

# 固体量子化学理论

陈创天 陈孝琛

(中国科学院福建物质结构研究所)

自六十年代以来,在固体物理的理论研究中,出现了一个新的分支学科,目前人们习惯上称它为“固体量子化学”。不言而喻,它的基本含意是把理论化学中有关电子结构理论的概念、计算方法引入固体物理的各个研究领域中。虽然这一新的理论方法有很强的生命力,但就国内而言,从事固体物理的科学工作者还没有给予足够重视,因此作者希望通过对这一新的分支学科的点滴介绍,引起国内有关科学工作者的兴趣,以便共同推动它的发展。

为了更好地阐明固体量子化学理论的发展,有必要简单地回顾一下,科学工作者在探索固体中电子运动规律时所走过的道路。

## 一、固体电子结构理论的历史回顾

早期固体量子理论所研究的对象主要是简单的金属,因为对于金属,其原子的外层价电子基本上可以认为是自由电子,无需考虑原子实对外层价电子的作用,因此可用电子气模型,通过求解简单的薛定谔方程得到电子运动轨道,从而较好地阐明了金属的电导、热导等性质。

但是,当人们的研究对象从简单金属转向一般固体时,发现自由电子模型是完全不适用的,例如这种模型不能解释固态为什么分为导体、绝缘体、半导体(它们之间的电阻率相差达 $10^{32}$ 倍)。显然,解决这个问题的关键在于正确认识原子实对价电子的作用性质。

在本世纪廿年代,由于当时对固体的结构化学知识还很少,因此对固态(主要是简单的晶态)只认识到它是离子(或原子)在空间周期性

物理

排列的结果。基于这一点,科学工作者提出:电子在固态中不是自由的,而是在一个周期势场中运动,电子运动轨道应服从平移不变性。正是在这一假定的基础上,Bloch等<sup>[1]</sup>开始逐步发展了固体电子结构的能带理论,这是电子结构理论的第二个发展阶段。

能带理论的建立对于固体理论的发展起了巨大的推进作用,较好地求得了结构简单的固体的电子运动轨道,并解决了许多重大的科学技术问题,突出的例子就是半导体技术的发展。

但是随着科学技术的进一步发展,科学工作者认识到,能带理论有一定的局限性。这是由于:

(1) 能带理论的发展主要是建立在一种简单的结构模型基础上,这种结构模型的基本观点是:晶体是由一些圆球状的原子(离子)按一定次序堆积而成的;原子间以弹性力相联系。但是自六十年代以来,随着固态化学的发展,给固体物理提供了越来越多的新型材料,例如有机高分子材料,这些固态的结构一般比较复杂,它们的电子运动轨道是现有的能带理论所无法解决的。

(2) 材料科学的发展,要求固体物理研究特定物质的微观结构与宏观性能间的相互关系,这一课题也是现有的能带理论所无法处理的。

(3) 杂质对固态的性能有很大的影响,因此研究杂质的电子运动规律已是当前的一个重要课题,但是杂质在固态中的位置一般是无序的,同时杂质的电子运动轨道往往带有很强的局域性。因此不能用现有的能带理论解决杂质

态的电子运动轨道。

(4) 固体物理的研究对象已经由晶态扩大到非晶态,非晶态不同于晶态,它只是短程有序,而在长程上是无序的。因此现有的能带理论无法解决非晶态的电子轨道运动问题。

(5) 能带理论也无法处理固态表面的电子运动规律。

虽然,目前还看不出有哪一种新的理论方法可以统一解决上述五个方面的问题。但是,从所有这些问题中,我们也可找出一个共同的特点,就是必须更多地注意固态中的电子在短程范围内的相互作用。例如,由于杂质的电子运动轨道有很强的局域化特性,因此研究杂质态的一个必要的前提是了解在杂质周围的短程相互作用,再如,要研究特定物质的微观结构与宏观性能间的相互关系,主要问题也是在于研究物质的原子间相互作用有什么不同?即原子间以何种方式结合?要解决这些问题,就不得不修改固态中的经典结构模型——“刚性球的有序堆积”说法。

实际上,只要认真分析一下大多数固态的组成和结构,就会发现除去像 NaCl 这样简单的离子型晶体外,在固态中的每一个原子、离子,其周围都有相当复杂的价电子结构,并往往是几个原子首先按一定方式相互组成基团或原子簇<sup>1)</sup>,然后,再由这些基团或原子簇配上另一些带上不同电荷的简单离子,按一定次序堆砌而成的。这也就是讲,固体的基本结构单元不应该是圆球状的离子,而应是原子簇。显然,这种原子簇结构模型符合大多数固态结构的实际情况,特别对于原子间以共价键为主要结合方式的固态更是如此。

近年来,采用 EXAFS 方法,对很多非晶态物质的结构测定表明,这类物质既非多晶,也不是完全无序,而是具有某种短程序,因而可以认为非晶态是原子簇(或基团)的无序排列。显然,从固态的原子簇模型出发,要求出固态中电子轨道的根本途径应该是首先掌握原子簇内的电子运动轨道,然后再考虑原子簇间,原子簇与阳离子间的相互作用——长程相互作用对这些

轨道的修正。

这里应特别指出的是,这种解决电子运动轨道的出发点和能带理论的出发点是不相同的。假如说,能带理论的建立是从长程序出发,逐步包括短程相互作用,则固态的原子簇模型,是从短程序出发,逐步包括长程相互作用。应该说这种观点更接近于真实的固态,可以解释更多的现象。例如,从能带理论出发,固态的带隙是由于晶格的周期性所引起的,一旦周期性消失,带隙概念也应该消失。但是,我们知道在非晶态中仍旧有带隙存在,这是用能带理论所无法解释的。假如我们从固态的原子簇模型出发,固态中的带隙主要决定于原子簇内最高占有态与最低空轨道的间距,长程相互作用所产生的效应只是把这些能级加宽,因此对于无序固态仍旧可以沿用带隙概念。

如何才能更好地了解基团或原子簇内的电子运动轨道呢?显然,最简单的途径是利用量子化学理论,因为这一理论对于解决基团或原子簇内电子运动轨道已有一套行之有效的计算方法,如分子轨道的各种近似方法、 $X\alpha$ -SW 法,等等。因此把量子化学的理论 with 计算方法引入固体物理,并充分考虑长程相互作用的影响,从而求出固态(晶态和非晶态)的电子轨道就构成了固体量子化学理论的主要研究内容,也就是本文要重点阐明的课题。

以下各节我们将简单地介绍固体量子化学理论在各领域的发展状况及其应用。

## 二、分子轨道理论在能带计算中的应用

能带理论发展的前期,重点是解决离子性较强而结构又比较简单的晶体的一般电导、电荷迁移等共性问题,因此强调电子在晶格周期势场中运动的共性特点比较多,而对电子能带

1) 目前在一般物理学一类的杂志中,基团与原子簇是不分的,而且统称原子簇(cluster)。但从化学上说,原子簇应指两个以上金属原子所组成的基团,由一个金属原子和若干个配位原子的集合体称基团。本文按物理文献的习惯,统称原子簇。

结构和组成晶体的原子价键特性间的相互关系注意不够.结果,对于能较多地反映这方面情况的 LCAO 法<sup>[1]</sup>没有给予应有的重视,而强调电子在周期性势场中运动的增值平面波法(APW法)、正交平面波法(OPW法)和格林函数法却得到了相当的发展.

近年来,为了用能带波函数计算某些宏观参量,已经要求越来越多地考虑离子(原子)周围的势场性质.因此,Phillips<sup>[2]</sup>等在1959年提出的赝势法(pseudopotential method)得到了相当的成功.但是,所有这些算法在联系固态的能带结构与组成固态的离子、原子的特性方面,总比不上LCAO法那样直接.所以近年来LCAO法重新受到重视.

自六十年代以来,随着电子计算技术的发展,量子化学的计算方法有了很大进展,计算精度也越来越高.因此,在用LCAO法计算固态的能带结构时,已经逐步把量子化学的各种近似计算引入到能带计算中<sup>[3]</sup>,从而在紧束缚方法的基础上形成一种新的计算方法,目前简称CO法(crystalline orbital).

这种方法的要点是:按紧束缚近似,由原子轨道 $\varphi_a(\mathbf{r})$ 组成Bloch和,即

$$\psi_a(\mathbf{k}|\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \cdot \sum_l e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l} \cdot \varphi_a(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l), \quad (1)$$

通过 $\psi_a(\mathbf{k}|\mathbf{r})$ 的线性组合,求出真实的晶体场轨函:

$$\psi_i(\mathbf{k}|\mathbf{r}) = \sum_a C_{ai}(\mathbf{k})\psi_a(\mathbf{k}|\mathbf{r}), \quad (2)$$

其中 $C_{ai}(\mathbf{k})$ 通过解Roothaan方程得到

$$\sum_\beta [F_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) - T_{\alpha\beta}(\mathbf{k})\varepsilon_i(\mathbf{k})]C_{\beta i}(\mathbf{k}) = 0 \quad (3)$$

(3)式中 $F_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ 、 $T_{\alpha\beta}(\mathbf{k})$ 的表达式按不同的近似程度给出.例如,按EHMO近似<sup>[3,4]</sup>,上述表达式为

$$\left. \begin{aligned} F_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) &= \sum_{l,m} \exp[i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)] \cdot H_{\alpha\beta}, \\ T_{\alpha\beta}(\mathbf{k}) &= \sum_{l,m} \exp[i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_l - \mathbf{R}_m)] \cdot S_{\alpha\beta}, \\ H_{\alpha\beta} &= -\frac{1}{2} K_{\alpha\beta}(I_\alpha + I_\beta)S_{\alpha\beta}, \end{aligned} \right\} (4)$$

物理

上式中 $S_{\alpha\beta}$ 为 $\varphi_\alpha$ 、 $\varphi_\beta$ 两个原子轨道的重叠积分, $I_\alpha$ 、 $I_\beta$ 分别为 $\alpha$ 、 $\beta$ 两个原子的离化位能.

按CNDO近似的计算式可见文献[5—7].根据这些不同的近似程度,这些方法分别称为EHMO/CO, CNDO/CO等.近来已经把CO法用于计算TTF-TCNQ等高聚物以及DNA周期性模型的电子能谱<sup>[8]</sup>.

为了进一步简化计算,某些科学工作者还试图在式(1)中,直接用基团或价键轨道代替原子轨道 $\varphi_a$ .例如Levin<sup>[9]</sup>曾用 $sp^3$ 杂化轨道代替 $\varphi_a$ ,进而计算IV族元素单晶以及III-V族半导体单晶的能带.结果能够直接得到 $\varepsilon(\mathbf{k})$ 和A-B键参数间的解析表达式,从而清楚地看出AB型半导体的能带结构如何随A-B键的性质改变而变化.

众所周知,对于C, Si, Ge,  $\alpha$ -Sn四种AA型异质同构体,从实验上测得它们能带的平均带隙有一个很均匀的变狭过程.这一特性若用APW, OPW等方法计算,则不易说明此现象,但若使用上述杂化轨道法,就可直接得到这四种元素晶体的平均带隙:

$$\begin{aligned} E_h(\text{C}):E_h(\text{Si}):E_h(\text{Ge}):E_h(\alpha\text{-Sn}) \\ \approx \beta(\text{C}):\beta(\text{Si}):\beta(\text{Ge}):\beta(\alpha\text{-Sn}) \\ \approx \Delta H(\text{C}):\Delta H(\text{Si}):\Delta H(\text{Ge}):\Delta H(\alpha\text{-Sn}) \\ \approx 1:0.6:0.45:0.4, \end{aligned} \quad (5)$$

而相应的实验值是

$$\begin{aligned} E_h(\text{C}):E_h(\text{Si}):E_h(\text{Ge}):E_h(\alpha\text{-Sn}) \\ = 1:0.5:0.45:0.4, \end{aligned} \quad (6)$$

式(5)中 $\beta$ 是共振积分, $\Delta H$ 是A-A键的键能.可以看到理论值和实验值符合程度是相当满意的.

### 三、原子簇计算方法

为了解决能带理论在处理复杂结构、杂质、缺陷等的电子运动规律上的不足,以及这种方法在计算各种受短程序所制约的各种物理参数方面所遇到的困难,近年来一些科学工作者相继采用固态的原子簇计算方法,即用原子簇的局域化电子轨道代替能带波函数,并得到了一

些初步的结果。

固态原子簇计算方法的基本要点是：以某个处于特定对称位置的原子（或基团）为中心，逐步包括邻近的原子（或基团）形成一个“大分子”，组成“大分子”的原子（或基团）数目随原子（或基团）间相互作用力的情况而定；同时适当地考虑边界条件，然后用各种近似的分子轨道法或  $X\alpha$ -SW<sup>[10]</sup> 计算原子簇的局域化电子轨道，并以此来逼近固体的能带。

这种方法能否成功，除去原子簇内所包含的原子数目足够多以外，一个重要的因素是如何确定边界条件。当一个“原子簇”从固体中“切割”出后，在边界上会出现游离键（dangling bonds），如何处理这些游离键，对原子簇的能级影响极大。边界条件处理不当，会导致这种方法的失败。

目前有两种边界条件比较成功，一种称为周期性边界条件<sup>[11,12]</sup>，它根据晶格的对称性，认为边界上的原子轨函具有平移不变性。另一种称为模拟边界条件<sup>[13]</sup>，它假定原子簇边界上有  $n$  个游离键， $2n$  个电子，所以在计算原子簇的局域化轨道时，就把  $2n$  个电子包括在内，而周围环境就用  $n$  个质子或  $n$  个碱金属原子替代。

近年来这方面的理论工作逐渐增多，并有许多成功的例子，现仅举数例，以资说明。

1. Messmer<sup>[14]</sup> 用  $X\alpha$ -SW 方法计算 Cu 单晶的能级，当所涉及的原子簇数目由两个 Cu 原子逐步增加到 13 个原子时，由此得到的原子簇能级已经很接近 Cu 单晶的能带，这说明只要考虑到 13 个 Cu 原子间的相互作用，就可以正确地反映出在 Cu 单晶中电子的整体运动性质，但  $X\alpha$ -SW 法比能带的计算方法方便得多。

2. Zunger<sup>[12]</sup>，Messmer<sup>[15]</sup> 等采用 EHMO 法计算金刚石、BN 单晶的原子簇“分子轨道”，同时计算这些单晶的各种物理参数，均获得很好的效果。近年来，随着计算技术的发展，还进一步采用比 EHMO 法更精确一些的 CNDO 方法<sup>[16]</sup> 计算原子簇的“分子轨道”。

3. 到目前为止，固态中以杂质、空穴为中心的局域化电子态始终没有一种好的计算方法进

行处理。在半导体理论中，除去由杂质、空穴所形成的“浅”能级能够用有效质量理论加以考虑外，对于“深”能级的杂质始终缺乏有效的方法。近来 Gartling<sup>[17]</sup> 用原子簇模型处理 Si、Ge 等半导体中杂质态，得到了一定的成功。他们的原子簇包含一个中心原子，四个最邻近的配位原子及 12 个 H 原子（中和 12 个在边界上出现的游离键）。然后用  $X\alpha$ -SW 法分别计算完整晶格的原子簇及中心原子被 S、Zn 等杂质原子取代后的原子簇的局域化电子态。然后比较所得到的能级（见图 1, 2），就可确定杂质态的性质、位置。如在 Si 中掺 S 后，若 S 是取代 Si，则

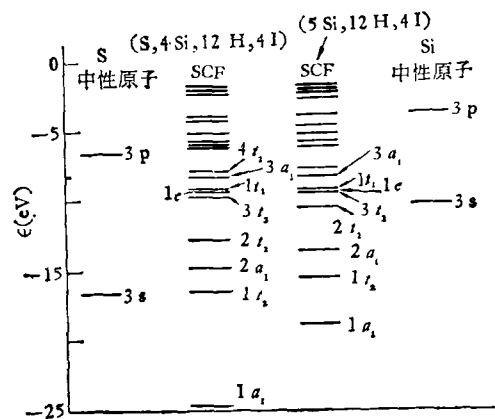


图1 中性 S, Si 原子能级, Si 单晶及 Si 被 S 取代后的原子簇能级. Si 被 S 取代后,  $3a_1$  能级降低, 由原来的空轨道变成占有轨道

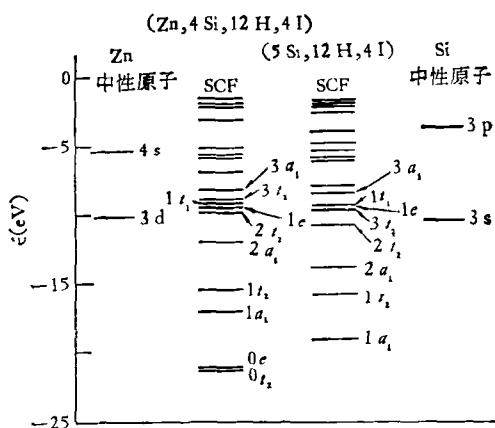


图2 中性 Zn, Si 原子能级, Si 单晶及其被 Zn 取代后的原子簇能级. Si 被 Zn 取代后,  $3a_1$  能级上升, 成为未填满轨道

S 是属于给电子杂质,导电性能增加;若在同一位置被 Zn 取代,则 Zr 是受电子杂质.随着取代位置的不同,上述性质会产生变化.我国北京师范大学刘若庄等同志<sup>[18]</sup>应用此法从理论上计算了 GaAs 单晶中氧取代 As 及 As 空穴的深能级,为 GaAs 注入氧离子后,使注入层变成半绝缘层这一实验事实提供了合理的物理解释.

近来这类计算已扩展到 AB 型半导体<sup>[19]</sup>.应该指出,这类方法除能计算半导体中的杂质态外,还适用于固体发光等性质.

#### 四、Green 函数在原子簇电子轨道计算中的应用

前面我们已经指出,使用原子簇的电子局域化轨道成功地解决了许多能带理论所无法解决的重要问题.但是我们也看到,原子簇计算方法中边界条件的选择对结果影响很大,这给理论方法带来了一定的任意性,减少了理论的可靠程度,影响了它的使用范围.例如用原子簇模型只适用于处理低浓度掺杂,因为当两个或几个杂质相互靠近时,边界条件很难选择,从而无法确定杂质的浓度对原子簇电子轨道的影响.由于同样的原因,对于非晶态问题的处理也有相当困难.如何才能克服由于边界条件所带来的计算困难呢?在引言中我们已指出,对于大多数的固态(包括非晶态),其基本构造块应该是基团或原子簇,因此边界条件的实质,应该是如何正确地考虑原子簇与原子簇及原子簇与阳离子间的相互作用.只要我们适当地选择原子簇(或基团)大小,我们总可以使得原子簇与原子簇或者原子簇与阳离子间的相互作用相对于原子簇内的相互作用只是一种微扰.因此我们就可以使用 Green 函数方法,即通过求无穷级微扰方法对原子簇间的微扰作用进行较为合理的计算.这种方法首先应用于晶格振动问题,目前正逐步地发展到计算固态中的电子能级及波函数.由于这种方法目前还处于发展阶段,因此本文只就这种方法的计算原则作一概要介

物理

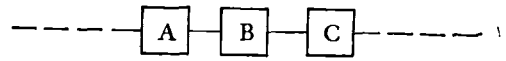


图3 一维固态的原子簇模型

绍.

假如我们有某种一维固态,如图3所示,每个方块代表一个原子簇或基团.假如对每个原子簇,通过某种分子轨道的计算方法,我们已求得本征矢与本征值,则每个方块实质上就代表一个对角矩阵  $h_A, h_B, h_C \dots$ , 假定我们只考虑最邻近的原子簇间的相互作用,则我们得到一个无穷链的三对角能量本征矩阵:

$$\begin{bmatrix} V_{n-1,n} \dots h_n & V_{n,n+1} & & & \\ & V_{n,n+1} & h_{n+1} & V_{n+1,n+2} & \\ & & V_{n+1,n+2} & h_{n+2} & \dots V_{n+2,n+3} \\ & & & & \dots \\ & & & & \dots \end{bmatrix} \quad (7)$$

式中  $h_n, h_{n+1}, h_{n+2} \dots$ ;  $V_{n-1,n}, V_{n,n+1}, \dots$  都是块矩阵,  $V_{n-1,n} \dots$  代表相互作用项.

假如我们研究的对象是一个均匀的一维晶格,则  $h_n = h_{n+1} = \dots = h$ ;  $V_{n-1,n} = V_{n,n+1} = \dots = V$ , 其中  $h, V$  都是常数.若研究对象是杂质态,则  $h_n, V_{n-1,n}$  等可以各不相同.对于这样一个无穷维的三对角分块矩阵,我们可通过 Feynman 图方法<sup>[20]</sup>,求出 Green 函数的对角元(实际上是一个矩阵):

$$\left. \begin{aligned} D &= D_0 + D_0 V D, \\ D &= \frac{1}{E - H_0 - V}, \\ D_{nn} &= (Z I - h_{nn}^0 - V_{n,n+1} \Delta_{n+1}^+ V_{n+1,n} \\ &\quad - V_{n,n-1} \Delta_{n-1}^- V_{n-1,n})^{-1}, \\ \Delta_n^\pm &= (Z I - h_{nn}^0 - V_{n,n\pm 1} \Delta_{n\pm 1}^\pm V_{n\pm 1,n})^{-1}, \end{aligned} \right\} \quad (8)$$

式(8)中  $h_{nn}^0$  代表原子簇的对角矩阵(未受边界微扰),  $I$  是单位矩阵.

只要知道  $V_{n,n\pm 1}, \Delta_n^\pm$  分矩阵的表达式,就可通过使  $D_{nn}$  的分母为零,得到第  $n$  个原子簇或基团的各个能量本征值.

使用同样方法,我们还可求得各个 Green 函数的非对角分块矩阵元<sup>[21]</sup>:

$$D_{n,n+1} = D_{n,n} V_{n,n+1} \Delta_{n+1}^+ \quad (9)$$

最近吴式玉等<sup>[22]</sup>还提出了一种计算本征函

数的方法。他们指出：只要知道 Green 函数的对角元  $D_{nn}$  及非对角矩阵元  $D_{nn'}$ ，原则上就可求出原子簇（或基团）的电子波函数。这使得 Green 函数在原子簇电子轨道的计算方法上又前进了一步。对于一个三维固态，它们的能量本征矩阵是一个厄米矩阵，因此不能直接应用 Green 函数的方法，但 Haydock 等<sup>[23]</sup>已经提出了一种正交方法，可以把一个任意的厄米矩阵通过正交方法变为一个三对角矩阵，从而把这种计算方法推广到三维空间，但是计算程序仍旧过于复杂，还未见具体的应用。

在结束本文时，作者愿借此机会倡议固体物理的理论工作者多多注意理论化学的进展，并参与这一工作的发展。

### 参 考 文 献

- [1] F. Bloch, *Z. Physik*, **52**(1928), 555.
- [2] J. C. Phillips and L. Kleinman, *Phys. Rev.*, **116**(1959), 287; V. Heine, *Solid State Physics*, **24**(1970), 1—31.
- [3] G. Del. Re and J. Ladik, G. Biczio, *Phys. Rev.*, **155**(1967), 997.
- [4] M. Nishida, *J. Chem. Phys.*, **69**(1978), 956.
- [5] J. Ladik, G. Biczio, *Acta Chim. Hung.*, **67**(1971), 397.
- [6] A. Karpfen, J. Ladik et al., *Theoret. Chim. Acta*, **34**(1974), 115.
- [7] R. Dovesi, C. R. Pisani et al., *Chem. Phys. Lett.*, **39**(1976), 103.
- [8] J. M. Andie et al., *International Journal of Quantum Chemistry Symposium*, **12**(1978), 233—247.
- [9] A. A. Levin, *Solid State Quantum Chemistry*, McGraw-Hill International Book Co., (1976).
- [10] J. C. Slater and K. H. Johnson, *Phys. Rev.*, **B5**(1972), 844; J. C. Slater, *Advances in Quantum Chemistry*, ed. by Per-olvloöwdin, Academic press, New York, Vol. 6, (1972), 1—48; K. H. Johnson, *ibid.*, Vol. 7, (1973), 1—143.
- [11] A. Zunger, *J. Phys. C.*, **7**(1974), 96; *J. Chem. Phys.*, **62**(1975), 1861; *J. Chem. Phys.*, **63**(1975), 1713.
- [12] A. Zunger & A. Katzir, *Phys. rev.*, **B11**(1975), 2378.
- [13] A. Zunger, *J. Phys. C.*, **7**(1974), 76; A. B. Kunz & D. L. Klein, *Phys. Rev.*, **B17**(1978), 4614.
- [14] R. P. Messmer, *Phys. Rev.*, **B13**(1976), 1396
- [15] G. D. Watkins & R. P. Messmer, *Computational Methods for Large Molecules and Localized State in Solids*, ed. by F. Herman, A. D. McLean and R. K. Nesbet, Plenum Press, New York, (1973), 133.
- [16] P. Deak, J. Kazsaki et al., *Phys. Lett.*, **A66**(1978), 395.
- [17] B. G. Gartling, *J. Phys. C*, **8**(1975), 3171; 3183.
- [18] 刘若庄等, 北京师范大学学报, **2**(1978), 1.
- [19] A. Fazio et al., *J. Phys. C*, **11**(1978), L175.
- [20] W. H. Bulter, *Phys. Rev.*, **B8**(1973), 4499.
- [21] S. Y. Wu, C. C. Tung et al., *J. Math. Phys.*, **15**(1974), 938.
- [22] K. S. Dy, S. Y. Wu et al., *J. Phys. C.*, **12**(1979), L141.
- [23] R. Haydock, V. Heine and M. J. Kelly, *J. Phys. C.*, **5**(1972), 2845.
- [6] J. P. Christiansen et al., *Computer Phys. Commun.*, **17**(1974), 271.
- [7] R. J. Mason, *Nucl. Fusion*, **15**(1975), 1031.
- [8] 徐至展等, 上海科技大学学报, **1**(1979), 34.
- [9] B. Yaakobi, A. Nee, *Phys. Rev. Lett.*, **36**(1976), 1077.
- [10] K. G. Whitney, J. Davis, *J. Appl. Phys.*, **45**(1974), 5294.
- [11] M. Seaton, *Atomic and Molecular Process*, Ed. by D. R. Bates, Academic, New York, (1962), Chapp. II.
- [12] Blaha, *Astrophys. J.*, **157**(1969), 473.
- [13] C. W. Allen, *Astrophysical Quantities*, (Althone Press, London, 1965), p. 59.
- [14] E. Oraw, J. Davis, *J. Appl. Phys.*, **45**(1974), 2480.
- [15] M. Seaton, *Mon. Nat. R. Astron. Soc.*, **119**(1959), 81.
- [16] J. W. Shearer, W. S. Barnes, *Laser Interaction and Related Plasma Phenomena*, Ed. By H J Schwarz, H. Hora, Plenum Press, New York, (1971), Vol. I, pp. 307—37.
- [17] T. Holstein, *Phys. Rev.*, **72**(1947), 1212.
- [18] Lawrence Livermore Laboratory, *Laser Program Annual Report*, (1974), UCRL-50021-74, p. 442.

(上接 37 页)

814.