

铷原子初通道—末通道辐射跃迁矩阵元研究*

王建国 仝晓民 李家明

(中国科学院物理研究所, 北京 100080)

(1994 年 8 月 1 日收到)

在相对论性自洽场理论基础上, 把量子亏损理论的一个初态到一个末通道的跃迁过程进行了推广: 具有相同角动量特征的初态形成所谓的初通道, 通过定义重整化矩阵元, 统一处理了一个初通道激发到一个末通道的无数个光跃迁过程. 作为例子, 计算了铷原子“ $s_{1/2}-p_{1/2}$ ”, “ $p_{1/2}-d_{3/2}$ ”, “ $d_{3/2}-f_{5/2}$ ”通道之间的光吸收过程.

PACC: 3280F

1 引 言

原子光吸收(或光辐射)物理过程的研究, 有助于理解原子体系的激发态能级结构和有关的电子关联作用, 同时为等离子体诊断、辐射输运模拟和 X 射线激光介质的模拟等提供必要的物理参数. 对于原子的光吸收过程, 如果入射的光子能量小于其电离阈值, 为光激发过程, 其对应的是“束缚—束缚”跃迁, 如果入射的光子能量大于其电离阈值, 则为光电离过程, 其对应的是“束缚—连续”跃迁. 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(里德伯态)和相应的连续态可以形成一个通道. 从一个初态激发到一个末通道中无数个分立态的“束缚—束缚”跃迁和相应的“束缚—连续”跃迁可以统一处理. 原子的光吸收截面和原子的振子强度成正比, 而振子强度又与能量归一的跃迁矩阵元平方成正比, 该能量归一的跃迁矩阵元随光子能量连续变化, 并在电离阈值上下能域连续相接^[1,2]. 因此只要掌握了相应的跃迁矩阵元的分布, 就系统地掌握从一个初态到一个末通道中无数个激发态的光跃迁过程. 本文在此基础上进行了推广, 具有相同角动量特征的所有初态形成所谓的初通道. 通过定义新的重整化矩阵元, 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跃迁可以统一处理. 我们以铷原子为例, 计算了“ $s_{1/2}-p_{1/2}$ ”, “ $p_{1/2}-d_{3/2}$ ”, “ $d_{3/2}-f_{5/2}$ ”通道之间的重整化矩阵元.

2 理论概述

铷原子由一个外层电子和具有闭壳层的离子实组成. 由于该离子实的激发能或其电

* 国家自然科学基金、国家科委、国家 863 高技术惯性约束聚变主题、中国工程物理研究院科学和技术、原子分子数据联合体资助的课题.

离阈值较高,在低能区的光吸收过程可以看作只发生在外层电子上.因此可在独立电子近似下较真实描述铷原子在低能区的光吸收过程.在独立电子近似下,原子中的电子都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性自洽场理论方法^[3],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喇克方程,得到初末态能级位置和相应的波函数,从而计算出有关的电偶极跃迁矩阵元和跃迁几率、截面^[1,2].

考虑某一电偶极允许跃迁 $n\kappa \rightarrow \lambda'\kappa'$, 这里 $\lambda' = n'$, ϵ 分别对应光激发(束缚—束缚)和光电离(束缚—连续).对光激发过程,其吸收截面可写为^[2]

$$\begin{aligned}\sigma &= (\pi e^2/mc) f_{n'\kappa', n\kappa} L \\ &= 4.035 \times 10^{-18} (\text{cm}^2 \cdot \text{Hartree}) f_{n'\kappa', n\kappa} L,\end{aligned}\quad (1)$$

其中 Hartree = 27.2 eV 为原子单位的能量, L 为线形因子,其单位为 Hartree⁻¹,并满足

$\int L d\epsilon = 1$. $f_{n'\kappa', n\kappa}$ 为振子强度:

$$f_{n'\kappa', n\kappa} = \frac{2\omega}{3g_{n\kappa}} |\tilde{D}_{n'\kappa', n\kappa}|^2 \quad (2)$$

其中 $\hbar\omega$ 为光子能量, $g_{n\kappa}$ 为初态简并度, $\tilde{D}_{n'\kappa', n\kappa}$ 为电偶极跃迁矩阵元^[4]:

$$\begin{aligned}\tilde{D}_{n'\kappa', n\kappa} &= \frac{1}{\omega} \langle n'\kappa'j' \| T^{(k)} \| n\kappa j \rangle \\ &= i^{k-1} c \left\{ \int G_{n'\kappa'}(r) j_{k-1}(qr) F_{n\kappa}(r) dr \left[\frac{(2k-1)(k+1)}{2} \right]^{1/2} \langle \kappa'j'l' \| X^{(k-1,1)k} \| \kappa j \bar{l} \rangle \right. \\ &\quad - \int G_{n'\kappa'}(r) j_{k+1}(qr) F_{n\kappa}(r) dr \left[\frac{(2k+3)k}{2} \right]^{1/2} \langle \kappa'j'l' \| X^{(k+1,1)k} \| \kappa j \bar{l} \rangle \\ &\quad - \int F_{n'\kappa'}(r) j_{k-1}(qr) G_{n\kappa}(r) dr \left[\frac{(2k-1)(k+1)}{2} \right]^{1/2} \langle \kappa'j'l' \| X^{(k-1,1)k} \| \kappa j l \rangle \\ &\quad \left. + \int F_{n'\kappa'}(r) j_{k+1}(qr) G_{n\kappa}(r) dr \left[\frac{(2k+3)k}{2} \right]^{1/2} \langle \kappa'j'l' \| X^{(k+1,1)k} \| \kappa j l \rangle \right\}, \quad (3)\end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned}&\langle \kappa'j'l' \| X^{(k',1)k} \| \kappa j \bar{l} \rangle \\ &= [(2j+1)(2j'+1)(2k+1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} \bar{l} & 1/2 & j \\ k' & 1 & k \\ l' & 1/2 & j' \end{Bmatrix} \\ &\quad \times (-)^{l'} [6(2\bar{l}+1)(2l+1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} l' & k' & \bar{l} \\ 0 & 0 & 0 \end{Bmatrix}, \quad (4)\end{aligned}$$

其中, $k=1$, 即电偶极矩阵元. 末态 $|n'\kappa'\rangle$ 为态归一. 对于光电离过程,其吸收截面可写为^[2]

$$\begin{aligned}\sigma &= (\pi e^2/mc) \left(\frac{df_{e\kappa', n\kappa}}{d\epsilon} \right) \\ &= 4.035 \times 10^{-18} (\text{cm}^2 \cdot \text{Hartree}) \left(\frac{df_{e\kappa', n\kappa}}{d\epsilon} \right), \quad (5)\end{aligned}$$

其中 $\frac{df_{\epsilon\kappa', n\kappa}}{d\epsilon}$ 为振子强度密度:

$$\frac{df_{\epsilon\kappa', n\kappa}}{d\epsilon} = \frac{2\omega}{3g_{n\kappa}} |D_{\epsilon\kappa', n\kappa}|^2, \quad (6)$$

$D_{\epsilon\kappa', n\kappa}$ 为末态能量归一的跃迁矩阵元:

$$D_{\epsilon\kappa', n\kappa} = \frac{1}{\omega} \langle \epsilon\kappa' j' \| T^{(k)} \| n\kappa j \rangle, \quad (7)$$

其中末态 $|\epsilon\kappa'\rangle$ 采用能量归一.

在 QDT 框架内, 从一个初态到一个末通道的光激发和光电离过程可以统一处理^[1,2,5]. 我们定义光激发振子强度密度:

$$\frac{df_{n'\kappa', n\kappa}}{d\epsilon} = f_{n'\kappa', n\kappa} N_{n'\kappa'}^2, \quad (8)$$

和末态能量归一的光激发跃迁矩阵元:

$$D_{n'\kappa', n\kappa} = \bar{D}_{n'\kappa', n\kappa} \cdot N_{n'\kappa'}, \quad (9)$$

其中 $N_{n'\kappa'}^2 = \nu_{n'\kappa'}^3 / (q+1)^2$ 为态密度^[1,2,6], q 为电离度, $\nu_{n'\kappa'}$ 为有效主量子数. 态归一和能量归一相差一个因子 $N_{n,\kappa}$. 该光激发的振子强度密度和能量归一的跃迁矩阵元将与前述的光电离的振子强度密度和能量归一的跃迁矩阵元在电离阈值上下平滑连接. 在一个通道内量子数亏损也是能量的连续函数^[6]. 因而通过有限的计算构成样点插值, 便能得到所有的量子数亏损和能量归一的跃迁矩阵元, 进而得到跃迁能量和跃迁截面.

以上统一处理了一个初态到末通道的跃迁过程. 而所有具有相同的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. 当初末态都在电离阈值以上的时候, 光吸收为自由—自由跃迁过程, 其逆过程就是韧致辐射. 当发射光子能量 $\hbar\omega$ 趋于于零、入射电子能量趋于零时, 韧致辐射的对应展开分波的初末态能量归一的跃迁矩阵元 $\bar{D}_{\epsilon\kappa', \kappa}$ 应具有与 ω^{-2} 成正比的渐近行为. 因此我们定义自由—自由跃迁的重整化矩阵元:

$$M_{\epsilon\kappa', \kappa} = \omega^2 \cdot \bar{D}_{\epsilon\kappa', \kappa}. \quad (10)$$

该重整化矩阵元将平滑地趋近电离阈值. 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. 定义光激发重整化矩阵元:

$$M_{n'\kappa', n\kappa} = \omega^2 \cdot N_{n'\kappa'} \cdot \bar{D}_{n'\kappa', n\kappa} \cdot N_{n\kappa}, \quad (11)$$

和光电离的重整化矩阵元:

$$M_{\epsilon\kappa', n\kappa} = \omega^2 \cdot D_{\epsilon\kappa', n\kappa} \cdot N_{n\kappa}, \quad (12)$$

这样定义的重整化矩阵元将同时是初态能量和末态能量的连续函数, 并在初末态的电离阈值上下平滑连接, 因而将能统一地处理初通道到末通道的所有跃迁过程.

为了考虑这种延拓的可行性, 分析了氢原子的非相对论性跃迁矩阵元在初末态能量趋于电离阈值时的渐近行为. 考虑氢原子初态 $|n, l\rangle$ 到末态 $|n+1, l+1\rangle$ 的电偶极允许跃迁, 非相对论性跃迁矩阵元为

$$\bar{D}_{n+1, l+1, nl} = \langle n+1, l+1 | r | n, l \rangle [(2l+3)(2l+1)]^{1/2} (-1)^l \begin{pmatrix} l & 1 & l+1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (13)$$

其中

$$\begin{aligned} \langle n+1, l+1 | r | n, l \rangle &= \frac{n^2}{4(n+1)^2} \left(\frac{n}{n+1} \right)^{l+1} \sqrt{\frac{(n+l)!(n+l+2)!}{[(n-l-1)!]^2}} \\ &\times \sum_{i,j=0}^{n-l-1} \frac{(-1)^{i+j} n^j C_{n-l-1}^i C_{n-l-1}^j}{(2l+i+1)!(2l+j+3)!(n+1)^j} \\ &\times \frac{(2l+i+j+4)!}{[1/2 + n/2(n+1)]^{2l+i+j+5}}. \end{aligned} \quad (14)$$

在氢原子初末态能级主量子数很大时, 有 $N_{n,\kappa} \sim n^{3/2}$, $N_{n+1,\kappa'} \sim (n+1)^{3/2} \sim n^{3/2}$ 和 $\omega \sim n^{-3}$, 因此在初末态能量趋近电离阈值时, 氢原子的重整化矩阵元:

$$M_{n+1l+1, nl} \simeq n^{-3} \cdot \bar{D}_{n+1l+1, nl}. \quad (15)$$

对 $ns \rightarrow (n+1)p$ 跃迁, 有

$$M_{n+1p, ns} \simeq -0.022 - 0.75 \times e^{-0.42n}. \quad (16)$$

对 $np \rightarrow (n+1)d$ 跃迁, 有

$$M_{n+1d, np} \simeq -0.035 - 1.98 \times e^{-0.5n}. \quad (17)$$

对 $nd \rightarrow (n+1)f$ 跃迁, 有

$$M_{n+1f, nd} \simeq -0.043 - 1.87 \times e^{-0.4n}. \quad (18)$$

这三个公式证实了不管初末态能量在电离阈值以下或以上, 重整化矩阵元都以同样的渐近行为趋于电离阈值. 重整化矩阵元的光滑性反映了跃迁过程内在的通道性质, 即束缚—束缚的光激发、束缚—自由的光电离与自由—自由的韧致辐射过程的内在联系. 这种性质与讨论中采用非相对论性或相对论性框架无关. 因而在讨论氢原子的重整化矩阵元时, 我们采用了可以给出解析形式的非相对论性矩阵元.

对于一般的多电子原子, 电子间的关联作用较强, 需采用组态相互作用的方法来处理^[7,8], 但预计也应有类似的通道性质.

3 计算结果与讨论

根据以上的理论分析, 我们计算了铷原子“ $s_{1/2} - p_{1/2}$ ”, “ $p_{1/2} - d_{3/2}$ ”, “ $d_{3/2} - f_{5/2}$ ”几个通道之间的重整化矩阵元.

3.1 “ $s_{1/2} - p_{1/2}$ ”通道

图1(a)为能量归一偶极跃迁矩阵元. 每条曲线对应一个初态 $ns_{1/2}$ 到一个末通道“ $p_{1/2}$ ”的跃迁过程. 在末态能量小于零时, 为束缚—束缚的光激发过程; 在末态能量大于零时, 为束缚—自由的光电离过程. 从图中可见, 每条曲线随末态能量(即光子能量)连续变化, 并在能量零点(电离阈值)光滑连接. 这样通过有限的计算构成样点, 一个初态到一个末通道的无限个跃迁过程可以统一处理^[1].

图1(a)中几条分离曲线对应的初态可以形成初通道“ $s_{1/2}$ ”. 图1(b)给出对应的初通道“ $s_{1/2}$ ”到末通道“ $p_{1/2}$ ”的重整化偶极跃迁矩阵元. 从该图可以看到, 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. 在三维图上, 该重整化矩阵元将是初态能量和末态能量的光滑曲面, 并在初态和末态能量零点平滑连接. 通过几个点内插和延拓, 无

限个态的初通道到无限个态的末通道的跃迁都可以统一处理.

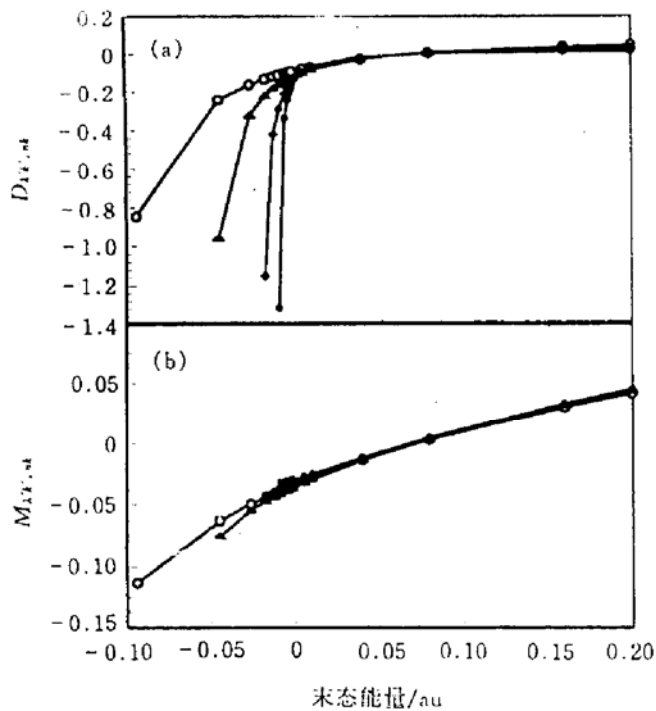


图1 (a)为不同的初态 $n s_{1/2}$ 到末通道 $p_{1/2}$ 能量归一偶极跃迁矩阵元; (b)为初通道 $s_{1/2}$ 到末通道 $p_{1/2}$ 重整化偶极跃迁矩阵元.
○ 为 $5s-p$; ▲ 为 $6s-p$; ◆ 为 $8s-p$; ● 为 $10s-p$

3.2 “ $p_{1/2}-d_{3/2}$ ”通道

图2(a)为能量归一偶极跃迁矩阵元. 每条曲线对应一个初态 $n p_{1/2}$ 到一个末通道 $d_{3/2}$ 的跃迁过程. 不同的初态 $n p_{1/2}$ 形成初通道“ $p_{1/2}$ ”. 图2(b)为初通道“ $p_{1/2}$ ”到末通道“ $d_{3/2}$ ”的重整化偶极跃迁矩阵元. 对比这两张图, 发现图2(b)中的曲线要比图2(a)中的曲线规律性更强. 在电离阈值附近图2(b)的曲线较有规律地紧密排列. 可以预期, 随着初态主量子数的增大, 曲线将逐渐趋于一个极限, 而图2(a)则看不出这种趋势. 这两张图中的曲线符合矩阵元节点变化的规律, 具体细节见文献[2, 9]. 这不妨碍通道性质的讨论.

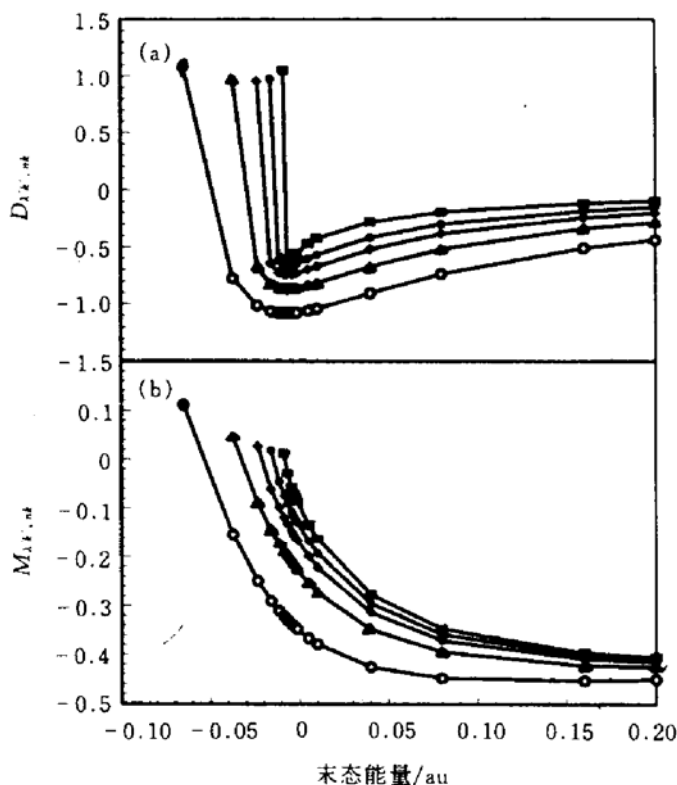


图2 (a)为不同的初态 $n p_{1/2}$ 到末通道 $d_{3/2}$ 能量归一偶极跃迁矩阵元; (b)为初通道 $p_{1/2}$ 到末通道 $d_{3/2}$ 重整化偶极跃迁矩阵元. ○ 为 $5p-d$; ▲ 为 $6p-d$; ◆ 为 $7p-d$; ● 为 $8p-d$; ■ 为 $10p-d$

3.3 “ $d_{3/2}-f_{5/2}$ ”通道

图 3(a) 为能量归一偶极跃迁矩阵元. 每条曲线对应一个初态 $nd_{3/2}$ 到一个末通道 $f_{5/2}$ 的跃迁过程. 不同的初态 $nd_{3/2}$ 形成初通道“ $d_{3/2}$ ”. 图 3(b) 为初通道“ $d_{3/2}$ ”到末通道“ $f_{5/2}$ ”的重整化偶极跃迁矩阵元. 容易看到图 3(b) 的曲线在电离阈值附近更光滑. 随着初态主量子数的增大, 曲线将更快地趋于一个极限. 在图 3(a) 中的 $4d_{3/2}$ 到末通道 $f_{5/2}$ 曲线与其它曲线有不同的趋于电离阈值的方式, 这是由于矩阵元节点个数不同的结果^[2,9], 因而导致图 3(b) 中的对应曲线在光电离时排列顺序有些变化.

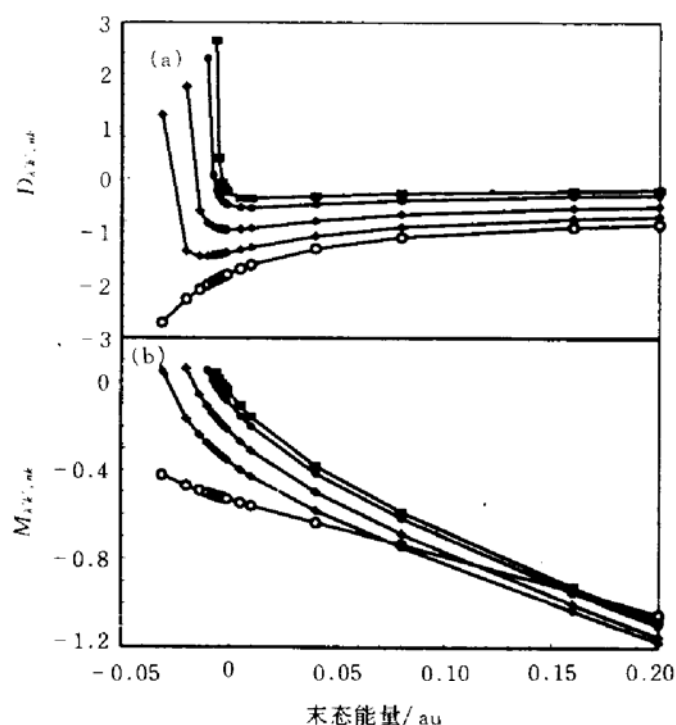


图 3 (a) 为不同的初态 $nd_{3/2}$ 到末通道 $f_{5/2}$ 能量归一偶极跃迁矩阵元; (b) 为初通道 $d_{3/2}$ 到末通道 $f_{5/2}$ 重整化偶极跃迁矩阵元. ○ 为 $4d-f$; ◆ 为 $5d-f$; ◈ 为 $6d-f$; ● 为 $8d-f$; ■ 为 $10d-f$

总之, 应用以上重整化矩阵元的性质, 从初通道到末通道的无数个辐射跃迁过程可以统一处理. 这种方法也能推广到其它物理过程, 如碰撞过程等, 对此将另文讨论.

- [1] 刘磊、李家明, 物理学报, **42**(1993), 1901.
- [2] 梁晓玲、李家明, 物理学报, **34**(1985), 1479.
- [3] 李家明、赵中新, 物理学报, **31**(1982), 97.
- [4] Xiao-Min Tong, Lei Liu, Jia-Ming Li, *Phys. Rev.*, **A49**(1994), 4641.
- [5] U. Fano and J. W. Cooper, *Rev. Mod. Phys.*, **40**(1968), 441.
- [6] C. M. Lee (Jia-Ming Li) and W. R. Johnson, *Phys. Rev.*, **A22**(1980), 979.
- [7] 赵中新、李家明, 物理学报, **34**(1985), 1469.
- [8] Xiao-Min Tong, Yu Zou, Jia-Ming Li and Xiao-Wei Liu, *Chin. Phys. Lett.*, **11**(1993), 69.
- [9] 全晓民、杨力、李家明, 物理学报, **38**(1989), 407.

RADIATIVE TRANSITION OF Rb ATOM BETWEEN INITIAL AND FINAL CHANNELS

WANG JIAN-GUO TONG XIAO-MIN LI JIA-MING

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

(Received 1 August 1994)

ABSTRACT

As an extension of theoretical study of transition from an initial state to a final channel, the initial states with same angular momentum form varied initial channels. By defining a new renormalized matrix element, the atomic radiative processes from an initial channel to a final channel can be treated in an unified manner. As an example, we present here the renormalized matrix element of Rb atom between initial and final channels.

PACC: 3280F