

АДИЈАБАТСКА РЕПРЕЗЕНТАЦИЈА ТЕОРИЈЕ ПЕРТУРБАЦИЈЕ ЗА НЕЕЛАСТИЧНЕ ЕЛЕКТРОН-АТОМСКЕ СУДАРЕ

Р. К. Јанев, Институт за физику, Београд и
В. Д. Об'едков, Ленинградски Универзитет, СССР.

АБСТРАКТ

Извршена је унитарна трансформација амплитуде прелаза код електрон-атомских нееластичних судара. За базис нове репрезентације изабране су адијабатске функције $\chi(\alpha)$ које при $\alpha \rightarrow 0$ прелазе у ортонормирани базис сопствених функција атомског хамилтонијана. Оператор унитарне трансформације нађен је у апроксимацији два стања и помоћу њега одређене су амплитуде директног и изменског прелаза. Дискутована је неједнозначност амплитуде Борна — Очура. Метод је илустриран на примеру $e-H$ расејања, што ниуколико не умањује његову општост.

1. У в о д

Последњих година у теорији атомских судара, особено у сударима тешких честица [1—3], интензивно је дискутовано питање избора базиса у коме се израчунава матрица интеракције. Недијагнални елементи ове матрице одговорни су за прелаз у систему. Одређени избор базисних функција одређује репрезентацију и при егзактном решавању проблема избор репрезентације је ирелевантан за коначне резултате. Међутим избор репрезентације одражава се на резултате у апроксимативним приступима проблему (на пр. задржавајући коначан број стања у развоју тоталне таласне функције система по неком ортонормираном скупу функција, коришћење метода теорије пертурбације итд.). Познато је да развој укупне таласне функције по сопственим функцијама молекуларног хамилтонијана (метод ЛКМО) има одређене предности над методом ЛКАО (који за базис користи атомске орбитале) при третирању судара тешких честица при ниским енергијама. Метод ЛКМО лежи у основи тзв. адијабатске репрезентације и последица његове примене при одређивању енергетских стања система је тзв. теорема Нојманна-Вигнера о непресецању термова исте симтерије. При високим енергијама судара метод ЛКАО поједностављује проблем и даје задовољавајућу тачност, али теорема Нојмана Вигнера у њему се нарушава. Овај базисни скуп функција лежи у основи тзв. „дијабатске” репрезентације [2].

У пертурбационом приступу проблему електрон-атомског расејања било је уобичајено коришћење дијабатске репрезентације, где за базисни скуп ортонормираних функција служи $\{\Phi_\alpha\}$ скуп сопствених функција атомског хамилтонијана. Међутим малост недијагоналних елемената матрице интеракције $\langle \Phi_\alpha | \hat{V} | \Phi_\beta \rangle$ обично није довољна у реалним процесима, те први ред теорије пертурбације даје задовољавајуће резултате тек при врло високим енергијама (реда стотине KeV). При ниским енергијама пресеци појединих процеса у првој апроксимацији обично се разликују од експерименталних за фактор 1,5—2. Поред тога у изменском расејању, први ред теорије пертурбације даје резултате који не поштују конзервационе законе. Све ово говори о неадекватности дијабатске репрезентације код описивања нискоенергетског расејања помоћу метода теорије пертурбације. Због тога у овој области енергија развијени су други методи за израчунавање амплитуде прелаза, било егзактнијим описивањем динамике процеса (апроксимација изобичених таласа, апроксимација силне спреге, методи теорије поља и тд.), било потпунијим укључивањем оператора интеракције (метод поларизованих орбитала, метод Шварца, оптички модел итд.).

Међутим, генерално, сама дијабатска репрезентација није јединствена нити априори приоритетна од могућих других за описивање процеса судара електрона са атомом. Унитарним трансформацијама може се са дијабатског базиса прећи на неки други у коме оператор пертурбације може да буде мањи и да итеративни поступци брже конвергирају. Прва алтернатива дијабатској репрезентацији била би адијабатска. Док у дијабатској репрезентацији дијагонализује се оператор кинетичке енергије, дотле у адијабатској репрезентацији матрица интеракције има дијагонални вид. При унитарној трансформацији са дијабатског базиса на адијабатски (дијагонализација оператора \hat{V}) унитарни оператор A треба да обезбеђује потребну малост оператора пертурбације у новој репрезентацији и одређене граничне услове. Ови гранични услови се свде на то да при врло великим растојањима упадног електрона од атома, обе репрезентације треба да се подударују. Критеријум малости оператора пертурбације може да буде поређење теоријског пресека у новој репрезентацији у неком реду теорије претурбације са експерименталним.

2. Амплитуда директног прелаза

У дијабатској репрезентацији таласна функција упадног електрона (односно пројекције вектора стања на разне канале) у безизменској апроксимацији, одређује се матричном једначином (користе се свуда атомске јединице)

$$\hat{L} F(\vec{r}) = \hat{U} F(\vec{r}) \quad (1)$$

$$\hat{L} = \hat{T} - \frac{k^2}{2}, \quad \frac{k^2}{2} = E - \epsilon$$

где су $\hat{T} = -\frac{1}{2} \nabla^2$ — оператор кинетичког кретања,

\hat{U} — оператор интеракције ($U_{ik} = \langle \Phi_i | \hat{V} | \Phi_k \rangle$),

E — тотална енергија система,

ϵ_i — сопствене енергије атома,

$F(\vec{r})$ — матрица стања инцидентног електрона.

Матрице T и $k^2/2$ у овој репрезентацији су дијагоналне.

У апроксимацији два стања $F(\vec{r})$ је дво-компонентна матрица — колона, а V је квадратна матрица. У овој апроксимацији амплитуда директног прелаза $1 \rightarrow n$ у првом реду теорије пертурбације (Борнова апроксимација) даје се изразом

$$f_n^B = -\frac{1}{2\pi} \int e^{-i\vec{k}_n \cdot \vec{r}} U_{n1}(\vec{r}) e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}} d\vec{r}. \quad (2)$$

Извршимо сада унитарну трансформацију базиса $\{\Phi_\alpha\}$

$$\chi = A\Phi. \quad (3)$$

Онда матрица F постаје $G = AF$, а матрица интеракције U трансформише се као

$$A^{-1} \hat{U} A = \hat{\Lambda} \quad (4)$$

У новој репрезентацији једначина (1) постаје

$$\hat{\mathcal{L}} G(\vec{r}) = \hat{\Lambda} G(\vec{r}), \quad (5)$$

где оператор $\hat{\mathcal{L}} = A^{-1} L A$ има облик

$$\hat{\mathcal{L}} = \hat{L} + \hat{t} - \frac{\hat{x}^2}{2} \quad (6)$$

а \hat{t} и $\frac{\hat{x}^2}{2}$ су дијабатске корекције на оператору \hat{L} . При том $\hat{t} = -A^{-1} \nabla A \nabla$

док $\frac{\hat{x}^2}{2}$ се добија из $A^{-1} \frac{\hat{x}^2}{2} A$ после издвајања дијагоналног дела.

Користећи (5) и (6) можемо добити једначину за $G(\vec{r})$ сличну једначини (1):

$$\hat{L} G(\vec{r}) = \hat{U} G(\vec{r}), \quad (7)$$

где оператор \hat{U} има облик

$$\hat{U} = \hat{\Lambda} - \hat{t} + \frac{\hat{x}^2}{2}. \quad (8)$$

Оператор $\hat{\Lambda}$ има само дијагоналне матричне елементе док оператори \hat{t} и $\hat{x}^2/2$ имају и недијагоналне елементе.

Једначина (7) има идентичан облик као и једначина за матрицу $F(r)$ (1). Решавајући је по теорији пертурбације у првој апроксимацији добијамо

$$\vec{f}_n^B = -\frac{1}{2\pi} \int e^{-i\vec{k}_n \cdot \vec{r}} U_{n1}(r) G_1^{(0)}(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (9)$$

где $G^{(0)}(\vec{r})$ је нулта апроксимација за матрицу $G(\vec{r})$. (Тилдом ћемо означавати величине у адијабатској репрезентацији).

Установимо сада конкретни облик матрице A у апроксимацији два стања. Пошто у овом случају унитарна матрица која дијагонализује квадратну матрицу U поклапа се са матрицом трансформације координатног система који ротира у равни, то њен облик је

$$A = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix}, \quad \alpha = \alpha(r). \quad (10)$$

Из услова дијагонализације (4) добијамо

$$2\alpha = \arctg \frac{2U_{1n}}{U_{nn} - U_{11}}. \quad (11)$$

При великим растојањима електрона од атома ($r \rightarrow \infty$) матрични елемент $U_{1n}(r) \rightarrow 0$, и адијабатска репрезентација прелази у дијабатску $\{\chi\} \rightarrow \{\Phi\}$. Одавде следи овај гранични услов за A

$$r \rightarrow \infty, \quad A \rightarrow I, \quad (12)$$

где I је јединична матрица. Лако је видети да матрица (10) задовољава услов (12) јер $\alpha(r) \underset{r \rightarrow \infty}{\sim} 0$. Са матрицом (10) налазимо

$$\chi_1 = \cos \alpha \Phi_1 - \sin \alpha \Phi_n, \quad (13)$$

$$\chi_n = \sin \alpha \Phi_1 + \cos \alpha \Phi_n,$$

$$\frac{x^2}{2} = \begin{pmatrix} k_1^2 - k_n^2 \\ 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\sin^2 \alpha & \sin \alpha \cos \alpha \\ \sin \alpha \cos \alpha & \sin^2 \alpha \end{pmatrix}. \quad (14)$$

Елементи матрице t се израчунавају такође непосредно. Дијагонални елементи матрице Λ имају облик

$$\lambda_{1,2} = \frac{U_{11} + U_{nn}}{2} \pm \sqrt{\frac{(U_{11} - U_{nn})^2}{4} + U_{1n}^2}. \quad (15)$$

С обзиром на гранични услов (12) решење нулног реда за функцију $G_1^{(0)}(\vec{r})$ има облик

$$G_1^{(0)}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}}$$

те амплитуда прелаза постаје

$$\tilde{f}_n^B = -\frac{1}{2\pi} \int e^{-i\vec{k}_n \cdot \vec{r}} U_{n1}(r) e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}} d\vec{r} \quad (17)$$

где

$$U_{n1}(r) = \frac{\Delta\varepsilon}{2} \sin 2\alpha - t_{n1} \quad (18)$$

а $\Delta\varepsilon = \varepsilon_1 - \varepsilon_n$. Ако је $\alpha(r)$ глатка функција (тачније ако су испуњени услови $|\alpha'| \ll |\alpha|$ и $|\alpha''| \ll |\alpha|$) онда t_{n1} у (18) се може занемарити и добијамо следећу адијабатску формулацију Борновске амплитуде директног прелаза

$$\tilde{f}_n^B \approx -\frac{\Delta\varepsilon}{2\pi} \int e^{-i\vec{k}_n \cdot \vec{r}} \sin 2\alpha e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}} d\vec{r} \quad (19)$$

Ова апроксимација обезбеђује правилну енергетску зависност пресека при великим енергијама, а \tilde{f}_n је ограничена при било којим интеракцијама.

При граничном прелазу на врло мала $\alpha(r)$ из (19) се добија дијабатска формула (2).

Уместо дијагонализације матрице U могло би се дијагонализовати матрица $U - \varepsilon_i$ (ε_i — сопствене вредности енергије атома). И у овом случају матрица унитарне трансформације остаје облика (10), али параметар $\alpha(r)$ је сада дефинисан изразом

$$2\alpha = \arctg \frac{2U_{1n}}{U_{nn} + \varepsilon_n - U_{11} - \varepsilon_1} \quad (20)$$

У овом случају амплитуда прелаза даје се формулом

$$\tilde{f}_n^B = \frac{1}{2\pi} \int e^{-i\vec{k}_n \cdot \vec{r}} t_{n1} e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}} d\vec{r} \quad (21)$$

Репрезентација (20)—(21), која дијагонализује матрицу $U - \varepsilon$, може се назвати адијабатском у правом смислу јер у оператору прелаза учествују само адијабатски елементи t_{n1} . Репрезентација (11), (17) у којој у оператору прелаза U_{n1} улази разлика енергија стања $\Delta\varepsilon$, може се назвати квазиадијабатском.

3. Изменска амплитуда

Не умањујући општост метода, ми ћемо изменско расејање третирати на случају $e-H$ из разлога једноставности математичких израза.

У дијабатској репрезентацији изменско расејање електрона (координата r_1) на атому водоника описује се једначином

$$\hat{L}F(\vec{r}_1) = \hat{U}F(\vec{r}_1) \pm \int \hat{K}F(\vec{r}_2) d\vec{r}_2 \quad (22)$$

где оператор K има елементе облика

$$K_{n1}^{(1,2)} = 2\Phi_1(\vec{r})\Phi_n^*(\vec{r}) \left[E - (\epsilon_n - \epsilon_1) - \frac{1}{r_{12}} \right] \quad (23)$$

а знаци „+” и „—” одговарају синглетном и триплетном случају, респективно. Амплитуда изменског прелаза $1-n$ има облик

$$g_n = -\frac{1}{2\pi} \int e^{-i\vec{k}_n \cdot \vec{r}} \hat{K}_{n1}(1,2) F_1(\vec{r}_2) d\vec{r}_2 \quad (24)$$

где у апроксимацији Борна-Оппенхеимера функција $F_1(\vec{r}_2)$ замењује се равним таласом $\exp(i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_2)$.

Извршимо прелаз на адијабатски базис у (22). Добија се:

$$\hat{L}G(\vec{r}_1) = U G(\vec{r}_1) \pm A^{-1}(r) \int \hat{K}(1,2) A(r_2) G_1(\vec{r}_2) d\vec{r}_2 \quad (25)$$

одакле за амплитуду изменског расејања се добија

$$\tilde{g}_n = \frac{1}{2\pi} \int e^{-i\vec{k}_n \cdot \vec{r}} A^{-1}(r_1) \int K_{n1}(1,2) A(r_2) G_1(\vec{r}_2) d\vec{r}_2 d\vec{r}_1. \quad (26)$$

Израчунавајући (26) експлицитно користећи трансформације (10)—(13) и гранични услов (12), примењен на $G_1(\vec{r}_2)$ добијамо амплитуду Борна-Оппенхајмера у адијабатској репрезентацији:

$$\tilde{g}_n^{BO} = -\frac{1}{2\pi} \int e^{-i\vec{k}_n \cdot \vec{r}} \chi_n^*(\vec{r}_2) \left(\frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_2} \right) \chi_1(\vec{r}_1) e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_2} d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \quad (27)$$

Овакав исти облик има изменска амплитуда Борна-Оппенхајмера и у дијабатској репрезентацији само што уместо функција χ_α тамо стоје функције Φ_α .

Познато је да амплитуда Борна-Оппенхајмера при ниским енергијама има низ недостатака (пресек за $s-s$ прелазе које она даје премашује теоријску границу дату конзервационим законима) [4]. Очкур [5] је одстранио ове њене недостатке развијајући је у асимптотски ред по k_1 и задржавајући само први члан реда. Процедура Очкура се може спровести и над амплитудом (27) и то доводи до следеће амплитуде Борна-Очкура:

$$\tilde{g}_n^{BO\epsilon} = -\frac{2}{k_1^2} \int e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \chi_n^*(\vec{r}) \chi_1(\vec{r}) d\vec{r} \quad (28)$$

где $\vec{q} = \vec{k}_1 - \vec{k}_n$ је предати импулс.

С друге стране, амплитуда директног прелаза у дијабатској репрезентацији може се написати у облику [4]

$$f_n = -\frac{2}{q^2} \int e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \Phi_n^*(\vec{r}) \Phi_1(\vec{r}) d\vec{r} \quad (29)$$

Поредећи (28) и (29) добијамо:

$$\tilde{g}_n^{0\varepsilon} = \frac{q^2}{k_1^2} \tilde{f}_n \quad (30)$$

где се \tilde{f}_n добија из f_n заменом Φ са χ у складу са (13).

Формуле (28) и (30) указују на неједнозначност амплитуде Борна-Очкура у том смислу што она са једнаким степеном тачности може да буде написана у произвољном базису $\chi = A\Phi$ (A — унитарни оператор). Пошто оператор A је произвољан (са ограничењем (12)), то у сваком конкретном случају он се може изабрати најоптималније. Ми смо овде дискутовали само две његове могуће репрезентације, адијабатску и квазиадијабатску.

Приметимо у закључку да метод који смо овде изнели и илустровали на апроксимацији два стања је општ и он се може применити на апроксимацију произвољног броја стања. Другим речима може се формулисати једна адијабатска репрезентација метода силне спреге. Међутим одређивање матрице унитарне трансформације у овом случају није тако тривијално, као што је то било случај у апроксимацији два стања.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] D. R. Bates, in „Atomic and Molecular Processes”. Acad. Pres, N. Y. 1962.
- [2] W. Lichten, Phys. Rev. **131**, 229 (1963).
- [3] F. T. Smith, Phys. Rev. **179** (№ 1) 111 (1969)
- [4] B. L. Moiseiwotsch, S. J. Smith, Rev. Mod. Phys. **50** 238 (1968).
- [5] V. I. Очкур, ЖЕТФ, **54**, 734 (1963).

R. K. Janev, V. D. Ob'edkov

ADIABATIC REPRESENTATION OF THE PERTURBATION THEORY FOR INELASTIC ELECTRON-ATOM COLLISIONS

A unitary transformation is applied to the inelastic electron-atom scattering amplitude. As a basis of the new representation the adiabatic wave functions are used. These functions for large electron-atom distances become the eigenfunctions of the atomic Hamiltonian. The operator of the unitary transformation is found in two-state approximation. In this approximation the explicit forms for adiabatic direct and exchange amplitudes are found. The nonuniqueness of the Born-Ochkur exchange amplitude is discussed.

Institute of Physics, Belgrade
Lenigrad State University, USSR