



《中国工程物理研究院科技丛书》第 047 号

原子结构、碰撞 与光谱理论

方泉玉 颜 君 著

国防工业出版社

0562
F228

《中国科学院科技丛书》第 047 号

原子结构、碰撞与光谱理论

The Theory of Atomic Structure,
Collisions and Spectra

方泉玉 颜 君 著

国防工业出版社

· 北京 ·

图书在版编目(CIP)数据

原子结构、碰撞与光谱理论 / 方泉玉, 颜君著. —北京: 国防工业出版社, 2006. 1

(中国工程物理研究院科技丛书)

ISBN 7-118-03788-5

I. 原... II. ①方... ②颜... III. ①原子结构②碰撞(物理)③光谱学 IV. ①O562.1 ②O4 ③O433

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2005)第 006647 号

国防工业出版社出版发行

(北京市海淀区紫竹院南路 23 号)

(邮政编码 100044)

国防工业出版社印刷厂印刷

新华书店经售

*

开本 850 × 1168 1/32 印张 16.25 412 千字

2006 年 1 月第 1 版 2006 年 1 月北京第 1 次印刷

印数: 1—2500 册 定价: 49.00 元

(本书如有印装错误, 我社负责调换)

国防书店: (010) 68428422

发行邮购: (010) 68414474

发行传真: (010) 68411535

发行业务: (010) 68472764

致 读 者

本书由国防科技图书出版基金资助出版。

国防科技图书出版工作是国防科技事业的一个重要方面。优秀的国防科技图书既是国防科技成果的一部分,又是国防科技水平的重要标志。为了促进国防科技和武器装备建设事业的发展,加强社会主义物质文明和精神文明建设,培养优秀科技人才,确保国防科技优秀图书的出版,原国防科工委于1988年初决定每年拨出专款,设立国防科技图书出版基金,成立评审委员会,扶持、审定出版国防科技优秀图书。

国防科技图书出版基金资助的对象是:

1. 在国防科学技术领域中,学术水平高,内容有创见,在学科上居领先地位的基础科学理论图书;在工程技术理论方面有突破的应用科学专著。

2. 学术思想新颖,内容具体、实用,对国防科技和武器装备发展具有较大推动作用的专著;密切结合国防现代化和武器装备现代化需要的高新技术内容的专著。

3. 有重要发展前景和有重大开拓使用价值,密切结合国防现代化和武器装备现代化需要的新工艺、新材料内容的专著。

4. 填补目前我国科技领域空白并具有军事应用前景的薄弱学科和边缘学科的科技图书。

国防科技图书出版基金评审委员会在总装备部的领导下开展工作,负责掌握出版基金的使用方向,评审受理的图书选题,决定资助的图书选题和资助金额,以及决定中断或取消资助等。经评审给予资助的图书,由总装备部国防工业出版社列选出版。

国防科技事业已经取得了举世瞩目的成就。国防科技图书承

IV

担着记载和弘扬这些成就,积累和传播科技知识的使命。在改革开放的新形势下,原国防科工委率先设立出版基金,扶持出版科技图书,这是一项具有深远意义的创举。此举势必促使国防科技图书的出版随着国防科技事业的发展更加兴旺。

设立出版基金是一件新生事物,是对出版工作的一项改革。因而,评审工作需要不断地摸索、认真地总结和及时地改进,这样,才能使有限的基金发挥出巨大的效能。评审工作更需要国防科技和武器装备建设战线广大科技工作者、专家、教授,以及社会各界朋友的热情支持。

让我们携起手来,为祖国昌盛、科技腾飞、出版繁荣而共同奋斗!

国防科技图书出版基金
评审委员会

国防科技图书出版基金

第四届评审委员会组成人员

名誉主任委员 陈达植

顾问 黄 宁

主任委员 刘成海

副主任委员 王 峰 张涵信 张又栋

秘书长 张又栋

副秘书长 彭华良 蔡 镭

委员 于景元 王小谟 甘茂治 冯允成

(按姓名笔画排序) 刘世参 杨星豪 李德毅 吴有生

何新贵 佟玉民 宋家树 张立同

张鸿元 陈火旺 侯正明 常显奇

崔尔杰 韩祖南 舒长胜

《中国工程物理研究院科技丛书》

出版说明

中国工程物理研究院建院 40 多年来,坚持理论研究、科学实验和工程设计密切结合的科研方向,完成了国家下达的各项国防科研任务。通过完成任务,在许多专业学科领域里,不论在基础理论方面,还是在实验测试技术和工程应用技术方面,都有重要发展和创新,积累了丰富的知识经验,造就了一大批优秀科技人才。

为了扩大科技交流与合作,促进我院事业的继承与发展,系统地总结我院 40 多年来各个专业领域里集体积累起来的经验,吸收国内外最新科技成果,形成一套系列科技丛书,无疑是一件十分有意义的事情。

这套丛书将部分地反映中国工程物理研究院科技工作的成果,内容涉及本院过去开设过 20 几个主要学科。现在和今后开设的新学科,也将编著出书,续入本丛书中。

这套丛书将在今后几年里陆续编辑出版。我院早些年零散编著出版的专业书籍,经编委会审定后,也纳入本丛书系列。

谨以这套丛书献给 40 多年来为我国国防现代化而献身的人们!

《中国工程物理研究院科技丛书》

编审委员会

1999 年 6 月 4 日修改

《中国工程物理研究院科技丛书》 第五届编审委员会名单

顾 问 俞大光

编委会主任 杜祥琬

副 主 任 彭先觉 孙 颖 李志民

委 员 (以姓氏笔画为序)

华欣生 江 松 刘柯钊 孙承纬 陈银亮

何建国 李 凡 李泽仁 苏 毅 汪小琳

吴志杰 张方晓 张富堂 张 健 罗顺火

孟凡宝 郑志坚 周德惠 竺家亨 顾 援

唐永建 黄 辉 彭述明

科技丛书编辑部

负 责 人 李天惠

本册编辑 李天惠

《中国工程物理研究院科技丛书》

已 出 版 书 目

- | | | | | |
|-----|---------------|-----------|---------|-------------|
| 001 | 高能炸药及相关物性能 | 董海山 周芬芬主编 | 科学出版社 | 1989 年 11 月 |
| 002 | 光学高速摄影测试技术 | 谭显祥编著 | 科学出版社 | 1990 年 02 月 |
| 003 | 凝聚炸药起爆动力学 | 章冠人等编著 | 国防工业出版社 | 1991 年 09 月 |
| 004 | 线性代数方程组的迭代解法 | 胡家贛编著 | 科学出版社 | 1991 年 12 月 |
| 005 | 映象与混沌 | 陈式刚编著 | 国防工业出版社 | 1992 年 06 月 |
| 006 | 再入遥测技术(上册) | 谢铭勋编著 | 国防工业出版社 | 1992 年 06 月 |
| 007 | 再入遥测技术(下册) | 谢铭勋编著 | 国防工业出版社 | 1992 年 12 月 |
| 008 | 高温辐射物理与量子辐射理论 | 李世昌编著 | 国防工业出版社 | 1992 年 10 月 |
| 009 | 粘性消去法和差分格式粘性 | 郭柏灵著 | 科学出版社 | 1993 年 03 月 |
| 010 | 无损检测技术及其应用 | 张俊哲等著 | 科学出版社 | 1993 年 05 月 |
| 011 | 半导体材料辐射效应 | 曹建中著 | 科学出版社 | 1993 年 05 月 |

- 012 炸药热分析
楚士晋编著 科学出版社 1994 年 12 月
- 013 脉冲辐射场诊断技术
刘庆兆主编 科学出版社 1994 年 12 月
- 014 放射性核素活度的测量方法和技术
古当长编著 科学出版社 1994 年 12 月
- 015 二维非定常流和激波
王继海编著 科学出版社 1994 年 12 月
- 016 抛物型方程差分方法引论
李德元 陈光南著 科学出版社 1995 年 12 月
- 017 特种结构分析
刘新民 韦日演主编 国防工业出版社 1995 年 12 月
- 018 理论爆轰物理
孙锦山 朱建士著 国防工业出版社 1995 年 12 月
- 019 可靠性维修性可用性评估手册
潘吉安编著 国防工业出版社 1995 年 12 月
- 020 脉冲辐射场测量数据处理与误差分析
陈元金编著 国防工业出版社 1997 年 01 月
- 021 近代成像技术与图像处理
吴世法著 国防工业出版社 1997 年 03 月
- 022 一维流体力学差分方法
水鸿寿著 国防工业出版社 1998 年 02 月
- 023 抗辐射电子学 辐射效应及加固原理
赖祖武等著 国防工业出版社 1998 年 07 月
- 024 金属的环境氢脆及其试验技术
周德惠 谭云编著 国防工业出版社 1998 年 12 月
- 025 试验核物理测量中的粒子分辨
段绍节编著 国防工业出版社 1999 年 06 月
- 026 实验物态方程导引(第二版)
经福谦著 科学出版社 1999 年 09 月

- 027 无穷维动力系统
郭柏灵著 国防工业出版社 2000 年 01 月
- 028 真空吸取器设计及应用技术
单景德编著 国防工业出版社 2000 年 01 月
- 029 再入飞行器天线
金显盛编著 国防工业出版社 2000 年 03 月
- 030 应用爆轰物理
孙承纬著 国防工业出版社 2000 年 12 月
- 031 混沌的控制、同步与利用
陈式刚等著 国防工业出版社 2000 年 12 月
- 032 激光干涉测速技术
胡绍楼著 国防工业出版社 2000 年 12 月
- 033 空气炮理论与实验技术
王金贵著 国防工业出版社 2000 年 12 月
- 034 一维不定常流与激波
李维新著 国防工业出版社 2000 年 12 月
- 035 X 射线与真空紫外辐射源及其计量技术
孙景文编著 国防工业出版社 2001 年 03 月
- 036 含能材料热谱集
董海山等编著 国防工业出版社 2001 年 03 月
- 037 材料中的氦及氦渗透
王佩璇 宋家树著 国防工业出版社 2002 年 04 月
- 038 高温等离子体 X 射线谱学
孙景文编著 国防工业出版社 2003 年 01 月
- 039 激光核聚变靶物理基础
张钧 常铁强著 国防工业出版社 2004 年 11 月
- 040 系统可靠性工程
国防工业出版社 2004 年 06 月
- 041 核材料 γ 特征谱的探测和分析技术
田东风 伍钧编著 国防工业出版社 2004 年 06 月

- 042 高能激光工程
苏毅 万敏编著 国防工业出版社 2004 年 06 月
- 043 近可积无穷维动力系统
郭柏灵 高平 陈瀚林著
国防工业出版社 2004 年 06 月
- 044 半导体器件和集成电路的辐射效应
陈盘训著 国防工业出版社 2005 年 06 月
- 045 高功率脉冲技术
刘锡三编著 国防工业出版社 2005 年 08 月
- 046 热电池
陆瑞生 刘效疆编著 国防工业出版社 2005 年 08 月
- 047 原子结构、碰撞与光谱理论
方泉玉 颜君著 国防工业出版社 2005 年 10 月

序

原子结构、碰撞与光谱理论是高科技领域的一个重要研究方向,它所提供的原子结构与动力学过程的各种基础参数有广泛的实际应用。

原子物理虽然是一门古老的学科,但在 20 世纪六七十年代之前,由于计算机运算速度和存储空间的限制,只能用简化的方法计算某些原子参数。其后,随着计算机的快速进步以及高科技发展需求的牵动,例如,X 光激光、惯性约束聚变的激光—X 光转换,以及高温等离子体诊断等领域都需要大量精确的原子参数,使得原子物理又成为很热门的研究领域,也成为高科技领域的重要组成部分。

本书系统地阐述了原子结构理论和电子-原子碰撞理论;以统一方式给出了原子(包括各种离化度离子)的哈密顿矩阵、辐射跃迁矩阵、碰撞跃迁矩阵,以及各种跃迁速率的表达式;并介绍了如何将它们应用到原子反应动力学方程(或称速率方程),以此得到等离子体原子数密度分布,并进行光谱分析;本书还介绍了多通道量子亏损理论,这些都是有重要实际应用价值的理论方法。本书可供原子物理专业研究生,从事原子物理以及相关领域研究的科技工作者参考。

本书作者长期从事该领域的研究和研究生教学工作,有深厚的基础和丰富的工作实践经验。书中除包含了作者与其同事们多年的研究成果和工作经验外,还包括了近半个世纪以来国际上广泛采用的某些理论和方法。相信本书的出版将使从事原子物理和相关领域研究的科技工作者、教师、研究生受益。

杜祥琬

前 言

原子结构与光谱的研究已经有很长的历史,并在 19 世纪中叶得到迅速发展。但是在第二次世界大战期间,由于人力、物力的转移,研究呈现低谷。第二次世界大战后基础物理研究又得到了重视,到 20 世纪中后期,随着计算机飞速发展以及高新技术需求的强力推动,原子物理研究又有了蓬勃发展,取得了前所未有的进步。例如,建立了电子-原子碰撞理论,发展了许多计算方法(平面波方法、扭曲波方法、强耦合方法)和相应的计算程序,成为原子物理的一个重要分支。又例如,建立与发展了多通道量子亏损理论,该理论可以统一地处理原子束缚态、连续态和自电离态。原子物理研究在等离子体非平衡物理现象和等离子体诊断等研究领域中有重要的实际应用。现代原子物理已经成为高科技领域的重要组成部分。

本书共分 15 章,前 9 章(包含第 10 章部分内容)吸收了 R. D. Cowan 专著“*The Theory of Atomic structure and spectra*”的精华,阐述了原子结构理论及线强度等基本概念,其后 5 章介绍了电子-原子碰撞理论和计算方法,详细描述了在等离子体中光子、电子与原子相互作用的各种物理过程,以及包括诸多物理过程的反应动力学的速率方程。作为速率方程的重要应用,介绍了如何进行光谱分析。以上部分由方泉玉研究员执笔。第 15 章介绍了多通道量子亏损理论,由颜君博士撰写。本书汇集了国际上近几十年来建立和发展的一些理论和方法,也包含了作者和同事们近 20 年的部分研究成果。本书可供原子物理、等离子体物理等相关专业的科技工作者、教师和研究生参考。

最后,作者借此机会感谢中国科学院院士于敏教授和中国科

学院院士李家明教授在该项理论研究工作中给予的指导和帮助。感谢中国工程物理研究院和作者所在的研究所在本书编写过程中给予的支持和赞助。感谢中国工程院院士杜祥琬教授在百忙中为本书作序。感谢邱玉波教授、董晨钟教授对本书的审阅。作者还要感谢《强激光与粒子束》杂志编辑部和国防工业出版社的同志的支持和辛勤工作。

作 者

目 录

绪论	1
第1章 基本概念	7
参考文献	20
第2章 波函数的角动量性质	21
2.1 引言	21
2.2 角动量算符及其本征值	22
2.3 轨道角动量与球谐函数	26
2.4 电子自旋	30
2.5 两个角动量的耦合	31
2.5.1 矢量耦合模型	31
2.5.2 CG 系数与 $3j$ 符号	36
2.5.3 两个球谐函数的乘积	40
2.6 LS 耦合	41
2.7 宇称和角动量的选择规则	43
参考文献	46
第3章 单电子原子	47
3.1 薛定谔方程与有心力场中径向方程的解析解	47
3.2 径向方程的数值解	53
3.3 量子数的物理意义与电子的几率分布	57
3.4 相对论修正	62
第4章 复杂原子	67
4.1 相对论修正的薛定谔方程及其矩阵求解方法	67
4.2 有心力场近似和原子壳层结构	70
4.3 反对称波函数的耦合	78

4.3.1	简单乘积函数的反对称	78
4.3.2	简单乘积函数的耦合	80
4.3.3	反对称波函数的耦合	88
4.4	组态平均能量	93
4.4.1	组态平均能量的定义	93
4.4.2	对称算符的对角矩阵元	94
4.4.3	组态平均能量的表达式	99
4.5	耦合反对称基函数	105
4.5.1	等效电子的 LS 允许项	106
4.5.2	部分根源系数	108
4.5.3	任意组态的完全反对称的耦合基函数	115
4.5.4	简化对称算符矩阵元	119
4.6	定性的能级结构	124
4.6.1	LS 耦合条件下性能级结构	124
4.6.2	JJ 耦合条件下性能级结构	127
4.6.3	其他耦合方式	130
4.7	原子能级的统计权重	131
4.7.1	单电子原子能级的统计权重	131
4.7.2	复杂原子能级的统计权重	132
4.8	能级结构的定量计算	135
	参考文献	137
第 5 章	径向波方程	138
5.1	变分原理与 Hartree-Fock (HF) 方程	138
5.2	局域势近似方法	144
5.2.1	Thomas-Fermi (TF) 和 Thomas-Fermi-Dirac (TFD) 方法	145
5.2.2	参数势方法	149
5.2.3	Hartree (H) 方法	149
5.2.4	Hartree-Fock-Slater (HFS) 方法	150
5.2.5	Hartree 加统计交换 (HX) 方法	152