

碱原子高里德堡态的极化率*

何兴虹 李白文 张承修

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

1988 年 10 月 6 日收到

本文使用一种具有解析解的原子唯象势模型,计算了碱原子 Na, K, Rb, Cs 里德堡 ($15 \leq n \leq 55$) 的标量和张量极化率, 计算结果与实验符合很好. 还确定了极化率标度关系 $\alpha = An^{*k} + Bn^{*6}$ 中的系数 A 和 B , 由此关系外推所得结果也与实验很好地符合.

一、引 言

原子极化率描述原子中电子云场强对外加电场的响应. 它在碰撞过程及其他很多方面的研究中起着重要作用^[1]. 此外, 系统的、较精确的原子极化率数据可用来检验实验振子强度的一致性以及波函数本身的外区行为. 最近, Osullivan 和 Stoicheff^[2,3] 利用无多普勒加宽的双光子光谱学技术从实验上测量了 Rb 原子里德堡态 ($n^2D, n = 13-55$; $n^2S, n = 15-80$) 的标量和张量极化率. 他们还给出了用库仑近似波函数 (CA 方法) 得到的理论值, 二者符合很好. 但库仑近似的理论值仅限于 $n \leq 25$ 的情形.

在文献[4, 5]中, 报道了一种有解析解的简单的原子唯象势模型. 在这个模型中, 碱原子价电子感受的屏蔽势取下述形式:

$$V(r) = -\frac{e}{r} \left[1 + \delta + \frac{\alpha'}{r + \gamma'} + \frac{\beta'}{(r + \gamma')^2} \right]. \quad (1)$$

其中 δ 代表电离度, α', β', γ' 是待定参数. 根据(1)式中势函数 $V(r)$ 的形式, 薛定谔方程具有简单的解析解, 其束缚态的解为

$$\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi) = R_{nl}(\rho) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (2)$$

$$R_{nl}(\rho) = N \exp(-\rho/2) (\rho + \gamma)^{-\delta_{nl}} \sum_{\nu=0}^{n-l-1} a_{\nu} \rho^{\nu}, \quad a_0 = 1, \quad (3)$$

$$\rho = \alpha r, \quad \alpha = (-4E)^{1/2}, \quad \gamma = \alpha \gamma'. \quad (4)$$

其中 δ_{nl} 是量子亏损. 势函数中的所有待定参数及波函数的系数 a_{ν} 均可表示为一个参数 (例如 δ_{nl}) 的函数. 这样, 对于确定的态 (nl), 以 δ_{nl} 作为输入参数, 势函数及波函数便可唯一地确定下来.

利用上面的模型势, 我们计算了碱原子高里德堡态的波函数以及高里德堡态 ($10 \leq n \leq 60$) 间的跃迁矩阵元和振子强度^[4,5], 并给出了 Na 原子几个态的极化率. 这些结果

* 国家自然科学基金资助的课题.

与用 CA 方法算得的值相一致. 本文在上述工作的基础上, 系统地计算了碱原子 Na, K, Rb, Cs 高里德堡态 ($15 \leq n \leq 55$) 的标量和张量极化率, 求得标度律, 并且与实验结果进行了比较.

二、碱原子极化率的表式

根据碱原子极化率的一般表示式^[7]

$$\alpha_0(n, L, J) = -\frac{2}{3} \sum_{n'L'J'} (2J' + 1) \left\{ \begin{matrix} L & J & 1/2 \\ J' & L' & 1 \end{matrix} \right\}_{l>}^2 \frac{|\langle nL | r | n'L' \rangle|^2}{E(J) - E(J')}, \quad (5)$$

$$\alpha_2(n, L, J) = -2 \left[\frac{10J(2J-1)(2J+1)}{3(J+1)(2J+1)} \right]^{1/2} \sum_{n'L'J'} (-1)^{J+J'} (2J' + 1) l_{>} \times \left\{ \begin{matrix} L & J & 1/2 \\ J' & L' & 1 \end{matrix} \right\}^2 \cdot \left\{ \begin{matrix} J & J & 1 \\ 1 & 2 & J \end{matrix} \right\} \times \frac{|\langle nL | r | n'L' \rangle|^2}{E(J) - E(J')}. \quad (6)$$

其中 $l_{>}$ 代表 L, L' 中之大者, $\left\{ \begin{matrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot \end{matrix} \right\}$ 代表 $6j$ 符号, 我们可以得到 S, P, D 各态的标量和张量极化率的具体表达式如下:

$$\begin{aligned} \alpha_0(nS_{1/2}) &= -\frac{1}{3} \left[\frac{4}{3} P(3/2) + \frac{2}{3} P(1/2) \right], \\ \alpha_0(nP_{1/2}) &= -\frac{1}{9} [4D(3/2) + 2S(1/2)], \\ \alpha_0(nP_{3/2}) &= -\frac{2}{45} [9D(5/2) + D(3/2) + 5S(1/2)], \\ \alpha_0(nD_{3/2}) &= -\frac{2}{45} \left[P(3/2) + 5P(1/2) - \frac{2}{5} F(5/2) \right], \\ \alpha_0(nD_{5/2}) &= -\frac{1}{9} \left[\frac{12}{5} P(3/2) + \frac{6}{35} F(5/2) + \frac{24}{7} F(7/2) \right], \\ \alpha_2(nP_{3/2}) &= \frac{2}{25} D(5/2) - \frac{8}{225} D(3/2) + \frac{2}{9} S(1/2), \\ \alpha_2(nD_{3/2}) &= \frac{2}{9} P(1/2) - \frac{8}{225} P(3/2) + \frac{2}{25} F(5/2), \\ \alpha_2(nD_{5/2}) &= \frac{4}{15} P(3/2) - \frac{16}{735} F(5/2) + \frac{20}{147} F(7/2). \end{aligned} \quad (7)$$

方程中使用了如下简记符号:

$$O(J') = e^2 \sum_{n'} \frac{|\langle nL | r | n'L' \rangle|^2}{E(nLJ) - E(n'L'J')} \equiv e^2 \sum_{n'} \frac{|R_{n'L'}^{nL}|^2}{E(nLJ) - E(n'L'J')}. \quad (9)$$

其中对应于 $L = 0, 1, 2$, $O \equiv S, P, D$; $E(nLJ)$ 和 $E(n'L'J')$ 分别是给定态 (n, L, J) 和中间态 (n', L', J') 的零场能量.

附带说明一点, 文献[3]中所列 D 态极化率(5)式与我们所得相应公式有些出入: 一是符号相反; 二是有两处系数不符. 怀疑是文献[3]有误. 从我们的计算结果与其实验值相比可以证实这点.

三、计算结果与讨论

将我们在文献[4]中得到的 $|R_{n'l}^{nl}|^2$ 代入(7)–(9)式, 计算了碱原子 Na, K, Rb, Cs 的 S, P, D 态极化率 ($15 \leq n \leq 55$). 表 1 列出了部分计算结果.

表 1 碱原子的标量和张量极化率(单位: MHz/(V/cm)²)

Na					
n	$\alpha_0(S)$	$\alpha_0(P)$	$\alpha_0(D)$	$\alpha_2(P)$	$\alpha_2(D)$
15	1.68(4)	-1.42(5)	2.95(6)	1.35(4)	-8.31(6)
25	4.99(5)	-6.38(6)	1.07(8)	6.35(5)	-3.02(8)
35	4.45(6)	-7.36(7)	1.14(9)	7.46(6)	-3.21(9)
45	2.32(7)	-4.51(8)	6.61(9)	4.61(7)	-1.86(10)
55	8.60(7)	-1.90(9)	2.68(10)	1.95(8)	-7.54(10)

K								
n	$\alpha_0(S)$	$\alpha_0(P_{1/2})$	$\alpha_0(P_{3/2})$	$\alpha_2(P_{3/2})$	$\alpha_0(D_{3/2})$	$\alpha_2(D_{3/2})$	$\alpha_0(D_{5/2})$	$\alpha_2(D_{5/2})$
15	1.63(4)	1.91(4)	1.95(4)	-5.85(2)	1.02(5)	-1.40(4)	1.02(5)	-1.97(4)
25	6.85(5)	7.67(5)	7.87(5)	1.56(4)	3.51(6)	-4.42(5)	3.50(6)	-6.18(5)
35	7.52(6)	8.24(6)	8.49(6)	4.24(5)	3.63(7)	-4.41(6)	3.62(7)	-6.14(6)
45	4.43(7)	4.80(7)	4.95(7)	3.49(6)	2.08(8)	-2.48(7)	2.08(8)	-3.44(7)
55	1.82(8)	1.95(8)	2.01(8)	1.71(7)	8.42(8)	-9.87(7)	8.39(8)	-1.37(8)

Rb								
n	$\alpha_0(S)$	$\alpha_0(P_{1/2})$	$\alpha_0(P_{3/2})$	$\alpha_2(P_{3/2})$	$\alpha_0(D_{3/2})$	$\alpha_2(D_{3/2})$	$\alpha_0(D_{5/2})$	$\alpha_2(D_{5/2})$
15	7.97(3)	2.92(4)	3.11(4)	-3.20(3)	2.16(4)	9.39(3)	2.02(4)	1.53(4)
25	3.70(5)	1.72(6)	1.84(6)	-1.71(5)	7.24(5)	5.21(5)	6.58(5)	8.38(5)
35	4.08(6)	2.21(7)	2.36(7)	-2.08(6)	7.14(6)	6.51(6)	6.37(6)	1.04(7)
45	2.40(7)	1.42(8)	1.52(8)	-1.31(7)	3.88(7)	4.15(7)	3.40(7)	6.62(7)
55	9.66(7)	6.18(8)	6.62(8)	-5.58(7)	1.54(8)	1.79(8)	1.34(8)	2.85(8)

Cs								
n	$\alpha_0(S)$	$\alpha_0(P_{1/2})$	$\alpha_0(P_{3/2})$	$\alpha_2(P_{3/2})$	$\alpha_0(D_{3/2})$	$\alpha_2(D_{3/2})$	$\alpha_0(D_{5/2})$	$\alpha_2(D_{5/2})$
15	5.21(3)	5.08(4)	6.99(4)	-6.99(3)	-4.37(4)	3.29(4)	-6.06(4)	7.11(4)
25	3.17(5)	4.17(6)	5.77(6)	-5.62(5)	-3.00(6)	2.12(6)	-4.09(6)	4.58(6)
35	3.94(6)	6.05(7)	8.40(7)	-8.09(6)	-4.06(7)	2.81(7)	-5.49(7)	6.06(7)
45	2.46(7)	4.17(8)	5.79(8)	-5.55(7)	-2.70(8)	1.85(8)	-3.63(8)	3.98(8)
55	1.02(8)	1.89(9)	2.63(9)	-2.51(8)	-1.20(9)	8.14(8)	-1.61(9)	1.75(9)

注: 在本表及以下各表中, $a(-b)$ 表示 $a \times 10^{-b}$.

(9) 式中的求和, 原则上应包括所有可能的跃迁, 但在实际计算中只需包括与所求态能量较为接近的态, 即主量子数 n 相差不大的态. 因为随着主量子数 n 之差增大, 分母中的能量差增大, 而分子中的矩阵元平方 $|R_{n'l}^{nl}|^2$ 减小, 总的贡献很快减小. 我们计算并比较了取 $|\Delta n| \equiv |n - n'| \leq 2$ 和 $|\Delta n| \leq 3$ 两种情形的极化率, 它们之间的误差绝大多数都在 1% 以内. 表 1 所列数据是取 $|\Delta n| \leq 3$ 的计算结果. 可以预期这样取所带来的截断误差将会更小.

表 2 和表 3 列出了我们的计算结果和 O'sullivan, Stoicheff 以及 Fabre 等人^[2,3,6]的实验结果。表 2 并给出了文献[3]的库仑近似值。可以看出,我们算得的 Na 原子的极化率与实验符合较好。Rb 原子实验结果和两种理论值均非常一致。其它原子的实验数据目前尚未见到。

表 2 一些 Rb 原子极化率计算值与已有实验值和库仑近似值的比较

n	$\alpha_0(S)$	
	实 验	本工作
15	7.929(3)	7.97(3)
25	3.745(5)	3.70(5)
35	4.202(6)	4.08(6)
45	2.49 (7)	2.40(7)
55	9.64 (7)	9.66(7)

n	$\alpha_0(D_{3/2})$			$\alpha_0(D_{5/2})$		
	实 验	本工作	CA	实 验	本工作	CA
15	2.14(4)	2.16(4)	2.13(4)	1.98(4)	2.02(4)	1.99(4)
25	7.4 (5)	7.24(5)	7.1 (5)	6.6 (5)	6.58(5)	6.5 (5)
35	7.4 (6)	7.14(6)		6.3 (6)	6.37(6)	
45	4.2 (7)	3.88(7)		3.8 (7)	3.40(7)	
55	1.64(8)	1.54(8)		1.39(8)	1.34(8)	

n	$\alpha_2(D_{3/2})$			$\alpha_2(D_{5/2})$		
	实 验	本工作	CA	实 验	本工作	CA
15	8.8 (3)	9.39(3)	9.4 (3)	1.51(4)	1.53(4)	1.54(4)
25	5.0 (5)	5.21(5)	5.2 (5)	8.1 (5)	8.38(5)	8.4 (5)
35	6.2 (6)	6.51(6)		1.04(7)	1.04(7)	
45	3.9 (7)	4.15(7)		6.4 (7)	6.62(7)	
55	1.63(8)	1.79(8)		2.54(8)	2.85(8)	

注: 实验值和库仑近似值取自文献[2]和[3]。

表 3 一些 Na 原子极化率计算值与已有实验值的比较

n	$\alpha_0(P)$		$\alpha_2(P)$	
	实 验*	本工作	实 验*	本工作
17	—	-3.66(-1)	3.2(-2)	3.53(-2)
18	—	-5.61(-1)	5.0(-2)	5.45(-2)
19	—	-8.40(-1)	7.4(-2)	8.20(-2)
23	-4.2 (0)	-3.46(0)	4.6(-1)	3.43(-1)
32	-3.86(1)	-3.86(1)	3.7(0)	3.89(0)
34	-7.54(1)	-5.99(1)	8.2(0)	6.07(0)
41	-3.25(2)	-2.31(2)		

* 参见文献[6]。

表 4 系数 A, B 值

	Na		K		Rb			Cs
					本工作	实 验*	CA*	
$\alpha_0(S)$	A	2.81(-5)	1.17(-4)		5.30(-5)	5.53(-5)	4.9(-5)	6.62(-5)
	B	2.14(-3)	2.17(-3)		2.22(-3)	2.20(-3)	2.23(-3)	2.52(-3)
$\alpha_0(P_{1/2})$	A	-1.45(-3)	1.22(-4)		5.37(-4)			1.98(-3)
	B	3.02(-3)	2.01(-3)		1.90(-3)			5.30(-4)
$\alpha_0(P_{3/2})$	A		1.27(-4)		5.76(-4)			2.74(-3)
	B		2.01(-3)		1.94(-3)			8.13(-4)
$\alpha_2(P_{3/2})$	A	1.53(-4)	-2.19(-5)		-4.41(-5)			-2.60(-4)
	B	-5.34(-4)	-4.17(-4)		-3.89(-4)			-2.02(-4)
$\alpha_0(D_{3/2})$	A	1.80(-2)	5.33(-4)		7.45(-5)	9.1(-5)	7.(-5)	-1.13(-3)
	B	-1.09(-2)	1.53(-3)		2.45(-3)	2.06(-3)	2.32(-3)	2.64(-3)
$\alpha_0(D_{5/2})$	A		5.31(-4)		5.85(-5)	7.2(-5)	6.(-5)	-1.51(-3)
	B		1.52(-3)		2.45(-3)	2.09(-3)	2.34(-3)	2.80(-3)
$\alpha_2(D_{3/2})$	A	-5.07(-2)	-5.84(-5)		1.51(-4)	1.42(-4)	1.54(-4)	7.52(-4)
	B	3.38(-2)	-4.04(-4)		-6.24(-4)	-5.7(-4)	-6.6(-4)	-7.51(-4)
$\alpha_2(D_{5/2})$	A		-8.08(-5)		2.39(-4)	2.28(-4)	2.4(-4)	1.61(-3)
	B		-5.83(-4)		-8.96(-4)	-7.7(-4)	-9.6(-4)	-1.29(-3)

* 参见文献[2]和[3].

从极化率 α 的公式可以看出, α 正比于偶极跃迁矩阵元的平方 $|R_{n'l}^{n'l}|^2$, 而与能量差 $E(nLJ) - E(n'L'J')$ 成反比. 对于高激发态, 由于前者近似随 n^{*4} 变化, 而后者大致随 n^{*-3} 变化, 因此可以预期 α 与 n^* 之间有如下近似标度关系:

$$\alpha \simeq An^{*7} + Bn^{*6}, \quad n^* = n - \delta_{nl}. \quad (10)$$

用最小二乘法将 n 在 15—55 之间的极化率数据拟合式(10)所得的系数 A 和 B 列于表 4 中. 可以明显地看出 Rb 原子 S 态和 D 态的 A, B 系数与由实验值所确定的相应系数同样符合很好. 这些系数和标度关系(10)式可用来推算更高的里德堡态的极化率. 例如, 我们利用上述系数及(10)式算得 Rb 原子 80S 态的标量极化率 α_0 为 1298 [MHz/(V/cm)²], 相应的实验值为 1340 [MHz/(V/cm)²], 误差仅为 3%.

本文计算工作在本所 VAX-11/785 计算机上进行, 得到机房的大力帮助. 在此谨致谢意.

- [1] T. M. Miller, *Adv. At. Mol. Phys.*, **13**(1977), 1.
- [2] M. S. O'Sullivan and B. P. Stoicheff, *Phys. Rev.*, **A31**(1985), 2718.
- [3] M. S. O'Sullivan and B. P. Stoicheff, *Phys. Rev.*, **A33**(1986), 1640.
- [4] Li Baiwen, Liu Bingmo, Chen Aiqiu, Zhang Xuerong, Zhang Chengxiu, *J. Phys. B*, **21**(1988), 2205.
- [5] 李白文、陈暖球、张学荣、张承修, *物理学报*, **36**(1987), 998.
- [6] C. Fabre, S. Haroche and P. Goy, *Phys. Rev.*, **A18** (1978), 229.
- [7] A. Khadjavi, A. Lurio and W. Happer, *Phys. Rev.*, **167**(1968), 128.

POLARIZABILITIES OF HIGH RYDBERG ALKALI ATOMS

HE XING-HONG LI BAI-WEN ZHANG CHENG-XIU

Laboratory of Magnetic Resonance and Atomic and Molecular

Physics, Wuhan Institute of Physics, Academia Sinica

(Received 6 October 1988)

ABSTRACT

A potential model for atoms is employed to calculate the scalar and tensor polarizabilities of Rydberg states ($15 \leq n \leq 55$) of Na, K, Rb and Cs. The results are very close to the experimental values. The scaling relations of the polarizabilities $\alpha = An^{*7} + Bn^{*6}$ are also established, and the results obtained from them also agree with experimental data satisfactorily.