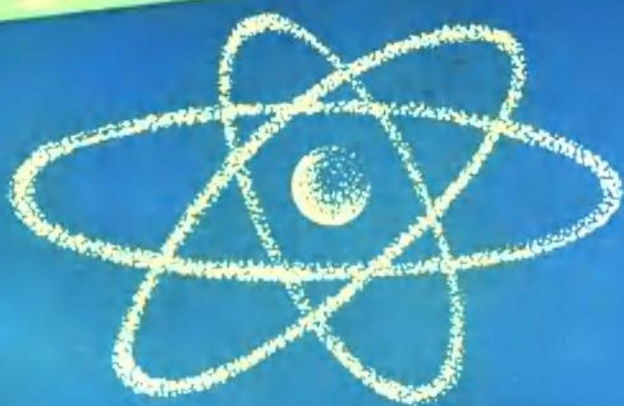


近代科学技术中的 原子分子辐射理论

王福恒 王嵩薇 编著



成都科技大学出版社

近代科学技术中的
原子分子辐射理论

王福恒 王嵩薇 编著

成都科技大学出版社

1991年

内 容 提 要

本书包括原子分子辐射吸收理论在近代科学技术领域中的作用；气体辐射的基本概念；光谱线增宽机制；原子及其离子辐射跃迁理论基础；束缚—束缚跃迁理论；束缚—自由跃迁理论；自由—自由跃迁理论；双原子分子及多原子分子辐射吸收理论；辐射传输等内容。

本书可供原子分子物理、天体物理、激光物理、等离子体物理、材料科学、光谱技术、大气传输、红外物理、核爆炸和核聚变技术、遥感技术、目标和环境光学特性研究等方面的教师、研究生、高年级大学生及工程技术人员参考。

近代科学技术中的 原子分子辐射理论

王福恒 王嵩薇 编著

成都科技大学出版社出版发行

四川省新华书店经销

成都科技大学印刷厂印刷

开本：787×1092毫米 1/32 印张：13.25 插页：4

1990年11月第1版 1991年4月第1次印刷

字数：287千字 印数：1—1200

ISBN7—5616—0674—5/O·54

定价：6.50元

序 言

王福恒教授为我校原子分子物理专业的研究生讲授“原子分子辐射理论”专题课多年，并编写了《原子分子辐射理论》讲义。这本讲义内容丰富，阐述系统，并纳入了作者的科研经验和见解，对培养研究生将微观理论用于实际问题起了很好的作用。现在将讲义修改成专著《近代科学技术中的原子分子辐射理论》，内容更加系统完善，由成都科技大学出版社出版。

在近代科学技术中，如天体物理、激光技术、航天技术和高温核聚变研究等方面的若干重大科学和工程问题都牵涉到原子分子理论的基础问题，需要由原子分子理论提供有关的计算方法和数据。钱学森同志早在1984年给我的一封信中谈到，原子分子物理今后的主要方向应从理论转向应用，发展应用原子与分子物理，成为工程师设计产品的工具，也就是要建立“原子与分子工程”，希望有一部分原子与分子物理学家转为原子与分子工程师。我感到钱学森同志的建议很重要，具有很深刻的创见。王福恒同志这本专著的突出特点是注重理论与实际的结合，论述了原子与分子辐射理论在几个重要科技领域中的应用，为发展应用原子与分子物理作出了贡献。这本专著的出版，为相关专业的研究生和科学工作者提供了一本很有实用价值的参考书籍，对培养应用原子分子物理的专门人才，将起很大的作用。

芑清泉

1990年9月22日于成都科技大学

绪 言

原子和分子辐射吸收是一个古老的研究课题。最先是人们根据原子和分子辐射跃迁现象来研究天体问题。近30多年来,由于现代科学技术的发展,要求对高温气体性质进行系统的研究,因为高温气体辐射性质的研究对核爆炸、核聚变、航天技术、激光技术以及天体物理等科学的研究有着重要意义。由于气体处于由几千度到几万度以上的高温状态,在有些情况下通过实验测定某些性能是很困难的,需要庞大的实验设备和很长的实验时间,且费用昂贵,在有些条件下甚至不可能开展实验因此很需要理论计算来配合。当今理论计算工作已成为研究高温气体性能的一个不可缺少的重要组成部分,高温气体是由原子分子及其离子组成的,因此研究高温气体实质上就是研究原子分子问题。

为了解决现代工程技术所提出的问题,早在60年代初期,钱学森等同志在“力学中的几个物理学问题”的学术报告中就呼吁物理学界,要以原子分子理论为基础开展高温气体热力学性质、输运性质、辐射性质、高压气体以及高压固体性质的计算研究。当时芑清泉教授和科学院力学所崔季平等同志受有关方面的委托,承担了这方面的研究和组织工作,芑清泉等教授他以当时的东北物理所和吉林大学等单位为骨干,组织国内一批力量开展了一些有实际意义的理论计算工作,虽经十年动乱的干扰,仍为后继的工作奠定了基础。目前国内有些单位正在开展原子分子辐射理论应用方面

的工作，例如，航空航天部二院二〇七所在开展目标与环境光辐射特性研究中，为了解决工程问题，已成功地把原子分子辐射理论用于高速飞行体尾喷焰红外辐射量的计算中去，填补了国内的空白。近年来，钱学森同志又提出原子分子物理今后的主要方向，应从理论转向实际应用的倡导，并提出“原子与分子工程”的概念。根据高技术发展的需要，原子与分子物理在新型激光器的研究上，受控热核聚变研究上，新材料的设计等方面将作出重要贡献。

本文以应用为出发点，较系统和详尽地论述了原子分子的辐射跃迁理论，书中既有我们自己的工作，又吸取了国内外名著中的某些精华。

本书原是为成都科技大学原子与分子物理专业研究生写的《原子和分子辐射理论》教材，从1983年开始试用过多次，现在整理出版，但由于笔者水平有限，书中不妥之处可能不少，请读者给予指正。

王福恒

1989年12月于北京

目 录

绪言

第一章 原子分子辐射吸收理论在近代科学技术领域中的作用..... (1)

§ 1.1 天体物理学中的原子分子量子跃迁过程..... (1)

§ 1.2 大气中的量子跃迁及其辐射..... (6)

§ 1.3 激光和激光应用中的原子分子问题..... (11)

§ 1.4 核爆炸和高温聚变中的原子分子过程..... (14)

§ 1.5 航天科学和工程中的原子分子辐射..... (16)

第二章 气体辐射的一些基本概念..... (21)

§ 2.1 高温气体中的原子和分子的量子跃迁过程..... (21)

§ 2.2 辐射场 局部热力学平衡 平衡辐射和黑体辐射..... (22)

§ 2.3 气体辐射吸收系数 发射系数和发射率..... (30)

§ 2.4 Einstein 系数 积分吸收系数和振子强度..... (33)

第三章 光谱线增宽机制..... (42)

§ 3.1 光谱线的自然增宽..... (42)

§ 3.2 光谱线的碰撞增宽..... (51)

§ 3.3 Doppler 增宽..... (55)

§ 3.4 碰撞增宽和Doppler 增宽的叠加..... (57)

§ 3.5 斯塔克 (Stark) 增宽..... (59)

§ 3.6 谱线增宽效应对 Einstein 系数和辐射
吸收系数的影响..... (61)

第四章 原子及其离子的辐射跃迁理论基础... (63)

§ 4.1 以 Einstein 系数表示的吸收系数和发
射系数..... (66)

§ 4.2 原子与辐射相互作用的量子力学描述
..... (80)

§ 4.3 连续态波函数..... (90)

§ 4.4 连续态数值波函数的几种归一化方法
..... (95)

第五章 束缚—束缚跃迁理论..... (95)

§ 5.1 基本理论..... (95)

§ 5.2 跃迁矩的几种表示方法..... (106)

§ 5.3 跃迁矩阵元角度部分积分的计算方法
(一) (108)

§ 5.4 光谱线的多重线强度理论..... (119)

§ 5.5 振子强度和振子强度定理..... (130)

第六章	束缚—自由跃迁理论	(134)
§ 6.1	微分光电吸收截面.....	(134)
§ 6.2	复合截面和光离化 (或光电) 截面·····	(140)
§ 6.3	多电子原子的光吸收截面.....	(144)
§ 6.4	多电子原子跃迁矩阵元角度部分积分 的计算方法 (二)	(147)
§ 6.5	光脱离吸收理论.....	(157)
§ 6.6	光离化截面的经典理论计算方法.....	(164)
第七章	自由—自由跃迁理论	(166)
§ 7.1	非长程力作用的自由—自由跃迁截面 的量子力学推导及其计算.....	(167)
§ 7.2	类氢近似自由—自由跃迁截面的计算	(177)
第八章	单通道量子亏损理论	(188)
§ 8.1	单通道量子亏损理论基础.....	(189)
§ 8.2	束缚—束缚跃迁计算的量子亏损方法	(194)
§ 8.3	束缚—自由跃迁计算的量子亏损方法	(197)
§ 8.4	自由—自由跃迁计算的量子亏损方法	(205)
第九章	高温空气中原子辐射吸收系数计算举 例 (一)	(210)
§ 9.1	氧、氮原子及其离子的光离化吸收系 数.....	(210)

§ 9.2	空气中正离子的自由—自由吸收系数	(226)
§ 9.3	总吸收系数	(227)
第十章	双原子分子的辐射吸收理论	(229)
§ 10.1	双原子分子光谱概念介绍	(229)
§ 10.2	波恩—欧帕海默(Born-opperheimer) 近似及分子跃迁矩	(242)
§ 10.3	双原子分子振动方程的求解	(250)
§ 10.4	三维刚性转子方程的求解及跃迁矩阵 元的计算	(262)
§ 10.5	双原子分子的积分吸收系数、发射系 数和振子强度	(273)
§ 10.6	光谱辐射吸收系数的近似理论计算方 法	(284)
§ 10.7	空气双原子分子平均辐射吸收系数的 计算	(304)
第十一章	多原子分子辐射吸收理论	(313)
§ 11.1	多原子分子振动跃迁的经典和量子力 学描述	(313)
§ 11.2	多原子分子转动跃迁的量子力学描述	(328)
§ 11.3	多原子分子的光谱积分线强度和积分 带强度	(337)
§ 11.4	多原子分子光谱吸收系数的计算方法	(352)

§ 11.5	谱带模型理论·····	(358)
第十二章	辐射传输 ·····	(370)
§ 12.1	辐射输运方程的建立和求解·····	(370)
§ 12.2	几种极限情况下辐射能源的输运问题 ·····	(380)
§ 12.3	一维多层介质辐射输运方程的求解·· ·····	(391)
§ 12.4	大气透过率及尾喷焰辐射量计算的基 本原理·····	(400)
	参考文献 ·····	(406)

第一章 原子分子辐射吸收理论

在近代科学技术领域中的

作用〔1〕—〔13〕

本章将概述原子分子辐射吸收理论在几个重要科技领域中的作用。由此来扩大我们的知识视野，从而了解到原子分子辐射吸收理论确实是某些学科的一块基石，是解决若干尖端科学和工程技术问题不可缺少的基础理论。

§1.1 天体物理学中的原子分子量子跃迁过程〔11〕〔12〕

由于观测技术突飞猛进，观测资料大量增加，特别是从飞机、气球、火箭及空间飞船上的观测，大大扩充了人类的视野，从而开辟了从 γ 射线直到射电辐射的全电磁波谱的天文学时代。

关于气体星云及其星际环境的知识，完全来自于对电子、原子和分子所发射和吸收的电磁辐射的探测。理论天体物理学家按着四个基本参量(即方向、频率、强度和偏振)将这些电磁数据加以分类，以使用温度、密度、化学组成和速度来描述气体的物理状态和化学状态。然而在处理和分析所观测数据的过程中，必须要用到原子分子的辐射吸收理论作指导，如果没有这个理论作为分析数据的基础，观测数据将

无法进行处理。

我们知道，关于太阳化学以及其他恒星化学组成的种种概念，全部是建筑在对不同原子、离子或分子谱线强度的解释之上；我们对日冕中温度分布的认识，就是以所观测到的几种高度电离了的原子（特别是铁原子）的跃迁强度为基础的；关于太阳表面不同部位磁场分布的图象完全建立在用太阳表面的磁场来解释原子谱线的分裂现象之上；所得到的关于太阳表面上空不同高度处的气体运动以及气体温度的知识，主要也是以光谱资料为依据，从谱线位置的少许位移，谱线轮廓以及它们的宽度，都会提供许多我们所需要的资料；从谱线的宽度和轮廓，还可以获得有关不同大气层中原子、离子或电子密度的概念。

下面通过两个比较具体一些的例子，即分析光谱线中所包含的信息和计算恒星的不透明度来说明原子分子辐射吸收理论的作用。

1. 光谱线中所包含的信息

自发衰变原子所发出的辐射的谱线强度（谱线轮廓，光谱分布）为

$$I(\omega) = |E(\omega)|^2 = I_0 \frac{\gamma}{2\pi} \frac{1}{(\omega - \omega_0)^2 + \gamma^2/4}, \quad (1-1)$$

式中， γ 是谱线的半宽度， ω 是圆频率， ω_0 为极大值处的圆频率。

在天文学研究中，谱线的固有宽度很少能直接测量到，但是实测宽度和固有宽度之间的偏差可以为我们提供大量的信息，因而各种谱线的增宽效应对我们将是很有用的。

造成原子谱线的增宽是由多种增宽机制所致，在第三章

中将专门讲述增宽机制问题，这里暂列举多谱勒致宽所造成的谱线频移的情况。这一效应是原子或分子随机运动的结果，而我们所观测到的便是这些原子和分子所发射出的辐射。如果运动速度不大，则辐射的频率位移大致与视向速度分量 v_r 成正比 $\Delta\omega = \omega_0 v_r / c$ ， $v_r \ll c$ 。引起多谱勒致宽的可以有两种运动：云内发射出原子的热速度，以及沿视线方向重叠在一起的各个云块所特有的湍流速度，有时候这两种效应是可以分离的。就以观测星际钠原子对恒星辐射的吸收情况来说，钠对可见光中黄光部分的吸收是很强烈的，在5890 Å 和5896 Å 处有一被称为钠D线的吸收谱线，若是我们在研究这些谱线时的分辨率高到可以检测出 10^{-6} 的谱线位移，那么我们就能够鉴别出速度小到 $\sim 3 \times 10^4$ 厘米·秒 $^{-1}$ 的运动。这时我们所观测到的将是一系列离散状的增宽吸收线，这些谱线是由吸收到视线方向的光线的各个云块所造成的，同时还能看到对应于每一块星际云的各条谱线都有一个确定的特征宽度。这种各别的谱线宽度可能完全是由热运动造成的，也可能部分起因于每块云内尺度更小的湍流运动，至于究竟是哪一种情况现在还不大清楚。

从谱线强度还可以确定辐射源内或者沿着辐射源视线方向上的各种原子、离子和分子密度，而不同谱线的强度之比，则可以用来确定气体的激发温度，其中要用到萨哈(saha)方程，即要把吸收线或发射线的强度同各类能级中原子或离子的密度联系起来。例如，要估计一下在一颗紫外发射星和地球之间沿着视线方向的天然星际氢的含量，那么就需要知道赖曼 α 吸收线的线型以及它的总强度，有了这方面的资料以后，就可以根据所观测到的吸收线宽度来确定氢

的含量。

2. 恒星的不透明度

恒量内部的物质是高度电离的，光子同物质之间的相互作用往往就决定了能量在恒星内部的传输率。

恒星内部核反应中所释放出来的 γ 光子差不多在瞬息之间就把能量转给了恒星物质，这种能量传递过程或者是通过中性原子，或部分电离原子的电离作用；或者是通过与电子的碰撞。辐射同物质之间的相互作用是很强烈的，以致从恒星中心最初释放出来的能量，通常要经过几万年之后才能最终逸出恒星表面，恒星对于辐射是高度不透明的，因而弄清楚造成这种不透明性的原因是很有意义的，有关恒星结构和演化的许多特征都同这个物理性质有关。

恒星内的辐射与其内的电子、离子和原子的相互作用共有四种形式，即由光子与自由电子造成的康普顿散射，由自由电子与离子形成的自由—自由跃迁，原子(或离子)的束缚—束缚跃迁以及原子(或离子)的束缚—自由跃迁。计算不透明度就需要计算这几种过程的跃迁截面。

用消光这个名词来表示光束因吸收和散射作用所减少的辐射量，于是可以定义辐射按垂直入射方向通过单位厚度物质层的消光 E 为：

$$E = \chi \rho, \quad (1-2)$$

式中，符号 χ 即为物质的不透明度， ρ 表示密度(g/cm^3)，光谱中某一特定频率 ν 处的辐射不透明度就为上述四种过程对不透明度的贡献相加，于是频率 ν 处的总不透明度 $\chi(\nu)$ 为：

$$\chi(\nu) = \chi_0 + (\chi_{ff}(\nu) + \chi_{bf}(\nu) + \chi_{bb}(\nu))(1 - e^{-h\nu/kT}), \quad (1-3)$$

式中, χ_o 、 χ_{ff} 、 χ_{bf} 和 χ_{bb} 分别为康普顿(compton)散射、自由-自由、自由-束缚和束缚-束缚跃迁所给出的不透明度。实际上需要的是辐射通过恒星时的平均自由程, 由于平均自由程与不透明度成反比, 实际上进行计算是就整个光谱范围对 $1/\chi(\nu)$ 求平均, 即平均不透明度为 $\bar{\chi}(\nu)$

$$\frac{1}{\bar{\chi}(\nu)} = \int_0^\infty \frac{1}{\chi(\nu)} \frac{dB_\nu(T)}{dT} d\nu / \int_0^\infty \frac{dB_\nu(T)}{dT} d\nu, \quad (14)$$

式中, $\bar{\chi}(\nu)$ 称之为Rosseland 平均不透明度, $B_\nu(T)$ 为 planck 黑体辐射亮度。

不透明度与其它物理参量又有下面的关系式:

$$\mu(\nu) = \chi(\nu)\rho = n\sigma, \quad (1-5)$$

式中, μ 为辐射吸收系数(厘米⁻¹), σ 为吸收截面(厘米²), n 为单位体积中的粒子数。可见, 计算不透明度即是计算辐射吸收系数或辐射吸收截面的问题。

有了不透明度 $\chi(\nu)$ 以后, 这可以用于计算光度。离恒星中心径向距离为 $r=r_0$ 处的总流量, 就是向外、向内两个方向的能流之差, 其值 $L(r, \nu)$ 定义为频率 ν 对距离 r 处的光度。定义总光度为

$$L(r) = \int_0^\infty L(r, \nu) d\nu, \quad (1-6)$$

式中, 内部任意径向距离 r 处的光度为

$$L(r, \nu) = -\frac{4\pi r^2}{3\rho\bar{\chi}(\nu)} C \frac{du_\nu(T)}{dr}, \quad (1-7)$$

式中, $u_r(T)$ 是辐射的能量密度。

通过上面的论述, 我们看到原子分子辐射理论确实与天体物理学有着密切的关系, 但由于本书目的所限, 这里不再举更多的例子来说明, 若读者希望更详细的了解这方面的知识, 请参见文献[11][12][24][29]。

§1.2 大气中的量子跃迁及其辐射

研究大气中的原子分子的量子跃迁及其辐射过程是一门较为古老的大气学学科的分支, 被称为大气辐射学。大气辐射学一直与其它技术科学的发展息息相关, 因此一直被人们所重视。随着科学技术的发展, 这门学科与更多的技术学科发生了密切的联系。

当前, 这门学科概括为以下三方面的内容:

1. 大气辐射传输理论和实验[9][30]

在研究大气传输问题中红外传输占其重要部分。地球大气的红外传输特性对红外技术和空间技术的研究极为重要。在研究地球的热平衡、目标的红外探测、导航、通讯与遥测地球资源等问题时都需要详细的大气传输资料, 其波长范围从近红外一直到远红外毫米波段, 分辨率从几个或几十个波数一直到单色的激光谱线宽度。

红外辐射通过大气传输过程是非常复杂的。对大气的辐射和吸收可以通过理论和实验进行研究。从理论上讲, 当分子的吸收谱线或吸收带的强度和位置已知时, 就可以计算红外辐射在指定的大气路程上的吸收衰减量。然而, 实际上由于好几个因素使这个计算问题变得复杂。这些因素是: 在新考虑的波长区间内, 吸收系数随波长(波数)而变; 温度和压