

研究简报

Al II $^1P_1^0$ 序列能级结构的多通道量子 亏损理论分析

杨 力 赵伊君 张志杰

(长沙工学院应用物理系)

1987年3月27日收到

本文利用多通道量子亏损理论 (MQDT), 分析了 Al II 受干扰序列 $^1P_1^0$ 的能级结构. 分析表明, 主序列 $3snp\ ^1P_1^0$ 受到了来自双激发态 $3p4s\ ^1P_1^0$ 的强烈干扰. 这种相互作用使 $3p4s\ ^1P_1^0$ 分布到整个 $3snp\ ^1P_1^0$ 之中, 而不再对应于一条单独的谱线. 利用拟合能级实验数据所得的 MQDT 参数, 计算了序列 $3snp\ ^1P_1^0$ 中 $n \leq 50$ 的能级. 对于已测得的能级, 计算结果与实验值符合得很好.

一、引 言

铝的一价离子 (Al II) 的能级结构与特性, 由于它在理论和实验方面的重要性, 人们进行了大量的实验和理论研究^[1]. 本世纪二、三十年代, Paschen, Sawyer 等人^[2-4]从实验上测得了大量的光谱. 1967年 Weiss^[5,6]对 Mg I 等电子序列的原子 (离子) 的多重态振子强度进行了理论研究; 后来又用组态叠加方法计算了 Al II 的 $3snf\ ^3F^0$ 序列 ($n \leq 7$) 的能级, 并讨论了干扰态 $3p3d\ ^3F^0$ 与主序列的相互作用情况. 1974年 Lu^[7]对 1S_0 , 1D_2 序列的能级结构进行了定性分析. 1979年 Kaufman^[8], Martin^[9]发表了他们在十多年实验中所得到的能级测量结果, 他们丰富了 Al II 的能级实验资料, 提高了测量精度.

实验资料表明, 主序列 $3snp\ ^1P_1^0$ 受到来自双激发态 $3p4s\ ^1P_1^0$ 的强烈干扰. 长期以来, 人们对于这一干扰态的认识存在分歧. 文献[3]认为由于干扰态与主序列之间的强烈相互作用, 使这一干扰态已被主序列所“吸收”, 因此该干扰态已不再单独存在. 而文献[9]则认为该干扰态依然存在, 且位于 $E = 148002.0\text{cm}^{-1}$ 处 (相当于文献[3]中的 $3s12p\ ^1P_1^0$ 态). 两种观点所依据的都是对能级结构的定性分析, 缺乏进一步的实验 (如振子强度) 或定量的理论分析. 本文旨在利用 MQDT 对 $^1P_1^0$ 的能级结构及通道作用情况进行定量的分析.

二、多通道量子亏损理论

MQDT 的基本出发点是将原子 (分子) 体系的电子-离子相互作用域以 r_0 为界在位形空间分成两部分. $r < r_0$ 为内域, $r > r_0$ 为外域. 在内域由于激发电子穿入离子 (core) 内而成为量子多体问题, 需要考虑所有电子的关联作用. 在外域激发电子实际上仅感受到离子实的库仑作用, 故为量子单体问题. 内、外域可分开处理. MQDT 的理论

形式最初是由 Seaton^[11] 建立的, 后经 Fano 等人^[12-16] 的改进与完善, 发展成为原子分子物理中一种广泛应用的强有力的理论. 按照这一理论, 体系的一切物理量都可以用一组参数(变换矩阵元 U_{ia} (或 θ_a) 及量子数亏损 μ_a) 来描述. 这组参数既可以通过实验光谱数据确定^[12-14], 也可以由理论计算确定^[15]. 理论的详细论述参见文献[17, 18], 在此不赘述.

三、 $^1P_1^0$ 序列能级结构的 MQDT 分析

$^1P_1^0$ 序列所对应的分解通道共有三个:

$$i = \begin{matrix} 1 & 2 & 3 \\ 3s(^1S)np^1P_1^0 & 3p(^2P)ns^1P_1^0 & 3p(^2P)nd^1P_1^0 \end{matrix}$$

相应的本征通道为

$$\alpha = \begin{matrix} a & b & c \\ sp^1P_1^0 & ps^1P_1^0 & pd^1P_1^0 \end{matrix}$$

由于序列 $3pnd^1P_1^0$ 的最低能态已位于第一电离阈上约 8000 cm^{-1} 处^[19], 在研究其分立谱时可不予考虑. 简化为两通道问题. 这两通道分别收敛于电离阈: $I_1 = 151862.7\text{ cm}^{-1}$, $I_2 = 205545.6\text{ cm}^{-1}$.

从图 1 可以看到, 主序列的单量子数亏损

$$\mu_n = n - \nu_{sn} \text{ (或 } -\nu_s \text{ mod. } 1)$$

随能量 E (或 ν_p) 的增大而迅速增大, 特别是对 $n \geq 10$ 的能级, μ_n 随 ν_p 几乎呈直线增加, 这标志着整个主序列都受到了强烈的干扰. 从曲线斜率 $\frac{d(-\nu_s)}{d\nu_p}$ 随 ν_p 的变化规律可以看到, 随着 n 的增加, 斜率也迅速增加, 到 $n = 11$ 附近达到最大.

表 1 为 $^1P_1^0$ 序列的通道混合系数的计算结果, 可以看到:

1) 分解通道 2 的混合系数 z_2 在很大的能量范围内 ($n \leq 20$) 都有相当大的值 ($z_2 \geq 0.1$), 即使是 $n = 50$ 仍然有 $z_2 = 0.018$, 这表明 $3snp^1P_1^0$ 序列的各态中含有相当数量的通道 2 ($3p4s^1P_1^0$) 的成份. 即主序列与干扰态之间发生了强烈的混合.

2) z_2 在 $n = 11$ 处取极大值. 表明 $3p4s^1P_1^0$ 在 $n = 11$ 附近与主序列的相互作用最强(在 Lu-Fano 图上表现为该处斜率最大). 因此可以推断出 $3p4s^1P_1^0$ 态应位于 $3s11p^1P_1^0$ 附近. 但考虑到 $z_2(3s11p^1P_1^0) = 0.375 < 0.5$, $z_1(3s11p^1P_1^0) \simeq 1$, 因此该能级的主要特征是 $|3s11p^1P_1^0\rangle$, 而不是 $|3p4s^1P_1^0\rangle$.

3) $z_2(3s12p^1P_1^0) < z_2(3s11p^1P_1^0)$, 所以文献[9]将 $3s12p^1P_1^0$ 这一能态认为是干扰态的做法也是不合理的.

基于以上分析可知, 干扰态 $|3p4s^1P_1^0\rangle$ 与主序列 $|3snp^1P_1^0\rangle$ 之间的强烈相互作用, 导致了它们之间的强烈混合, 混合的结果仍是以 Rydberg 态为主要特征, 故应以 $3snp^1P_1^0$

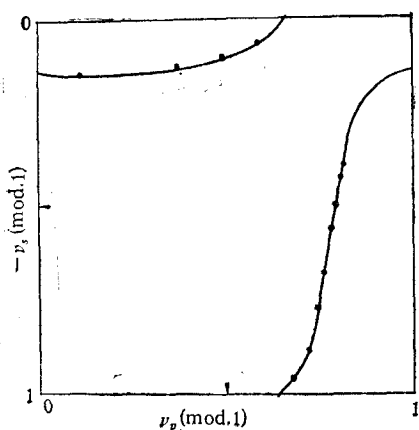


图 1 Al III $^1P_1^0$ 序列的 Lu-Fano 图

表 1 Al II $^1P_1^0$ 序列的 MQDT 参数

	A_1	A_2	Z_1	Z_2
3s 4p	2.770	0.046	0.978	0.210
3s 5p	2.569	-0.664	0.985	0.173
3s 6p	1.901	-0.975	0.984	0.179
3s 7p	1.288	-1.084	0.980	0.202
3s 8p	0.819	-1.111	0.972	0.237
3s 9p	0.476	-1.106	0.960	0.281
10p	0.224	-1.092	0.959	0.330
11p	0.037	-1.075	1.001	0.375
12p	-0.109	-1.059	0.917	0.332
13p	-0.226	-1.043	0.944	0.297
14p	-0.322	-1.029	0.962	0.251
15p	-0.402	-1.017	0.973	0.209
16p	-0.467	-1.005	0.981	0.176
17p	-0.521	-0.996	0.988	0.150
18p	-0.567	-0.987	0.975	0.128
19p	-0.606	-0.980	0.966	0.111
20p	-0.638	-0.974	0.961	0.098
30p	-0.799	-0.940	0.953	0.042
50p	-0.876	-0.922	0.957	0.018

表 2 Al II $^1P_1^0$ 序列的 MQDT 参数

$\theta^0(\text{rad})$	$\frac{d\theta}{dE}$	$\mu_1^{(0)}$	$\frac{d\mu_1}{dE}$	$\mu_2^{(0)}$	$\frac{d\mu_2}{dE}$
0.36675	0.0	0.83805	0.09474	0.24212	0.22371

表 3 3snp $^1P_1^0$ 序列的能级计算结果

组 态	$E_{\text{cal.}}(\text{cm}^{-1})$	$E_{\text{exp}}(\text{cm}^{-1})$	$\Delta E = E_{\text{cal.}} - E_{\text{exp}}(\text{cm}^{-1})$
3s 4p	106920.56	106920.56	0.00
3s 5p	125869.03	125869.14	-0.11
3s 6p	134919.17	134919.40	-0.23
3s 7p	139919.00	139918.98	0.02
3s 8p	142961.40	142961.20	0.20
3s 9p	144941.44	144941.10	0.34
10p	146299.78	146299.92	-0.14
11p	147270.86	147270.82	0.04
12p	148004.53	148004.49	0.04
13p	148584.48	148584.44	0.04
14p	149054.01	149053.98	0.03
15p	149437.18	149437.17	0.01
16p	149751.24	149751.24	0.00
20p	150563.11		
50p	151674.89		

标记。而以 $|3p\ 4s\ ^1P_1^0\rangle$ 为主要特征的态已不再单独存在(注: z_i 的计算值仅与能级的有效量子数 ν_s, ν_p 有关,而与事先对能级的标记方式无关)。

根据能级的实验结果,采用了一种改进的拟合方式^[9],对 $^1P_1^0$ 序列进行了拟合。表 2 列出了拟合结果。

表 3 是能级计算结果 ($3s\ n\ p\ ^1P_1^0, n \leq 50$),比较可知,对已测得的能级,计算值与实验值符合得很好。

感谢中国科学技术大学研究生院孙军强同志关于 MQDT 的讲座以及同作者的多次有益讨论和帮助。

- 1 S. S. Tayal and A. Hibbert, *J. Phys. B*, **17**(1984), 3835.
- 2 F. Paschen, *Ann. Phys.*, **71**(1923), 537.
- 3 R. A. Sawyer and F. Paschen, *Ann. Phys.*, **84**(1927), 1.
- 4 F. Paschen and R. Ritschl, *Ann. Phys.*, **18**(1933), 867.
- 5 A. Weiss, *J. Chem. Phys.*, **47**(1967), 3573.
- 6 A. Weiss, *Phys. Rev. A*, **9**(1974), 1524.
- 7 K. T. Lu, *J. Opt. Soc. Am.*, **64**(1974), 706.
- 8 V. Kaufman and L. Hagan, *J. Opt. Soc. Am.*, **69**(1979), 232.
- 9 C. E. Moore, Atomic Energy Levels, Natl. Bur. Std. (U. S.) Circular No. 467, U. S. GPO, Washington, D. C. (1971), Vol. I.
- 10 W. C. Martin and R. Zabulas, *J. Phys. Chem. Ref. Data*, **8**(1979), 817.
- 11 M. J. Seaton, *Proc. Phys. Soc. Lond.*, **88**(1966), 801.
- 12 U. Fano, *Phys. Rev.*, **A2**(1970), 353.
- 13 K. T. Lu, *Phys. Rev.*, **A4**(1971), 579.
- 14 C. M. Lee and K. T. Lu, *Phys. Rev.*, **A8**(1973), 1241.
- 15 C. M. Lee, *Phys. Rev.*, **A10**(1974), 584.
- 16 C. M. Lee and W. R. Johnson, *Phys. Rev.*, **A22**(1980), 979.
- 17 李家明, 物理学报, **29**(1980), 419.
- 18 李家明, 物理学报, **32**(1983), 84.
- 19 杨力, 硕士论文, 长沙工学院应用物理系, (1987), 3月.

ANALYSING THE LEVEL STRUCTURE OF $^1P_1^0$ SERIES OF IONIZED ALUMINUM(Al II) BY MULTICHANNEL QUANTUM DEFECT THEORY

YANG LI ZHAO YI-JUN ZHANG ZHI-JIE

(Department of Applied Physics, Changsha Institute of Technology)

ABSTRACT

We have analysed the level structure of perturbed Rydberg series $^1P_1^0$ of Al II using the multichannel quantum defect theory (MQDT). The analysis shows that the main series $3snp\ ^1P_1^0$ is perturbed so strongly by the doubly excited state $3p4s\ ^1P_1^0$ such that the latter has entirely distributed into the main series and does not correspond to a single spectrum line any more. The experimental energy levels are well reproduced and the energy levels for $n \leq 50$ are calculated.