

表1 三种方法测量质子轰击条形 GaAs/GaAlAs
DHLD 像散因子的典型实验数据

No.	BN1	568	BN2	BN4	733	706-1
λ (nm)	840.2	868.6	875.6	888.2	896.1	896.9
I_{th} (mA)	60	95	69	66	54	55
I (mA)	67	100	85	75	65	65
K (7)	1.00	8.27	3.81	12.51	1.44	1.00
K (8)	1.01	1.28	1.66	5.22	2.05	1.33
K (11)	1.02	2.87	1.36	4.66	3.68	1.15
$\left \frac{\Delta K_7}{K(11)} \right $ (%)	2.0	188	180	168	60.9	1.30
$\left \frac{\Delta K_8}{K(11)} \right $ (%)	1.0	15.4	22.1	12.0	44.3	15.7

注: $\Delta K_7 = K(7) - K(11)$; $\Delta K_8 = K(8) - K(11)$

代表第1、2和3种方法测量同一 DHLD 的像散因子大小。三种方法测量的 No. BN1 的 K 值很一致, 说明高斯型分布满足上述三种测量方法的假设条件。No. 568 的三种 K 值相差较大, 原因是其光强分布近场和远场都不对称, 也不属类高斯型, 特别是远场光强分布出现“肩状”。

我们在 DHLD 光输出正向端面上镀一层 SiO 膜, 然后测量镀膜前后的 $K-I$ 和 $\Delta Z-I$ 关系曲线, 实验结果表明, 正向端面镀电介质保护膜在一定程度上改善了半导体激光器的像散特性, K 值和 $|\Delta Z|$ 值都减小了, 而且它们随 I 变化而涨落程度也显著减弱。

作者感谢刘弘度副教授对此项研究的支持和有益的讨论, 感谢徐万劲同志协助部分测量。

本项研究得到中国国家自然科学基金资助。

参 考 文 献

- 1 M. Osinski, J. Buus, *IEEE J. Quant. Electr.*, **QE-23**(1), 9(1987)
- 2 K. Petermann, *IEEE J. Quant. Electr.*, **QE-15**(7), 566(1979)
- 3 T. P. Lee *et al.*, *Electr. Lett.*, **18**(21), 902(1982)
- 4 G. Arnold *et al.*, *IEEE J. Quant. Electr.*, **QE-19**(6), 974(1983)
- 5 H. C. Casey, Jr. M. B. Panish, *Heterostructure Lasers, Part B*(Academic Press, Inc., 1978), 241
- 6 A. Yariv, *Quantum Electronics* (John Wiley Sons, Inc., 1975), 110

(收稿日期: 1987年12月28日)

U 原子能级

刘子东* 潘守甫

(吉林大学原子与分子所, 长春市)

Energy levels of U

Liu Zidong, Pan Shoufu

(Institute of Atomic and Molecular Physics, Jilin University, Changchun)

提要: 本文用 MCDF 方法对 U 原子 $5f^3 6d 7s^2$, $5f^3 6d^2 7s$, $5f^3 6d 7s 7p$, $5f^2 6d^2 7s^2$, $5f^4 7s^2$, $5f^3 7s^2 7p$ 和 $5f^4 6d 7s$ 组态的能级进行了计算, 发现 U 原子一些偶宇称能级的组态标定是不正确的。

关键词: 能级, U 原子, MCDF 法

一、引 言

1976 年 J. Blaise 和 L. J. Radziemski, Jr.^[1] 比较系统地报道了 310—900 nm 波段的 92000 条 U 原

子和 U 离子的光谱线, 确定了 U 原子 1240 条偶宇称能级和 360 条奇宇称能级及相应的大部分同位素位移、 g 因子。Voigt、Klose、Corliss^[2-6] 等人还对 U 原子能级寿命进行了一系列研究。至今, 人们已用各种实验方法对 U 原子结构进行了较深入的研究。

本文通过对 MCDF 程序^[7] 的修改, 用 MCOF-

* 现在在中国科学院武汉物理所工作。

OL 方法对 U 原子 7 个组态的部分低能级进行了计算, 取得了令人满意的结果, 为进一步研究 U 原子结构打下了基础。

二、U 原子能级计算

1. MCDF-OL 方法介绍

假设 N 电子原子束缚态波函数可表示为

$$\psi = \sum_{\mu=1}^{N_c F} W_{\mu} \phi_{\mu}^{N_c, 2, \dots, N, J, J_z}$$

其中 $N_c F$ 代表组态数; ϕ 是 $\{J^2, J_z\}$ 的共同本征函数。

原子总的相对论哈密顿量近似为

$$H = \sum_i H_{0(i)} + \sum_{ij} 1/r_{ij}$$

$$H_0 = -ic\alpha\vec{\nabla} + \beta c^2 - N/r$$

原子束缚态总能量 $E = \langle \psi | H | \psi \rangle$

$$E = \sum_{\mu\nu} W_{\mu} W_{\nu} \langle \phi^{\mu} | H | \phi^{\nu} \rangle$$

$$E = \sum_{\nu} W_{\nu}^2 E_{\nu}^0 + \sum_{\substack{NFGR \\ ij}} W_{\nu} W_{\mu} C_{n(i,j,l,m)}^k R_{n(i,j,l,m)}^k$$

其中 E_{ν}^0 代表组态平均能量^[8]; $C_{n(i,j,l,m)}^k$ 代表角系数。

$$R_{n(i,j,l,m)}^k = \iint [P_i(r)P_j(r) + Q_i(r)Q_j(r)] \frac{r^k}{r^{k+1}} \times [P_l(s)P_m(s) + Q_l(s)Q_m(s)] ds dr$$

据变分原理

$$\delta[E + \sum_i \varepsilon_i N_{(i)} + \sum_{(i \neq j)} \varepsilon_{ij} N_{(ij)}] = 0$$

经整理得 MCDF 方程:

$$\frac{d}{dr} \begin{pmatrix} P_i(r) \\ Q_i(r) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -k_i/r & \frac{2}{\alpha} + \alpha(\varepsilon_i - V_i(r)) \\ -\alpha(\varepsilon_i - V_i(r)) & k_i/r \end{pmatrix} \begin{pmatrix} P_i(r) \\ Q_i(r) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} X_{Q_i}(r) \\ X_{P_i}(r) \end{pmatrix}$$

表 1 中性铀原子 ($5f^3 6d 7s^2 + 5f^3 6d^2 7s$) $J=6$ 组态奇宇称能级 (cm^{-1}) 的计算与实验观测结果

能级		1	2	3	4
E(MCDF)	(a)	0	4108	5787	9835
理论判别	(a)	$0.70f^3 ds^2 + 0.5f^3 d^2 s$	$0.56f^3 ds^2 + 0.61f^3 d^2 s$	$0.52f^3 ds^2 + 0.13f^3 d^2 s$	$0.66f^3 ds^2 + 0.14f^3 d^2 s$
E(MCDF)	(b)	0	4323	6911	10367
理论判别	(b)	$0.71f^3 ds^2 + 0.52f^3 d^2 s$	$0.50f^3 ds^2 + 0.67f^3 d^2 s$	$0.68f^3 ds^2 + 0.03f^3 d^2 s$	$0.46f^3 ds^2 + 0.09f^3 d^2 s$
实验	(c)	0	4276	6249	7006
实验判别	(c)	$f^3 ds^2$	$f^3 ds^2$	$f^3 d^2 s$	$f^3 ds^2$

注: 理论判别 ~ 栏中的组态系数只是相应组态中组态系数的最大绝对值。

其中 (a) 本文结果, (d) 取自文献 [9], (c) 取自文献 [1]。

其中 $V_{U(r)} = -N/r + \sum_{jk} a_{(ij)}^k Y_{(ij)}^k / r$

$$(r/\alpha) X_{P \text{ or } Q_i}(r) = \sum_{j \neq i} [r \varepsilon_{ij} + \sum_k b_{(ij)}^k Y_{(ij)}^k] P_{P \text{ or } Q_j} + \sum C_{(i,j,l,m)}^k Y_{(l,m)}^k P_{P \text{ or } Q_j}$$

$$Y_{(ij)}^k = \frac{1}{r^k} \int_0^r F(s) S^k ds + r^{k+1} \int_r^\infty F(s) ds / s^{k+1}$$

$$F(s) = P_i(s)P_j(s) + Q_i(s)Q_j(s)$$

$a_{(ij)}^k, b_{(ij)}^k$ 代表角系数。

2. 结果与讨论

在下面的计算中, 由于一些组态的数目太多, 现有的条件无法将这些组态全部考虑进去, 我们只取了其中的一部分组态。

2.1 ($5f^3 6d 7s^2 + 5f^3 6d^2 7s$) $J=6$ 双组态的能级计算

我们分别考虑了 $5f^3 6d 7s^2$ 中的 $5f^3 6d 7s^2, 5f^3 6d 7s^2, 5f^2 5f 6d 7s^2, 5f^2 5f 6d 7s^2, 5f^2 5f 6d 7s^2$ 的全部 25 个组态和 $5f^3 6d^2 7s$ 中的 $5f^3 6d^2 7s, 5f^3 6d 6d 7s, 5f^3 5f 6d 7s$ 的全部 31 个组态。结果列于表 1。

从表 1 我们可以看到:

(1) 本文结果与 Grant^[9] 的结果基本一致。二者都是前三条能级与实验符合较好。这是因为这两种计算都只考虑了 ($5f^3 6d 7s^2 + 5f^3 6d^2 7s$) $J=6$ 的部分组态。若望得到更好的结果, 就必须考虑更多的组态。

(2) 在头二条能级中, $5f^3 6d 7s^2$ 和 $5f^3 6d^2 7s$ 组态相互作用是非常强的。

2.2 ($5f^3 6d 7s 7p, 5f^2 6d^2 7s^2, 5f^2 7s^2 7p, 5f^4 7s^2, 5f^4 6d 7s$) ($J=6, 7$) 单组态的能级计算

我们分别考虑了 $5f^4 7s^2, 5f^3 7s^2 7p, 5f^2 6d^2 7s^2$ ($J=6, 7$) 的全部组态, $5f^4 6d 7s$ ($J=6, 7$) 中的 $5f^4 6d 7s, 5f^4 6d 7s, 5f^3 5f 6d 7s, 5f^3 5f 6d 7s$ 全部组态,

表2 中性铯原子($5f^36d7s7p$, $5f^26d^27s^2$, $5f^47s^2$, $5f^27s^27p^2$, $5f^46d7s$) $J=6, 7$ 组态
偶宇称能级(cm^{-1})的计算结果

理论判别 ^(a)	J	E(MCDF) ^(a)	实验 ^(b)	实验判别 ^(b)	理论判别 ^(a)	J	E(MDF) ^(a)	实验 ^(b)	实验判别 ^(b)
$f^2d^2s^2$	6	7620			f^3dsp	7	15545	14859	f^4s^2
f^3dsp	6	7712			f^3dsp	7	16793	16900	f^3dsp
f^3dsp	6	12856	12643	f^4s^2	$f^2d^2s^2$	7	17558	15632	$f^2d^2s^2$
$f^2d^2s^2$	6	14175	11503	$f^2d^2s^2$	f^3dsp	7	18290	18296	f^4ds
f^3dsp	6	15764	14644	f^3dsp	$f^2d^2s^2$	7	19483	18839	$f^2d^2s^2$
$f^2d^2s^2$	6	16346	15638	$f^2d^2s^2$	f^3dsp	7	20316	19648	f^3dsp
f^3dsp	6	16886	16195	f^4ds	f^3dsp	7	20864	19886	f^3dsp
$f^2d^2s^2$	6	17806	17071		$f^2d^2s^2$	7	21582	20465	
f^3s^2p	6	18160	16506	f^3s^2p	f^3s^2p	7	22122	20767	f^3s^2p
f^3dsp	6	18531	17362	f^3dsp	$f^3d^2s^2$	7	23057	21426	
$f^2d^2s^2$	6	19099			f^3dsp	7	23676	21768	f^3dsp
f^3s^2p	6	19950			f^3dsp	7	24569		
$f^2d^2s^2$	6	20989			f^3dsp	7	25157		
f^3s^2p	6	22228			f^3dsp	7	25928		
f^4s^2	6	25979			f^4s^2	7	28328		
f^4ds	6	31074			f^4ds	7	34105		
f^3dsp	7	10615			f^4ds	7	40199		
$f^2d^2s^2$	7	11287							

注: (a) 本文结果, (b) 取自文献 [1].

$5f^36d7s7p$ ($J=6$) 中的 $5f^36d7s7\bar{p}$ 、 $5f^36d7s7p$ 、 $5f^36d7s7\bar{p}$ 、 $5f^25f6d7s7\bar{p}$ 全部 49 个组态和 $5f^36d7s7p$ ($J=7$) 中的 $5f^36d7s7\bar{p}$ 、 $5f^36d7s7p$ 、 $5f^25f6d7s7\bar{p}$ 、 $5f^25f6d7s7p$ 全部 56 个组态。结果列于表 2。

从表 2 我们看到除了 $5f^36d7s7p$ 和 $5f^26d^27s^2$ 的最低能级实验上还未测到外, 低能级的计算值与实验值符合较好。但二者的组态标定却有一些不同。实验上^[1] 分别将 14859cm^{-1} ($J=7$)、 12643cm^{-1} ($J=6$) 的能级标定为 $5f^47s^2$ 组态; 将 18296cm^{-1} ($J=7$)、 16195cm^{-1} ($J=6$) 的能级标定为 $5f^46d7s$ 组态, 但理论计算表明, 这四条能级值分别与 $5f^36d7s7p$ 的相应能级计算值相符合。假如实验上的标定是正确的, 根据计算结果 $5f^47s^2$ ($J=6, 7$) 和 $5f^46d7s$ ($J=6, 7$) 的计算值比相应的实验值高出 10000cm^{-1} 以上。据 J. Blaise 和 Leon J. Radziemski Jr.^[1] 介绍, 实验上标定这些能级主要依据纯组态的同位

素位移。但是这种方法对于区别一些同位素位移差别比较大的组态比较可靠, 而对于区别同位素位移差别比较小的组态就显得不可靠了。 $5f^36d7s7p$ 、 $5f^47s^2$ 和 $5f^46d7s$ 组态正是属于后者^[10]。综合以上讨论, 我们不难得出结论: 以上四条能级实验上的标定是不正确的, 实际上这些能级属于 $5f^36d7s7p$ 而不是 $5f^47s^2$ 和 $5f^46d7s$ 组态。

王治文和赵永芳老师为我们提供了 MCDF 程序, 借此机会向他们表示诚挚的谢意。

参 考 文 献

- 1 J. Blaise, L. J. Radziemski, Jr., *J. Opt. Soc. Am.*, **66**, 644(1976)
- 2 P. A. Voigt, R. L. Kornblith, *J. Opt. Soc. Am.*, **66**, 492(1976)
- 3 P. A. Voigt, *Phys. Rev. A*, **11**(6), 1845(1975)
- 4 J. Z. Kleese, P. A. Voigt, *Phys. Rev.*, **16**(5), 2032(1977)

