

氢分子分立区和连续区(11.0—19.0 eV)的 光学振子强度研究*

钟志萍¹⁾ 张卫华¹⁾ 徐克尊²⁾ 凤任飞²⁾ 李家明¹⁾³⁾

¹⁾(清华大学现代应用物理系, 单原子分子测控科学与技术研究中心, 北京 100084)

²⁾(中国科学技术大学近代物理系, 合肥 230027)

³⁾(中国科学院物理研究所, 北京 100080)

(1998 年 6 月 7 日收到; 1998 年 11 月 4 日收到修改稿)

利用通道规律, 并考虑了转动分布对跃迁峰型的影响, 对测量得到的绝对氢分子光吸收谱进行了分析. 文中逐个确定了 11.0—15.0 eV 各振动态的振子强度, 并得到了 $B^1\Sigma_u^+$ 的解离强度. 同时, 利用多重散射 $X\alpha$ 自洽场方法计算了氢分子分立区和连续区(11.0—19.0 eV)的光吸收谱. 通过计算值和实验绝对测量值的比较可以说明, 在自洽层次, 文中理论计算值已能较好地说明本实验.

PACC: 3120H; 3310; 3480G; 3370; 3450H

1 引 言

氢分子是大气和星际物质中的重要组成物质, 研究其振动分辨的光学振子强度, 对大气物理、空间科学和等离子体物理等学科都具有重大意义, 并可用来检验和发展不同的模型和计算方法. 但是, 研究氢分子第一电离阈下电子跃迁的光学振子强度(截面)的实验非常少, 而且主要是研究从基态 $X^1\Sigma_g^+$ 到 $B^1\Sigma_u^+$ ($2p\sigma$) 及 $C^1\Pi_u$ ($2p\pi$) 这两个电子跃迁. 一般理论, 或是仅计算分立态的振子强度, 或是仅计算光电离形成的氢分子连续区的振子强度密度.

文献[1]用快电子碰撞方法测量得到了绝对氢分子振动分辨的光吸收谱(11.0—19.0 eV). 在分析实验谱时, 文献[1]对 $\Sigma_g \rightarrow \Sigma_u$ 和 $\Sigma_g \rightarrow \Pi_u$ 的跃迁, 采用了同一对称有效峰形进行拟合; 并且仅分析了 11.0—13.8 eV 能区的振子强度. 本文对该谱作了进一步分析, 有了以下两点改进: 首先考虑了由于氢分子的转动分布引起的 $\Sigma_g \rightarrow \Sigma_u$ 和 $\Sigma_g \rightarrow \Pi_u$ 跃迁的谱峰形状的不同; 其次, 我们根据通道规律分析实验测量值, 以期从谱中获得尽可能多的物理信息. 同时, 在多通道量子数亏损理论^[2]的框架下, 我们计算了氢分子分立区各电子态和连续区(15.5—19.0 eV)的振子强度密度, 与实验谱比较, 在自洽层次, 我们理论计算值已能较好地说明本实验.

* 国家自然科学基金重点项目(批准号: 19734030)和攀登计划资助的课题.

2 实验方法和理论概述

对于原子、分子绝对光吸收谱的测量,快电子碰撞方法是一种比较理想的实验方法.它可以在很宽的能量范围,得到具有正确强度分布的光吸收谱^[1,3,4],而这是一般的光学测量方法难以做到的.本实验用的高分辨快电子能量损失谱仪的具体介绍可参见文献[3,4].简单说来,该谱仪由电子枪、单色器、作用室和可转动的分析器四大部分组成.谱仪的入射电子能量为 1—5 keV,能量分辨 40—120 meV.本实验是在电子入射能量为 1500 eV,散射角为 0°(此时光学近似条件有效地满足)的条件下进行的,典型能量分辨为 60 meV,样品气压是 4.0×10^{-3} Pa.光学振子强度密度谱的具体获得过程参见文献[1].

原子、分子的光吸收谱通常包含束缚态、自电离态和连续态,分子还有自解离态.理论上,用传统的组态与组态混和的方法处理这些态变得十分困难,因为这时牵涉到无穷多的组态.而多通道量子数亏损理论^[2],从碰撞的角度统一地处理这些态.在多通道量子数亏损理论中,具有相同角动量特征的束缚态(里德堡态)和相应的连续态可以形成一个通道.通道参数(量子数亏损等)随能量平缓变化,通道波函数和跃迁矩阵元也是激发能的连续函数,它们可以比较容易地从第一原理计算得到,也可以从光谱数据拟合得到.多重散射 $X\alpha$ 自洽场方法^[5-8]是根据自洽场方法,对电子间非定域的交流能采用 Slater 提出的 $X\alpha$ 方法^[11],并在此基础上引进了圆球分区(muffin-tin)近似^[12]形成的.与传统的组态和组态混和的方法相比,这种计算方法可以大大减少计算量.我们组在多通道量子数亏损理论框架下,用多重散射 $X\alpha$ 自洽场方法曾经计算了一些分子、分子离子的里德堡态能级结构^[24,25].CO, N₂ 分子^[9]和十电子系列 CH₄ 等分子^[10]的 X 射线吸收谱,理论计算的能级结构和强度都与已有的实验数据符合良好.本文利用多重散射自洽场方法计算了氢分子的轨道能和跃迁振子强度,精度较好.计算中只考虑波函数的电子部分.

3 结果与分析

图 1 显示了氢分子 $n\rho\sigma$ 和 $n\rho\pi$ 两通道的振子强度密度曲线.其中圆点是我们理论计算的结果,它们可用光滑曲线(实线)连结.我们特地在电离阈值附近密集地计算了几个点,可以看到,在电离阈值附近,里德堡轨道、连续轨道的振子强度密度确实是光滑连接的.这是通道规律的体现:同一通道的量子数亏损和振子强度密度是光滑变化的^[5-8].图 1 的虚线,是我们根据通道规律,光滑连接分立区 $n=2$ 和连续区 18.0—19.0 eV 的实验点(倒三角)得到的, $n=2$ 的实验值来自本工作,见表 1;18.0—19.0 eV 的数据点,是由文献[1]的实验值和我们计算的相应两通道的振子强度密度之比得到的.

表 1 列出了我们计算的氢分子电子跃迁的能量和光学振子强度(由振子强度密度除以态密度得到),及前人的理论和实验值.我们在多通道量子数亏损理论^[2]的框架下,统一处理束缚态、自电离态和连续态,能够快速得到某一通道的任意里德堡态和连续态的振子强度密度.表 1 仅列出了与现有实验、理论结果比较的计算值,符合较好.

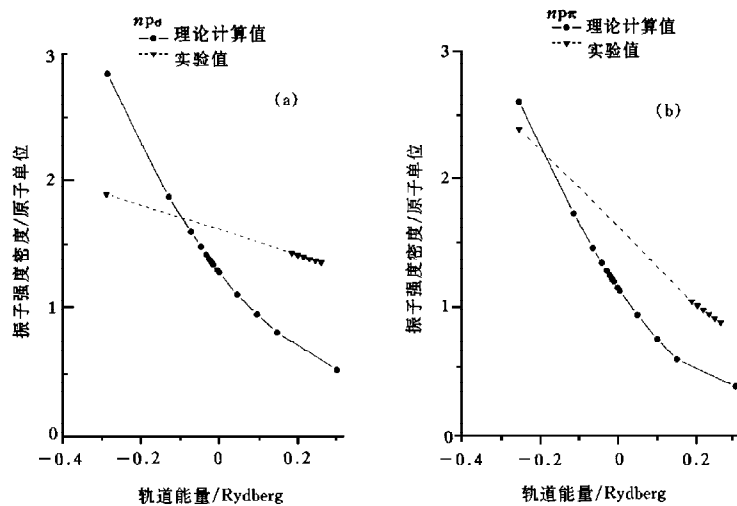
图 1 氢分子 $np\sigma$ 和 $np\pi$ 两通道的振子强度密度曲线

表 1 氢分子电子跃迁的能量和光学振子强度

	$1\sigma \rightarrow 2p\sigma$ $B^1\Sigma_u^+$	$1\sigma \rightarrow 2p\pi$ $C^1\Pi_u$	$1\sigma \rightarrow 3p\sigma$ $B'^1\Sigma_u^+$	$1\sigma \rightarrow 3p\pi$ $D^1\Pi_u$	$1\sigma \rightarrow 4p\sigma$ $B''^1\Sigma_u^+$	$1\sigma \rightarrow 4p\pi$ $D'^1\Pi_u$
能量(Ry.)						
实验						
文献[13]	0.84	0.88	1.02	1.04	1.08	1.09
理论						
本工作 ^a	0.86	0.89	1.02	1.03	1.07	1.07
文献[14] ^b	0.94	0.96	1.08	1.09	1.13	1.13
文献[14] ^c	0.93	0.96	1.08	1.09	1.13	1.13
振子强度						
实验						
文献[1]	0.31 ^d	0.35 ^d	—	—	—	—
文献[15]	0.301 ^d	0.340 ^d	—	—	—	—
本工作	0.30 ^d	0.32 ^d	0.037 ^e	0.066 ^f	—	—
本工作 ^g	0.30	0.32	0.078	0.073	0.031	0.028
理论						
本工作	0.46	0.35	0.084	0.067	0.029	0.024
文献[14] ^b	0.309	0.361	0.0728	0.104	0.0309	0.0474
文献[14] ^c	0.286	0.345	0.0626	0.0978	0.0257	0.0445
文献[16]	0.311	0.356	—	—	—	—
文献[17]	—	—	0.052 ^h	0.0429 ⁱ	—	—

a. 本文的计算以电离阈值为零点, 电离阈值采用了文献[13]的实验值; b. Tamm-Dancoff 近似(TDA)计算所得; c. 无规相位近似(RPA)计算所得; d. 文献中未分析得到的高振动态, 采用了文献[16]的理论值, 详细说明见正文; e. 是 $\nu' = 0-8$ 之和, 未包含解离部分; f. 本实验分析得到的 $\nu' = 0-4$ 之和是 0.049, 其余态强度估计见正文; g. 根据通道规律分析, 由图 1 虚线插值得到; h. 是两部分之和: 1) 文献[17]计算的 $\nu' = 0-8$ 之和(0.032), 2) 根据文献[18]的理论截面数据分析得到的解离强度(0.019); i. 是 $\nu' = 0-15$ 之和.

我们用快电子碰撞方法,测量得到了绝对的氢分子振动分辨的光吸收谱^[1](11.0—19.0 eV),见图 2. $\Sigma_g \rightarrow \Sigma_u$ 跃迁和 $\Sigma_g \rightarrow \Pi_u$ 跃迁的转动强度分布,分别卷积线宽 60 meV 的

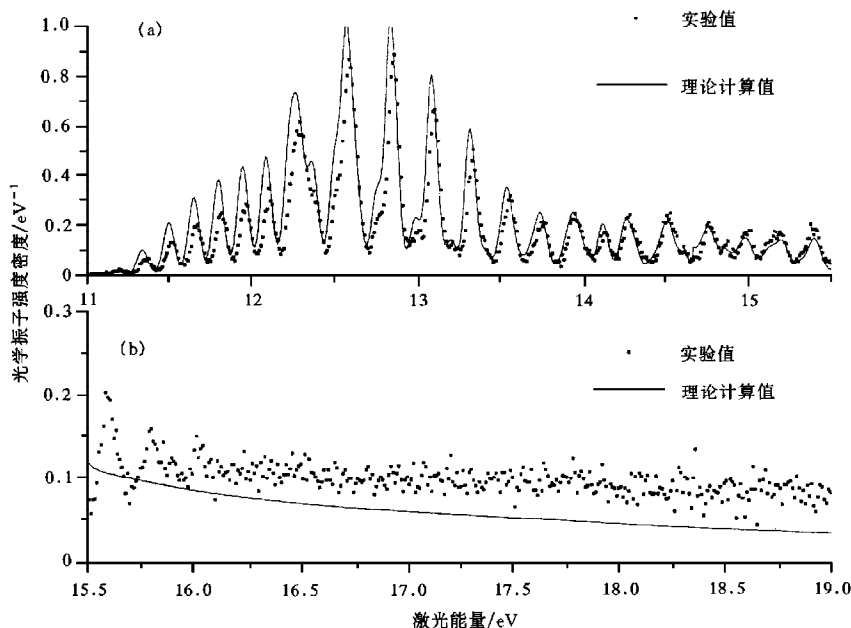


图 2 氢分子的绝对光吸收实验和理论谱(11.0—19.0 eV)

高斯型仪器函数后得到的谱峰形状见图 3 (a). 显然 $\Sigma_g \rightarrow \Pi_u$ 跃迁与 $\Sigma_g \rightarrow \Sigma_u$ 跃迁均偏离高斯型,其中 $\Sigma_g \rightarrow \Pi_u$ 跃迁的峰型较接近对称峰型,而 $\Sigma_g \rightarrow \Sigma_u$ 跃迁的峰形不对称性较明显.文献[1]对 $\Sigma_g \rightarrow \Pi_u$ 跃迁和 $\Sigma_g \rightarrow \Sigma_u$ 跃迁采用同一对称有效峰形拟合实验数据,这样会带来较大的拟合误差,而且仅拟合了能区 11.0—13.8 eV.图 3(b), (c)是我们根据图 3 (a)的峰型得到的拟合曲线,与实验谱吻合很好.需要说明的是,拟合中用到的各振动态的能级位置,是我们总结文献[19,20]给出的能级位置得到的.这样,根据图 3(a)的峰型和通道规律,可以逐个地认定 11.0—15.0 eV 能区的振动态振子强度.下面将详细介绍确定的振子强度.

对 $B^1\Sigma_u^+$, 我们分析得到了 $0 \leq v' \leq 22$ 的振子强度,与文献[16]计算值符合很好.因而 $v' \geq 23$ 的振子强度(其总和小于总振子强度的 10%),就由文献[16]得到.这样得到的总振子强度为 0.30,见表 1.由文献[1]得到的

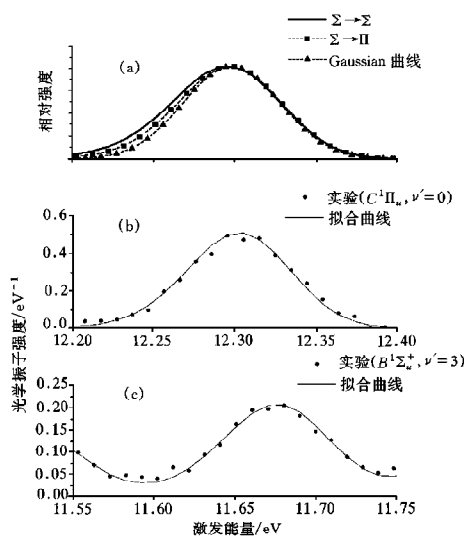


图 3 $\Sigma_g \rightarrow \Pi_u$ 和 $\Sigma_g \rightarrow \Sigma_u$ 跃迁峰型及拟合曲线

总振子强度为 0.31, 这反应了不同分析方法的差别. 需要说明的是, 文献[1]分析得到的是 $\nu' = 1-18$ 的振子强度, 文献[15]是 $\nu' = 0-22$ 的振子强度. 对 $C^1\Pi_u$, 本工作逐个确定了 $\nu' = 0-7$ 的振子强度(其总和大于总振子强度的 90%), 与文献[16]计算值一致. 因此, $\nu' > 7$ 的振子强度也可由文献[16]得到. 由此得到的总振子强度为 0.32, 而由文献[1]得到的是 0.35, 这同样反映出不同分析方法的差别. 需要说明的是, 文献[1, 15]得到的是 $\nu' = 0-6$ 的振子强度. 本工作 $B^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$ 的振子强度可利用表 1, 分别标定文献[1]的表 2, 表 3 得到. $B^1\Sigma_u^+$ 和 $C^1\Pi_u$ 的解离强度不到相应总振子强度的 3%, 为确定其他电子态的振动态振子强度, 我们采用文献[18]的计算值, 从实验谱中扣除 $B^1\Sigma_u^+$ 和 $C^1\Pi_u$ 的解离贡献.

表 2 $B^1\Sigma_u^+$, $D^1\Pi_u$, $B''^1\Sigma_u^+$ 和 $D'^1\Pi_u$ 的振动分辨的振子强度(括号内数值为实验误差, 振子强度单位均为 10^{-3} , 能量单位为 eV)

ν'	$B^1\Sigma_u^+$				$B''^1\Sigma_u^+$	
	能量	本工作	已有实验	已有理论	能量	本工作
0	13.702	3.8(1.0)	3.84 ^[15]	2.6 ^[19] , 2.92 ^[17]	14.502	2.0(0.5) 1.5*
1	13.935	7.0(1.2)	2.84 ^[21]	5.7 ^[19] , 5.98 ^[17]	14.751	2.5(1.0) 2.8*
2	14.149	7.3(1.3)	—	8.0 ^[19] , 7.06 ^[17]	14.978	3.0(1.2) 2.9*
3	14.339	7.1(1.3)	4.48 ^[21]	8.9 ^[19] , 6.99 ^[17]	—	—
4	14.501	6.5(1.4)	—	8.2 ^[19] , 5.54 ^[17]	—	—
5	14.620	4.0(1.0)	2.89 ^[22]	5.3 ^[19] , 3.10 ^[17]	—	—
6-8	14.680	1.0(0.4)	0.78 ^[22]	1.8 ^[19] , 0.87 ^[17]	—	—
总和		37.(7.)	—	40. ^[19] , 32.5 ^[17]	—	7.5
解离强度		41.(8.)	—	38. ^[19] , 19. ^[18]		

ν'	$D^1\Pi_u$			$D'^1\Pi_u$		$D''^1\Pi_u$		
	能量	本工作	已有实验	已有理论	能量	本工作	能量	本工作
0	14.023	6.4(1.4)	6.14 ^[21]	7.9 ^[19] , 4.50 ^[17]	14.620	2.4(0.6)	14.940	1.5(1.2) 2.5*
1	14.271	12.(1.7)	—	13. ^[19] , 7.60 ^[17]	14.874	5.5(1.3) ^a	—	— 5.4 ^{*b}
2	14.540	13.(1.6)	10.9 ^[21]	14. ^[19] , 7.93 ^[17]	—	—	—	—
			8.28 ^[23]	—	—	—	—	—
3	14.785	10.(1.4)	7.16 ^[23]	11. ^[19] , 6.70 ^[17]	—	—	—	—
4	15.014	8.5(1.4) ^b	—	8.2 ^[19] , 5.10 ^[17]	—	—	—	—
总和		50.	—	54. ^[19] , 31.78 ^[17]	—	—	—	—

假设 $n=4, 5$ 的振动分布与 $n=3$ 的一致而得到的振动态振子强度(电子态强度来自图 1 的虚线值); a. 是 $D'^1\Sigma_u^+$ 的 $\nu'=1$ 和 $B''^1\Sigma_u^+$ 的 $\nu'=0$ 之和; b. 是 $D^1\Pi_u$ 的 $\nu'=4$ 与 $6p\sigma$ 的 $\nu'=0$ 之和.

表 2 给出了 $B^1\Sigma_u^+$, $D^1\Pi_u$, $B''^1\Sigma_u^+$, $D'^1\Pi_u$ 和 $D''^1\Pi_u$ 的振子强度. 本工作的实验误差有两

个主要来源:(1)从实验测量得到的谱转换为绝对光学振子强度谱带来的误差,为 10%^[1]; (2)数据拟合带来的误差,约为 11%—18% (对弱峰拟合误差会更大). 要特别补充说明的是:我们根据一个电子态内振动分布应该光滑这一特性,得到能级位置重合的不同振动态($B^1\Sigma_u^+$ 的 $\nu'=4$ 与 $B'^1\Sigma_u^+$ 的 $\nu'=0$; $B^1\Sigma_u^+$ 的 $\nu'=5$ 与 $D^1\Pi_u$ 的 $\nu'=0$) 的振子强度.

对 $n\rho\sigma$ 通道,本工作分析得到了 $n=2-4$ (即 $B^1\Sigma_u^+$, $B'^1\Sigma_u^+$ 和 $B''^1\Sigma_u^+$) 的振子强度. 对 $B^1\Sigma_u^+$, 我们得到了 $\nu'=0-8$ 的振子强度. Chan 等的实验组^[15] 仅仅报道了 $B^1\Sigma_u^+$ 的 $\nu'=0$ 的振子强度(他们也是用快电子能量损失谱仪获得相应的光学振子强度密度谱), 和我们的实验非常吻合; Lewis^[21] 用光吸收方法得到 $B^1\Sigma_u^+$ 的 $\nu'=1, 3$ 光学振子强度, 其数值小于我们的实验结果; Glass-Maujean 等人^[22] 用同步辐射方法测量得到 $B^1\Sigma_u^+$ 的 $\nu'=5-8$ 的振子强度(他们的实验误差为 14%—25%), 他们的值约是我们实验值的 75%. 理论上, 由 Glass-Maujean^[17] 得到的光学振子强度值约是我们实验值的 75%. 文献[19] 计算了 $B^1\Sigma_u^+$ 的 Franck-Condon 因子, 根据 $B^1\Sigma_u^+$ 电子态振子强度(由通道规律得到, 见表 1), 我们可以近似得到文献[19] 相应的振动态振子强度, 其结果和我们的基本一致(见表 2). 当 $\nu'\geq 9$ 时, $B^1\Sigma_u^+$ 将解离, 我们分析到的 $\nu'\leq 8$ 之和为 0.037, 文献[17] 的是 0.0325, 文献[19] 为 0.040. 而根据通道规律, $B^1\Sigma_u^+$ 的电子态强度是 0.078(见表 1). 这样我们分析得到 $B^1\Sigma_u^+$ 解离强度为 0.041, 解离比为 52%; 而由文献[19] 得到相应的解离强度为 0.037, 解离比 48%. Glass-Maujean 等^[18] 计算的相应解离强度为 0.019, 解离比为 37%. 要注意的是, Glass-Maujean 组^[17, 22] 计算和测量的振子强度值均系统地小于我们的结果. 为了分析其他电子态的振子强度, 需要扣除 $B^1\Sigma_u^+$ 的解离贡献. 我们利用本工作得到的 $B^1\Sigma_u^+$ 的解离强度 0.041, 标定文献[18] 计算的 $B^1\Sigma_u^+$ 解离分布曲线, 然后从实验曲线中将其扣除. 这样, 可以逐个认定其他振动态振子强度. $B''^1\Sigma_u^+$ 与 $B^1\Sigma_u^+$ 和 $B'^1\Sigma_u^+$ 属于同一个里德堡系列, 除了 $B^1\Sigma_u^+$ 外($B^1\Sigma_u^+$ 既是初始态, 又是键态, 我们称为前兆态^[7, 24, 25]), 根据同一里德堡系列的特性, 预期振动分布是渐趋一致的. 这样, 由通道规律得到 $B''^1\Sigma_u^+$ 的总振子强度为 0.031(见表 1), 再根据 $B^1\Sigma_u^+$ 的振动分布而得到 $B''^1\Sigma_u^+$ 振动态振子强度, 见表 2 给出的带 * 的数值. 有趣的是, 我们实验分析的结果和带 * 的数值是相互符合的. 我们实验分析得到的总和 ($\nu'\leq 2$) 为 0.075, 预期非解离强度大于 25%, 解离小于 75%. 对于更高 n 的里德堡态, 解离比例应增加.

对 $n\rho\pi$ 通道, 本工作分析得到了 $n=2-5$ (即 $C^1\Pi_u$, $D^1\Pi_u$, $D'^1\Pi_u$, $D''^1\Pi_u$) 的振子强度. 其中对 $D^1\Pi_u$, 我们得到了 $\nu'=0-4$ 的振子强度, 振动分布与文献[19] 计算的 Franck-Condon 因子一致. 这样用我们的实验值标定文献[19] 计算的 Franck-Condon 因子, 可得到我们实验未分析的 $D^1\Pi_u$ 其他振动态振子强度(约是总振子强度的 25%). 由此得到的总振子强度为 0.066(见表 1), 这与我们根据通道规律分析得到的总振子强度 0.073(见表 1) 的差别在 10% 以内. 这样由文献[19] 得到的振子强度与我们结果的差别也在 10% 以内. Lewis^[21] 用光吸收方法得到了 $D^1\Pi_u$ 的 $\nu'=0, 2$ 的振子强度, 和我们的实验结果吻合很好; Glass-Maujean 等人^[23] 用同步辐射方法测量得到了 $D^1\Pi_u$ 的 $\nu'=2, 3$ 的振子强度(他们的实验误差为 14%—25%), 并做了理论计算. 与 $B^1\Sigma_u^+$ 一样, Glass-Maujean 组的实验、理

论结果均系统地小于我们的结果. $D'^1\Pi_u$, $D''^1\Pi_u$ 与 $C^1\Pi_u$, $D^1\Pi_u$ 是属于同一个里德堡系列, 初始态 $C^1\Pi_u$ 不是前兆态, 预期该系列解离不强. 同 $B''^1\Sigma_u^+$ 的处理类似, 由通道规律得到 $D'^1\Pi_u$, $D''^1\Pi_u$ 的总振子强度分别为 **0.028**(见表 1)、**0.013**; 根据 $D^1\Pi_u$ 的振动分布而得到 $D'^1\Pi_u$ 和 $D''^1\Pi_u$ 振动态振子强度, 见表 2 给出的带 * 的数值. 同样, 我们实验分析的结果和带 * 的数值, 是相互符合的.

图 2 显示了氢分子实验数据谱^[1]、本工作的拟合曲线, 以及两者之差(13.5—15.0 eV), 拟合结果令人满意. 总的说来, 根据我们的实验分析值可以看出, 当 n 较高时, 同一通道的电子态的振动强度分布是趋于一致的. 因此我们可以近似认为当 $n > 3$ 时, $n\rho\sigma$ 和 $n\rho\pi$ 的振动强度分布和 $n = 3$ 时一样. 由此, 利用我们实验确定的峰型和振动带强度分布, 可以在氢分子的分立区分布我们理论计算的电子态光学振子强度. 再结合我们计算的连续区电离振子强度密度, 就可以得到能和实验比较的理论谱. 与实验谱的比较见图 2; 图 2(a)是能区 11.0—15.5 eV 的比较, 显然我们的理论曲线和实验结果符合很好, 尤其是在能区 13.0—15.5 eV, 理论曲线和实验值基本重合; 图 2(b)是能区 15.5—19.0 eV 的比较, 我们的理论计算值大约是实验的 50%—100%. 总的说来, 在自洽层次, 我们理论计算的氢分子分立区和连续区的振子强度密度谱已能较好地说明实验.

4 总结和讨论

文献[1]用快电子碰撞方法得到了绝对氢分子振动分辨的光吸收谱, 典型能量分辨为 **60 meV**, 见图 2. 在这样的能量分辨条件下, 不能把所有的振动态分开. 我们在数据分析中, 考虑了转动分布对不同跃迁峰形的影响(见图 3), 并利用通道规律(见图 1), 较精确地确定了 $n\rho\sigma$ 和 $n\rho\pi$ ($n = 2-5$) 的部分振动态振子强度, 及 $B'^1\Sigma_u^+$ 的解离强度(见表 2). 我们分析得到的数据与现有的实验和理论值大致符合, 可以提供给大气物理、空间科学和等离子体物理等学科. 我们在自洽层次计算的 $n\rho\sigma$ 和 $n\rho\pi$ 两通道的振子强度密度在阈值附近光滑连结, 符合通道规律(图 1), 这就检验了我们的计算方法的数字精度. 我们理论计算的氢分子分立区和连续区的振子强度密度谱与我们的实验谱符合很好(见图 2). 需要指出的是, 在连续区, 我们目前仅考虑了三个态($B^1\Sigma_u^+$, $C^1\Pi_u$ 和 $B'^1\Sigma_u^+$)的解离影响, 而高 n 态在电离阈值以上的分布, 以及其他态的解离也会对这部分的谱产生影响. 另外, 我们的理论计算值是自洽层次得到的, 没有考虑组态间相互作用, 而得到的结果已能较好地说明实验. 进一步, 我们可以考虑通道的相互作用: 从一个自洽场的单电子哈密顿量 h_0 出发, 计算所有束缚、非束缚态波函数, 并以为之完备基, 构成具有一定耦合方式和轨道占据数的通道波函数. 这点已在原子多通道理论中实现^[26-28]. 我们将由此构筑分子超激发态结构, 从而更精确地描述电离、解离等情况. 这是我们锲而不舍的追求目标.

[1] Z. P. Zhong, K. Z. Xu, R. F. Feng, X. J. Zhang, L. F. Zhu, X. J. Liu, J. Electron Spectroscopy and Related Phenomena (1998).

[2] 李志明, 物理学报, **29**(1980), 419 [Li Jia-ming, Acta Physica Sinica, **29**(1980), 419(in Chinese)].

[3] S. L. Wu, Z. P. Zhong, R. F. Feng, S. L. Xing, B. X. Yang, K. Z. Xu, Phys. Rev., **A51**(1995), 4494.

- [4] 凤任飞、扬炳忻、武淑兰、邢士林、张芳、钟志萍、郭学折、徐克尊, 中国科学, **A26**(1996), 1288 [Feng Ren-fei *et al.*, *Science in China(Series A)*, **A26**(1996), 1288(in Chinese)].
- [5] X. L. Liang, X. C. Pan, J. M. Li, *Chin. Phys. Lett.*, **2**(1985), 545.
- [6] 潘晓川、梁晓玲、李家明, 物理学报, **36**(1987), 426 [Pan Xiao-chuan *et al.*, *Acta Physica Sinica*, **36**(1987), 426(in Chinese)].
- [7] L. Liu, J. M. Li, *J. Phys.*, **B24**(1991), 1893.
- [8] P. H. Zhang, J. M. Li, *Phys. Rev.*, **A54**(1996), 665.
- [9] P. H. Zhang, J. M. Li, *Phys. Rev.*, **A56**(1997), 1819.
- [10] A. F. Niu, Y. Zhang, W. H. Zhang, J. M. Li, *Phys. Rev.*, **A57**(1998), 1912.
- [11] J. C. Slater, *J. Chem. Phys.*, **43**(1965), S228.
- [12] K. H. Johnson, Scattered-Wave Theory of the Chemical Bond, in *Advances in Quantum Chemistry*, Vol. 9, ed. P. O. Lowdin(Academic Press, New York, 1973), 143.
- [13] G. Herzberg, Ch. Jungen, *J. Mol. Spec.*, **41**(1972), 425.
- [14] G. P. Arrighini, F. Biondi, G. Guidotti, A. Biagi, F. Marinelli, *Chem. Phys.*, **52**(1980), 133.
- [15] W. F. Chan, G. Cooper, C. E. Brion, *Chem. Phys.*, **168**(1992), 375.
- [16] A. C. Allison, A. Dalgarno, *At. Data*, **1**(1970), 289; *Mol. Phys.*, **19**(1970), 567.
- [17] M. Glass-Maujean, *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, **30**(1984), 301.
- [18] M. Glass-Maujean, P. M. Guyon, J. Breton, *Phys. Rev.*, **A33**(1986), 346.
- [19] R. J. Spindler, Jr., *J. Quant. Spectrosc Radiat Transfer*, **9**(1969), 597, 627, 1041.
- [20] A. Monfils, *J. Mol. Spec.*, **25**(1968), 513.
- [21] B. R. Lewis, *J. Quant. Spectry. Radiat. Tran.*, **14**(1974), 537.
- [22] M. Glass-Maujean, J. Breton, P. M. Guyon, *J. Chem. Phys.*, **83**(1985), 1468.
- [23] M. Glass-Maujean, J. Breton, P. M. Guyon, *Chem. Phys. Lett.*, **23**(1984), 25.
- [24] 孙飙、李家明, 物理学报, **42**(1993), 25 [Shun Biao, Li Jia-ming, *Acta Physica Sinica*, **42**(1993), 25(in Chinese)].
- [25] Huanwang Yang, Biao Sun, Jia-ming Li, *Chin. Phys. Lett.*, **9**(1992), 133.
- [26] Y. Zou, X. M. Tong, J. M. Li, *Acta Phys. Sin.*, **44**(1995), 50.
- [27] W. Huang, Y. Zou, X. M. Tong, J. M. Li, *Phys. Rev.*, **A52**(1995), 2770.
- [28] X. M. Tong, Y. Zou, J. M. Li, *Chinese Phys. Lett.*, **12**(1995), 351.

A STUDY OF OPTICAL OSCILLATOR STRENGTHS IN THE VALENCE AND CONTINUUM REGIONS (11.0—19.0 eV) OF MOLECULAR HYDROGEN*

ZHONG ZHI-PING¹⁾ ZHANG WEI-HUA¹⁾ XU KE-ZUN²⁾ FENG REN-FEI²⁾ LI JIA-MING¹⁾³⁾

¹⁾(Department of Modern Applied Physics, Center of Atomic and Molecular Science, Tsinghua University, Beijing 100084)

²⁾(Department of Modern Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230027)

³⁾(Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080)

(Received 7 June 1998; revised manuscript received 4 November 1998)

ABSTRACT

By considering channel characters and thermal distribution of the rotational levels, experimentally determined absolute photoabsorption spectrum of molecular hydrogen have been analysed; these vibronic oscillator strengths in the region of 11.0—15.0 eV are determined, the total photodissociation of $B'^1\Sigma_u^+$ is also obtained. Meanwhile, the photoabsorption spectrum in the valence and continuum regions (11.0—19.0 eV) of molecular hydrogen has been calculated based on multi-scattering self-consistent field. The theoretical calculations are in good agreement with experimental results.

PACC: 3120H; 3310; 3480G; 3370; 3450h, 4350E

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 19734030).