

# 高 $l$ 态对镁原子自电离光谱的影响

戴长建

(浙江大学物理系, 杭州 310027)

**摘 要** 采用多通道量子数亏损理论与  $K$  反应矩阵相结合的理论处理方法, 研究了高  $l$  组态  $3pnl$  ( $l = 4$ ) 对于镁原子  $3pnd$  ( $J = 3$ ) 自电离光谱的影响. 在处理中引入  $3png$  ( $J = 3$ ) 组态的影响后能够完整地描述  $3pnd$  ( $J = 3$ ) 自电离光谱. 通过对自电离光谱的细微结构的研究, 讨论了有关的实验现象的物理机制. 理论结果与实验一致.

**关键词** 自电离, 高  $l$  态, 组态作用.

## 1 引 言

多通道量子数亏损理论与  $K$  矩阵相结合的理论处理方法被成功地用于研究镁原子的自电离光谱<sup>[1,2]</sup>和由自电离态弹射的电子的角分布<sup>[3,4]</sup>, 并取得了与实验相一致的结果. 用该方法也解决了实验研究所难以进行的有关电离阈附近的组态相互作用问题<sup>[5]</sup>.

本文拟采用八通道量子数亏损理论对镁原子的  $3pnd$  ( $J = 3$ ) 自电离光谱进行计算, 研究包含  $3png$  ( $J = 3$ ) 组态的  $3pnd$  态的光谱结构并与未考虑  $3png$  组态的多通道量子数亏损理论计算结果进行比较, 以便讨论后者所未涉及的物理现象.

由于  $3png$  态的主要光谱特征取决于镁原子的两个价电子, 它们分别处于轨道半径很小的  $3p$  轨道和很大的  $ng$  轨道,  $ng$  电子对原子实的极化和贯穿作用很小, 因而这种态的自电离是通过长程相互作用产生的. 作为近似,  $3png$  态的波函数可表达为  $3p$  电子的库仑波函数和  $ng$  电子的类氢波函数的乘积. 显然, 对于这种原子特性的研究必将对原子结构的计算产生影响.

## 2 理论方法

镁原子比其它较重碱土金属原子具有较简单的能级结构, 特别是  $3p$  离子态是镁离子的第一激发态, 这一特征使得  $3pnd$  自电离序列所涉及的连续通道的数目大为减小, 也使  $3pnd$  自电离光谱的完整的多通道量子数亏损理论处理成为可能. 镁原子  $3pnd$  ( $J = 3$ ) 自电离光谱的完整描述显然来自八个激发通道的贡献. Dai 等人根据他们的实验结果, 忽略了与  $3png$  组态的三个通道的影响, 并采用五通道量子数亏损理论 -  $K$  矩阵的简化模型计算了镁原子的  $3pnd$  ( $J$

\* 国家自然科学基金、国家教委留学回国人员服务中心和浙大校基金资助项目.

收稿日期: 1993年10月4日

= 3) 自电离光谱, 取得了与实验相一致的理论结果<sup>[1]</sup>. 由于他们忽略了来自于  $3png$  组态的影响, 因而无法了解与其相关的物理现象. 本文从与  $3pnd$  ( $J = 3$ ) 自电离光谱相关的八个通道的  $LS$  耦合下的  $K$  矩阵<sup>[4]</sup>出发, 先获得适合于描述自电离过程的  $jj$  耦合下的多通道量子数亏损理论参数, 再采用典型的理论处理方法<sup>[6]</sup>计算  $3pnd$  态的自电离光谱.  $LS$  耦合下的  $K$  矩阵  $K^{LS}$  可通过一个转换矩阵  $V$  变为  $jj$  耦合下的  $K$  矩阵  $K^{jj}$ , 即

$$K^{jj} = VK^{LS}V^T \quad (1)$$

其中  $V^T$  为  $V$  矩阵的转置矩阵.  $V$  矩阵的矩阵元的值由两种耦合机制下的四个角动量的重新耦合决定, 其核心问题涉及到  $9j$  符号的计算, 这里仅给出  $V$  矩阵的计算结果以及与之相联系的两种耦合机制下的八个通道的光谱表示, 即

$$\begin{bmatrix} 3s_{1/2}ef_{5/2} \\ 3s_{1/2}ef_{7/2} \\ 3p_{1/2}nd_{5/2} \\ 3p_{3/2}nd_{5/2} \\ 3p_{1/2}ng_{7/2} \\ 3p_{3/2}ng_{7/2} \\ 3p_{3/2}ng_{9/2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{3/7} & 0 & 0 & \sqrt{4/7} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{4/7} & 0 & 0 & -\sqrt{3/7} & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2/9} & 0 & -\sqrt{1/3} & 0 & 0 & \sqrt{4/9} & 0 & 0 \\ -\sqrt{1/15} & 0 & \sqrt{2/5} & 0 & 0 & \sqrt{8/15} & 0 & 0 \\ \sqrt{32/45} & 0 & \sqrt{4/15} & 0 & 0 & -\sqrt{1/45} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{1/3} & 0 & 0 & 1/2 & \sqrt{5/12} \\ 0 & 0 & 0 & 1/3 & 0 & 0 & \sqrt{1/3} & -\sqrt{5/9} \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{5/9} & 0 & 0 & -\sqrt{5/12} & -1/6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3pnd \ ^3D \\ 3s \ \epsilon \ f \ ^1F \\ 3pnd \ ^1F \\ 3png \ ^1F \\ 3s \ \epsilon \ f \ ^3F \\ 3pnd \ ^3F \\ 3png \ ^3F \\ 3png \ ^3G \end{bmatrix} \quad (2)$$

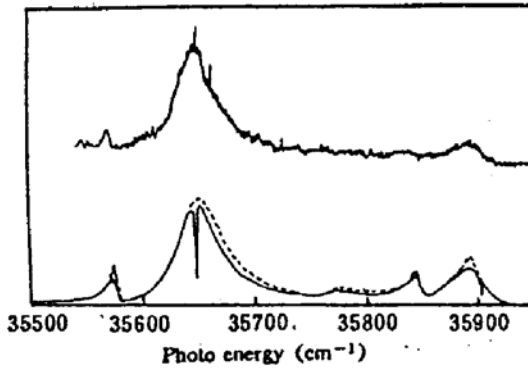
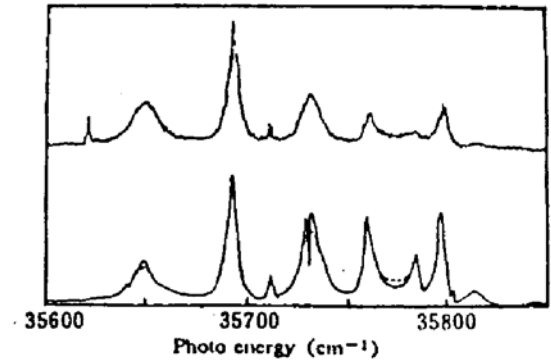
其中  $nl$  ( $l = 2, 4$ ) 表示束缚通道, 而  $\epsilon f$  则表示连续通道.

将矩阵  $K^{jj}$  对角化求得其本征值和本征矢量便可获得多通道量子数亏损理论参数. 这些参数由八个本征通道的量子数亏损  $\mu_n$  和一个  $8 \times 8$  的转换矩阵  $U$  构成. 由这些参数进一步可求得各个通道的混合系数, 计算自电离光谱的过程可按标准的步骤进行<sup>[1]</sup>, 这里不再赘述.

### 3 结果与讨论

本工作分别计算了镁原子的  $3pnd$  ( $J = 3$ ), 其中  $n = 10 \sim 20$  的自电离光谱. 在此仅给出两个实例以便于讨论. 图 1 和图 2 分别对应于  $n = 10$  和  $n = 15$  两个  $3pnd$  ( $J = 3$ ) 自电离光谱. 每幅图的上方附有对应自电离光谱的实验结果<sup>[1]</sup>. 在每一幅图中包括两条计算光谱的曲线, 其中实线对应于八通道的理论结果, 而虚线则代表未含  $3png$  组态的五通道的计算结果.

结果表明, 两种理论均与低分辨率条件下获得的实验光谱基本一致. 在实验所测的光谱中, 由于仪器线宽(如激光线宽)的限制, 难以分辨光谱中的细微结构, 也减小了某些尖锐结构的尖锐性. 换言之, 倘若对理论计算所获得的光谱人为地考虑与对应的实验仪器线宽相一

Fig. 1  $3p10d$  autoionization spectrum ( $J = 3$ )Fig. 2  $3p15d$  autoionization spectrum ( $J = 3$ )

致的线宽影响, 那么实验与理论结果的比较则更为直观和准确. 这种处理方法对于自电离态之宽度与实验分辨率接近的情形<sup>[7]</sup>显得尤为重要.

镁原子的  $3p10d$  和  $3p15d$  ( $J = 3$ ) 自电离光谱的计算结果显示, 五通道模型给出了与八通道完整的量子数亏损理论处理基本一致的结果, 这正是实验上观察不到  $3png$  组态的显著影响的主要原因. 另一方面, 两种理论给出了光谱结构上的明显差别. 五通道模型未能预测出存在于  $3pnd$  自电离峰上的分裂结构, 而八通道的完整描述则证明了这一分裂结构的存在, 因此这一分裂结构的存在来自于  $3pn'g$  组态的贡献. 即说明  $3pn'g$  态与  $3pnd$  自电离态呈简并状态并在后者的中心附近产生一个倒向的尖峰结构. 这种光谱结构曾在钡原子的自电离光谱中被观察到<sup>[8,9]</sup>. 镁与钡原子的自电离光谱中这一分裂结构的主要区别在于后者的裂距更大些, 实验很容易观察到它们的存在. 这种分裂结构可被认为是一些较窄的能级与一个很宽的简并自电离能级相互作用的一个特征. 理论上可视为一些束缚态与有限带宽的连续态之间的相互作用问题<sup>[10]</sup>. 一般情况下, 这种光谱结构的产生并非来源于不同跃迁的振幅之间的干涉, 而是由自电离能级结构本身所决定的. 另一方面, 当  $n \gg l$  时, 一个里德堡  $nl$  系列的量子数亏损  $\delta_l$  与轨道角动量量子数  $l$  之间存在  $\delta_l \propto l^{-5}$  关系<sup>[11]</sup>, 即  $\delta_l$  随  $l$  的增大而迅速减小, 因而在多数情况下,  $l = 4$  的  $ng$  态量子数亏损被认为趋于零而予以忽略, 并可得到与相应实验相符合的结果. 本研究表明, 镁原子的  $3png$  态的量子数亏损约为 0.2, 此值与  $3pnd$  态的量子数亏损  $\sigma_d = 1.2$  相比较小很多, 但与钡原子的  $6png$  自电离序列的量子数亏损  $\sim 0.02$  相比却很大. 这表明在相关的理论计算中把镁原子  $3png$  态的量子数亏损视为零可能会引起较大的误差. 同时, 这一结果表明了镁原子区别于较重碱土金属原子的另一特征. 这一特征的存在导致了  $3png$  态与  $3p(n+1)d$  自电离态的近简并, 因而成为分辨率不很高的相应实验中观察不到  $3png$  态的影响的重要原因. 可以推断, 假若  $3png$  态的量子数亏损与钡原子  $6png$  态相似具有接近于零的值, 那么忽略  $3png$  态影响的五通道模型便会与相应的实验结果产生差别. 因此, 正是  $\sigma_d - \sigma_p \approx 1$  使得五通道量子数亏损理论也能成功地预测镁原子的  $3pnd$  ( $J = 3$ ) 自电离光谱的实验结果.

最后, 从  $n = 10 \sim 20$  的  $3pnd$  自电离光谱的八通道模型计算中还发现, 分裂结构的裂距是随主量子数  $n$  的增大而减小的, 并大致服从  $\nu^{-3}$  的比例关系, 其中  $\nu$  为有效主量子数. 这种裂距与有效量子数的比较关系在钡原子的相关实验中已被观察到<sup>[9]</sup>.

**结 论** 本文计算了包含  $3png$  组态相互作用的镁原子  $3pnd$  ( $J = 3$ ) 自电离光谱, 着重研究了它们的光谱结构以及导致产生这种结构的物理机制. 研究表明  $3png$  态对  $3pnd$  态的影响相对较弱, 尽管它们能使与其简并的  $3pnd$  自电离态分裂, 但这种分裂的裂距很小, 以致很难被相

应的实验分辨清楚. 在此情况下忽略  $3png$  态的影响的五通道量子数亏损理论模型便可获得与实验观察相一致的自电离光谱.

### 参 考 文 献

- [1] C. J. Dai, G. W. Schinn, T. F. Gallagher, Mg  $3pnd$  ( $J = 3$ ) autoionization spectra using isolated-core excitation. *Phys. Rev. (A)*, 1990, **42**(1): 223~235
- [2] G. W. Schinn, C. J. Dai, T. F. Gallagher, Mg  $3pns$  and  $3pnd$  ( $J = 1$ ) autoionizing series. *Phys. Rev. (A)*, 1991, **43**(5): 2316~2327
- [3] M. D. Lindsay, L. T. Cai, G. W. Schinn *et al.*, Angular distribution of ejected electrons from autoionizing  $3pns$  states of magnesium. *Phys. Rev. (A)*, 1992, **45**(1): 231~241
- [4] M. D. Lindsay, C. J. Dai, L. T. Cai *et al.*, Angular distributions of ejected electrons from autoionizing  $3pnd$  states of magnesium. *Phys. Rev. (A)*, 1992, **46**(7): 3789~3806
- [5] 戴长建, 自电离序列的相互作用. *物理学报*, 1994, **43**(3): 369~379
- [6] C. M. Lee, K. T. Lu, Spectroscopy and collision theory I. The Ar absorption spectrum. *Phys. Rev. (A)*, 1973, **8**(3): 1241~1257
- [7] C. J. Dai, S. M. Jaffe, T. F. Gallagher, Ba  $5d_{5/2}nd_j$ ,  $J=4$  states and their interaction with the  $5d_{3/2}\epsilon d_{5/2}J=4$  continuum. *J. Opt. Soc. Am(B)*, 1989, **6**(8): 1486~1491
- [8] F. Gounand, T. F. Gallagher, W. Sandner *et al.*, Interaction between two Rydberg series of autoionizing levels in barium. *Phys. Rev. (A)*, 1983, **27**(4): 1925~1938
- [9] S. M. Jaffe, R. Kachru, H. B. Van Linden Van den Heuvell *et al.*, Ba  $6png$ ,  $J=3$  and  $J=5$  autoionizing states. *Phys. Rev. (A)*, 1985, **32**(3): 1480~1488
- [10] R. R. Jones, C. J. Dai, T. F. Gallagher, Ba  $6p_n f_r$  autoionizing series. *Phys. Rev. (A)*, 1990, **41**(1): 316~326
- [11] R. R. Freeman, D. Kleppner, Core polarization and quantum defects in high-angular-momentum states of alkali atoms. *Phys. Rev. (A)*, 1976, **14**(5): 1614~1619

## Influence of High- $l$ States on the Autoionization Spectra

Dai Changjian

(Department of Physics, Zhejiang University, Hangzhou 310027)

(Received 4 October 1993)

**Abstract** A combination of multichannel quantum-defect theory with the  $K$  reaction matrix has been used to investigate the influence of high- $l$   $3pnl$ , ( $l = 4$ ) configurations on the Mg  $3pnd$  ( $J = 3$ ) autoionization spectra. The introduction of the  $3png$  ( $J = 3$ ) configurations allows us to construct a complete model of the  $3png$  ( $J = 3$ ) autoionization process. Physical mechanism of some experimental phenomena have been related to the detailed structures of the autoionization spectra. Our theoretical results agree well with the published experimental spectra.

**Key words** autoionization, high- $l$  state, configuration interaction.