

氢原子 $^1S^e$ 双激发态的强径-径关联区*

鲍 诚 光

中山大学物理系

1989年2月22日收到

本文详细地研究了氦原子 $^1S^e$ 态 $N=3$ 序列内的电子-电子关联。探索并确认了 K 分类的几何内涵。发现了“强径-径关联区”的存在，其中两个电子的径向运动呈强烈的反位相耦合。

PACC: 3150

本文沿用文献[1]的方法并在其基础上对基空间作了调整和扩大，集中研究了氦原子 $N=3$ 序列的 $^1S^e$ 双激发态。改进了能量本征值的计算结果（见表1第二列）。在求得诸本征波函数 Ψ 之后，对其进行分波分解：

$$\Psi = \sum_l |(ll)_0\rangle \langle (ll)_0| \Psi \rangle, \quad (1)$$

式中 l 为每一电子相对于原子核的角动量，然后定义每一分波的权重为

$$B^{(l)} = \int dr_1 dr_2 r_1^2 r_2^2 |\langle (ll)_0 | \Psi \rangle|^2, \quad (2)$$

式中 r_i 为电子的相对于原子核的位置矢径 r_i 的模。权重 $B^{(l)}$ 满足

$$\sum_l B^{(l)} = 1. \quad (3)$$

采用在文献[2]和[3]中提出的 ${}_m(K, T)_N^A$ 分类法则对 $N=3$ 序列的态进行分类。发现不同 K 的态有完全不同的分波构成，这可以从表1中看出。其中第一列为诸态在 $N=3$ 序列中依能量从低到高排列的序号，第三列给出 K 量子数，第四列为在给定 K 值的子序列中的序号。第五列至第八列分别给出 S 波， P 波， D 波和 F 波的权重。

表 1

i	$E(\text{eV})$	K	m	B^S	B^P	B^D	B^F
1	-9.673	2	1	0.55	0.42	0.03	
2	-8.654	0	1	0.33	0.23	0.44	0.01
3	-7.595	2	2	0.53	0.43	0.04	
4	-7.199	0	2	0.34	0.20	0.46	
5	-6.990	-2	1	0.11	0.32	0.51	0.06
6	-6.950	2	3	0.50	0.44	0.06	
7	-6.735	0	3	0.39	0.20	0.41	
8	-6.643	-2	2	0.11	0.34	0.53	0.02

从表1中可清楚地看到 $K=2$ 态以 S 和 P 波为主， $K=0$ 态以 S 和 D 波较重， $K=-2$ 态以 P 和 D 波为主。

* 国家自然科学基金资助的课题。

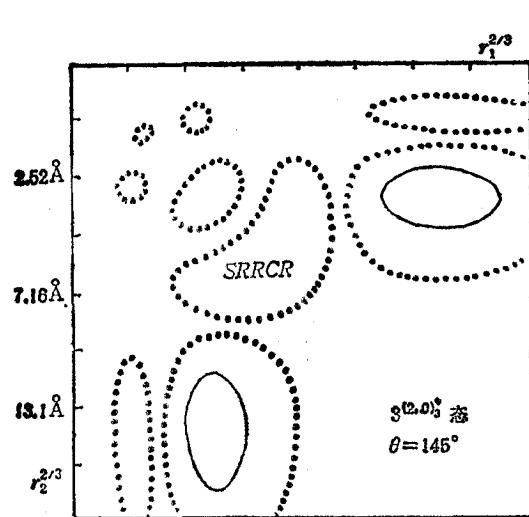


图 1

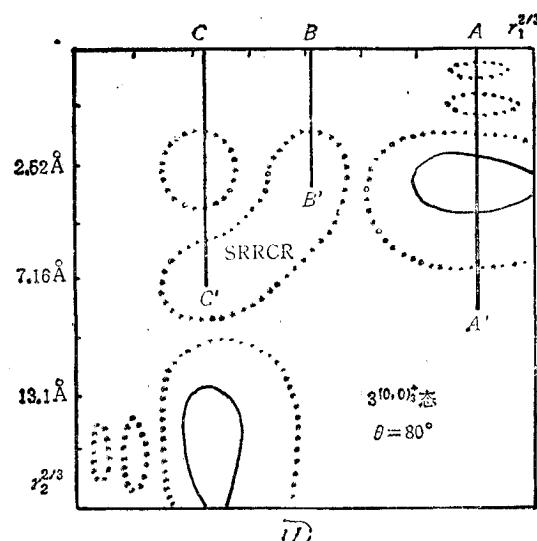


图 2

由于电子间的角关联是通过不同分波之间的干涉实现的，因此具有不同分波结构的态其角关联的情况也是不同的，相应地预期这些态将具有不同的几何特征。通过对形状密度^[1,4] $\rho_s(\bar{r}_1 \bar{r}_2 \theta)$ （其中 θ 是 \bar{r}_1, \bar{r}_2 之间的夹角）的观察可具体研究这些态的几何特征。对于一个给定的态，令 ρ_s^{\max} 为 ρ_s 的最大值，

$$\rho_s(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \theta) = \rho_s^{\max}. \quad (4)$$

显然，(4) 式中的 $\bar{r}_1, \bar{r}_2, \theta$ 给出最可能形状（对于 ${}^1S^c$ 态，这一形状的空间取向是各向同性的）。利用求得的波函数，算得对于 $K=+2$ 的态， $\bar{\theta} \approx 145^\circ$ ；对于 $K=0$ 的态， $\bar{\theta} \approx 80^\circ$ ；对于 $K=-2$ 的态， $\bar{\theta} \approx 28^\circ$ 。换言之，由于 K 不同的态的分波构成不同，其几何特征也大不相同。从处在外面的电子的角度看，对于 $K=2$ 的态内电子喜欢躲在原子核的后面（或者说内电子位于原子核后面的几率较大）；对于 $K=0$ 的态，内电子喜欢位于原子核的两侧；而对于 $K=-2$ 的态，内电子则喜欢挡在原子核的前面。当然，由于内电子转动得比外电子快得多，外电子只是觉得有一团电子云在里面，但是这一团云的分布绝不是各向同性的（例如 $K=2$ 时内电子主要分布在原子核后面）；并且，当外电子转动时，这一分布作为整体将随之而转动以保持 $\bar{\theta}$ 不变。

计算表明 ρ_s 在 ρ_s^{\max} 附近的分布是较为尖锐的。以 $(m, K) = (3, 2)$ 的态为例， $\rho_s = \frac{1}{2} \rho_s^{\max}$ 的等值线所围出的区域，其 θ 值的变化约在 120° 到 160°

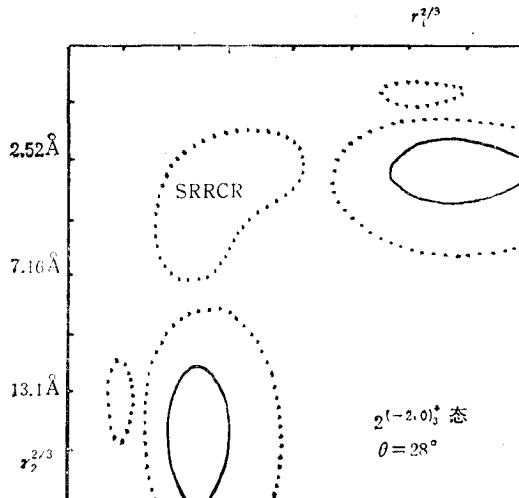


图 3

之间,也就是说电子之间的角关联是相当强的。由于这个特点,可以把 θ 固定在 $\bar{\theta}$ 上,然后研究 ρ_s 随 r_1 和 r_2 的分布,以便考察这两个径向自由度之间的关联。在图1至图3中给出(m, K)=(3, 2), (3, 0)和(2, -2)三个态的情况(在 $m(KT)^{1/2}$ 分类中,这三个态分别记为 ${}_3(2, 0)_{\pm}^{\pm}$, ${}_3(0, 0)_{\pm}^{\pm}$ 和 ${}_2(-2, 0)_{\pm}^{\pm}$)。图中的坐标以同样的比例分别正比于 $r_1^{2/3}$ 和 $r_2^{2/3}$,虚线给出 $\rho_s = \frac{1}{40} \rho_s^{\max}$,实线给出 $\rho_s = \frac{1}{2} \rho_s^{\max}$ 。

从图中可以清楚地看出各存在一个 r_1 和 r_2 有很强的关联的区域(即强径-径关联区(SRRCR))。反之在这个区域外关联是很弱的。例如以图2为例,若 r_1 在A点附近变动时,内电子 e_2 的运动(由 ρ_s 在AA'线段上的分布描写,可看出是一个 $N=3$ 的运动)基本上不受影响。反之,当 r_1 从B到C时,内电子可从B'连续移动到C'(即从 $N=3$ 壳连续移动到 $N=4$ 壳)。在这个过程中电子可不断地向外跳跃到 $N=5$ 壳去(但也可以保持在 $N=3$ 壳内,不过几率要小得多);因而在这个区域出现了很强的反位相的径-径关联(r_1 减少, r_2 相应增加),同时也伴随着产生了能量的转移。对于 K 等于负的态(即图3),发现它的 $N=3$ 壳很宽,整个是一个强径-径关联区;能量交换在这一宽阔的壳内进行。它的 $N=4$ 壳被推向外边,使得 K 等于负的态的体积很大(可由外电子距中心的最可几距离定义体积)。例如我们发现($m, K=-2$)态的体积和($m+1, K=0$)态相当。

当改变序号 m 时, ρ_s 的分布定性上和图1至图3给出的一样,只不过表现外电子振荡的峰的数目有所改变。

概括起来,我们发现即使外电子离内电子很远,它们之间的角关联总是很强的;使得诸态有各自的几何特征,从而提供了 K 分类的几何依据。与此相反,径-径关联则主要在两个电子相距很近时发生。若设内电子所在主壳为第 N 壳,发现对于 K 等于正或零的态,当外电子进入 $N+1$ 壳时强的径-径关联开始发生;这时内电子将被推向 $N+1$ 壳,并可进一步跃出 $N+1$ 壳。另一方面,对于 K 等于负的态,仅当两个电子同时处于主壳 N 时,强径-径关联才会发生。

在文献[4]中主要研究了电子的径向运动与角向运动之间的关联,并指出强径-角关联区(SRACR)的存在。本文则主要研究了径向运动之间的关联并指出强径-径关联区(SRRCR)的存在,从而进一步加深了对氦原子的电子关联的认识。

- [1] Bao Cheng-guang, *Phys. Rev.*, **A38** (1988), 591.
- [2] D. R. Herrick and O. Sinanoglu, *Phys. Rev.*, **A11** (1975), 97.
- [3] C. D. Lin, *Phys. Rev.*, **A12** (1975), 493; **A14** (1976), 30; **A23** (1981), 1585; **A25** (1982), 76; **A25** (1982), 1535; **A29** (1984), 1019.
- [4] 鲍诚光,物理学报, **37**(1988), 1494.

STRONG RADIAL-RADIAL CORRELATION REGION IN DOUBLY EXCITED $^1S^o$ STATES OF HELIUM ATOM

BAO CHENG-GUANG

Department of Physics, Zhongshan University, Guangzhou

(Received 22 February 1989)

ABSTRACT

The electron-electron correlation in the $N=3$ series of the $^1S^o$ helium states has been investigated in detail. The geometric implication of the K-classification scheme has been recognized. The strong radial-radial correlation region where the radial motions of the two electrons are coupled strongly in inverse phase has been discovered.

PACC: 3150

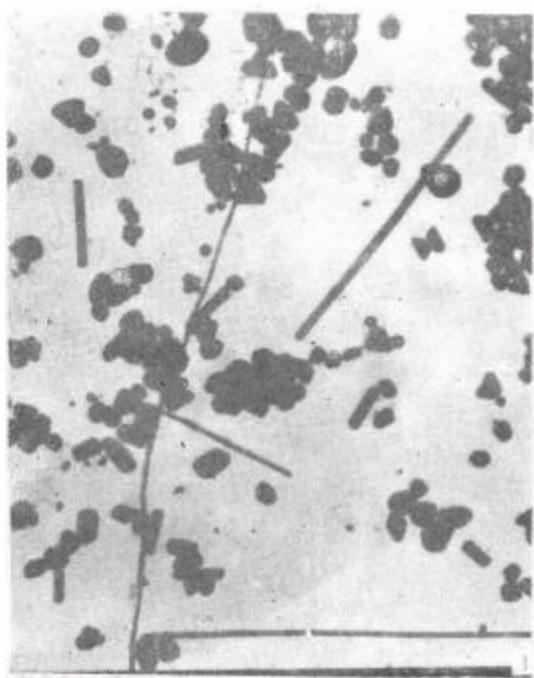


图 1 银胶的电子显微镜象 $\times 35000$

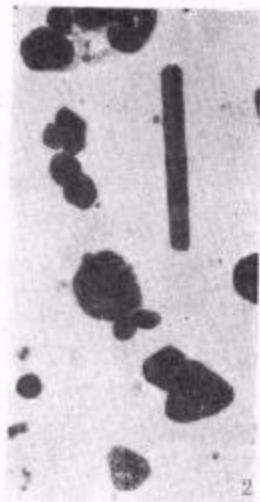


图 2 图 1 中局部(棒)的放大像

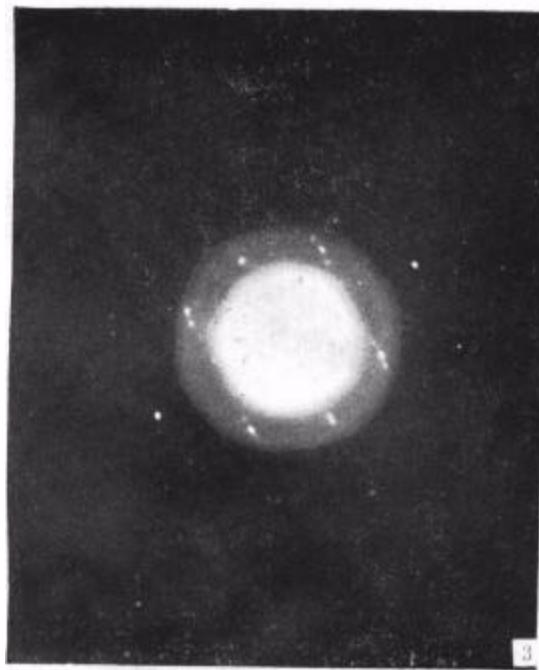


图 3 图 1 中胶体银颗粒的电子衍射象

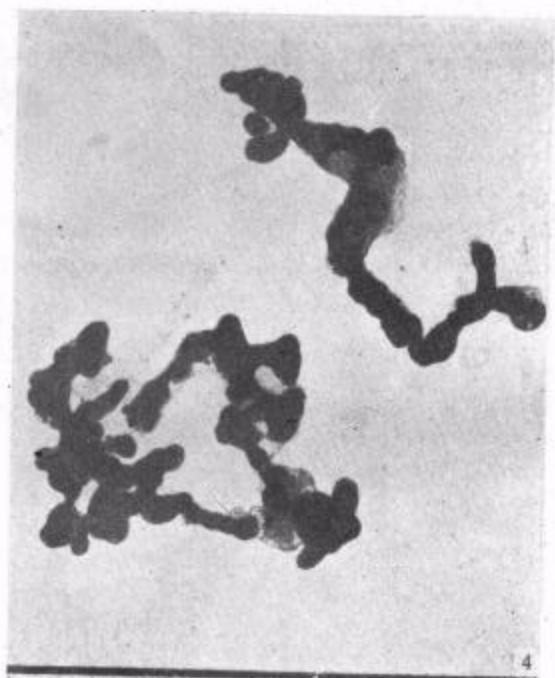


图 4 银胶 (2ml) 中加入 KCl (0.25 ml, 浓度为 0.2mol) $\times 35000$



图 5 图 4 约部分放大象

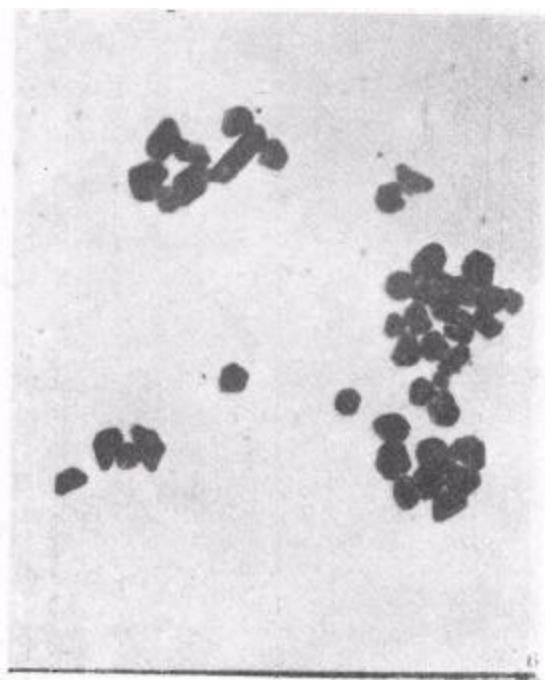


图 6 银胶 (2ml) 中加入吡啶 (2ml, 浓度为 1mol) $\times 50000$

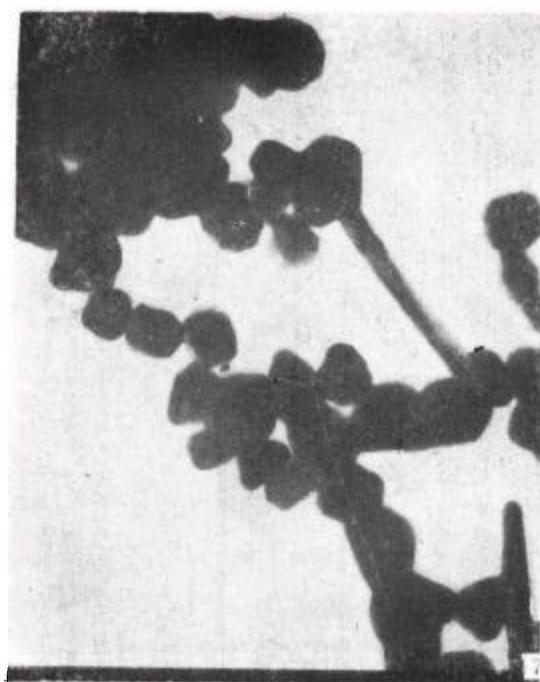


图 7 银胶中先加吡啶, 后加 KCl $\times 100000$

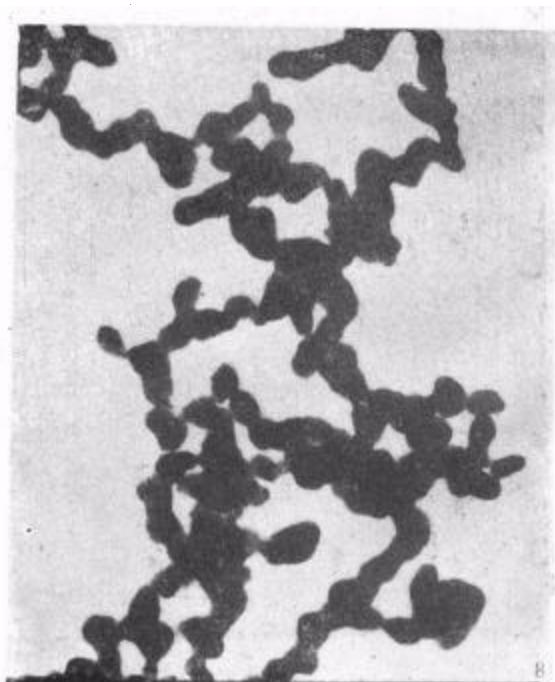
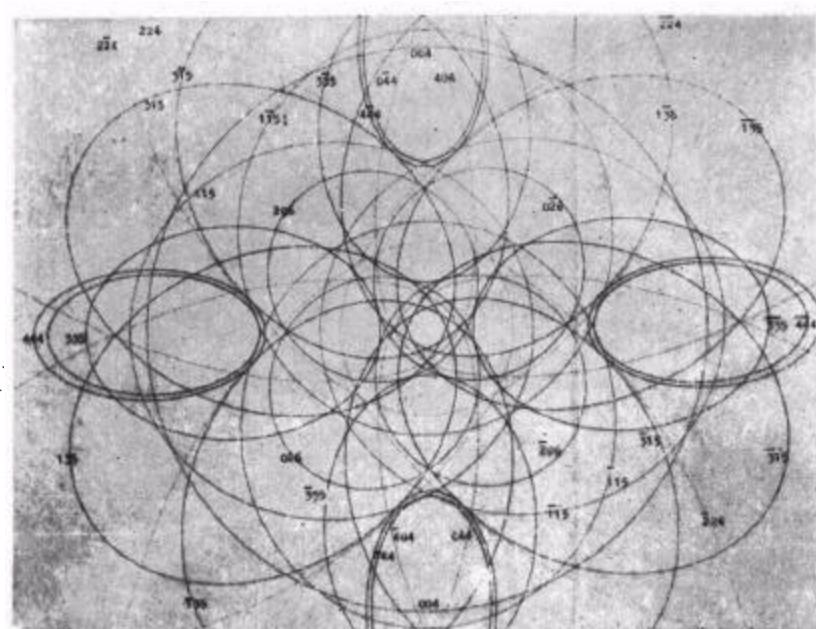
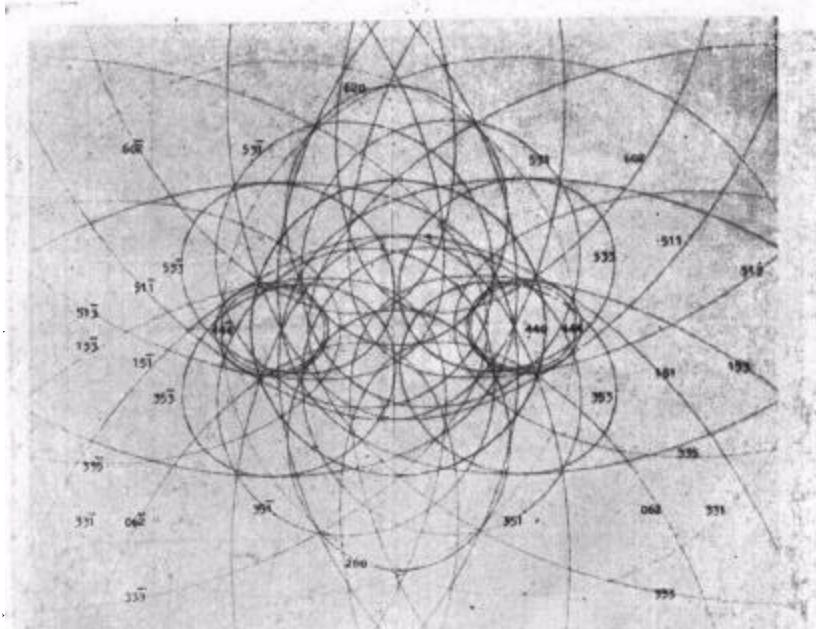


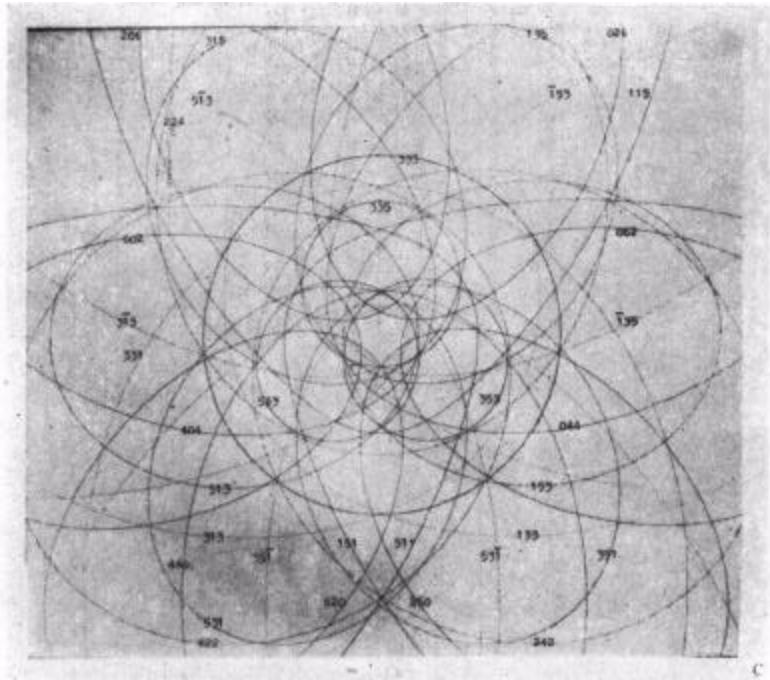
图 8 银胶中先加 KCl, 后加吡啶 $\times 50000$



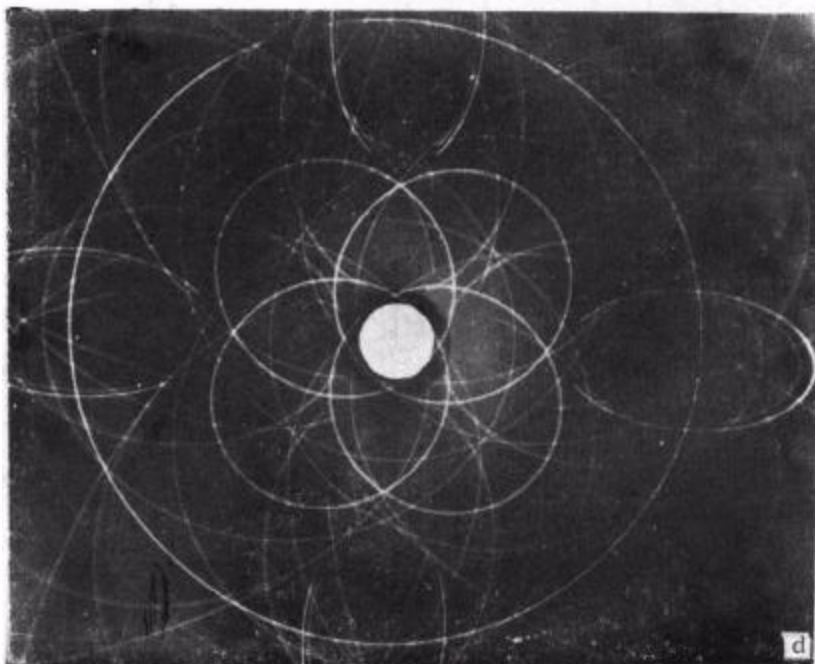
(a)



(b)



(c)



(d)

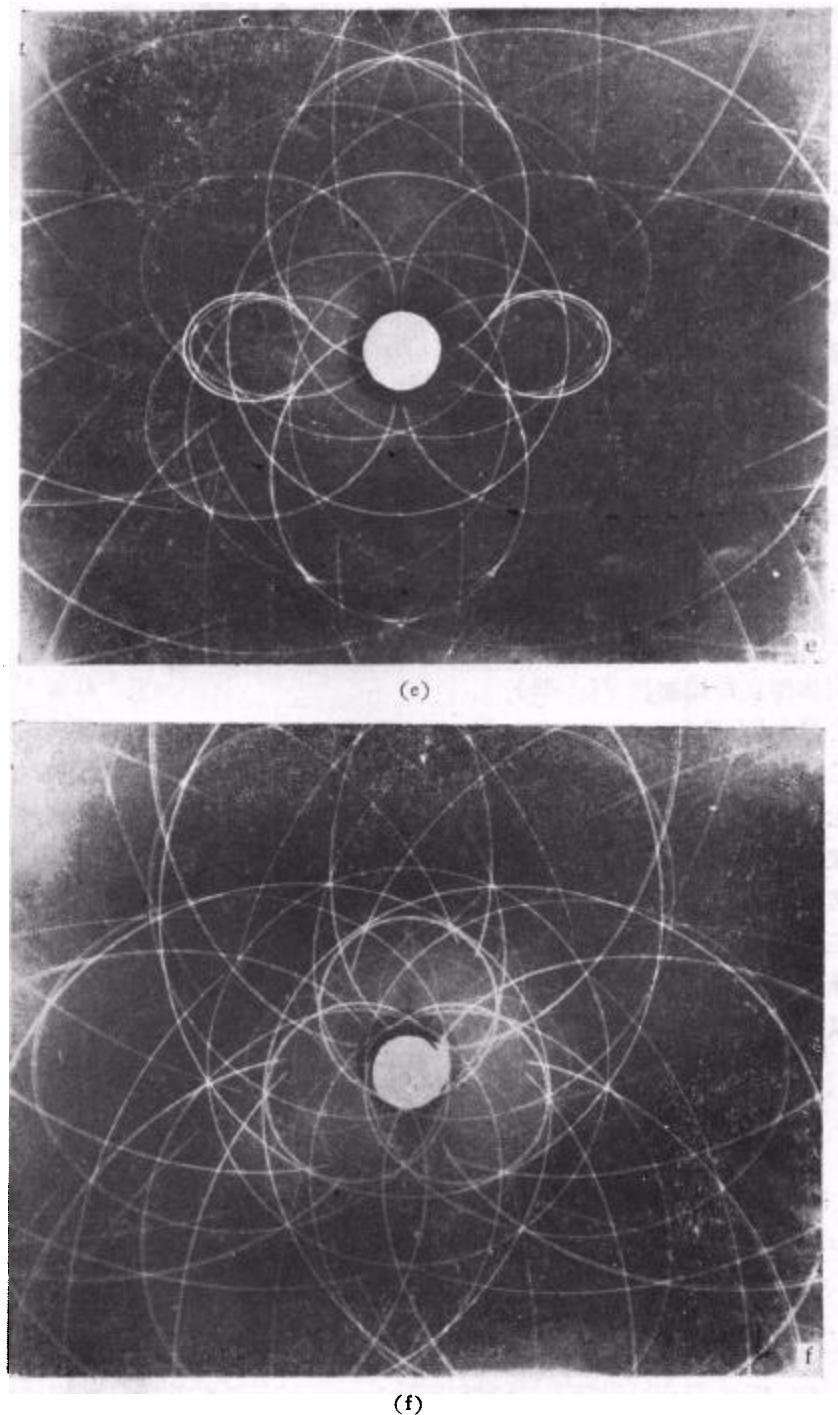


图 4 由计算机产生的背射腰 Kossel 衍射花样[(a),(b),(c)]和实拍照片
[(d),(e),(f)] Si 单晶, Cu 靶, K_{α} 辐射
(a), (d) 为<100>晶片, $D = 70\text{mm}$, $h = 3\text{mm}$; (b),(e) 为<110>晶片, $D = 70\text{mm}$,
 $h = 5.5\text{mm}$; (c), (f) 为<111>晶片, $D = 70\text{mm}$, $h = 5\text{mm}$