

# 钡原子 $6p\ 3/2ns$ 自电离里德伯态的研究\*

吕 俊 戴长建 李从奇 徐云飞 刘正东 唐景昌  
(浙江大学物理系, 杭州 310027)

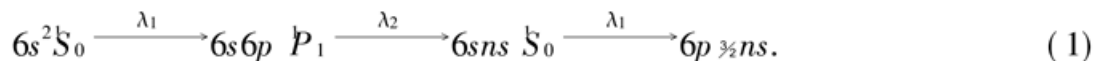
**摘 要** 用激光多步激发技术研究了处于  $6p\ 3/2$  电离限以下的  $6p\ 3/2ns$  自电离态的光谱。并利用最新的  $R$  矩阵的计算结果, 结合多通道量子亏损理论进行了理论分析。理论结果与实验光谱相符合。  
**关键词** 自电离, 多通道量子亏损理论,  $R$  矩阵。

## 1 引 言

近10多年来随着激光光谱技术的发展, 碱土金属原子的自电离里德伯态的光谱特性已得到了广泛而深入的研究。对于 Ba 原子的  $6p\ ns (J = 1)$  自电离态, 已有较多的实验和多通道量子亏损理论计算结果见诸报道<sup>[1-3]</sup>。但由于实验上存在一定的难度, 以往的研究多侧重于主量子数较大的态, 而对  $n \leq 12$  的态的报道较少。最近我们对  $6p\ ns$  自电离系列的光谱进行了较为系统的研究。本文将报道对  $6p\ 3/2ns (8 \leq n \leq 12)$  的研究结果。这些自电离态的能级位置处于  $6p\ 3/2$  电离限以下, 由于受到来自于  $6p\ 3/2nl (l = 0, 2)$  系列的干扰态的干扰, 它们的自电离光谱具有其它主量子数较大的  $6p\ 3/2ns$  态的光谱所没有的结构和特性。因此, 研究这一能域的自电离光谱, 有助于进一步了解组态相互作用对光谱的影响。

## 2 实 验

实验装置主要由真空系统、原子束产生装置、激光光源、微通道板粒子探测器及微机控制的信号采集与处理系统等组成<sup>[4]</sup>。Ba 原子束由温度为 800 °C 的原子炉产生, 准直后进入作用区与三束激发光相交。激发激光由 Nd:YAG 抽运的染料激光器产生, 线宽约为  $0.5\ \text{cm}^{-1}$ 。分步激发 Ba 原子的过程为:



实验过程中,  $\lambda_1$  和  $\lambda_2$  分别固定于相应跃迁的共振波长上, 通过扫描  $\lambda_3$  获得自电离态的激发截面谱。因为第三步激发为孤立实激发(ICE), 故  $\lambda_3$  的扫描范围在离子共振线  $6s \rightarrow 6p\ 3/2$  附近。由自电离过程产生的离子被微通道板探测, 其信号经 Boxcar 门积分器取样平均后输入到计算机进行存储和处理, 经频率标定后得到自电离截面的随激光频率的变化关系。

\* 国家自然科学基金(19774048)、国家科委863高技术惯性约束聚变主题、浙江省自然科学基金(197024)和曹光彪高科技发展基金的资助项目。

### 3 理 论

多通道量子亏损理论的优点之一是使用较少的物理参数 ( $\mu_\alpha$  和  $U_{i\alpha}$ ) 即可统一描述包括连续态和束缚态在内的所有相关通道光谱特性。在早期的工作中, 多通道量子亏损理论参数可通过简化的多通道量子亏损理论模型对实验光谱的拟合而得到<sup>[1, 2]</sup>。但研究表明, 对于 Ba 原子这样的较重的碱土金属原子, 由光谱拟合得到的多通道量子亏损理论参数往往不能准确地反映通道间的相互作用。近年来多通道量子亏损理论与  $R$  矩阵方法结合, 使从头计算复杂原子的光谱成为可能<sup>[5]</sup>。目前,  $R$  矩阵方法已较好地解决了高  $Z$  原子的轨道-自旋相互作用所带来的计算上的困难, 并在分析 Ba 原子实验光谱方面取得了成功<sup>[6]</sup>。

有关多通道量子亏损理论在文献[7]中已有描述, 这里仅给出其理论框架和与本文相关的公式。当里德伯电子与离子实的距离  $r > r_0$  时, 两者之间的作用势可用纯库仑势来描述, 此时体系的波函数可表示为分解通道波函数  $\phi$  的线性叠加, 而当  $r < r_0$  时, 体系的波函数可表示为本征通道波函数  $\phi_i$  的线性叠加。本工作所采用的  $R$  矩阵计算结果是在  $r_0 = 20 a.u.$  的条件下得出的, 共包括 13 个分解通道(参见表 1)。在本工作所关心的能域, 共有 8 个收敛于  $6s$  和  $5d_j$  电离限的分解通道是开放的, 故有 8 个碰撞本征态  $\rho$ 。根据多通道量子亏损理论, 对于闭合通道, 有

$$\sum_{\alpha} B_{\alpha}^{(\rho)} U_{i\alpha} \sin [\pi(\nu_i + \mu_{\alpha})] = 0, \quad (2)$$

而对于开放通道, 则有

$$\sum_{\alpha} B_{\alpha}^{(\rho)} U_{i\alpha} \sin [\pi(-\tau_{\rho} + \mu_{\alpha})] = 0, \quad (3)$$

式中  $B_{\alpha}^{(\rho)}$  为碰撞本征态  $\rho$  的本征通道混合系数,  $\nu_i$  为相应于电离限  $I_i$  的有效量子数,  $\pi\tau_{\rho}$  为碰撞本征态的本征相移,  $U_{i\alpha}$  为分解通道和本征通道的转换矩阵  $U$  的矩阵元,  $\mu_{\alpha}$  为本征通道量子亏损。在本工作中  $U_{i\alpha}$  和  $\mu_{\alpha}$  可由最新的  $R$  矩阵计算结果得到。

Table 1. The dissociation channels for the odd-parity  $J = 1$  series of Ba

$n$	1	2	3	4	5	6	7
$ i\rangle$	$6snp_{3/2}$	$6snp_{3/2}$	$5d_{3/2}np_{3/2}$	$5d_{3/2}np_{3/2}$	$5d_{3/2}nf_{3/2}$	$5d_{3/2}np_{3/2}$	$5d_{3/2}nf_{3/2}$
$n$	8	9	10	11	12	13	
$ i\rangle$	$5d_{3/2}nf_{3/2}$	$6p_{3/2}ns$	$6p_{3/2}nd_{3/2}$	$6p_{3/2}ns$	$6p_{3/2}nd_{3/2}$	$6p_{3/2}nd_{3/2}$	

由于实验采用孤立实激发方式, 在将  $6sns$  里德伯态光电离的过程中自电离过程占绝对优势, 故相应的偶极跃迁矩阵元  $D_{\rho}$  为

$$D_{\rho} = \langle i | = \langle 6p_{3/2}ns | \mathbf{D} | 6sns \rangle A_{\rho}, \quad (4)$$

式中  $\mathbf{D}$  为电偶极矩张量算符, 跃迁矩阵元  $\langle 6p_{3/2}ns | \mathbf{D} | 6sns \rangle$  包含初态和末态的径向和角向的积分, 以及它们之间的重叠积分;  $A_{\rho}$  为碰撞本征态的  $6p_{3/2}ns$  分解通道的混合系数, 可由下式求得:

$$A_{\rho} = \frac{1}{N} \sum_{\alpha} B_{\alpha}^{(\rho)} U_{i\alpha} \cos [\pi(\nu_i + \mu_{\alpha})], \quad (5)$$

其中归一化系数

$$N = \sum_i \sum_{\alpha} B_{\alpha}^{(\rho)} U_{i\alpha} \cos [\pi(-\tau_{\rho} + \mu_{\alpha})] \quad (i, \alpha = 1, 2, \dots, 13). \quad (6)$$

式中  $i$  仅对开放通道求和。求出  $D_{\rho}$  后, 总的光激发截面  $\sigma$  则不难得到

$$\sigma = \frac{4\pi^2}{3} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \right) \hbar\omega_3 \sum_{\rho} |D_{\rho}|^2, \quad (7)$$

其中  $\hbar\omega_3$  为实验中第三束激光的能量。

## 4 结 果

本工作中测量了所有低于  $6p_{3/2}$  电离限的  $6p_{3/2}ns$  态的自电离谱, 并对每个态进行了理论计算。这里限于篇幅, 仅给出  $6p_{3/2}8s$  和  $6p_{3/2}11s$  态的实验和计算结果, 如图 1 和图 2 所示。两图中(a)为实验谱线, (b)为理论计算结果。由于  $n$  越小, 自电离态的宽度越大, 对于较低的态, 在扫描过程中激光光强的变化不可忽略不计, 所以根据激光染料的增益曲线对实验谱线进行了修正。图 1(a) 中的谱线是修正后的实验结果。由图 1 和图 2 可见, 理论计算结果和实验谱线符合得很好, 这一方面说明本工作所采用的  $R$  矩阵很好地反映了这一能域的各种组态相互作用, 同时在另一方面, 也表明实验结果是准确可靠的。

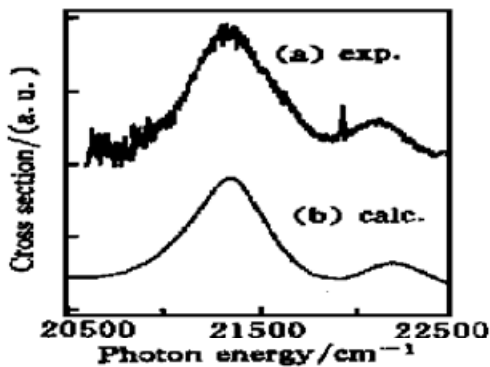


Fig. 1 Transition profile of the  $6p_{3/2}8s$  autoionizing state

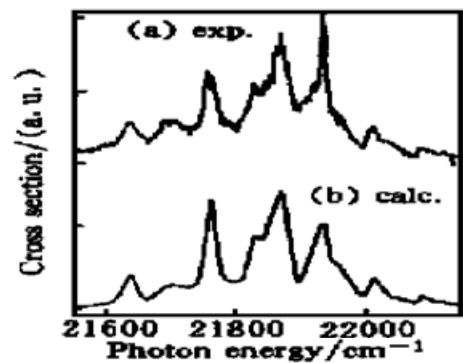


Fig. 2 Transition profile of the  $6p_{3/2}11s$  autoionizing state

实验和理论均表明, 收敛于两个不同电离限  $6p_{1/2}$  和  $6p_{3/2}$  的里德伯系列之间存在着强烈的组态相互作用。由于受  $6p_{1/2}nl$  ( $l = 0, 2$ ) 态的干扰, 本工作所测得的自电离光谱均不同程度地偏离了洛伦兹线形。如图所示, 在  $6p_{3/2}ns$  态的自电离主峰上有窄峰结构。它们均来自于  $6p_{1/2}n'l$  干扰态与  $6p_{3/2}ns$  态的组态混合。对于  $n > 10$  的  $6p_{3/2}ns$  态, 由于  $6p_{1/2}n'l$  干扰态的宽度远小于它们之间的间隔,  $6p_{3/2}ns$  态的自电离光谱(见图 2) 上的每个窄峰可对应于某个  $6p_{1/2}n'l$  态。而与此形成鲜明对照的是, 对于  $n \leq 10$  的态, 其自电离主峰上的结构与  $6p_{1/2}n'l$  态的对应关系变得很不明显, 表明分别收敛于  $6p_{1/2}$  和  $6p_{3/2}$  电离限的自电离组态间的混合是强烈和复杂的。

## 参 考 文 献

- [1] Kachru R, Tran N H, Pillet P *et al.*. Angular distributions and branching ratios of the electrons ejected from the Ba[ $6p_{1/2(3/2)}ns_{1/2}$ ] $J=1$  autoionizing states. *Phys. Rev. (A)*, 1985, **31**(1) : 218~ 234
- [2] Hieronymus H, Kohl M, Neukammer J *et al.*. Perturbed angular distribution of electrons following photoionization of  $6sns \ S_0$  barium Rydberg states. *Phys. Rev. (A)*, 1990, **41**(3) : 1477~ 1491
- [3] Lange V, Aymar M, Eichmann U *et al.*. Barium  $6pns$  ( $J = 1$ ) autoionizing Rydberg states: Comparison between experiment and  $R$ -matrix calculations. *J. Phys. (B)*, 1991, **24**(1) : 91~ 109
- [4] Dai C J, Lu J. Sr  $5p_{3/2}nd$  ( $J = 1, 3$ ) autoionizing states. *J. Phys. (B)*, 1996, **29**(12) : 2473~ 2484
- [5] Greene C H, Aymar M. Spin-orbit effects in the heavy alkaline-earth atoms. *Phys. Rev. (A)*, 1991, **44**(3) : 1773~ 1790
- [6] Maeda K, Aymar M, Ueda K *et al.*. Absolute photoionization cross sections of the Ba ground state in the autoionization region: I. 238~ 218 nm. *J. Phys. (B)*, 1997, **30**(14) : 3159~ 3171
- [7] Lu J, Dai C J, Lee C Q *et al.*. Study of the even-parity  $J = 0$  spectrum of neutral barium. *J. Quant.*

*Spectrosc. Radiat. Transfer*, 1998, **60**(5) : 339~ 343

## Study of the Ba $6p\ \frac{3}{2}ns$ Autoionizing Rydberg States

Lu Jun      Dai Changjian      Lee Congqi      Xu Yunfei

Liu Zhengdong      Tang Jingchang

(*Department of Physics, Zhejiang University, Hangzhou 310027*)

(Received 25 January 1999; revised 17 March 1999)

**Abstract** Using a multi-step laser excitation technique, the excitation spectra of the Ba  $6p\ \frac{3}{2}ns$  ( $J = 1$ ) autoionizing states below the  $6p\ \frac{1}{2}$  limit are studied. The experimental data are compared with the results of an  $R$ -matrix calculation combined with multichannel quantum defect theory (MQDT). The agreement between experiment and theory is satisfactory.

**Key words** autoionization, multichannel quantum defect theory,  $R$ -matrix.