

GaII 能谱的多通道量子数亏损理论 (MQDT) 分析

梁 良¹⁾ 王永昌²⁾ 刘学文

西北师范大学物理系, 兰州, 730070

1989年8月7日收到

本文利用多通道量子数亏损理论 (MQDT), 通过拟合 Isberg 等人^[1] 新近关于 GaII 的实验能级数据, 确定出偶宇称 $J = 0, 1, 2, 3$ 和奇宇称 $J = 1, 2$ 六个对称块的 MQDT 参数, 预言了 11 个 Rydberg 系列离散能级的位置, 并分析了各 Rydberg 系列之间的干扰情况, 除个别低能级外, 能级计算值与已测得的实验值符合得很好。

PACC: 3120; 3150

一、引 言

关于类 Z_n 等电子数序列 GaII 离子早期的实验能级数据已汇集在 Moore^[2] 的原子能级表 II 中, 但观测到的能级数目不多, 且测量精度较低。近年来在 Tokamak 高温等离子体中观察到类 Zn 离子共振线及互组合线 $4s^2^1S_0 - 4snp^3P_1^{[3]}$, 这些谱线可以作为诊断等离子体的重要信息, 因而引起了人们的兴趣。1985 年 Isberg 等人^[1] 对 GaII 光谱进行了比较详细的实验研究, 通过测量 500—9800 Å 范围的空心阴极发射的 GaII 离子光谱, 获得了 142 条谱线, 确定了 $4snl$ ($n \leq 8, 0 \leq l \leq 4$) 以及 $4p^2$ 组态的能级位置, 提高了实验精度。关于 GaII 能谱, 理论工作不多, Victor 和 Taylo^[4] 用半经验模型势方法计算过 GaII 的 $n \leq 7, 0 \leq l \leq 3$ 的能级, 跃迁波长和吸收振子强度, 但波长和能级计算值与观测值相差较大。文献 [5] 曾用多组态 H-F 计算方法证实双激发态 $4p^2^1D_2$ 和 $4s4d^1D_2$ 态相互作用很强。为了提供 GaII 离子各 Rydberg 系列间相互干扰的全面的物理图景, 本文利用 MQDT 统一定量地描述了各系列能级之间的相互作用情况, 确定了 11 个 Rydberg 系列的离散能级位置, 相信今后在 GaII 离子高激发能态的研究中会得到进一步证实。

二、多通道量子数亏损理论

MQDT 将激发的原子 (或离子) 看成由一个激发电子和其对应的离子 (core) 组成

1) 西北师范大学 89 届研究生, 现在西安冶金建筑学院工作, 710055。

2) 现在西安交通大学物理系工作, 710049。

的量子系统,它的基本点是将激发电子-离子(core)相互作用分成两个区域:外域($r > r_0$)和内域($r < r_0$).外域波函数由库仑波函数的组合描述,内域波函数的行为由本征量子数亏损 μ_a 和正交转换矩阵元 U_{ia} 表示, U_{ia} 描述激发电子与离子(core)之间距离由内域增大到外域时它们之间耦合性质的变化,而 μ_a 则表示由于内域的相互作用使外域的库仑波向内产生位移,其位移的大小由相位 $\pi\mu_a$ 表示.利用波函数的边界条件可以得到行列式

$$\det|U_{ia} \sin \pi(v_i + \mu_a)| = 0, \quad (1)$$

式中 v_i 为有效量子数,再结合能量关系

$$E = I_i - \frac{1}{2v_i^2} \quad (i = 1, 2, \dots, N) \quad (2)$$

(I_i 为第 i 个分解通道的电离阈能量, N 为考虑的分解通道总数目),代入实验能级数据,便可以拟合出 U_{ia}, μ_a 的最佳参量值,由这些参量值可推出 Rydberg 系列其它激发态的能量,以及第 i 通道在第 n 个离散能级波函数中的混合系数 $Z_i^{(n)}, Z_i^{(n)}$ 的表示式如下:

$$Z_i^{(n)} = (-1)^{l_i+1} v_{i,n}^{3/2} \sum_a U_{ia} \cos n(v_{i,n} + \mu_a) A_a^{(n)} / N_n, \quad (3)$$

式中符号意义与文献[7]相同, N_n 为归一化因子, A_a 为用本征通道波函数 ψ_a 表示体系波函数时的系数.MQDT的基本原理及拟合实验光谱数据求解参数的过程文献[6—9]已有详尽说明,本文不再赘述.

三、计算结果与分析

根据文献[1]关于 Gall 离子的实验光谱数据,将能级划分为偶宇称 $J = 0, 1, 2, 3$ 和奇宇称 $J = 1, 2$ 六个对称块,前者包括12个通道,后者包括4个通道,这些通道分别收敛于电离阈 $I_1 = 165465.8 \text{ cm}^{-1}$ [9], $I_2 = 230635.2 \text{ cm}^{-1}$ 和 $I_3 = 232353.43 \text{ cm}^{-1}$ [10].拟合实验光谱数据使

$$w = \sum_i \left[\frac{(\det|U_{ia} \sin \pi(v_{i,n} + \mu_a)|)^2}{N_i} \right]^{1/2} \quad (4)$$

为最小, (n 对实验点求和, N_i 为参与拟合的能级总数目),可求得六个对称块的 MQDT 参数,分别列于表1和表2.由这些参数计算得到的11个 Rydberg 系列的离散能级值列于表3,其它 $4\text{pnp}^1\text{D}_2, ^3\text{P}_{0,1,2}, ^1\text{S}_0$ 五个通道只有 4p^2 组态的能级位于第一电离阈之下.由表3可知,除 $4\text{s}4\text{d}^3\text{D}_2$ 和 $4\text{p}^2^1\text{D}_2, 4\text{p}^2^3\text{P}_2$ 三个能级的计算值与实验值相差稍大外(其相对误差仍少于0.05%),其它能级计算值与观测值符合得很好,这三个能级符合稍差的原因是低能态 $4\text{s}4\text{d}^3\text{D}_2$ 同时受到两个干扰态 $4\text{p}^2^1\text{D}_2$ 和 $4\text{p}^2^3\text{D}_2$ 的强作用所致.限于篇幅,在表4及表5中仅列出偶宇称 $J = 0, 1, 2$ 能级的通道混合系数.为了便于研究各通道之间的干扰情况,分别画出 Gall 偶宇称 $J = 0, 1, 2$ 的 Lu-Fano 图,如图1至图3所示.分析上面的计算结果可以得到以下结论:

1) 对偶宇称 $J = 0$ 的能谱,由表4可知,对 $4\text{sns}^1\text{S}_0$ 系列,分解通道2和3的混合系数 Z_2, Z_3 在 $4\text{s}6\text{s}^1\text{S}_0$ 处有较大值0.2406和0.3899,表明 $4\text{p}^2^3\text{P}_0$ 和 $4\text{p}^2^1\text{S}_0$ 都对 $4\text{s}6\text{s}^1\text{S}_0$ 有

表 1 偶宇称 $J=0, 1, 2, 3$ 的 MQDT 参数

偶宇称 $J=0$				偶宇称 $J=1$		
$i\bar{\alpha}\alpha$	1	2	3	1	2	3
s	$(^2S_{1/2})s_{1/2}$	$(^2P_{1/2})p_{1/2}$	$(^2P_{3/2})p_{3/2}$	$(^2S_{1/2})s_{1/2}$	$(^2S_{1/2})d_{3/2}$	$(^2P_{1/2})p_{1/2}$
α	$4sns\ ^1S$	$4pnp\ ^3P$	$4pnp\ ^1S$	$4sns\ ^3S$	$4snd\ ^3D$	$4pnp\ ^3P$
E_i	165465.80	230635.2	232352.43	165465.80	165465.80	230635.2
$\mu_a^{(0)}$	0.2449	0.0596	0.8736	0.2963	0.0433	0.1036
$\mu_a^{(1)}$	0.1549	-0.0115	-0.0803	0.3266	0.2218	-0.2348
$\mu_a^{(2)}$	0.0782	0.0048	-0.0230	0.3699	1.1060	-2.0628
θ_{11}	$\theta_{11} = 0.0119$	$\theta_{11} = 0.0670$	$\theta_{11} = 0.0358$	$\theta_{11} = 0.1067$	$\theta_{11} = 0.0071$	$\theta_{11} = 0.0347$
U_{ia}	0.9977	0.0096	-0.0673	0.9943	-0.1067	-0.0034
	0.0289	0.8365	0.5471	-0.1065	-0.9937	0.0353
	0.0615	-0.5478	0.8343	0.0071	0.0347	0.9994
偶宇称 $J=2$				偶宇称 $J=3$		
$i\bar{\alpha}\alpha$	1	2	3	4	1	2
s	$(^2S_{1/2})d_{3/2}$	$(^2S_{1/2})d_{5/2}$	$(^2P_{1/2})p_{1/2}$	$(^2P_{3/2})p_{3/2}$	$(^2S_{1/2})d_{3/2}$	$(^2S_{1/2})g_{7/2}$
α	$4snd\ ^3D$	$4snd\ ^1D$	$4pnp\ ^1D$	$4pnp\ ^3P$	$4snd\ ^3D$	$4sng\ ^3G$
E_i	165465.80	165465.80	230635.2	232353.43	165465.80	165465.80
$\mu_a^{(0)}$	0.0424	0.9625	0.065	0.0467	0.0424	0.0186
$\mu_a^{(1)}$	0.2170	-0.5237	0.0149	0.0382	0.1863	-0.1674
$\mu_a^{(2)}$	1.2903	-9.7497	0.1651	0.4732	1.1000	-0.0420
$\mu_a^{(3)}$	0.3672	-92.1828	1.5114	6.0514	5.0609	16.3210
θ_{11}	$\theta_{11} = 0.3142$	$\theta_{11} = 0.1925$	$\theta_{11} = 0.1373$		$\theta_{11} = -0.0035$	
θ_{21}	$\theta_{21} = 0.0441$	$\theta_{21} = -0.1583$	$\theta_{21} = -0.4465$			
U_{ia}	0.9036	0.3692	-0.1458	-0.1451	0.99999	0.0035
	-0.3520	0.9149	-0.0590	0.1883	0.0035	-0.99999
	-0.0535	-0.0008	-0.6878	0.1257		
	0.0490	0.0897	0.6666	-0.1353		

较大的干扰,而且 $4p^2\ ^1S_0$ 对 $4s6s\ ^1S_0$ 的干扰最大, $4sns\ ^1S_0$ 其它能级受到 $4p^2\ ^1S_0$ 和 $4p^2\ ^3P_0$ 的干扰比较小。图 1 中 $4p^2\ ^1S_0$ 和 $4s6s\ ^1S_0$ 处于回避相交处, $n=6$ 处斜率很大也说明了这一点,对 $n>7$ 以后的态干扰相对地很少。

2) 对于偶宇称 $J=1$ 的能谱,由表 5 可知 $4snd\ ^3D_1$ 系列与 $4sns\ ^3S_1$ 系列相互有干扰,但干扰强度随 n 的增大基本不变。 $4snd\ ^3D_1$ 系列和 $4sns\ ^3S_1$ 系列分别在 $n=4$ 和 $n=5$ 处受到双激发态 $4p^2\ ^3P_1$ 的轻度干扰,但 $4p^2\ ^3P_1$ 态对两个系列的其它能级几乎没有作用^[11],图 2 也清楚地表明了这一点。

3) 对偶宇称 $J=2$ 的能谱,由表 6 可知 $4snd\ ^1D_2$ 和 $4snd\ ^3D_2$ 两个系列之间有相互干扰,且随 n 增大其干扰强度变化不大。 $4snd\ ^1D_2$ 系列在 $n=4$ 处受到两个干扰态 $4p^2\ ^1D_2$ 和 $4p^2\ ^3P_2$ 的强烈干扰,而且后者的干扰稍大一些,文献 [1] 用 Ritz 图只表明了

表2 奇宇称 $J=1, 2$ 的 MQDT 参数

奇宇称 $J=2$			奇宇称 $J=1$	
$i\bar{\alpha}\alpha$	1	2	1	2
i	$(^2S_{1/2})P_{3/2}$	$(^2S_{1/2})F_{3/2}$	$(^2S_{1/2})P_{1/2}$	$(^2S_{1/2})P_{3/2}$
α	$4snp\ ^3P$	$4snf\ ^3F$	$4snp\ ^3P$	$4snp\ ^1P$
U_i	165465.80	165465.80	165465.80	165465.80
$\mu_a^{(0)}$	0.9565	0.0860	0.9385	0.8873
$\mu_a^{(1)}$	-0.1464	-0.7437	0.0060	-0.0986
$\mu_a^{(2)}$	-0.2778	0.8101	0.1228	-0.2618
$\mu_a^{(3)}$	-1.9518	31.6481	1.3727	-0.6015
	$\theta_{12} = 0.3346$		$\theta_{12} = 0.0015$	
U_{ia}	0.9408	-0.3389	0.8165	0.5785
	-0.3389	-0.9408	-0.5761	-0.8173

表3 GaII 的能级值 (单位为 cm^{-1})

组态	谱项	J	E_{cal}	E_{exp}	$E = E_{\text{cal}} - E_{\text{exp}}$
4s ²	¹ S	0	0.0		
4s5s	¹ S	1	102944.53	102944.55	-0.02
	³ S	0	106662.20	106662.21	-0.02
4s6s	¹ S	1	133010.13	133010.22	-0.09
	³ S	0	133741.06	133741.02	0.04
4s7s	¹ S	1	145494.01	145493.91	0.10
	³ S	0	146023.24	146023.24	0.00
4s8s	¹ S	1	151923.78	151923.83	-0.05
	³ S	0	152200.63	152200.63	0.00
4s9s	¹ S	1	155676.61		
	³ S	0	155841.18		
4s10s	¹ S	1	158058.79		
	³ S	0	158164.93		
4s50s	¹ S	1	165272.91		
	³ S	0	165273.33		
4s4p	³ P	0	47367.51		
		1	47814.05		
		2	48749.74		
	¹ P	1	70701.27	70701.27	0.00
4s5p	³ P	0	118430.02		
		1	118518.47	118518.47	0.00
		2	118727.89	118727.89	0.00
	¹ P	1	120550.28	120550.27	0.00
4s6p	³ P	0	138841.01		
		2	138755.83		
	¹ P	1	139600.21		
4s7p	³ P	1	148328.38		
		2	148252.35		
	¹ P	1	148700.64		

续 表 3

组 态	谱 项	J	E_{cal}	E_{exp}	$E = E_{\text{cal}} - E_{\text{exp}}$
4s8p	3P	1	153517.76		
		2	153464.57		
4s9p	1P	1	153729.04		
		2	156662.53		
4s10p	3P	1	156625.71		
		2	156794.25		
4s50p	1P	1	158711.24		
		2	158685.16		
4s50p	3P	1	158798.99		
		2	165275.77		
4s4d	1D	1	165275.63		
		2	165276.18		
4s5d	3D	1	113815.03	113815.92	-.89
		2	113895.80	113842.19	53.61
4s6d	1D	1	113883.19		
		2	126187.92	126187.47	.45
4s7d	3D	1	137157.51	137157.48	.03
		2	137168.00	137168.40	-.40
4s8d	1D	1	137185.23	137185.30	-.07
		2	139702.37	139703.28	-.91
4s9d	3D	1	147520.46	147520.49	-.03
		2	147526.39	147526.18	.21
4s10d	1D	1	147535.66	147535.19	.47
		2	148447.27	148446.41	.86
4s50d	3D	1	153064.90	153064.89	.01
		2	153068.10	153068.20	-.10
4s4f	1D	1	153072.73	153073.46	-.73
		2	153515.14	153515.54	-.40
4s5f	3D	1	156382.44		
		2	156384.29		
4s6f	1D	1	156386.83	156386.53	.30
		2	156639.56		
4s7f	3D	1	158525.68		
		2	158526.82		
4s8f	1D	1	158528.36		
		2	158688.02		
4s9f	3D	1	159990.49		
		2	159991.25		
4s10f	1D	1	159992.24		
		2	160100.22		
4s50f	3D	1	165282.66		
		2	165282.66		
4s50f	1D	1	165296.76		
		2	165283.26		
4s4f	3F	2	137332.14	137332.35	-.21
4s5f	3F	2	147485.28	147484.25	1.03

续表 3

组 态	谱 项	J	E_{cal}	$E_{\text{ex.}}$	$E = E_{\text{cal}} - E_{\text{ex.}}$
4s6f	3F	2	152998.84	153000.09	-1.25
4s7f	3F	2	156322.68	156322.24	0.44
4s8f	3F	2	158477.65		
4s9f	3F	2	159952.91		
4s10f	3F	2	161006.51		
4s50f	3F	2	165289.62		
4s5g	3G	3	147817.47	147817.50	-0.03
4s6g	3G	3	153214.84	153214.68	0.16
4s7g	3G	3	156468.52	156468.79	-0.27
4s8g	3G	3	158579.75	158579.63	0.12
4s9g	3G	3	160026.76		
4s10g	3G	3	161061.46		
4s50g	3G	3	165303.35		
4p 1	1D	2	107723.24	107720.56	2.68
		0	114695.40	114695.40	0.00
		1	115224.35	115224.39	-0.04
		2	116123.01	116139.80	-16.79
		0	135639.22	135639.24	-0.02

表 4 偶宇称 $J=0$ 的 3 通道混和系数

	能级 (cm^{-1})	Z_1	Z_2	Z_3
4s5s 1S_0	106662.20	0.9986	0.0173	0.0480
4p 1 3P_0	114695.40	0.0100	0.8842	0.5199
4s6s 1S_0	133741.06	0.8889	0.2406	0.3899
4p 1 1S_0	135639.22	0.4743	0.4578	0.7519
4s7s 1S_0	146023.24	0.9987	0.0265	0.0447
4s8s 1S_0	152200.63	0.9996	0.0141	0.0224
4s9s 1S_0	155841.18	0.9998	0.0100	0.0141
4s10s 1S_0	158164.93	0.9999	0.0000	0.0100
4s50s 1S_0	165273.33	1.0000	0.0000	0.0000

表 5 偶宇称 $J=1$ 的 3 通道混和系数

	能级 (cm^{-1})	Z_1	Z_2	Z_3
4s5s 3S_1	102944.53	0.9942	0.1068	0.0100
4s4d 3D_1	113815.03	0.1072	0.9930	0.0500
4p 1 3P_1	115224.35	0.0100	0.0458	0.9983
4s6s 3S_1	133010.13	0.9993	0.1063	0.0000
4s5d 3D_1	137157.52	0.1068	0.9993	0.0000
4s7s 3S_1	145494.01	0.9993	0.1068	0.0000
4s6d 3D_1	147520.47	0.1068	0.9993	0.0000
4s8s 3S_1	151923.78	0.9993	0.1068	0.0000
4s7d 3D_1	153064.90	0.1068	0.9993	0.0000
4s9s 3S_1	155676.61	0.9993	0.1068	0.0000
4s50d 3D_1	165282.66	0.1109	0.9939	0.0000
4s50s 3S_1	165272.94	0.9993	0.1068	0.0000

表 6 偶宇称 $J=2$ 的 4 通道混和系数

	能级 (cm^{-1})	Z_1	Z_2	Z_3	Z_4
$4p^2 \ ^1D_2$	107723.24	0.5715	0.7670	0.2373	0.1697
$4s4d \ ^3D_2$	113895.80	0.8990	0.4370	0.0000	0.0000
$4p^2 \ ^3P_2$	116123.01	0.1082	0.9883	0.0424	0.0985
$4s4d \ ^1D_2$	126187.92	0.4001	0.8922	0.1378	0.1575
$4s5d \ ^3D_2$	137168.00	0.9265	0.3763	0.0000	0.0000
$4s5d \ ^1D_2$	139702.37	0.3774	0.9251	0.0300	0.0300
$4s6d \ ^3D_2$	147526.39	0.9270	0.3751	0.0000	0.0000
$4s6d \ ^1D_2$	148447.27	0.3736	0.9274	0.0141	0.0141
$4s7d \ ^3D_2$	153068.10	0.9271	0.3748	0.0000	0.0000
$4s7d \ ^1D_2$	153515.14	0.3723	0.9281	0.0100	0.0100
$4s8d \ ^3D_2$	156384.29	0.9271	0.3748	0.0000	0.0000
$4s8d \ ^1D_2$	156639.56	0.3715	0.9284	0.0000	0.0000
$4s9d \ ^3D_2$	158526.82	0.9270	0.3749	0.0000	0.0000
$4s9d \ ^1D_2$	158688.02	0.3708	0.8624	0.0000	0.0000
$4s10d \ ^3D_2$	159991.25	0.9270	0.3751	0.0000	0.0000
$4s10d \ ^1D_2$	160100.22	0.3704	0.9289	0.0000	0.0000
$4s50d \ ^3D_2$	165282.66	0.9264	0.3764	0.0000	0.0000
$4s50d \ ^1D_2$	165283.26	0.3678	0.9298	0.0000	0.0000

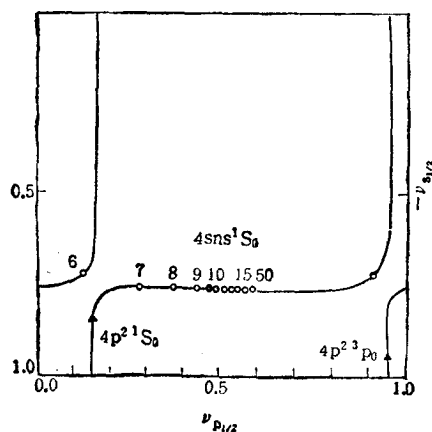


图 1 GaII 偶宇称 $J=0$ 离散能级的 Lu-Fano 图
 ○ 为 $4sns \ ^1S_0$ 实验值; ● 为 $4sns \ ^1S_0$ 理论值;
 ▲ 为 $4p^2 \ ^1S_0, \ ^3P_0$ 实验值

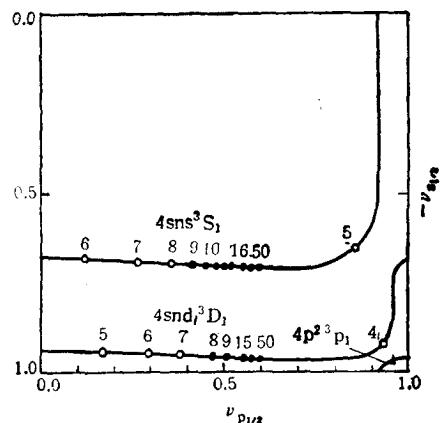


图 2 GaII 偶宇称 $J=1$ 离散能级的 Lu-Fano 图
 ○ 为 $4sns \ ^3S_1$ 和 $4snd \ ^3D_1$ 实验值; ● 为 $4sns \ ^3S_1$ 和 $4snd \ ^3D_1$ 理论值; ▲ 为 $4p^2 \ ^3P_1$ 实验值

$4p^2 \ ^1D_2$ 对 $4snd \ ^1D_2$ 的干扰很大。对 $4p^2 \ ^1D_2$ 能态, 分解通道 1 和 2 的混合系数分别为 $Z_1 = 0.5715$, $Z_2 = 0.7670$, 这表明 $4p^2 \ ^1D_2$ 态的标记只有形式上的意义, 它实际上以 $4snd \ ^1D_2$ Rydberg 态为主要特征, $4p^2 \ ^3P_2$ 的情况也是如此。

4) 对偶宇称 $J=3$ 的能谱, $4snd \ ^3D_3$ 和 $4sng \ ^3G_3$ 两个系列之间无相互作用; 奇宇称 $J=1$ $4snp \ ^1P_1$ 和 $4snp \ ^3P_1$ 两个系列之间存在相互干扰, 但干扰情况随 n 增大不发生变化。奇宇称 $J=2$ 两个系列 $4snf \ ^1P_2$ 和 $4snp \ ^3P_2$ 的情况和奇宇称 $J=1$ 的情况相类似。

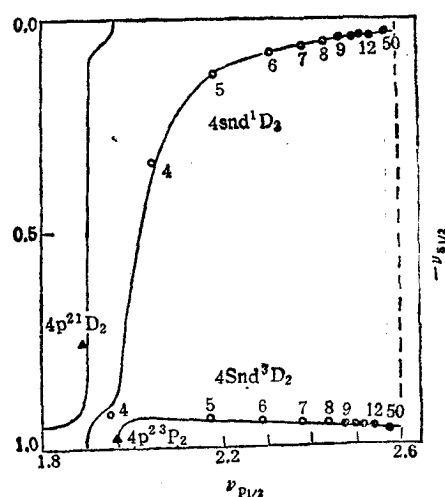


图3 GaII 偶宇称 $J=2$ 离散能级的 Lu-Fano 图 ○ 为 $4snd^1D_2$ 和 $4snd^3D_2$ 实验值;
● $4snd^1D_2$ 和 $4snd^3D_2$ 理论值; ▲ $4p^2^1D_2, ^3P_2$ 实验值

- [1] B. Isberg and U. Litzén, *Phys. Scripta*, **31**(1985), 533.
- [2] C. E. Moore, Atomic Energy Level, N. B. S. Circular Washington, **II**(1971), 467.
- [3] E. Hinnov, *Phys. Rev.*, **A14**(1976), 1533.
- [4] G. A. Victor And W. R. Taylor, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **28**(1983), 137.
- [5] C. F. Fischer, J. Hansen, *Phys. Rev.*, **A19**(1979), 1819.
- [6] U. Fano, *J. Opt. Soc. Am.*, **65**(1975), 979.
- [7] C. M. Lee and K. T. Lu, *Phys. Rev.*, **A8**(1973), 1241.
- [8] 李家明, 物理学报, **29**(1980), 419.
- [9] 李家明, 物理学报, **32**(1983), 84.
- [10] B. Isberg and U. Litzén, *Phys. Scripta*, **33**(1986), 426.
- [11] B. Denne, U. Litzen and L. J. Curtis, *Phys. Lett.*, **71A**(1979), 35.

ANALYSIS OF GaII SPECTRUM BY MULTICHANNEL QUANTUM DEFECT THEORY

LIANG LIANG WANG YONG-CHANG LIU XUE-WEN

Department of Physics, Northwest Normal University, Lanzhou, 730070

(Received 7 August 1989)

ABSTRACT

In this paper we have analysed the spectrum of GaII by means of multichannel quantum-defect theory (MQDT). Here the MQDT parameters for even-parity $J=0,1,2,3$ and odd-parity $J=1,2$ bound levels involving three limits are determined through a fit of the calculated results to experimental data. The unknown energy levels of eleven Rydberg series are predicted by using these optimum parameters. The interaction between these series are discussed. The predicted energy values are in good agreement with the experimental data from ref. [1].

PACC: 3120, 3150