

限制环境下类氢体系的共振增强现象^{*}

王晓峰 乔豪学 刘海林 于国萍[†]

(武汉大学物理系, 武汉 430072)

(2004 年 7 月 9 日收到, 2005 年 3 月 7 日收到修改稿)

采用 B 样条方法, 以囚禁于巴基球内的 Be^{3+} 为例, 计算了限制环境下类氢体系在不同外阱形状和位置下 $2s-3p$ 振子强度随外阱深度的变化. $2s, 3p$ 态都被限制在外阱时出现共振增强, 在坍塌点发现共振增强峰. 计算结果表明, 共振增强现象对外阱形状不敏感, 但是对外阱的限制能力有要求, 同时还受到外阱位置的影响.

关键词: B 样条, 巴基球, 振子强度, 共振增强

PACC: 3120, 3270C

1. 引言

随着 $\text{La}@C_{60}$ ^[1] 的成功制备, 在实验上已经相继获得 $\text{K}@C_{60}$ ^[2], $\text{He}@C_{60}$ ^[3] 和 $\text{Ne}@C_{60}$ ^[4] 等. 这类体系中, 原子在外来势阱(简称外阱)的影响下表现出许多新奇独特的性质, 因此研究限制环境对囚禁原子能级结构和谱特性的影响具有重要意义. 在这一课题的众多理论研究中^[5-15], 只有 Connerade^[13], Qiao 等^[14] 和张献周等^[15] 研究了囚禁于巴基球中心的氢原子和类氢离子的电子结构. 文献 [13] 计算了被囚禁氢原子基态和几个低激发态的能级结构和波函数, 文献 [14] 还计算了类氢离子基态和低激发态的特性以及 $1s-2p$ 振子强度, 文献 [15] 讨论了被囚禁氢原子的里德伯能级结构和振子强度. 在文献 [14, 15] 中, 我们可以看到当外阱深度 V_0 取某些值时有共振增强现象, 但是对这一现象的更深入研究, 作者至今尚未见报道. 我们将探讨限制环境下类氢体系低激发态之间的跃迁(以 $2s-3p$ 为例). 由于 B 样条(B splines)是一种高度局域化的函数, 因此可以用 B 样条作为展开基函数来处理量子阱的这种特殊问题. 文献 [16] 用 B 样条方法计算了氢原子的关联能, 文献 [14, 15] 也采用了 B 样条方法, 都取得了很好的结果. 因为 Be^{3+} 具有较深的内库仑阱, 本文将采用 B 样条方法计算不同外阱形状和位置下囚禁在巴基球内的 $\text{Be}^{3+} 2s-3p$ 态振子强度随外

阱深度 V_0 的变化, 并分析外阱形状和位置对共振增强现象的影响.

2. 理论与方法

被囚禁的氢原子和类氢离子, 体系的哈密顿算符可写为

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} - \frac{Z}{r} + \frac{\hat{L}^2}{2r^2} + V(r). \quad (1)$$

囚禁原子的巴基球环境采用内外半径分别为 r_A 和 r_B 的等效球壳势 $V(r)$,

$$V(r) = \begin{cases} -V_0 & (r_A \leq r \leq r_B), \\ 0 & (\text{其他}). \end{cases} \quad (2)$$

此模型曾被 Xu 等^[17] 成功地用于解释空心 C_{60} 分子的实验光离化截面和振子强度. 为了能方便地改变外阱形状以达到“软化”外阱的目的, 我们对等效球壳势模型作如下改动:

$$V(r) = -V_0 g(x),$$
$$x = \frac{2r - (r_A + r_B)}{r_A - r_B}, \quad (3)$$
$$g(x) = \begin{cases} 1 & (-1 \leq x \leq 1), \\ 0 & (\text{其他}). \end{cases}$$

需要改变外阱形状时, 只要相应变化 $g(x)$ 在 $-1 \leq x \leq 1$ 区域内的函数形式即可,

$$g(x) = 1 \quad (\text{方势阱}), \quad (4)$$

$$g(x) = \sqrt{1-x^2} \quad (\text{半圆形势阱}), \quad (5)$$

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 10374074)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: yugp@hotmail.com

$$g(x) = -x^2 + 1 \quad (\text{抛物线形势阱}), \quad (6)$$

$$g(x) = \frac{1-k}{\alpha(x+1)} + k \quad (\text{梯形势阱 } 0 \leq k \leq 1). \quad (7)$$

通常情况下要在 $0 < r < r_A$, $r_A \leq r \leq r_B$, $r > r_B$ 三个区域分别展开波函数, 然后在边界处连接起来以满足标准边界条件, 求解计算比较困难. 本文采用特殊节点设计的 B 样条函数作为基函数展开波函数, 标准边界条件自动得以满足, 使计算方便易行. 对给定的节点序列 $\{t_i\}$, $i=1, 2, \dots, K$ 阶 B 样条函数定义为^[18]

$$B_{i,K}(x) = \begin{cases} 1 & (t_i \leq x \leq t_{i+1}), \\ 0 & (\text{其他}). \end{cases} \quad (8)$$

$$B_{i,K}(x) = \frac{x-t_i}{t_{i+K}-t_i} B_{i,K-1}(x) + \frac{t_{i+K}-x}{t_{i+K}-t_{i+1}} B_{i+1,K-1}(x). \quad (9)$$

当用 B 样条函数作为基函数在径向半无限空间 $(0, \infty)$ 展开时, 实际计算中必须在一个很大的数值 R_{\max} 处截断, R_{\max} 的数值由所计算物理量的精度确定. 为了方便地调节节点和保证精度, 本文采用如下非线性变换:

$$r = r(x) = R_0 \frac{x}{1 + R_0/R_{\max} - x}, \quad (10)$$

式中 R_0 是变换参数. 通过以上变换可将半无限空间 $[0, R_{\max}]$ 变换到有限的空间 $[0, 1]$.

本文采用 7 阶 B 样条函数作为基函数展开波函数, 根据势场特点节点设计为

$$t_1 = t_2 = \dots = t_7 = 0, \quad (11)$$

$$t_8 < t_9 < \dots < t_{12} \\ = t_{13} = t_{14} = t_{15} = x_A, \quad (12)$$

$$x_A < t_{16} < \dots < t_{20} \\ = t_{21} = t_{22} = t_{23} = x_B, \quad (13)$$

$$x_B < t_{24} < \dots < t_{413} \\ = t_{414} = \dots = t_{419} = 1, \quad (14)$$

其中 x_A, x_B 分别为 r_A, r_B 作非线性变换(10)式所对应的值. 节点在 $[0, x_A]$, $[x_A, x_B]$ 和 $[x_B, 1]$ 三个区域是均匀分布的. 在下面的计算中, 当外阱形状为等腰三角形时, 因为势场在 r_A, r_B 和 $(r_A + r_B)/2$ 处均不连续, 所以还应增加一个四重节点. 系统波函数的基函数为

$$\phi_i^{lm} = B_{i,K}(x) Y_{lm}(\Omega). \quad (15)$$

通过在外阱的两个边界处采用四重节点以使波函数

7-4-1 阶可微, 边界条件自动得到满足.

根据(10)式将波函数和哈密顿量也作相应非线性变换, 可由薛定谔方程得到如下矩阵方程:

$$HC = EMC, \quad (16)$$

式中 M 为交叠矩阵, C 为列矢. 求解薛定谔方程可得到各能态的波函数及能量.

量子力学的偶极矩阵元 $|r_{jk}|^2$ 决定了从 $|j\rangle$ 到 $|k\rangle$ 态波函数跃迁的允许谱线强度. 采用偶极子发射近似, 振子强度可以定义为

$$f_{i \rightarrow j} = \frac{1}{3} \Delta E \frac{1}{2J_i + 1} | \langle i | r | j \rangle |^2, \quad (17)$$

式中 J_i 为初态的总角量子数, ΔE 为初态和末态的能量差.

3. 结果及讨论

考虑到巴基球的外阱深度 V_0 有很多方法加以调节(如改变巴基球的配位数), 我们假定外阱深度 V_0 在 $0-10 E_H$ (E_H 为 Hartree 能量) 范围内变化. 本文所采用的单位均为原子单位(a.u.), 在下面的计算中, 如果没有特别说明, 外阱均为方势阱. 图 1、图 2 分别为 $2s, 3p$ 能级和 $2s-3p$ 振子强度随外阱深度 V_0 的变化曲线, 巴基球参数采用 C_{60} 笼式分子的值(内径 $r_A = 5.75$ a.u., 外径 $r_B = 7.64$ a.u., 厚度 $\Delta = 1.89$ a.u.)^[17]. 在图 1 中, 态能量 E_n 约为 -7.96 和 $-2.00 E_H$ 处有两条水平线(对应 $1s, 2s$ 基态能量), 外阱深度 $V_0 = 1.97 E_H$ 处有一个能级反交叉点, 分别称为坍塌线和坍塌点^[14]. 根据文献[14]的分析可知, 坍塌线上的点代表态处在内库仑阱中, 受外阱影响较小, 因而能量保持定值; 而其他点代表波函数在外部势阱区有较大的值, 被外部势阱所吸引. 随着外阱深度的增加能量降低. 由图 1、图 2 可以看出, 外阱深度 V_0 较小时, $2s$ 态限制在内阱中而 $3p$ 态很快被限制在外阱中, 随着外阱深度 V_0 的增加波函数重叠变小进而导致振子强度减小. 当 $3p$ 态完全被限制在外阱中时, 振子强度减小到零. 当 V_0 增加到 $1.97 E_H$ 时有共振增强峰出现. 随着 V_0 继续增加, $2s$ 态被限制在外阱中而 $3p$ 态被限制在内阱中, 振子强度又降为零. 当 $4.1 E_H < V_0 < 8.2 E_H$ 时, $2s, 3p$ 态同被限制在外阱中而出现共振增强. $V_0 > 8.2 E_H$ 时 $2s$ 态重新被限制在内阱中, 振子强度减为零.

图 3 为 V_0 分别取 $1.90, 1.97, 2.10 E_H$ 时 $2s, 3p$

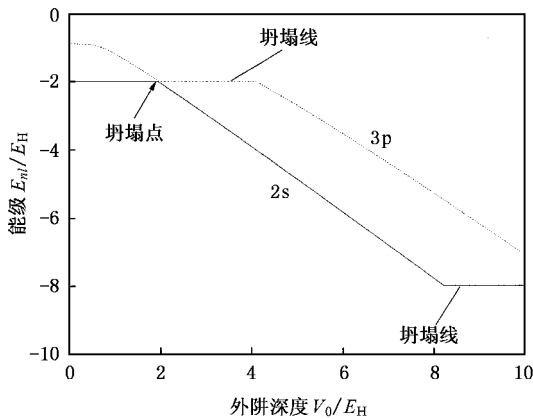


图 1 巴基球内 Be^{3+} $2s$ — $3p$ 态能级随外阱深度 V_0 的变化曲线

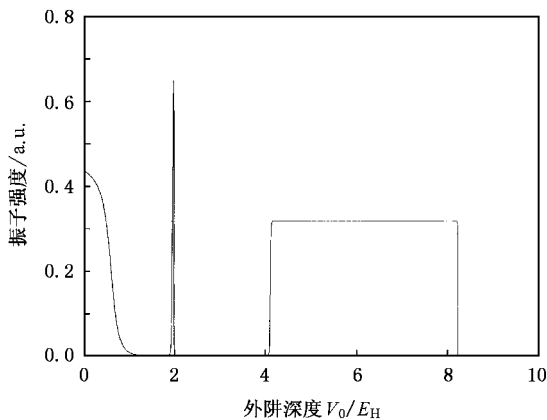


图 2 巴基球内 Be^{3+} $2s$ — $3p$ 跃迁的振子强度随外阱深度 V_0 的变化曲线

态电子径向概率分布. 在离巴基球中心 5.75 和 7.64 a.u. 处, 态的电子径向概率分布曲线有两个“包”出现. 这是由于在边界处势场不连续引起的. 从图 3 可以看到, 当 $V_0 = 1.90 E_H$ 时, $2s$ 态处于内阱中而 $3p$ 态完全被限制在外阱中, 波函数没有交叠因而振子强度为零; 当 $V_0 = 2.10 E_H$ 时刚好相反, $2s$ 态处于外阱中而 $3p$ 态被限制在内阱中, 振子强度同样为零. 随着 V_0 的增加, 起初被限制在内阱的 $2s$ 态“坍塌”到外阱中, 而 $3p$ 态正好相反, 由被限制在外阱“坍塌”到内阱中, 这种现象称作镜像坍塌^[13].

对比此前的计算结果^[14], 在计算中我们首次发现坍塌点处有一个很窄的共振增强峰, 这是一个奇妙的现象. Be^{3+} $2s$ — $3p$ 振子强度曲线的共振增强峰出现在 $V_0 = 1.97 E_H$ 处. 当增加外阱深度 V_0 使 $2s$ 态向外阱“坍塌”而 $3p$ 态向内阱“坍塌”的过程中, 出现了电子径向概率分布在内外阱都不为零的情况. 在

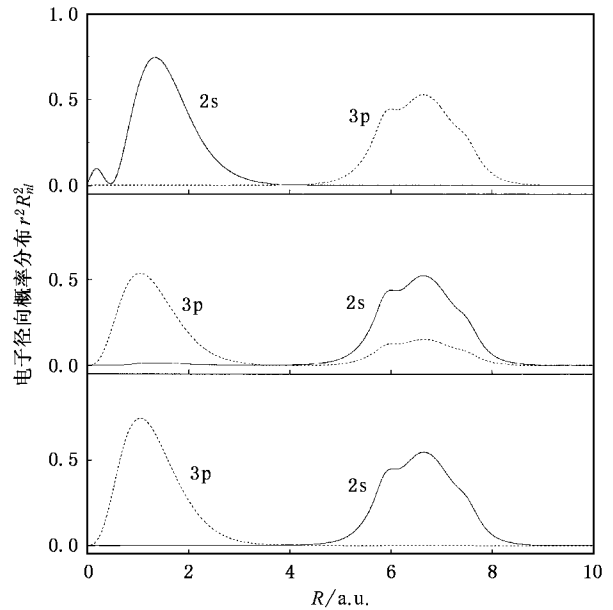


图 3 巴基球内 Be^{3+} $2s$ — $3p$ 态在不同外阱深度 V_0 下的电子径向概率分布

外阱深度为 $1.97 E_H$ 时波函数在外阱处有比较强的混合, 在内阱也有部分混合, 因而振子强度出现极大值. 通过上述分析可知, 在坍塌点(能级反交叉点)有共振增强峰出现, 因而以下的讨论中我们将会用共振增强峰表征共振增强现象.

为了更一般地研究共振增强现象, 我们在固定外阱位置(内径 $r_A = 5.75$ a.u., 外径 $r_B = 7.64$ a.u., 厚度 $\Delta = 1.89$ a.u.) 不同外阱形状下, 以及固定外阱形状和宽度(方势阱, 厚度 $\Delta = 1.9$ a.u.) 改变外阱位置 r_A (用内径 r_A 表示外阱位置) 的情况下, 分别计算了振子强度随外阱深度 V_0 的变化. 图 4 为方势阱、半圆形势阱、抛物线形势阱和等腰三角形形势阱下振子强度随外阱深度 V_0 的变化曲线. 在图 4 中, 方势阱、半圆形势阱和抛物线形势阱下的变化曲线比较接近, 共振增强峰分别出现在 $1.97, 1.97, 2.00 E_H$ 的位置. 当外阱形状为等腰三角形时, 共振增强峰对应的外阱深度 V_0 为 $2.51 E_H$. 从图 4 可以看出, 类氢体系被限制在形状差别较大的不同外阱中时, 都会出现共振增强现象, 共振增强现象对外阱形状不敏感.

在图 4 中, 等腰三角形形势阱下的变化曲线与其他三种势阱形状差别较大, 这是因为不同形状的外阱具有不同的限制能力. 我们进一步计算了具有相似形状的一系列外阱下共振增强峰位置随外阱深度

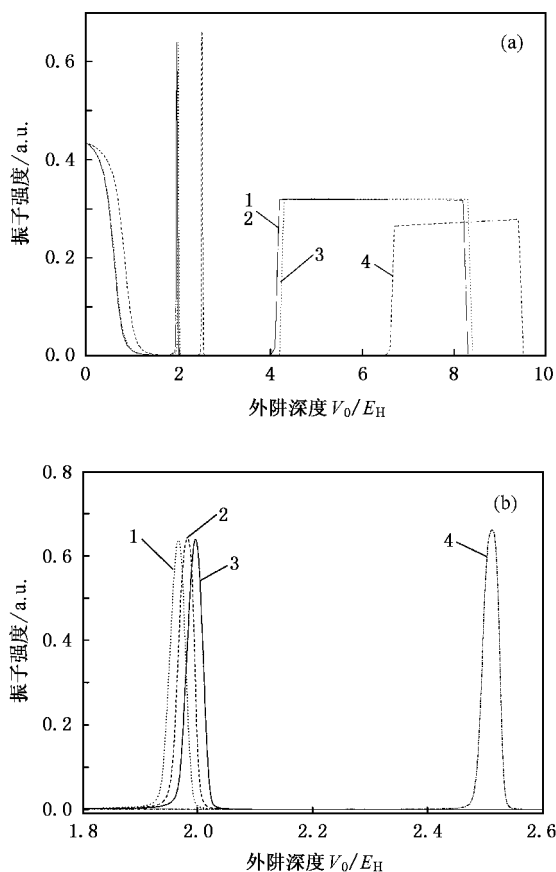


图4 不同外阱形状下 $2s-3p$ 跃迁的振子强度随外阱深度 V_0 的变化曲线 (a)为外阱深度 $0-10 E_H$ 变化时对应的振子强度变化曲线 (b)为(a)的局部放大图. 曲线1为方势阱下的变化曲线, 曲线2为半圆形势阱下的变化曲线, 曲线3为抛物线形势阱下的变化曲线, 曲线4为等腰三角形形势阱下的变化曲线

V_0 的变化, 如图5所示. 采用梯形势阱作为外阱, 其中 $k=0.0, 0.1, 0.2, \dots, 1.0$, 当 $k=0, 1$ 时即为梯形势阱的两个特例——三角形势阱和方势阱. 随着 k 值的增加, 外阱形状由三角形 ($k=0$) 变为梯形 ($0 < k < 1$), 最后变为方势阱 ($k=1$), 限制能力逐渐增强, 共振增强峰值对应的外阱深度 V_0 也逐渐减小, 直到 $1.97 E_H$. 这说明共振增强现象受到外阱限制能力影响.

图6为不同外阱位置 r_A 下 $2s-3p$ 振子强度随外阱深度 V_0 变化曲线. 当外阱位置 r_A 较小时 (如 $r_A=2.0$ a.u.), 因为内外阱靠得较近, 即使 $2s, 3p$ 态分别被限制在内外阱中, 波函数也有重叠, 使得振子强度不为零且始终有一较大值. 逐渐增大外阱位置 r_A , 当 $2s, 3p$ 态分别被限制在内外阱中, 波函数的重叠越来越小, 振子强度趋于零; 当 $2s, 3p$ 态同时被限制在外阱中, 波函数有强的混合, 出现共振增强. 随着

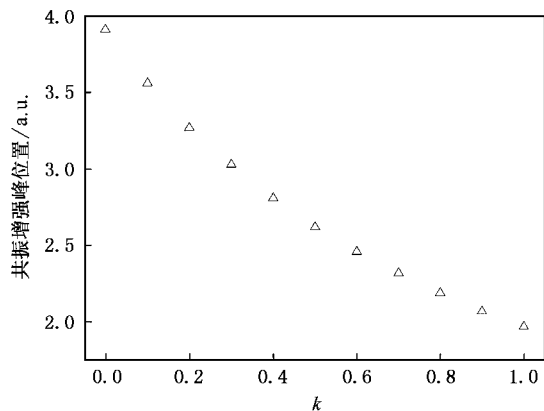


图5 逐渐改变外阱形状引起共振增强峰位置的变化

外阱位置 r_A 的增大, 要将 $2s$ 态由限制在内阱变为限制在外阱, 需要更大的外阱深度 V_0 , 因而共振增强峰对应的外阱深度 V_0 逐渐变大. 我们计算出 $r_A=8.0, 9.0, 10.0$ a.u. 的共振增强峰对应的外阱深度 V_0 分别为 $2.12, 2.16$ 和 $2.18 E_H$, 也证实了上述分析.

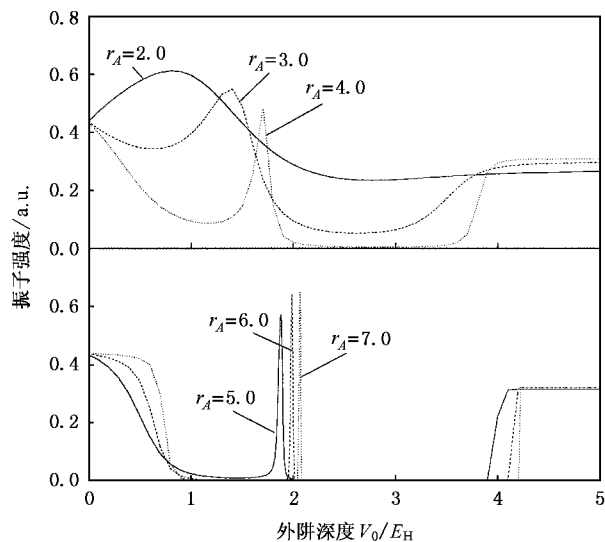


图6 不同外阱位置 $2s-3p$ 跃迁的振子强度随外阱深度 V_0 的变化曲线

4. 结 论

使用 B 样条函数作为基函数展开波函数, 并结合非线性变换的方法, 我们分别计算了不同外阱形状和不同外阱位置下被囚禁在巴基球中心的 Be^{3+} $2s-3p$ 振子强度随外阱深度 V_0 的变化. 当 $2s, 3p$ 态同时处在外阱中时, 因波函数有较强的混合而出现

共振增强. 我们还在坍塌点发现共振增强峰, 并分析了成因. 计算结果表明: 通过限制环境的引入, 使电子处在内库仑阱和外部势阱的双阱结构中, 因为外阱的存在而出现共振增强; 不同外阱形状都会出现共振增强现象, 共振增强现象对外阱形状不敏感, 随

外阱限制能力的增强, 共振增强峰对应的外阱深度 V_0 减小; 当外阱位置 r_A 逐渐增大时, 共振增强现象越来越明显. 以上结果为被限制原子、离子的谱特性研究提供了理论依据.

- [1] Kroto H W , Allaf A W , Balm S P 1991 *Chem. Rev.* **91** 1213
- [2] Kroto H W , Mackay A L , Tumer G *et al* 1993 *Phil. Trans. Roy. Soc. A* **343** 1
- [3] Whitehouse D B , Buckingham A D 1993 *Chem. Phys. Lett.* **207** 332
- [4] Cioslowski J , Nanayakkara A 1992 *Phys. Rev. Lett.* **69** 2871
- [5] Joslin C G , Gary C G , Goddard J D *et al* 1993 *Chem. Phys. Lett.* **213** 377
- [6] Jaskólski W 1996 *Phys. Rep.* **271** 1
- [7] Connerade J P 1997 *J. Alloys Comp.* **225** 79
- [8] Varshni Y P 1997 *J. Phys. B* **30** L589
- [9] Connerade J P , Dolmatov V K 1998 *J. Phys. B* **31** 3557
- [10] Decleva P , Alti G D , Fronzoni G *et al* 1999 *J. Phys. B* **32** 4523
- [11] Connerade J P , Dolmatov V K , Manson S T *et al* 1999 *J. Phys. B* **32** L395
- [12] Baltenkov A S 1999 *J. Phys. B* **32** 2745
- [13] Connerade J P 1999 *J. Phys. B* **32** L239
- [14] Qiao H X , Li B W 2002 *Commun. Theor. Phys. (Beijing)* **37** 475
- [15] Zhang X Z , Jiao Z Y , Rao J G 2002 *Nucl. Phys. Rev.* **19** 253 (in Chinese) [张献周、焦照勇、饶建国 2002 原子核物理评论 **19** 253]
- [16] Qiao H X , Rao J G , Li B W 1997 *Acta Phys. Sin.* **46** 2104 (in Chinese) [乔豪学、饶建国、李白文 1997 物理学报 **46** 2104]
- [17] Xu Y B , Tan M Q , Becker U 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 3538
- [18] de Boor C 1978 *A Practical Guide to Spline* (New York : Springer) p131

Resonance enhancement of the endohedrally confined hydrogen-like system *

Wang Xiao-Feng Qiao Hao-Xue Liu Hai-Lin Yu Guo-Ping

(Department of Physics , Wuhan University , Wuhan 430072 , China)

(Received 9 July 2004 ; revised manuscript received 7 March 2005)

Abstract

Using B -spline method , we take Be^{3+} in buckminster fullerence as an example and have calculated the $2s-3p$ oscillator strength of the endohedrally confined hydrogen-like system in the confining well with different shapes and locations . Resonance enhancement appears as the $2s$ and $3p$ states are both bound in outer well , and a resonance enhancement peak has been found at the " collapse point " . Our results show that resonance enhancement is insensitive to the shape of the confining well , and it is also influenced by confinement ability . The location of the confining well may strongly affect the resonance enhancement .

Keywords : B -spline , buckminster fullerence , oscillator strength , resonance enhancement

PACC : 3120 , 3270C