

## Fr 原子的激发态结构\*

刘 磊 李家明<sup>1)</sup>

(中国科学院物理研究所)

1988 年 3 月 11 日收到

应用自洽场理论方法, 计算了 Fr 的里德堡态能级结构. 与精确的实验比较, 符合良好. 还阐明了高 Z 元素的相对性效应, 高 Z 元素的能级结构计算需采用相对论性理论方法.

利用日益发展的激光技术进行激光分离同位素或微量元素探测, 一般涉及应用激光多步激发原子进而场电离或光电离的过程. 因此, 这些新技术的发展, 引起了人们对原子, 尤其是对贵重的高 Z 原子激发态结构研究的较大兴趣. 例如, 放射性元素  $^{223}\text{Fr}$  是  $^{235}\text{U}$  的衰变产物, 它的半衰期  $T_{1/2} = 22 \text{ min}$ . 在  $3 \times 10^{18}$  个天然 U 原子中只存在一个 Fr 原子. 对于 Fr 的激发态结构人们还了解甚少. 最近, 利用激光共振光电离技术, 对 Fr 的激发态结构有了较精确的实验观察(即 s 通道和 d 通道里德堡态能级结构)<sup>[1]</sup>. 本文应用我们已建立的相对论性自洽场理论方法<sup>[2,3]</sup>, 计算了 Fr 的激发态结构(包括 s, p, d, f 和 g 通道). 与精确的实验进行了比较分析, 明确了相对论性自洽场理论方法的适用范围. 同时还进行了非相对论性自洽场理论计算<sup>[3,4]</sup>, 阐明了高 Z 元素的相对性效应. 本文计算结果表明: 高 Z 元素的能级结构计算需采用相对论性理论方法.

我们的计算采用独立电子模型, 即将所有的电子考虑成各自独立地在一个共同的平均自洽场中运动. 而这个平均自洽场是由原子核和其它电子的库仑作用形成的. 在相对论性情形, 我们应用 Dirac-Slater 自洽场方法, 求得相对论性原子自洽势<sup>[2]</sup>. 在非相对论性情形, 我们应用 Hartree-Slater 自洽场方法得到非相对论性原子自洽势<sup>[4]</sup>. 通过求解相对论自洽势的 Dirac 方程得到束缚激发态的轨道能, 再进一步通过里德堡公式求得量子数亏损<sup>[5]</sup>. 同时还可以计算连续态的短程相移  $\delta$ . 根据量子亏损理论<sup>[5,6]</sup>, 对于某特定的分波, 其分立束缚态的量子数亏损  $\mu$  和其对应的连续态的短程相移  $\delta/\pi$  在阈值处连续相接. 这所有分立束缚态和其对应的连续态形成所谓的通道. 对于 Fr 原子, 我们分别计算了  $s_{1/2}$ ;  $p_{1/2,3/2}$ ;  $d_{3/2,5/2}$ ;  $f_{5/2,7/2}$ ;  $g_{7/2,9/2}$  等通道的量子数亏损和其对应的短程相移; 它们在阈值处都是连续相接的. 这表明了我们数值计算的可靠性. 同样地, 我们采用非相对论性自洽势而求解其 Schrödinger 方程, 得到非相对论的量子数亏损.

表 1 列出了 s 通道和 d 通道的里德堡能级的实验值<sup>[1]</sup>和我们计算的相对论自洽场理论结果. 实验未能分辨出  $d_{3/2}$  和  $d_{5/2}$  通道. 我们的理论计算结果, 采用了实验电离阈值  $I = 32848.0 \text{ cm}^{-1}$ <sup>[1]</sup>. 表 2 列出了我们相对论性和非相对论性理论计算的量子数亏损以

\* 国家自然科学基金和中国科学院院长基金资助的课题.

<sup>1)</sup> 中国高等科学技术中心(世界实验室)理论物理分中心.

表 1 Fr 原子里德堡能级位置的实验值和相对理论值  
(单位:  $\text{cm}^{-1}$ )

n	实 验 值		相 对 论 理 值			
	$s_{1/2}$	$d_{3/2,5/2}$	$s_{1/2}$	$d_{3/2,5/2}$		
25	32571.47	32612.48	32571.84	32611.74	32612.91	
26	32597.42	32632.92	32597.60	32632.22	32633.25	
27	32619.67	32650.86	32619.91	32650.16	32651.06	
28	...	32666.56	32639.37	32665.95	32666.74	
29	32656.27	32680.52	32656.44	32679.91	32680.62	
30	32671.25	32692.83	32671.49	32692.34	32692.96	

表 2 Fr 原子在阈值处的量子数亏损理论值

	$s_{1/2}$	$p_{1/2,3/2}$	$d_{3/2,5/2}$	$f_{5/2,7/2}$	$g_{7/2,9/2}$
相对论值	5.065	4.584 4.483	3.450 3.396	1.013 1.013	0.000 0.000
(平均值)	(5.065)	(4.515)	(3.419)	(1.013)	(0.000)
非相对论值	4.895	4.456	3.381	1.013	0.000
实验值	5.074		3.417		

及量子数亏损的实验值(仅  $s$  和  $d$  两通道)<sup>[4]</sup>。由表 1 和表 2 可以看到, 相对论性理论结果和实验结果符合得很好。这说明: 由于碱金属 Fr 最外壳层只有一个电子, 即所谓单通道问题; 该壳层内的原子实相当坚实, 其第二电离阈值很高, 所以在第一电离阈值附近的能域, 自洽场理论的描述和精确的实验结果很好地符合。从表 2 可以看出:  $s$  通道量子数亏损最大, 其相对论值为 5.065; 并且随着角动量  $l$  值的增加, 离心势的增大, 量子数亏损依次减小, 分别为:  $p$  通道 4.584, 4.483;  $d$  通道 3.450, 3.396;  $f$  通道 1.013, 1.013;  $g$  通道 0.000, 0.000。这是因为, 量子数亏损的正或负反映着, 原子自洽势较之点库仑势对于电子波函数的吸引或排斥; 其绝对值大小反映着这种吸引或排斥的强弱。对于  $s$  通道, 没有离心势的作用, 其波函数能够透进到原子内部而所感受的吸引最强, 则量子数亏损最大。而随着  $l$  值的增加, 离心势的增大, 波函数越来越不易透进到原子实而所感受的吸引减弱, 则相应地量子数亏损逐步减小。我们的计算没有考虑原子实极化的影响。原子实极化使里德堡能级略微降低, 所以极化效应使自洽场计算的量子数亏损略微增加。特别是对高  $l$  波, 因为量子数亏损几乎为零, 所以原子实极化是不可忽略的。具体地说, 由于 Fr 无实验数据, 但可根据已有的实验数据<sup>[7]</sup>, Cs 原子的  $g$  通道的量子数亏损大约为 0.01 左右, RaII 的  $g$  通道的量子数亏损大约为 0.02 左右, 并考虑到量子数亏损随原子序, 电离度等的变化规律, 估计出 Fr 原子的  $g$  通道的量子数亏损大约在 0.01 到 0.02 之间, 即对 Fr 原子, 原子实极化将使  $g$  通道的量子数亏损略增加 0.01—0.02。

为了便于比较, 我们在表 2 同时列出了相对论的量子数亏损的自旋-轨道权重平均值。表 2 所列的非相对论性和相对论性在阈值处的量子数亏损值, 可以阐明 Fr 原子的相对论效应。多电子原子的相对论效应来自两个方面: (1) 对完全相同的势, 由于分别求解 Dirac 方程和 Schrödinger 方程所引起的差别; (2) 由于各电子分别满足 Dirac 运动方程而自洽地相互屏蔽, 所引起的多电子体系原子自洽势的不同。我们可以通过 Foldy-

Wouthuysen 转换<sup>[8]</sup>, 理解由于分别求解 Dirac 方程和 Schrödinger 方程而引起的差异; 具体地说, 考虑到  $(V/c)^2$  阶为止, Dirac 哈密顿算符经转换可写为 Schrödinger 哈密顿算符

$$H_{\text{FD}} = H_{\text{nr}} - \frac{P^4}{8m^3c^2} + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \frac{1}{r} \frac{dV}{dr} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}) + \frac{\hbar^2}{8m^2c^2} \Delta V. \quad (1)$$

这里  $H_{\text{nr}}$  为非相对论 Schrödinger 哈密顿算符, 即

$$H_{\text{nr}} = \frac{P^2}{2m} + V(r). \quad (2)$$

相对论效应可较方便地从 (1) 式等号右端第 2, 3, 4 项来说明: 第 2 项  $-P^4/8m^3c^2$  为相对论的质量校正; 在短程区, 局部动量较大, 因此相对论效应显著. 第 3 项则为熟悉的自旋轨道相互作用, 只是引起分裂的细结构; 在非相对论性理论上, 可应用微扰理论计算得到, 并不是主要的贡献. 第 4 项为 Darwin 项, 这类相对论效应是由于电子云在电子康普顿波长的尺度范围内的颤动而引起, 其主要贡献也来自近核短程区. 对于相对论和非相对论原子自洽势的不同, 可理解如下: 在多电子的原子体系里, 原子自洽势是由原子核的吸引库仑势和各电子间的相互排斥库仑势自洽地组成<sup>[2,4]</sup>. 具体地说, 内壳层电子云由于相对论效应而较接近原子核, 增加了对较外壳层电子云的屏蔽. 因此, 次内壳层电子云将稍向外膨胀, 从而又稍减弱其对更外壳层的屏蔽效应. 根据这样相互补偿的机理, 在内壳层区域, 相对论自洽势和非相对论自洽势稍有差别; 在较外区域, 两者将一致. 总而言之, 在多电子的体系里, 相对论效应主要体现在近程区域, 可以用  $Z\alpha$  的大小来衡量 ( $Z$  为原子序,  $\alpha \approx 1/137$  为精细结构常数). 对于高原子序 ( $Z = 87$ ) 的 Fr 原子, 表 2 可以清楚地说明相对论效应. 对于 s 通道, 由于没有离心势而波函数能穿透到原子自洽势的短程区域, 所以其相对论效应最大, 即其量子数亏损相差约达 0.17. 这里, 相对论量子亏损比非相对论量子亏损大, 说明相对论效应使电子云吸向原子核. 对于 p 通道, 由于存在离心势而其波函数将较不易穿透到内区, 则其相对论效应较小, 即其量子数亏损相差约达 0.06. 对于 d 通道, 由于离心势增加而波函数排斥在外区, 则其相对论效应更小, 即其量子数亏损相差值在 0.04 左右.

根据我们的理论计算, 与精确实验结果进行了比较. 对于 Fr 的高激发态(它们分别形成单通道的里德堡系列), 相对论性自洽场理论能够很好地描述其能级结构. 通过分析相对论效应, 本文结果表明: 定量计算高原子序原子的能级结构(即使是由外壳层电子激发而引起的能级结构)需要采用相对论性的理论方法.

感谢评审者关于 s 通道量子数亏损的有益的讨论.

- [ 1 ] S. V. Andreev, V. S. Letokhov and V. I. Mishin, *Phys. Rev. Lett.*, **59**(1987), 1274.
- [ 2 ] 李家明、赵中新, *物理学报*, **31**(1982), 97.
- [ 3 ] 赵中新、李家明, *物理学报*, **34**(1985), 1496.
- [ 4 ] 李家明、赵中新, *物理学报* **30**, (1981), 105.
- [ 5 ] C. M. Lee (Jia-Ming Li), W. R. Johnson, *Phys. Rev.*, **A22**(1980), 979.
- [ 6 ] 李家明, in *Electronic and Atomic Collisions*, eds. D. C. Lorents, W. E. Meyerhof, J. R. Peterson, Elsevier Science Publisher-B. V., Amsterdam, (1986), p. 621.
- [ 7 ] C. E. Moore, *Atomic Energy Levels*, **3**(1971), Nat. Bur. Stand. (U. S.).

- [ 8 ] Albert Messiah, Quantum Mechanics, Vol. 2, p. 947, NORTH-HOLLAND PUBLISHING COMPANY-AMSTERDAM, (1970).

## STRUCTURE OF EXITED FRANCIUM ATOM

LIU LEI LI JIA-MING

(*Institute of Physics, Academia Sinica*)

### ABSTRACT

Based on atomic self-consistent-field theory (i.e., independent electron model), we have performed both nonrelativistic and relativistic calculations for the energy levels of exited Rydberg francium atoms. Our relativistic theoretical results agree well with recent experimental measurements. Relativistic effect of high  $Z$  atoms is also discussed. A relativistic calculation is necessary to calculate the energy levels for high  $Z$  atoms.