

# 原子的双电子高激发态与库仑三体问题

黄 雯

(中国科学院物理研究所)

本世纪以来,随着相对论和量子力学的建立和发展,物理学取得了迅猛的进展,由此也带动和推动了其它相关学科的发展。因此人们通常将 20 世纪称之为“物理的世纪”。在物理学的诸多领域中,孕育了量子力学的原子物理在本世纪中获得了极其充分的发展。有人可能认为原子物理已经完成了它的历史使命了,剩下的只是些修修补补的工作。而实际的情况又是如何呢?

首先让我们了解一下原子物理中基本理论的现状。

对于一个由带  $Z_e$  电荷的原子核和  $N$  个电子组成的原子(包括离子)体系,其物理性质可通过体系的波函数进行描述。在一定的近似下,描述原子中电子运动状态的哈密顿量可写为<sup>\*</sup>)

$$H = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{1}{2} \nabla_i^2 - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i < j=1}^N \frac{1}{r_{ij}}, \quad (1)$$

式中  $r_i$  为第  $i$  个电子相对原子核的坐标,  $r_{ij} = |r_i - r_j|$  为第  $i, j$  两个电子间的距离。该体系的波函数  $\Psi$  所满足的薛定谔方程为

$$H\Psi = E\Psi, \quad (2)$$

式中  $E$  为体系的总能量。对于 (1)、(2) 式所描绘的体系,其波函数只有在  $N=1$  (氢原子或类氢离子) 时有精确的解析解,在  $N>1$  时无法求得精确解。

为了解决以上问题, Hartree 以独立电子模型 (Hartree, 1928) 为出发点,提出了中心场近似方法。这种方法的基本思想是每个电子在一个平均场中运动,而这一平均场是由原子核的吸引场和其它电子产生的平均排斥场所组成。独立电子模型适用的条件是电子与其邻近的任意一个电子的个别相互作用(电子的对相互作用)要比该电子与原子体系中其余部分的

相互作用小得多。在实际的情形中,当电子被束缚在封闭的壳层里时,由于泡利不相容原理的限制,电子的对相互作用所引起的效应在很大程度上被抑制了,但当这种束缚减弱时(如电子处于激发态),这种效应就会变得越来越重要。通常人们将这种效应称之为电子关联效应。

为了考虑电子关联效应的影响,人们引入了组态相互作用方法 (CI),在此基础上又引入了多通道量子亏损理论方法 (MQDT)。这些方法在原子的基态、低激发态以及只有一个电子处于高激发态的研究之中得到广泛的应用并取得了很大的成功。

以上这些方法的特点是对于电子关联效应的影响只在一个很小的区域(原子实附近)内考虑,当电子远离这一区域时通常作为一个独立电子加以处理。然而对于有两个(或更多的)电子处于较高激发态的情形,这些方法的缺点随即显现出来,因为对这样的体系来说,当体系的能量增加时参与相互作用的组态(对于 CI) 或通道(对于 MQDT) 数目将迅速增加(甚至达到无穷多个),从而使计算变得非常困难。这里所涉及到的问题实际上是库仑量子体系中有关长程相互作用的三体问题(在本文中只讨论两个电子处于高激发态情形,三体问题是多体问题的基础),亦即两个激发态电子间的关联作用在一个大的尺度范围内(远离原子实的区域)仍起着重要的作用。目前对这一问题的研究无论是理论上还是实验上都还是很初步的,还有许多困难需要克服。

库仑三体问题并不仅仅是一个复杂的数学问题,更重要的也是人们更为关心的是它所具

<sup>\*</sup>) 这里采用原子单位制,即在自然单位制 ( $\hbar=c=1$ ) 中进一步取电子质量  $m$  和基本电荷  $e$  均为 1。

有的物理内涵。由于有两个电子处于高激发态,整个原子体系的对称性、稳定性以及它所拥有的好量子数(守恒量)都将与人们熟知的独立电子模型有所不同甚至差异很大。对于这一极富挑战性问题的研究,不仅对原子物理有很重要意义,对于分子物理、化学、生物物理以及天体物理等也具有重要的价值。

1953年, Wannier 研究了两个电子间关联效应对近阈区电子碰撞过程的影响,并导出了著名的 Wannier 阈值定律,由此拉开了研究涉及长程相互作用的库仑三体问题的序幕。实验上人们最早是在 1963 年观察到明显的电子对关联效应:在 He 的吸收光谱中(190—210 Å),人们预期看到强度相当的不同组态  $2snp$ ,  $2pns$  及可能的  $2pnd$  谱线系(依据独立电子模型),但实际上只观察到一个很强的谱线系和一个很弱的谱线系。初步的理论分析将观察到的双电子激发态看作是  $2snp$  和  $2pns$  组态以大致相当的比例进行叠加,与原先的组态已大不相同(注意此时独立电子模型中的单电子轨道角动量已不是好量子数)。人们发现,对这些态来说,到相同总角动量及总自旋的态的跃迁所产生的不同谱线系其激发速率及衰变速率有数量级上的差别,这意味着到不同系列能级的跃迁受到未知的选择定则的制约。这就促使人们对双电子激发态进行更深入的研究。

虽然人们对双电子激发态的研究很早就开始了,但是由于实验上的困难,直到八十年代以后才取得较大的进展。目前采用的实验方法有同步辐射激发、低能电子碰撞激发和激光共振激发等。前两种方法属于早期使用的方法,由于能量分辨率较差( $\sim 10\text{meV}$ )等原因,在实验中受到很大的限制,目前主要用于研究较低的双电子激发态。激光共振激发是随着激光技术的应用而发展起来的实验方法,由于激光具有高功率密度、高能量分辨率等特点,使得这一方法在双电子激发态的研究中占有极其重要的地位。

双电子激发态按其束缚能的大小通常可分为较低的双电子激发态(按独立电子模型其两

个电子的主量子数  $N, n$  一般有  $\min(N, n) < 10$ )以及双电子高激发态。对于较低的双电子激发态,由于原子实的束缚依然较为紧密,因而两个激发电子间的关联相对地说还较弱,对于这类问题人们已经有了较好的理论模型。对于涉及长程相互作用库仑三体问题的双电子高激发态,两个激发电子间的关联极为强烈,理论上对电子行为的解释存在着许多困难,这些困难与缺乏对双电子高激发态全面的实验研究有直接的关系。

近几年来,随着实验技术的进一步发展,人们在双电子高激发态的实验研究中已取得了可喜的进展。这些进展揭示了原子双电子高激发态中电子运动的新现象和新规律(如电子运动轨道的杂化以及极化效应等),为理论工作提供了许多重要的启示。

我国在这一领域起步很晚,但是进展迅速。清华大学现代应用物理系单原子探测实验室在短短几年内就建成了一套用于研究原子双电子高激发态的激光共振电离谱仪,并在实验方法上取得重大的突破性进展,解决了以往实验方法中存在的严重困难,大大拓展了双电子激发态研究的范围,并获得了许多重要的结果。通常在采用激光共振激发方法研究原子双电子高激发态的实验中,原子双电子高激发态的制备是利用多束可调谐的染料激光借助多个中间共振能级的共振激发来进行的,在这样一个复杂的激发过程中,由于各种因素的影响,激发产物中除了双电子高激发态原子(将很快自电离生成离子)外,还有大量的与原子双电子高激发态无关的离子(本底离子),在以往的实验中人们缺乏有效的探测方法区分以上两种离子信号,从而造成原子双电子高激发态光谱中存在很强的本底,这给人们研究原子双电子高激发态带来很大困难。在清华大学所研制的激光共振电离谱仪中,对已有的实验方法进行了重大的改进,率先引入了脉冲电场——稳恒电场顺序电离方法,不仅消除了以上所提的很强的本底,并且还进一步提高了探测效率,从而获得了目前世界上最好的在双逃逸电离阈(两个电子

她用物理的情趣，引我们科苑揽胜  
她用知识的力量，助我们奋起攀登

## 欢迎订阅《现代物理知识》

\* 《现代物理知识》创刊于1989年元月，是一份中、高级科普杂志，侧重于介绍现代物理知识、物理学前沿的最新成果与发展动态和有关物理学的新技术及其应用。

\* 《现代物理知识》由中国科学院主管，中国科学院高能物理研究所主办，科学出版社出版。

\* 《现代物理知识》，双月刊，国内邮发代号2-824，国外代号BM609，国内外发行，各地邮局均可订阅，每期定价1.50元，全年9.00元。

\* 本刊编辑部办理邮购：每期2.00元，全年11.00元，合订本20.00元，均含邮费、包装费。

\* 鉴于目前全国高等和专科院校，以及有关教育部门，正在研讨理工科物理教学内容和教

学手段的现代化问题，不少人希望本刊能为这一具有深远意义的教学改革活动做出应有的贡献，为不负众望，我们出版了1994年“现代物理知识与教学现代化”增刊。北京大学、清华大学、中国科技大学、北京工业大学、北京师范大学等高等院校，以及中国科学院的许多科学家和教授为这期增刊撰文。我们相信，这些文章对正在从事物理教学现代化的大专院校的教师定能有所启迪。

“现代物理知识与教学现代化”增刊，16开，200页，定价6.50元(含邮资)，由本刊编辑部办理邮购，欲购者请汇款至：100039北京918信箱《现代物理知识》编辑部收。

都被电离时所需的最小能量)附近的原子双电子高激发态激发光谱。通过对这些光谱的理论分析，可以发现在原子双电子高激发态中存在着普遍的由强烈的电子关联作用造成的轨道杂化现象(单电子轨道不再具有确定的宇称和角动量)，轨道杂化的程度强烈地依赖于电子关联作用的强弱。进一步的分析还可发现，原子双电子高激发态的激光光谱在一定程度上开始出现分子光谱中所特有的振转光谱特征，这一现象给予人们一个重要的启示，即原子双电子高激发态与分子的结构具有相似性，这使人们有可能将二者统一到同一理论框架中来。对以上这些成果清华大学的许祥源教授在第七届国际共振电离谱学会议的大会邀请报告上进行了报

道，得到了各国科学家们的广泛重视。这是我国在基础研究中又一达到国际先进水平的领域。

库仑场中的三体问题是原子物理中一颗闪闪发光的宝石，其重要性不仅仅局限于原子物理领域，对于分子物理来说，它具有同等的重要性，在许多化学、生物反应过程中起着重要作用的电子交换过程实际上也是这种关联作用的直接结果。

库仑场中三体问题的解决，将使人们在最终解决多体问题的道路上前进一大步。目前实现这一目标依然任重而道远，需要更多有志的青年科学家投身这一领域。

(上接第47页)

国际上超导研究的深入，我们的差距也越加明显，特别是基础性工作上的差距。因此，今后仍

将进一步加强基础研究工作，“九·五”规划要提出有竞争力的明确的攻关目标。

(卜吉霖 宝 编)