

原子分子物理学研究进展

Progress in the Research of Atomic and Molecular Physics

屈一至

(中国科学院物理研究所, 博士生 北京 100080)

李家明

(中国科学院物理研究所, 中国科学院院士 北京 100080)

原子分子物理学是研究原子、分子的结构、性质、相互作用和运动的规律, 提供原子、分子信息和数据的一门学科。它在物理学中是一门发展历史较长的分支学科, 又是一门不断发展、涉及面广、很有生命力的分支学科。原子、分子物理学起源于19世纪对太阳光谱和气体放电的研究, 经过本世纪20年代第一次发展高峰后, 它已经成为一门独立的物理学分支学科。到四五十年代, 由于发展了射频波段的波谱学, 测量精度大为提高, 为创立和检验量子电动力学、相对论和各种基本对称性提供了实验基础。从70年代到现在, 各国都围绕能源、材料、环境与安全等问题制定了一系列发展高新技术的计划, 如我国的“863计划”等。推动这些计划又都迫切需要大量的原子分子物理的方法和数据, 遂使原子分子物理学进入了又一个高峰时期。由于原子或分子(包括团簇)是物质结构的一种基本层次, 因此, 在各类科学研究的领域里, 凡是物质中的原子或分子的特性起重要作用时, 就需要原子、分子物理学, 它是其它学科向微观深入发展的桥梁。这样, 与原子、分子物理学有密切关系的领域也就不断地扩展, 在物理学内有光谱学、凝聚态物理、等离子体物理、空间物理、核物理及粒子物理等; 在物理学外有化学、天文学和分子生物学等。这些学科之间是相互促进和相互补充的。由于原子分子物理学的涉及面广, 所以它是应用性很广的学科之一, 是很多应用项目的基础。

一、学科研究的3个前沿

原子分子物理学研究的范围是以量子理论为基础探讨物质的性质, 它以结构、碰撞过程和环境效应作为前沿。这些前沿之间存在着相互渗透的关系。目前这些前沿分别由数个生长点引导着向前扩展。

1. 结构方面

原子、分子的量子结构是原子分子物理学的基本问题。自从量子理论萌芽以来, 有关原子的电子能级、分子的电子能级、振动能级和转动能级已有大量的研究, 对于从基态算起的一些能级已有清楚的理解。物质的量子理论和其他学科, 如量子化学、固体的能带理论方面有较密切的联系。在理论方面, 对于这种具有长程相互作用的多体量子问题, 计算方法和计算技术均在不断地发展。在实验方面, 能谱测量方法(激光光谱、X光谱、电子能谱等)的分辨率不断地提高。在对能级结构理解的研究方面, 理论和实验紧密地结合, 同时又相互促进, 在定量上和细致程度上均获得不断的提高, 因此这方面仍然是一个重要的活跃前沿。在这一前沿方面有以下4个生长点。

(1) **激发态结构** 原子或分子的激发态包含着无限多个束缚态(即Rydberg态)、无限多个自电离态和对应的连续态, 这种由多态组成的能谱结构是极为丰富的。同时, 这些连续态也描述了它们对应的碰撞过程。因此, 这个生长点(激发态的结构)和另一个前沿(碰撞过程)之间存在着极密切的关系。另外, 处于激发态(主量子数为 n)的原子, 其体积随着激发成 n° 增加, 该原子周围的环境对高激发态的能级结构有重要的影响。因此, 激发态结构成为这个前沿的最重要的生长点之一, 同时和其它两个前沿(碰撞过程和环境效应)存在着密切的关系, 相互促进, 共同向前发展。在理论方面, 多通道量子亏损理论提供了统一和定量地描述高激发态结构的方法。在实验方面, 由于激光光谱的发展、同步辐射光谱的使用、高分辨X光谱、高温等离子体光谱的发展和探测技术的进步(例如对光子、电子、原子、离子的探头和电子测量系统等), 使得极为丰富的激发态能谱能从实验上被测量出来, 从而使理论和实验可以紧密地结合在一起。激发态结构的研究成果, 还为一些技术的研究发展, 例如短波长激光器的研制、激光同位素分离技术的发展、受控热核聚

变的研究和特殊监测技术的发展等,作出了重要的贡献。原子激发态结构和分子激发态结构分别有其独特之处,下面作进一步说明。

第一,原子的激发态 由于激光光谱技术和原子束技术的发展,原子的激发态,尤其是高原子序原子的激发态结构的研究正在迅速地发展。例如利用多光子激光光谱,克服了传统吸收光谱中选择定则的限制,可探测传统吸收光谱无法探测的激发态结构;利用双光子光谱,经巧妙地安排可以进行无多普勒加宽的光谱测量,可进一步探讨激发态的超精密结构和同位素移位。结合激光和原子束的特点,可以对原子激发态结构进行精确的、清楚的实验测量,用来检验理论的可靠性,总结和掌握丰富的激发态能谱数据。近年来实现的高激发双里德堡态—行星原子引起了较多的关注,它对研究电子关联效应有重要的作用,对激发态的研究工作也已进行。同时,利用电子束技术和高分辨光谱技术,对负离子的总能量、激发态寿命、亚稳态等也进行了一系列研究和测定。

激发态的研究和各种有关碰撞过程的研究,将对激光同位素分离新技术的建立、X射线激光研究、受控聚变研究中的诊断等方面作出重要贡献。例如,惯性约束聚变研究中的高功率激光装置、磁约束聚变研究中的各种放电装置等各类高功率的能量装置,在释放能量时将产生高能量密度的等离子体,它包含各种离化度的激发态原子,这是原子物理和等离子物理相互渗透的区域。在磁约束装置所产生的核聚变燃料等离子体中,只要含约1/100的高原子序(≥ 26)杂质就将完全破坏聚变点火的可能性。又如,恒星的表面(如太阳表面)也是由各种离化态原子组成的高温等离子体,行星大气外层(如地球的电离层)也存在各种离化态的原子,因此这方面的研究将为其它学科(如空间物理、天文学等)提供不可缺少的物理数据。

第二,分子的激发态 除了电子激发以外,还有其它类型的激发(分子转动、振动和解离),激发态能级结构更为复杂。应用分子束的“喷嘴”效应,可使分子的转动和振动温度降低,避免分子转动带和振动带形成波尔兹曼热分布,从而简化其吸收谱,有利于进行分子激发态能谱的测量和分析。激光技术和分子束技术的结合,不但激起了激光诱导化学反应研究的热潮,而且还使激发态研究同碰撞过程、化学反应动力学发生密切的关系。它的研究成果可以直接对激光同位素分离(分子方案)新技术的建立作出贡献。由于气体激光介质中存在各种激发态的分子,分子激发态的研究还将为新型气体激光器的发展提供不可缺少的物理数据。另外,星际空间和行星大气层中也都存在各种激发态的分子,这方面的研究将为空间物理、天文学等学科提

供服务。

(2)原子团簇结构 由于量子理论的发展,人们对于稳定的原子集团(分子)的基态结构已有较深刻的理解。目前研究的热点将是系统地探讨原子团簇。它们可能不是稳定的分子,而只是自由基或集团而已。因此,从其原子个数和几何形状方面来说,原子团簇的范围是非常广泛的。这个生长点的研究方向将是以量子理论为基础,探索和总结原子团簇结合的规律及其性质变化的规律,即研究团簇的物理化学性质与组成它的原子数目及几何构形的关系,以及团簇如何发展成为宏观固体。目前,实验上可用超饱和的蒸汽制备原子团簇,具体地说,将蒸汽通过毛细管向真空中绝热膨胀,在超声喷射过程中可凝聚形成原子团簇。在实验中可观察到的氙原子团簇的原子数已达到180个左右。因此,可以通过理论和实验相结合来探讨各种原子团簇的性质。原子的激发态结构如何随着团簇的原子个数和几何形状而变化,这方面的研究将和激发态结构的研究发生密切的关系,同时也和另一个前沿方面(环境的效应)相互交叉,因为当团簇中原子个数或几何形状变化时,对其中某一原子而言,则是处于各种不同的周围环境。这方面研究的成果也可能发展成为新的材料监测技术。结合各种激光光谱技术的发展(如激光喇曼光谱、相干反斯托克—喇曼光谱、红外吸收光谱等),可以探测原子团簇中原子的相互运动,研究原子团簇的结构,包括自由基的结构。这些自由基可能是有关化学反应过程中的瞬间复合体,因此这方面的研究又将和量子化学、化学反应动力学相互渗透。原子团簇的研究将可能促进一些特殊新材料的研制,从而和表面物理、凝聚态物理等学科发生关系。

(3)超精细能级结构 由于原子核与原子尺度的电磁场相互作用,同位素效应和高阶量子电动力学效应而产生。实验上观测这类超精细结构涉及多种超精细能谱技术,例如波谱技术、超精细光谱技术和激光光谱技术等。人类通过理解有关超精细结构的物理,可以把原子当作“微观探头”,监测各种状况下物质的性质。因此,这个生长点和环境效应关系密切,也和其它分支学科(凝聚态物理)以及其它学科(如化学、分子生物学等)相互渗透。同时,对原子时标、激光同位素分离等应用项目也能够产生重要作用。

(4)“奇异”结构 指原子或分子中包含 μ 、 π 或反质子 $\bar{p}$ 等粒子时的结构。有关技术的发展促进了原子“奇异”结构的研究;反之,研究工作的深入也将对有关技术提出更严格的要求,又促进了技术的发展。目前,由于重离子加速器技术的发展,可以把两个高原子序 Z 的离子(如铀)加速而克服相互之间的库仑排斥势,形成瞬时的超高原子序($2Z$)的

“原子核”，从而引发人们对这种奇异的超高原子序原子的电子结构的兴趣。具体地说，考虑了“原子核”的非点效应后， $1S_{1/2}$ 电子的束缚能将大于两倍的电子静止质能($2m_0c^2$)，嵌入 Dirac 理论电子负能连续能域中并自动发射正电子。它涉及真空在 10^{-12} 厘米尺寸内的结构，这是强场下量子电动力学中的一个基本问题。由于反质子贮存环技术的进步，将能提供高通量的反质子束，从实验上将可以观察到奇异的“ $\bar{p}$ ”原子的结构，这将引起人们对这类奇异原子的研究。它将涉及在 10^{-12} 厘米尺寸内的各类相互作用，同时包含电磁相互作用和强相互作用的影响，这可能是原子物理和粒子物理相互促进的又一个例子。此外，专门产生高流强介子加速器系统(即所谓 π 介子工厂)能提供从实验上探讨含 π^- 介子或含 μ^- 介子的奇异原子的条件，这将促进原子物理和核物理形成相互渗透。 μ^- 介子如何在氦氖混合液中慢化、被俘获、最后形成 $(D\mu^-T)$ 分子，对于这些“ μ^- 化学反应”的研究，将和碰撞过程的研究形成交叉区域。有关这些反应的速率对于判断 μ^- 介子催化受控聚变新方案的可行性，将具有重要意义。

2. 碰撞过程

在介绍结构研究时，已说明了碰撞过程的研究必须建立在结构研究的基础上。碰撞过程研究的范围非常广，它包含各种类型的过程，如两体碰撞过程、三体碰撞过程直至多体碰撞过程。就两体碰撞过程而言，其组合就非常多：入射的粒子可能是光子、电子、原子、离子或分子，碰撞的对象则是在第一个前沿中探讨的原子或分子体系。这个前沿的研究方向是：在理论上，建立和发展可靠的理论计算方法，以解决这类多体量子动力学问题；实验上，则是建立和发展交叉束碰撞实验方法，以精确地测量各种碰撞过程的截面。然后，通过理论和实验相结合，总结和掌握各种碰撞过程的物理数据。这些碰撞过程涉及“电离辐射”(即由光子、电子或离子携带而使物质电离的能量形式)将能量淀积到物质中的各种微观机理。它的研究和很多分支学科有密切关系，例如辐射物理、空间物理、天文物理、化学动力学、凝聚态物理和等离子体物理等。在应用方面，碰撞过程的研究能为一些重大新技术的研究，例如核能泵激气体激光、受控热核聚变、激光同位素分离技术的发展等，提供不可缺少的物理数据。由于碰撞研究涉及面广，同时在应用方面又有其重要的意义，所以目前世界上对碰撞过程的研究是原子分子物理学研究的主攻方向。下面我们将进一步说明这方面研究的两个生长点：完全碰撞实验和量子碰撞理论。

(1)“完全”碰撞实验 指碰撞前入射粒子和靶粒子的量子态能够精确地被选定，碰撞后产物的量子态也能够精确地被监测。在这样的情况下进行碰

撞过程截面、微分截面的测量，称为“态—态间”的实验，它是碰撞研究的实验方向。这类完全碰撞实验的实现，主要是因为交叉束技术、激光技术和电子探测技术的进步。“完全”碰撞实验的发展也将不断对这些技术提出更严格的要求，促进有关技术的发展。它提供的精确的实验数据，可以检验各种碰撞理论的可靠性，为人类理解碰撞过程作出不可缺少的贡献。

(2)量子碰撞理论 有关碰撞过程的种类几乎是不可数的，因此各种片断的实验数据和各种近似理论计算非常多。目前理论研究的方向是：建立和发展量子碰撞理论方法，定量计算各种碰撞截面，统一地阐明各种有关过程的内在关系，并应用这些关系检验各种不同的碰撞过程的截面数据，以便完全掌握碰撞过程的物理数据。这个生长点不但同“完全”碰撞实验有密切的关系，而且同激发态结构的研究也相互渗透。

3. 环境效应

前面探讨的原子分子物理体系可能处于各种不同的外在条件下，如外加电磁场，周围存在着其它的原子、分子或离子等。这些外在的不同状况对所探讨的原子、分子体系的物理、化学性质的影响称为环境效应。这是一个多学科互相渗透的区域，它的研究将对理解物质的性质、发展新技术作出不可缺少的贡献。下面简单介绍这个前沿的两个生长点：强场效应和趋向稠密效应。

(1)强场效应 指外加的静电、静磁或交变电磁场非常强，已不能作为微扰时产生的影响。对处于基态的氢原子而言，静电场需大于或等于 $E_c = 2.7 \times 10^9$ 伏特/厘米(目前无法在实验室中实现)，这时基态氢原子是不稳定的，将很快地被电场电离，静磁场强则需大于或等于 $B_c = 2.35 \times 10^9$ 高斯，这时基态氢原子将成为雪茄形，其电离阈值将大为增加，当然不可能在实验室中观察到这类原子，它们只能在中子星上存在。强静磁场问题，在理论上是一个不可分离变量的单体量子问题，是一个简单又有意义的物理数学问题。目前，由于激光技术和原子束技术的进步，已可以在实验室中观察到处于高度激发态的原子(即 Rydberg 原子，其主量子数 $n \approx 10^3$)，当静电场强为 E_c/n^4 ，或静磁场强为 B_c/n^3 时，将产生强场效应。在强外场中，原子的结构和形状都发生很大的变化，例如在零场电离阈值附近，一直延伸到正能区的能谱出现共振结构，这类强场效应的实验已成为现实。交变电磁场的强场效应，也将可能在实验室中清楚地观察到。强场效应的理论研究将能够得到实验上的验证和启发，而获得生命力。这方面的研究和激发态结构的研究存在着非常密切的关系，它还和有关新技术的发展形成相互促进的关系。

(2) **趋向稠密效应** 指周围原子密度变高而引起的物质性质变化。这方面的研究和其它分支学科,如高压物理、凝聚态物理、等离子体物理等存在着相互渗透的关系。在探索人类未来能源——受控热核聚变研究(惯性约束方案)中,将会不断地对高密度、部分离化的等离子体的物质性质提出愈来愈精确的要求,在高密度、部分离化时的等离子体中,各种离化态原子处于高稠密的状况下。目前对这种状况的物质性质的理解尚很肤浅。它将是原子物理、凝聚态物理和等离子体物理互相促进、共同发展的一个重要方面。

二、对重大新技术发展的作用

原子分子物理学是一门基础学科,它的任务就是探讨该学科范围内的物质性质,建立相应的物理数据库和有关的新技术,从而对重大新型技术的研究和发展项目作出不可缺少的贡献。当然,这些重大新型技术的研究和发展,一般所涉及学科较多,所接触的技术领域较广。在这类大型研究计划中,每一个阶段都要在装置上进行各种物理实验(由尽可能齐备的诊断测量所组成),原子、分子物理所发展的新技术成为这些诊断测量中重要的部分,同时在该研究项目中必须有理论模拟。在理论模拟工作中,原子、分子物理数据成为不可缺少的重要组成部分。

1. 新型气体激光器的研究

利用核能作泵浦的气体激光器,是产生高能激光的一个重要发展方向。在这类研究项目中,除了分阶段进行并建立各阶段的实验装置外,还必须有一支理论模拟队伍。在理论模拟工作中,原子、分子物理将作出不可缺少的贡献。在理论和实验密切结合下,才能选出最佳设计方案,完成核能泵浦气体激光器的研制。目前美国已编辑了一些有关原子、分子的物理数据。

2. 激光同位素分离技术的发展

用激光同位素分离铀²³⁵核裂变燃料的主要原因是经济上的。按预测指标,利用激光分离铀²³⁵的大规模生产所需的投资要比其它方法(如气体扩散)低,因此将以较低的成本满足未来人类对核燃料的需要。激光同位素分离技术除了能生产核燃料外,还能生产其它同位素,这将扩大同位素的应用范围。具有同位素分离潜力的原子分子光过程的种类是非常多的,因此如何汇编如此大量的基本物理数据,然后利用这些知识,选出最佳方案就成为原子分子物理研究的一个课题。除了原子分子物理外,成功的分离技术发展还需要材料蒸气源技术、

产品收集技术和高效激光器研究等方面的支持。

3. 未来能源——受控热核聚变研究

受控热核聚变研究目前分为两种主要方案:惯性约束和磁约束。它们将在较长时期内相互竞赛,最后只能用事实比较其成败。惯性约束方案还涉及国防方面,因此各国在此方案上所投入的科研经费是难以估算的。例如,美国 Lawrence Livermore 实验室是世界上进行惯性约束——激光聚变研究最大的科学实验基地,专门长期研究物质原子辐射系数和物态方程(原子物理学将起重要作用)。他们的科研成果直接提供给约 30~40 人组成的理论模拟课题组应用。理论模拟工作对靶的设计和未来预测是必须的。

关于磁约束方案,1991 年在欧洲的 JET 装置和 1993 年在美国 TFTR 装置上成功地进行了氘—氚反应的实验。按目前的计划,演示性的聚变堆将于 2025 年建成,而商业聚变堆将于 2040 年建成。关于磁约束的研究,在 70 年代中期进行了严格论证,在论证中明确指出了原子物理的重要性。在现阶段的实验装置上,很多有害的杂质效应都涉及高原子序离化态的原子,对未来较大型的装置也将存在同样的问题。因此,有关离化态原子的物理和这些高原子序杂质对等离子体的平衡以及能量耗损的影响,是非常重要的物理问题。这些问题的解决与否,将影响到整个磁约束研究的成败。此外,等离子体与第一层壁相互作用而产生杂质的现象,也涉及到原子物理学。

4. 磁流体发电机的发展

磁流体发电机将是高效率的发电设备。它涉及许多领域,如材料科学、等离子体物理和原子分子物理等。如何高效率地产生离化态的工作气体(由电子、离子、原子和分子组成),以及这些部分离化的工作气体的各种输运过程,都涉及各种原子、分子碰撞过程。因此原子分子物理研究将为磁流体发电机的研究发展作出重要贡献。

5. 新型监测技术的发展

与原子分子有关的技术,例如激光技术和电子测量技术,都能够发展成为精确的监测技术,适用于各种不同场合。例如,研究提高内燃机效率的动态监测系统,宇航中特殊监测系统,材料分析中使用的光电子能谱分析技术、俄歇电子谱分析技术、离子质谱分析技术和 X 荧光分析技术等。这些新型的监测技术都是在原子分子物理的研究工作中发展出来的。

总之,原子分子物理学是一门发展历史较长、涉及面广、富有生命力的学科,它的应用性很广,是很多应用项目的基础。 (责任编辑 肖庆山)