

Rb 原子里德伯态的 l 混合跃迁 截面及标度律

刘 鸿 陈暖球 李白文

中国科学院武汉物理研究所波谱与原子分子物理开放研究实验室, 武汉, 430071

1991年1月28日收到

本文在冲击近似方法的基础上, 采用一种有解析解的唯象势波函数, 计算了高里德伯态 Rb 原子与稀有气体 (He, Ne) 热碰撞的 l 混合截面, 并与实验及其它理论结果进行了比较。计算结果表明, 上述截面与主量子数 n 的关系满足某种标度律。

PACC: 3150; 3120

一、引 言

里德伯态原子与稀有气体原子碰撞的 l 混合跃迁过程是里德伯态原子研究中的一个重要课题, 这是因为这类碰撞在激光、核聚变、材料和射电天文科学等高新技术部门有重要应用前景。另外, 对这一过程的研究, 将有助于对一般三体碰撞过程的深入理解和处理。

自从 Gallagher^[1-3] 首次作了高里德伯态 ($n = 8-15$) Na 原子与稀有气体热碰撞实验后, 关于高里德伯态碱原子与稀有气体热碰撞的研究已有许多工作。对于重碱原子, Hugon^[4] 等人作了高里德伯态 Rb 原子与稀有气体热碰撞 ($T = 520\text{K}$) 的实验, 发现高里德伯态 Rb 原子经过热碰撞会由初态 (nF) 跃迁到附近的态 ($nl', l' > 3$) 上。即角动量混合过程主要在态 ($nF, G, H, \dots$) 之间进行。实验和理论结果都表明, Rb 原子的 l 混合截面值无论在数量级上还是与主量子数 n 的关系上都与 Gallagher 的 Na 原子的 l 混合截面有相同的特点, 起决定作用的是价电子的行为。

在理论研究方面, 对于 Na 原子的低 n 区 ($n \leq 8$), Olson^[5] 采用适合强耦合区的耦合道方法, 用双态模型计算了 Na 原子的 l 混合截面。在高 n 区 ($n > 15$) 的主要方法是半经典方法^[6]、Born 近似方法^[7]和冲击近似方法^[8-10]。这些理论方法都是建立在 Fermi^[11] 的自由电子模型的基础上, 在计算中一般采用 H 原子波函数和 CA 波函数。但对中 n 区 ($8 \leq n \leq 15$), 现在还没有适当的理论方法得出与实验相一致的结果。我们在文献[9]中采用了一种唯象势波函数, 由此计算的 Na 原子中 n 区的 l 混合截面比其它理论方法的结果有明显的改进。对于 Rb 原子的 l 混合截面的研究, Prunele 等人^[12] 采用半经典方法计算了 Rb 原子的 l 混合截面。计算过程中对 $|nl\rangle$ 态电子与稀有气体 B 原子碰撞散射截面是取其状态平均值 $\langle \sigma_e \rangle_{nl}$, 在此基础上计算出处于 $|nl\rangle$ 态与 B 原子碰撞几率, 由此得到 Rb-B 的 l 混合截面。其计算结果的数量级与实验基本一致, 但随主量子数变化的趋势与实验有相当的差距, 特别在较大 n 时与实验偏差更大。

本文的工作是在冲击近似方法基础上,用唯象势波函数计算 Rb 原子的 $n = 9-21$ 的跃迁形状因子,并由此计算了 Rb 原子 ($n = 9-21$) 在 $T = 520\text{K}$ 时与稀有气体 He, Ne 热碰撞的 l 混合截面. 计算结果与实验及其它理论结果进行了比较. 并讨论了截面与主量子数 n 满足的标度关系.

二、计算方法

里德伯态原子 A^{**} 与稀有气体 B 原子的热碰撞过程



是一个复杂的三体过程,即原子实 A^+ 、价电子和 B 原子三者之间的相互作用过程. Fermi^[1] 为了解决高里德伯态原子 A^{**} 与稀有气体 B 原子热碰撞引起的谱线移动问题时提出了自由电子模型:高激发态价电子受到的原子实束缚很弱,可以看作为一个自由电子,碰撞过程主要是价电子与 B 原子的碰撞,略去了原子实 A^+ 与 B 原子的相互作用. 因此, A^{**} 原子与 B 原子的碰撞过程可简化为电子与 B 原子的碰撞:



在冲击近似方法下,里德伯态原子 A^{**} 与 B 原子的散射振幅可表示为(本文采用原子单位)

$$F_s(nlm \rightarrow n'l'm' | Q) = \mu \int \varphi_{n'l'm'}^*(K-Q) f_s(K \rightarrow K-Q) \varphi_{nlm}(K) d^3k, \quad (3)$$

其中 K 为电子碰撞前的动量, $K' = K - Q$ 为电子碰撞后的动量 (Q 为转移动量), μ 为系统的折合质量, f_s 为电子与稀有气体 B 原子碰撞的散射振幅, $\varphi_{nlm}(K)$ 为电子在动量空间的波函数.

在低能近似下 ($K \approx 0$), 对于电子与 B 原子碰撞的散射振幅,我们采用 O'malley^[2] 近似公式

$$f_s(K \rightarrow K-Q) = -L - \pi\alpha Q/4, \quad (4)$$

其中 L 为 B 原子的零能散射长度, α 为 B 原子的偶极极化率. 在我们的计算中,采用以下数值^[13]:

$$\text{He}: L = 1.19, \alpha = 1.384; \quad \text{Ne}: L = 0.24, \alpha = 2.663.$$

对(3)式经过适当的推导,可以得到 $|nl\rangle \rightarrow |n'l'\rangle$ 的跃迁截面为

$$\begin{aligned} \sigma(nl \rightarrow n'l') &= \int f_s(nlm \rightarrow n'l'm' | Q) dQ \\ &= 2\pi\mu^2/K^2 \int_{Q_{\min}}^{Q_{\max}} (-L - \pi\alpha Q/4)^2 F_{nl'n'l'}(Q) Q dQ, \end{aligned} \quad (5)$$

其中 K 为系统的相对运动动量, $F_{nl'n'l'}$ 称为平方形状因子,即

$$F_{nl'n'l'}(Q) = (2l'+1) \sum_{\lambda} (2\lambda+1) \begin{pmatrix} l & l' & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}^2 |\langle n'l' | J_{\lambda}(Qr) | nl \rangle|^2, \quad (6)$$

其中 $J_{\lambda}(Qr)$ 为球贝塞耳函数, $\begin{pmatrix} l & l' & \lambda \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ 为 $3j$ 系数. $|nl\rangle$ 和 $|n'l'\rangle$ 分别为碰撞前后价电子的波函数. (5)式中的 Q 积分上、下限 $Q_{\max}, Q_{\min}$ 可由动量守恒和能量守恒定律得

出

$$K + K = K' + K', \quad K^2/2\mu + E_{nl} = K'^2/2\mu + E'_{nl}, \quad (7)$$

$$\text{即} \quad Q_{\max} = K + K' \approx 2K, \quad (8)$$

$$Q_{\min} = |K - K'| = \mu |E_{nl} - E'_{nl}|/K, \quad (9)$$

其中 $K = \sqrt{8\mu K_B T/\pi}$, K_B 为玻耳兹曼常数, T 为温度, E_{nl} 为 Rb 原子 $|nl\rangle$ 态的能量。

为了计算平方形状因子, 需要确定价电子的波函数。我们在文献[14]中提出了一种唯象势模型, 根据这个模型, 碱原子中价电子所受到的原子实屏蔽势为

$$V(r) = -2[(1 + \delta + \beta'/(r + \gamma')^2 + \kappa'/(r + \zeta')^2)]/r, \quad (10)$$

其中 δ 为离化度, β', γ', κ' 和 ζ' 为待定参数。即碱原子的波函数的形式为 $\Psi_{nlm} = R_{nl} Y_{lm}$, Y_{lm} 为球谐函数, 其径向波函数 R_{nl} 满足 Schrödinger 方程

$$[-1/r^2 d/dr(r^2 d/dr) + l(l+1)/r^2 + V(r)]R_{nl} = E_{nl}R_{nl}. \quad (11)$$

由此所得到的波函数 R_{nl} 有以下形式的解析解:

$$R_{nl} = C_{nl} \exp(-\rho/2) \rho^s (\rho + y)^t (\rho + \zeta)^u \sum_{\nu} a_{\nu} \rho^{\nu}, \quad a_0 = 1, \quad (12)$$

其中 $\rho = \alpha r$, $y = \alpha y'$, $\zeta = \alpha \zeta'$, $\alpha = 2(1 + \delta)/(n - \delta_{nl})$, δ_{nl} 为 (nl) 态的量子亏损值, 势参数和 R_{nl} 式中的参数 s, t, u 以及系数 a_{ν} 可由解一组非线性方程得到(具体过程可参见文献[14]), 其中量子亏损为唯一输入参数。

我们利用唯象势波函数计算了 Rb 原子 $n = 9-21$ 的形状因子 $F_{nl n' l'}$, 并由此计算了 Rb 原子 $n = 9-21$ 的 l 混合截面。

三、结果与讨论

利用(5),(6)式及碱原子唯象势波函数, 我们计算了 Rb 原子 ($n = 9-21$) 与稀有气体 B 原子 (He, Ne) 热碰撞 ($T = 520\text{K}$) 所发生的跃迁过程 $nF \rightarrow n'l' (l' = 4, 5, 6, \dots, n-1)$ 的截面 $\sigma(nF \rightarrow n'l')$, 并由此得到了 Rb-B 碰撞的 l 混合截面

$$\sigma_{\text{RbB}}(n) = \sum_{l'=4}^{n-1} \sigma(nF \rightarrow n'l'). \quad (13)$$

计算结果见表 1。

由表 1 可看出: 对 Rb-He 碰撞的 $n = 9, 11, 13$ 的截面值, 文献[12]比本文的计算值要好, 但是, 从 $n = 15$ 开始的截面值, 本文的计算值要比文献[12]更接近实验值。随着 n 的增大, 本文计算的截面值基本上与实验值一致, 而文献[12]的截面值与实验值的偏差随 n 的增大而增大。对 Rb-Ne 碰撞, 由于没有可供比较的实验值, 我们只列出了理论计算结果。

关于 l 混合截面在较大 n 下的渐近行为已有一些分析和研究。Hickman 在文献[7]中根据条件: ①碱原子高里德伯态 $(nl), (n'l')$ 为近简并, 可以认为 $Q_{\min} = 0$; ②电子与稀有气体 B 原子碰撞截面取为零能散射截面 $4\pi L^2$, L 为零能散射长度; 这两个条件在较大 n 下都是满足的。在此基础上, 采用 Born 近似方法通过计算拟合得到了在较高激发

表 1 Rb 原子与 He, Ne 原子热碰撞 l 混合截面(单位: $10^3 \text{ \AA}^2$, $T = 520\text{K}$)

主量子数	Rb-He			Rb-Ne	
	实验值 ^[2]	文献[12]的理论值	本文	文献[12]的理论值	本文
$n = 9$	0.870 ± 0.175	1.74	3.84	0.548	2.08
$n = 11$	1.05 ± 0.20	1.51	2.41	0.411	1.22
$n = 13$	1.00 ± 0.20	1.27	1.44	0.323	0.541
$n = 15$	0.810 ± 0.160	1.11	0.996	0.254	0.348
$n = 17$	0.560 ± 0.140	0.956	0.692	0.217	0.224
$n = 19$	0.470 ± 0.120	0.855	0.512	0.190	0.157
$n = 21$	0.440 ± 0.130	0.764	0.405	0.162	0.121

态下 Na 原子与 He 原子热碰撞 l 混合截面渐近式

$$\sigma_{\text{NaHe}}(n) = 4\pi L^2 D / v^2 n^{2.733}, \quad (14)$$

其中 D 为一参数, L 为 Na-He 的零能散射长度, v 为在温度 T 下 Na-He 系统的相对运动速度。(14)式能较好地描述 Na-He 碰撞 l 混合截面在大 n 下的渐近行为。但是, 此式不能反映 Na 原子与不同稀有气体原子 B(He, Ne) 碰撞 l 混合截面的不同的渐近行为, 因为式中反映不同的稀有气体原子的特性仅在于 L 的不同。另外(14)式也不能描述其它碱原子与稀有气体碰撞的情况。

在考虑了碱原子中电子 e 与稀有气体 B 原子的碰撞截面随 n 变化行为和采用唯象势波函数描述碱原子后, 通过计算和分析我们发现, 无论是轻碱原子 Na 还是重碱原子 Rb, 它们与稀有气体原子碰撞的 l 混合截面在较大 n 下渐近式均可简单表示为 $\sigma_{l\text{mix}} = A/n'$, A 为一与系统的相对运动速度有关的参数。利用文献[9]中采用的冲击近似方法计算的 Na 与 He, Ne 的 l 混合截面, 采用最小二乘方法对 $n = 12, 13, 14, 15$ 的 Na-He 和 Na-He 的 l 混合截面进行拟合可得到符合标度律 $\sigma = A/n'$ 的参数, 即

$$\text{Na-He: } \tau = 2.733, A = 1804.3; \quad \text{Na-Ne: } \tau = 3.262, A = 1950.3.$$

由这些参数所得到的截面值在较大 n 下与理论计算值和实验值符合得很好。这说明 Na 原子与稀有气体 He, Ne 原子的热碰撞 l 混合截面在较大 n 下具有形式简单的标度律。另外, 从我们的 Na-He 的参数 τ 与 Hickman 的 2.733 值的一致性可以看出 Born 近似方法和冲击近似方法所计算的 Na-He 碰撞的 l 混合截面的渐近行为是一致的。这主要是因为碱原子中电子 e 与 He 原子碰撞的截面随 n 变化不大。本文计算的 Rb-He 和 Rb-Ne 热碰撞 l 混合截面值也符合这个标度律, 对 $n = 15, 17, 19, 21$ 的截面值进行拟合可得

$$\text{Rb-He: } \tau = 2.684, A = 1408.7; \quad \text{Rb-Ne: } \tau = 3.155, A = 1748.2.$$

比较 Rb 和 Na 原子的情况可以看出: Rb 和 He 或 Ne 原子碰撞的参数 τ 和 Na 原子的相应参数基本上是一致的, 只有很小的差别, 这个差别来源于 Rb 原子的碰撞初态为 nF 态, 而 Na 原子的初态为 nD 态。但是, Na 原子或 Rb 原子与 He, Ne 原子碰撞的参数 τ 有较大差别。计算表明, 这种差别是由于原子中电子与 He, Ne 原子的碰撞截面随 n 的不同变化行为所引起的, 即 e -He 的碰撞截面随 n 变化不大, 而 e -Ne 的碰撞截面随 n 增大而减小。我们也对文献[12]中的 $n = 15, 17, 19, 21$ 的 l 混合截面作了拟合, Rb-He 的参数

为: $t = 1.10$, $A = 21.78$; Rb-Ne 的参数为: $t = 1.32$, $A = 9.09$. 这与我们的数据, Hickman 的结果及实验的情况均相差很大. 这表明文献[12]的计算结果没有较正确的渐近行为.

确定 l 混合截面满足的标度律有一定的实际意义. 我们据此可以很简便地估算出碱原子很高的 n 态的 l 混合截面值. 为了检验上述标度律的可靠性, 我们计算了 Na 原子 $n = 30$ 的 $\sigma_{\text{NaHe}}(30D \rightarrow 30F)$, 结果为 0.0701. 另外, 计算表明, $\sigma(nl \rightarrow n'l')$ 截面随 l' 变化不大, 由此可估算 Na 原子的 $n = 30$ 的 l 混合截面为 $\sigma_{\text{NaHe}}(n = 30) \approx \sigma_{\text{NaHe}}(30D \rightarrow 30F)(n - 3) = 0.189$, 而由标度律得到截面值为 0.166. 同样, Rb 原子的 $n = 30$ 的 $\sigma_{\text{RbHe}}(30F \rightarrow 30G) = 0.069$, 则 $\sigma_{\text{RbHe}}(n = 30) \approx \sigma_{\text{RbHe}}(30F \rightarrow 30G)(n - 4) = 0.179$, 而由标度律得到的值为 0.153; 可以看出, 由标度律得到的值与理论计算值符合得较好.

本文的计算工作是在本室的 VAX-11/785 计算机上完成的. 机房的同志给予了许多帮助, 谨向他们致谢.

- [1] T. F. Gallagher, S. A. Edelstein and R. M. Hill, *Phys. Rev. Lett.*, **35**(1975), 644.
- [2] T. F. Gallagher, S. A. Edelstein and R. M. Hill, *Phys. Rev.*, **A15**(1977), 1945.
- [3] T. F. Gallagher, W. E. Cooke and S. A. Edelstein, *Phys. Rev.*, **A17**(1978), 904.
- [4] M. Hugon, F. Gounand, P. R. Fournier and J. Berlande, *J. Phys. B*, **12**(1979), 2707.
- [5] R. E. Olson, *Phys. Rev.*, **A15**(1977), 631.
- [6] J. Derouard and M. Lombardi, *J. Phys. B*, **11**(1978), 3875.
- [7] A. P. Hickman, *Phys. Rev.*, **A19**(1979), 994.
- [8] M. Matsuzawa, *J. Phys. B*, **12**(1979), 3743.
- [9] 刘鸿、陈暖球、李白文, 物理学报, **40**(1991), 537.
- [10] 李毓成、孙林贵, 原子与分子物理学报, **1**(1989), 938.
- [11] E. Fermi, *Nuovo Cim.*, **11**(1934), 157.
- [12] E. de Prunele and J. Pascale, *J. Phys. B*, **12**(1979), 2511.
- [13] T. F. O'malley, *Phys. Rev.*, **130**(1963), 1020.
- [14] Xinghong He, Baiwen Li Aiqiu Chen and Chengxiu Zhang, *J. Phys. B*, **23**(1990), 661.

THE l -MIXING CROSS SECTION OF RYDBERG STATES OF ATOMIC Rb AND THE SCALING LAW

LIU HONG CHEN AI-QIU LI BAI-WEN

*Laboratory of Magnetic Resonance and Atomic and Molecular Physics, Wuhan Institute of Physics, Academia Sinica,
Wuhan, 430071*

(Received 28 January 1991)

ABSTRACT

On the basis of impulse approximate method, a kind of analytical wavefunctions based on a potential model was used to calculate the l mixing cross section of thermal collision of Rydberg states of atomic Rb with rare gas (He, Ne). The results were compared with the experimental results and other theoretical values. These results show that there exists a kind of scaling law for the l mixing cross section of Rydberg alkali atoms.

PACC: 3150; 3120