

最弱受约束电子势模型散射态的精确解

陈昌远 沈宏兰

(盐城师范专科学校物理系, 盐城 224002)

孙国耀

(中山大学物理系, 广州 510275)

(1996 年 9 月 16 日收到)

研究了最弱受约束电子势模型的散射态性质, 获得了扭曲库仑波的解析解. 给出了精确的按“ $k/2\pi$ 标度”归一化的散射态波函数及相移表达式. 讨论了散射振幅的解析性质, 给出了束缚-连续跃迁矩阵元的解析计算公式. 结果可广泛应用于处理原子的散射问题.

PACC: 3110; 0365

1 引 言

郑能武在 80 年代提出的最弱受约束电子势模型 (weakest bound electron potential model, WBEPM)^[1,2]

$$V(r) = -Z'/r + B/r^2, \quad (1)$$

式中 $B = [d(d+1) + 2ld]/2$, d 是量子数修正. 它较好地描述了单价原子 (离子) 的行为, 用它计算碱原子及类碱离子的振子强度、跃迁概率等物理量取得了比较满意的结果^[3,4]. 文献[5,6]给出了这一理论中矩阵元的计算公式及其递推关系, 文献[7—9]提供了这一理论中参数的确定方法, 我们在以前的工作中^[10], 给出了精细结构的计算公式. 所有这些为 WBEPM 在束缚态问题中的应用提供了极大的方便并已取得了很好的结果. 但是, 关于 WBEPM 散射态的解及其在散射问题中的应用至今还未见报道.

在散射问题中, 需知道连续电子波函数. 通常是在给定势的情况下, 通过求解单个连续电子的 Schrödinger 方程获得. 起初人们完全忽略连续电子与靶之间的相互作用, 采用平面波描述连续电子. 后来人们用库仑相互作用势描述连续电子与靶之间的相互作用, 而获得库仑波函数. 最精确的当然是扭曲库仑波函数^[11,12], 它考虑了电子之间的相互作用及畸变引起的短程非库仑势的效应. 虽然求解扭曲库仑波函数的方法很多, 使用的势也各不相同, 然而能获得解析结果的却未见报道.

WBEPM 中的第二项 B/r^2 正是考虑了电子间的相互作用以及原子实的极化畸变所引入的短程非库仑势. 在连续波中, 这一项体现了对库仑波的扭曲作用. 既然 WBEPM 在束缚态中已经获得了成功, 所以没有理由怀疑它不能应用于散射态. 为此本文把 WBEPM 由束缚态推广到散射态, 获得了扭曲库仑波的解析解. 给出了精确的按“ $k/2\pi$ 标度”归一化的散射态波函数和相移表达式. 讨论了散射振幅的解析性质, 由散射态波函数导出了束

束缚态波函数,给出了束缚-连续跃迁矩阵元的解析计算公式.为 **WBEPM** 在散射问题中的应用打下了基础.

2 散射态的精确解

把(1)式代入 **Schrödinger** 方程,分离变量得 l 分波的径向方程为

$$\frac{d^2 u(r)}{dr^2} + \left[k^2 + \frac{2Z'}{r} - \frac{l'(l'+1)}{r^2} \right] u(r) = 0, \quad (2)$$

式中 $l' = l + d$, $k = \sqrt{2E}$, 对于散射态, $E > 0$, 所以 $k > 0$. $R(r) = u(r)/r$, 边界条件是 $u(0) = 0$, 而 $R(r)$ 就是径向波函数. 考虑到 $r=0$ 领域的边界条件, 作函数代换

$$u(r) = A(kr)^{l'+1} e^{-ikr} v(r), \quad (3)$$

把(3)式代入(2)式得

$$r \frac{d^2 v}{dr^2} + (2l' + 2 - 2ikr) \frac{dv}{dr} - [2ik(l' + 1) - 2Z'] v = 0, \quad (4)$$

引入无量纲变量 $z = 2ikr$, 则(4)式可化为

$$z \frac{d^2 v}{dz^2} + (2l' + 2 - z) \frac{dv}{dz} - (l' + 1 + iZ'/k) v = 0. \quad (5)$$

这正是合流超几何微分方程, 其参数 $\alpha = l' + 1 + iZ'/k$, $\gamma = 2l' + 2$. 它在原点解析的解是合流超几何函数

$$v(r) = F(l' + 1 + iZ'/k, 2l' + 2, 2ikr), \quad (6)$$

于是散射态径向波函数

$$R_{kl}(r) = A_{kl}(kr)^{l'+1} \frac{e^{-ikr}}{r} F(l' + 1 + iZ'/k, 2l' + 2, 2ikr). \quad (7)$$

下面研究(7)式的渐近行为, 以确定归一化常数 A_{kl} 和相移. 利用合流超几何函数的渐近公式^[13], 当 z 为纯虚数 $z = 2ikr = |z|e^{i\pi/2}$, $|z| \rightarrow \infty$ 时,

$$\begin{aligned} \Gamma(\alpha, \gamma, z) \longrightarrow & \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\gamma - \alpha)} e^{i\alpha\pi} |z|^{-\alpha} e^{-i\alpha\pi/2} \\ & + \frac{\Gamma(\gamma)}{\Gamma(\alpha)} e^z |z|^{\alpha - \gamma} e^{i\pi(\alpha - \gamma)/2}, \end{aligned} \quad (8)$$

可求出

$$\begin{aligned} & F(l' + 1 + iZ'/k, 2l' + 2, 2ikr) \\ & \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{\Gamma(2l' + 2)}{\Gamma(l' + 1 - iZ'/k)} e^{i\pi(l' + 1 + iZ'/k)/2} (2kr)^{-(l' + 1 + iZ'/k)} \\ & + \frac{\Gamma(2l' + 2)}{\Gamma(l' + 1 + iZ'/k)} e^{i2\pi k r} e^{-i\pi(l' + 1 - iZ'/k)/2} (2kr)^{-(l' + 1 - iZ'/k)}, \end{aligned} \quad (9)$$

令

$$\Gamma(l' + 1 - iZ'/k) = |\Gamma(l' + 1 - iZ'/k)| e^{i\delta'_l}, \quad (10)$$

则

$$\Gamma(l' + 1 + iZ'/k) = |\Gamma(l' + 1 - iZ'/k)| e^{-i\delta'_l}, \quad (11)$$

式中 δ'_l 为实数. 于是(9)式可化为

$$F(l'+1+iZ'/k, 2l'+2, 2ikr) \\ \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{\Gamma(2l'+2)e^{-\pi Z'/2k} e^{ikr}}{|\Gamma(l'+1-iZ'/k)|(2kr)^{l'+1}} \\ \times [ie^{-i(kr - \frac{\pi}{2}l' + \frac{Z'}{k} \ln 2kr + \delta'_l)} - ie^{-i(kr - \frac{\pi}{2}l' + \frac{Z'}{k} \ln 2kr + \delta'_l)}], \quad (12)$$

由此可得

$$R_{kl}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{A_{kl}\Gamma(2l'+2)e^{-\pi Z'/2k}}{|\Gamma(l'+1-iZ'/k)|2^{l'+1}} \\ \times \frac{2}{r} \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l' + \frac{Z'}{k} \ln 2kr + \delta'_l - \frac{\pi d}{2}\right), \quad (13)$$

由文献[14], 令

$$R_{kl}(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \frac{2}{r} \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l' + \frac{Z'}{k} \ln 2kr + \delta'_l\right), \quad (14)$$

得归一化常数

$$A_{kl} = \frac{2^{l'+1} |\Gamma(l'+1-iZ'/k)| e^{\pi Z'/2k}}{\Gamma(2l'+2)} \quad (15)$$

和相移

$$\delta_l = \delta'_l - \frac{\pi d}{2} = \arg \Gamma(l'+1-iZ'/k) - \frac{\pi d}{2} \quad (16)$$

于是 WBEPM 的散射态径向波函数按“ $k/2\pi$ 标度”归一化的精确解为

$$R_{kl} = \frac{|\Gamma(l'+1-iZ'/k)| e^{\pi Z'/2k} (2kr)^{l'+1} e^{-ikr}}{\Gamma(2l'+2) r} \\ \times F(l'+1+iZ'/k, 2l'+2, 2ikr). \quad (17)$$

上式满足归一化条件

$$\int_0^\infty r^2 R_{k'l'}^*(r) R_{kl}(r) dr = 2\pi \delta(k' - k). \quad (18)$$

在(1)式中, 若取 $B=0$, 则 WBEPM 就退化为库仑势. 因此令 $d=0$, $B=0$, 于是 $l'=l+d=l$, 则(16)和(17)式分别成为

$$\delta_l = \arg \Gamma(l+1-iZ'/k), \quad (19)$$

$$R_{kl}(r) = \frac{2k |\Gamma(l+1-iZ'/k)| e^{\pi Z'/2k} (2kr)^l e^{-ikr}}{(2l+1)!} \\ \times F(l+1+iZ'/k, 2l+2, 2ikr). \quad (20)$$

这与文献[14]直接求解库仑势所得到的结论是完全一致的. 也就是说, 本文的结论具有普遍性, 库仑波作为特例包含在本文的一般结论之中.

前面我们给出了 WBEPM 散射态的精确解, 于是 WBEPM 的扭曲库仑波为

$$\varphi = \frac{4\pi}{2k} \sum_{lm} i^{-l} e^{i\delta_l} Y_{lm}^*(\hat{r}) Y_{lm}(\hat{k}) R_{kl}(r), \quad (21)$$

式中 δ_l 和 R_{kl} 分别由(16)式和(17)式确定.

3 散射振幅的解析性质

根据分波法的一般理论, 散射振幅

$$f(\theta) = \sum_l (2l+1) \left[\frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik} \right] P_l(\cos \theta) \\ \stackrel{\text{令}}{=} \sum_l (2l+1) a_l P_l(\cos \theta). \quad (22)$$

下面研究散射振幅的解析性质. 即把它作为能量 E 的函数, 拓展到整个复 k 平面上, 并研究其解析性质. 由(22)式, 研究散射振幅的解析性质, 就是研究 $a_l = \frac{e^{2i\delta_l} - 1}{2ik}$ 的解析性质, 也就是研究 $e^{2i\delta_l}$ 的解析性质, 由于

$$e^{2i\delta_l} = \frac{\Gamma(l'+1-iZ'/k)}{\Gamma(l'+1+iZ'/k)} e^{-i\pi d}, \quad (23)$$

为此, 只需研究 $\Gamma(l'+1-iZ'/k)$ 的解析性质. 利用

$$\Gamma(z) = \frac{\Gamma(z+1)}{z} = \frac{\Gamma(z+2)}{z(z+1)} = \frac{\Gamma(z+3)}{z(z+1)(z+2)} = \dots, \quad (24)$$

可见 $z=0, -1, -2, \dots$ 是 $\Gamma(z)$ 的一阶极点. 也就是说 $\Gamma(l'+1-iZ'/k)$ 的一阶极点在

$$l'+1-iZ'/k = 0, -1, -2, \dots = -n_r \quad (n_r = 0, 1, 2, \dots) \quad (25)$$

处, 即

$$Z'/k = -i(n_r + l' + 1) = -i(n + d) = -in', \quad (26)$$

式中 n 是主量子数, $n' = n + d$ 称为有效主量子数^[1,2]. 于是在散射振幅的极点所在处, 粒子的能量

$$E = k^2/2 = \frac{1}{2} \left(\frac{Z'}{-in'} \right)^2 = -\frac{Z'^2}{2n'^2}. \quad (27)$$

上式正是 WBEPM 的束缚态能谱公式^[1,2]. 于是我们看到, 把散射振幅作为能量 E 的函数, 解析拓展到整个复 k 平面上, WBEPM 的束缚态能级正好对应于散射振幅的极点所在. 也就是说, WBEPM 和量子理论的普遍原理是一致的.

根据波函数的统计解释, (17)式的复共轭

$$R_{kl}^*(r) = \frac{|\Gamma(l'+1-iZ'/k)| e^{\pi Z'/2k} (2kr)^{l'+1} e^{ikr}}{\Gamma(2l'+2) r} \\ \times F(l'+1-iZ'/k, 2l'+2, -2ikr) \quad (28)$$

和(17)式描述的是同一状态. 把(26)式代入(28)式, 则(28)式可表示成

$$R_{nl}(r) = N'_{nl} \left(\frac{2Z'r}{n'} \right)^{l'} e^{-\frac{Z'r}{n'}} F(-n' + l' + 1, 2l' + 2, \frac{2Z'r}{n'}). \quad (29)$$

由于 $-n' + l' + 1 = -n + l + 1 = -n_r$, 因而上式等号右边的合流超几何函数退化成宗量为 $\frac{2Z'r}{n'}$ 的 n_r 次多项式. 也就是说, (29)式满足束缚态的边界条件 $R \xrightarrow[r \rightarrow \infty]{} 0$. 利用含有合流超几何函数的积分公式, 得归一化常数

$$N'_{nl} = \left(\frac{2Z'}{n'} \right)^{3/2} \left[\frac{\Gamma(n' + l' + 1)}{2n'(n' - l' - 1)!} \right]^{1/2} \frac{1}{\Gamma(2l' + 2)}. \quad (30)$$

由于 $d=0$ 时, WBEPM 就退化为类氢原子. 因此, 在(29)式和(30)式中, 令 $l' = l + d = l$, $n' = n + d = n$, 则(29)式和(30)式分别退化为文献[14, 15]给出的用合流超几何函数表示的类氢原子的径向波函数及相应的归一化常数.

利用合流超几何函数和广义拉盖尔多项式之间的关系^[13]

$$L_n^\alpha(x) = \frac{\Gamma(\alpha+1+n)}{n! \Gamma(\alpha+1)} F(-n, \alpha+1, x), \quad (31)$$

(29)式可改写成用广义拉盖尔多项式表示的形式

$$R_{nl}(r) = N_{nl} \left(\frac{2Z'r}{n} \right)^{l'} e^{-\frac{Z'}{n}r} L_{n-l'-1}^{2l'+1} \left(\frac{2Z'}{n}r \right), \quad (32)$$

式中归一化常数

$$N_{nl} = \left(\frac{2Z'}{n} \right)^{3/2} \left[\frac{(n'-l'-1)!}{2n' \Gamma(n'+l'+1)} \right]^{1/2}. \quad (33)$$

这就回到了文献[1, 2, 5]最初给出的 WBEPM 的束缚态波函数及其归一化常数的表达式。

4 束缚-连续矩阵元的解析计算公式

文献[5, 6]给出了 WBEPM 中束缚态之间跃迁矩阵元的解析计算公式. 当把 WBEPM 应用于散射问题时, 需计算束缚-连续跃迁矩阵元. 例如在偶极近似下, 计算光电离截面时^[16], 就需计算矩阵元 $\langle n_1 l_1 | r | k l_2 \rangle$ 的值. 下面我们导出 WBEPM 中普遍的束缚-连续跃迁矩阵元 $\langle n_1 l_1 | r^s | k l_2 \rangle$ 的解析计算公式.

束缚-连续跃迁矩阵元定义为

$$\langle n_1 l_1 | r^s | k l_2 \rangle = \int_0^\infty R_{n_1 l_1}^*(r) R_{k l_2}(r) r^s dr. \quad (34)$$

把(17)式和(32)式代入上式并化简, 得

$$\begin{aligned} & \langle n_1 l_1 | r^s | k l_2 \rangle \\ &= N_{n_1 l_1} A_{k l_2} \left(\frac{2Z'_1}{n'_1} \right)^{l'_1} k^{l'_2+1} \int_0^\infty r^{l'_1+l'_2+s+2} e^{-\left(\frac{Z'_1}{n'_1}+ik\right)r} \\ & \quad \times L_{n'_1-l'_1-1}^{2l'_1+1} \left(\frac{2Z'_1}{n'_1}r \right) F(l'_2+1+iZ'_2/k, 2l'_2+2, 2ikr) dr. \end{aligned} \quad (35)$$

把广义拉盖尔多项式的级数表达形式

$$L_n^\alpha(x) = \sum_{t=0}^n (-1)^t \binom{n+\alpha}{n-t} \frac{x^t}{t!} \quad (36)$$

代入(35)式, 得

$$\begin{aligned} & \langle n_1 l_1 | r^s | k l_2 \rangle \\ &= N_{n_1 l_1} A_{k l_2} \left(\frac{2Z'_1}{n'_1} \right)^{l'_1} k^{l'_2+1} \sum_{t=0}^{n'_1-l'_1-1} (-1)^t \binom{n'_1+l'_1}{n'_1-l'_1-1-t} \frac{1}{t!} \left(\frac{2Z'_1}{n'_1} \right)^t \\ & \quad \times \int_0^\infty r^{l'_1+l'_2+s+2+t} e^{-\left(Z'_1/n'_1+ik\right)r} \\ & \quad \times F(l'_2+1+iZ'_2/k, 2l'_2+2, 2ikr) dr. \end{aligned} \quad (37)$$

利用含有合流超几何函数的积分公式^[14]

$$\int_0^\infty Z^v e^{-\lambda Z} F(\alpha, \gamma, kZ) dZ = \Gamma(v+1) \lambda^{-v-1} F(\alpha, \gamma+1, \gamma, k/\lambda), \quad (38)$$

算出(37)式中的积分,并将归一化常数(15)式和(33)式代入(37)式化简合并整理,最后得

$$\begin{aligned} & \langle n_1 l_1 | r^s | k l_2 \rangle \\ &= \left(\frac{2 Z_1'}{n_1'} \right)^{3/2} \left[\frac{(n_1' - l_1' - 1)!}{2 n_1' \Gamma(n_1' + l_1' + 1)} \right]^{1/2} \frac{(2k)^{l_2'+1} |\Gamma(l_2' + 1 - i Z_2'/k)| e^{\pi Z_2'/2k}}{\Gamma(2l_2' + 2)} \\ & \times F\left(l_2' + 1 + i Z_2'/k, 2l_2' + 3, 2l_2' + 2, \frac{2ik}{Z_1'/n_1' + ik} \right) \\ & \times \sum_{t=0}^{n_1' - l_1' - 1} (-1)^t \begin{pmatrix} n_1' + l_1' \\ n_1' - l_1' - 1 - t \end{pmatrix} \frac{1}{t!} \left(\frac{2 Z_1'}{n_1'} \right)^{l_1' + t} \\ & \times \Gamma(l_1' + l_2' + s + t + 3) (Z_1'/n_1' + ik)^{-(l_1' + l_2' + s + t + 3)}. \end{aligned} \quad (39a)$$

上式即为 **WBEP**M 中普遍的束缚-连续跃迁矩阵元的解析计算公式. 使用条件是 $s > -(l_1' + l_2' + 3)$ 和 $|2ik/(Z_1'/n_1' + ik)| < 1$. 若 $|2ik/(Z_1'/n_1' + ik)| > 1$, 则矩阵元的计算公式为

$$\begin{aligned} & \langle n_1 l_1 | r^s | k l_2 \rangle \\ &= \left(\frac{2 Z_1'}{n_1'} \right)^{3/2} \left[\frac{(n_1' - l_1' - 1)!}{2 n_1' \Gamma(n_1' + l_1' + 1)} \right]^{1/2} \frac{(2k)^{l_2'+1} |\Gamma(l_2' + 1 - i Z_2'/k)| e^{\pi Z_2'/2k}}{\Gamma(2l_2' + 3)} \\ & \times (l_2' + 1 - i Z_2'/k) \left(-\frac{Z_1'/n_1' + ik}{2ik} \right)^{l_1' + 1 + i Z_2'/k} \\ & \times F\left(l_2' + 1 + i Z_2'/k, i Z_2'/k - l_2', i Z_2'/k - l_2' - 1, \frac{Z_1'/n_1' + ik}{2ik} \right) \\ & \times \sum_{t=0}^{n_1' - l_1' - 1} (-1)^t \begin{pmatrix} n_1' + l_1' \\ n_1' - l_1' - 1 - t \end{pmatrix} \frac{1}{t!} \left(\frac{2 Z_1'}{n_1'} \right)^{l_1' + t} \\ & \times \Gamma(l_1' + l_2' + s + t + 3) \left(\frac{Z_1'}{n_1'} + ik \right)^{-(l_1' + l_2' + s + t + 3)}. \end{aligned} \quad (39b)$$

5 结 论

本文把 **WBEP**M 推广到散射态, 详细研究了散射态特性. 给出了精确的按“ $k/2\pi$ 标度”归一化的连续波波函数和相移表达式以及扭曲库仑波的解析解. 讨论了散射振幅的解析性质, 指出散射振幅在复 k 平面上的极点正好对应于束缚态能级所在, 由连续波波函数导出了束缚态波函数. 给出了普遍的束缚-连续跃迁矩阵元的解析计算公式. 由于 **WBEP**M 特别适用于描述单价原子(离子), 因此本文给出的结果可望在处理碱原子及类碱离子的散射问题中获得广泛的应用.

我们知道, 量子理论中 **Schrödinger** 方程能够精确求解的例子是非常少的. 每一个精

确可解的例子均具有重要的理论意义且在实际问题中有着广泛的应用. 本文及其他作者的工作说明, 郑能武提出的 WBEPM 的束缚态和散射态均可以精确求解, 是三维可精确求解的又一实例, 并且具有普遍性, 类氢体系作为特例包含其中. 就此而言, WBEPM 已非常令人满意了, 更不用说它在实际问题中还有着广泛的应用.

- [1] 郑能武, 科学通报, **30**(1985), 1801; **31**(1986), 1316; **32**(1987), 354.
- [2] 郑能武, 原子新概论(江苏教育出版社, 南京, 1988), 10.
- [3] 郑能武、李国胜, 物理学报, **42**(1993), 735.
- [4] 杨治虎, 原子与分子物理学报, **11**(1994), 330; **11**(1994), 445.
- [5] 文根旺、王麓雅、王瑞旦, 科学通报, **35**(1990), 1231.
- [6] 文根旺、王瑞旦、王麓雅, 科学通报, **36**(1991), 1137.
- [7] 郑能武、李国胜、王 洪, 文 平, 科学通报, **37**(1992), 2048.
- [8] 郑能武、李国胜, 物理学报, **42**(1993), 727.
- [9] 周光辉、文根旺、段宜武, 原子与分子物理学报, **13**(1996), 104.
- [10] 陈昌远、周荣秋、孙国耀, 原子与分子物理学报, **12**(1995), 336.
- [11] S. M. Younger, *Phys. Rev.*, **A22**(1980), 111.
- [12] E. J. McGuire, *Phys. Rev.*, **A26**(1982), 125.
- [13] 王竹溪、郭敦仁, 特殊函数概论(科学出版社, 北京, 1979), ch. 6.
- [14] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*, 3rd ed. (Pergamon, Oxford, New York, 1977), ch. 5.
- [15] 曾谨言, 量子力学(上册)(科学出版社, 北京, 1981), 第 6 章.
- [16] J. J. Yeh *et al.*, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **32**(1985), 24.

EXACT SOLUTIONS OF SCATTERING STATES IN THE WEAKEST BOUND ELECTRON POTENTIAL MODEL

CHEN CHANG-YUAN SHEN HONG-LAN

(*Department of Physics, Yancheng Teachers College, Yancheng 224002*)

SUN GUO-YAO

(*Department of Physics, Zhongshan University, Guangzhou 510275*)

(Received 16 September 1996)

ABSTRACT

Characteristics of the scattering states in the most weakly bound electron potential model have been studied, and certain analytical solutions of a distorted Coulomb wave were obtained. The normalized wave functions of scattering states on the “ $k/2\pi$ scale” and the calculation formula of phase shift are presented. Analytical properties of the scattering amplitude are discussed, and analytical formulas for calculating bound-continuous transition matrix elements are also given. The results may be useful in a wide class of scattering problems.

PACC: 3110; 0365