

原子分子物理若干前沿及其进展概述¹⁾

梅 刚 华

(中国科学院武汉物理研究所, 波谱与原子分子物理国家重点实验室, 武汉 430071)

摘要 原子分子物理研究正在以前所未有的深度、广度和精度展开。文章简要介绍了原子分子物理研究的若干重要前沿及其近期进展, 和某些重要的原子分子应用技术。

关键词 原子分子物理, 进展

Abstract Researches in atomic and molecular physics are now being carried out to an unprecedented degree in intensity, extensiveness and precision. In this article we briefly introduce some important researches and their recent achievements in the frontier of atomic and molecular physics. Some practical applications of atomic and molecular techniques are also described.

Key words atomic and molecular physics, new achievements, frontiers

原子分子物理是研究原子分子结构、运动规律和相互作用的物理学分支学科, 体现人们在原子、分子层次认识物质的水平。“构成物质的最小单元是什么”的古老原子分子物理命题虽然存在了几千年, 但原子分子物理研究取得实质进展却是本世纪的事。本世纪二、三十年代建立的量子力学, 奠定了原子分子物理的理论基础, 极大地刺激了原子分子物理的理论及实验研究, 并使原子分子物理首次成为一门独立的物理学分支学科。60年代, 随着激光问世而形成的激光光谱技术, 以及其后产生的与激光光谱技术相关的原子分子精密测量技术, 使原子分子物理研究迈上新的台阶。原子分子物理正在以空前的深度、广度和精度展开。本文简要介绍了原子分子物理研究的若干进展。首先谈谈原子分子物理研究的基本问题及现代实验技术, 然后介绍若干前沿问题及其近期进展, 最后列举了几项重要的原子分子应用技术。

1 原子分子物理研究的基本问题——原子结构

原子是由原子核和一个或多个绕核运动的

核外电子组成的微观物质系统。在原子系统内部及其与外部环境之间存在各种相互作用和物理效应。其主要部分是库仑作用, 即核与电子之间的相互吸引和电子之间的相互排斥作用。库仑作用使得核外电子只能在某些特定的“轨道”上运动(更严格地说, 应该是电子运动出现在这些轨道上的几率极大)。这些轨道具有确定的能量。所以, 原子系统的能量是非连续分布的, 体现为一组不同的“能级”。其他相互作用和物理效应在量级上一般远小于库仑作用, 它们的作用可使库伦能级进一步分裂或移动, 导致原子能级的精细和超精细结构。产生精细和超精细结构的相互作用和物理效应大体上包括^[1]: 原子内电子高速运动引起的相对论效应, 电子自身的轨道运动和自旋运动之间的磁相互作用, 电子与核之间的电、磁相互作用, 同种元素的不同同位素质量和体积不同而引入的同位素效应(产生同位素移动), 量子电动力学效应(一种重要的能级移动——Lamb移动即由此引起), 原子与外部静电、磁场的相互作用(分别引入斯塔克分裂和塞曼分裂)等等。分子是

1) 1994年10月6日收到初稿。

由多个原子构成的组成物质的最小单元，其内部及其与外部的相互作用远较原子复杂，这里不一一列举。总之，众多相互作用及物理效应的存在导致原子、分子具有极为复杂的能级结构。各能级之间可以发生各种动力学过程。如原子中的电子可从一个能级转移到另一个能级，称为跃迁；还可以挣脱核的束缚而变为自由电子，相应地中性原子变为带电离子，称为电离。跃迁和电离一般由原子与外部环境的相互作用（如与光场作用，与其他粒子碰撞等）而引起。

由上述可知，原子分子结构（主要是能级结构）是诸多物理相互作用和效应的综合体现，换言之，它携带了大量物理信息。通过对原子分子结构的研究，可得到原子分子各种相互作用和效应的物理机制。此外，原子分子的光学、电学和磁学等物理性质及化学性质都依赖于原子分子结构。例如，原子的发光特性（波长、偏振等）取决于原子内本征能级的跃迁；化学性质随原子序数（核外电子数目）变化而周期性变化。由于以上原因，原子分子结构成为原子分子物理研究的基本问题。

2 精密谱方法与现代原子分子物理实验技术

由于原子分子物理研究的基本问题是原子结构，因而原子分子结构参量的测量也就成为原子分子物理实验研究的基本问题。又因为原子分子能级的精细和超精细分裂很小，所以必须保证很高的测量精度。

研究原子分子结构的常用实验方法是光谱。我们以激光诱导荧光方法为例说明测量原理。设想原子内有上、下两个能级，其能量分别用 E_e 和 E_g 表示。用频率可变的激光照射这种原子，当激光频率 ν 恰好满足

$$h\nu = \Delta E = \Delta E_e - E_g \quad (1)$$

时（ h 为普朗克常数），处于 E_g 态的原子就要向 E_e 态跃迁（能否跃迁还要受跃迁选择定则的制约，此处假定该跃迁是允许的）。一般地 E_e 态

寿命极短，亦即几乎在跃迁发生的同时，原子会发射 $h\nu$ 光子而从 E_e 态返回 E_g 态。用灵敏光检测器容易记录到这种发射光子信号，此时读出激光频率，也就测定了 $\Delta E = h\nu$ 。

再看看如何提高测量精度。先举一个测量湖水深度的例子。为说明方便，设湖底是平整的。为了实现精确测量，应考虑三个因素。其一，必须有一把足够精确的尺子，即尺子的刻线必须足够准确、细密；其二，由于湖水深浅未知，这把尺子必须足够长；其三，必须尽可能克服风的影响。假如测量过程中狂风大作，湖面一片惊涛骇浪，即便尺子精度再高，测量值也不会准确。原子分子结构测量亦与此类似。下面根据这三条线索，简要介绍几种原子分子结构的精密光谱测量方法，简称为精密谱方法。

2.1 尺精度问题

光谱的精度主要取决于光源频率带宽 $\Delta\nu$ ，相当于“尺子”的刻线。 $\Delta\nu$ 有时也称为光谱的分辨率。 $\Delta\nu$ 越小，分辨越高，光谱测量精度也越高。现有的商品激光分辨可达几到几十 MHz，可以满足大部分实验要求。激光-射频双共振的分辨可达几十到几百 kHz，新近出现的光学链的分辨高达数百 Hz

2.2 尺长度问题

“尺子”长度相当于光源频率 ν 。 ν 与 ΔE 成正比[参见(1)式]，而 ΔE 可相差 10^{10} 数量级。因此，为了实现各种不同的 ΔE 的测量， ν 必须在很大范围内可调，相当于一把很长的“尺子”。激光-射频双共振可测量射频波段的 ΔE ，高分辨激光光谱可测量从近紫外到红外乃至远红外波段的 ΔE ，用激光倍频和双光子跃迁可测量紫外波段的 ΔE 。同步辐射的分辨率较低，但由于它可以产生从红外到 X 射线波段的辐射光，也被广泛用于原子分子结构测量。软 X 射线激光器也可望在不久的将来走向实用阶段。

2.3 风影响问题

通常情况下原子分子必定受到某些外界干扰作用而出现能级谱线的展宽（相当于风所引起的湖面的波浪），从而引入测量误差。常见的

干扰展宽为原子分子之间及其与容器器壁之间的碰撞作用引起的碰撞展宽和原子分子运动引起的多普勒展宽。为了克服这些展宽，出现了粒子囚禁和冷却技术。人们首先利用光场或电、磁场的作用将中性原子分子或带电的离子、电子等限制(囚禁)在某一空间范围(阱)，再利用激光场的作用使被囚禁的粒子运动进一步减速(冷却)，最后得到近乎孤立、静止的粒子系统。这种粒子系统具有极窄的能级跃迁谱线，可对其进行极为精确的光谱测量。

测量精度是制约原子分子物理研究水平的关键因素。精密谱方法的出现，使得大量以前难以观察甚至根本观察不到的物理效应的观察研究成为可能，因而是现代原子分子实验技术发展中最具有革命性意义的事件。其他重要的实验技术也可以举出很多，如计算机、弱信号探测和处理、超高真空技术、加速器及各种碰撞实验装置、原子及分子束技术、极端条件(高温、高压、强光场、强电、磁场)制备技术、核磁共振等等。它们和精确谱方法一起，构成现代原子分子实验技术背景。

3 原子分子物理研究的若干前沿及其进展

由于精确谱方法等大批现代实验技术的应用，原子分子物理研究水平进入了新的层次，达到前所未有的深度、广度和精度。下面列举若干重大前沿课题及其近期进展。

3.1 原子分子结构

原子分子结构的理论框架是量子力学。由于研究问题的侧重点不同，出现了各种不同的理论方法。较重要的有：Hartree-Fock 方法、组态相互作用方法、多重组态 Dirac-Fock 方法、多通道量子亏损理论、多体微扰理论、相对论相位随机方法和分子轨道理论等等。实验研究以高分辨激光光谱为主。原子分子高激发态由于所受库仑作用弱，易受外部环境(如电、磁、光场)作用，呈现出许多低能态(基态、低激发态)所没有的特性，如电子关联、量子混沌、易于

电离等，因而引起广泛的研究兴趣。所研究的原子分子系统越来越复杂，出现了从简单原子分子到复杂原子分子，中性原子分子到离化态原子分子，低离化度离子到高离化度离子，通常条件下的原子分子到极端条件下的原子分子转变的趋势。每年都有大量超精细结构常数、同位素移动、兰姆移动、碰撞截面等结构数据报道，且数据越来越精确。

3.2 物理学基本理论和定律的检验

20世纪以来物理学各领域均取得了巨大进展。出现了许多物理学新理论、新定律，如相对论、量子力学、量子电动力学、弱电统一理论、弱相互作用下宇称不守恒、CPT 定理等等。对这些理论和定律的检验一直是原子分子物理基础研究的重要内容。这类实验难度很大，但仍取得巨大进展。如用 Cs 原子检验宇称不守恒的实验耗时已由几年前的两个月缩短到 8h，检验精度达 2% 左右^[2]。正、反电子同荷异性的检验精度则高达 10^{-12} 量级^[3]。迄今为止的实验结果都支持上述理论。目前还在致力于改进实验方法，以求提高检验精度。这类研究由于涉及对自然界本质的认识，因而是十分重要的研究课题。

3.3 物理量的精确测量

物质的属性及其运动状态由物理量描述，如质量、电荷、能量、时间、长度等等。精确谱方法的出现大大提高了物理量的测量精度。现有的原子钟测量时间的精度在 10^{-14} 量级^[4](百万亿分之一)，电子 g 因子(电子的重要特性参量)测量精度达 10^{-12} 量级^[3]，里德伯常数(描述原子分子能级结构的重要参量)的测量精度达 10^{-11} 量级^[5]。物理量的精确测量不仅关系到物理学本身的发展，而且对国民经济的发展也具有重大影响。例如，原子钟已被广泛用于宇航、通信、国防、地质等各经济部门。

3.4 粒子囚禁和冷却

粒子囚禁和冷却一方面大大提高了物理量的测量精度，另一方面，它为一些不稳定的粒子(如高离化度离子、特殊原子分子等)提供了非常“清洁”的环境，使其具有较长的“生存”寿命

而得以被仔细观察研究，因而大大拓宽了被研究原子分子体系的范围。近年来的国际原子物理会议都将囚禁和冷却列为重点专题。囚禁中性原子分子一般采用激光场和超导线圈产生的高强磁场。囚禁离子多采用交变电场。新型囚禁装置还在不断出现。例如，近几年才出现的电子束离子阱能够产生和囚禁元素周期表上几乎所有元素的不同离化度的离子^[6]。在激光冷却方面，已能将原子或离子温度降至 μK 量级^[7]。新的冷却机理也在不断探索。

3.5 特殊原子分子与团簇

特殊原子分子是在自然界存在寿命很短的非稳定原子分子，由于其特殊的理论及应用价值正日益引起重视。例如， μ 子素和电子偶素是研究、检验量子电动力学的理想对象，分子离子、自由基则在化学反应中作用重大。特殊原子分子的光谱研究已有较大进展。原子分子团簇是由几个至几百个乃至数千个原子或分子组成的聚集体。通过对团簇的研究有可能揭示物质形态和特性如何从微观到宏观过渡的规律。虽然团簇研究历史只有十来年，但发展十分迅速，现已形成一门原子分子物理学、化学和材料科学共同关注的、相对独立的交叉学科——团簇科学。

3.6 分子反应动力学

化学反应过程是怎样的？能否人为控制化学反应？这些问题已提上原子分子物理学家和化学家的日程。用状态合适的激光照射某一母体分子，可以造成分子键的断裂而生成数种子分子，这就是所谓“光解”。改变激光状态，生成物可以改变，这就为人为控制化学反应提供了可能。发生化学反应（如光解）的时间极为短促，一般在 $\text{fs}(10^{-15}\text{s})$ 量级。人们正在试图利用 fs 激光技术实现对化学反应全过程的观察。此领域极有可能在较短期内获得重大突破。

4 若干重要原子分子应用技术

原子分子物理是应用背景很强的物理学科。它对科学技术的发展和社会进步已经产生

了巨大推动作用。电子学和电子产业、量子电子学和量子计量标准、光电子学和激光产业的诞生和发展都与原子分子物理直接相关。下面列举几种具有重大应用价值的原子分子技术。

4.1 新型量子频率标准

量子频率标准是利用频率非常稳定的原子跃迁谱线制成的精密计时系统，即前已提及的原子钟。目前除原有的频标系统性能进一步得到改善外，还在提出新的频标机理和研制新的频标系统，如光频标、超慢原子频标、离子阱频标等。

4.2 新型激光源

原子分子物理必将继续对激光产业的发展作出贡献。寻找新的激光源的工作正在深入进行。用高离化态原子作为工作物质，有望制成真空紫外和软 X 射线激光器。自由电子激光、高功率和超短脉冲激光技术日趋成熟。这些新型激光源的问世必将大大扩展激光的功能，以满足各种不同的需要。

4.3 原子分子操作技术

现已出现一种称为“光镊”的原子分子操作工具。它利用良好聚焦的激光束的作用，能像镊子一样“夹”住单个原子分子以供详细观察研究。在刚刚结束的第14届国际原子物理大会上报告的用光镊观察研究单个 DNA 分子的工作引起热烈反响。另一项操作技术——原子搬迁，则可将单个原子从固体表面的此处“搬”到彼处，功能类似一支“原子笔”。用它已绘制出相当复杂的图形。这项技术如果成熟，则可以在极小的面积上储存大量信息，其重要性是不难想见的。

4.4 磁共振成像

最近的研究表明，高（磁）场核磁共振成像，不仅可用于研究人脑组织结构（判断脑组织病变），还可用作脑功能研究，从而引起原子分子物理、医学和生命科学界的高度重视，以致于有人预测它将发展成为“思维阅读器”^[8]。美国政府已将 90 年代确定为“脑的十年”，已引起许多国家包括我国的重视。预计磁共振成像将成为人脑科学十分重要的研究手段。

致谢 本文承蒙叶朝辉研究员、朱熙文研究员、李白文研究员和高克林副研究员阅读初稿，并提出宝贵意见，特此致谢。

参 考 文 献

- [1] 郑乐民、徐庚武，原子结构与原子光谱，北京大学出版社，(1988)。
- [2] C. S. Wood, D. Cho, C. Bennett et al., Proc. 14th Int. Conf. on Atom. Phys. (Boulder), Abstracts 1D-1, (1994).
- [3] H. Dehmelt, *Rev. Mod. Phys.*, 62(1990), 525.
- [4] 王义道、王庆吉、傅济时等，量子频标原理，科学出版社，(1986), 355.
- [5] F. Nez, M.D. Plimmer, S. Bourzey et al., *Atomic Physics 13*, Eds. H. Walther, T.W. Hansch and B. Neizert, American Institute of Physics, (1993), 20.
- [6] R. E. Marrs, *Atomic Physics 12*, Eds., J.C. Zorn and R.R. Lewis, American Institute of Physics, (1991), 189.
- [7] S. L. Rolston, C. Gerz and P.D. Lett et al., Eds. H. Walther, T.W. Hansch and B. Neizert, American Institute of Physics, (1993), 118.
- [8] J. Alper, *Science*, 261 (1993), 556.

量 子 阵 级 联 激 光 器¹⁾

李 明

(中国科学院物理研究所,北京 100080)

摘要 介绍了一种新型的工作于 $4.25\mu\text{m}$ 的半导体激光器——量子阱级联激光器。这种新型激光器是单极性的,它发光仅依赖于电子而并非正负两种电荷。介绍了这种激光器的结构、工作原理和激光特性。

关键词 半导体激光器,红外激光器,量子阱

Abstract A new type of semiconductor laser, i. e. quantum cascade laser, which operates at $4.25\mu\text{m}$ is described. It is a unipolar laser operating solely on electrons rather than on positive and negative charges. The structure, operation principle and characters of this kind of laser are also introduced.

Key words semiconductor laser, infrared laser, quantum well

在被光激发的激光介质中,如果在能级中布居的粒子数发生了反转,即上能级粒子数大于下能级粒子数,那么激光介质受激辐射的概率将大于受激吸收的概率。上能级粒子向下能级跃迁并释放光子。这是多数气体或固体激光器的工作原理。半导体激光器,包括量子阱激光器是通过导带中的电子与价带中的空穴复合产生光子的。所产生光子的能量决定于导带与价带的能带间隙。最近,AT&T 贝尔实验室发明了一种量子阱级联激光器^[1-3]。它是一种多层的量子阱结构。每一层结构包括一个注入区和一个激发区。激发区为三个耦合量子阱。这种激光器的光子产生依赖于电子能级在耦合量子

阱中的台阶式分布。当电子从一个高能级量子阱跃入另一个低能级量子阱中时,将产生一个光子。从物理内容上看,这是一种新型激光器。因为它的发光机理不再像激光二极管那样依靠电子与空穴的复合产生光子,而是电子在具有不同能级量子阱之间的迁移过程中,释放能量产生光子。因而,量子阱级联激光器是单极性激光器。

贝尔实验室设计的这种激光器的工作波长为 $4.25\mu\text{m}$ 。可根据要求,通过改变激发区量子阱的阱宽改变电子能级,从而使得激光器的工

1) 1994 年 8 月 24 日收到初稿, 11 月 7 日收到修改稿。