

# 原子分子物理进展\*

仝晓民 李家明

(中国科学院物理研究所, 北京 100080)

**摘要** 介绍了国内原子分子物理的进展, 详细介绍了在原子高激发态理论和实验研究中的两个具体工作: (1) 突破了传统组态相互作用的制约, 建立了可处理连续组态的相对论性多通道理论, 直接计算量子数亏损理论中的物理参量, 将无数个里德伯态、自电离态及连续态统一描述; (2) 在激光五步共振激发-场电离飞行时间质谱实验装置上, 首创脉冲电场-稳恒电场顺序电离方法, 克服了严重本底干扰, 提高了信噪比, 因而能清楚地观察到原子双里德伯激发态能级结构.

**关键词** 原子, 分子, 相对论性多通道理论

**Abstract** We present a brief introduction to recent developments of atomic and molecular physics. Two examples of theoretical and experimental studies on the atomic highly excited states are given: (1) Relativistic multichannel theory which can be regarded as an extension of traditional configuration interaction theory by including continuum configuration interactions. Based on this theory, we can calculate the physical parameters in multichannel quantum defect theory, and treat all the infinite Rydberg states, autoionization states and continuum states in an unified manner. (2) A time delay between the pulsed and static electric field in the experiment of five photon resonant excitation to the highly excited double Rydberg states has been used for the first time. Due to the improvement of the signal to noise ratio, the energy structure of the double Rydberg states may be clearly observed.

**Key words** atom, molecule, relativistic multichannel theory

近几年来, 在国家科委“攀登计划”、国家自然科学基金委员会“重大项目”支持下, 全国原子分子物理学研究可以说是取得了令人鼓舞的进展. 在原子、分子激发态和动力过程研究, 电子与原子、分子碰撞实验研究以及化学物理中的态-态反应动力学研究等方面都取得了重要的研究成果. 例如, 在与原子、分子物理密切交叉的化学物理方面, 中国科学院大连化学物理研究所利用双共振多光子电离光谱技术阐明了碰撞诱导 CO 分子单-参重混合态的分子内传能过程中的量子干涉效应<sup>[1]</sup>, 利用激光制备处于单一转动态的 NH<sub>2</sub> 自由基, 研究其转动态-态传能过程<sup>[2]</sup>; 中国科学院化学研究所系统地

从实验上研究了两大类过渡金属与硫的二元团簇的形成和光解动力学过程<sup>[3]</sup>. 中国科学技术大学也取得一些重大的进展: 完成了高分辨电子能量损失谱实验装置和(e, 2e)电子动量谱实验装置的建立和调试, 将可以能壳分辨的方式测量原子、分子体系在动量空间中的电子波函数的振幅, 同时这种实验测量还可推广应用于凝聚态物质体系; 利用高分辨光谱技术研究了 GeH<sub>4</sub> 和 SiH<sub>4</sub> 的局域模振动, 根据转振动分辨的分子光谱测量和理论分析, 阐明了处于局域模振动态的分子几何构形从 T<sub>d</sub> 演化为 C<sub>3v</sub> (即

\* 国家自然科学基金资助项目, 国家科委“攀登计划”资助项目, 国家 863 高技术惯性约束聚变主题基金资助项目, 中国工程物理研究院科学和技术基金资助项目.  
1995 年 6 月 2 日收到初稿, 1995 年 7 月 4 日收到修改稿.

特定的 H-Ge 间和 H-Si 间形成高度的局域振动)<sup>[4,5]</sup>. 中国科学院武汉物理研究所利用光抽运技术研究在强磁场下碱金属原子的超精细塞曼能级及其弛豫过程; 根据该基础研究成果所发展的原子滤波技术可应用于特殊的保密通信, 同时通过电子自旋极化的 Cs 与<sup>129</sup>Xe 自旋交换碰撞过程可达到<sup>129</sup>Xe 核自旋极化<sup>[6]</sup>, 核自旋极化 Xe 的核磁共振成像可能将成为未来非常重要的生物体成像诊断. 它较好的反差比而不同于传统质子的核磁成像诊断, 因为含质子的水在生物体内占有很大的比率. 清华大学在自行研制的一套激光五步共振激发-场电离飞行时间质谱实验装置上, 首创脉冲电场-稳恒电场顺序电离方法, 克服了严重本底干扰, 从而提高信噪比, 因而能清楚地观察到原子双里德伯激发态能级结构(即同时有两个电子处于高度激发的里德伯轨道), 展示出电子关联效应的动态演化过程<sup>[7]</sup>. 还应用原子多光子共振发电离过程所发展的元素超痕量测量技术对资源(如贵金属隐伏矿的探测)、宇宙化学(如根据 Ru/In 相关性而对 6500 万年前由于小行星撞击地球而引起恐龙灭绝的“学说”提出了证据)等方面取得了重要的应用成果. 中国科学院物理研究所在原子、分子和团簇的理论方面取得了一些进展<sup>[8,9]</sup>, 特别是突破了传统组态相互作用的制约, 建立了可以处理连续组态相互作用的原子相对论性多通道理论, 它可以直接以非微扰方式计算散射矩阵(S 矩阵), 根据 S 矩阵的解析性, 可以精确求得电离阈值附近电子能级结构, 同时也可以计算慢电子与离子的碰撞截面. 由此可以统一地描述无数个里德伯态、相应的连续态及自电离态; 以这种通道的方式应该能更好地为惯性约束聚变(ICF)和 X 射线激光研究等重大项目服务, 提供可靠的原子参数. 这里, 我们将重点介绍一下在原子高激发态方面的理论和实验研究.

## 1 原子激发态结构和动力过程的理论研究——相对论性多通道理论

根据量子电动力学, 在库仑规范下, 忽略 Breit 相互作用和其他高阶 QED 修正, 可得到原子中电子所满足的狄拉克方程. 为了求解多电子原子体系的狄拉克方程, 我们可以把哈密顿量  $H$  分成两部分, 即

$$H = H_0 + V, \quad (1)$$

其中

$$H_0 = \sum_i (\alpha_i \cdot p_i + \beta_i mc^2 + V_{\text{SCF}}(r_i)) \quad (2)$$

是相对论性自洽场原子哈密顿量;

$$V = \sum_i \left( -\frac{Ze^2}{r_i} - V_{\text{SCF}}(r_i) \right) + \sum_{i>j} \frac{e^2}{r_{ij}} \quad (3)$$

是残余相互作用.

根据 Dirac-Slater 自洽场方法(局域交换近似), 我们可以得到原子的相对论性自洽势  $V_{\text{SCF}}$ . 在此基础上可求出所有束缚和连续的单电子波函数  $\varphi_a$ , 其中  $a$  对于束缚和连续波函数分别代表量子数  $n\kappa$  和  $\epsilon\kappa$ . 以这组单电子正交完备基函数  $\varphi_a$ , 在一定的电子排布下, 经过反对称化以及适当的角动量耦合, 就可构造出组态波函数  $\Phi_n$  及  $\Phi_j$ , 形成  $N$  电子体系的正交完备基函数. 它们满足下列方程:

$$H_0 \Phi_n = E_n^0 \Phi_n, \quad (4)$$

$$H_0 \Phi_j = \epsilon \Phi_j. \quad (5)$$

任意一个能量本征态波函数  $\Psi(E, i)$  可表示成<sup>[10-12]</sup>

$$\Psi(E, i) = \sum_n A_n(E, i) \Phi_n + \sum_j \int_{\epsilon} B_j(E, i) \Phi_j \cdot d\epsilon, \quad (6)$$

其中下标  $j$  表示各电离通道<sup>[13,14]</sup>. 所谓电离通道是指由一系列的组态波函数, 具有特定的总角动量和宇称以及角动量耦合方式, 其原子实处于特定状态, 而激发电子轨道能量不同. (6) 式中第一项是对特定孤立组态的展开, 第二项

是对各电离通道的求和及电离通道内的所有组态波函数积分,  $\epsilon_c$  为积分下限(传统组态相互作用只考虑了束缚类组态波函数). 在该通道内的束缚式组态波函数可以能量归一的方式进行连续化, 即

$$\Phi_{j\epsilon} = \Phi_{jn} \cdot \left(\frac{dn}{d\epsilon}\right)^{1/2}, \quad (7)$$

其中  $\frac{dn}{d\epsilon}$  为态密度.

将(6)式代入下列多电子体系的狄拉克方程:

$$H\Psi(E, i) = E\Psi(E, i), \quad (8)$$

并分别对  $\Phi_n$  和  $\Phi_{j\epsilon}$  作投影可得以下积分方程:

$$\begin{aligned} & E_n^0 A_n(E, i) + \sum_n V_{n,n} A_n(E, i) \\ & + \sum_j \int_{\epsilon_c} V_{n,j\epsilon} B_{j\epsilon}(E, i) \cdot d\epsilon \\ & = E A_n(E, i), \quad (9) \\ & \sum_n V_{j\epsilon',n} A_n(E, i) + \epsilon' B_{j\epsilon'}(E, i) \\ & + \sum_j \int_{\epsilon_c} V_{j\epsilon',j\epsilon} B_{j\epsilon}(E, i) \cdot d\epsilon \\ & = E B_{j\epsilon'}(E, i), \quad (10) \end{aligned}$$

其中  $V_{n,n} = \langle \Phi_n | V | \Phi_n \rangle$  是束缚-束缚残余相互作用矩阵元,  $V_{n,j\epsilon} = \langle \Phi_n | V | \Phi_{j\epsilon} \rangle$  是束缚-通道残余相互作用矩阵元,  $V_{j\epsilon',j\epsilon} = \langle \Phi_{j\epsilon'} | V | \Phi_{j\epsilon} \rangle$  是通道-通道残余相互作用矩阵元.

根据(10)式,  $B_{j\epsilon'}(E, i)$  可以表示为

$$\begin{aligned} B_{j\epsilon'}(E, i) = & \left[ P \frac{K_{j\epsilon',iE}}{(E - \epsilon')} + \delta_{j\epsilon'} \cdot \delta(\epsilon' - E) \right] \\ & \cdot D(E, i), \quad (11) \end{aligned}$$

其中  $K_{j\epsilon',iE}$  是待求的未知量,  $D(E, i)$  是归一化因子, 它由波函数的无限远渐近行为决定,  $P$  代表主值积分. 根据(9)式, 得

$$A_n(E, i) = \frac{K_{n,iE}}{E - E_n^0} \cdot D(E, i). \quad (12)$$

将(11)和(12)式代入(9)和(10)式, 得到 Lippmann-Schwinger 积分方程:

$$K_{n',iE} = V_{n',iE} + \sum_j \int_{\epsilon_c} \frac{V_{n',j\epsilon} K_{j\epsilon,iE}}{E - \epsilon} \cdot d\epsilon$$

$$+ \sum_n \frac{V_{n',n} K_{n,iE}}{E - E_n^0}, \quad (13)$$

$$\begin{aligned} K_{j\epsilon',iE} = & V_{j\epsilon',iE} + \sum_j \int_{\epsilon_c} \frac{V_{j\epsilon',j\epsilon} K_{j\epsilon,iE}}{E - \epsilon} \cdot d\epsilon \\ & + \sum_n \frac{V_{j\epsilon',n} K_{n,iE}}{E - E_n^0}. \quad (14) \end{aligned}$$

在适当的能量网格点上求解(13)和(14)式, 可得  $K_{j\epsilon',iE}$  和  $K_{n,iE}$ . 在  $r$  很大的区域, 连续态能量本征函数有如下渐近行为:

$$\begin{aligned} \Psi(E, i) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} & [\Phi_{iE} + \sum_j \tilde{\Phi}_{jE} \cdot (-\pi K_{jE,iE})] \\ & \cdot D(E, i) \\ & \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A \left\{ \sum_j \Theta_j [f_j(r, E) C_{ji} \right. \\ & \left. - g_j(r, E) S_{ji}] \cdot D(E, i) \right\}, \quad (15) \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} \Phi_{iE} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} & A \left\{ \Theta_i \cdot [f_i(r, E) \cos(\pi\mu_i^0) \right. \\ & \left. - g_i(r, E) \sin(\pi\mu_i^0)] \right\}, \quad (16) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_{iE} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} & A \left\{ \Theta_i \cdot [-f_i(r, E) \sin(\pi\mu_i^0) \right. \\ & \left. + g_i(r, E) \cos(\pi\mu_i^0)] \right\}, \quad (17) \end{aligned}$$

$$C_{ji} = \delta_{ji} \cos(\pi\mu_j^0) + \pi K_{ji} \sin(\pi\mu_j^0), \quad (18)$$

$$S_{ji} = \delta_{ji} \sin(\pi\mu_j^0) - \pi K_{ji} \cos(\pi\mu_j^0), \quad (19)$$

式中  $K_{ji} = K_{jE,iE}$ ,  $\mathcal{A}$  是反对称化算符,  $\Theta_i$  是原子实波函数和激发电子角向波函数的乘积式波函数,  $f_i$  和  $g_i$  是规则和非规则相对论性库仑波函数<sup>[14]</sup>.  $\mu_i^0$  是第  $i$  电离通道的量子数亏损, 在连续能态即是以  $\pi$  为单位的短程相移. 归一化因子  $D_\alpha(E, i)$  可由本征通道波函数的边界条件决定:

$$\begin{aligned} \Psi_\alpha = & \xrightarrow{r \rightarrow \infty} \sum_i \Psi_{iE}, \\ & \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A \left\{ \sum_i \sum_j \Theta_j [f_j(r, E) C_{ji} \right. \\ & \left. - g_j(r, E) S_{ji}] \cdot D_\alpha(E, i) \right\}, \\ & \xrightarrow{r \rightarrow \infty} A \left\{ \sum_j \Theta_j \cdot U_{j\alpha} [f_j(r, E) \cos(\pi\mu_\alpha) \right. \\ & \left. - g_j(r, E) \sin(\pi\mu_\alpha)] \right\}, \quad (20) \end{aligned}$$

式中  $\alpha$  表示各本征通道,  $\tan(\pi\mu_\alpha)$  和  $U_{j\alpha}$  分别是矩阵  $C^{-1} \cdot S$  的本征值和本征矢量. 也就是

$$\sum_k (C^{-1})_{jk} \cdot S_{ki} = \sum_\alpha U_{j\alpha} \cdot \tan(\pi\mu_\alpha) \cdot U_{i\alpha}, \quad (21)$$

这里  $\mu_\alpha$  和幺正矩阵  $U_{i\alpha}$  分别是多通道量子亏损理论中的本征量子数亏损和转换矩阵. 其短程相互作用散射矩阵可由  $\mu_\alpha, U_{i\alpha}$  求得, 即  $S_{ij}^s = \sum_\alpha U_{i\alpha} \cdot \exp(-i2\pi\mu_\alpha) \cdot U_{j\alpha}$ . 从  $\mu_\alpha, U_{i\alpha}$  出发即可对高里德伯态能级、自离化态及连续态做统一的处理. 当得到  $\mu_\alpha, U_{i\alpha}$  后, 根据

$$\sum_\alpha [U_{i\alpha} \sin\pi(\nu_i + \mu_\alpha)] A_\alpha = 0, \quad (22)$$

对所有的  $i, \nu_i$  满足

$$(I_i - E)\alpha^2 = 1 - \left\{ 1 + \frac{\alpha^2(q+1)^2}{[\sqrt{\kappa^2 - \alpha^2(q+1)^2 + \nu_i - |\kappa|}]^2} \right\}^{-1/2}, \quad (23)$$

( $I_i$  是对应于第  $i$  个电离通道的电离阈值,  $q$  为

电离度), 我们可以求得无数个里德伯能级. 对于连续能量, 即电子-原子离子实的碰撞过程, 其散射截面可由散射矩阵  $S_{ij}^c = \exp(i\sigma_i^c) [\sum_\alpha U_{i\alpha} e^{i2\pi\mu_\alpha} U_{j\alpha}] \exp(i\sigma_j^c)$  求得, 其中  $\sigma_i^c, \sigma_j^c$  为库仑相移.

根据上面的理论计算方法, 我们以 Ne 原子为检验的例子, 计算了其  $J^\pi = 0^+$  等对称块的量子数亏损和转移矩阵 ( $J$  为总角动量,  $\pi$  为总宇称), 我们计算的本征量子数亏损为 0.676 和 0.800, 与由精确光谱拟合而得到的 0.679, 0.807<sup>[16]</sup> 吻合得很好. 进一步, 我们计算了  $J^\pi = 1^+$  对称块的量子数亏损, 进而求得激发态能级和 Lande  $g$  因子 (可准解析地求得所有任意给定主量子数  $n$  的里德伯能级和  $g$  因子), 列于表 1. 计算的能级结构和 Lande  $g$  因子与实验吻合得很好. 同时, 计算的 Lande  $g$  因子也完全揭示了由  $3p[1\frac{1}{2}]_1$  的 0.669 到  $4p[1\frac{1}{2}]_1$  的 0.974 的变化过程. 具体的讨论见文献[18].

表 1 NeI 在  $J^\pi = 1^+$  时的激发态能级 ( $\text{cm}^{-1}$ ) 和朗道  $g$  因子

| 谱项                    | $E_{\text{th}}$ | $E_{\text{exp}}[17]$ | $g_{\text{th}}$ | $g_{\text{exp}}[17]$ | 谱项                    | $E_{\text{th}}$ | $E_{\text{exp}}[17]$ | $g_{\text{th}}$ | $g_{\text{exp}}[17]$ |
|-----------------------|-----------------|----------------------|-----------------|----------------------|-----------------------|-----------------|----------------------|-----------------|----------------------|
| $3p[1\frac{1}{2}]_1$  | 148787          | 148260               | 1.991           | 1.984                | $5p[1\frac{1}{2}]_1$  | 167520          | 167451               | 1.852           | -                    |
| $3p[1\frac{1}{2}]_1$  | 150555          | 150124               | 0.654           | 0.669                | $5p[1\frac{1}{2}]_1$  | 167694          | 167642               | 1.030           | -                    |
| $3p'[1\frac{1}{2}]_1$ | 151243          | 150774               | 0.983           | 0.999                | $5p'[1\frac{1}{2}]_1$ | 168409          | 168357               | 0.621           | -                    |
| $3p'[1\frac{1}{2}]_1$ | 151505          | 151040               | 1.359           | 1.340                | $5p'[1\frac{1}{2}]_1$ | 168418          | 168361               | 1.510           | -                    |
| $4p[1\frac{1}{2}]_1$  | 162680          | 162520               | 1.928           | 1.929                | $6p[1\frac{1}{2}]_1$  | 169785          | 169750               | 1.794           | -                    |
| $4p[1\frac{1}{2}]_1$  | 163137          | 163015               | 0.975           | 0.974                | $6p[1\frac{1}{2}]_1$  | 169869          | 169841               | 1.049           | -                    |
| $4p'[1\frac{1}{2}]_1$ | 163779          | 163659               | 0.676           | 0.685                | $6p'[1\frac{1}{2}]_1$ | 170611          | 170587               | 1.544           | -                    |
| $4p'[1\frac{1}{2}]_1$ | 163838          | 163710               | 1.425           | 1.397                | $6p'[1\frac{1}{2}]_1$ | 170614          | 170580               | 0.641           | -                    |

\*  $np[K]_J$  表示  $2p^5(^2P^0_{1/2})np[K]_J$ ;  $np'[K]_J$  表示  $2p^5(^2P^0_{3/2})np'[K]_J$ .

原子方面发展的这套多通道理论计算方法可以推广到分子和团簇等量子多体问题的研究中.

## 2 原子双高里德伯态的实验研究

图 1 所示为 Yb 原子及  $\text{Yb}^+$  离子的能级

图, 由于双高里德伯态已处于第二电离域附近, 需要多光子过程 (即五光子共振激发), 才可能用激光将其从基态  $6s^20S$  激发到所关心的双高里德伯态  $NLnl$  ( $N$  和  $n$  为两个激发电子的主量子数值,  $L$  和  $l$  为其轨道角动量). 对 Yb 的问题,  $NLnl$  为  $NPnd$ . 具体的激发途径为: 首先由  $\lambda_1, \lambda_2$  两束光将 Yb 原子激发到  $6snd^{1,3}D_2$  态

上, 然后由  $\lambda_3, \lambda_4$  两束光将激发态的  $\text{Yb}^*$  原子激发到  $7snd$  自电离态上, 最后由  $\lambda_5$  这束光将  $\text{Yb}$  原子激发到双高里德伯态  $NPnd$  ( $\text{Yb}^{**}$ ). 这种双高里德伯态会很快自电离为  $\text{Yb}^+$  的高激发态, 经场电离后, 由飞行时间质谱(TOF)测

量  $\text{Yb}^{2+}$  离子信号. 在实验中, 若直接采用场电离的方式, 由于第三、四束激光已将  $\text{Yb}$  原子激发到自电离态, 他们会很快自电离为  $\text{Yb}^+$  (见图1), 再吸收  $\lambda_3, \lambda_4, \lambda_5$  而激发到高里德伯态  $\text{Yb}^{**}$  而被场电离为  $\text{Yb}^{++}$  离子, 构成实验中非

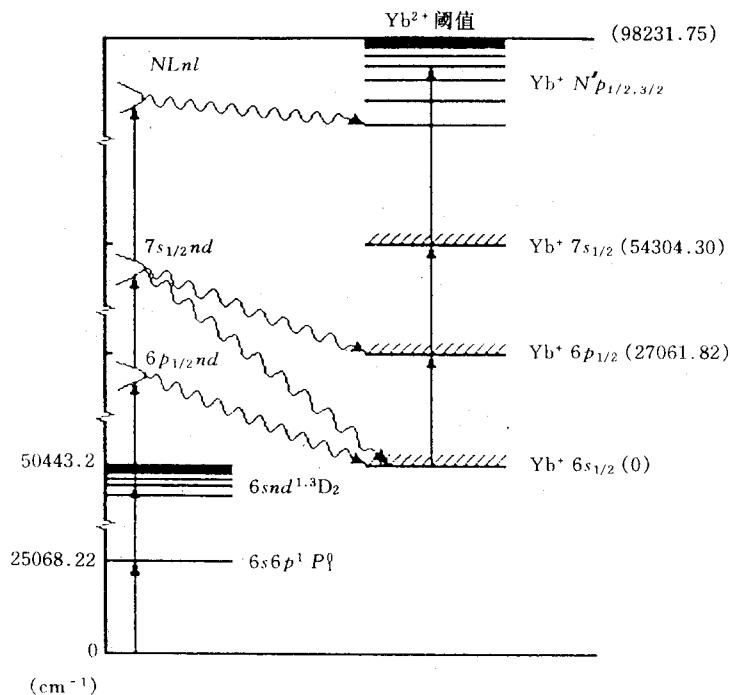


图1 Yb 原子及  $\text{Yb}^+$  离子的能级图

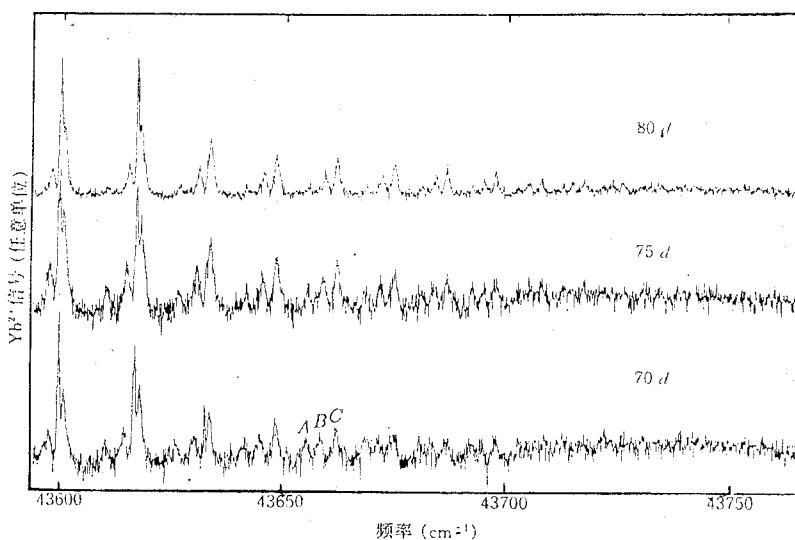


图2 Yb 原子双高里德伯态激发能谱

常强的离子本底. 因此, 采用一步场电离的方法, 很难在  $\text{Yb}^{2+}$  离子信号中分清来自  $\text{Yb}^{+*}$  的贡献或来自  $\text{Yb}^{**}$  自电离后的  $\text{Yb}^{+}$  的高里德伯态的贡献.  $\text{Yb}^{+}$  基态吸收  $\lambda_3, \lambda_4, \lambda_5$ , 激发到  $\text{Yb}^{+}$  的里德伯态 ( $\text{Yb}^{+*}$ ) 能级比  $\text{Yb}$  双高里德伯态  $NPnd$  ( $\text{Yb}^{**}$ ) 的能级高, 因此可以在共振区先加一适当脉冲电场, 其强度  $E$  正好将高于  $NPnd$  能级的  $\text{Yb}^{+}$  的里德伯态场电离, 而低于  $NPnd$  能级的  $\text{Yb}^{+}$  的里德伯态不被场电离. 这样由  $\text{Yb}^{+}$  激发的高里德伯态被脉冲场电离为  $\text{Yb}^{++}$ , 而由  $NPnd$  自电离为  $\text{Yb}^{+}$  的里德伯态不被脉冲场电离. 同时由双高里德伯态  $NPnd$  ( $\text{Yb}^{**}$ ) 自电离而产生的  $\text{Yb}^{+}$  和由高里德伯态  $\text{Yb}^{+*}$  场电离后产生的  $\text{Yb}^{++}$  离子都在脉冲场中加速而飞离共振区, 进入一个强的稳恒电场区. 在稳恒电场中,  $\text{Yb}^{+}$  的里德伯态被场电离为  $\text{Yb}^{++}$  离子. 在共振区和稳恒电场区中产生的  $\text{Yb}^{++}$  离子在稳恒电场区加速进入飞行区. 由高里德伯态  $\text{Yb}^{+*}$  场电离后产生的  $\text{Yb}^{++}$  离子在脉冲场中等到的加速度大, 因而先到达离子探测器(多通道板). 用这种五光子共振激发, 脉冲电场-稳恒电场顺序电离的方法可以消除很强的离子本底, 而得到清晰的双高里德伯态的激发谱, 图 2 展示了  $\text{Yb}$   $NPnd$  的一个实验谱, 其中  $nd$  分别为  $70d, 75d$  和  $80d$ , 而调谐  $\lambda_5$  ( $NP$  从  $40P$  开始). 图中  $A, B, C$  三个峰是由四束激光将  $\text{Yb}$  原子激发到  $7s70d$ , 从单电子模型来看, 第五束光将  $7s$  电子激发到  $44P$  而形成  $44P70d$  双高里德伯态, 但由于两个激发电子存在关联效应, 因而形成三个峰. 这种双高里德伯态的实验为理论上研究具有长程相互作用的三体问题提供了很好的实验数据. 在实验过程中, 同时测量了  $\text{Yb}^{+}$  里德伯态能级结构并拟合得到其电离阈值. 实验所得的  $\text{Yb}^{+}$  的电离阈值为  $98231.75(20)\text{cm}^{-1}$ , 较以前的实验测量值  $98269(50)\text{cm}^{-1}$ [19] 提高了两个量级.

最后补充说明一下, 前面我们介绍了相对论性多通道理论, 它突破了传统组态相互作用

的制约, 将无限个组态化为有限个通道来统一处理. 这套多通道理论计算方法是可以推广到分子乃至团簇等量子多体问题的研究中. 而双高里德伯激发态涉及的是一个无限通道的问题. 因此, 需要建立新的理论方法, 处理这种无限通道的问题. 这将是今后理论工作的一个重点.

## 参 考 文 献

- [1] G. H. Sha, J. B. He, B. Jiang et al., *J. Chem. Phys.*, (1995).
- [2] L. M. Wang, X. C. Li and N. Q. Lou, 3rd Amia, Conference on Laser Technigrcer for State-selected and State-to-State Chemistry, Los Angles, U. S. A, Jan. 1994.
- [3] Z. Gao, Q. H. Zhu, F. A. Kong et al., *J. Chem. Phys.*, **101** - 11(1994).
- [4] Q. S. Zhu, A. Comparguce, J. Vetterhoffer et al., *J. Chem. Phys.*, **99**(1993), 2359.
- [5] Q. S. Zhu, A. Compargue and F. Stoeckel, *Spectrochimica Acta*, **50A**(1994), 663.
- [6] Z. D. Liu, M. X. Zao, C. J. Wu et al., *Chem. Phys. Lett.*, **194**(1992), 440.
- [7] W. Huang, X. Y. Xu, C. B. Xu et al., *Phys. Rev. A*, **49** (1994), R653.
- [8] 邹宇、全晓民、李家明, 物理学报, **44**(1995), 50.
- [9] 刘磊、全晓民、李家明, 物理学报, **44**(1995).
- [10] A. Dalgarno, T. G. Heil, S. E. Bulter, *Astrophys. J.*, **245** (1981), 793.
- [11] Jia-Ming Li, Ying-Jian Wu, R. H. Pratt, *Phys. Rev. A*, **40** (1989), 3036.
- [12] 巫英坚、李家明, 物理学报, **38**(1989), 1056.
- [13] U. Fano, *Phys. Rev.*, **124**(1961), 1866.
- [14] C. M. Lee (Jia-Ming Li), W. R. Johnson, *Phys. Rev. A*, **22**(1980), 975.
- [15] M. J. Seaton, *Rep. Prog. Phys.*, **46**(1983), 167.
- [16] A. F. Starace, *J. Phys. B*, **6**(1973), 76.
- [17] C. E. Moore, Atomic Energy Levels, Vol. 1, NSRDS-NBS 35, Nation Bureau Standards 1971.
- [18] W. Huang, Y. Zou, X. M. Tong and J. M. Li, *Phys. Rev. A*, (1995).
- [19] W. C. Martin, R. Zalubas, and L. Hagan, Atomic Energy Levels—the Rare - Earth Elements NSRDS - NBS 60 (US Government Printing Office, Washington, 1978).