

振子强度密度理论研究*

类锂离子 3s 态到 p 通道跃迁振子强度密度

刘 磊 李家明¹⁾

1)中国科学院物理研究所,北京 100080

复旦大学物理系,上海 200433;

三束材料改性国家重点联合实验室,复旦大学分部,上海 200433

1992 年 12 月 14 日收到

以类锂离子 3s 态到 p 通道光跃迁为例,在单通道理论框架下统一处理从一个初态(3s)到一个通道(p 通道)中无数个激发态(包括束缚态 np 和连续态 ep)的光跃迁过程.具体地根据相对论性和非相对论性原子自洽场理论,分别计算了类锂离子 3s 态到 p 通道跃迁的有关振子强度密度,阐明了其相对论效应以及振子强度密度随原子序数变化的标度规律.根据本文所计算的振子强度密度,可方便地获得 3s 跃迁至所有 np 束缚激发态的振子强度.

PACC: 3280F

一、引 言

原子和离子的光吸收(或光辐射)物理过程的研究,对于寻找 X 射线激光以及其可行性的研究是很重要的.对于原子离子的光吸收过程,如果入射光子能量小于其电离阈值则为光激发过程,其对应的是“束缚—束缚”跃迁,如光子能量大于电离阈值,则光吸收过程为光电离过程,其对应的是“束缚—连续”跃迁.根据量子数亏损理论,具有相同角动量特征的无数个离散态(即里德伯态)和相应的连续态形成一个通道.从一个初态到一个通道中无数个离散态的“束缚—束缚”跃迁和相应连续态的“束缚—连续”跃迁可以统一处理.原子光吸收截面与原子的振子强度密度成正比,该振子强度密度随光子能量连续变化,并在电离阈值上下能域连续相接.因此只要掌握了相应的振子强度密度的分布,就系统地掌握了从一个初态到一个通道中无数多个激发态的光跃迁过程.对于中性基态原子的振子强度密度已有综述性的评论^[1].对于中性原子激发态的振子强度密度的极小点位置^[2]和离化态原子基态的光电离过程(相应于电离阈值以上能域的振子强度密度)^[3-5],也曾作过比较系统的探讨.本文根据相对论性和非相对论性原子自洽场理论,分别具体计算了类锂离子 3s 态到 p 通道跃迁的有关振子强度密度,从而统一处理其无穷多个“束缚—束缚”跃迁 $3s \rightarrow np (n=2, 3, \dots)$ 和相应的“束缚—连续”跃迁 $3s \rightarrow \epsilon p$.同时,本文还阐明了其相对论效应,讨论了振子强度密度随原子序数变化的标度规律.

* 国家自然科学基金资助的课题.

二、类锂离子 3s—p 通道跃迁振子强度密度

类锂离子(或其它类碱金属离子)激发态由一个激发电子和一个具有闭壳层结构的离子实组成. 由于该离子实的激发能或其电离阈值(即类锂离子的第二电离阈值)较高, 类锂离子的光吸收过程一般为单通道物理过程. 因此可在独立电子近似下较真实地描述类锂离子的光吸收过程. 在独立电子近似下, 原子中的电子彼此独立地在一个共同的自洽势中运动, 而原子的光吸收过程可以看成是一个处于 $n\lambda$ 壳层(对于相对论情形, $\lambda=\kappa$; 对于非相对论情形, $\lambda=l$. 下同)的电子, 在吸收光子能量后跃迁到另一束缚态 $n'\lambda'$ (即光激发)或连续态 $\epsilon'\lambda'$ (即光电离)的过程. 根据已建立的相对论和非相对论自洽场理论方法, 首先分别求出原子离子的相对论性和非相对论性自洽势. 在自洽势的基础上, 分别求解狄喇克方程和薛定谔方程得到初末态能级位置和相应的波函数, 从而进一步分别计算出有关的相对论性和非相对论性量子数亏损和振子强度密度^[2,6]. 对于一般的原子离子, 光吸收过程通常为多通道问题, 需要进一步考虑电子间的关联, 可采用组态相互作用等方法处理^[6]. 下面给出描述光吸收过程的有关表达式, 以更好地理解 and 阐述有关振子强度的相对论效应及其随原子序数变化的标度规律. 在电偶极近似下, 考虑其某一允许跃迁 $n\lambda \rightarrow n'\lambda'$ ($\epsilon'\lambda'$), 则对光电离过程, 其吸收截面可写为^[2,6]

$$\begin{aligned}\sigma &= (\pi e^2 h / mc) (df_{\lambda'} / d\epsilon') \\ &= 4.035 \times 10^{-18} (\text{cm}^2 \cdot \text{Hartree}) (df_{\lambda'} / d\epsilon'),\end{aligned}\quad (1)$$

其中 Hartree = 27.21 eV 为能量的原子单位. $df_{\lambda'} / d\epsilon'$ 为跃迁振子强度密度, 其量纲为 Hartree⁻¹, 对固定的初态它是末态轨道能 ϵ' 的函数. 为了后面进一步讨论振子强度密度随原子序数变化的标度规律, 这里将采用非相对论的表达式, 因为非相对论类氢离子具有严谨的标度规律; 振子强度密度正比于初末态的能量差 $\Delta\epsilon$ 和其偶极矩阵元 $M(\epsilon')$ 的平方; 其初态波函数为态归一, 末态波函数为能量归一. 对于光激发过程, 其吸收截面可写为^[2,6]

$$\sigma = 4.035 \times 10^{-18} (\text{cm}^2 \cdot \text{Hartree}) f_{\lambda'} L, \quad (2)$$

其中 L 为线形函数, 其量纲为 Hartree⁻¹, 并满足 $\int L d\epsilon = 1$. 跃迁振子强度 $f_{\lambda'}$ 为一无量纲数. 它正比于初末态的能量差 $\Delta\epsilon$ 和其偶极矩阵元 $M(n')$ 的平方; 其初末态波函数均为态归一. 当末态波函数采用能量归一时, 该振子强度即为相应的振子强度密度 $df_{\lambda'} / d\epsilon'$, 即

$$df_{\lambda'} / d\epsilon' = f_{\lambda'} N_{n'\lambda'}^2, \quad (3)$$

其中 $N_{n'\lambda'}$ 为末态波函数态密度, 由下式给出(这里已忽略小量 $d\mu' / d\epsilon'$)^[7]:

$$\begin{aligned}N^2 &= \{(n' - \mu' - |\kappa'| + \gamma)^3 / Q^2\} \\ &\quad \{1 + [Q\alpha / (n' - \mu' - |\kappa'| + \gamma)]^2\}^{3/2}; \quad (\text{相对论性})\end{aligned}\quad (4)$$

$$\xrightarrow{\alpha \rightarrow 0} (n' - \mu')^3 / Q^2, \quad (\text{非相对论性})$$

式中 μ' 为 $n'\lambda'$ 轨道的量子数亏损, Q 为原子电离度加 1, α 为精细结构常数, $\gamma = (\kappa'^2 - Q^2\alpha^2)^{1/2}$. 量子数亏损 μ' 和轨道能 $\epsilon'_{n'\lambda'}$ 由下式联系^[7]:

$$\epsilon' = - \{1 - [1 + (Q\alpha)^2/(n' - \mu' - |\kappa'| + \gamma)^2]^{-1/2}\}/\alpha^2, \quad (\text{相对论性}) \quad (5)$$

$$\xrightarrow{\alpha \rightarrow 0} -Q^2/2(n' - \mu')^2. \quad (\text{非相对论性})$$

根据量子数亏损理论,量子数亏损 μ' 随轨道能平缓变化. 其跃迁矩阵元亦是跃迁能量的连续函数,并在阈值上下能域连续相接. 在一定条件下跃迁矩阵元随能量的变化可通过零点(通过零点的能量位置在阈值上下均可能)^[2]. 该零点对应于振子强度密度的极小点. 当确定极小点位置后则可较方便地对连续变化的振子强度密度进行数值内插. 在此基础上可统一地描述光激发和光电离过程(包括其跃迁概率和波长). 为便于下面讨论,定义约化振子强度密度 $df_{\kappa'}/d\epsilon'$ 为

$$df_{\kappa'}/d\epsilon' = Q^2 df_{\kappa'}/d\epsilon. \quad (6)$$

由(3)和(4)式可方便地看出 $df_{\kappa'}/d\epsilon'$ 和 $f_{\kappa'}$ 随原子序数变化有相同的标度规律.

表 1 给出所计算的部分类锂离子 $3s-np$ 跃迁的振子强度和波长,并与能够得到的其它理论或实验数据^[8,9]作了比较. 说明本文自治场理论结果的精度在 10^{-2} 数量级. 这基本上满足了应用的要求. 如需要更可靠的理论结果,可在此基础上进行超越自治场的理论计算^[6]. 根据本文计算结果,各种类锂离子的 $3s$ 态和 np 态的量子数亏损之差 $\Delta\mu = \mu_{np} - \mu_{3s}$ 满足 $-0.4 < \Delta\mu < 0$ (见表 2),因此 $3s-np$ 跃迁的振子强度在阈值下存在一个极小点^[2]. 一般而言,随着 $\Delta\mu$ 的减小(即绝对值 $|\Delta\mu|$ 增大),该极小点位置向高能方向移动^[2,10]. 例如当 $\Delta\mu < -0.4$ 时,该极小点位置即移到阈值以上,形成光电离截面的 Cooper 极小点^[2]. 对于本文所考虑的等电子系列而言, $\Delta\mu$ 随着原子序数的增大而增大,因此极小点位置应随原子序数的增大而降低. 具体地讲,对锂原子,极小点位置在 $4p$ 与 $5p$ 之间,即 $3s-np$ 跃迁矩阵元在 $n \leq 4$ 时为负,在 $n \geq 5$ 时为正. 由于 $4p$ 与 $5p$ 态的能量差很小,它们的能级位置和极小点位置很接近,因此如表 1 所示, $3s-4p$ 和 $3s-5p$ 跃迁振子强度很小. 对于 Be^+ 等其它离子,极小点位置则下降到 $3p$ 与 $4p$ 之间.

由表 1 可见,对原子序数 Z 低的离子,相对论效应很小,即对于相对论性计算值 $f_{1/2}$ 和 $f_{3/2}$,其比值 $R = f_{3/2}/f_{1/2}$ 约等于其非相对论极限值 2,而 $f_r = f_{1/2} + f_{3/2}$ 则约等于相应的非相对论性计算值 f_{nr} . 随着原子序数增大,则相对论效应逐步增大;对于不同的跃迁,比值 R 有可能大于 2 也可能小于 2,同样 f_r 有可能大于 f_{nr} 也可能小于 f_{nr} . 相对论效应主要来源于原子内区^[11]. 采用相对论性计算时,各通道波函数将由于相对论效应而向内收缩. 其中 s 通道波函数能渗透到原子内区,其相对论效应最显著,收缩得最多. 而在 $p_{1/2}$ 和 $p_{3/2}$ 通道中,由于离心势的作用,其波函数相对不容易渗透到原子内区,因此其相对论效应弱于 s 通道;即 p 通道波函数的收缩量小于 s 通道波函数的收缩量. 其中 $p_{3/2}$ 相对于 $p_{1/2}$ 而言收缩得又少一些. 这些相对论效应反映在量子数亏损上即: $\delta\mu(s) \gg \delta\mu(p_{1/2}) > \delta\mu(p_{3/2})$ ^[11]. 这里 $\delta\mu$ 表示 μ 的相对论值与非相对论值之差. 由于相对论效应使初末态波函数向内收缩,按类氢离子变化规律,在零点以上的跃迁矩阵元的绝对值将减小,因此 $f_r < f_{nr}$; 同时比值 $R < 2$. 在零点附近,跃迁矩阵元 $M(\epsilon)$ 随 ϵ 的增大而上升,即从负值过零点上升到正值;但相对论和非相对论所计算的零点位置应不同. 由于 $\delta\mu(s) \gg \delta\mu(p_{1/2}) > \delta\mu(p_{3/2})$,因

此末态与初态量子数亏损之差 $\Delta\mu$ 的非相对论性计算值大于相应的相对论性计算值;同时对于相对论性计算,相应于 $s-p_{1/2}$ 跃迁的 $\Delta\mu$ 大于 $s-p_{3/2}$ 跃迁的 $\Delta\mu$. $\Delta\mu$ 较大(即其绝对值较小)则相应的振子强度极小点位置较低^[2],因此,非相对论性极小点位置最低,其次为 $s-p_{1/2}$ 跃迁的极小点,而 $s-p_{3/2}$ 跃迁的极小点位置最高. 注意到 M 在极小点以上为正,在极小点以下为负. 可知在极小点附近跃迁矩阵元 M 的非相对论性计算值大于相对论性计算值;同时对于相对论性计算,相应于 $s-p_{1/2}$ 跃迁的 M 大于 $s-p_{3/2}$ 跃迁的 M . 振子强度正比于 M 的平方,于是如表 1 所示,在振子强度极小点以上, $f_r < f_{nr}$, $R < 2$; 在振子强度

表 1 部分类锂离子 $3s-np_{1/2,3/2}$ 跃迁的波长 $\lambda_{1/2,3/2}$ 和振子强度 $f_{1/2,3/2}$ (表中 Z 为原子序数; n 为末态主要量子数; λ 为 $\lambda_{1/2}$ 和 $\lambda_{3/2}$ 的权重平均值; $f = f_{1/2} + f_{3/2}$ 为 $3s-np$ 跃迁总振子强度; $R = f_{3/2}/f_{1/2}$, 其非相对论极限为 2)

Z	n	相 对 论			非相对论	[7]		
		$\lambda_{1/2,3/2}$ λ	$f_{1/2,3/2}$ f	R		$\lambda_{1/2,3/2}$ λ	$f_{1/2,3/2}$ f	R
3	2	8254.9	8255.7	-1.14×10^{-1}	-2.28×10^{-1}	8126.4	-3.45×10^{-1}	
		8255.4		-3.42×10^{-1}	2.00			
	3	25633.	25630.	4.11×10^{-1}	8.23×10^{-1}			
		25631.		1.23×10^0	2.00			
	4	10570.	10569.	5.36×10^{-5}	1.08×10^{-4}			
		10569.		1.62×10^{-4}	2.02			
	5	8323.2	8323.1	2.11×10^{-4}	4.20×10^{-4}			
		8323.1		6.31×10^{-4}	1.99			
	12	65.648	65.856	-2.25×10^{-2}	-4.57×10^{-2}			
		65.787		-6.82×10^{-2}	2.03			
12	3	2220.2	2151.6	7.04×10^{-2}	1.45×10^{-1}	2278.7	2.11×10^{-1}	1.42×10^{-1}
		2174.5		2.16×10^{-1}	2.07			
	4	169.39	169.22	1.16×10^{-1}	2.29×10^{-1}			
		169.28		3.44×10^{-1}	1.98			
	22	16.265	16.449	-1.78×10^{-2}	-3.80×10^{-2}			
		16.388		-5.58×10^{-2}	2.13			
	3	1097.8	897.12	3.60×10^{-2}	8.88×10^{-2}			
		964.01		1.25×10^{-1}	2.46			
	4	44.166	43.999	1.37×10^{-1}	2.63×10^{-1}			
		44.055		4.00×10^{-1}	1.93			
92	2	6.6642	8.6678	-1.38×10^{-2}	-8.83×10^{-2}	16.287	-1.78×10^{-2}	-3.79×10^{-2}
		7.9999		-1.02×10^{-1}	6.42			
	3	168.72	9.1400	8.78×10^{-3}	3.71×10^{-1}			
		62.333		3.80×10^{-1}	42.30			
	4	1.9339	1.7850	1.52×10^{-1}	1.09×10^{-1}			
		1.8346		2.61×10^{-1}	0.72			
	22	16.287	16.452	-1.78×10^{-2}	-3.79×10^{-2}			
				-5.57×10^{-2}	2.13			
	3	1097.8	897.12	3.60×10^{-2}	8.88×10^{-2}			
		964.01		1.25×10^{-1}	2.46			
92	4	44.166	43.999	1.37×10^{-1}	2.63×10^{-1}	44.272	1.37×10^{-1}	2.64×10^{-1}
		44.055		4.00×10^{-1}	1.93			
	2	6.6642	8.6678	-1.38×10^{-2}	-8.83×10^{-2}			
		7.9999		-1.02×10^{-1}	6.42			
	3	168.72	9.1400	8.78×10^{-3}	3.71×10^{-1}			
		62.333		3.80×10^{-1}	42.30			
	4	1.9339	1.7850	1.52×10^{-1}	1.09×10^{-1}			
		1.8346		2.61×10^{-1}	0.72			
	22	16.287	16.452	-1.78×10^{-2}	-3.79×10^{-2}			
				-5.57×10^{-2}	2.13			

极小点以下, $f_r > f_{nr}$, $R > 2$. 具体地讲,对锂原子 $3s-np$ 跃迁,当 $n \leq 4$ 时, $f_r > f_{nr}$, $R > 2$; 当 $n \geq 5$ 时, $f_r < f_{nr}$, $R < 2$. 对于 Be^+ 等其它 $Z > 3$ 的类锂离子的 $3s-np$ 跃迁,当 $n \leq 3$ 时, $f_r > f_{nr}$, $R > 2$; 当 $n \geq 4$ 时, $f_r < f_{nr}$, $R < 2$. 在表 1 中,对于原子序很小的锂原子,预期相对

论效应很小, 但对其 $3s-4p$ 和 $3s-5p$ 跃迁, 由于在极小点上下以至其振子强度本身很小, 因此相对论效应相对较为显著 (即 $R(4p)=2.02, R(5p)=1.99$). 对于原子序数较大的类锂离子, 相对论效应逐步增强; 即对于一个特定的跃迁, $|f_i - f_{nr}|$ 和 $|R-2|$ 逐步增大. 由于振子强度 $f \sim \Delta\epsilon \cdot M(n')^2$, 因此非相对论性振子强度存在简单的类氢标度规律^[12]. 对于 $\Delta n \neq 0$ (即末态主量子数 $n \neq 3$) 的跃迁, 由 (5) 式 $\Delta\epsilon \sim Z^2$, 而 $M(n') \sim Z^{-1}$. 所以 $f \sim Z^0$. 由表 1 看到, 原子序数较大时, 类氢近似成立, 非相对论振子强度随原子序的变化趋于平稳. 对于 $\Delta n = 0$ 的跃迁, 由于高电离度离子的量子数亏损 $\mu \sim Z^{-1}$, 由 (5) 式 $\Delta\epsilon \sim Z$, 因此 $f \sim Z^{-1}$. 如表 1 所示, 非相对论振子强度随原子序数增加而单调下降. 有趣的是, 在过渡到相对论情形时, $3s$ 和 $3p_{1/2}$ 态趋近简并 (即 $\Delta\epsilon(3p_{1/2}) \sim Z$), 而自旋-轨道能级分裂随原子序数增大迅速增大 (即 $\Delta\epsilon(3p_{3/2}) \sim Z + \beta Z^4$, 详见后面讨论), 结果对于高 Z 离子, 如表 1 中类锂离子, $R=42.3 \gg 2$. 下面还将进一步阐述约化振子强度密度随原子序数变化的标度规律.

表 2 类锂离子 $3s-p_{1/2,3/2}$ 通道跃迁约化振子强度密度 (表中 Z 为原子序数; μ_{3s} 为 $3s$ 初态的量子数亏损; n 为末态 np 的主量子数, $n=0$ 表示末态为阈值处的连续态 (即对应于 $3s-\epsilon p$ 约迁); $\mu_{1/2,3/2}$ 分别为 $p_{1/2,3/2}$ 通道量子数亏损; $df/d\bar{\epsilon}$ 为约化振子强度密度)

Z μ_{3s}	n	相 对 论				非相对论
		$\mu_{1/2,3/2}$		$df_{1/2,3/2}/d\bar{\epsilon}$		$df/d\bar{\epsilon}$
3	2	0.042	0.042	-8.56×10^{-1}	-1.71×10^0	-2.57×10^0
	3	0.049	0.049	1.06×10^1	2.12×10^1	3.17×10^1
	4	0.051	0.051	3.30×10^{-3}	6.68×10^{-3}	9.81×10^{-3}
	5	0.052	0.052	2.55×10^{-2}	5.09×10^{-2}	7.67×10^{-2}
	6	0.053	0.053	4.87×10^{-2}	9.73×10^{-2}	1.46×10^{-1}
	0.42	0.054	0.054	8.72×10^{-2}	1.74×10^{-1}	2.62×10^{-1}
4	2	0.048	0.048	-4.94×10^{-1}	-9.88×10^{-1}	-1.48×10^0
	3	0.055	0.054	7.25×10^0	1.45×10^1	2.18×10^1
	4	0.057	0.056	1.27×10^0	2.53×10^0	3.80×10^0
	5	0.057	0.057	1.08×10^0	2.16×10^0	3.25×10^0
	0.28	0.059	0.059	7.37×10^{-1}	1.47×10^0	2.21×10^0
6	2	0.039	0.039	-2.88×10^{-1}	-5.77×10^{-1}	-8.56×10^{-1}
	3	0.044	0.043	4.22×10^0	8.48×10^0	1.27×10^1
	4	0.045	0.045	4.09×10^0	8.16×10^0	1.23×10^1
	5	0.045	0.045	2.61×10^0	5.21×10^0	7.84×10^0
	0.17	0.046	0.046	1.35×10^0	2.70×10^0	4.06×10^0
9	2	0.028	0.028	-2.05×10^{-1}	-4.14×10^{-1}	-6.17×10^{-1}
	3	0.031	0.031	2.58×10^0	5.22×10^0	7.74×10^0
	4	0.032	0.031	6.20×10^0	1.23×10^1	1.86×10^1
	5	0.032	0.032	3.54×10^0	7.05×10^0	1.06×10^1
	0.11	0.033	0.032	1.65×10^0	3.28×10^0	4.95×10^0
12	2	0.022	0.022	-1.74×10^{-1}	-3.54×10^{-1}	-5.23×10^{-1}
	3	0.024	0.023	1.85×10^0	3.83×10^0	5.56×10^0
	4	0.024	0.024	7.25×10^0	1.44×10^1	2.18×10^1
	5	0.025	0.024	3.96×10^0	7.85×10^0	1.19×10^1
	0.077	0.025	0.025	1.76×10^0	3.50×10^0	5.28×10^0

续表 2

Z	n	相 对 论				非相对论
		$\mu_{1/2,3/2}$		$df_{1/2,3/2}/d\bar{\epsilon}$		$df/d\bar{\epsilon}$
15	2	0.018	0.018	-1.58×10^{-1}	-3.25×10^{-1}	-4.75×10^{-1}
	3	0.019	0.019	1.44×10^0	3.10×10^0	4.34×10^0
	4	0.020	0.019	7.87×10^0	1.55×10^1	2.37×10^1
	5	0.020	0.020	4.19×10^0	8.28×10^0	1.26×10^1
	0.060	0.020	0.020	1.82×10^0	3.61×10^0	5.46×10^0
22	2	0.013	0.012	-1.39×10^{-1}	-2.99×10^{-1}	-4.20×10^{-1}
	3	0.014	0.013	9.52×10^{-1}	2.36×10^0	2.87×10^0
	4	0.014	0.013	8.62×10^0	1.67×10^1	2.61×10^1
	5	0.014	0.013	4.45×10^0	8.71×10^0	1.34×10^1
	0.041	0.014	0.014	1.87×10^0	3.71×10^0	5.68×10^0
32	2	0.009	0.008	-1.26×10^{-1}	-2.97×10^{-1}	-3.88×10^{-1}
	3	0.010	0.009	6.38×10^{-1}	2.26×10^0	1.94×10^0
	4	0.010	0.009	9.05×10^0	1.68×10^1	2.76×10^1
	5	0.010	0.009	4.59×10^0	8.77×10^0	1.41×10^1
	0.029	0.011	0.010	1.90×10^0	3.71×10^0	5.79×10^0
42	2	0.008	0.006	-1.19×10^{-1}	-3.17×10^{-1}	-3.73×10^{-1}
	3	0.008	0.007	4.77×10^{-1}	2.68×10^0	1.46×10^0
	4	0.009	0.007	9.19×10^0	1.62×10^1	2.85×10^1
	5	0.009	0.007	4.62×10^0	8.52×10^0	1.43×10^1
	0.023	0.009	0.007	1.90×10^0	3.64×10^0	5.84×10^0
52	2	0.007	0.005	-1.13×10^{-1}	-3.51×10^{-1}	-3.63×10^{-1}
	3	0.008	0.005	3.79×10^{-1}	3.44×10^0	1.17×10^0
	4	0.008	0.006	9.19×10^0	1.50×10^1	2.90×10^1
	5	0.008	0.006	4.59×10^0	8.06×10^0	1.45×10^1
	0.019	0.008	0.006	1.88×10^0	3.52×10^0	5.88×10^0
62	2	0.007	0.004	-1.08×10^{-1}	-4.03×10^{-1}	-3.57×10^{-1}
	3	0.007	0.004	3.12×10^{-1}	4.51×10^0	9.76×10^{-1}
	4	0.007	0.005	9.09×10^0	1.34×10^1	2.93×10^1
	5	0.008	0.005	4.53×10^0	7.43×10^0	1.46×10^1
	0.017	0.008	0.005	1.86×10^0	3.34×10^0	5.90×10^0
72	2	0.007	0.003	-1.02×10^{-1}	-4.74×10^{-1}	-3.52×10^{-1}
	3	0.007	0.004	2.64×10^{-1}	5.89×10^0	8.38×10^{-1}
	4	0.007	0.004	8.92×10^0	1.14×10^1	2.96×10^1
	5	0.008	0.004	4.43×10^0	6.61×10^0	1.47×10^1
	0.016	0.008	0.004	1.82×10^0	3.10×10^0	5.93×10^0
82	2	0.007	0.003	-9.61×10^{-2}	-5.71×10^{-1}	-3.49×10^{-1}
	3	0.008	0.003	2.27×10^{-1}	7.59×10^0	7.36×10^{-1}
	4	0.008	0.003	8.67×10^0	9.14×10^0	2.97×10^1
	5	0.008	0.003	4.31×10^0	5.62×10^0	1.47×10^1
	0.016	0.008	0.004	1.77×10^0	2.79×10^0	5.94×10^0
92	2	0.008	0.002	-8.94×10^{-2}	-7.04×10^{-1}	-3.47×10^{-1}
	3	0.008	0.003	1.97×10^{-1}	9.63×10^0	7.06×10^{-1}
	4	0.009	0.003	8.36×10^0	6.68×10^0	2.99×10^1
	5	0.009	0.003	4.14×10^0	4.45×10^0	1.47×10^1
	0.016	0.009	0.003	1.72×10^0	2.38×10^0	5.95×10^0

表 2 给出原子序数不大于 92 的类锂离子 3s 到 p 通道跃迁的约化振子强度密度以及有关的量子数亏损值. 约化振子强度密度为能量的光滑连续的缓变函数. 由下面的讨论可知, 等电子系列的约化振子强度密度随原子序的变化亦是光滑连续的缓变函数. 因此可以采用表 2 中有限的基数数据, 利用约化振子强度密度随原子序数和能量的变化关系进行可靠的数值内插. 然后可方便地应用(3)和(4)式得到任意原子序数任意跃迁的振子强度. 相应地可以利用量子数亏损随原子序数和能量的变化关系, 采用表 2 中有限的基数数据进行可靠的数值内插. 然后可方便地应用(5)式之差得到任意原子序数任意跃迁的波长. 因此掌握了表 2 中的数据, 就系统地掌握了所有类锂离子从一个 3s 定态到整个 p 通道中无穷多个末态跃迁的振子强度密度和跃迁波长, 从而系统地掌握相应的光跃迁截面等. 下面将具体阐述振子强度密度随原子序数变化的标度规律. 分三种情形讨论.

1. $\Delta n = -1$ (3s—2p 跃迁)

振子强度或由(6)式定义的约化振子强度密度正比于初末态能量差 $\Delta\epsilon$ 和相应的偶极矩阵元 $M(n')$ 的平方. 根据(5)式, $\Delta\epsilon \sim Q^2 \sim Z^2$. 采用非相对论库仑标度, 则 $M(n') \sim Z^{-1}$. 因此约化振子强度密度 $df/d\bar{\epsilon} \sim Z^0$, 即不强烈地依赖 Z . 由表 2 可见, 非相对论约化振子强度密度 $(df/d\bar{\epsilon})_n$ 随原子序数增加缓慢下降, 并在高 Z 区域趋于平稳. $(df/d\bar{\epsilon})_n$ 的这种变化趋势可以理解为, 随着原子序数增加 $\Delta\mu$ 减小, 振子强度密度极小点位置下降, 从而抑制 3s—2p 跃迁的约化振子强度密度, 使其缓慢减小. 当然在低 Z 区, 电子屏蔽作用相对重要, 库仑标度并不完全适用, 但仍给出很有意义的结果. 过渡到相对论情形, 3s—2p_{1/2} 跃迁的约化振子强度密度 $(df/d\bar{\epsilon})_r$ 和 $(df/d\bar{\epsilon})_n$ 随 Z 的变化趋势一致, 即随 Z 的增加缓慢下降, 并在高 Z 区域趋于平稳. 当 $4 < Z \leq 92$, 其最大值与最小值之比约为 3. 如前所述, 由于相对论效应, 3s—2p_{3/2} 跃迁的约化振子强度密度大于 3s—2p_{1/2} 跃迁的约化振子强度密度. 该相对论效应随原子序数增大而增大, 使得 3s—2p_{3/2} 跃迁约化振子强度密度随原子序数增大先缓慢下降后又缓慢上升. 当 $4 < Z \leq 92$, 其最大值与最小值之比约为 2.

2. $\Delta n = 0$ (3s—3p 跃迁)

此时初末态能量差相对较小, 需考虑 3p_{1/2} 与 3p_{3/2} 的能量差. 对于非相对论性或 3s—3p_{1/2} 跃迁, 由(5)式知, 初末态能级差 $\Delta\epsilon \sim Z$ (因为 $\mu \sim Z^{-1}$), 而偶极矩阵元 $M(n') \sim Z^{-1}$, 所以约化振子强度密度 $df/d\bar{\epsilon} \sim Z^{-1}$. 如表 2 所示, 非相对论性或 3s—3p_{1/2} 跃迁约化振子强度密度随原子序数按约 Z^{-1} 的速度下降. 当 $4 < Z \leq 92$, $Zdf/d\bar{\epsilon}$ 最大值与最小值之比约为 1.2. 对于 3s—3p_{3/2} 跃迁, 由(5)式, $\Delta\epsilon \sim Z(1 + \beta Z^3)$, 这里 $\beta = \alpha^2/4\Delta(Z\mu)$, $\Delta(Z\mu)$ 为 3s 轨道与 3p_{3/2} 轨道 $Z\mu$ 之差. $\Delta(Z\mu) \sim Z^0$ 而其数量级为 1, β 的数量级为 10^{-5} . 因此 $df/d\bar{\epsilon} \sim Z^{-1} + \beta Z^2$. 由表 2 所示, 3s—3p_{3/2} 跃迁约化振子强度密度先随原子序数增大而下降后又较快地增大. 当 $4 < Z \leq 92$, 其最大值与最小值之比约为 4.5.

3. $\Delta n > 0$ (3s—np 跃迁, $n=4, 5, \dots$)

类似于 $\Delta n = -1$ 情形, 此时初末态能量差 $\Delta\epsilon \sim Z^2$, 偶极矩阵元 $M(n') \sim Z^{-1}$, 所以约化振子强度密度 $df/d\bar{\epsilon} \sim Z^0$. 与 $\Delta n = -1$ 时不同的是, 随着 Z 增大而振子强度密度极小点位置下降, 将逐步减弱对约化振子强度密度的抑制, 使其缓慢增大. 如表 2 所示, 非相对论性约化振子强度密度随着 Z 增大而缓慢上升, 并在高 Z 区趋于平稳. 由于相对论效应, 相对论约化振子强度密度小于相应的非相对论约化振子强度密度, 并且该相对论效应将随

Z 增大而增大,因此如表 2 所示,各种 $3s-np$ 跃迁的相对论约化振子强度密度随原子序数增大先缓慢上升后又缓慢下降. 当 $4 < Z \leq 92$, 各种跃迁最大值与最小值之比约为 2 左右. 根据表 2, 随着 n 的增大, 约化振子强度密度随 Z 变化的幅度越来越小.

三、总结与讨论

我们在原子自洽场理论的基础上,以类锂离子 $3s$ 到 p 通道跃迁为例,探讨了从一个固定初态到一个通道中无穷多个末态的光跃迁过程. 具体地展示了在量子数亏损的理论框架下,通过振子强度密度可以统一地处理上述无穷多个光跃迁过程. 根据本文所得到的理论结果,阐明了振子强度密度的相对论效应,讨论了振子强度密度随原子序数变化的规律. 在本文基础上,可进一步探讨从一个初始通道中无穷多个初态到一个末通道中无穷多个末态的光跃迁过程. 另外,本文所采用的自洽场理论方法,基本上模拟了真实原子的单通道问题. 这对于类锂原子这样的类碱金属原子离子是合适的,所给出结果的精度在 10^{-2} 数量级(参见表 1). 对于一般的原子离子,通常是多通道问题. 对于多通道问题如何系统地处理从一个初态或初始通道到末通道的光跃迁过程,值得进一步探讨.

对本文计算结果,再补充说明两点:

1. 相对论自洽场理论方法未考虑高阶量子电动力学效应. 相应地,根据表 2 中的量子数亏损值所确定的 $3s$ 和 np 态的能级位置不包含兰姆位移和真空极化等高阶量子电动力学修正. 当需要更准确的能级位置时,可在本文的基础上进一步考虑高阶量子电动力学效应^[13],同时进一步考虑电子关联效应^[6].

2. 根据本文计算结果,类锂离子 p 通道量子数亏损随主量子数(轨道能量)的增大而增大,这与 s 通道量子数亏损随轨道能量增大而减小的趋势相反^[14-16]. 对于原子序数不大于 95 的各种离化态原子 s, p, d, f 和 g 通道的量子数亏损,我们曾系统地阐述过其随轨道能量以及随原子序数和电离度的变化规律^[16]. 同时,对于中性原子 s, p 和 d 通道量子数亏损随轨道能量变化而增减的趋势,也已有过综述性的评论^[14]. 这里不再作进一步的阐述.

[1] U. Fano, J. W. Cooper, *Rev. Mod. Phys.*, **40**(1968), 441.

[2] 梁晓玲、李家明, *物理学报*, **34**(1985), 1479.

[3] R. H. Pratt, A. Ron, H. K. Tseng, *Rev. Mod. Phys.*, **45**(1973), 273.

[4] 刘磊、全晓民、李家明, *物理学报*, **37**(1988), 1800.

[5] 刘磊、李家明, *物理学报*, **40**(1991), 1922.

[6] 李家明、赵中新, *物理学报*, **34**(1985), 1470.

[7] C. M. Lee (J. M. Li), W. R. Johnson, *Phys. Rev.*, **A22**(1980), 979.

[8] W. L. Wiese, M. W. Smith, and B. M. Glennon, *Atomic Transition Probabilities*, National Bureau of Standards, Washington, D. C. (1966).

[9] Qiren Zhu, Shoufu Pan, and Tianhai Zeng, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **52**(1992), 109.

[10] 全晓民、李家明, *物理学报*, **40**(1991), 693.

[11] 例如: 刘磊、李家明, *物理学报*, **38**(1989), 407.

[12] 潘晓川、李家明, *物理学报*, **34**(1985), 1500.

- [13] 例如; L. A. Vainshtein and U. I. Safronova, *Physica Scripta*, **31**(1985), 519.
- [14] U. Fano, C. E. Theodosiou, and J. L. Dehmer, *Rev. Mod. Phys.*, **48**(1976), 49.
- [15] 王永昌、王曼英、林波、王雄基, 原子与分子物理学报, **2**(3)(1985), 67.
- [16] 鲍敏琪、全晓民、李家庭, 物理学报, **38**(1989), 1082.

THEORETICAL STUDY IN OSCILLATOR STRENGTH DENSITY

Oscillator Strength Density from 3s State to p-Channel
States for Li-like Atomic Ions

LIU LEI LI JIA-MING¹⁾

¹⁾*Institute of Physics, Academia Sinica, Beijing 100080*

Department of Physics, Fudan University, Shanghai 200433

(Received 14 December 1992)

ABSTRACT

Based on the relativistic and non-relativistic self-consistent-field methods, we have calculated the oscillator strength density from 3s state to p-channel states for Li-like atomic ions. The dependence of the oscillator strength density on atomic number and some related relativistic effects are discussed. Using the calculated oscillator strength density as interpolation benchmark points, one can easily obtain oscillator strengths of all 3s-*np* transitions for Li-like atomic ions ($3 \leq Z \leq 92$).

PACC: 3280F