



中国科学院研究生教学丛书



高等原子分子物理学

徐克尊 著

科学出版社

056

519

X74

中国科学院研究生教学丛书

高等原子分子物理学

徐克尊 著

科学出版社

2000

内 容 简 介

本书为《中国科学院研究生教学丛书》之一。

本书是在大学“原子物理”和“量子力学”基础上为原子分子物理有关专业的研究生开设的“高等原子分子物理学”课程的教材。主要内容包括原子物理学的主要研究内容、原子的激发态结构、分子的能级结构、谱线宽度和线形、激光和同步辐射光谱学、电子能谱学和电子动量谱学、其它一些重要研究手段等。

本书适合于大学物理系原子分子物理专业和化学系物理化学专业研究生用做教材,亦可供相关专业研究生和教学科研人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

高等原子分子物理学/徐克尊著. -北京:科学出版社,2000.9
(中国科学院研究生教学丛书)

ISBN 7-03-008455-1

I. 高… II. 徐… III. 原子物理学:分子物理学 IV. O56

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2000)第 06564 号

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码:100717

源海印刷厂 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2000 年 9 月第 一 版 开本:850×1168 1/32

2000 年 9 月第一次印刷 印张:15

印数:1—2 000 字数:391 000

定价:25.00 元

(如有印装质量问题,我社负责调换〈杨中〉)

前 言

本书是根据作者在中国科学技术大学给“原子与分子物理”学科研究生讲“高等原子分子物理”课的讲稿,经不断修改和补充而成的,该课程要求大学“原子物理”和“量子力学”作为基础。拙著《近代物理学》是为大学本科生的原子物理课程而写的,本书是在《近代物理学》一书基础上为研究生课程“高等原子分子物理”而写,两者有密切的联系。

本书以实验事实为基础,着重阐述物理概念和规律,力求说理清楚、重点突出、条理分明。既注意介绍原子分子物理学的基础知识,又着重介绍近二十年主要的原子分子物理实验研究前沿、进展。全书共 7 章,主要内容包括原子分子物理学的主要研究内容、原子的激发态结构、分子的能级结构、谱线宽度和线形、激光和同步辐射光谱学、电子能谱学和电子动量谱学,以及其它一些重要研究手段等。

第一章着重介绍当前原子分子物理实验研究的主要前沿领域,当然在其它各章也会涉及一些前沿研究内容。第五至七章则是介绍当前原子分子物理实验研究的主要手段,它们是激光和同步辐射光谱方法、电子碰撞方法以及其它一些方法。第四章介绍谱学实验中常常会遇到的各种谱的线形以及造成谱线宽度增加的原因。大学原子物理课中原子结构主要讲基态结构,本书第二章主要介绍原子的激发态结构。大学原子物理课中分子结构介绍得很少,本书第三章详细介绍分子的能级结构,包括多原子分子的能级结构。

原子分子物理学作为一门学科自 20 世纪初开始发展,到 30 年代形成高潮,之后由于原子核物理和粒子物理的发展而进入低谷,许多人认为它已经是一门老的成熟的学科了,虽然它还属于近

代物理范畴。但是,自 20 世纪 60 年代以后,由于许多新的实验手段的出现,如激光光谱、同步辐射和电子碰撞等,使原子分子物理的研究进入许多新的领域;许多学科,如化学、生物学、天文学和材料科学等,已经进入原子分子层次;许多部门,如国防、X 激光、聚变、医学、地质、能源等,已经越来越多地利用原子分子物理的数据、方法和技术。它们共同作用的结果,使原子分子物理的研究自 20 世纪 70 年代以后又进入一个新的高潮。

作者要感谢李家明先生对本书的写作和形成的一贯鼓励和支持。北京大学高崇寿先生对本书进行了全面审阅,并建议作者将书名由《原子分子物理学》改为《高等原子分子物理学》,实验室的许多老师和学生在进行科研过程中,与作者进行过讨论,对本书的部分内容也作出了贡献,苑震生和张安宁同志为本书绘制了全部插图,作者一并表示衷心的感谢。

由于书中相当多的材料涉及近期研究工作,由于作者本人学识的限制,书中肯定会有许多错误和不妥之处,敬请读者指正。

徐克尊

2000 年 3 月 1 日

第一章 原子物理学的主要研究内容

§ 1.1 原子物理发展概况

一、早期发展

原子论最早是由古希腊哲学家为了论证唯物主义主张作为哲学而提出来的。但在当时,人们对自然界只是很肤浅的了解,还没有形成自然科学,把思想和认识上的东西统称为哲学。因此这一主张只不过是一个大胆的想法,一个哲学学派的有争议的思想而已,并没有任何实验根据可说。但是世界上的事总是合久必分,分久必合,螺旋式上升。当时的合是低水平的合,是对自然规律不了解下的合。到17世纪以后,随着自然科学的发展,终于脱离哲学的束缚而分离出来成为独立科学——自然哲学,随后又分开为各门学科,特别是化学的发展,才使原子分子论(简称原子论)建立在实验和理论的基础上。这里值得提到的是1774年拉瓦锡(A.L.Lavoisier)的元素学说,1803年道尔顿(J.Dalton)的原子学说,以及阿伏伽德罗(A.Avogadro)常量假设。原子论指明:不同元素代表不同原子,原子在空间上按一定方式或结构结合成分子,分子进一步集聚成物体。分子的结构直接决定物体性能。

注意这时的原子分子论基本上属于化学范畴。近代化学的框架仍然基本是在原子分子论基础上。当时有个不成文的分工,物理学研究物体的运动规律和相互作用,分力、热、电、光学。现在的原子物理当时没有,所以叫近代物理。化学研究物体组成和结构,以及分子的性质和反应。

然而,就原始的概念来说,物理是探索宇宙万物之理,物理学研究自然界和物质的属性、特征、原因、运动现象、作用及其规律。根据这个定义,现代的原子分子物理研究原子的内部组成和结构

(特别是能级结构)、原子如何构成分子、分子的能级结构、以及动力学问题。尽管光谱数据的积累从 19 世纪末已开始,但原子分子物理作为一门科学却是从 20 世纪开始的。首先玻尔在 1913 年分析了过去的氢原子光谱数据,提出了原子的电子处于不同的能级状态的量子论。立即弗兰克-赫兹利用电子束与原子气体碰撞实验证实了原子的电子能级结构。很快揭示了波粒二象性并发展了量子力学,从而开始了原子物理发展的黄金时期。这一时期理论上主要是发展量子力学,实验上主要利用光谱学方法研究原子的能级结构,利用电子碰撞研究动力学问题。随着光谱仪分辨率的提高,发现了能级精细结构和超精细结构现象。这时化学也在物理上这些重大成就基础上向前发展,用量子力学可以解释化学反应和计算化学反应率。物理与化学在新的基础上发生交融,促进了交叉学科量子化学和化学物理学的发展。卢瑟福和居里夫人、尤里得的是诺贝尔化学奖,但我们认为当然是原子物理工作。事物发展分久必合,但是是在更高层次上的合。

自从 1932 年发现中子,特别是 1936 年发现裂变现象之后,人们的注意力发生很大的变化,许多原子物理学家转移到原子核物理的研究上来,这是由于当时处于二次世界大战前夕,主要是军事上的动力,即研制裂变武器和聚变武器,当然也有和平利用原子能和射线造福于人类的动力,以及核物理学科本身的探索发展动力。40 年代后期以后,建造了许多加速器,使核物理和粒子物理得到蓬勃发展,爆炸了原子弹和氢弹,原子能发电和放射性核素得到广泛应用,发现了各种各样的当时叫做基本粒子的微小粒子。

二、原子物理发展新高潮

1970 年肖洛(A.L.Schawlow)等研制成功窄带调频染料激光器,并用来发展了激光光谱学方法之后,由于高分辨和高单色亮度的特点,它已经成为研究原子分子价壳层激发态结构,特别是跃迁概率很小的能级的主要手段。与此同时,由赛格巴恩

(K.M.Siegbahn)发展的用高分辨电子能谱仪测量光电子和俄歇电子的能谱方法,也被用来研究原子的价、内壳层能级结构,发现了化学位移。80年代后,波长可调且短到真空紫外、软X射线和硬X射线能区的同步辐射也发展成为研究原子分子高激发态、内壳层和离子激发态和电离结构的主要手段。再加上X激光、受控核聚变和天体物理等大量需要高精度的原子、分子和离子结构和相互作用数据,这些使原子分子物理又重新被人们重视,并得到很快发展,促成了原子分子物理研究的新高潮。图1.1.1给出每十年原子物理、核物理和粒子物理所获得诺贝尔物理奖的人数直方图,可以很清楚地看出历史的发展。原子物理经历了从20世纪初到30年代的黄金发展高潮,现在第二个高潮又已来临。核物理的第一次高潮是从30年代到70年代,现在高潮已经过去。粒子物理的高潮从30年代开始到现在已经达到它的顶峰。我为什么这么说,80年代原子物理获奖三次9人中只有一人鲁斯卡是因为许多年前发明电子显微镜而伴随得奖,其他人都是最近的工作,这后面会详细介绍。而粒子物理获奖三次8人中只有二人是近期工作,1984年鲁比亚由于在1983年实验上发现中间玻色子而获奖,另一人范德梅尔是因为在1972年提出束冷却技术而得奖,这是由于当时虽然实现了 e^+e^- 、 pp 对撞,但由于 $\bar{p}$ 束很弱而未实现 $p\bar{p}$ 对撞,束冷却不是指平均温度下降,而是使 $\bar{p}$ 能量分散减小,从而能够获得高强度高能量分辨 $\bar{p}$ 束,因而才建成CERN的 $p\bar{p}$ 对撞机。另外两个奖6人都是二十多年前的工作:1988年莱德曼、施瓦茨和斯坦伯格在1962年的中微子束工作,发现 μ 子型中微子,而验证轻子的二重态结构;1990年弗里德曼、肯德尔和泰勒在1967年做的高能电子被质子的深度非弹性散射实验,发现部分子,证明质子内部有结构,这个实验类似卢瑟福的 α 散射实验发现原子存在类点核一样,大角散射截面增大很多,也说明核子内有类点组分即部分子。今后由于高能加速器的建造费用非常庞大,如美国的SSC因超过100亿美元而下马,如果没有新原理和新路子可走,无疑将妨碍粒子物理向前发展。当然各个学科的

发展总是有时出现高潮，有时出现低潮，这是符合事物发展的辩证规律的。

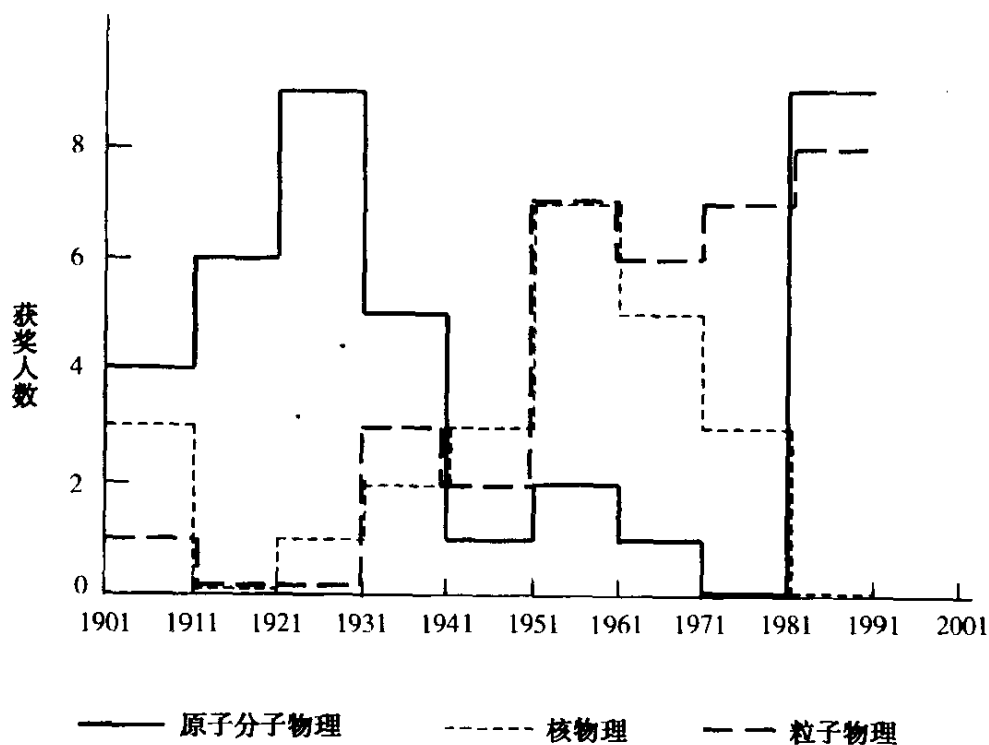


图 1.1.1 每十年的诺贝尔奖获得者人数

探究原子物理的这一新发展的原因，以下几点是值得重视的。

(1) 原子分子是微观世界的第一、二层次，宏观凝聚态物质的性质决定于原子分子的组成和结构。此外，原子、分子及离子、电子普遍存在于天体、星际空间、地球大气、等离子体、生物体和化学反应中，因此，许多学科的发展与原子分子物理密切相关，同时一些学科的相互交会又是在原子分子这一层次上。这些学科包括等离子体物理、表面科学、天体物理、空间物理、凝聚态物理、材料科学、大气物理、化学、环境科学、生物学、医学等。彭桓武先生说过：“原子分子物理是发展交叉学科最有利最重要的学科。原子分子物理的重点应是对激发态的研究，激发态－激发态作用将会引起化学或生物方面概念性变化，生物过程应是非平衡态和激

发态的过程。”清楚地阐明了原子分子物理的基础性和重要作用。过去在化学和生物学中,化学反应根本不考虑激发态作用,李远哲得诺贝尔化学奖就是在化学反应动力学中的贡献,现在化学反应中态-态作用已成为研究的热点、国家攀登计划的一个项目。

(2) 当前世界和平与发展是主流,大多数国家都在致力于发展本国的国民经济,世界经济已从农业经济时代、工业经济时代正在进入知识经济时代,在这里面,科学技术对社会生产力的提高和对社会的发展起着越来越重要的第一生产力的作用,同时经济发展和生产力提高以后又反过来对科学技术提出更高的要求。彭桓武先生说过“新领域的开垦,虽然有时也可以从旧领域中提出要求,但主要是由于人们认识能力的工具的新发展所决定。”“所谓认识能力的工具是指仪器设备、计算机加实验方法、计算方法之类。”当前不管是老的生产技术部门,如冶金、化工、采矿、地质,还是新兴的高科技产业,如半导体、集成电路、计算机、光纤通信、激光技术、航天技术等都需要各种认识能力的工具以及各式各样特性的材料和各种原子分子数据。它们中有一些的发展无论是理论上还是实验手段上还需要立足于原子分子物理。例如,原子物理发展起来的许多仪器如电子能谱仪、俄歇谱仪、各种光谱仪、X 荧光分析仪、X 射线衍射技术、磁共振谱仪、电子显微镜和扫描探针显微镜等,以及各种实验技术和计算方法已在各方面得到很大应用。

(3) 军事上尖端武器的研制也对原子分子数据提出大量要求。过去发展核武器曾经对原子核物理提出大量数据要求,今天 X 激光武器、反导弹武器的研制需要的是大量的各种各样的原子分子数据,如截面、能级结构、寿命等。例如中国科学院上海光学精密机械研究所神光大功率激光器上实现的 X 激光用的就是类氪锗,科学家只有对这种离子的各种数据了解清楚才可能获得如此成功,而国际上这些数据均是保密而不发表。

总结(1)、(2)和(3),由于认识能力的工具正走向精致,达到原子水平。原子分子将不仅是靠想象的或被统计计算的东西,而

是能抓得住、移得动、可受操纵控制的东西。今天原子物理及相关的认识能力的工具不仅对各门学科,而且对核聚变、能源、材料、激光及光加工等生产技术部门以及对国防、国家安全系统等提供理论、实验方法和数据,正在起着越来越大的作用。

(4) 由于核物理和粒子物理几十年的发展,拥有许多这方面人才,发展了许多新的实验方法和技术,如各种粒子探测器、能谱仪、同步辐射、快电子学、多道幅度和时间测量技术、计算机技术等。这些人才和技术转移到原子分子物理后,使能谱和时间测量的分辨率和精度提高了几个数量级,使原子分子物理得到很大发展,可以做过去不可能做的许多工作。

顺便说一下,原子分子物理研究对于培养和训练人才来说是最全面而有效的。这是由于目前粒子物理所用设备庞大,包括探测器、加速器、数据在线获取系统、离线分析等方面需要很多人,各人分工较细,很难得到全面训练;固体物理、光学、磁学等常常是制作各种样品,拿到实验室测量,对于现代化的测量仪器和技术往往没有机会得到训练;而原子物理研究所用设备不算太大,一两个人就可开展,但技术较全面,涉及真空技术、数据获取和处理技术、各种谱仪和探测技术、各种电子技术、计算机技术等。此外,原子分子物理本身又是较为基础的并和许多学科有较多联系的学科,因此原子分子物理研究生很容易适应其它专业工作。

§ 1.2 激发态结构

原子分子结构和动力学是原子分子物理学的基本问题。研究内容主要包括原子分子结构(包括周围环境的影响)和各种粒子、辐射(包括电子、原子、离子、光子、微波)与原子分子相互作用两个方面。研究的理论手段主要是量子力学,实验手段主要是光谱实验(包括波谱)和碰撞实验,当然还有一些其它重要的方面和方法。下面几节将分别详细介绍原子物理在这一新的发展时期的主要前沿研究工作,本节介绍激发态结构。

一、一般情况

我们已经对原子的电子能级、分子的电子、振动和转动能级作了长期研究工作,并积累了大量数据,特别是对基态及低激发态能级结构有了一个基本了解。实际上原子能级除内电子形成的内壳层能级,价电子形成的占据的价能级和未占据的低激发能级外,还包含各种高激发能级结构:价电子或内电子激发而形成的里德伯束缚态、近电离阈伴线结构、双电子激发态、自电离态和电离连续结构等。

分子是一个多核的量子力学体系,玻恩-奥本海默近似认为电子是在核的框架所形成的势场内运动,分子结构与核的几何构型紧密相关,激发态的构型又不同于基态。除由组成分子的各个原子的内满壳层电子围绕自身所在原子的中心库仑场运动形成的芯能级,价电子受到分子各原子共同形成的非中心力作用下产生的占据的和未占据的低激发价能级以外,还有类似上述原子的高激发能级结构和超激发态,以及分子特有的转动、振动能级和电离、解离通道,能谱结构非常丰富。由于大多数分子谱带相互重叠,又存在电子态能级的相互扰动及预解离等,对分子谱线的标识和研究比较困难。

因此,用早期传统的光谱学方法很难对原子分子的高激发态进行系统研究。这是因为经典光源的单色性差、能谱密度低,且频率固定不可调,采用光激发的方法很难将原子分子激发至所需要研究的激发态;其次,高激发态的寿命通常很长,且随主量子数 n 的增大而迅速增大,自发辐射荧光十分微弱,一般不能用荧光探测方法来研究;最重要的是,由于高激发态的量子能级非常密集,受到光谱本身各种增宽机制和光谱分光元件的限制,传统光谱方法难以满足分辨高激发态的要求。

近 20 年,由于能谱测量方法和技术的发展(如激光光谱、X 光谱、同步辐射光谱、电子能谱、离子能谱等),使测量的分辨率大为改善,以及多通道量子亏损理论、量子化学从头计算方法和大

容量高速计算机技术的不断改善和发展,目前对一些小分子的光谱,包括一些较高激发态的光谱已积累了丰富的数据,标识了大量转动分辨的光谱线。但对大分子和大量高激发态的了解还处于开始状态。在理论上,原子高激发态和电离连续态已可统一用多通道量子亏损理论解释,价键理论可以较好地解释分子的几何结构和化学反应性能,分子轨道理论可以定量计算分子光谱和激发态能级结构,分子势能面概念是研究分子反应动力学行为的基础,正在被更多地研究。目前对基态分子几何构型的计算已相当精确,对激发态小分子,用组态作用、多体微扰及电子相关能,亦得到相当好结果。使对激发态结构的研究更加深入,对能级结构的理解在定量方面和细致程度上不断提高。

当前主要是用新发展的各种高分辨能谱技术将原子分子这些丰富的激发态能级和动力学特性更多地测量出来,建立、完善和发展处理束缚态和连续态特别是高激发态的量子力学理论,研究热点已由低分辨率转入高分辨率,由低激发态进入高激发态;由外层电子激发进入内层电子激发;由简单原子分子进入复杂原子分子;由中性原子进入离化态原子和分子。原子内壳层能级在大学已讲过,原子分子基态与低激发态也讲了部分,下两章专门讲这两个问题,这里着重介绍里德伯态、自电离态和近阈结构。

二、里德伯态

里德伯态是原子或分子中电子(通常是一个)跃迁到主量子数 n 较高的轨道上所形成的高激发电子态,这时,这个处于外层的电子离原子实(原子核加其它电子)很远,可以近似地看作一个电子在一个电荷为 $+e$ 的库仑场中运动,不存在贯穿轨道,即为类氢原子,只是中心体的质量可能大于质子质量。例如,氦原子的基态电子组态为 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$, 因此,氦的里德伯态是某一壳层中一个电子激发上去形成的,可以看作是 $3p$ 轨道缺少一个电子,更高的 ns, np 等轨道上有一个电子形成的,这里 $n > 3$ 。

对于原子情况,较为简单,低激发态基本研究清楚,里德伯

原子通常指原子中最外层一个电子处在主量子数 n 较大的高激发态, 氢原子已观测到 n 高到 630 的里德伯态。

里德伯原子具有一系列的独特性质。它的尺度很大, 因此碰撞截面也大, 其轨道半径为

$$r_n = \frac{n^2 a_0}{Z} \quad (1.2.1)$$

其中, a_0 是玻尔半径; Z 为原子实具有的电荷数, 通常为 +1。

里德伯原子的能级能量为

$$E_n = -\frac{Z^2 \alpha^2 m c^2}{2(n - \Delta_{nl})^2} = -\frac{Z^2 \cdot 13.6 \text{eV}}{(n - \Delta_{nl})^2} \quad (1.2.2)$$

其中, Δ_{nl} 为量子数亏损。

里德伯态的电离能 $I_p = -E_{nl}$, 当 n 大时很小, 相邻能级间隔也很小, 是一个弱束缚系统, 结构简单, 容易受外界电、磁场影响, 这将在后面介绍。

里德伯态的寿命很长, 近似与 n^3 成正比。

分子的情况比较复杂。里德伯态是价电子被激发到远离分子中心的轨道上, 并围绕整个分子中心运动, 可以近似看作在一个电荷为 $+e$ 的库仑场中运动, 这又属于原子型的里德伯轨道, 具有的能量可以用上述里德伯原子能量公式描述。例如, N_2 分子的基态电子组态为 $\text{KK}(\sigma_g 2s)^2(\sigma_u 2s)^2(\pi_u 2p)^4(\sigma_g 2p)^2$, 共 14 个电子。因此, N_2 的里德伯态是处于这些价轨道如 $\pi_u 2p$ 或 $\sigma_g 2p$ 价轨道上的一个电子跃迁上去形成的, 能级能量用公式(1.2.2)计算, $Z=1$ 。电子排列不再考虑内层电子和价电子的区分, 而是按原子轨道排列, 电子组态为 $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3pnl$, 这里 $n > 2$ 就行。对于这样的一个里德伯电子态, 实际上还分裂为一系列的振动态和转动态, 相互间有交叉。那些跃迁到 $\pi_g 2p, \sigma_u 2p$ 低激发分子轨道的仍是分子态, 偏离里德伯态很多, 可能与低激发的里德伯态有交叉。

由式(1.2.2)可知,里德伯态主要用量子数亏损 Δ_n 描述。由于量子数亏损与主量子数 n 关系不大,主要决定于角量子数 l , Δ_n 也可写为 Δ_l 。 Δ_l 通过测量激发能由式(1.2.2)得到。例如,以 C 原子为中心的分子(烷、烯等)的 Δ_s 、 Δ_p 、 Δ_d 和 Δ_f 分别大约为 1.0、0.6、0.1 和 0.0,不同的分子有些差别,而 C 原子的相应值分别为 1.2、0.7、0.2 和 0.0,比较接近。以 S 原子为中心的分子的相应值分别为 2.0、1.6、0.08 和 0.06,而 S 原子的相应值分别为 2.0、1.6、0.2 和 0.0,也比较接近。

早期研究里德伯原子即把原子激发到高激发态多利用气体放电或紫外光子吸收方法,可调谐激光和同步辐射的应用使里德伯原子的研究工作得到新发展。例如使用两束或多束激光分步激发或电离是非常有效的方法,称为共振电离光谱学。用这一方法使原子激发、退激发、再激发则可得到高 l 里德伯原子($s \rightarrow p \rightarrow d \rightarrow f$)。

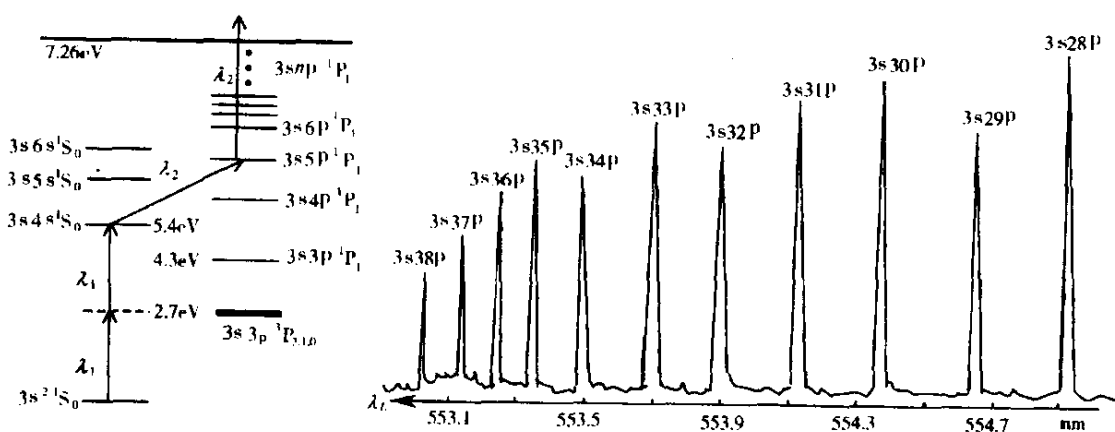


图 1.2.1 镁原子的高里德伯态激光光谱和相关能级

下面举一个用两束激光分步多光子共振电离方法测量 Mg 的 $3snp^1 P_l$ 里德伯态光谱的具体例子看如何研究里德伯态。Mg 的能级如图 1.2.1 左边,基态为 $3s^2 1S_0$,如要测 $3snp$ 里德伯态能级能量,用直接单光子激发,需真空紫外区,除了同步辐射外是难于达到的,如采用二台可调激光器,一台双光子激发到 $3s4s^1 S_0$ 态,另一台双光子激发到 $3snp$ 态和电离,则易于探测。实验装

置如图 1.2.2, YAG 产生 1.06μ 激光经谐波发生器二倍频和三倍频产生 532nm 和 355nm 输出, 分别泵浦两台染料激光器, 引入热管炉中与 Mg 蒸气原子作用。染料激光器 I 的输出被调到 $\lambda = 459.74\text{nm}$ (2.7eV), 产生 $3s^2^1S_0 \rightarrow 3s4s^1S_0$ 双光子共振激发; 染料激光器 II 的输出在 $\lambda = 553.0 \sim 555.0\text{nm}$ 之间扫描, 通过炉内钨杆测量电离离子信号可得 $3sn p^1 P_1$ 里德伯态。图 1.2.1 右边给出测量结果。

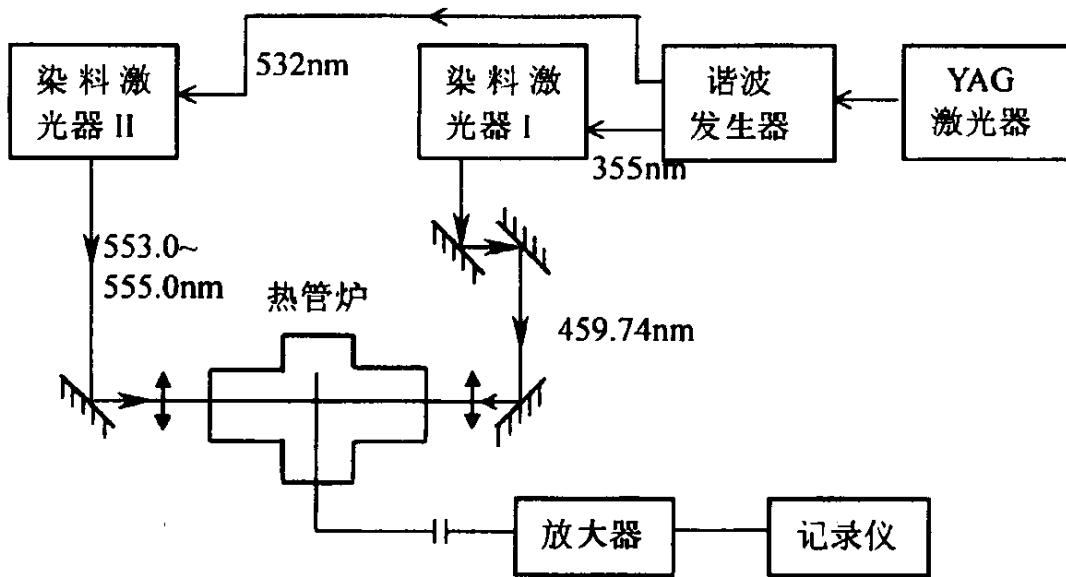


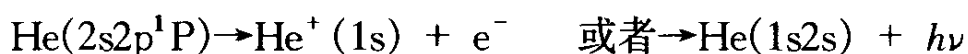
图 1.2.2 两束激光分步多光子共振电离方法测量镁原子的高里德伯态

三、自电离态和双电子激发态

随着对高激发里德伯态的研究取得很大进展, 又逐步扩大到自电离态的研究上。自电离态的激发能超过电离能, 因而不是一个稳态, 它可以通过放出一个正能量电子到达离子的低激发态或基态, 或者放出一个光子到原子低激发态, 或者分子解离成两个离子。这种新颖的原子态与天体物理、受控核聚变研究工作有关, 它可能为实现新型真空紫外激光和激光分离同位素提供一种有效途径。对电子关联效应和三体量子力学体系研究也具有重要意义。

最常见的一种自电离态是原子的一个内壳层电子特别是内价电子被激发到外层轨道形成里德伯态, 另一类自电离态是双电子

激发形成的里德伯态。我们知道,在通常的原子分子物理中处理的是单电子激发态,实际上也存在双电子激发甚至三电子激发态。不过这种过程的激发截面相当小,量子态数更多,能级和光谱也更复杂,现在也开始研究。由于大多数这种内壳层激发和双电子激发里德伯态位于第一电离势以上,因而也会发生自电离现象。例如,He 原子形成能量 60.1eV 的 $2s2p^1P$ 双电子激发态,它可以通过两种方式衰变



两者是竞争的。这个能级寿命很短,宽度为 0.17eV,主要以前者自电离方式衰变,因而是一个自电离态。图 1.2.3 给出用快电子能量损失谱仪测量的 He 原子的能量损失谱图,可以明显地看见由 $1s^2^1S_0 \rightarrow 1snp^1P_1$ 组成的分立激发能谱,以及由 $2snp^1P_1$ 组成的电离连续区双电子激发谱,它的前两个 $n=2$ 和 3 的自电离峰位置为 60.1eV 和 63.5eV,超过 He 的电离能 24.58eV 很多。

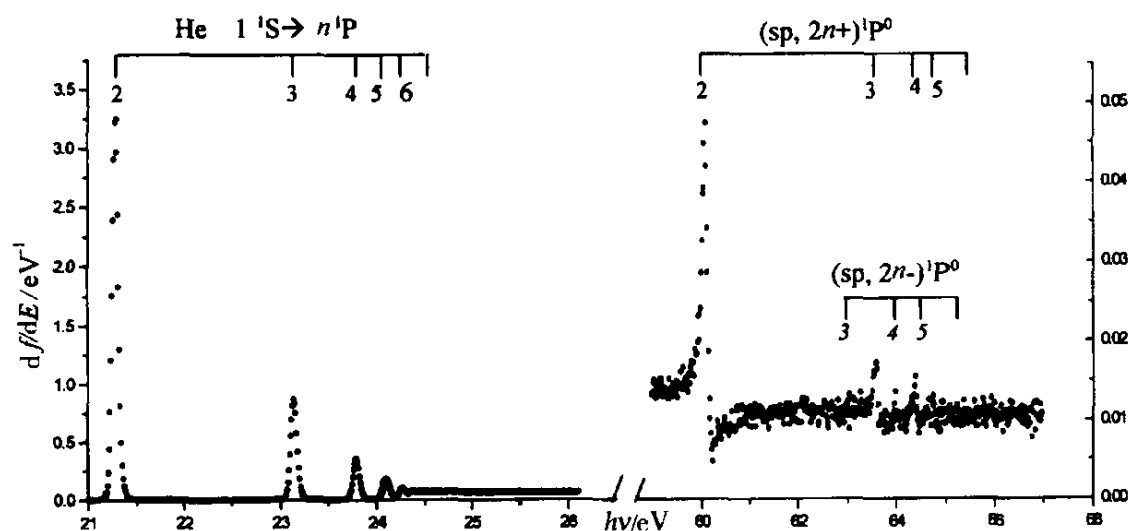


图 1.2.3 氦原子的电子能量损失谱

在自电离能区,原子或分子吸收激发能 E_j 后,有两条途径导致电离,一是直接电离,为连续谱中相应这个能区的部分,另一是经自电离态间接电离,为叠加在连续谱之上的峰,两者干涉形成不对