

Al I 原子 2D 吸收谱的多通道 量子数亏损理论分析

赵 钧

(清 华 大 学)

1982 年 1 月 18 日收到

提 要

本文用多通道量子数亏损理论分析计算了 Al I 原子的 2D 吸收谱。采取具有三个不同电离阈的三个分解通道的混合模型。在适当选择了与能量有关的参数 μ_n , D_n 以及转换矩阵元 U_{in} 之后, 计算了第一电离阈和第二电离阈之间的 2D 自电离谱, 并与 Roig 的测量结果作了比较。利用上述参数延伸到分立能域, 得到 2D 能级的里德伯系列及其振子强度值。其结果与 Lin 和 Weiss 的分析以及相关的实验相符。

一、引 言

中性铝原子的光谱结构表明, 以第一电离阈(对应于离子 $Al^{+1} 3s^2(^1S)$) 为收敛极限的 nd^2D 能级系列受到外来系列的强烈干扰^[1]。由基态到这一里德伯系列的光学跃迁几率(或振子强度)也相应地有非单调的变化^[2]。另一方面, 在铝原子的光电离吸收谱中, np'^2D 自电离结构特别显著^[3,4]。与其它自电离线比较, np'^2D 线具有大得多的共振宽度, 呈现色散曲线形式的线型, 吸收截面的值也较强。

铝原子 2D 吸收谱理论分析, 过去是分别在分立能域和连续能域进行的。Weiss^[5] 和 Lin^[6] 用组态混合和量子数亏损方法研究了 2D 分立谱。他们指出, 这个能级系列和相应的振子强度的反常性主要是受到外来能级 $3s 3p^2 ^2D$ 的强烈扰动。Le Deurneuf 等人用 R 矩阵方法计算了波长在 $2070 \text{ \AA} > \lambda > 570 \text{ \AA}$ 之间的吸收谱, 给出了组态为 $sp(^3P^o) np'^2D$ 的头几条自电离谱线的位置和线型参数^[7]。然而更精确的实验资料^[3]证明, 这个 np'^2D 自电离谱在高能态还受到外在的 $sp(^1P^o) np''^2D$ 的干扰, 而 Le Deurneuf 等在计算中未考虑这一干扰的影响。

我们知道, 当一个多电子原子的激发, 产生几个收敛于不同的电离阈的里德伯系列, 而这些系列又存在强烈的耦合时, 它的复杂的分立谱、自电离谱和完全电离谱可以用一个统一的理论即多通道量子数亏损理论来处理。这个理论的数学形式最初是由 Seaton 建立的^[8], 其后, Fano 将该理论推广应用于分子系统^[9], 并强调在多通道量子数亏损理论中本征通道的物理意义。多通道量子数亏损理论又不断被应用在原子与分子的光激发^[9-13], 光电离^[9,11-14], 电子与分子离子的解离复合过程^[15], 以及电子与离子碰撞激发过程^[16]。

本文的目的就是应用多通道量子数亏损理论统一地处理 Al I 原子的 2D 吸收谱。根据

实验资料,我们采用三个分解通道(三个通道对应三个不同的电离阈)的耦合模型. 只需适当确定少量的与能量有关的理论参数即本征量子数亏损 μ_α , 转换矩阵元 $U_{i\alpha}$ 以及偶跃迁矩阵元参数 D_α , 就可确定 3D 分立能级的位置和相应的振子强度,同时也得到第一电离阈(相应于离子 $Al^{+1} s^2 (^1S)$) 和第二电离阈(相应于离子 $Al^{+1} sp (^3P^0)$) 之间的 3D 自电离谱. 这个自电离谱已考虑到 $sp(^1P^0)np'^2D$ 能级的干扰. 从分立能域到这一自电离能域都取得了与相关实验基本符合的结果.

二、多通道量子数亏损理论

受激发的多电子原子体系可以看成是一个“电子-离子”体系. 电子与离子的相互作用在位形空间可分为两个区域——短程相互作用域和域外空间. 这个短程相互作用域是以离子的核为中心,以 r_0 为半径的空间球体. 在此域外 ($r > r_0$) 受激电子和离子间的相互作用可看成是纯库仑作用,而在域内,电子和离子形成一个复合体,电子之间有各种关联作用. 当受激电子运动到作用域外,这时离子具有一定能量,离子和电子各具有一定的角动量和一定的耦合. 这样一个组合方式就叫一个分解通道. 由于电子在短程作用域内的关联作用,电子离子之间可以交换能量和角动量,因此整个原子体系可以处在不同的分解通道之中. 根据对称性的考虑,具有相同总角动量和宇称性的通道可以混合. 因此原子的复杂光谱可以分解为各个特定对称块而分别考虑.

每个分解通道对应一个能级系列的收敛极限即电离阈值,几个通道可以有相同的电离阈. 因此,在一个对称块中一般有 N 个通道 M 个收敛极限 ($N \geq M$). 每个能态在不同的分解通道内就可用不同的有效量子数 ν 表示. 其关系为

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

I_i 是第 i 个分解通道的电离阈值(以原子单位表示). 在域外,每个分解通道的波函数可写成

$$\Psi_i = \mathcal{A} \Phi_i [f(\nu_i, r)c_i - g(\nu_i, r)d_i] \quad (r > r_0). \quad (2)$$

Φ_i 是一个复合的波函数,它是离子波函数和受激电子的轨道、自旋波函数的适当耦合, \mathcal{A} 是反对称化算符. 电子径向波函数是 f_i 和 g_i 的线性组合,而 f_i 和 g_i 分别是规则库仑波函数和非规则库仑波函数,其性质见文献[9]. 系数 c_i 和 d_i 则必须由作用域面 ($r = r_0$) 的边界条件和无限远 ($r \rightarrow \infty$) 的边界条件来决定. “电子-离子”体系的波函数的一般解是这 N 个分解通道波函数的线性迭加. 由于电子之间存在相互作用,因此各个通道的系数 c_i 和 d_i 彼此有关,不能独立地决定. 然而,我们可将这 N 个分解通道波函数作适当的线性组合,构成 N 个新的通道波函数,称为本征通道波函数,以 Ψ_α 表示. 其特点是参加组合的所有分解通道的电子径向波函数在域外是具有共同的相移 $\pi\mu_\alpha$ 的库仑驻波, μ_α 称为 α 本征通道的本征量子数亏损.

$$\Psi_\alpha = \mathcal{A} \sum_i \Phi_i U_{i\alpha} [f(\nu_i, r) \cos \pi\mu_\alpha - g(\nu_i, r) \sin \pi\mu_\alpha] \quad (r \geq r_0). \quad (3)$$

迭加系数 $U_{i\alpha}$ 实际上是正交变换的矩阵元,现在,“电子-离子”体系的波函数便可写成

$$\Psi = \sum_{\alpha} A_{\alpha} \Psi_{\alpha} \quad (\text{当 } r \geq r_0). \quad (4)$$

(4) 式中的参数 μ_{α} , $U_{i\alpha}$ 由作用域表面的边界条件决定, 反映了作用域内所有的密切的相互作用. 在通常感兴趣的能域内, 这些参数可随能量作缓慢平滑的变化. 混合系数 A_{α} 则由无限远 ($r \rightarrow \infty$) 的边界条件来决定.

在分立能域, 这时所有分解通道都是关闭的. 对其中任一个分解通道 i , 其对应的电子轨道能量 $\epsilon_i = -\frac{1}{2\nu_i^2} < 0$. 无限远的边界条件是当 $r \rightarrow \infty$ 时 $\Psi = 0$, 利用库仑波函数的渐近式, 得到下列线性方程式:

$$\sum_{\alpha} U_{i\alpha} \sin \pi(\nu_i + \mu_{\alpha}) A_{\alpha} = 0 \quad (\text{对所有的 } i). \quad (5)$$

(5) 式有解的条件是系数行列式为零,

$$F(\{\nu_i\}, \{\mu_{\alpha}, U_{i\alpha}\}) = \det |U_{i\alpha} \sin \pi(\nu_i + \mu_{\alpha})| = 0. \quad (6)$$

当参数 $\{\mu_{\alpha}, U_{i\alpha}\}$ 确定后, (6) 和 (1) 式联合就可确定各个分立能级的值, 这些值是以一组能量参数 $\{\nu_i\}$ 表示的. 这些能级系列已考虑了各通道之间的相互干扰.

在自电离能域, 这时部分分解通道已经开放, 对于开放的分解通道 i , 相应的电子轨道能量 $\epsilon_i = \frac{1}{2} k_i^2$ 是正的. 引入开放的本征通道 ρ , 其通道波函数是所有开放的分解通道驻波的迭加, 而这些分解通道都具有相同的相移 $\pi\tau_{\rho}$. 利用无限远的边界条件就得到类似 (5) 式的方程, 不过对于所有开放的分解通道, 其 ν_i 要以 $-\tau_{\rho}$ 来代替^[11]. 在参数 $\mu_{\alpha}, U_{i\alpha}$ 已知时, 类似于 (6) 式的方程便决定了自电离共振的特性.

为了研究原子的吸收谱, 需要计算吸收截面. 这个截面与偶极跃迁矩阵元的平方成正比. 当终态是由几个开放的本征通道的迭加所组成时, 每个开放的本征通道的振子强度密度可以表示为

$$\frac{df^{(\rho)}}{dE} = \frac{2(E - E_0) |\sum D_{\alpha} A_{\alpha}^{(\rho)}|^2}{N_{\rho}^2}. \quad (7)$$

D_{α} 是 Fano 引入的对应于 α 本征通道的偶极矩阵元参数, N_{ρ} 为这一开放的本征通道 ρ 的波函数按单位能量规一化的规一化常数^[12].

$$N_{\rho}^2 = \sum_{i'} \left| \sum_{\alpha} U_{i'\alpha} \cos(-\tau_{\rho} + \mu_{\alpha}) A_{\alpha}^{(\rho)} \right|^2. \quad (8)$$

i' 表示对所有开放的分解通道求和, 总的振子强度密度则是上述分振子强度密度之和:

$$\frac{df}{dE} = \sum_{\rho} \frac{df^{(\rho)}}{dE}. \quad (9)$$

如果把上述振子强度密度定义推广到分立能域, 则分立能级的振子强度值就是这一能量的连续函数在某些点上的值.

按定义, 分立能级上的振子强度可写成

$$f_n = \frac{2(E_n - E_0) |\sum D_{\alpha} A_{\alpha n}|^2}{N_n^2}. \quad (10)$$

n 表示第 n 个能量本征态, N_n 则是这一本征态 (束缚态) 的规一化常数. 它的计算见文献 [12]. 当参数 $\mu_{\alpha}, U_{i\alpha}$ 随能量变化时, 对 N 个通道 M 个电离阈的情形, 这一规一化常数

便为

$$N_n^2 = \sum_i K_n^{(i)2} \left(\frac{\partial V_i}{\partial E} \right)_n + \sum_a A_{an}^2 \left(\frac{\partial \mu_a}{\partial E} \right)_n + \frac{1}{\pi} \sum_{i,\alpha,\beta} U_{i\beta} \left(\frac{\partial U_{i\alpha}}{\partial E} \right)_n \sin \pi(\mu_{\alpha n} - \mu_{\beta n}) A_{\alpha n} A_{\beta n}, \quad (11)$$

$$K_n = \sum_a U_{ia} \cos \pi(\nu_{in} + \mu_{an}) A_{an}. \quad (12)$$

在上述理论中, μ_a , U_{ia} , D_a 都是一些参数, 它们反映了电子与离子在相互作用域内的相互作用, 因此可以作理论计算^[13], 但一般可由实验资料来决定^[12,17]. 这些参数决定之后, 我们就可以统一地计算从分立谱区到连续谱区适当范围内的光吸收谱.

三、数据分析

Al I 原子的基态是 $3s^2(^1S) 3p(^2P)$, 偶极跃迁使 $3p$ 电子可激发到 ns 或 nd 态, 形成数个里德伯系列, 这些系列都收敛于第一电离阈, 即相应于离子为 $3s^2(^1S^0)$, 阈值为 48278.37 cm^{-1} ^[13], 由于受激电子和离子的短程作用, 离子也可能受激发, 其中一个 s 电子激发到 p 态, 使离子成为 $(^3P^0, ^1P^0)$ 态, 这时可以形成以离子激发态 $3s 3p(^3P^0, ^1P^0)$ 为极限的系列, 它们的电离阈^[3] 分别是 85857.67 cm^{-1} , $108128.07 \text{ cm}^{-1}$, 依次为第二和第三电离阈 (本文第二电离阈取 $\text{Al}^+(^3P_2^0)$ 处的值).

分析前述实验资料可知, 影响 Al I 原子 2D 吸收谱的主要是三个分解通道的耦合, 这三个通道分别为 $3s^2(^1S)nd(^2D)$, $3s3p(^3P^0)np'(^2D)$, 和 $3s3p(^1P^0)np''(^2D)$. 它们相应的电离阈值 I_i 已经给出. 实验资料还表明, 除二重态外, 四重态的谱线强度很弱, 因此上述分解通道中的组合方式仍取 L-S 耦合. 同时, 由基态到 2D 的光学跃迁以 $^2P_{3/2}-^2D_{3/2}$ 为主, 因此, 这三个分解通道的对称性是总角动量为 $J = 5/2$, 偶宇称态.

三个分解通道的标志写成

$$\begin{array}{ccc} i = 1 & 2 & 3 \\ (^1S)^2D & (^3P^0)^2D & (^1P^0)^2D \end{array}$$

由这三个分解通道混合而得到的三个本征通道仍以 L-S 耦合符号来标志. 尽管每个本征通道的组态并不是单一的, 但我们仍以占主要地位的组态作为本征通道的标志, 即

$$\alpha = \begin{array}{ccc} a & b & c \\ s^2d(^2D) & spp'(^2D) & spp''(^2D) \end{array}$$

通道确定之后, 再决定参数 μ_a , U_{ia} . 由于转换矩阵 (3×3) 的正交性, 其独立参数只有三个, 按 Lee 和 Lu 的方法^[12], 以 $\theta_a (\alpha = 1, 2, 3)$ 来表示. 为确定这些参数, 我们考虑到第三个分解通道是个“较深”的封闭通道, 在第一电离阈附近的能域范围内, 可将这一通道“投影”掉, 把三通道问题在这个能量范围内化为二通道问题处理, 这样可求得部分参数的初始值. 在二通道问题中, 转换矩阵 U_{ia} 是 (2×2) 矩阵, 独立参数只是一个角参数 θ .

二通道问题的处理, 特别是 $(\nu_1 \nu_2)$ 数对图的应用, 有不少的实例^[9,17]. 我们采用类似的步骤, 由 (6) 式确定了一组参数 $\{\mu_a U_{ia}\}$. 特别要指出, 由于铝原子 2D 分立能级的数据

不多,我们还要根据 2D 自电离谱的实验资料来反复修正这些参数,使之与实验资料有最好的适合.最后得到的一组二通道理论参数见表1.参数 D_a 的选择是使第一 2D 自电离线的振子强度密度与实验结果相适合.这时 $D_1=0$, $D_2=4.50+(-25)\times\epsilon$, ϵ 是以第一电离阈为零点计算的电子轨道能量.相应的振子强度密度分布与实验的比较见图1.

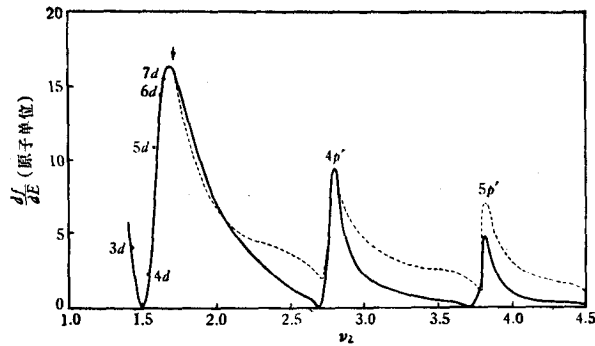


图1 Al I 2D 振子强度密度

— 为二通道理论计算的曲线; --- 取自 Kohl Parkinson 及 Roig 的实验;
● 取自 Shabanova 的振子强度值; 箭头表示第一电离阈的位置

表1 Al I 原子 $^2D_{3/2}$ 二通道量子数亏损理论参数

$\mu_1^{(0)}$	$\frac{d\mu_1}{d\epsilon}$	$\mu_2^{(0)}$	$\frac{d\mu_2}{d\epsilon}$	$\theta^{(0)}$	$\frac{d\theta}{d\epsilon}$
0.4333	-1.26	0.1092	-0.243	1.05	-1.5

由图1可见,在第一电离阈处振子强度密度值为16.5(原子单位),如果换算成吸收截面值, $\sigma = 1.098 \times 10^2 [\text{eV}][\text{Mb}] \times \frac{df}{dE}$,则 $\sigma = 65 \text{Mb}$,这个值和Kohl, Parkinson的测

量结果^[19]一致. Kohl 和 Parkinson 已经指出,在第一电离阈附近的吸收截面的主要贡献来自 2D , 2S 吸收的贡献很小.上述振子强度曲线外推到分立能域,我们发现由Shabanova和Penkin测得的 2D 最低的五个能级的振子强度值^[2]和曲线基本符合,对更高的能级则偏离曲线.有理由认为他们的测量值在高能级上是不精确的.另一方面将振子强度密度曲线向高能域外推,由图1可见,吸收截面的峰值和线型明显地低于Roig的测量值^[3].这表明,只在低能阈可以用二通道近似,如果要计算在第一电离阈和第二电离阈之间的整个 2D 自电离谱,必须考虑三个通道的耦合.

三通道问题的处理类似于二通道情形.我们首先利用 2D 分立谱实验资料决定三通道的本征参数 $\{\mu_a, \theta_a\}$,按照Armstrong的方法^[18],先将(6)式和(1)式决定的空间曲线投影在 (ν_1, ν_2) 平面上.这时投影曲线表示成

$$\nu_1 = \nu_2 + \frac{1}{\pi} \cot^{-1} \left\{ \frac{\left[\sum_{\alpha} U_{1\alpha} U_{3\alpha} \cot \pi(\nu_2 + \mu_{\alpha}) \right]^2}{\cot \pi(\nu_3 - \nu_2) + \sum_{\alpha} U_{3\alpha}^2 \cot \pi(\nu_2 + \mu_{\alpha})} - \sum_{\alpha} U_{1\alpha}^2 \cot \pi(\nu_2 + \mu_{\alpha}) \right\}, \quad (13)$$

其中 ν_2, ν_3 之间的关系按 (1) 式决定. 每个分立的 2D 能级相应的数对 (ν_{1n}, ν_{2n}) 都应落在这条曲线上. 反之, 我们可以选定适当的参数值 $\{\mu_{\alpha}, \theta_{\alpha}\}$, 使曲线尽可能精确地通过所有已知的分立能级的数对值. 在选这些参数值时, 我们把从二通道处理中得到的本征通道参数 μ_{α} 作为三通道问题中前两个本征通道的参数的近似值. 由 Roig 的实验资料, 考虑到通道 $(^3P^0) np'$ (2D) 受通道 $(^1P^0) np''$ (2D) 的干扰, 在数对图 (ν_2, ν_3) 上初步确定第三个本征量子数亏损 μ_3 为 0.88, 然后再调节参数 θ_{α} . 由于和二通道处理中相同的理由, 即单由分立谱的能级资料不足以完善地确定这些参数, 我们还要利用第一电离阈到第二电离阈之间的 2D 自电离谱的已知实验数据来反复调节. 最终得到一组参数, 见表 2. 根据这些参数作出在第二电离阈以下的整个能阈中的投影曲线和振子强度密度曲线见图 2. 在计算振子强度曲线时, 我们选择的偶极跃迁矩阵元参数分别为 $D_1 = 0.1, D_2 = 4.56 + (-21) \times e, D_3 = 0.828 + (-2.05) \times e$. 这个 2D 自电离谱线与实验值的比较, 见表 3. 由表 3 可见, 三通道理论结果除 $8p'$ (2D) 自电离态的波长略大以外, 其余能级均和实验符合, 比 R 矩阵的计算^[7] 也有所改善.

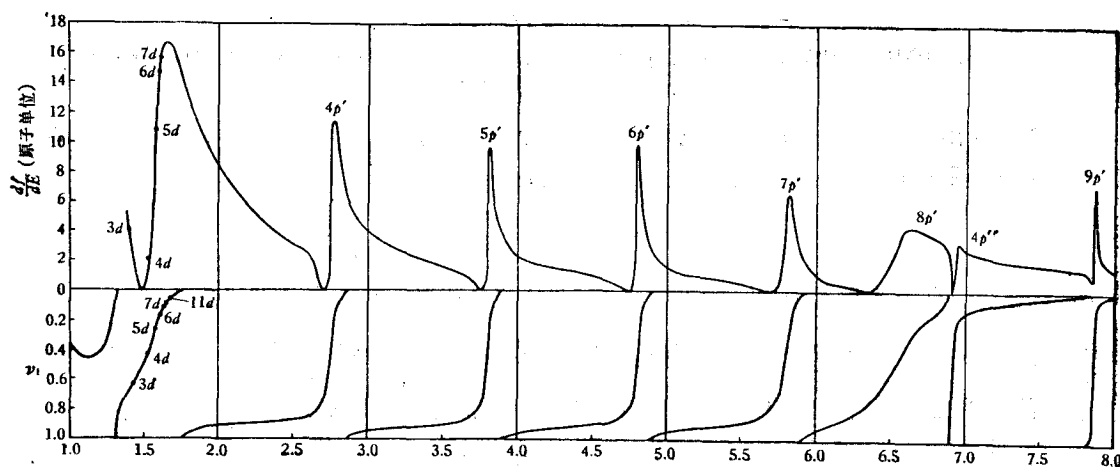


图 2

(a) 三通道理论计算的 Al 2D 振子强度密度曲线 (b) (ν_1, ν_2) 数对图, ν_1 只取小数部分; 实线代表 (13) 式的曲线; ● 为 2D 能级数对值, 取自 Eriksson 实验

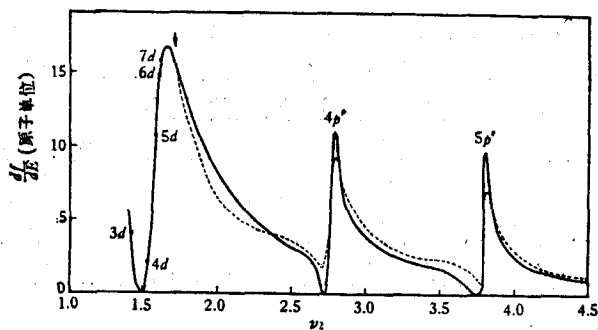
表 2 Al I 原子 $^2D_{5/2}$ 三通道量子数亏损理论参数

$\mu_1^{(0)}$	$\frac{d\mu_1}{de}$	$\mu_2^{(0)}$	$\frac{d\mu_2}{de}$	$\mu_3^{(0)}$	$\frac{d\mu_3}{de}$	θ_1^*	θ_2	θ_3
0.4375	-1.52	0.1026	-0.4626	0.8806	0.0213	1.08	0.173	-0.20

* 由这三个 θ 值决定的变换矩阵为 $\|U_{i\alpha}\| = \begin{pmatrix} 0.4643 & -0.8483 & -0.2548 \\ 0.8688 & 0.4921 & -0.0551 \\ 0.1721 & -0.1957 & 0.9655 \end{pmatrix}$

表 3 Al $1^2D_{5/2}$ 自电离谱线理论与实验比较

组 态		$4p'$	$5p'$	$6p'$	$7p'$	$8p'$	$(4p'')$	$9p'$
Roig 实验	n	2.779	3.803	4.799	5.802	6.749	6.810	7.794
	$\lambda (\text{\AA})$	1395.7	1277.63	1233.15	1210.69	1198.3	1197.73	1189.75
三通道理论	n	2.775	3.805	4.806	5.81	6.55	6.92	7.86
	$\lambda (\text{\AA})$	1396.5	1277.5	1233.13	1210.55	1200.48	1196.7	1189.32
R 矩阵理论 ^[7]	n	2.827	3.849	4.856	5.86	6.858		
	$\lambda (\text{\AA})$	1386.45	1274.69	1231.47	1209.75	1197.25		

图 3 Al 1^2D 振子强度密度

— 为三通道理论计算曲线; 取自 Kohl Parkinson 及 Roig 的实验; ● 取自 Shabanova 的振子强度值; 箭头表示第一电离阈的位置

图 3 给出了头两个 2D 自电离线的理论与实验的比较图. 与二通道情形相比, 符合有较大改善. 我们用 Fano 参数来表示自电离线的线型^[20], 即

$$\sigma = \sigma_0 \frac{(\varepsilon + q)^2}{1 + \varepsilon^2} \quad (14)$$

σ , σ_0 分别是有干扰和无干扰时的吸收强度, q 是线型指数, 它决定共振峰的线型, ε 是约化能量参数, 即 $\varepsilon = (E - \bar{E}) / \frac{1}{2} \Gamma$, 这里 \bar{E} 是指受扰动能级的位置, Γ 是谱线宽度. 表 4 给出头三条 2D 自电离线的线型以及与实验的比较. 由三通道理论得到的自电离线的吸收峰值比 Roig 实验值偏大, 而谱线宽度 Γ 则偏小.

表 4 2D 自电离谱线的 Fano 线型参数

		$4p'$	$5p'$	$6p'$
Roig 实验	Γcm^{-1}	820	350	257
	q	1.57	2.21	1.94
三通道理论	Γcm^{-1}	761.2	226.7	112.2
	q	1.55	2.0	2.0
R 矩阵理论 ^[7]	Γcm^{-1}	815	276.5	128.4

由图 3 可见, 自第一电离阈以下到分立能阈, 振子强度曲线和二通道处理基本重合. 为了了解三个分解通道对束缚态能级及振子强度的影响程度, 我们将束缚态波函数写成

三个分解通道波函数混合的形式^[12]:

$$\bar{\Psi}_n = \Psi_n / N_n = \sum_i \Phi_i P_i^{(n)} Z_i^{(n)}. \quad (15)$$

$P_i^{(n)}$ 是束缚态 Ψ_n 中第 i 个分解通道的电子径向波函数,

$$P_i^{(n)} = [\nu_{i,n}^2 \Gamma(l_i + \nu_{i,n} + 1) \Gamma(\nu_{i,n} - l_i)]^{-1/2} (2r/\nu_{i,n}) \nu_{i,n} e^{-r/\nu_{i,n}} \quad (r \rightarrow \infty). \quad (16)$$

$Z_i^{(n)}$ 是第 i 个分解通道的混合系数,

$$Z_i^{(n)} = (-1)^{l_i+1} \nu_{i,n}^{3/2} \times \sum_{\alpha} U_{i\alpha} \cos \pi (\nu_{i,n} + \mu_{\alpha n}) A_{\alpha n} / N_n. \quad (17)$$

$|Z_i^{(n)}|^2$ 就表示第 i 个分解通道对束缚态 Ψ_n 的影响程度.

利用表 2 中的参数可以计算这些 $Z_i^{(n)}$ 的值. 图 4 表示第二和第三分解通道的混合系数平方值与各能级的关系. 显然, 影响 2D 分立谱能级位置和吸收强度的主要是 $3s^2(^1S)n d(^2D)$ 通道和 $3s3p(^3P^0)np'(^2D)$ (后者主要是 $3s3p(^3P^0)3p'(^2D)$ 能级) 通道的强烈耦合. 在这个能域, 第三通道 $3s3p(^1P^0)np''(^2D)$ 的影响是很小的. 由于 $3s3p(^3P)3p'(^2D)$ 能态和 nd^2D 的许多能级都有混合, 因此不可能确定它的位置, 这一点已经为 Weiss 和 Lin 指出过.

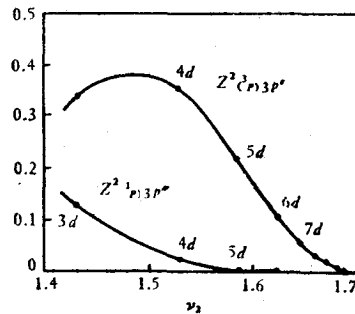


图 4 2D 能级系列中第二和第三通道的混合量 Z^2

四、结 论

用多通道量子数亏损理论计算了 Al I 原子 2D 吸收谱. 能量在第二电离阈以下, 影响 2D 吸收谱的是三个分解通道, 它们是 $3s(^1S)nd(^2D)$, $3s3p(^3P^0)np'(^2D)$, $3s3p(^1P^0)np''(^2D)$. 无论是分解通道还是本征通道, 都假定 L-S 耦合成立. 在适当选择了与能量成线性关系的参数 μ_{α} , D_{α} , 以及转换矩阵元 $U_{i\alpha}$ 之后, 计算了从第一电离阈到第二电离阈之间(波长范围是 $1180 \text{ \AA} < \lambda < 2070 \text{ \AA}$) 的整个 2D 自电离谱. 其结果与 Roig 的测量相符. 在第一电离阈附近的得到的吸收截面值和 Kohl Parkinson 的测量结果也符合. 将振子强度密度曲线外推到分立能域, 就能确定 2D 能级的里德伯系列以及相应能级的振子强度, 它们分别与 Eriksson 和 Shabanova 的测量值相互一致(振子强度只有从 $3d-5d$ 五个能级相符). 在分立谱的能域, 第三通道的影响很小, 可以认为 2D 能级及其振子强度的反常性主要是 $3s3p(^3P^0)3p'(^2D)$ 能级的强烈干扰. 由于这一能级已混合到许多 nd 能级之中, 要确定它的位置已没有意义.

由三通道理论计算得到的自电离谱, 与实验相比, 峰值偏高, 线宽稍狭. 这和参数 D_{α} 的选择有很大的关系. 在我们选定的 D_{α} 参数中, D_1 很小, 而 D_2 则很大, 且随能量的改变也大, 对自电离谱起主要的作用. 如何从物理上解释这些参数的异常性质, 还有待于进一步研究.

在一定范围内成功地计算了 Al I 原子的 2D 吸收谱, 说明多通道量子数亏损理论在统一地处理原子的复杂光谱方面确有其优越性.

感谢李天明同志 (C.M. Lee) 的鼓励和有益的指教。

参 考 文 献

- [1] K. B. S. Eriksson and H. B. S. Isberg, *Ark. Fys.*, **23**(1962), 527.
- [2] N. P. Penkin and L. N. Shabanova, *Opt. Spectrosc.*, **18**(1965), 504.
- [3] Randy A. Roig, *J. Phys. B*, **8**(1975), 2939.
- [4] J. M. Esteva *et al.*, *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer.*, **12**(1972), 1291.
- [5] A. W. Weiss, *Phys. Rev. A*, **9**(1974), 1524.
- [6] C. D. Lin, *Astrophys. J.*, **187**(1974), 385.
- [7] M. Le Deurneuf, Vo Ky Lan *et al.*, *J. Phys. B*, **8**(1975), 2640.
- [8] M. J. Seaton, *Proc. Phys. Soc. Lond.*, **83**(1966), 801.
- [9] U. Fano, *Phys. Rev. A*, **2**(1970), 353; *ibid.*, **15**(1977), 817.
- [10] A. F. Starace, *J. Phys. B*, **6**(1973), 76.
- [11] K. T. Lu, *Phys. Rev. A*, **4**(1971), 579.
- [12] C. M. Lee and K. T. Lu, *Phys. Rev. A*, **8**(1973), 1241.
- [13] C. M. Lee, *Phys. Rev. A*, **10**(1974), 584.
- [14] D. Dill, *Phys. Rev. A*, **7**(1973), 1979; C. M. Lee, *Phys. Rev. A*, **10**(1974), 1598.
- [15] C. M. Lee, *Phys. Rev. A*, **16**(1977), 109.
- [16] 李天明, *物理学报*, **29**(1980), 419.
- [17] K. T. Lu, *Proc. R. Soc. Lond. A*, **353**(1977), 431; J. Geiger, *J. Phys. B*, **12**(1979), 2277.
- [18] J. A. Armstrong, P. Esherick and J. J. Wynne, *Phys. Rev. A*, **15**(1977), 180.
- [19] J. L. Kohl and W. H. Parkinson, *Astrophys. J.*, **184**(1973), 641.
- [20] U. Fano, *Phys. Rev.*, **124**(1961), 1866.

THE 2D ABSORPTION SPECTRUM OF Al I: A MQDT ANALYSIS

ZHAO JUN

(Tsinghua University, Beijing)

ABSTRACT

The Multichannel Quantum Defect Theory (MQDT) has been applied to the analysis of the 2D absorption spectrum of atomic aluminium. The model consists of the mixing of three dissociation channels with different ionization thresholds. By suitably taking the values of the eigen-parameters μ_α, D_α which depend on electron energy and on the transformation matrix elements $U_{i\alpha}$, the 2D autoionization spectrum between the first and second ionization limits is calculated and the result is compared with Roig's measurements. Extending these parameters to the region of discrete spectrum, we obtained the Rydberg series of 2D energy levels as well as their oscillator strengths which also coincide with the analyses of Lin and Weiss and related experiments.