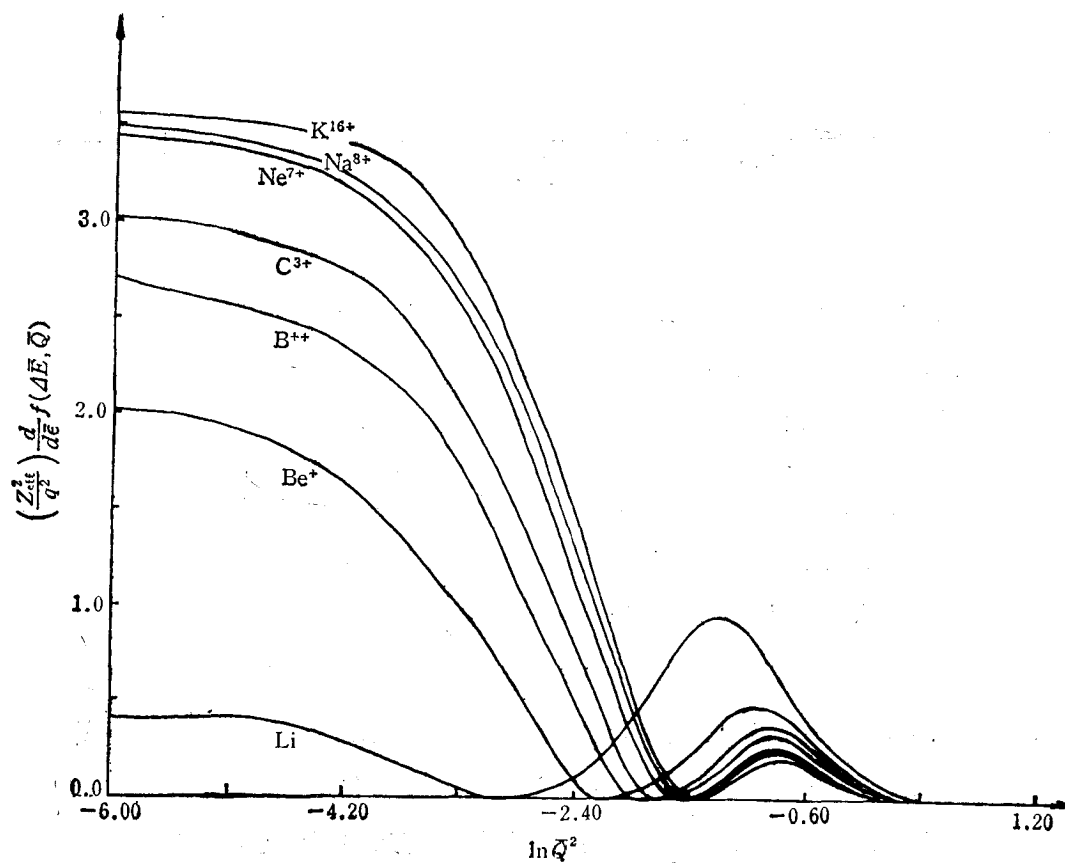
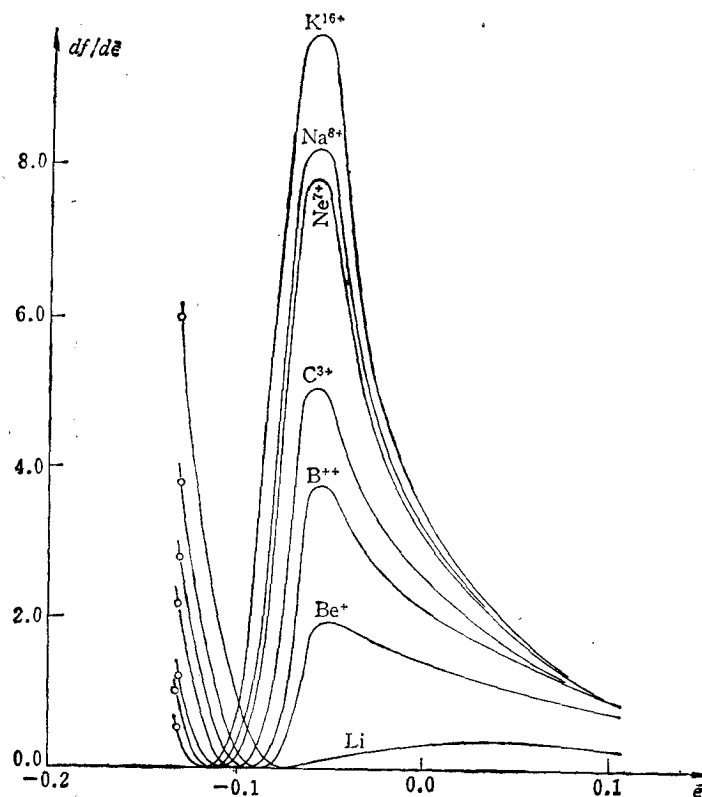


图6 P通道的断面图, $\varepsilon = 0.0$

图7 近似光学振子强度密度图, $\ln \bar{Q}^2 = -6.0$,

○表示 2p; 3p 在峰值附近

的广义振子强度密度表现出类 H 离子的特性——即广义振子强度密度主要分布在节线内区。

三、讨 论

我们计算了类 Li 等电子系列的广义振子强度密度, 对每个类 Li 离子, 我们不是单独地探讨某个态的广义振子强度, 而是计算和分析整个通道中的广义振子强度密度的变化规律以及它们的标度关系。每个通道中包括有无穷多个束缚态(里德堡态)和连续态。计算和分析表明, 对类 Li 离子从基态的激发, 基态 2s 壳层的有效原子序 Z_{eff} 和 q 是很好的标度参数, 经过这两个参数的标度后, 类 Li 离子(特别是高 Z 的类 Li 离子)的广义振子强度密度表现出了很好的标度特性。有了这些变化规律和标度关系, 可以使我们全面地、系统地掌握类 Li 离子的电子碰撞激发截面数据。

当要探索各种类 Li 离子以激发态为初态的广义振子强度密度的标度关系时, 由于初、末态波函数都主要分布在非库仑作用域外, 标度参数应皆选为 q , 即约化能量为

$$\bar{\varepsilon} = \varepsilon/q^2,$$

约化动量转移为 $\bar{Q} = Q/q$ 。在这种情况下各种类 Li 离子的广义振子强度密度之间的标

度规律有待进一步的探索。

对于其它不同原子或离子的电子碰撞激发情况,这时可能不是单通道而是多通道的情况,激发末态不只是无数的束缚态和连续态,还有自电离共振态。用多通道量子亏损理论(MQDT)可以统一地处理这种情况下广义振子强度密度的变化规律以及标度关系。对于这类问题也有待于进一步的探讨。

我们的计算是在非相对论自治场层次之上的,将来在超越自治层次时,以上计算的结果在定性上不会改变,例如重整化广义振子强度密度随 ε , $\bar{Q}$ 的变化规律,节线规律、标度规律等。但在定量上,广义振子强度密度值很小的地方,例如节线位置等可能有所修正。

中国科学院物理研究所对本课题组的支持,对田伯刚同志的帮助,本所计算机应用研究组和中国科学院计算中心的同志们所给予的帮助在此一并致谢。

参 考 文 献

- [1] M. Inokuti, *Rev. Mod. Phys.*, **43** (1971), 279.
- [2] 田伯刚,李家明,物理学报, **33** (1984), 1401.
- [3] 李家明,物理学报, **29**(1980), 419.
- [4] 李家明,物理学报, **32**(1983), 84.
- [5] M. J. Seaton, *Rep. Prog. Phys.*, **46** (1981), 167.
- [6] 李家明,赵中新,物理学报, **30**(1981), 105.

SCALING RELATION OF GENERALIZED OSCILLATOR STRENGTH DENSITY ALONG ISOELECTRONIC SEQUENCE

PAN XIAO-CHUAN LI JIA-MING
(Institute of Physics, Academia Sinica)

ABSTRACT

The differential cross section and total cross section of high-energy electron impact excitation can be calculated by 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 number of bound states and adjoint continuum states which can be treated in an unified manner by Quantum Defect Theory. Thus, we define generalized oscillator strength density (GOSD) as the generalized oscillator strength per unit of excitation energy. We have calculated the GOSD's of the lithium-like isoelectronic sequence (Li, Be⁺, B⁺⁺, C³⁺, Ne⁷⁺, Na⁸⁺, K¹⁶⁺) for excitation from the ground state to S, P, D and F channels. The scaling relation along isoelectronic sequence is discussed.