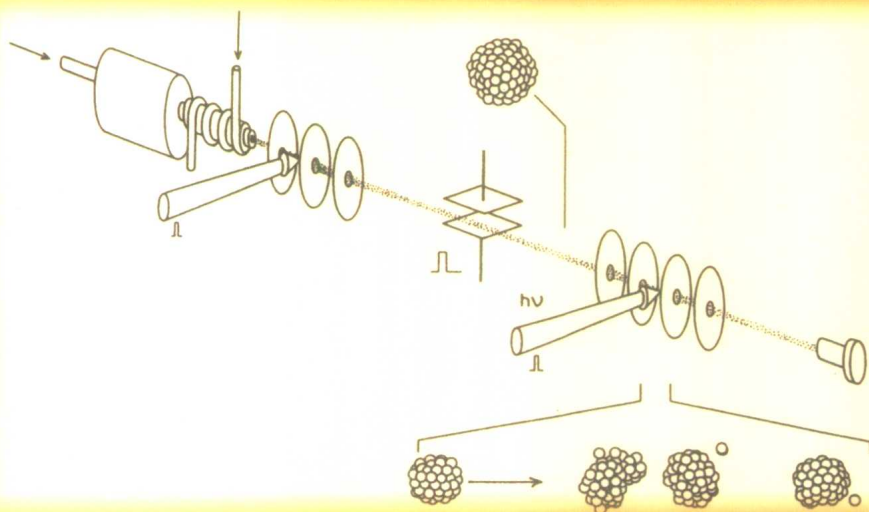


Highly Excited Atoms

高激发原子



[英] J.-P. 康纳德 著



科学出版社

www.sciencep.com

内 容 简 介

本书是一部关于高激发原子、易受扰动的原子和相互作用环境中的原子的物理学入门著作。

本书以电子壳层的特性与传统理论的简要回顾开篇,进而讨论 Rydberg 态、量子亏损理论、原子 f 值、离心势垒效应、巨共振、自电离、内壳层与双激发谱、 K 矩阵理论、强激光场中的原子、统计方法、量子混沌和固体中的原子效应。另有一章论述原子团簇,着重于径向性质、轨道塌缩、多体效应、单粒子模型的突破、混沌的出现和团簇与固体中原子的行为。用孤立共振的传统处理方法和若干新方法对自电离问题进行了全面的讨论。书中含有大量的实验举例、插图和广泛的参考文献。

本书适合于原子物理、分子物理、化学物理、光学和激光物理学工作者和从事团簇物理交叉领域研究的人员。

Jean Patrick Connerade

Highly Excited Atoms

Cambridge University Press 1998

图字:01-2000-2796 号

图书在版编目(CIP)数据

高激发原子/[英]J.-P.康纳德著;詹明生、王谨译.—北京:科学出版社,2003.1

ISBN 7-03-010814-0

I. 高… II. ①康…②詹…③王… III. 原子激发-激发态-研究 IV. O562.4

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2002)第 079446 号

责任编辑:张邦固 / 责任校对:柏连海

责任印制:安春生 / 封面设计:王 浩

科学出版社 出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

<http://www.sciencep.com>

双青印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2003 年 1 月第 一 版 开本:850 × 1168 1/32

2003 年 1 月第一次印刷 印张:16 3/4

印数:1—2 000 字数:428 000

定价:35.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈环伟〉)

译者的话

原子物理研究原子的结构、性质及相互作用的规律。原子物理起源于 19 世纪对太阳光谱和气体放电的研究,经过 20 世纪 20 年代第一次发展高峰期,在结合原子模型、实验获得的有关原子核知识、量子力学之后,而成为一门独立的物理学分支学科。20 世纪 40~50 年代发展的原子分子束磁共振和射频微波波谱学,使对原子分子的测量精度提高百万倍以上,为创立和检验量子电动力学、相对论和各种基本对称性提供实验基础,也开辟了精密测量和量子计量的新时代。从 70 年代以来,利用激光、计算机和低能加速器等新技术带来的光谱学和在复杂理论计算方面的进步,结合固体物理、材料科学、能源和环境应用,原子物理在高激发态、不规则动力学、复杂原子、复杂环境中的原子等方面取得了新的进展。所以,原子物理是一门有着百年历史的学科,而其发展却从来没有停顿过。原子是物质科学研究的最基本层次,研究高激发的原子和原子的相互作用是固体物理、化学、生物等学科的基础。

目前,国内外绝大多数这方面的教科书仍停留在量子力学基础和简单原子(如氢、氦和类氢原子或离子)的描述上,强调旧的理论和易于求解的问题,强调角向分布和角动量耦合而忽视了波函数径向部分的重要性,强调孤立的自由原子的性质而忽视了在相互作用环境中原子特性的贡献。从观念上认为复杂原子体系仅是复杂而已,忽视了这些体系的新的物理现象的介绍。本书则打破了原子物理教科书的传统,成功地对基于原子所进行的如多粒子相关、混沌、强场效应等方面研究的近期实验和理论进行了论述,对孤立原子与团簇和固体性质的内在联系进行了较大篇幅的介绍。

本书作者 J.-P. Connerade 教授对中国十分友好,早在二十多年前他就开始在帝国理工学院接受中国留学生和访问学者,近年来多次访华,曾在北京、西安、成都、杭州、广州、大连、武汉等地的多所高校和科研单位讲学,并与中国科学院武汉物理与数学所保持密切的合作关系. 他非常关心本书中文版的问世,提供了全部的原始插图,亲自帮助联系版权问题. 他在中文版序言中特地提及了我国著名物理学家吴大猷先生对原子物理的重大贡献.

翻译本书的动机与意愿,是为了使中国的广大读者,特别是那些不容易获得原版的学者和青年学生,能有机会读到该著作.

该译本得以完成离不开本研究组多名研究生的参与,其中柳晓军、王继锁、曹俊文、赵宏太、汪毅、赵志等初译了第一至第十章,王谨博士翻译了第十一章和第十二章. 吴礼金教授审校了全书特别是公式部分,李白文教授对一些专业术语的翻译提出了很好的建议,在此深表谢意. 由于译者水平有限,特别是本书一些内容涉及多学科交叉,对一些超出本人专业范围的术语的翻译可能有不合时宜之处,加之时间仓促,译文中错误在所难免,热忱希望大家批评指正.

詹明生

2002 年 10 月

中译版前言

孔子说过,整肃世界从自家做起. 因为我们的世界由原子组成,在科学领域,该语意指:要认识整个世界,我们必须先理解原子. 因此,原子物理学是基础科学,这不仅因为物质是由原子组成的,而且控制原子性质的 Coulomb 力是长程的, Coulomb 力足以影响到宏观尺度.

我们常听人说,原子的问题已彻底清楚了. 如果说这种说法正确的话,也仅只对氢原子适用. 对于含有多个电子的原子,我们还要用到很多近似,因而不能说完全解决了,许多工作还有待开展. 在本书中,我试图引起大家注意我们对原子物理理解的局限性,同时我也尽量给大家展示新的内容.

当然,最有趣的原子不是孤立的原子而是相互作用的原子,正像原子物理不是孤立的学科而是整个科学的关键部分一样. 事实上,模型化的原子是对物理世界深入理解的第一步. 我在本书中各处使用了许多事例和引用了很多相关文献以试图说明这一点.

最后,我认为轨道塌缩现象是研究多电子原子的中心问题. 在有关这个问题的几篇评述文章中我与早期的作者一样将该问题的主要贡献归于 Göppert-Mayer. 他当然是开拓者之一,但当我写本书第五章时,我注意到了吴大猷早期的工作. 在此,我特对吴在轨道塌缩方面的开拓性的重要贡献表示敬意,并对其工作价值给予突出的提及. 特别有意义的是,吴的方法与 Fermi 和 Göppert-Mayer 的方法不同,他用的是半解析的方法且导出了整个 Rydberg 系列的在许多年之后才重新发现的性质. 他的原始发现应该作为中国原子物理学家早期成功事例之一而载入史册.

我很高兴在《高激发原子》一书的中文版初版的前言中作以上

补遗. 我要对詹明生及其在武汉的同事们表示衷心的感谢, 是他们翻译而产生了本书的中文版. 同时我也要感谢其他在中国的同学和朋友们, 他们通过自己的研究为本书的内容作出了大量贡献. 在本译文版中我也特地增加了第 10.26 节, 以记载通过帝国理工学院(伦敦)与中国科学院武汉物理与数学研究所(武汉)之间开展合作研究的最新进展.

J.-P. 康纳德

2000 年 4 月 江渝 16 号轮船上 于奉节

PREFACE TO THE CHINESE EDITION

Before seeking order in the world, says a wise Confucian proverb, one should first seek it in one's own house. Since most of the world around us is made up of atoms, the scientific equivalent of this proverb is that nothing can be understood until we know how atoms behave. Atomic physics is therefore the fundamental science, not only because matter is made of atoms, but also because Coulomb forces, which govern their properties, are of long range, acting even on the scale of our macroscopic world.

Sometimes, you will hear people say that everything about the atom is well understood. If this statement has any truth, it applies only to hydrogen. For atoms with several electrons, so many approximations are needed that we certainly cannot speak about a complete solution. Thus, much remains to be done. In this book, I have tried to draw attention to some fundamental limitations in our present understanding of atomic physics, as well as presenting a fairly up-to-date account of the subject.

Of course, the most interesting atom is not the isolated atom but the interacting atom, just as atomic physics is not an isolated subject but a key part of the great picture of science—modeling atoms is, in fact, the first step towards a better understanding of the physical world. I have tried to emphasize this everywhere in the book by introducing many examples of related subjects and references to them.

Finally, I believe that the phenomenon of orbital collapse is

central to the study of many-electron atoms. In several review papers about this subject, I followed earlier authors in attributing much of this development to Göppert-Mayer, who was indeed one of the pioneers. However, while composing Chapter 5 of this book, I became aware of the early work of T. Y. Wu whose pioneering and important contribution to the understanding of orbital collapse is here acknowledged and given the prominence it deserves. It is particularly interesting that Wu's approach was a different one from that of Fermi and Göppert-Mayer. He used a semi-analytic method, and deduced properties of the full Rydberg manifold which were re-discovered many years later. His original discovery should be counted among the early successes of Chinese atomic physicists.

It gives me particular pleasure to point this out in the Preface to the first edition in Chinese of "Highly Excited Atoms". I also wish to express my heartfelt gratitude and appreciation to Zhan Mingsheng and his collaborators from Wuhan, who have created this Chinese translation, and to other colleagues and friends in China, who have contributed a lot through their own research to the contents of this book. In this edition I specially added section 10.26 to update the cooperative fruit through a joint project between the Imperial College (London) and the Wuhan Institute of Physics and Mathematics (Wuhan), the Chinese Academy of Sciences.

J. -P. Connerade

Aboard Boat Jiangyu No. 16 at Fengjie

April 2000

序言——本书的动机

原子物理是一门成熟的学科,有着著名的历史. 已有许多著作论述到它的传统应用. 然而,原子物理又是一个飞速发展的研究领域,大学课程常用的多数传统教材不再能反映它的发展现状也就不足为奇了. 早期的原子物理教科书主要是以许多生动的事例演示量子力学原理在原子物理的应用. 由于求解径向 Schrödinger 方程的数值方法原则上虽然已知但一般不易获得,于是强调角动量代数和含电子自旋的形式理论,而将径向积分作为参数处理.

这些方法对任何原子物理工作者来说当然是必要的,但依著者之见,角动量理论不再是本学科导入的最佳方式. 用已有的超快计算机和许多优秀的软件,求解径向方程现在也已不困难. 因此研究观念的一个重要转变是不再把注意力集中在中心场方程的角部分. 的确,有理由说明,反向思维是正确的. 球谐函数的性质仅只需确定一次,然后就可用于模拟所有中心场原子问题. 另一方面,径向方程必须对每一个系统甚至每一个激发态分别求解. 因此径向函数的行为是决定性的. 尽管 Racah 代数方法还是不可缺少的工具,但其本身已不再是原子物理的核心问题. 事实上,近期在多电子原子物理中最重要的发现都与径向方程的敏感性和电子-电子相关的研究有着有机的联系.

用以相辅本科基础量子力学课程的传统原子物理课程,主要讨论氢、氦及元素周期表中前三行的原子,且随着原子数的增加涉及的细节更少. 人们也认为原子在角动量量子化的引入、自旋存在的演示、中心场模型的建立方面起了载体作用. 但这些认识不再足以为本学科提供现时的基础. 事实上,当年青的物理学者从

事与激发态或有相互作用的原子相关的研究时,他们将会遇到完全不同的原子物理的新素材,如果以传统的方式来讲授原子物理,可能会使他们认识不到这些新内容是大学课程的直接延伸。

更为糟糕的是,如果要为大学生开出一个较完整的课程表,原子物理的标准教科书则几乎无能为力。如由固态物理学者授课,他需要过渡元素和稀土元素的数据,而这些数据在原子物理课程中常被忽视。以原子轨道塌缩为例,许多教材(确实也有许多教师)长期以来都用过时的半经典屏蔽模型来解释,而不使用 Fermi 及 Göppert-Mayer 所创立的现代理论解释,这就令人感到奇怪了。实际上 Fermi 早就指出半经典屏蔽模型是不合理的。正确的解释要易懂得多,与事实相符合,并且为如何利用量子阱的基本原理提供了一个非常好的例证。确实,双阱模型和周期表的完全解释应该体现在大学生的教材之中。

类似地,量子亏损理论在原子物理的现代描述中起着非常重要的作用,也应该作为起码的内容写进教材中,其现代发展为散射理论的许多基本原理提供了一个极好的例证。Lu-Fano 图的原理易于掌握,且极有助于对多体问题的一个重要方面(即通道间的耦合)的理解。双激发与内壳层激发同样在教科书中很少涉及,连续态的结构也没有得到重视,等等。

事实上,从大学课程中,学生们常常得到这样的印象,认为原子是极其简单的体系,能够精确求解和彻底理解。在物理课程中原子似乎仅仅是作为教学示例而已。与这种错误的观点同鼻孔出气的还有另外一种不仅只在学生中颇为流行的观念,认为重原子含有很多粒子,其物理复杂,难以理解,仅只有氢原子和氦原子才是真正能求解的。

本书试图扭转以上所述的印象。首先,写本书的根本目的不是讲述基本量子力学的原理,也不涉及其发展,在本书中,量子力学仅作为一个工具。本书假定读者已具有入门大学课程的基础,熟悉氢原子的 Schrödinger 方程的求解,并由此可求解多电子原子

的平均场和中心场近似问题. 主要集中于使多电子原子有趣并有别于其他物理系统方面的特性. 另一方面本书感兴趣的是高激发原子, 即处于 Rydberg 态或第一电离阈值以上能态的原子, 这些场合多体效应尤为突出.

近年来原子物理经历了与整个物理学相同的变革. 单就两个粒子之间的力的本性已不再是中心问题. 关于力的统一的问题的研究, 已经探索的能量区域越来越高, 最终超出了实验室加速器的最高能量. 很明显, 在可达到的能量范围内, 未解决的问题还是多体问题, 确实所有的能量范围亦是如此.

如果按从小的体系到大的体系这样的顺序来看的话, 不说量子电动力学, 即使在基础量子力学的层次, 到仅三个粒子的少体问题就不可解了. 许多最近的进展, 包括混沌和量子混沌的研究, 都说明了, 即使像氢原子这样的简单体系, 问题也很严重.

随之产生的是关于经典动力学混沌的量子体系的对应原理适用性问题. 另外, Pauli 原理(不具有经典对应)有时还使量子少体问题比经典的更容易一些.

对多电子原子, 两个粒子的 Coulomb 作用是很好理解的, 没有关于力的复杂性的问题. 因此可完全集中于少体问题. 二十年前, 许多物理学家因为 Coulomb 作用的简单性对原子失去兴趣, 而现在正是这一点重新确立了原子物理的中心地位.

在我们的定义中, “高激发”原子是其中电子激发到接近或高于电离势的能量的原子. 因此, 高激发原子的性质包括高 Rydberg 态、电离连续区及更高能量连续区域内的激发或结构. 对氢原子, 因为仅只有一个电子, “高激发”原子的概念不是特别重要. 而对于多电子原子, 则有不同的激发通道: 或者是多个电子被激发、或者激发的不是价电子.

探索多电子原子的多体特性要用足够的能量. 在光学能区, 仅价电子能被激发, 因此仅只有刚好存在扰动时束缚 Rydberg 系的谱才能提供多体效应的信息. 正因如此, 当进入“高激发”谱范

围时,对 Rydberg 谱中不规则谱的研究非常重要. 用单光子跃迁来激发原子的最好光源是真空紫外或软 X 射线.

一个多电子原子是能够研究 N 体问题的最简单的量子体系,其中 N 是电子数目. 在多电子原子中,静电势是核与电子、电子与电子间的主要相互作用,该作用的规律物理学家皆知,理解不复杂;而体系的多体特性则可能产生复杂性. 特别重要的是区分 N 电子原子与氢原子(或更一般的单电子模型,如单组态 Hartree-Fock 原子)的那些微妙现象.

Hartree-Fock 方法利用一系列的近似将 N 电子原子问题变成一套自洽求解的耦合单电子问题. 虽然该方法简单且获得了成功,但并不明了,当从量子过渡到经典力学时可看出这一点. 三体问题中可能出现混沌,这意味着三体问题的求解与两体问题可能本质不同. 量子力学中不出现混沌,但也不尽如此. 最近在高磁场中 Rydberg 原子的实验证明在真实的量子体系中存在着“规则-混沌”跃迁的痕迹. 孤立的多电子原子是否存在类似的混沌行为,以及有无混沌出现的区域等问题尚无定论. 问题都与单粒子模型的观点有关. 因此寻找与该模型背离之处(电子-电子相关)的实验特别重要. 我们甚至会问:在高激发原子中电子相关能触发“规则-混沌”过渡吗?

对“量子混沌学家”来说,高激发原子是一个研究光谱统计性质和动力学效应的多用探针. 长程 Coulomb 力使能达到很高的量子数,以至可接近半经典极限. 与磁场中单摆的经典非线性问题类似,强磁场中的原子为量子化体系中的规则到混沌的过渡提供了一个非常漂亮的示例.

高激发原子的测量可研究各种多体效应,这些在其他物理学分支(如核物理、固态物理)中可能或没有对应. 在探索多体相互作用中原子物理学家用到了许多新的辐射源,主要是电子加速器(同步辐射)与可调谐染料激光器. 通常是实验走在新发现的前头,而有用的或新的理论方法则发展或借用于其他领域. 多电子

原子成为了这些新计算方法的测试平台. 甚至曾经出现过新的理论问题, 如相对论性与相关性之间的相互关系问题曾是许多研究的主题, 由于负能态的可能影响, 该问题在多电子 Dirac 方程的自洽场计算中的作用有待研究.

实验室中短脉冲、高功率激光器的发展改变了原子物理的传统面貌. 人们不再坚持电磁场始终作为小的微扰: 辐射场与物质的相互作用重新成为了一个热门的话题, 强场问题的另一个侧面, 也含有量子混沌. 强交流外场与“缀饰原子”、短脉冲激发动力学相关. 几个前所未有的现象已被实验发现, 而完整的理论有待形成.

最后, 原子物理中的另一个重要的论题是原子环境对电子性质的影响, 就像分子或固态一样. 在原子物理、分子物理和凝聚态物理的交叉前沿中新的领域已经形成. 随着巨共振首次在固体的 X 射线谱中被发现及在原子物理中的研究, 该领域发展迅速. 此后共振光发射已成为固态物理中的一个著名的方法, 已经证明固体中的价起伏和中间价效应与具有原子性质的局域轨道有关.

已经发现了一个适于研究该前沿领域的理想体系: 原子团簇. 原子团簇的性质从自由原子极限变化到与所含原子数目有关的固体. 当团簇小的时候是量子尺度, 当大小增加时可达宏观尺度. 因而可用来研究量子到宏观性质的演变, 研究固态性质的最早出现, 如固体中的等离子体振荡.

团簇也演示了基本物理原理的普遍性和一般性: 金属团簇的稳定性由与核物理密切相关的壳层的闭合性所支配. 团簇和原子核中的合作效应、巨偶极共振在 14 个数量级的尺寸范围内都服从相同的定律.

总之, 原子物理大有待研究之处. 不仅从基础科学研究的角度看原子物理仍是活跃的学科, 在与其他学科的联系和在应用方面也大有作为. 因此, 原子不是孤立的和单纯的原子, 而是与自身与环境相互作用着的, 其性质变化多样.

本书试图填补目前教科书的一些空白,同时避免与传统的内容重复.读者对象为年青研究人员,或不是纯原子物理领域而对上述方面有兴趣的研究者.为强调重要的基本原理,本书尽量避免繁复.采用了目前研究论文中的大量新结果为示例.

同时,也希望读者熟悉原子物理方面的大学课程的一般内容,如量子力学原理、氢原子、角动量初步、自旋-轨道相互作用、Pauli原理、平均场、中心场模型、填充原理、光谱符号和偶极选择定则.

本书不是一本教科书,而是一本特殊方面的专著.不过还是希望它能填补文献中的空白,一方面是对现代原子物理课程的补充,另一方面对实际需要在其研究中用到原子物理的研究人员是一个初步的参考.

J.-P. 康纳德

1997年4月 于伦敦

目 录

译者的话

中译版前言

序言——本书的动机

第一章 闭壳层、球对称性、稳定性与“幻数”.....	1
1.1 “幻数”	1
1.2 双轴定理	2
1.3 化学价	4
1.4 电离势	5
1.5 闭壳层中的集体运动	7
1.6 同系序列	8
1.7 Hartree-Fock 方程	9
1.8 SCF 程序	12
1.9 SCF 计算的输出	13
1.10 解的惟一性	14
1.11 相对论性的中心场	15
1.12 计算机程序	17
1.13 Heisenberg 的“洞”概念	18
1.14 离子的周期表	19
1.15 闭壳层和负离子	21
1.16 闭壳层:概述.....	22
第二章 Rydberg 态	23
2.1 H 与类氢系统的 Rydberg 系列.....	23
2.2 系限与束缚能.....	24
2.3 单位制.....	26

2.4	多电子系统的 Rydberg 态	27
2.5	角动量守恒和 l 简并	28
2.6	系限的进一步探讨:光激发与内壳层激发	29
2.7	以 n^* 进行标度	31
2.8	能级间隔的相对论扩展	31
2.9	碱原子模型	32
2.10	波函数随 n 和 l 的变化	35
2.11	赝单电子谱	37
2.12	扩展的碱原子模型	40
2.13	电离势的确定	41
2.14	Rydberg 态的大小	43
2.15	Rydberg 原子的介观“筛”	45
2.16	零动能光电子谱(ZEKE)的“幻 Rydberg 态”	46
2.17	碰撞:Fermi 模型	47
2.18	吸附截面:Wigner 阈值定律	48
2.19	电子吸附的测量	49
2.20	碰撞与高 Rydberg 态	51
2.21	Rydberg 原子气体	52
2.22	极短脉冲激发 Rydberg 态	53
2.23	Rydberg 原子在非常短脉冲下的电离	56
2.24	负离子	57
2.25	分子中的 Langevin 相互作用	59
2.26	负离子分子	60
2.27	准分子和外场效应	60
2.28	非常高 Rydberg 态和外场	61
2.29	分子谱中的 Rydberg 态	62
2.30	Rydberg 化	63
2.31	氢分子	64
2.32	三原子分子的 Rydberg 态	65

2.33	多原子分子	73
2.34	固体中的杂质和激子	75
2.35	结论: Rydberg 特征和意义	79
第三章	束缚态的量子亏损理论	81
3.1	引言	81
3.2	量子亏损的分析方法	82
3.3	单通道 QDT	83
3.4	与从头计算理论的比较: 重现	85
3.5	向 MQDT 的过渡	87
3.6	两通道的考虑: Lu-Fano 图	88
3.7	Lu-Fano 图的性质	91
3.8	连续态	93
3.9	扩展到更多通道和更多系限	94
3.10	经验 QDT 的局限	95
3.11	多原子分子的 Lu-Fano 图	96
3.12	结论	99
第四章	原子的 f 值	100
4.1	离散跃迁谱线强度	100
4.2	选择定则	101
4.3	Einstein 速率系数	104
4.4	振子强度	105
4.4.1	受迫振子的经典色散理论	105
4.4.2	窄线型近似	107
4.4.3	全频范围的吸收	108
4.4.4	推广到简单量子理论	108
4.5	Thomas-Reiche-Kuhn 求和规则	110
4.5.1	描述谱线强度的不同方法	112
4.6	Rydberg 系的 f 值变化过程	113
4.6.1	连续谱强度	115