

Ru 原子 Rydberg 态的能级结构

唐建志 许祥源 黄 雯 赵文正

清华大学现代应用物理系, 北京, 100084

1989 年 9 月 26 日收到

本文描述用激光共振激发-场电离方法测量 Ru 原子的 $4d'(^4F)ns$ 系列和 $4d'(^4F)nd$ 系列 Rydberg 态的能级结构. 对可能的多重态的相对谱线强度进行了计算. 理论计算与实验结果符合得很好. 由此可以确定出观测到的各谱线的光谱项.

PACC: 3270; 3280F

一、引 言

近十几年来,高 Rydberg 态研究一直是原子物理学的前沿课题,它不仅有助于基础物理研究,如验证量子亏损理论,研究原子动力学过程,丰富原子数据库等,而且有着广泛的应用背景,如原子的微量测量,激光分离同位素等.

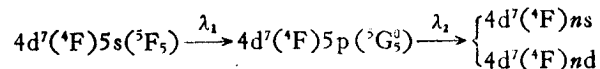
铂族元素的超微量分析在海洋资源勘探、地球化学以及地质学等方面具有重要的应用背景,但对铂族元素 Rydberg 态的研究至今很少有人涉及. Ru 原子基组态为 $(Kr, 4d'(^4F)5s(^3F_5))$, 其内壳层是开的,这样,它的 Rydberg 态可能会出现很复杂的能级结构. 因此对 Ru 原子 Rydberg 态能级结构的研究将会大大地丰富人们对 Rydberg 态的认识,开辟 Rydberg 态研究的新领域.

本文在以前工作^[1]的基础上,通过改进实验条件,用激光共振激发-场电离方法测量了 Ru 原子 $4d'(^4F)ns$ 系列和 $4d'(^4F)nd$ 系列的能级结构和谱线强度比,并通过理论分析确定了各能级的光谱项.

二、实验方法与实验结果

实验方法详见文献[1]. 激光共振电离谱仪除采用微通道板代替电子倍增器以及增大离子的漂移长度外,其它方面与文献[1]相同. 这里仅就与 Rydberg 态能级结构测量有关的问题作一简单介绍.

为了清晰地显示谱线结构,必须努力提高谱仪的能量分辨率. 这主要通过适当调节激光脉冲能量加以实现. 处于基态的 Ru 原子分两步激发至高 Rydberg 态:



其中 $\lambda_1 = 3301.60 \text{ \AA}$, λ_2 连续可调. 实验中, λ_1 的脉冲能量在激光器出口处只有几十微

焦, λ_2 的能量约为一、二百微焦. 低的激光能量可以降低多光子本底, 同时防止谱线增宽. 为了测量出谱线强度比, λ_2 的能量也不能过高.

当 n 比较小时, 能级间隔较大, 谱线结构也比较明显. 为测出 n 较小的能级结构, 必须提高高压脉冲的幅度. 实验中用于场电离的为 2000V 晶体管负脉冲高压电源.

实验测得的部分 Rydberg 态能级结构如图 1 所示. 实验测量波长经刻度和空气折射率的修正后列在表 1 中. 运用 Dirac-Slater 相对论性自洽场理论方法计算 Ru 原子高激发态的能级和量子亏损, 可以确定出 s 系列和 d 系列各 Rydberg 能级的主量子数^[1]. Ru 原子的第一电离阈值为 $I.P. = 59365.9(4)\text{cm}^{-1}$. 从图 1 和表 1 中可以看出, 测量到的 ns 系列 ($n = 28-34$) 为一个单谱线的能级结构, 但测量到的 nd 系列 ($n = 24-32$) 为一个双谱线的能级结构. 表 1 中的 λ_1^d 和 λ_2^d 表示所观测到的 nd 系列双重能级结构所对应的第二束激光的波长, 其间隔随 n 的增大而减小. R 表示对应的分支比的实验值.

表 1 nd 和 ns 系列能级实验值与分支比

n_d	24	25	26	27	28	29	30	31	32
λ_1^d	3464.97	3462.75	3460.82	3458.87	3457.28	3455.89	3454.65	3453.54	3452.51
λ_2^d	3464.68	3462.56	3460.62	3458.65	3457.17	3455.80	3454.57	3453.48	3452.45
R	2.14	2.13	1.85	1.72	1.82	1.60	2.09	2.20	2.30
n_s			28	29	30	31	32	33	34
λ_2			3459.83	3458.13	3456.53	3455.26	3454.06	3453.00	3452.07

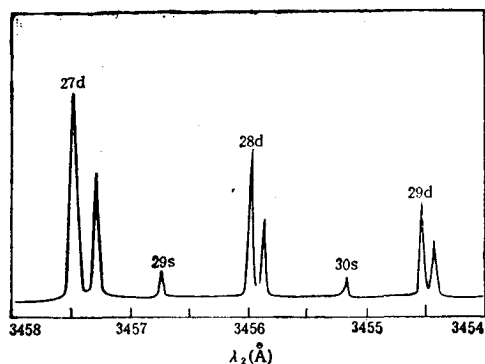


图 1 Ru 原子 Rydberg 态的部分能级结构

三、分支比的计算与光谱项的确定

对于开壳原子的单电子跃迁

$$l_1^{n_1}(\alpha_1 L_1 S_1) l_2(L S J) \rightarrow l_1^{n_1}(\alpha_1 L_1 S_1) l_2'(L' S' J'). \quad (1)$$

其谱线强度^[2]为

$$S_{\beta\beta'} = |\langle \beta J \| p^{(1)} \| \beta' J' \rangle|^2 \quad (2)$$

$$= D_{\beta\beta'}^2. \quad (3)$$

其中 $D_{\beta\beta'}$ 为偶极跃迁矩阵元, β 为以外的其它量子数, $\mathbf{p}^{(1)}$ 为偶极跃迁算符.

$$\mathbf{p}_q^{(1)} = \sum_{i=1}^N r_q^{(1)}(i) = \sum_{i=1}^N r_i c_q^{(1)}. \quad (4)$$

其中 N 为电子的数目, $c_q^{(k)}$ 为 k 秩张量算符的 q 分量, 定义为

$$c_q^{(k)} = \left(\frac{4\pi}{2k+1} \right)^{1/2} Y_{kq}(\theta, \phi). \quad (5)$$

在 LS 表象下, 经过演算得到偶极跃迁矩阵元为

$$\begin{aligned} D_{LS} &= \langle [l_1^{w_1}(\alpha_1 L_1 S_1), l_2] LSJ \| r^{(1)}(N) \| [l_1^{w_1}(\alpha_1 L_1 S_1), l_2'] L' S' J' \rangle \\ &= \delta_{SS'} (-1)^{S+J'-L_1-l_2'} \cdot [L, L', J, J']^{1/2} \\ &\quad \cdot \left\{ \begin{matrix} L & J & S \\ J' & L' & 1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l_2 & L & L_1 \\ L & l_2' & 1 \end{matrix} \right\} P_{l_2 l_2'}^{(1)}. \end{aligned} \quad (6)$$

其中 $P_{l_2 l_2'}^{(1)}$ 为单电子跃迁矩阵元.

利用 $6j$ 符号的性质, 由(6)式可得到 LS 表象下, 偶极跃迁的选择定则为

$$\begin{aligned} \Delta S &= S - S = 0, \\ \Delta L &= L' - L = 0, \pm 1 \quad (l_2' \neq 0), \\ \Delta J &= J' - J = 0, \pm 1. \end{aligned} \quad (7)$$

对于满足选择定则的不同谱项, 其谱线强度是不同的. 但谱线强度之比与单电子跃迁矩阵元 $P_{l_2 l_2'}^{(1)}$ 无关, 仅与角动量量子数有关. 例如对于下列的跃迁:

$$l_1^{w_1}(\alpha_1 L_1 S_1) l_2 (LSJ) \rightarrow l_1^{w_1}(\alpha_1 L_1 S_1) l_2' (L' S' J'), \quad (8)$$

$$\rightarrow l_1^{w_1}(\alpha_1 L_1 S_1) l_2'' (L'' S' J''). \quad (9)$$

其谱线强度之比(或称相对谱线强度)为

$$R_9 = \frac{S_9}{S_9} = \frac{[L', J']}{[L'', J'']} \cdot \frac{\left\{ \begin{matrix} L & J & S \\ J' & L' & 1 \end{matrix} \right\}^2 \cdot \left\{ \begin{matrix} l_2 & L & L_1 \\ L' & l_2' & 1 \end{matrix} \right\}^2}{\left\{ \begin{matrix} L & J & S \\ J'' & L'' & 1 \end{matrix} \right\}^2 \cdot \left\{ \begin{matrix} l_2 & L & L_1 \\ L'' & l_2'' & 1 \end{matrix} \right\}^2}. \quad (10)$$

若 $L' = L''$, 即当不同的末态仅仅其谱项的总角动量不同时, 上式简化为

$$R_9 = \frac{[J']}{[J'']} \cdot \frac{\left\{ \begin{matrix} L & J & S \\ J' & L & 1 \end{matrix} \right\}^2}{\left\{ \begin{matrix} L & J & S \\ J'' & L & 1 \end{matrix} \right\}^2}. \quad (11)$$

这里的 $6j$ 符号可查表^[3]或编制程序计算得到.

由(7)式的角动量选择定则可以推得 ns 系列 Rydberg 态只有两个可能的谱项, 对应于下列跃迁:

$$4d^7(^4F)5p(^3G_0^o) \longrightarrow 4d^7(^4F)ns(^3F_5), \quad (12)$$

$$\longrightarrow 4d^7(^4F)ns(^3F_4). \quad (13)$$

由(11)式很容易计算得到其相对谱线强度为

$$R_{12} = S_{13}/S_{12} = 9. \quad (14)$$

即(12)式的跃迁其谱线强度比(13)式的跃迁约小一个数量级。所以在实验中只观测到 ns 系列的每个 Rydberg 态对应于一条谱线,其谱项为 $4d^7(^4F)ns(^5F_4)$ 。

而对 nd 系列,每个 Rydberg 态有 8 个可能的谱项,分别对应于下列跃迁:

$$4d^7(^4F)5p(^5G_3^o) \longrightarrow 4d^7(^4F)nd(^5H_6), \quad (15)$$

$$\longrightarrow 4d^7(^4F)nd(^5H_5), \quad (16)$$

$$\longrightarrow 4d^7(^4F)nd(^5H_4), \quad (17)$$

$$\longrightarrow 4d^7(^4F)nd(^5G_6), \quad (18)$$

$$\longrightarrow 4d^7(^4F)nd(^5G_5), \quad (19)$$

$$\longrightarrow 4d^7(^4F)nd(^5G_4), \quad (20)$$

$$\longrightarrow 4d^7(^4F)nd(^5F_5), \quad (21)$$

$$\longrightarrow 4d^7(^4F)nd(^5F_4). \quad (22)$$

经过计算可知,在这些可能的跃迁中,(17)式的跃迁谱线最强,它与其它跃迁的谱线强度之比分别为: $R_{15} = 303.3$, $R_{16} = 31.8$, $R_{18} = 8.13$, $R_{19} = 83.2$, $R_{20} = 11.8$, $R_{21} = 1.91$, $R_{22} = 17.2$ 。可以看出,除(21)式的跃迁外,其它跃迁的谱线强度均比(17)式的跃迁小一个数量级以上。 nd 系列的每个 Rydberg 态有两条较强的谱线,其谱线强度之比为 1.91:1。与表 1 中 $I\lambda_d^o/I\lambda_d^i$ 的值相比可以看出,理论分析与实验结果非常符合。据此可以确定出观测到的 nd 系列谱线的光谱项分别为: $4d^7(^4F)nd(^5H_4)$ 和 $4d^7(^4F)nd(^5F_5)$ 。此外,还可以看出 nd 系列的 8 个可能谱项中最强的谱线 $4d^7(^4F)nd(^5H_4)$ 满足下列跃迁规则:

$$L \rightarrow L + 1$$

$$J \rightarrow J - 1$$

四、结 论

运用激光共振激发-场电离方法观测到了 Ru 原子 ns 系列和 nd 系列的 Rydberg 态的能级结构。通过相对谱线强度的理论计算,可以确定出谱线最强的光谱项。理论分析与实验结果进行比较,两者符合得很好,据此可以确定观测到的各能级谱线的光谱项。在复杂的谱项结构中确定出最强的光谱项,这在原子微量探测,激光分离同位素等应用中选择中间共振激发态具有重要的意义。

工作过程中,中国科学院物理研究所李家明教授给予了十分宝贵的指导,谨致以衷心的感谢。

[1] 许祥源等,物理学报, **38**(1989),1665.

[2] R. D. Cowan, The Theory of Atomic Structure and Spectra, University of California Press, (1981).

[3] M. Rotenberg *et al.*, The 3-j and 6-j Symbols, The Technology Press, (1959).

LEVEL STRUCTURES OF RYDBERG STATES OF Ru ATOM

TANG JIAN-ZHI XU XIANG-YUAN HUANG WEN ZHAO WEN-ZHENG

Department of Modern Applied Physics, Tsinghua University, Beijing, 100084

(Received 26 September 1989)

ABSTRACT

The energy level structures of Rydberg states of Ru atom in $4d^7(^4F) ns$ series and $4d^7(^4F) nd$ series are measured by means of laser resonance excitation—electric field ionization method. The relative line strengths within the multiplet of an electron configuration are calculated. The theoretical results are coincident with the experiments satisfactorily. The terms of the measured spectrum lines can be identified.

PACC: 3270; 3280F