

文章编号: 1007-4627(2002)02-0192-03

Sc 原子高激发态理论研究*

张新峰¹, 夏丹¹, 钟志萍², 彭永伦¹, 许祥源¹, 李家明^{1,3}

(1 清华大学物理系, 原子分子纳米科学研究中心, 北京 100084;

2 中国科学院研究生院物理部, 北京 100030;

3 中国科学院物理研究所, 北京 100080)

摘要: 利用相对论性多通道量子亏损理论计算了 Sc 的原子里德堡态能级. 计算结果显示, 由于通道间的相互作用, 使得光谱非常复杂, 这与实验测量结果是一致的.

关键词: 相对论性多通道量子亏损理论; Sc 原子; 激发态

中图分类号: O562.1 **文献标识码:** A

1 引言

近些年来, 有非常多的关于闭壳层元素高激发态的实验研究, 特别是对惰性气体的研究, 但是对开壳层元素的研究不多. 研究开壳层元素的主要困难在于产生可用的原子束, 现有的测量大多是 20 世纪 70 年代的结果, 而且很多的数据的精度较低^[1].

Sc 原子有一个单独的 3d 电子, 电子排布为

$[\text{Ar}]3d4s^2(^2D_{3/2})$, 属于 d 子壳层未填满的开壳层原子. 这些年来, 随着实验技术的进步和高性能计算机的问世, 出现了很多关于开壳层原子的研究成果. 运用激光多步共振激发的方法, 经由中间态 $3d4s4p^2F_{5/2}$, 我们得到了 Sc 原子的里德堡态和自电离态光谱^[2]. 但是得到的 Sc 原子的激发光谱非常复杂, 在第一电离阈下的光谱中找不到收敛到第一电离阈的清晰的里德堡系列, 如图 1 所示.

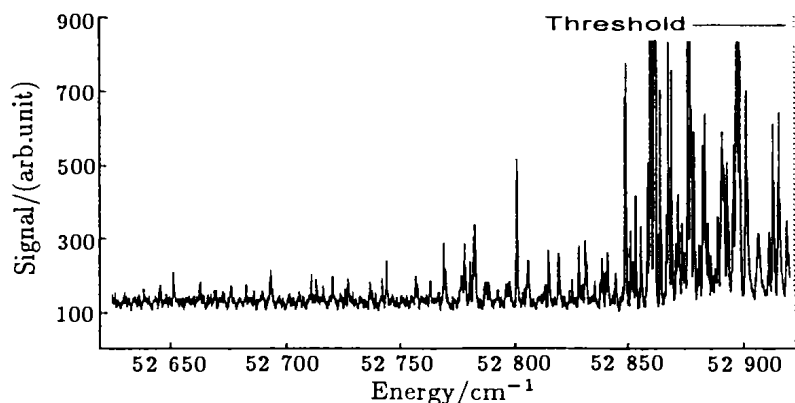


图 1 Sc 原子里德堡态光谱^[2]

为了解释实验测量结果, 我们用相对论性多通道量子亏损理论(RMCT)^[3-6]对 Sc 的原子里德堡态进行了研究, 分析了各个通道的里德堡系列的相互作用, 对比激光光谱, 分析了各个通道的相互作用.

2 理论方法

RMCT 可以看作是传统的组态相互作用理论的发展. 传统的组态相互作用只能处理有限个束缚组态, 而相对论性多通道理论可以处理无限个里德堡的相互作用, 而且考虑束缚-连续及连续-连续组

收稿日期: 2002-03-05; 修改日期: 2002-04-05

* 基金项目: 国家自然科学基金资助项目; 科技部攀登项目资助

作者简介: 张新峰(1979-), 男(汉族), 陕西三原人, 博士研究生, 从事原子物理研究.

态之间的相互作用. 因此, 我们不仅能够计算能级位置和能量本征波函数, 并且可以直接计算多通道量子亏损理论 (MQDT)^[7,8] 的物理参数 (本征量子数亏损 μ_a 和本征通道-分解通道转换矩阵 $U_{i,a}$). 当获得物理参数 ($\mu_a, U_{i,a}$) 以后, 我们就可以用多通道量子亏损理论对无限个里德堡态、电子-原子碰撞过程以及原子-原子碰撞过程进行计算.

3 计算结果和讨论

基于 RMCT 理论, 我们目前计算了收敛到最

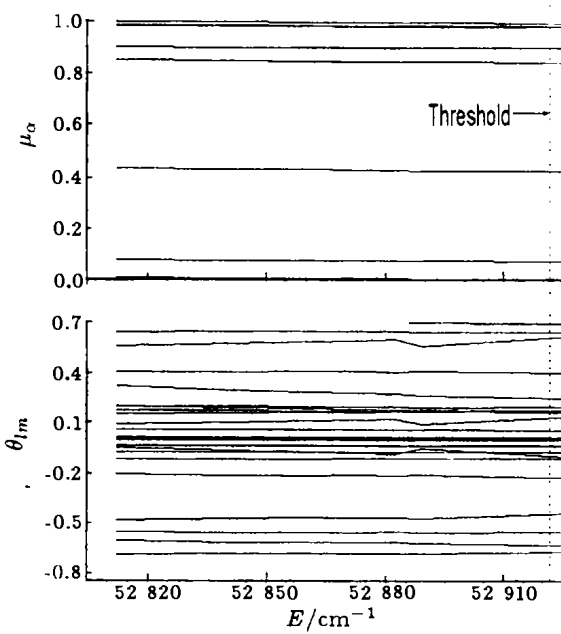


图 2 转换矩阵 $U_{i,a}$ 的本征量子数亏损 μ_a 和欧拉角 $\theta_{i,m}$.

低的 4 个电离阈的 $J=7/2$ 的各个本征通道的 μ_a 和 $U_{i,a}$. 图 2 给出了 8 个本征量子数亏损 μ_a 和 8×8 么正转换矩阵 $U_{i,a}$ 的 28 个欧拉角 $\theta_{i,m}$, 从图中可以看出各个本征通道的 μ_a 和 $U_{i,a}$ 都随着能量的改变光滑、缓慢地变化, 这符合本征通道 μ_a 和 $U_{i,a}$ 的变化规律, 同时也反映了我们的计算的精度.

图 3 给出了我们计算的在第一电离阈下的 $J=7/2$ 各个通道的能级位置.

如果一个态与其他态的相互作用比较强, 在实验光谱上相应的能级附近将会出现峰宽增加、强度异常等现象, 相应的量子数亏损将不能和未受干扰的同一通道的其他态的量子数亏损光滑连接. 从实验谱中我们可以很明显地看出, 光子能量在 52 859, 52 876, 52 883, 52 890, 52 897, 52 901, 52 906 和 52 915 cm^{-1} 等附近的谱峰异常, 这就表明在这些位置附近存在较强的组态相互作用. 我们理论计算显示 (见图 3), 在 52 859, 52 876, 52 883, 52 890, 52 897, 52 901, 52 906 和 52 915 cm^{-1} 附近, 通道 $(4s3d_{3/2})_{J=1} \epsilon d_{7/2}$ 和 $(4s3d_{3/2})_{J=2} \epsilon d_{5/2}$ 的量子数亏损和邻近态的量子数亏损不能光滑连接 (而其他通道的量子数亏损都很好的光滑连接), 这表明在这些能级附近两个通道发生了较强的相互作用, 这与实验测量的结果基本一致. 其它实验观测到的干扰态本次计算未能解释, 主要原因是我们目前只计算了末态 $J=7/2$ 的通道, 而实际上 $J=3/2$ 和 $J=5/2$ 的通道也是光学允许跃迁的. 未来我们将计算 $J=3/2$ 和 $J=5/2$ 的通道, 结合目前工作, 预期计算结果将能更好地解释实验谱.

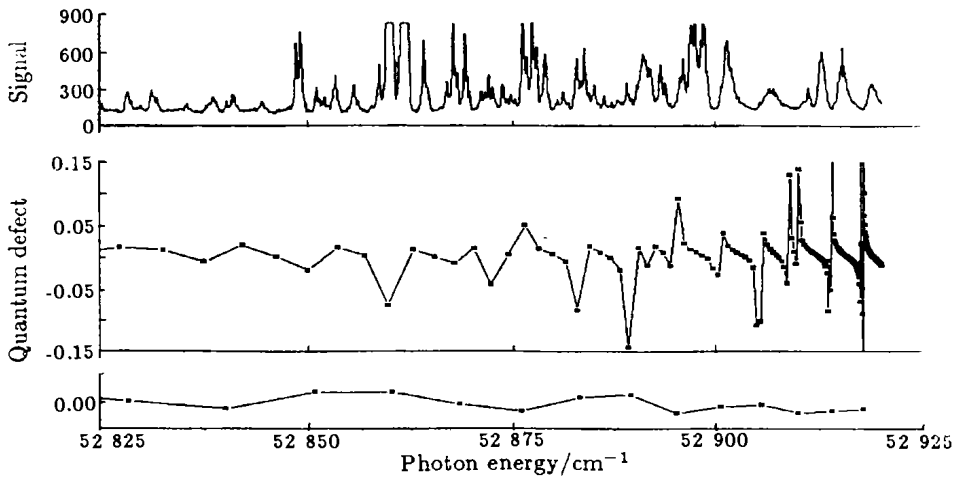


图 3 从上到下依次为实验光谱图^[2]、通道 $(4s3d_{5/2})_{J=1} \epsilon d_{7/2}$ 量子数亏损图和通道 $(4s3d_{3/2})_{J=2} \epsilon d_{5/2}$ 量子数亏损图

参 考 文 献:

- [1] Whitfield S B, Kehoe K, Wehilitz R, *et al.* Photoelectron Spectrometry of Atomic Scandium in the Region of the $3p \rightarrow 3d$ Giant Resonance[J]. *Phys Rev*, 2002(1), **A64**: 022701-1.
- [2] 孙 玮, 薛 平, 谢秀平等. Sc 原子 Rydberg 态及自电离态的研究[J]. *原子与分子物理学报*, 1998, **15**(7): 35.
- [3] 董晨钟, 邹 宇, 王建国等. 双电子复合过程的相对论理论研究: 通道的变化特征[J]. *物理学报*, 1995, **44**: 50.
- [4] Huang W, Zou Y, Tong X M, *et al.* Atomic Energy Levels and Land Factors: A theoretical study[J]. *Phys Rev*, 1995, **A52**: 2 770.
- [5] Tong X M, Zou Yu, Li J M. Relativistic Mutichannel Theory; Theoretical studies of excited energy structure of Ar atom[J]. *Chin Phys Lett*, 1995, **12**: 351.
- [6] 颜 君, 张培鸿, 仝晓民等. 碱金属 nf 里德伯态精细结构反常物理机制的理论研究(能谱与碰撞: 碱金属 nf 里德伯态精细结构与电子-碱金属离子碰撞的 f 波相移)[J]. *物理学报*, 1996, **45**(12): 1 978.
- [7] 李家明. 电子与类离锂离子碰撞激发[J]. *物理学报*, 1980, **29**: 419.
- [8] Zou Yu, Tong X M, Li J M. Relativistic Mutichannel Theory: Theoretical studies of excited energy structure of Ar atom[J]. *Chin Phys Lett*, 1995, **12**: 351.

A Theoretical Study on Highly Excited States of Sc*

ZHANG Xin-feng¹, XIA Dan¹, ZHONG Zhi-ping², PENG Yong-lun¹, XU Xiang-yuan¹, LI Jia-ming^{1,3}

(1 *Department of Physics, Molecular Sciences, Tsinghua University, Beijing 100084, China;*

2 *Department of Physics, the Graduate School of the Chinese Academy of Sciences, Beijing 100039, China;*

3 *Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100080, China*)

Abstract: The energy levels of Rydberg series of Sc atom have been calculated by Relativistic Multichannel Theory (RMCT). The calculations reveal that the Rydberg spectra are complex due to the channel interactions, which is consistent with the experimental spectra.

Key words: relativistic multichannel theory; Sc atom; excited state

* **Foundation item:** National Natural Science Foundation of China; Ministry of Science and Technology