

(e, 2e) 的多重散射展开方法*

陈 学 俊¹⁾

郑 良 友

清华大学现代应用物理系, 北京, 100084

西安交通大学物理系, 西安, 710049

1990年11月15日收到

本文将作者之一在文献[6]中发展的多重散射展开方法应用于氢原子(e, 2e)的三重微分截面的计算。具体地得出 Ehrhardt 几何条件下的数值结果, 所得结果与实验数据符合得相当好。

PACC: 3480D

一、引 言

众所周知,核物理学的(p, 2p)以及原子和分子物理学的(e, 2e)都已取得了重大进展^[1-5]。本文的目的是将文献[6]中的多重散射展开方法具体应用于氢原子的(e, 2e)过程。针对 Ehrhardt 几何条件,完成了入射电子能量为 150eV 时的三重微分截面的数值计算。所得结果与实验数据符合得相当好。这表明多重散射展开方法确是一个好方法,它具有准确度高,计算比较简单,适用范围宽等优点。

二、理 论

在文献[6]中,已对普遍情况下的多重散射展开方法作了详细的叙述。这里只简要综述本文要用到的内容。

氢原子的(e, 2e)过程的特性由哈密顿算符 H 决定,它的形式为

$$H = H_0 + V, \quad (1)$$

其中

$$H_0 = \frac{1}{2} \mathbf{p}_1^2 + \left(\frac{1}{2} \mathbf{p}_2^2 + V_1(\mathbf{r}_2) \right), \quad (2)$$

$$V = V_1(\mathbf{r}_1) + V_2(\mathbf{r}), \quad (3)$$

而且

$$V_1(\mathbf{r}) = -\frac{1}{r}, \quad (4)$$

* 国家自然科学基金资助的课题。

1) 中国高等科学技术中心(世界实验室)。

$$V_2(\mathbf{r}) = \frac{1}{r}. \quad (5)$$

本文始终采用原子单位制,除非有特别的说明.电子质量比质子的小得多,原子核在这里被当作无限重处理. $\mathbf{p}_1$ 和 $\mathbf{p}_2$ 分别是入射电子和靶电子的动量算符; $\mathbf{r}_1$ 和 $\mathbf{r}_2$ 是相应的坐标, $\mathbf{r}$ 是入射电子与靶电子的相对坐标. 坐标关系如图 1 所示.

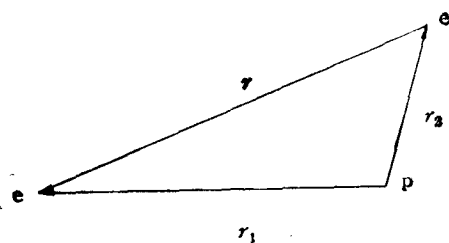


图 1 ($e, 2e$) 碰撞的坐标关系

碰撞前和后的系统状态分别用 $\Psi_i^{(0)}$ 和 $\Psi_f^{(0)}$ 表示,它们由下面的定态 Schrödinger 方程决定:

$$H_0 \Psi_\alpha^{(0)} = E \Psi_\alpha^{(0)} \quad (\alpha = i, f). \quad (6)$$

从始态到终态的 S 矩阵元由量子散射公式给定:

$$S_{fi} = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \Psi_f^{(0)} | V | \Psi_i^{(0)} \rangle, \quad (7)$$

其中 $\Psi^{(\pm)}$ 是系统的完全波函数并符合入射球面波边界条件,由下式决定:

$$\langle \Psi^{(\pm)} | = \langle \Psi_i^{(0)} | + \langle \Psi^{(\pm)} | V G_0, \quad (8)$$

其中

$$G_0 = [E - H_0 + i\epsilon]^{-1} \quad (\epsilon = 0^+). \quad (9)$$

利用迭代法,容易得出 S_{fi} 的 Born 展开形式:

$$S_{fi} = S_B^{(1)} + S_B^{(2)} + S_B^{(3)} + S_B^{(4)} + \dots, \quad (10)$$

其中

$$S_B^{(1)} = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \Psi_f^{(0)} | V | \Psi_i^{(0)} \rangle, \quad (11)$$

$$S_B^{(2)} = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \Psi_f^{(0)} | V G_0 V | \Psi_i^{(0)} \rangle, \quad (12)$$

$$S_B^{(3)} = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \Psi_f^{(0)} | V G_0 V G_0 V | \Psi_i^{(0)} \rangle, \quad (13)$$

$$S_B^{(4)} = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \Psi_f^{(0)} | V G_0 V G_0 V G_0 V | \Psi_i^{(0)} \rangle. \quad (14)$$

如果 H_0 的所有本征函数 $\Psi_n^{(0)}$ 已知,那么格林函数 G_0 可表示为

$$G_0 = \sum_n \frac{|\Psi_n^{(0)}\rangle \langle \Psi_n^{(0)}|}{E - E_n + i\epsilon},$$

这里的求和指标遍及全部分立和连续的中间态.由此可见,三级和三级以上的 Born 展开

项是很难实际计算的.

为了寻求多重散射展开级数, 定义如下两个扭曲波 $\xi_1^{(-)}$ 和 $\xi_2^{(-)}$:

$$\langle \xi_1^{(-)} | = \langle \Psi^{(0)} | + \langle \xi_1^{(-)} | V_1 G_0, \quad (15)$$

$$\langle \xi_2^{(-)} | = \langle \Psi^{(0)} | + \langle \xi_2^{(-)} | V_2 G_0, \quad (16)$$

$\xi_1^{(-)}$ 和 $\xi_2^{(-)}$ 是能够精确地解析求解的. 有了这两个扭曲波, $\langle \Psi^{(-)} |$ 可以表示成如下的形式:

$$\langle \Psi^{(-)} | = \langle \xi_1^{(-)} | + \langle \Psi^{(-)} | V_2 G_1, \quad (17)$$

$$= \langle \xi_2^{(-)} | + \langle \Psi^{(-)} | V_1 G_2, \quad (18)$$

其中

$$G_1 = [E - H_0 - V_1 + i\varepsilon]^{-1}, \quad (19)$$

$$G_2 = [E - H_0 - V_2 + i\varepsilon]^{-1}. \quad (20)$$

采用文献[6]的方法, 可以得到 $\langle \Psi^{(-)} |$ 的一种多重散射展开级数:

$$\langle \Psi^{(-)} | = \langle \Psi_{M1}^{(-)} | + \langle \Psi_{M2}^{(-)} | + \dots, \quad (21)$$

其中

$$\langle \Psi_{M1}^{(-)} | = \langle \varphi_{q_a}^* \Phi_{q_b}^{(-)} \eta_1^{(-)} \eta_2^{(-)} |, \quad (22)$$

$\langle \Psi_{M2}^{(-)} |$ 的形式比较复杂一些, 这里从略, 这里并不用到它.

在(22)式中, φ_{q_a} 为^[6]

$$\varphi_{q_a} = e^{i\mathbf{q}_a \cdot \mathbf{r}_1} e^{-iE_a t}, \quad (23)$$

$\mathbf{q}_a$ 和 E_a 分别是入射电子被散射后的动量和动能.

$\eta_1^{(-)}$ 由下式决定^[6]:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \eta_1^{(-)} = \left[\frac{1}{2} \mathbf{p}_1^2 + V_1(\mathbf{r}_1) \right] \eta_1^{(-)}, \quad (24)$$

以及相应的入射球面波边界条件. (24)式有精确的解析解^[7], 结果为

$$\eta_1^{(-)} = e^{i\mathbf{q}_a \cdot \mathbf{r}_1} e^{-\pi\eta_a/2} \Gamma(1 + i\eta_a) F(-i\eta_a, 1; -i(\mathbf{q}_a \mathbf{r}_1 + \mathbf{q}_a \cdot \mathbf{r}_1)) e^{-iE_a t}, \quad (25)$$

其中

$$\eta_a = \frac{1}{q_a}, \quad (26)$$

$\Gamma(z)$ 是伽马函数, $F(a, b; z)$ 是合流超几何函数. $\eta_2^{(-)}$ 由下式决定^[6]:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \eta_2^{(-)} = \left[\frac{1}{2} \mathbf{p}_2^2 + V_2(\mathbf{r}) \right] \eta_2^{(-)}, \quad (27)$$

以及相应的边界条件. 它也有解析解^[7], 结果为

$$\eta_2^{(-)} = e^{i\mathbf{q}_a \cdot \mathbf{r}_1} e^{-\pi\eta_a/2} \Gamma(1 - i\eta_a) F(i\eta_a, 1; -i(\mathbf{q}_a \mathbf{r} + \mathbf{q}_a \cdot \mathbf{r})) e^{-iE_a t}. \quad (28)$$

$\Phi_{q_b}^{(-)}$ 由下式决定^[6]:

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Phi_{q_b}^{(-)} = \left[\frac{1}{2} \mathbf{p}_2^2 + V_1(\mathbf{r}_2) \right] \Phi_{q_b}^{(-)}. \quad (29)$$

精确的解析解为^[7]

$$\Phi_{q_b}^{(-)} = e^{i\mathbf{q}_b \cdot \mathbf{r}_2} \Gamma(1 + i\eta_b) e^{i\mathbf{q}_b \cdot \mathbf{r}_1} F(-i\eta_b, 1; -i(\mathbf{q}_b \mathbf{r}_2 + \mathbf{q}_b \cdot \mathbf{r}_2)) e^{-iE_b t}, \quad (30)$$

其中

$$\eta_b = \frac{1}{q_b}, \quad (31)$$

q_b 和 E_b 分别代表敲出电子(碰撞前为靶电子)的出射动量和动能。至此 $\langle \Psi_{M1}^{(-)} |$ 的表达式已经完全确定了。将(21)式代入(7)式,就得到 S 矩阵元的多重散射展开级数:

$$S_{fi} = S_M^{(1)} + S_M^{(2)} + \dots, \quad (32)$$

其中

$$S_M^{(1)} = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \Psi_{M1}^{(-)} | V | \Psi_i^{(0)} \rangle, \quad (33)$$

$$S_M^{(2)} = -i \int_{-\infty}^{+\infty} dt \langle \Psi_{M2}^{(-)} | V | \Psi_i^{(0)} \rangle. \quad (34)$$

下面讨论多重散射展开的一些特点:

(1) 文献[6]已证明:

$$S_M^{(1)} \approx S_B^{(1)} + S_B^{(2)} + S_B^{(3)}. \quad (35)$$

这说明多重散射级数的第一项就相当于 Born 级数的前三项,因而只取多重散射级数的第一项就有很高的准确度。

(2) $S_M^{(1)}$ 的计算较为简单,由(22)–(23)式看出,在 $S_M^{(1)}$ 的具体表达式中并不包含格林函数,因而也就没有对中间态的求和问题。因而,计算相对简单一些。

(3) 在 $\Psi_{M1}^{(-)}$ 的表达式中包含了两个出射电子的空间关联效应。 $\Psi_{M1}^{(-)}$ 可写成如下形式:

$$\begin{aligned} \Psi_{M1}^{(-)} = & \{ \phi_{qa}(\mathbf{r}_1) e^{-iE_a t} \} \{ e^{-\pi\eta_a/2} \Gamma(1 - i\eta_a) \\ & \times F(i\eta_a, 1; -i(q_a r + \mathbf{q}_a \cdot \mathbf{r})) \} \{ \phi_{qb}(\mathbf{r}_2) e^{-iE_b t} \}, \end{aligned} \quad (36)$$

其中

$$\phi_{qa} = e^{i\mathbf{q}_a \cdot \mathbf{r}_1} e^{\pi\eta_a/2} \Gamma(1 + i\eta_a) F(-i\eta_a, 1; -i(q_a r_1 + \mathbf{q}_a \cdot \mathbf{r}_1)), \quad (37)$$

$$\phi_{qb} = e^{i\mathbf{q}_b \cdot \mathbf{r}_2} e^{\pi\eta_b/2} \Gamma(1 + i\eta_b) F(-i\eta_b, 1; -i(q_b r_2 + \mathbf{q}_b \cdot \mathbf{r}_2)). \quad (38)$$

(36)式中等号右端第一个花括号的 $\phi_{qa}(\mathbf{r}_1)$ 代表入射电子被氢原子核散射的扭曲波;第二个花括号代表入射电子与靶电子散射的扭曲波修正,它是两个电子相对坐标的函数,反映了两个出射电子的空间关联;第三个花括号代表敲出电子被氢原子核散射的扭曲波。

如果在(36)式中忽略两个出射电子的空间关联,那么(36)式就过渡到扭曲波 Born 近似的形式。如果再进一步忽略氢原子核对入射电子和敲出电子的散射作用,那么(36)式就进一步过渡到平面波 Born 近似的形式。

三、结果与讨论

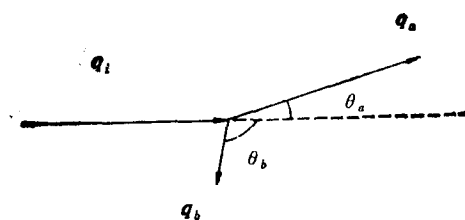
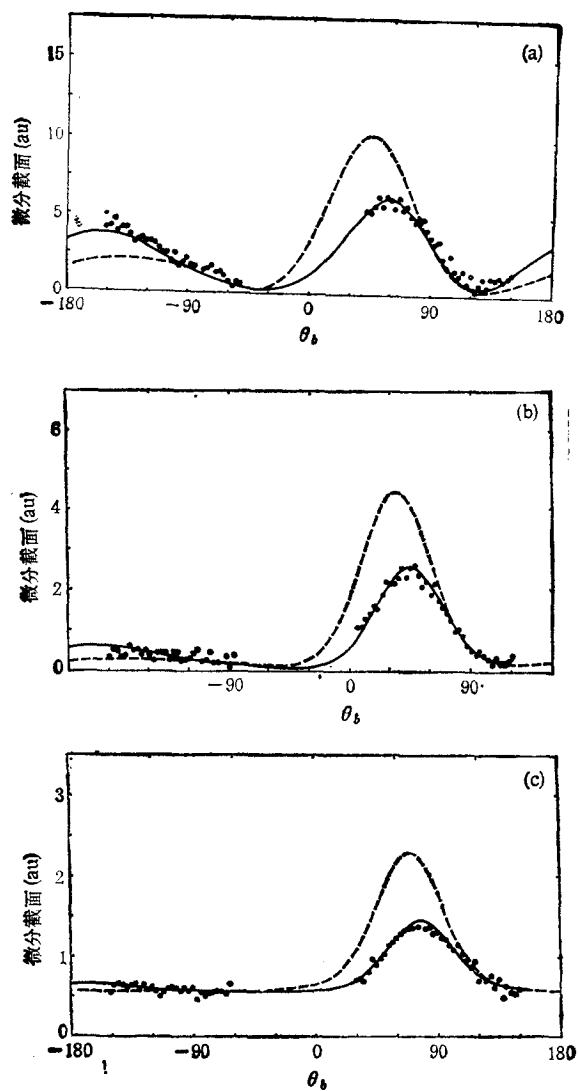
将(36)式代入(33)式,并经过一些运算,得

$$S_M^{(1)} = -2\pi i \delta[E_i + E(q_i) - E_a - E_b] T, \quad (39)$$

其中

$$T = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 [\phi_{qa}(\mathbf{r}_1) f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \phi_{qb}(\mathbf{r}_2)]^* \left(\frac{1}{r} - \frac{1}{r_1} \right) e^{i\mathbf{q}_i \cdot \mathbf{r}_1} \phi_{1i}(\mathbf{r}_2), \quad (40)$$

$$f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = e^{-\pi\eta_a/2} \Gamma(1 - i\eta_a) F(i\eta_a, 1; -i(q_a r + \mathbf{q}_a \cdot \mathbf{r})), \quad (41)$$

图 2 Ehrhardt 几何条件下的 $(e, 2e)$ 碰撞过程图 3 Ehrhardt 几何条件下氢原子 $(e, 2e)$ 的三重微分截面 入射电子能量是 150eV ; 敲出电子能量是 5eV ; $\theta_o = 4^\circ$

q_i 是入射电子的动量, $\phi_{1,2}(r_2)$ 和 E_i 是氢原子的基态波函数和能量. 正如文献[6] 所分析的,(40)式表面上是六重积分,但实际上可化简为三重积分. 实验上可测得的三重微分截面可表示成

$$\frac{d^3\sigma}{d\Omega_a d\Omega_b dE_b} = (2\pi)^{-5} \frac{q_a q_b}{q_i} |T|^2. \quad (42)$$

以上面的公式为基础,我们针对 Ehrhardt 几何条件(图 2),完成了一些典型的数值计算,结果如图 3(a)–(c) 所示. 这三个图的纵坐标是三重微分截面,横坐标是敲出电子的出射角 θ_b ,黑点是 Ehrhardt^[8] 实验值,实线是我们的计算结果,虚线是第一级 Born 近似的结果. 从图 3 可知,按我们的理论,只取第一级多重散射项就能得到与实验数据相当符合的结果. 这有力地说明多重散射展开方法是一个相当好的方法.

本工作还得到清华大学研究生院和理学院基金的资助. 感谢黄祖洽教授审阅本文初稿并提出了有价值的意见.

- [1] 陈学俊,核物理动态, 7(4)(1990), 27.
- [2] 陈学俊,第四届全国量子化学会议文集,上册,(1990),第 23 页.
- [3] B. Lohmann and E. Weigold, *Phys. Lett.*, 86A(1981), 139.
- [4] I. E. McCarthy and E. Weigold, *Rep. Prog. Phys.*, 51(1988), 299.
- [5] H. Ehrhardt, *Comments in At. Mol. Phys.*, 13(1983), 115.
- [6] X. J. Chen (陈学俊), *Phys. Rev.*, A40(1989), 1795.
- [7] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics, Non-relativistic Theory*, 3rd. ed.; Pergamon, New York, (1977).
- [8] H. Ehrhardt et al., *Phys. Lett.*, 110A(1985), 92.

MULTIPLE-SCATTERING EXPANSION METHOD FOR (e,2e) COLLISIONS OF ATOMIC HYDROGEN

CHEN XUE-JUN

Department of Modern Applied Physics, Tsinghua University, Beijing, 100084

ZHENG LIANG-YOU

Department of Physics, Xi'an Jiaotong University, Xi'an, 710049

(Received 15 November 1990)

ABSTRACT

The multiple-scattering expansion method proposed in Ref [6] has been applied to the calculations for the triple differential cross sections of the (e,2e) collisions of atomic hydrogen under the Ehrhardt geometric conditions. The present results are in good agreement with the experimental data.

PACC: 3480D