

铷原子初末通道碰撞跃迁过程^{*}

屈一至 王建国 李家明

(中国科学院物理研究所, 北京 100080)

(1995 年 12 月 12 日收到)

根据量子数亏损理论, 具有相同角动量特征的无数个分立态和相应的连续态可以形成一个通道. 通过定义重整化广义振子强度密度, 将处理初态到末通道碰撞跃迁过程的方法进行了推广, 统一地处理从初通道到末通道的无数个碰撞激发及电离过程. 以铷原子为例, 分别计算了 $s_{1/2}-p_{1/2}$ 及 $s_{1/2}-s_{1/2}$ 通道之间的碰撞跃迁过程.

PACC: 3480D; 3480K

1 引 言

在辐射物理、等离子体物理、大气物理、空间物理等领域的研究中, 常常需要大量的带电粒子(特别是电子)与原子、离子非弹性碰撞激发和电离截面的数据. 为了更好地评估实验和理论计算产生的截面数据, 并提供建立相应数据库的方法, 我们从通道的角度研究了原子非弹性碰撞跃迁过程的规律. 原子(离子)的非弹性碰撞过程可分成两类, 如果能量转移小于其电离阈值为碰撞激发过程, 对应“束缚-束缚”跃迁; 如果能量转移大于其电离阈值为碰撞电离过程, 对应“束缚-连续”跃迁. 当入射电子能量很高, 可以用 Born 近似计算非弹性碰撞截面. 这时, 微分截面正比于广义振子强度. 根据量子数亏损理论(QDT), 具有相同角动量特征的无数个分立态(里德堡态)和相应的连续态可以形成一个通道. 定义靶原子单位激发能内的广义振子强度为广义振子强度密度, 它是激发能的连续函数, 在能量转移和动量转移空间里形成一个光滑的 Bethe 面^[1-3]. 由此可以统一处理从特定初态到末通道内无限个里德堡态和相应的连续态的微分截面和总截面^[2,3]. 同样, 具有相同角动量特征的所有初态也可以形成“初通道”, 本文通过定义重整化广义振子强度密度, 可以统一处理无限个初态组成的初通道与无限个末态组成的末通道之间的碰撞跃迁. 以铷原子为例, 分别计算了 $s_{1/2}-p_{1/2}$ (光学允许)及 $s_{1/2}-s_{1/2}$ (光学禁戒)通道之间的非弹性碰撞跃迁过程.

2 理论概述

考虑电子与靶原子(离子)碰撞后, 靶从初态 $|n\kappa\rangle$ 激发到末态 $|n'\kappa'\rangle$ 的物理过程. 当入

^{*} 国家高技术研究发展计划、中国工程物理研究院科学技术基金及原子分子数据联合体资助的课题.

射电子能量很高,即入射电子的速度比靶原子中被激发电子的轨道平均速度大得多时,可以用 Born 近似计算截面.这时跃迁的微分截面正比于“广义振子强度”(除特别说明外,本文一律采用原子单位 $m = e = \hbar = 1$)^[4]

$$d\sigma = \frac{2\pi p'}{p v v'} \frac{\mathcal{F}_{n\kappa, n'\kappa'}(\Delta E, Q)}{\Delta E} d(\ln Q^2), \quad (1)$$

其中 p, p' 及 v, v' 为入射电子初末态动量及速度; $Q = p' - p$ 为动量转移, ΔE 为能量转移. 这里末态 $|n'\kappa'\rangle$ 为束缚态,波函数采用态归一. 广义振子强度

$$\mathcal{F}_{n\kappa, n'\kappa'}(\Delta E, Q) = \frac{2\Delta E}{Q^2} \sum_k \frac{|\langle n'\kappa' || T^k || n\kappa \rangle|^2}{(2j+1)(2k+1)}. \quad (2)$$

这里相对论性跃迁矩阵元用多极矩展开的方式计算,其中 j 为初态电子角动量, T^k 为 k 阶多极矩,详细表达式见文献[4].

对碰撞电离过程,靶从初态 $|n\kappa\rangle$ 跃迁到连续态 $|\epsilon'\kappa'\rangle$ 的单位能量微分散射截面

$$d\left(\frac{d\sigma}{d\epsilon'}\right) = \frac{2\pi p'}{p v v' \Delta E} \frac{d\mathcal{F}_{n\kappa, \epsilon'\kappa'}(\Delta E, Q)}{d\epsilon'} d(\ln Q^2), \quad (3)$$

其中末态 $|\epsilon'\kappa'\rangle$ 为连续态,波函数采用能量归一,广义振子强度密度

$$\frac{d\mathcal{F}_{n\kappa, \epsilon'\kappa'}(\Delta E, Q)}{d\epsilon'} = \frac{2\Delta E}{Q^2} \sum_k \frac{|\langle \epsilon'\kappa' || T^k || n\kappa \rangle|^2}{(2j+1)(2k+1)}. \quad (4)$$

为了反映从特定初态到末通道(具有相同的总角动量、宇称和角动量耦合方式,但不同能量的末态形成末通道)碰撞激发及电离过程的规律,在量子数亏损理论框架下,定义碰撞激发过程的广义振子强度密度

$$\frac{d}{d\epsilon} \mathcal{F}_{n\kappa, n'\kappa'}(\Delta E, Q) = N_{n'\kappa'}^2 \mathcal{F}_{n\kappa, n'\kappa'}(\Delta E, Q), \quad (5)$$

其中 $N_{n'\kappa'}^2 = \nu_{n'\kappa'}^3$ 为末态态密度因子^[2,3], $\nu_{n'\kappa'}$ 为有效主量子数. 在通道内,该碰撞激发、碰撞电离的广义振子强度密度在激发能和动量转移空间里形成一个连续的 Bethe 面^[1-3],并在电离阈值处光滑连接.

(2), (4) 式中包含对多极矩矩阵元的平方求和,我们首先讨论各多极矩矩阵元的标度关系,定义能量归一的碰撞激发和碰撞电离多极矩矩阵元分别为

$$\bar{M}_{n\kappa, n'\kappa'}^k = N_{n'\kappa'} \langle n'\kappa' || T^k || n\kappa \rangle / Q, \quad \bar{M}_{n\kappa, \epsilon'\kappa'}^k = \langle \epsilon'\kappa' || T^k || n\kappa \rangle / Q. \quad (6)$$

它们在电离阈值处光滑连接,同时也是动量转移的连续函数^[2].

以上统一地处理了从一个初态到末通道的跃迁过程.而所有具有相同角动量特征的初态也可以形成初通道.我们可以把上述理论方法推广到初通道到末通道的跃迁过程.快电子与原子(离子)间的相互作用相当于“虚光子场”作用于原子(离子)上^[5],当靶原子初末态都在电离阈值以上的时候,它吸收虚光子的过程可以看成靶原子的连续-连续跃迁过程,其逆过程就是韧致辐射.当该韧致辐射发射光子能量 $\omega = \Delta E$ 趋于零、靶原子初末态能量趋于电离阈值时,韧致辐射分波展开的初末态能量归一的跃迁矩阵元(速度公式)具有与 ω^{-2} 成正比的渐近行为^[6].因此我们可以定义连续-连续跃迁的“重整化矩阵元”

$$\tilde{M}_{\epsilon\kappa, \epsilon'\kappa'} = \omega^2 \cdot M_{\epsilon\kappa, \epsilon'\kappa'} = (\Delta E)^2 \langle \epsilon'\kappa' || T^k || \epsilon\kappa \rangle / Q. \quad (7)$$

该重整化矩阵元将平滑地趋近初末态电离阈值.我们可以把这种渐近行为延拓到电离阈

值以下的各激发态. 相应地定义碰撞激发和碰撞电离重整化多极矩矩阵元分别为

$$\widetilde{M}_{n\kappa, n'\kappa'}^k = (\Delta E)^2 N_{n\kappa} \widetilde{M}_{n\kappa, n'\kappa'}^k, \quad \widetilde{M}_{n\kappa, \epsilon'\kappa'}^k = (\Delta E)^2 N_{n\kappa} \widetilde{M}_{n\kappa, \epsilon'\kappa'}^k, \quad (8)$$

其中 $N_{n\kappa}^2$ 为初态态密度因子.

当激发能远大于电离能, 末态电子处于准自由极限下, 由能量动量守恒可知, 矩阵元在 $Q^2 = 2\Delta E$ 附近呈现出极值. 在末态能量及动量转移坐标下, 广义振子强度密度在 $Q^2 = 2\Delta E$ 附近形成一条极值带, 即 Bethe 背脊 (ridge). 为了反映这一特性, 定义 $\widetilde{Q}^2 = Q^2/\Delta E$, 这样所有的极值带都将近似平行于激发能 ϵ 轴. 相应地, 可以定义碰撞激发和碰撞电离的“重整化广义振子强度密度”

$$\frac{d}{d\epsilon} \mathcal{F}_{n\kappa, n'\kappa'} = (\Delta E)^3 N_{n\kappa}^2 N_{n'\kappa'}^2 \mathcal{F}_{n\kappa, n'\kappa'}(\Delta E, \widetilde{Q}), \quad (9)$$

$$\frac{d}{d\epsilon} \mathcal{F}_{n\kappa, \epsilon'\kappa'} = (\Delta E)^3 N_{n\kappa}^2 \frac{d}{d\epsilon} \mathcal{F}_{n\kappa, \epsilon'\kappa'}(\Delta E, \widetilde{Q}). \quad (10)$$

它们同时是初、末态能量以及动量转移的连续函数, 并在初末态的电离阈值上下平滑连接. 因此通过对有限的计算样点进行插值, 我们可以统一地处理初通道到末通道的所有跃迁过程.

3 计算结果和讨论

根据以上的理论分析, 我们计算了铷原子“ $s_{1/2}-p_{1/2}$ ”及“ $s_{1/2}-s_{1/2}$ ”通道之间的重整化矩阵元和重整化广义振子强度密度. 铷原子由具有闭壳层的离子实和一个外层电子组成. 由于该离子实的激发能和电离阈值较高, 原子碰撞跃迁过程主要发生在外层电子上, 可在独立电子近似下较真实地描述铷原子碰撞跃迁过程. 在独立电子近似下, 原子中的电子可以看作彼此独立地在同一自洽场中运动. 根据已建立的相对论自洽场理论方法^[7], 首先求解出原子的相对论性自洽势. 在自洽势的基础上求解狄拉克方程, 得到初末态能级位置和相应的波函

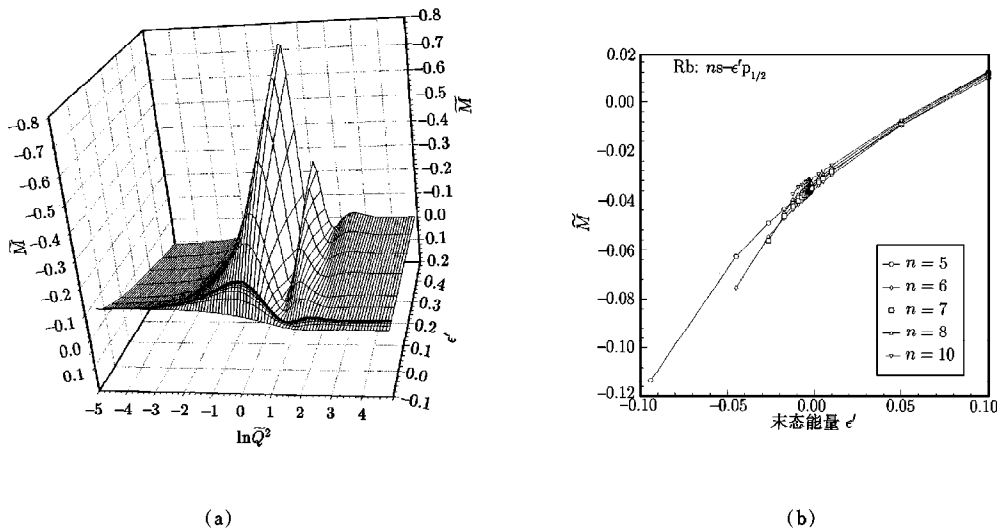


图1 Rb 原子碰撞跃迁重整化矩阵元 (a) $s-\epsilon' p_{1/2}$, (b) $ns-\epsilon' p_{1/2}$ (初态 $n=5, 6, 7, 8, 10$); $\ln \widetilde{Q}^2 = -10.0$

数,从而计算出有关的碰撞跃迁矩阵元、广义振子强度和碰撞跃迁截面^[4].

图 1(a)为 Rb:6s— $\epsilon'p_{1/2}$ 碰撞跃迁重整化矩阵元 $\tilde{M}^1$ 随 $\ln\tilde{Q}^2$ 及末态能量 ϵ' 变化的关系曲线.当末态能量小于零时,对应束缚-束缚的光激发过程;当末态能量大于零时,对应束缚-连续的光电离过程.从图中可见, $\tilde{M}^1$ 在激发能和动量转移空间里连续变化,并在电离阈值处光滑连接.

图 1(b)为 $\ln\tilde{Q}^2 = -10.0$ 处碰撞跃迁重整化矩阵元 $\tilde{M}^1$. 每条曲线对应一个初态 ns ($n=5, 6, 7, 8, 10$) 到一个末通道 $\epsilon'p_{1/2}$ 的碰撞跃迁过程.从图中可见, 每条曲线随末态能量连续变化,并在电离阈值处光滑连接.同时, 图中不同的初态(形成初通道)到末通道曲线非常有规律地紧密排列.在初态能量和末态能量坐标下, 该重整化矩阵元形成一个光滑曲面,并在初态和末态能量零点平滑连接.

为了更好地反映不同的初态(形成初通道)到末通道曲线非常有规律地紧密排列的情况, 图 2、图 3 给出了初通道—末通道重整化广义振子强度密度 $d\tilde{F}/d\epsilon$ 在 $(d\tilde{F}/d\epsilon, \ln\tilde{Q}^2)$ 平面上的投影. 图 2、图 3 还分别给出了 Rb:s—p(光学允许)和 Rb:s—s(光学禁戒)的 $d\tilde{F}/d\epsilon$. 它们展示了重整化广义振子强度密度碰撞激发、电离过程的初通道—末通道的特性.

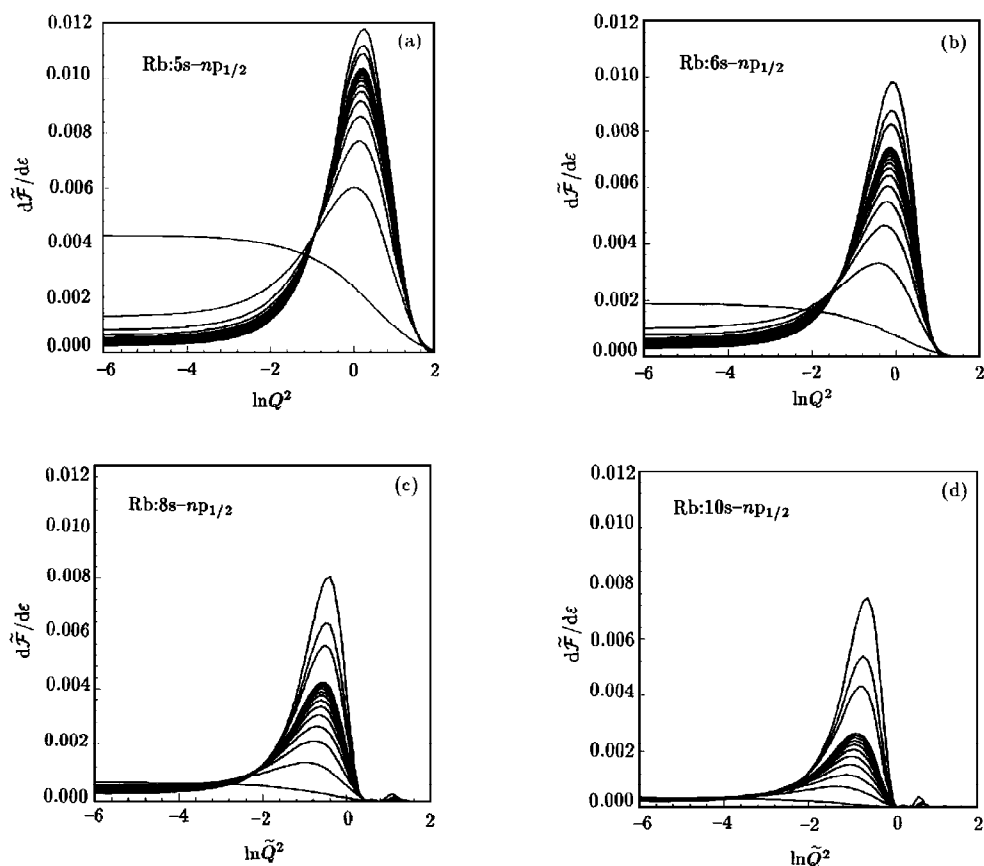


图 2 Rb 原子 s—p 初通道—末通道重整化广义振子强度密度 从主峰看, 末态(由下至上)包括 $n'=6, 7, \dots, 20$ 及连续态 $\epsilon'=0.0025, 0.005, 0.01$ au

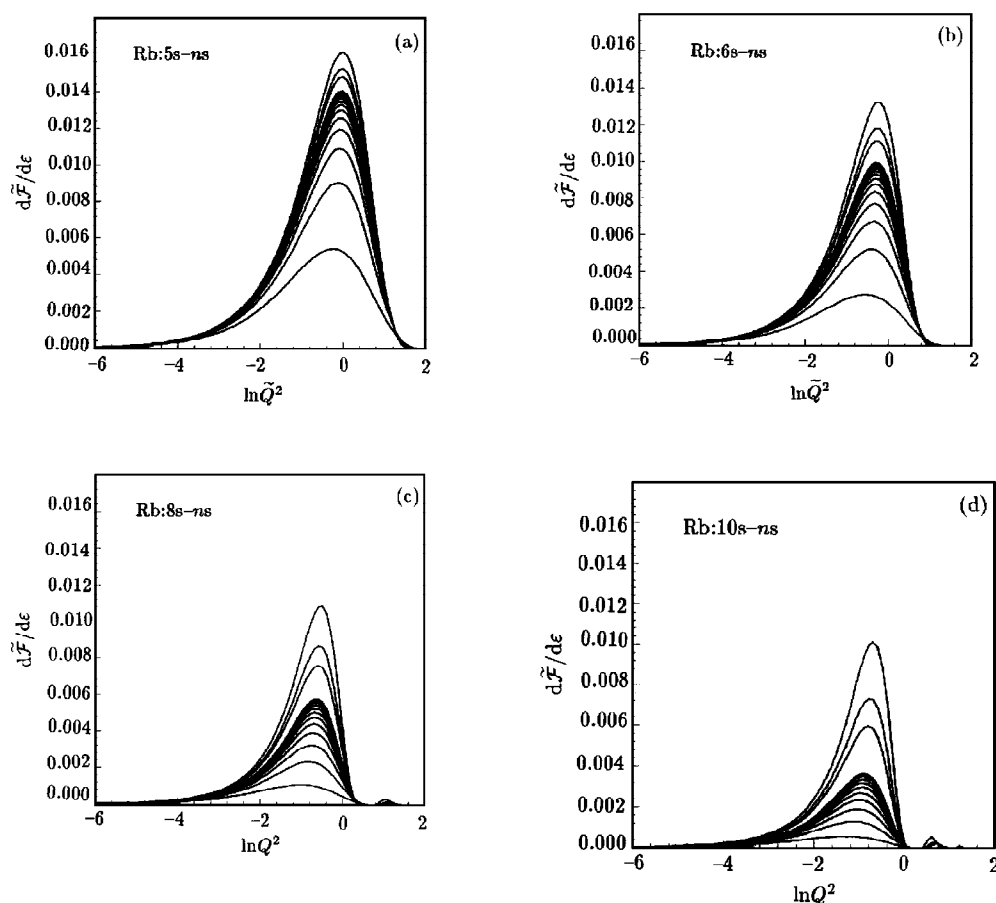


图3 Rb 原子 s—s 初通道—末通道重整化广义振子强度密度 从主峰看,末态(由下至上)包括 $n' = 6, 7, \dots, 20$ 及连续态 $\epsilon' = 0.0025, 0.005, 0.01$ au

可以看出,在末态能量及动量转移坐标下,这样定义的重整化广义振子强度密度同时是初、末态能量及动量转移的连续函数,曲线有规律地紧密排列,并在初末态的电离阈值上下平滑连接。

总之,利用上述碰撞跃迁重整化矩阵元的通道性质,初通道到末通道之间的无数个碰撞激发和电离过程可以统一处理;即通过有限的计算构成样点插值,我们可以方便地得到特定初、末通道之间任意初、末态之间的广义振子强度密度,进而得到跃迁能量和跃迁截面。

对于一般的多电子原子,电子间和关联作用较强,需采用组态相互作用的方法来处理,但预期也有类似的通道性质。

[1] M. Inokuti, *Rev. Mod. Phys.*, **43**(1971), 297.

[2] 田伯刚、李家明, *物理学报*, **33**(1984), 1401.

[3] 潘晓川、李家明, *物理学报*, **34**(1985), 1500.

- [4] 屈一至、仝晓明、李家明, 物理学报, **44**(1995), 1701.
- [5] C. E. Brion, *Comments At. Mol. Phys.*, **16**(1985), 249.
- [6] 王建国、仝晓明、李家明, 物理学报, **44**(1995), 92.
- [7] 李家明、赵中新, 物理学报, **31**(1982), 97.

INELASTIC COLLISION PROCESS OF Rb ATOM BETWEEN INITIAL AND FINAL CHANNELS

QU YI-ZHI WANG JIAN-GUO LI JIA-MING

(*Institute of Physics, Academia Sinica, Beijing 100080*)

(Received 12 December 1995)

ABSTRACT

Based on the quantum defect theory, the infinite Rydberg states and its adjacent continue states with the same angular momentum property will form a channel. Previous studies have considered the collision-induced transitions from a single initial state to a final channel. Here we extend these theory to include all possible transitions between two channels. By defining a renormalized generalized oscillator strength density (GOSD) which varies smoothly across threshold, the inelastic collisions from an initial channel to a final channel can be treated in a unified manner. As an example, we present the renormalized GOSD of the Rb atom from s-initial to p-final channel, and also from s-initial to s-final channel.

PACC: 3480D; 3480K