

# 绝对测量 He 原子快电子碰撞双激发的电子关联动力学\*

刘小井<sup>1</sup> 朱林繁<sup>1</sup> 苑震生<sup>1</sup> 徐克尊<sup>1,†</sup> 李家明<sup>2,3</sup>

(1 中国科学技术大学近代物理系 中国科学院选键化学重点实验室 合肥 230027)

(2 上海交通大学物理系 上海 200030)

(3 清华大学物理系 原子分子纳米科学中心 北京 100084)

**摘要** 应用高分辨快电子能量损失谱仪,绝对测量了 He 原子各种光学允许和光学禁戒的双电子激发过程的动量转移依赖特性,报道了作为动量转移函数的以内禀关联量子数  $K, T$  和  $A$  表征的电子态  ${}_2(0,1)_{2}^{+}1P^{\circ}$ ,  ${}_2(1,0)_{2}^{+}1S^{\circ}$  和  ${}_2(1,0)_{2}^{+}1D^{\circ}$  的 Fano 参数  $q, f_a, \rho^2, f$  和  $S$ ,同时对  ${}_2(-1,0)_{2}^{+}1S^{\circ}$  和  ${}_2(1,0)_{2}^{+}$  的波函数作出定性检验.从而在实验上通过激发动力学过程研究了电子关联效应.

**关键词** He 原子, 双激发态, 电子关联

## Analysis of the electron correlation dynamics in the double excitation of helium by fast electron impact

LIU Xiao-Jing<sup>1</sup> ZHU Lin-Fan<sup>1</sup> YUAN Zhen-Sheng<sup>1</sup> XU Ke-Zun<sup>1,†</sup> LI Jia-Ming<sup>2,3</sup>

(1 Laboratory of Bond-Selective Chemistry, Department of Modern Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230027, China)

(2 Department of Physics, Shanghai Jiao-Tong University, Shanghai 200030, China)

(3 Department of Physics, Center of Atomic and Molecular Nanosciences, Tsinghua University, Beijing 100084, China)

**Abstract** The momentum transfer dependence of fundamental double excitation processes of helium is studied by absolute measurements using an angular resolved fast-electron energy loss spectrometer with high energy resolution. The dynamical correlations are expressed in terms of the internal correlation quantum numbers,  $K$ ,  $T$ , and  $A$ . The Fano profile parameters  $q, f_a, \rho^2, f$ , and  $S$  of doubly excited states  ${}_2(0,1)_{2}^{+}1P^{\circ}$ ,  ${}_2(1,0)_{2}^{+}1S^{\circ}$  and  ${}_2(1,0)_{2}^{+}1D^{\circ}$  are reported as functions of the momentum transfer  $K^2$ . A qualitative analysis of the states of  ${}_2(-1,0)_{2}^{+}1S^{\circ}$  and  ${}_2(1,0)_{2}^{+}1S^{\circ}$  is given.

**Key words** Helium, double excitation, electron correlation

电子关联效应普遍存在于多电子体系中. 对于较少电子的多体体系,理论上,人们可以用各种数值方法解薛定谔方程,来研究电子关联效应;而对于较多电子的原子、分子和团簇这样的多体体系,人们不得不引入各种近似的模型给出电子关联效应. He 原子作为最简单的范例,一直是理论家和实验家广泛关注的对象<sup>[1-3]</sup>. 处于氦原子双激发态的两个电子,由于距离原子核都比较远,使得原子核-电子相互作用减弱,而电子-电子间相互作用突出,因而很难仅用常规量子数  $N$  (内电子主量子

数)、 $n$  (外电子主量子数)、 $L, S$  和  $\pi$  来表征氦原子双激发态能级结构,为此人们又引入超球坐标内关联量子数  $K, T$  和  $A$  来表征双激发态氦原子中的电子关联行为<sup>[4-6]</sup>,谱项写作  ${}_n(K, T)_N^{A, 2S+1}L^{\pi}$ . 到目前为止,人们主要通过测量光激发或后续的衰变过程研究这些关联行为<sup>[7-9]</sup>,理论上也普遍给出的是这

\* 国家自然科学基金(批准号:10134010,10004010,10176013)资助项目,中国科学技术大学青年基金资助项目  
2003-12-15 收到初稿 2004-02-02 修回

† 通讯联系人. E-mail: xukz@ustc.edu.cn

方面的结果<sup>[10,11]</sup>. 此外用离子碰撞方法也对此有所研究<sup>[12]</sup>.

角分辨快电子能量损失谱方法作为对光吸收激发的一种重要补充, 虽然其能量分辨不如激光光谱方法, 但是能提供对激发过程更全面的描述<sup>[13]</sup>, 特别是激发过程的动量转移依赖特性和提供研究非偶极跃迁的可能性. 但是由于在 He 双激发能区不但激发截面低, 而且要求的能量分辨难于达到, 因此由电子-原子碰撞激发而带来的动力学关联效应, 不管是实验还是理论上, 人们了解的都很少<sup>[14,15]</sup>. 在以前的实验测量中, 能量分辨低于 0.5 eV, 这个数值远大于所研究共振峰的自然宽度, 因而难于对激发过程做出准确的描述.

实验所用的是我们发展的加位置灵敏探测器的高分辨快电子多道能量损失谱仪<sup>[16,17]</sup> (如图 1 所示), 由电子枪产生电子束, 经过能量单色器后, 在作用室与靶气体碰撞, 散射后的电子通过能量分析器后, 由位置灵敏探测器测量. 分析器以碰撞点为中心转动, 测量从不同角度散射出来的电子, 对应不同动量转移的激发过程. 图 2 给出 He 的 0°—6° 的广义振子强度密度谱, 可以看到它们由系列镶嵌在连续基底上的 Fano 共振<sup>[18]</sup> 构成. 为展示  $2(0, 1)_2^+ 1P^o$  与  $3(0, 1)_2^+ 1P^o$  附近的共振结构, 图 3 给出了扣除连续电离基底后的 0°、2°、4° 和 6° 的广义振子强度密度谱. 可以看出  $n(0, 1)_2^+ 1P^o$  的光学允许特性与  $2_3(1, 0)_2^+ 1S^e$ 、 $2_3(1, 0)_2^+ 1D^e$  的光学禁戒特性.

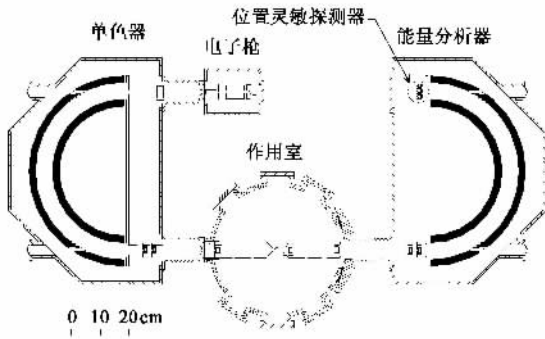


图 1 高分辨快电子能量损失谱仪示意图

考虑到仪器函数影响, 用 Fano 线型<sup>[18]</sup> 最小二乘法拟和图 2 中的曲线, 得到双激发态  $2(0, 1)_2^+ 1P^o$ 、 $2(1, 0)_2^+ 1S^e$  与  $2(1, 0)_2^+ 1D^e$  的 Fano 线型参数, 这些参数显示于图 4. 首先是  $2(0, 1)_2^+ 1P^o$ , 它的强度随动量转移变大而减小, 这是典型的偶极允许跃迁行为. 波函数干涉始终使得低能端相干增强而高能端相干相消, 因而  $q$  是负数. 另外  $q$  的数值

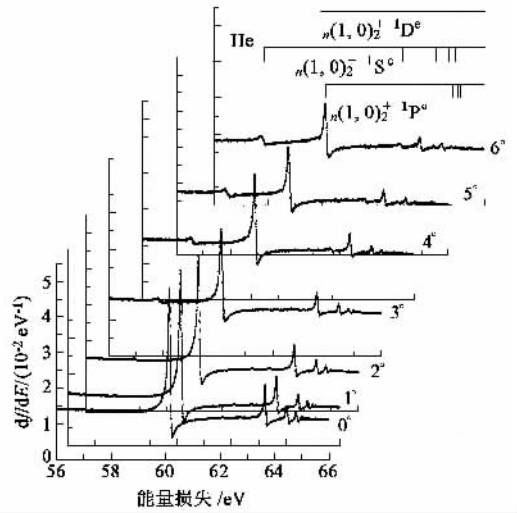


图 2 1°—6° 的绝对广义振子强度密度谱

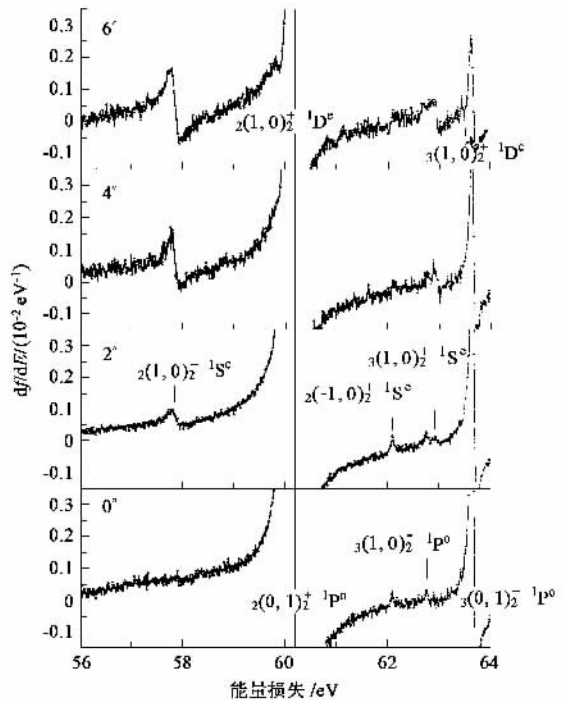


图 3 扣除连续基底后的广义振子强度密度

随动量转移变大而减小, 共振态跃迁幅度比相关连续态跃迁幅度下降得快. 由于总连续振子强度中禁戒成分上升的缘故, 因而  $\rho^2$  减小. 属于同一 Rydberg 系列的共振态  $2_{-5}(0, 1)_2^+ 1P^o$  表现出相似的行为. 然后是  $2(1, 0)_2^+ 1S^e$ , 它的  $q$  是负的(高能端相消),  $f_s f_a$  和  $\rho^2$  随动量转移变大而上升, 表现出电单极跃迁的行为. 在实验误差范围内,  $q$  变化很小. 最后是  $2(1, 0)_2^+ 1D^e$ , 由于与  $2(0, 1)_2^+ 1P^o$  严重重叠, 并且强度要弱得多, 因此误差比较大.  $q$  值在  $-0.37 \pm 0.18$  范围内缓慢变化, 表现为窗共振的形

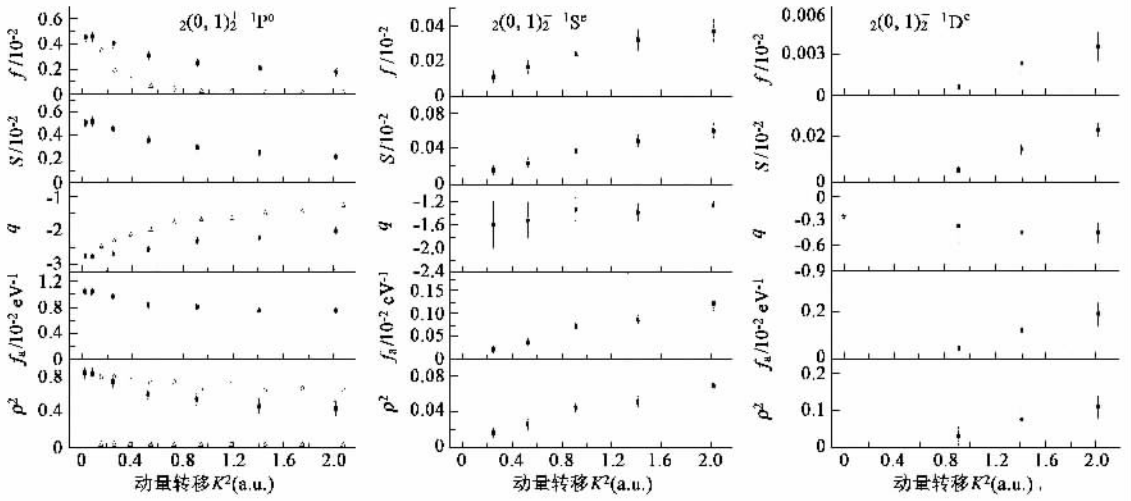


图4  $2(0,1)2^+1P^0$ 、 $2(0,1)2^+1S^0$  与  $2(0,1)2^+1D^0$  双激发态的 Fano 线型参数随动量转移的变化 ( $S, f$  表征共振强度,  $q$  为束缚态与连续态跃迁振幅之比,  $f_a$  为相关连续态振子强度密度,  $\rho^2$  为  $f_a$  与总连续态振子强度密度之比. 带误差显示的是本次实验结果)

式,与最近电偶极-四极干涉实验<sup>[10]</sup>测量的  $-0.25$  相符合. 值得注意的是 Krässig 认为“由于所有的电多极的影响,电子碰撞方法不能惟一地给出  $2(1,0)2^+1D^0$  的  $q$  值”,在我们的实验条件下,更高的多极矩的贡献是很小的.  $f, S, f_a$  和  $\rho^2$  随动量转移变大而上升,表现出电四极跃迁的行为. 可以看出电单极跃迁  $2(1,0)2^+1S^0$  强度大于电四极跃迁  $2(1,0)2^+1D^0$  强度.

下面我们讨论  $2(1,0)2^+1S^0$  与  $2(-1,0)2^+1S^0$  强度变化的区别,以期阐明关联量子数  $K, T$  和  $A$  在跃迁动力学中的作用. 按照 Fermi 黄金规则,跃迁强度正比于跃迁矩阵元平方  $|2(K, T)1^2S^0|T|1(0,0)1^1S^0|^2$ . 在较大的散射角度(如  $4^\circ$ ),跃迁矩阵元主要来自内区 ( $R \sim 1$  a.u.) 的贡献,而在小散射角度(如  $0^\circ$ ),跃迁矩阵元主要来自外区 ( $R \sim 5$  a.u.) 的贡献. 图5给出相关电子态在超球坐标下的波函数密度图<sup>[6]</sup>. 可以看到,在小角度下,  $2(-1,0)2^+1S^0$  的矩阵元要大一些,而大角度下情况正好相反,与图3显示相一致. 图3显示  $2(-1,0)2^+1S^0$  的自然宽度比  $2(1,0)2^+1S^0$  窄,这是由于  $2(-1,0)2^+1S^0$  主要来自于电子组态  $(2s)^2$ , 而  $2(1,0)2^+1S^0$  主要来自于电子组态  $(2p)^2$ . 图3还表明  $2(0,1)2^+1P^0$  的始终强于  $2(1,0)2^+1P^0$ , 以前在光吸收谱中只能观察到动量转移为零的情形.

这一次实验测量了各种光学允许和光学禁戒的双电子激发过程的动量转移依赖特性,定量地给出

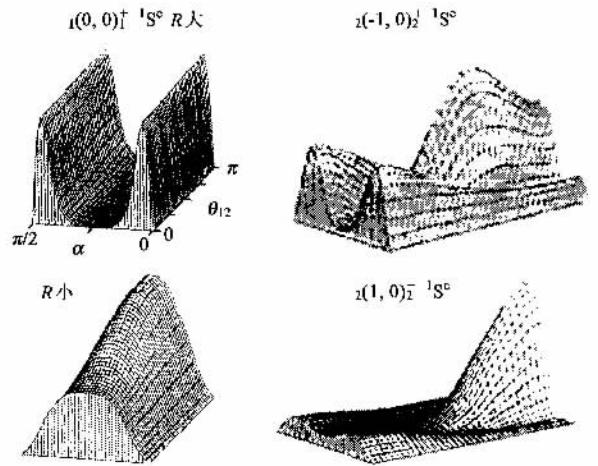


图5 超球坐标中的波函数密度

各种跃迁参数,并对双激发态的波函数做出了定性检验. 实验通过激发动力学过程研究了电子关联,是对以往 He 双电子激发过程研究的重要补充,为研究原子分子中电子关联作用机制提供了新的实验手段.

参考文献

[ 1 ] Madden R P, Codling K. Phys. Rev. Lett., 1963, 10 : 516  
 [ 2 ] Cooper J W, Fano U, Prats F. Phys. Rev. Lett., 1963, 10 : 518  
 [ 3 ] Tanner G, Richter K, Rost J M. Rev. Mod. Phys., 2000, 72 : 497  
 [ 4 ] Macek J. J. Phys. B, 1968, 1 : 831  
 [ 5 ] Lin C D. Phys. Rev. A, 1984, 29 : 1019; Adv. At. Mol. Phys., 1986, 22 : 77  
 [ 6 ] Lin C D. Phys. Rev. A, 1982, 25 : 76

- [ 7 ] Domke M , Schulz K , Remmers G *et al.* Phys. Rev. A ,1996 , 53 :424
- [ 8 ] Gorczyca T W , Rubensson J E , Sätthe C *et al.* Phys. Rev. Lett. ,2000 ,85 :1202
- [ 9 ] Krässig B , Kanter E P , Southworth S H *et al.* S. ,Phys. Rev. Lett. ,2002 ,88 :203002
- [ 10 ] Yan J , Qu Y Z , VoKy L *et al.* Phys. Rev. A ,1998 ,57 :997
- [ 11 ] Rost J M , Schulz K , Domke M *et al.* J. Phys. B ,1997 ,30 :4663
- [ 12 ] Htwe W T , Vajnai T , Barnhart M *et al.* Phys. Rev. Lett. , 1994 ,73 :1348
- [ 13 ] Inokuti M. Rev. Mod. Phys. 1971 ,43 :297
- [ 14 ] Fan X W , Leung K T. J. Phys. B ,2001 ,34 :811
- [ 15 ] Liu X J , Zhu L F , Yuan Z S *et al.* Phys. Rev. Lett. ,2003 , 91 :193203 -1
- [ 16 ] Xu K Z , Feng R F , Wu S L *et al.* Phys. Rev. A ,1996 ,53 :3081
- [ 17 ] Liu X J , Zhu L F , Jiang X M *et al.* Rev. Sci. Instrum. , 2001 ,72 :3357
- [ 18 ] Fano U. Phys. Rev. ,1961 ,124 :1866 ;Phys. Rev. ,1965 , A64 :3655

## · 物理新闻和动态 ·

### 双脉冲星的发现

来自英国、澳大利亚、意大利和美国的天文学家首次发现了双脉冲星。这一发现可用于检验广义相对论,并使研究脉冲星的磁气圈成为可能(有关论文见 Lyne G *et al.* Scienceexpress 2004 ,1094645 )。

脉冲星是密度极高的中子星,比地球的质量大一百万倍,而直径仅为几十公里。脉冲星处于极快的旋转中,同时像灯塔一样,向空间发射出无线电波。当无线电波扫过地球时,射电望远镜将探测到一系列有规律的脉冲,由此对脉冲星进行探测。双脉冲星是一个脉冲星围绕另一个脉冲星做轨道运动的双星系统,对双脉冲星发射的无线电波做精确的时间测定可以用来检验爱因斯坦的广义相对论。

关于发现双脉冲星的故事始于 2003 年 12 月。曼彻斯特

大学 Jodrell Bank 天文台的 Andrew Lyne 及其合作者用 64m 的 Parkes 射电望远镜发现了脉冲星 J0737 - 3039A。他们发现这颗脉冲星在围绕另一颗中子星,以 23ms 的周期做轨道运动( Nature 2003 ,426 :531 )。现在用 Jodrell Bank 的 Parkes 望远镜和 76m Lovell 射电望远镜进行的新的测量显示,这颗中子星也是脉冲星,周期为 2.77s。

研究组已经能够测量这两颗脉冲星的质量比值。广义相对论预言,这两颗脉冲星会缓慢地做螺旋运动而彼此接近,其运动还具有“摆动”的特征。

此外,通过研究周期为毫秒的脉冲星经过其伙伴后面时辐射的情况可以详细地探查第二颗脉冲星的外层空间或磁气圈。

( 树华 编译自 Physics Web News ,9 January 2004 )

### 使小行星轨道偏离的非引力作用

美国和捷克的天文学家在一颗小行星中第一次观察到一种微小的非引力作用,称作 Yarkovsky 效应。这个研究组还通过测量一个小行星的质量赢得了另一项第一。研究结果有助于将来更好的跟踪小行星的轨道( Schesley *et al.* Science , 2003 ,302 :1739 )。

Yarkovsky 效应的基本思想是,小行星的表面在白天受到太阳加热,晚上冷却下来。这意味着小行星从它的“下午面”比相反的一面发射更多的热量。因而“下午面”发生的反冲也较大,总的效应是一种非引力的微弱力作用在这个小行星上。这种力引起的加速度是非常小的,但是,在几百万年的时间内,累积的效应能够变得非常大,致使小行星偏离围绕太阳的自然轨道,把小行星从介于火星与木星之间的“主传送带”向内推向地球。

加利福尼亚喷气推进实验室( JPL )的 Steven Chesley 和他在 JPL、布拉格的 Charles 大学、波多黎各的 Arecibo 天文台

以及加利福尼亚大学洛杉矶分校的同事们研究了 6489 号小行星“ Golevka ”的轨道在 12 年的时间内如何改变。他们分析了 Arecibo 和加州 Goldstone 天文台的望远镜获取的雷达数据,发现自从 1991 年以来 Yarkovsky 效应已使 Golevka 的轨道改变了约 15km。他们还计算了这个小行星的直径为 530m,重约 2.1 亿吨,平均密度为  $2.7g/cm^3$ 。

“这样小的小行星的质量以前从没有测量过。通过质量测量使我们能够确定它的密度,从而获得了解其内部结构的线索。对所研究的这颗小行星来说,它具有严重断裂的内部结构。”Chesley 这样告诉 Phys. Web。

美国与捷克的合作组下一步计划研究其他的小行星,希望这种新方法最终成为跟踪小行星轨道的常规方法。天文学家们还认为,测量 Yarkovsky 加速度是在地球上确定直径小于 1km 的小行星的质量和密度的惟一方法。

( 树华 编译自 Physics Web News ,5 December 2003 )