

Rb 原子 4p 和 5s 次壳层双激发里德伯态的研究

金石琦 滕华国 徐至展

(中国科学院上海光机所 上海 201800)

提要 报道了 $4p^6 5s^2 S_{1/2} \rightarrow 4p^5 5s(^3P_{2,1,0}, ^1P_1) ns, nd$ 内壳层跃迁产生双里德伯激发态的光谱, 与最新实验值进行了比较, 并分析了内部通道在重叠区域作用的规律。

关键词 双里德伯态, Rb 原子, 组态, 内壳层

1 引言

碱金属原子 p 壳层价电子激发到里德伯态产生的谱线非常丰富, 其主要原因是 sd 次壳层的组态相互作用混合所致。随着碱金属原子的原子序数的增加, 吸收光谱更为复杂, 在碱金属元素中尤以铷原子的光谱最为复杂。选取组态

$$4p^6 5s^1, 4p^5 5s^1 5p^1, 4p^5 5s^1 4f^1, 4p^5 5s^1 5f^1, 4p^5 5s^1 4d^1, 4p^5 5s^1 5d^1$$

时, 跃迁谱线有 1800 余条。

M. A. Baig 等人最新实验观测到了 130 个能级并且做了标定^[1], $4p^5 5s^1, ns$ 和 $4p^5 5s^1, nd$ 与理论计算比较在高里德伯态的光谱跃迁波长误差很小, 数值符合很好。本文给出了 $4p^5 5s^1, ns(n = 5 \dots 20)$ 和 $4p^5 5s^1, nd(n = 4 \dots 19)$ 电子跃迁光谱波长与光谱强度, 为研究高里德伯态原子在其它重要领域内的应用及激光与物质的作用具有一定的贡献。

2 理论模型

设铷原子体系的哈密顿量为

$$H = - \sum_i^{37} \nabla_i^2 - \sum_i^{37} \frac{2Z}{r_i} + \sum_i^{37} \xi_i(r_i) (l_i \cdot s_i) + \sum_{i>j} \sum_{r_{ij}} \frac{2}{r_{ij}} \quad (1)$$

式中第一项是动能, 第二项是势能, 第三项是轨道与自旋作用, 其系数

$$\xi_i(r_i) = \frac{\alpha^2}{2} \left| \frac{1}{r_i} \frac{dV^i(r_i)}{dr_i} \right| \quad (2)$$

式中第四项是双电子相互作用项:

$$\psi_b \left| \sum_{i<j} \frac{2}{r_{ij}} \right| \psi_{b'} \rangle = \delta_{LSJM, L'S'J'M'} \sum_k [f'_k F^k(l_1 l_2) + g'_k G^k(l_1 l_2)] \quad (3)$$

$$\text{其中 } f'_k = (-1)^L [l_1, l_2] \begin{bmatrix} l_1 & k & l_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_2 & k & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} l_1 & l_2 & L \\ l_2 & l_1 & k \end{bmatrix} \quad (4)$$

$$g'_k = (-1)^S [l_1, l_2] \begin{bmatrix} l_1 & k & l_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}^2 \begin{bmatrix} l_1 & l_2 & L \\ l_1 & l_2 & k \end{bmatrix} \quad (5)$$

径向积分和交换积分可表示为

$$F^k(l_1 l_2) = R^k(l_1 l_2, l_1 l_2) \quad (6)$$

$$G^k(l_1 l_2) = R^k(l_1 l_2, l_2 l_1) \quad (7)$$

直接库仑能 $\Sigma f_k F^k$ 与总自旋 S 无关, 交换能 $\Sigma g_k G^k$ 与总自旋 S 有关。根据多电子体系激发能级的特点, 我们设 $4p^5 5s$ 离子的 $J_c = 2, 1, 0$ 与里德伯电子的轨道耦合是弱耦合。

由于铷的原子序数不是很大, 电子耦合用 LS 耦合计算。

3 数值计算和讨论

3.1 $4p, 5s$ 内壳层光谱分析

铷原子从基态 $4p^6 5s^1 {}^2S_{1/2}$ 电偶极允许跃迁的能级有

$$\begin{aligned} 4p^6 5s^1 {}^2S_{1/2} &\rightarrow 4p^5 5s({}^3P_2), ns[D]_{3/2}, nd[S]_{1/2} [P]_{1/2, 3/2} [D]_{3/2} \\ &\rightarrow 4p^5 5s({}^3P_1), ns[P]_{1/2, 3/2}, nd[P]_{1/2, 3/2} [D]_{3/2} \\ &\rightarrow 4p^5 5s({}^3P_0), ns[P]_{1/2}, nd[D]_{3/2} \\ &\rightarrow 4p^5 5s({}^1P_1), ns[P]_{1/2, 3/2}, nd[P]_{1/2, 3/2} [D]_{3/2} \end{aligned}$$

表 1 Rb 里德伯原子主量子数从 $n= 8\sim 19$ 理论计算波长和实验标定波长

Table 1 The wavelength and experiment scaled states

calculate wavelength (nm)	configuration	experimental wavelength (nm)	states *
61. 68070	$4p^5 5s^1 8s^1 (3P)^2 P_{3/2}$	61. 6832	8s
61. 20099	$4p^5 5s^1 8s^1 (1P)^2 P_{1/2}$	61. 2031	8s
60. 84323	$4p^5 5s^1 8d^1 (3P)^2 D_{3/2}$	60. 8494	8d
60. 30939	$4p^5 5s^1 11d^1 (3P)^2 D_{3/2}$	60. 3115	11d
60. 28448	$4p^5 5s^1 13s^1 (3P)^2 P_{3/2}$	60. 2868	13s
60. 24584	$4p^5 5s^1 12d^1 (3P)^4 P_{3/2}$	60. 2373	12d
60. 20998	$4p^5 5s^1 14s^1 (3P)^2 P_{3/2}$	60. 2114	14s
60. 15441	$4p^5 5s^1 15s^1 (3P)^2 P_{3/2}$	60. 1557	15s
60. 12222	$4p^5 5s^1 14d^1 (3P)^2 D_{3/2}$	60. 1261	14d
60. 11134	$4p^5 5s^1 16s^1 (3P)^2 P_{3/2}$	60. 1112	16s
60. 08473	$4p^5 5s^1 15d^1 (3P)^2 D_{3/2}$	60. 0877	15d
60. 07695	$4p^5 5s^1 17s^1 (3P)^2 P_{3/2}$	60. 0779	17s
60. 05511	$4p^5 5s^1 16d^1 (3P)^2 D_{3/2}$	60. 0581	16d
60. 04896	$4p^5 5s^1 18s^1 (3P)^2 P_{1/2}$	60. 0494	18s
60. 03826	$4p^5 5s^1 17d^1 (3P)^4 P_{3/2}$	60. 0334	17d
60. 03070	$4p^5 5s^1 17d^1 (3P)^2 P_{3/2}$	60. 0334	17d
60. 02625	$4p^5 5s^1 19s^1 (3P)^2 P_{3/2}$	60. 0272	19s
59. 99748	$4p^5 5s^1 19d^1 (3P)^2 D_{3/2}$	59. 9980	19d

* experiment scaled^[1].

表 1 给出理论计算的波长和实验测定的波长与标定的能级。大部分跃迁波长误差在 0.005 nm 范围内。

Rb 原子 4p 内壳层激发的光谱覆盖四个态的系列, 即 $4p^5 5s(^3P_{2,1,0}, ^1P_1)$, 因此自然选组态有 $4p^5 5s(^3P_{2,1,0}, ^1P_1) ns, nd$ 。谱线强度在主量子数 n 较低时, ns 系列的谱线强度比 nd 系列的强, 但在主量子数 n 升至 12s 之后, nd 系列的谱线强度明显变得比 ns 系列的要强。

表 2 Rb 里德伯原子组态 $(3P)^2 P_{3/2}$ 主量子数从 $n=7\sim 20$ 理论计算波长和实验标定波长之误差

Table 2 The error of $(3P)^2 P_{3/2}$ wavelength

experiment states	wavelength (nm)	theory wavelength (nm)	error (nm)
7s	62.8603	62.84296	0.03693
8s	61.6832	61.68070	0.00250
9s	61.0943	61.08707	0.00723
10s	60.7505	60.74700	0.00350
11s	60.5452	60.53026	0.01494
12s	60.3919	60.38646	0.00544
13s	60.2868	60.28448	0.00232
14s	60.2114	60.20998	0.00142
15s	60.1157	60.15441	0.00129
16s	60.1112	60.11134	0.00014
17s	60.0779	60.07695	0.00095
18s	60.0494	60.04896	0.00044
19s	60.0272	60.02625	0.00095
20s	60.0080	60.00822	0.00022

表 3 Rb 里德伯原子组态 $4p^6 5s^1 ^2S_{1/2} \rightarrow 4p^5 5s(^3P_2) nd$ 主量子数从 $n=4\sim 19$ 理论计算波长和实验标定波长之误差

Table 3 The error of $4p^6 5s^1 ^2S_{1/2} \rightarrow 4p^5 5s(^3P_2) nd$ wavelength

experiment states	wavelength (nm)	configuration states	theory wavelength (nm)	error (nm)
4d	68.4720	$(3P)^4 D_{1/2}$	68.48609	0.01409
5d	63.7050	$(3P)^4 P_{3/2}$	63.70134	0.00366
6d	62.0371			
7d	61.2526	$(3P)^2 D_{3/2}$	61.22900	0.02360
8d	60.8494	$(3P)^2 D_{3/2}$	60.84323	0.00617
9d	60.5872	$(3P)^2 D_{3/2}$	60.57843	0.00877
10d	60.4327	$(3P)^2 D_{3/2}$	60.42414	0.00856
11d	60.3115	$(3P)^2 D_{3/2}$	60.30939	0.00211
12d	60.2373	$(3P)^2 D_{3/2}$	60.22483	0.01247
13d	60.1731	$(3P)^2 D_{3/2}$	60.16985	0.00325
14d	60.1261	$(3P)^2 D_{3/2}$	60.12222	0.00388
15d	60.0877	$(3P)^2 D_{3/2}$	60.08473	0.00333
16d	60.0581	$(3P)^2 D_{3/2}$	60.05511	0.00299
17d	60.0334	$(3P)^2 D_{3/2}$	60.03070	0.00270
18d	60.0142	$(3P)^2 D_{3/2}$	60.01291	0.00129
19d	59.9980	$(3P)^2 D_{3/2}$	59.99748	0.00052

从表 1 可看出,实验标定的能级与理论计算的能级组态基本一致,实验标定的能级在高里德伯态跃迁光谱中与理论符合得很好,但在较低能级跃迁谱线标定的能级略有误差^[1]。

3.2 实验和理论波长差分析

表 2 和表 3 所示的理论和实验值比较可看出 7s 能级跃迁谱线波长差很大,为 0.03693 nm, 11s 能级谱线跃迁波长差也较大,为 0.01494 nm。

表 3 所示为 d 态能级谱线跃迁波长与理论波长之差,可见低能级谱线跃迁波长差值较大。四重态只有 5d 能级跃迁波长与理论差较小。

图 1 表示 56.0~ 63.0 nm 之间波长及其谱线的强度,较强的谱线集中在 57.0~ 58.6 nm 之间和 59.5~ 61.2 nm 之间。图 2 和图 3 分别表示这两个较强区间的谱线波长与强度之间的函数关系。谱线在 60.0 nm 至 60.08 nm 很窄的区域内集中了很密集的谱线,对应的能级在 166431.6 和 166643.8 cm⁻¹ 之间。

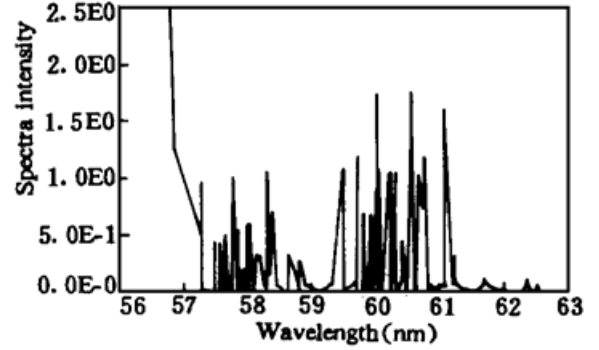


图 1 Rb 里德伯原子辐射波长(56.0~ 63.0 nm)与光谱线的强度
横轴为波长,纵轴为光谱强度

Fig. 1 Rb Rydberg spectrum from 56.0~ 63.0 nm

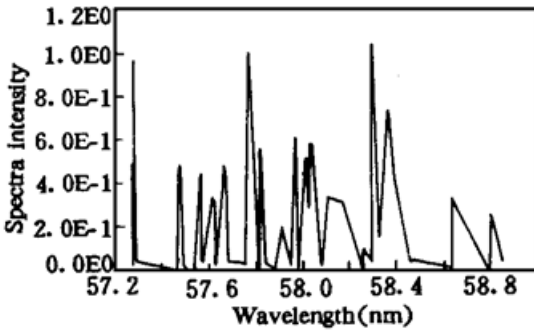


图 2 Rb 里德伯原子辐射波长(57.0~ 58.6 nm)与光谱线的强度
横轴为波长,纵轴为光谱强度

Fig. 2 Rb Rydberg spectrum from 57.0~ 58.6 nm

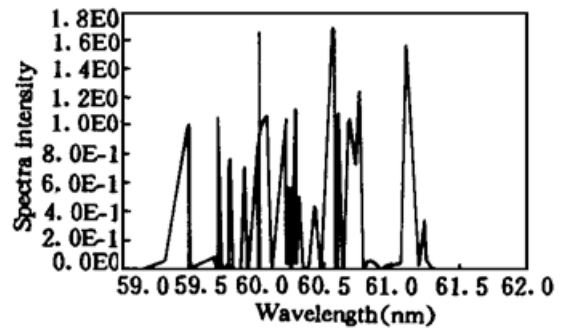


图 3 Rb 里德伯原子辐射波长(59.5~ 61.2 nm)与光谱线的强度
横轴为波长,纵轴为光谱强度

Fig. 3 Rb Rydberg spectrum from 59.5~ 61.2 nm

4 结 论

我们已经分析了铷原子内壳层双里德伯激发能级的跃迁谱线。这些谱线对应的能级跃迁分别趋于七个阈值。其中四个阈值属于 4p 内壳层激发,三个阈值属于双激发能级。4p 内壳层激发和双激发能级非常靠近,以至于有部分重叠。

内壳层激发

$$4p^5(^2p_{3/2})5s^3p_2 = 167039.720 \text{ cm}^{-1}$$

$$4p^5(^2p_{3/2})5s^3p_1 = 168565.840 \text{ cm}^{-1}$$

$$4p^5(^2p_{1/2})5s^3p_0 = 172485.160 \text{ cm}^{-1}$$

$$4p^5(^2p_{1/2})5s^1p_1 = 174307.120 \text{ cm}^{-1}$$

双激发

$$4p^54d^3p_0 = 176718.400 \text{ cm}^{-1}$$

$$4p^54d^3p_1 = 177157.960 \text{ cm}^{-1}$$

$$4p^54d^3p_2 = 177652.070 \text{ cm}^{-1}$$

参 考 文 献

- 1 M. A. Baig, M. S. Mahmood, M. Akram *et al.*. *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.*, 1995, **28**: 1777

The Doubly Excited Rydberg States of Rb Atom 4p and 5s Subshells

Jin Shiqi Teng Huaguo Xu Zhizhan

(Shanghai Institute of Optics and Fine Mechanics, Chinese Academy of Sciences, Shanghai 201800)

Abstract We calculate the 4p and 5s inner shell doubly excited Rydberg states of rubidium. The spectral region is between 50 and 70 nm. There is a little difference of the spectra with the different configurations. Here, we report $4p^65s^2S_{1/2} \rightarrow 4p^55s(^3P_{2,1}, ^1P_1)ns, nd$, the spectra of doubly excited Rydberg states from inner-shell excitation and compare them with new experimental results^[1].

Key words doubly Rydberg state, Rb atom, configuration, inner-shell