

# 原子分子物理的研究前沿和某些最新进展

徐克尊

(中国科学技术大学)

2005.6.5

# 内容

导言、原子分子物理的新高潮

一、高激发态结构

二、碰撞

三、原子分子的能壳分辨波函数

四、团簇

五、精密测量

六、奇特原子分子

七、强场效应

八、单原子分子操纵和探测识别

九、玻色-爱因斯坦凝聚和原子激射器

# 导言、 原子分子物理发展的新高潮

- 原子分子物理发展的第一个高潮
- 原子分子物理发展的第二个高潮

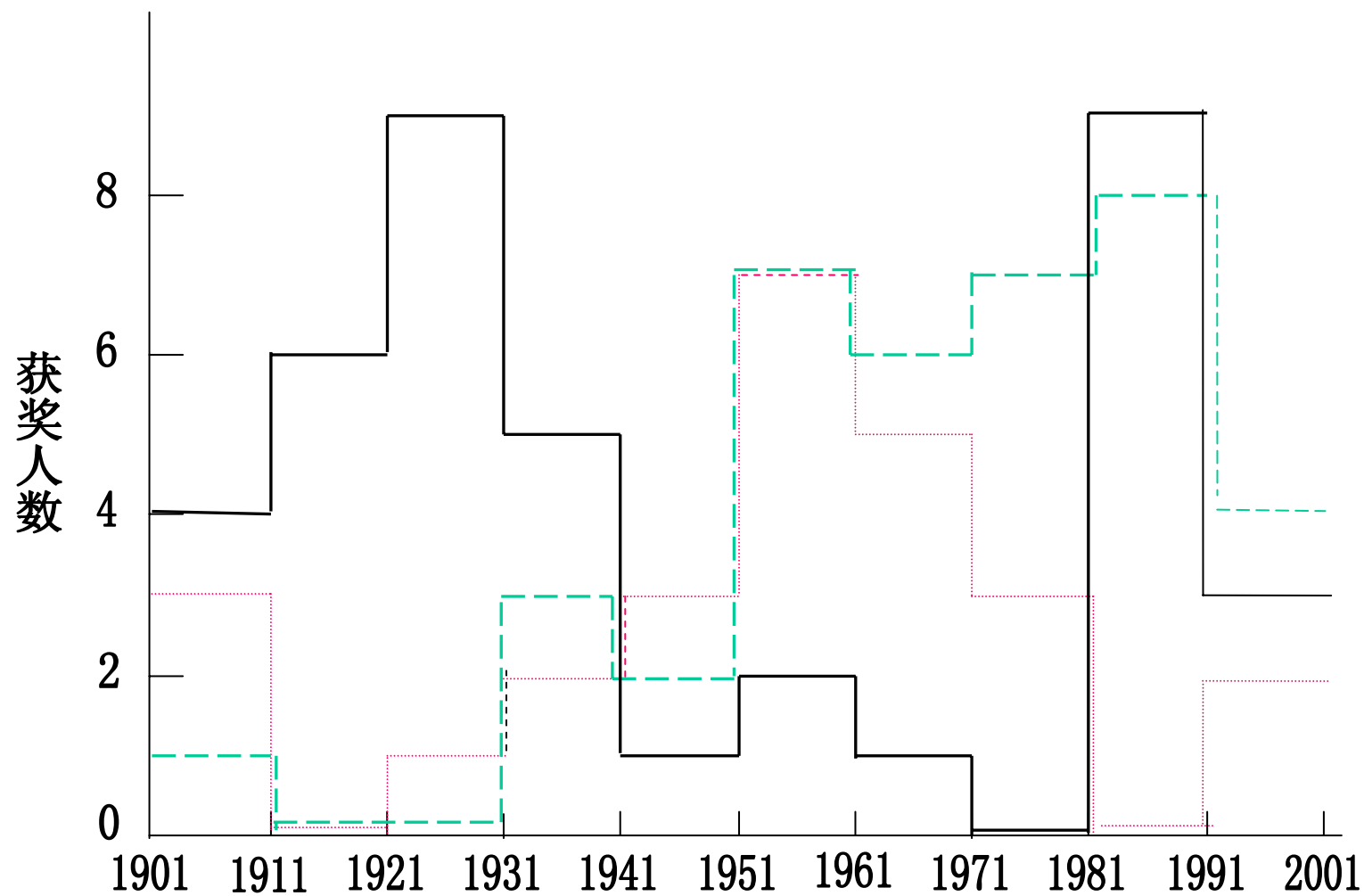


图1.1.1 每十年的诺贝尔奖获得者人数

—— 原子分子物理      ..... 核物理      - - - - 粒子物理

# 原子分子物理学发展的第一个高潮---

原子分子物理学建立时期（从二十世纪初到三十年代后半期）

- 实验: 电子发现: 1906年: J.J.Thomson, 1923年Millikan 获诺贝尔物理奖  
α 粒子散射: 1911年: Rutherford 获诺贝尔化学奖  
电子与原子碰撞: 1925年: Franck和Hertz 获诺贝尔物理奖  
电子衍射: 1937年: Davisson和G.P.Thomson 获诺贝尔物理奖  
X射线: 1901年Rontgen发现、1917年Barkla（特征）获诺贝尔物理奖  
分子束磁共振: 1943年: Stern获诺贝尔物理奖  
能级结构和反常磁矩精密测量: 1955年Lamb和Kusen 获诺贝尔物理奖
- 理论: 量子论: 1922年, N.Bohr获诺贝尔物理奖  
量子力学: 1932年Helsenberg, 1933年Schrodinger和Dirac  
1945年Pauli, 1954年Born 获诺贝尔物理奖  
量子电动力学: 1965年Feynman,Schwinger和Tomonaga获诺贝尔物理奖  
量子化学: 获诺贝尔化学奖
- ★ 由于科学（原子核物理学开始建立）和社会学（二次大战）原因，原子物理学研究走向停顿。

# 原子分子物理学发展的第二个高潮---

## 原子分子物理学发展的新高潮(从二十世纪七十年代到现在)

- 激光光谱学：1981年Bloembergen和Schawlow 获诺贝尔物理奖
- 光电子能谱学：1981年，Siegbahn 获诺贝尔物理奖
- 同步辐射光谱学：八十年代以来，发展专用（二、三和四代）同步辐射光源
- 团簇物理化学：1996年，Kroto, Smalley和Curl 获诺贝尔化学奖
- 超精细能级结构测量：1989年，Ramsey, Dehmelt和Paul 获诺贝尔物理奖
- 原子分子测控：
  - 扫描隧道显微镜：1986年Binnig和Rohrer 获诺贝尔物理奖
  - 激光冷却和囚禁原子：1997年朱隶文, Phillips和Tannoudji 获诺贝尔物理奖
  - 实现玻色-爱因斯坦凝聚：2001年Cornell, Wieman和Ketterle 获诺贝尔物理奖
- 分子反应动力学：1991年，李远哲获诺贝尔化学奖
- 量子化学：2000年，密度泛函理论获诺贝尔化学奖

# 原子分子物理发展的第二个高潮

- 形成第二个高潮的原因

(1) 原子分子普遍存在于天体、星际空间、地球大气、等离子体、生物体和化学反应中；宏观物质的性质决定于原子分子的组成和结构，宏观学科的研究正深入到原子分子层次，原子分子物理是发展交叉学科最有利最重要的学科。

(2) 当前世界和平与发展是主流，经济发展 $\leftrightarrow$ 科学技术，一些生产技术部门和高科技产业的发展无论是理论上还是实验手段上很多需要立足于原子分子物理。

(3) 军事上尖端武器的研制已不是对核数据而是对原子分子数据提出大量要求。

(4) 核物理和粒子物理人才和实验方法和技术转移到原子分子物理后，使原子分子物理得到很大发展。

- 原子分子物理研究对于培养和训练人才来说是最全面而有效的

从理论上，原子分子物理是较为基础的并和许多学科有较多联系的学科；

从技术上，涉及真空技术、数据获取和处理技术、各种谱仪和探测技术、各种电子学、计算机等。因此，原子分子物理研究生很容易适应其它专业工作。

# 一、高激发态结构

原子分子的价电子和内电子激发态有很多种→

- 里德伯态→

- 自电离态→

分子超激发态

双电子激发态

- 近阈结构和扩展X射线吸收精细结构→



原子：

内壳层能级

价壳层占据能级

未占据的激发能级

高激发态（里德伯态、自电离态、双电子激发态、近阈结构等）

电离

分子：

内壳层能级（芯能级）

价壳层占据能级

未占据的激发能级

高激发态（里德伯态、超激发态包括自电离态与双电子激发态、  
近阈结构等）

电离

解离（包括预解离）

转动

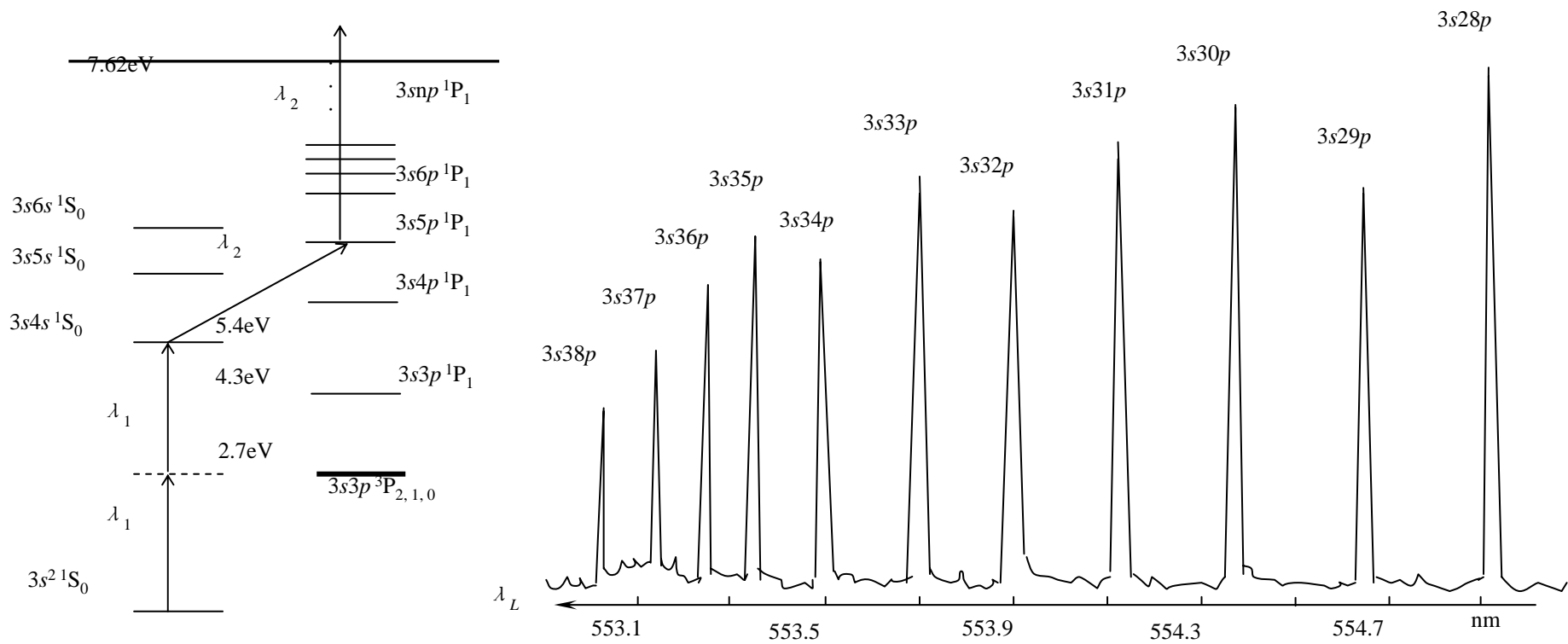
振动



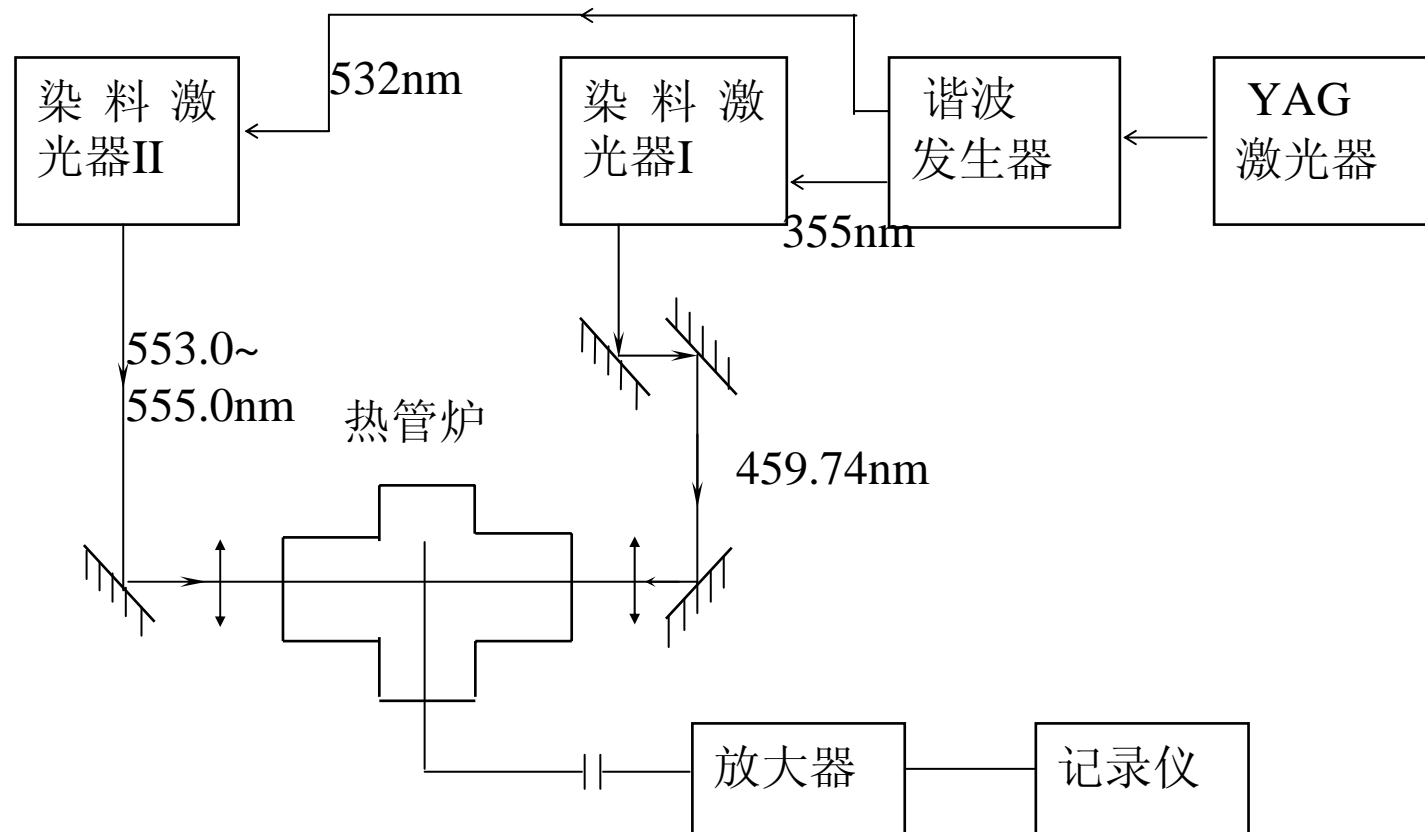
里德伯态是原子或分子中电子（通常是一个）跃迁到主量子数 $n$ 较高的轨道上所形成的高激发电子态，这个处于外层的电子离原子实（原子核加其它电子）很远，可以近似地看作一个电子在一个电荷为 $+e$ 的库仑场中运动，即为类氢原子，只是中心体的质量可能大于质子质量。

里德伯原子具有一系列的独特性质。它的尺度很大，因此，碰撞截面也大，寿命很长，近似与 $n^3$ 成正比。

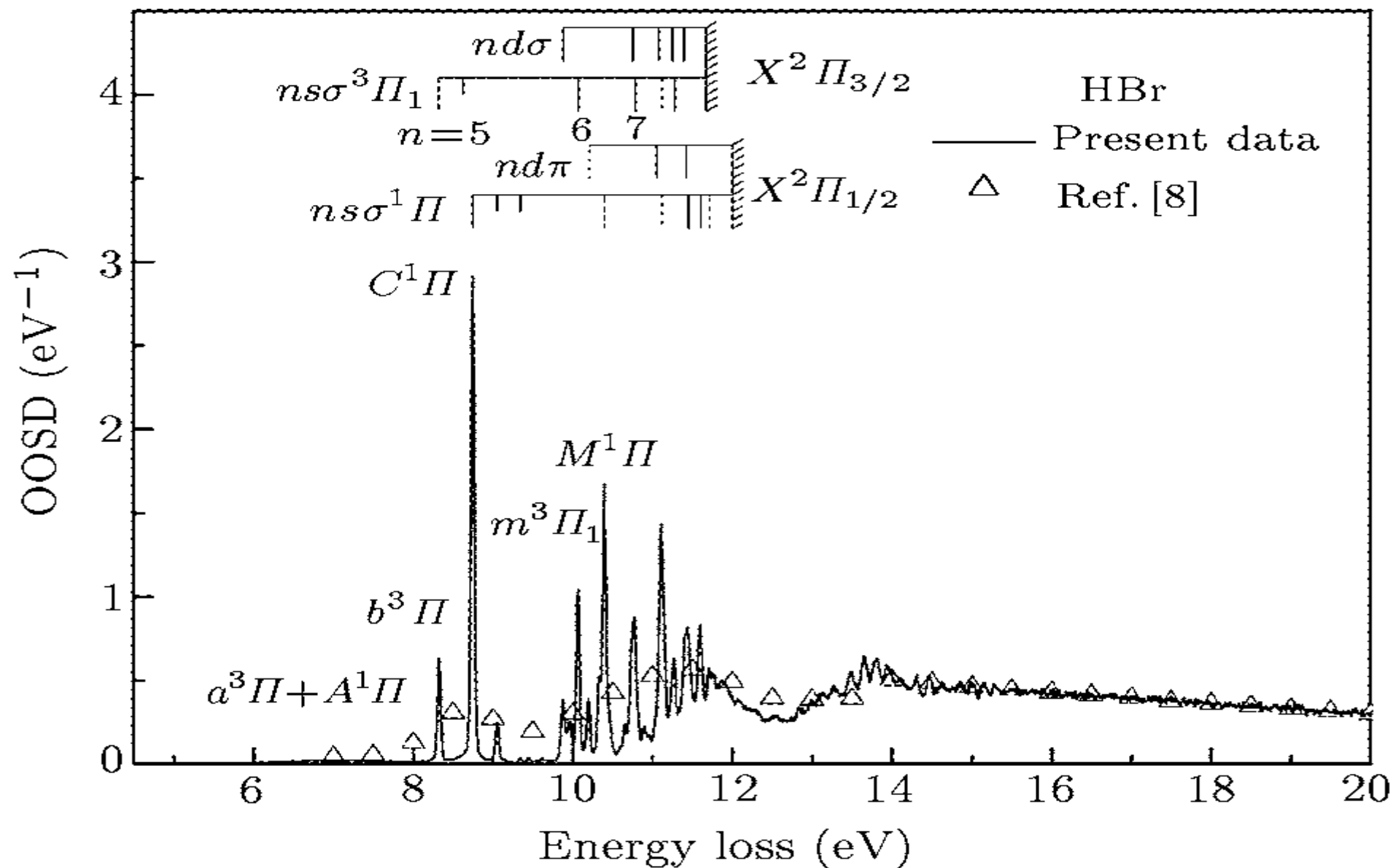
分子的情况比较复杂。里德伯态是价电子被激发到远离分子中心的轨道上，并围绕整个分子中心运动，可以近似看作在一个电荷为 $+e$ 的库仑场中运动，这又属于原子型的里德伯轨道，具有的能量可以用上述里德伯原子能量公式描述。



镁原子的高里德伯态激光光谱和相关能级



两束激光分步多光子共振电离方法测镁原子的高里德伯态



里德伯态  $n(6,7,8)s\sigma^3\Pi_1$



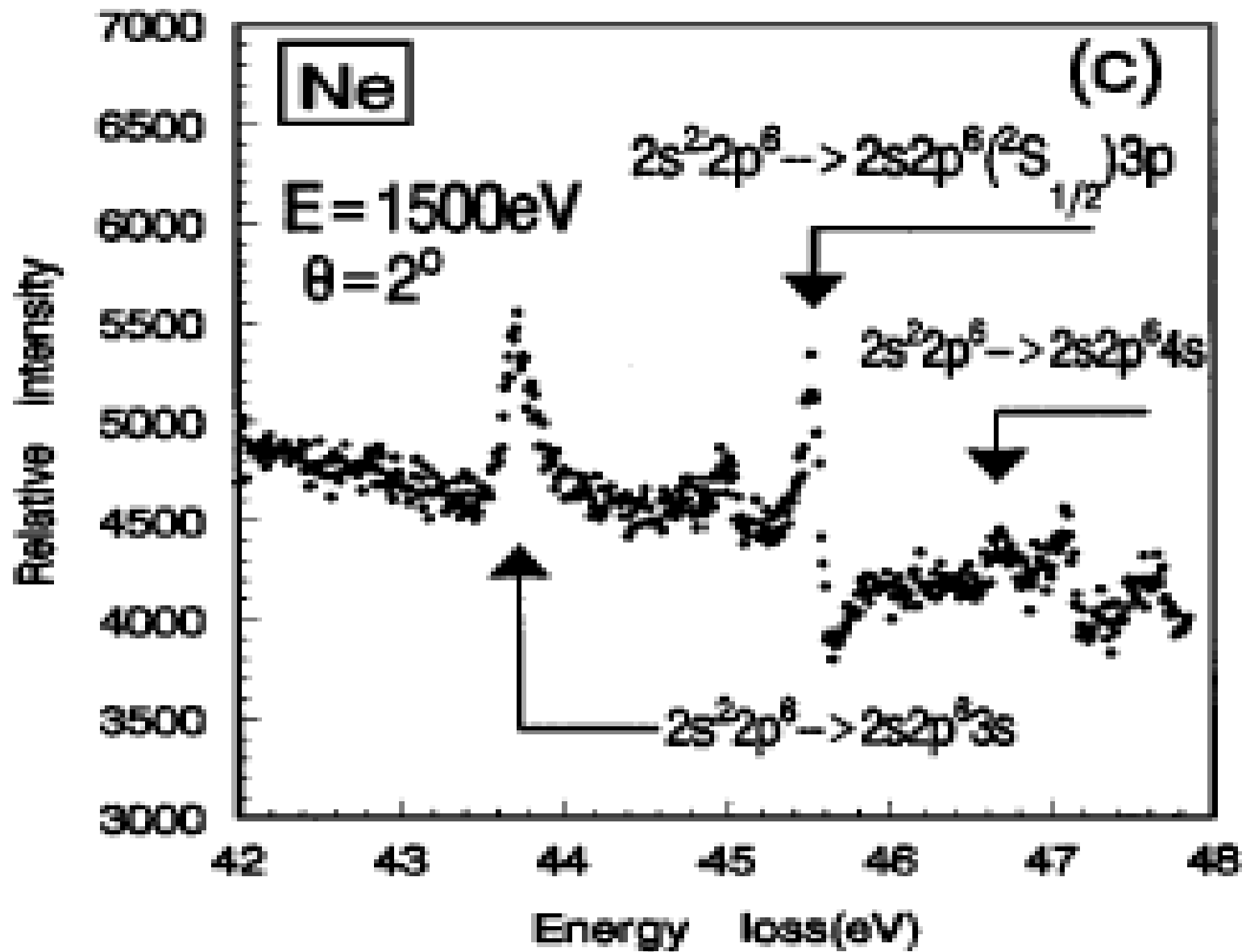
自电离态是一种电子束缚激发态，它的激发能超过第一电离能，因而不是一个稳态，它可以通过放出一个正能量电子到达离子的低激发态或基态，或者放出一个光子到低激发态，或者分子解离成两个离子或中性的原子或分子。

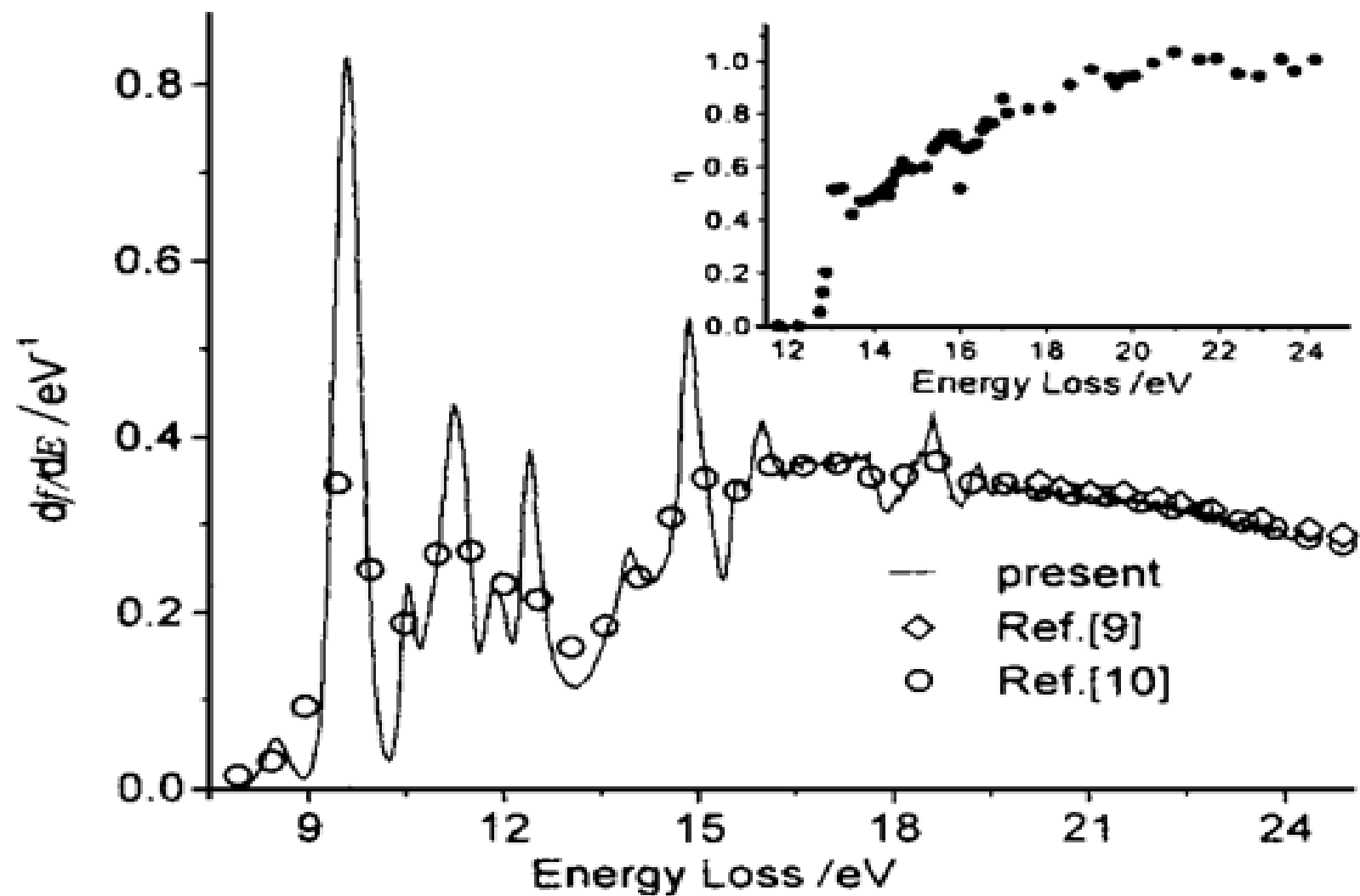
最常见的一种自电离态是原子的一个内壳层电子特别是内价电子被激发到外层轨道形成里德伯态，它的激发能超过最外层价电子的电离能。 →

分子的自电离态还包括解离过程，常又叫超激发态。 →

另一类自电离态是双电子激发态。 →

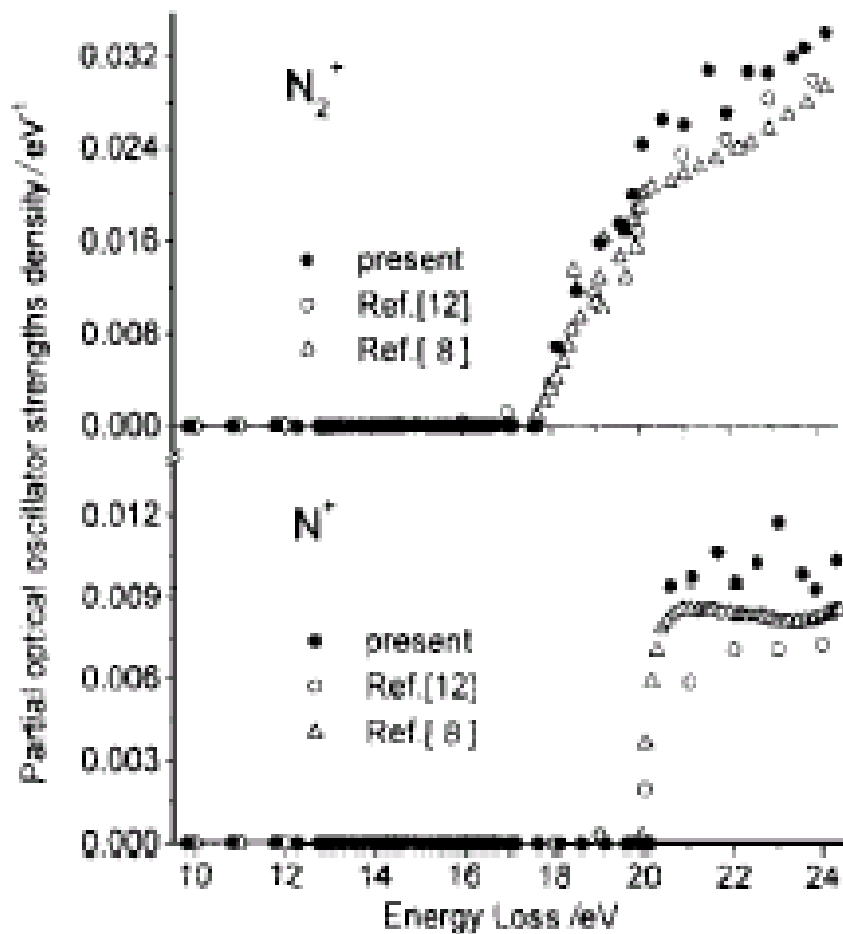
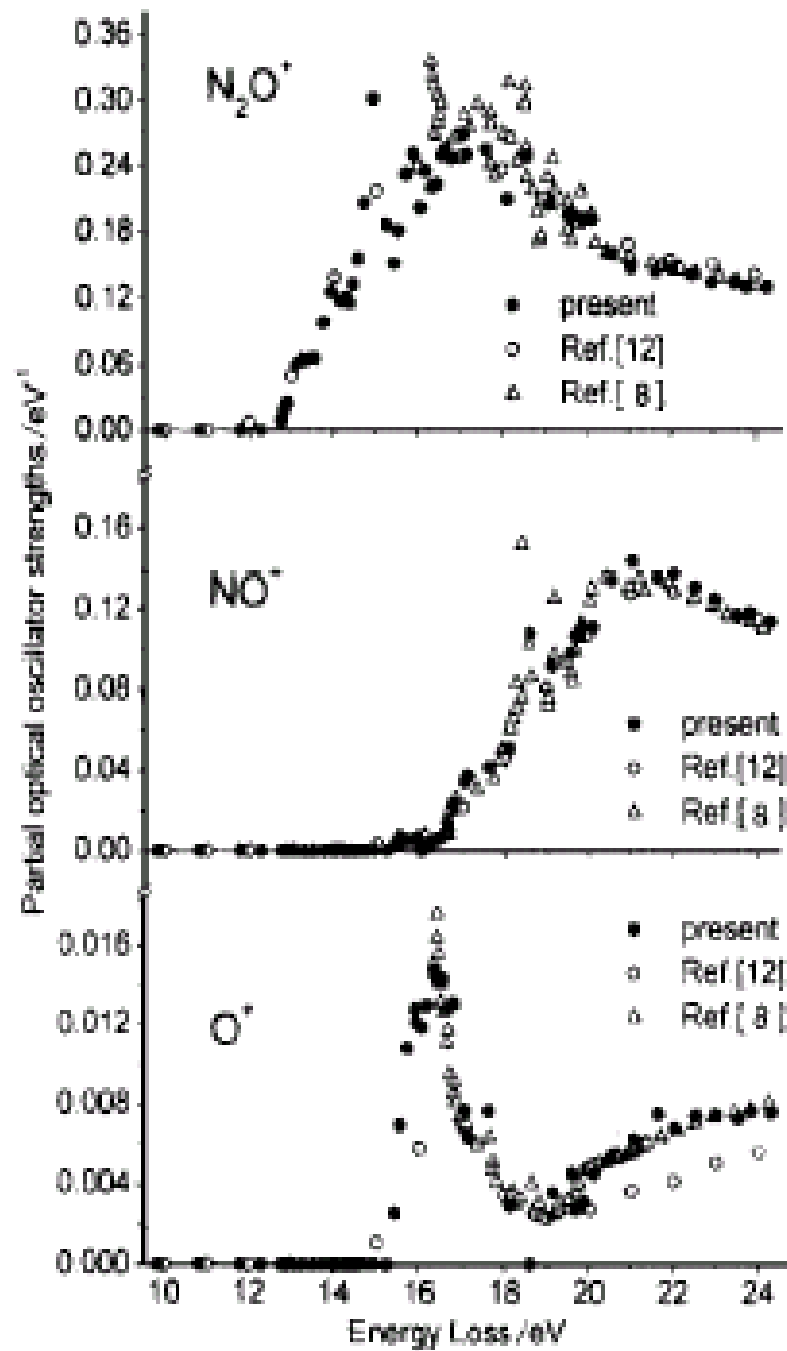
中空原子是一种特殊的自电离态，即某一内壳层全部多电子激发，如Li原子的1s内层两个电子全被激发到外层形成的。 →





$N_2O$  在 7.8~24.5 eV 的光学振子强度密度谱(内插图为  $N_2O$  的电离效率曲线), 14.0, 14.9, 16.0 是超激发态





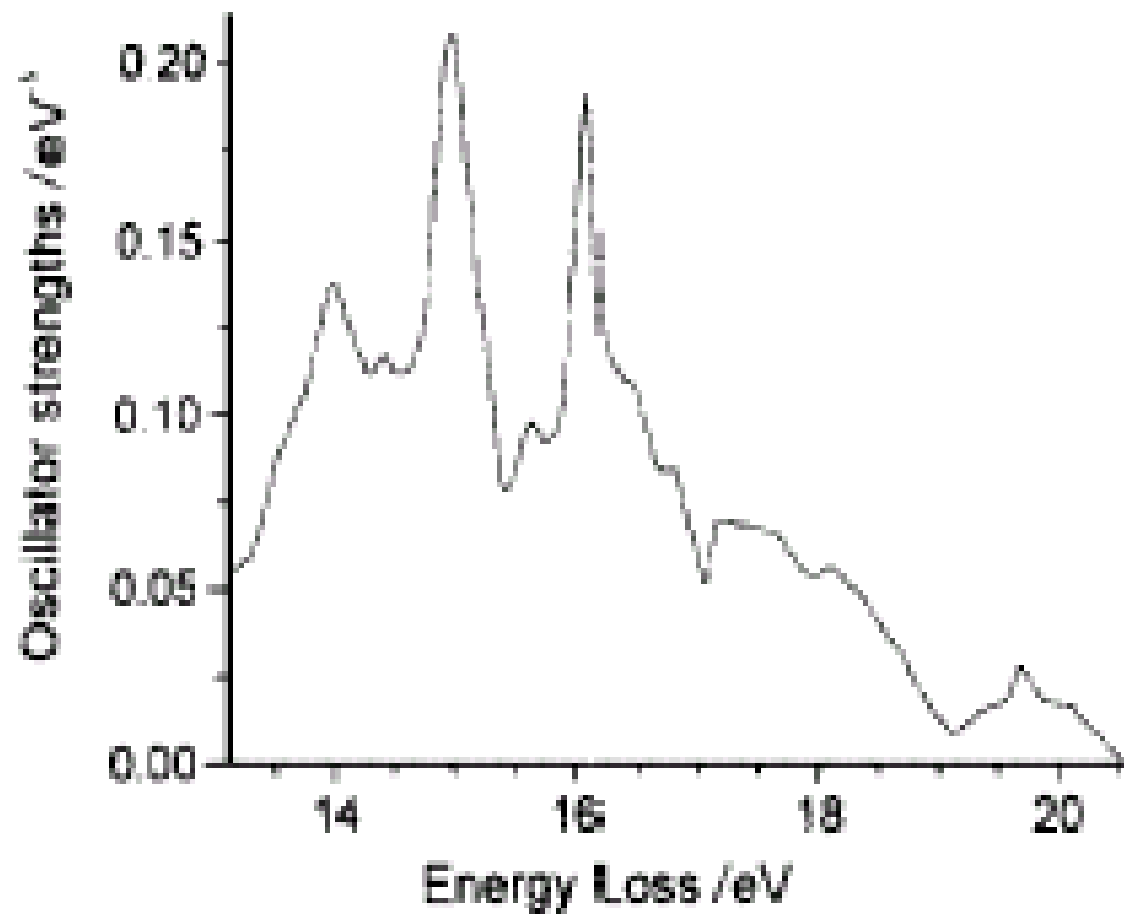
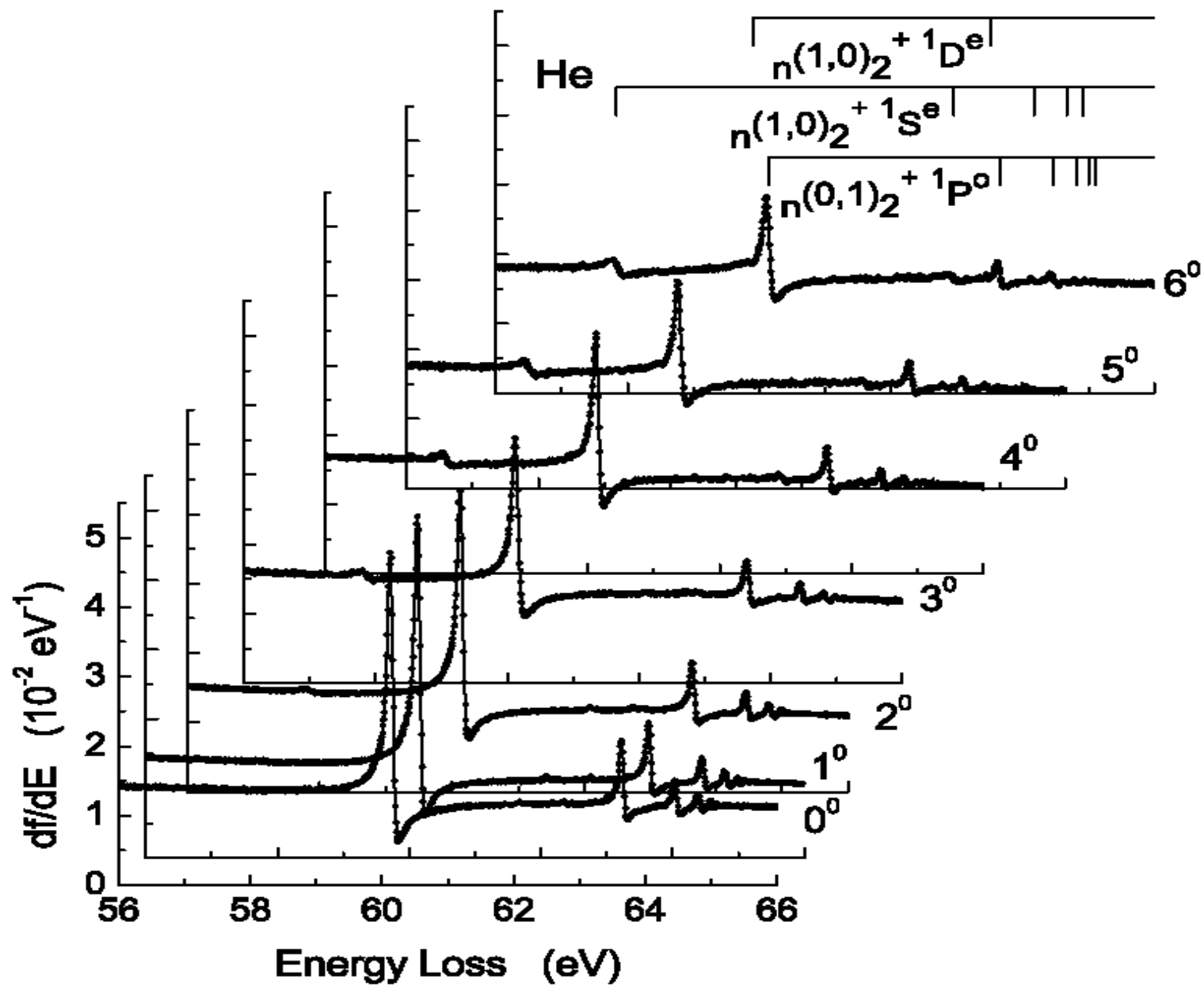
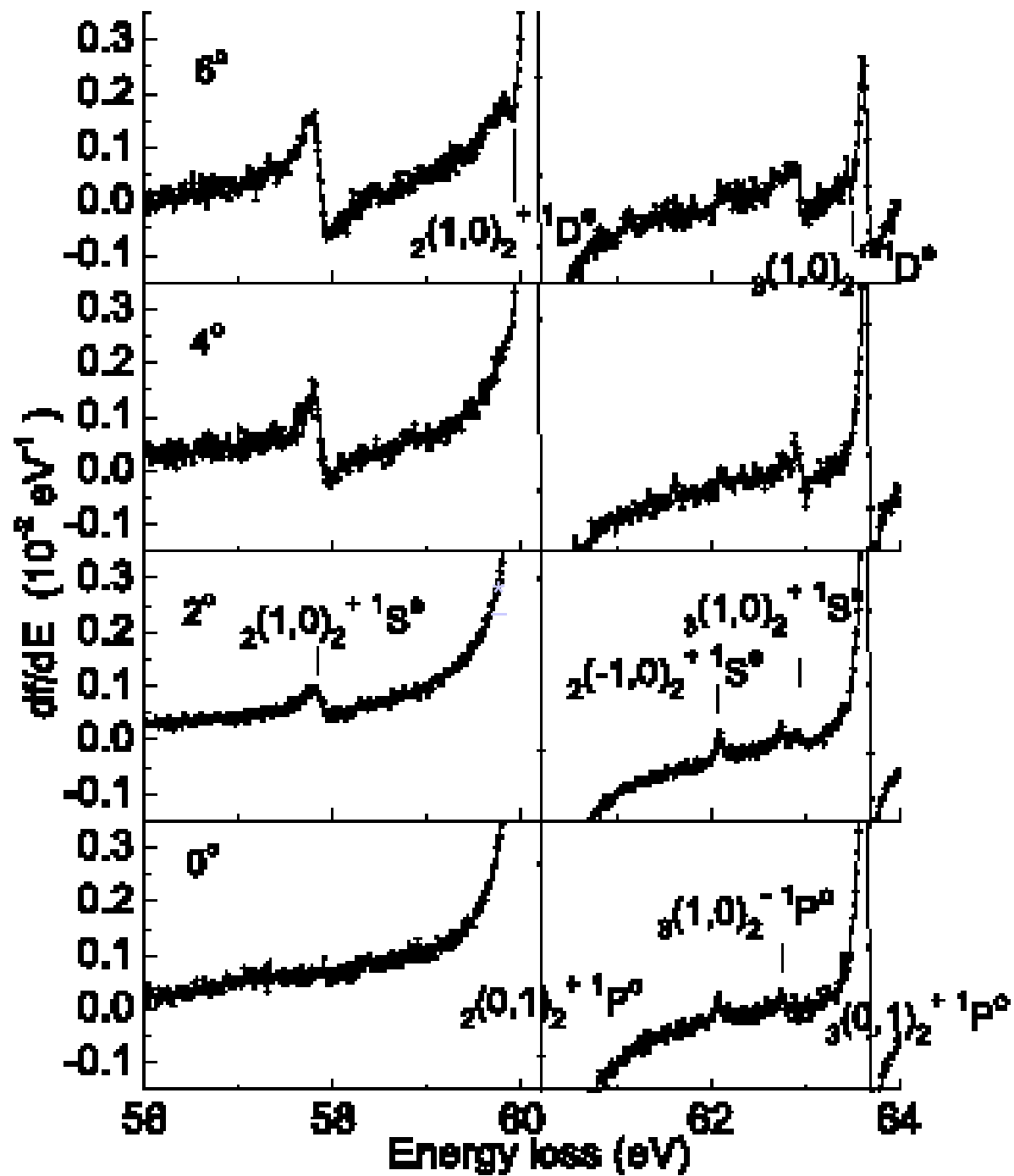


图 3 N<sub>2</sub>O 中性解离的振子强度密度谱

Fig .3 The oscillator strength spectra for neutral dissociation of N<sub>2</sub>O







近阈结构和扩展X射线吸收精细结构是原子分子内壳层X射线吸收曲线在吸收边附近出现的很复杂的振荡变化现象。它大致可分为两个区域:

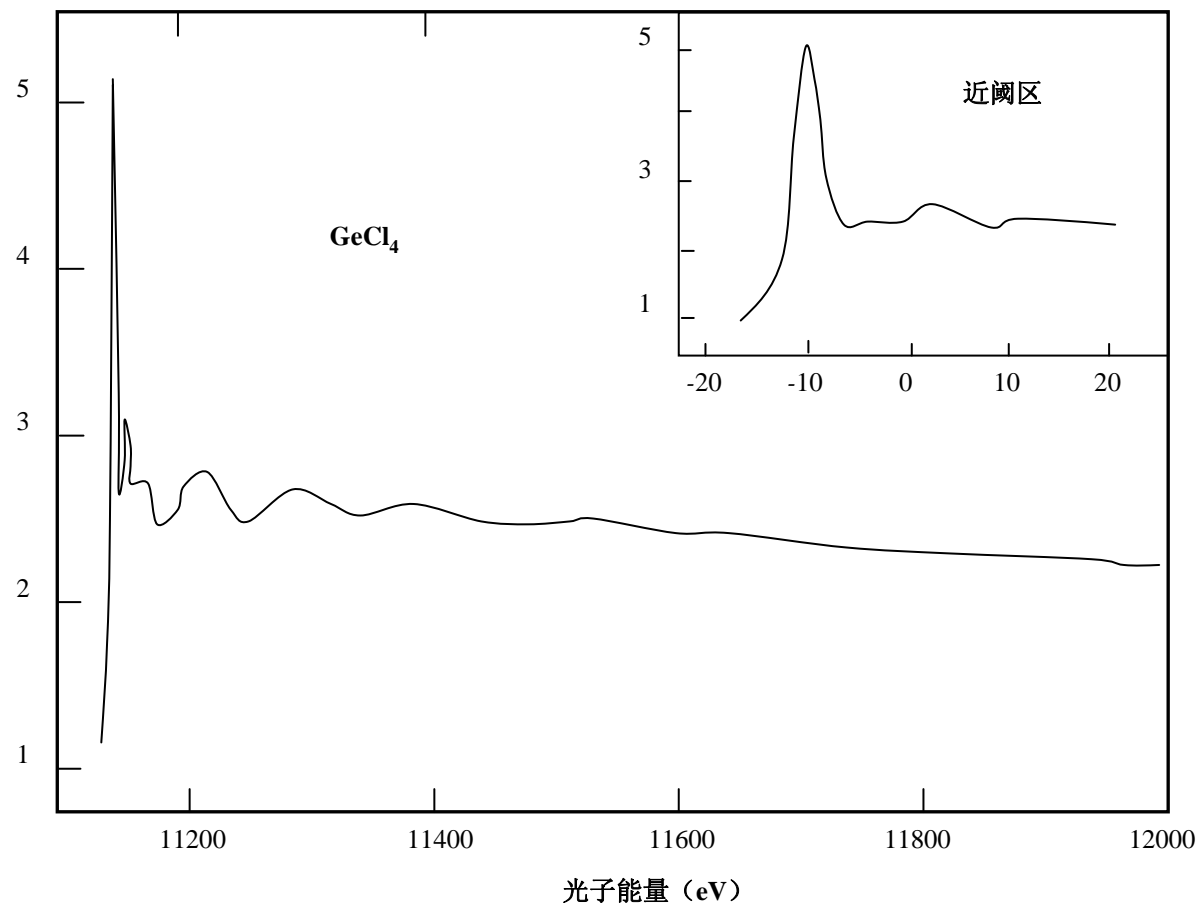
(1) 近阈区。范围从吸收边(即电离阈值)以下约10-30eV到吸收边以上50-100eV, 由环境而定, 也称Kossel结构。

(2) EXAFS区, 即扩展X射线吸收精细结构区。从吸收边以上40-70eV到1keV。在这范围内在平滑下降的吸收曲线上叠加了一些小振荡, 也称Kronig结构。

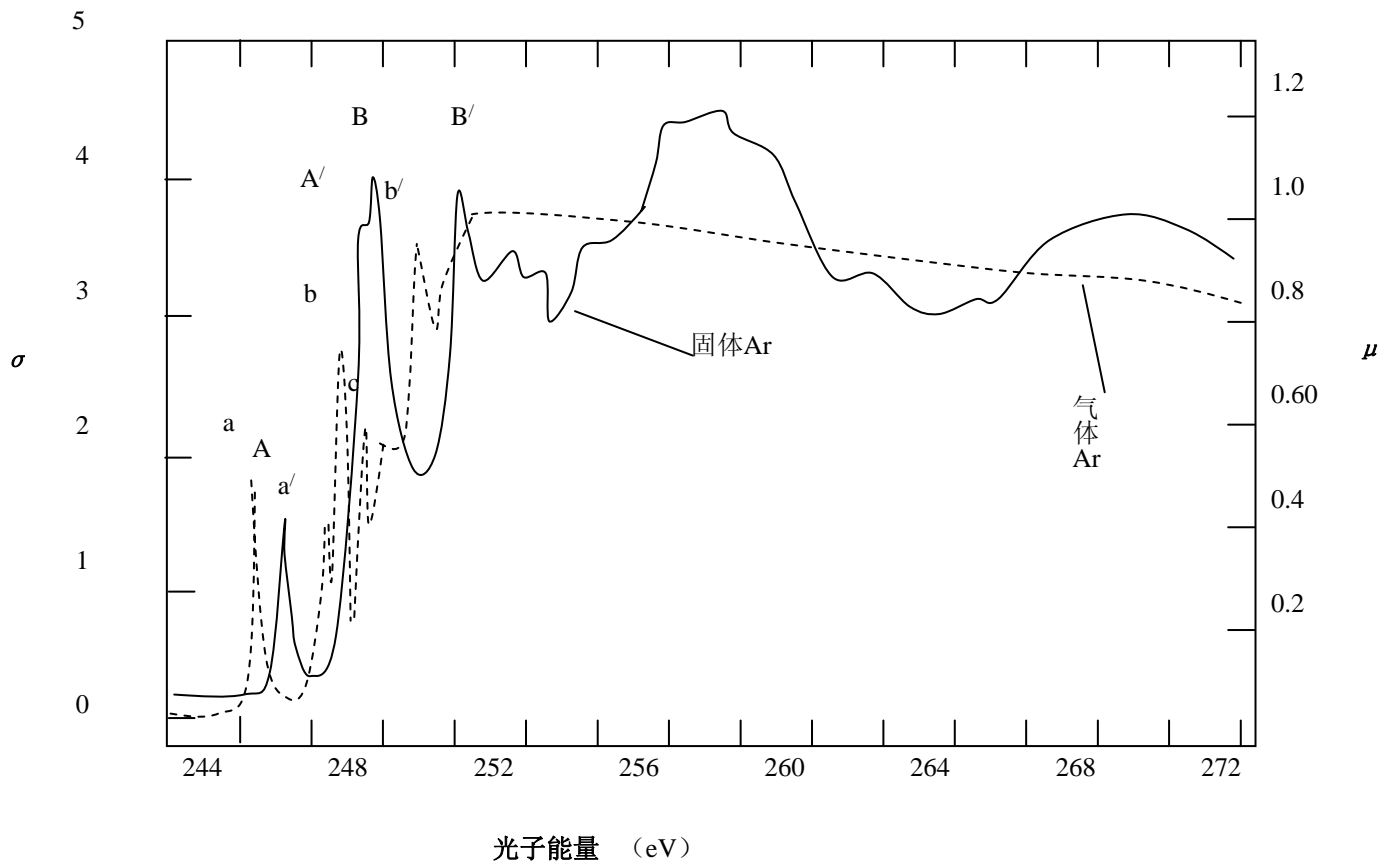
有时把这两个总起来称为XAFS(X-ray Absorption Fine Structure), 即X射线吸收精细结构。实际上用电子碰撞方法(EELS)也可以研究, 称为EXELFS(Extended Energy Loss Fine Structure)。

EXAFS区出现的是一系列和缓的振荡, 这是由于受激发而出射的电子受到邻近原子的散射, 以及这种散射波与出射的电子波之间的相干作用而形成的, 与原子在复杂的分子或者在凝聚态中的周围环境即结构有关。显然这对化学和凝聚态物理是最有价值的。

近阈区的情况很复杂, 包含的信息涉及原子中内壳层电子被激发形成低激发束缚电子态、里德伯态、激子态、电离连续区势形共振态以及化学位移等。这部分结构和能谱无论是对原子分子还是固体都是灵敏地反映出元素的结合状态。



$\text{GeCl}_4$ 气体分子的K吸收边精细结构



氩原子的气态( $1s^2 2s^2 2p^6 3s^2 3p^6$ )和固态2p吸收边精细结构

## 二、碰撞

- 实验方法  $\Rightarrow$
- 基本数据  $\Rightarrow$
- 物理现象  $\Rightarrow$



## 三、碰撞·实验方法

1. 激光光谱→
2. 同步辐射→
3. 电子碰撞→
4. 离子碰撞→

# 激光光谱方法

原子分子吸收能量为 $h\nu$ 的光子后可以被激发或电离,称为光吸收或光电离。用这两种方法可以得到原子分子的激发能 $E_j$ 和电离能 $E_i$ 分别为

$$E_j = h\nu, \quad E_i = h\nu - T_e$$

通常使用激光光谱学方法通过测量光谱峰值的能量 $h\nu$ 得到激发能;使用电子能谱方法,通过测量能量 $h\nu$ 光子能量 $h\nu$ 和光电子动能 $T_e$ 值得到电离能。

激光光谱方法具有常规光谱方法无法比拟的优点,最主要有三点:

- (1) 具有很高的光谱分辨本领。 $10^{-5}$ - $10^{-6}$ ,甚至可以达到 $10^{-8}$ - $10^{-14}$ 。
- (2) 有高的时间分辨本领。不但已经可以做到 $10^{-11}$ - $10^{-12}$ s时间分辨,称为皮秒激光技术,现可以做到飞秒( $1\text{fs}=10^{-15}\text{s}$ ),甚至达到几百阿秒( $1\text{as}=10^{-18}\text{s}$ )。可以进行超快过程光谱学研究,如原子分子激发态寿命、化学反应动力学研究,甚至用于实时跟踪并控制原子中的电子运动。
- (3) 有高的光源单色亮度和高的探测灵敏度。这对弱光谱和强场的非线性光谱学测量特别有用。因此,能够做原子分子的双光子或多光子激发光谱测量,进行那些传统光源吸收光谱受电偶极选择定则限制而不能发生的激发态结构研究,以及进行无多普勒增宽的光谱测量。
- (4) 能量较小。在几个eV,一般用于价壳层研究。



# 同步辐射方法

同步辐射有以下特点：

- (1) 同步辐射本身是一种具有很宽波段的连续光，从远红外、可见、紫外、真空紫外、软X射线，一直到硬X射线。用在内壳层或价壳层高激发态研究。
- (2) 光强大。合肥同步辐射光源比X光机(10—100W)强30—300倍。通过单色器后在实验站内通常可达 $10^{10}$ — $10^{11}$ 光子/秒，使用波荡器后光通量可提高3个数量级。
- (3) 方向性好。合肥同步辐射光源的半张角为0.511MeV/800MeV  $\sim$  0.6mrad。
- (4) 是完全线偏振光，偏振平面在电子运动轨道平面内。
- (5) 具有脉冲时间结构，有高的时间分辨性能。合肥同步辐射光脉冲宽约60ps，周期为5ns。



# 电子碰撞方法

由于电子的质量轻，不需要很大能量就可以使原子分子激发和电离，因此，除光学方法外，碰撞方法是研究原子分子结构和动力学的最重要方法之一。

(1) 电子能损谱仪一般说来它不受电偶极辐射跃迁选择定则的限制，可以研究非偶极作用即光学禁戒跃迁所涉及的能级特性。

(2) 能得到原子分子的微分散射截面、广义振子强度和光学振子强度、电子碰撞总截面，以及测量散射电子与原子分子碰撞产生的各种次级粒子的符合实验，例如，(e,2e)方法除了能得到原子分子电离能谱和三重微分电离截面之外，快电子的(e,2e)电子动量谱仪还能测量各个壳层的电子动量谱，得到原子分子内的电子轨道，或者说电子的动量密度和位置密度分布。

(3) 测量激发态能量范围很宽、调节方便。它可以很容易地实现从红外直到X射线很宽的能量范围内扫描。因此，它既可以用于价壳层，又可以用于内壳层研究。

(4) 快电子能损谱仪的能量分辨近于常数，在 **50meV**，最好已达到14meV。



## 离子碰撞方法

(1) 离子束通常要使用较为昂贵的加速器得到各种类型的较高能量的离子，进行离子的能级结构和动力学研究。九十年代以后，更是专门建造了一些高剥离电荷态的离子束源，用来研究离子的特性。

(2) 电子回旋共振源**ECR**利用微波场使作回旋运动的电子被共振加速，电子与工作气体不断碰撞，发生多次电离引出形成离子束做实验。

(3) 电子束离子阱**EBIT**用几百keV高能强流电子束轰击原子或低电荷态离子，它们被捕获在离子阱中被不断再电离，从而产生几到几十keV的高电荷态离子,不引出离子或引出形成离子束做实验。



## 二、碰撞·基本数据

- 能量  $\Rightarrow$
- 吸收截面
- 微分截面：一般定义三重微分截面，在快电子情况下,玻恩近似有：

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = 4a_0^{-2} \left(\frac{K}{\hbar}\right)^{-4} \frac{p_a}{p_0} \left| \left\langle \psi_j \left| \sum_{k=0}^N e^{iK \cdot r_k} \right| \psi_i \right\rangle \right|^2 \underset{\text{a. u.}}{=} 4K^{-4} \frac{p_a}{p_0} |\varepsilon_j(K)|^2 \quad \Rightarrow$$

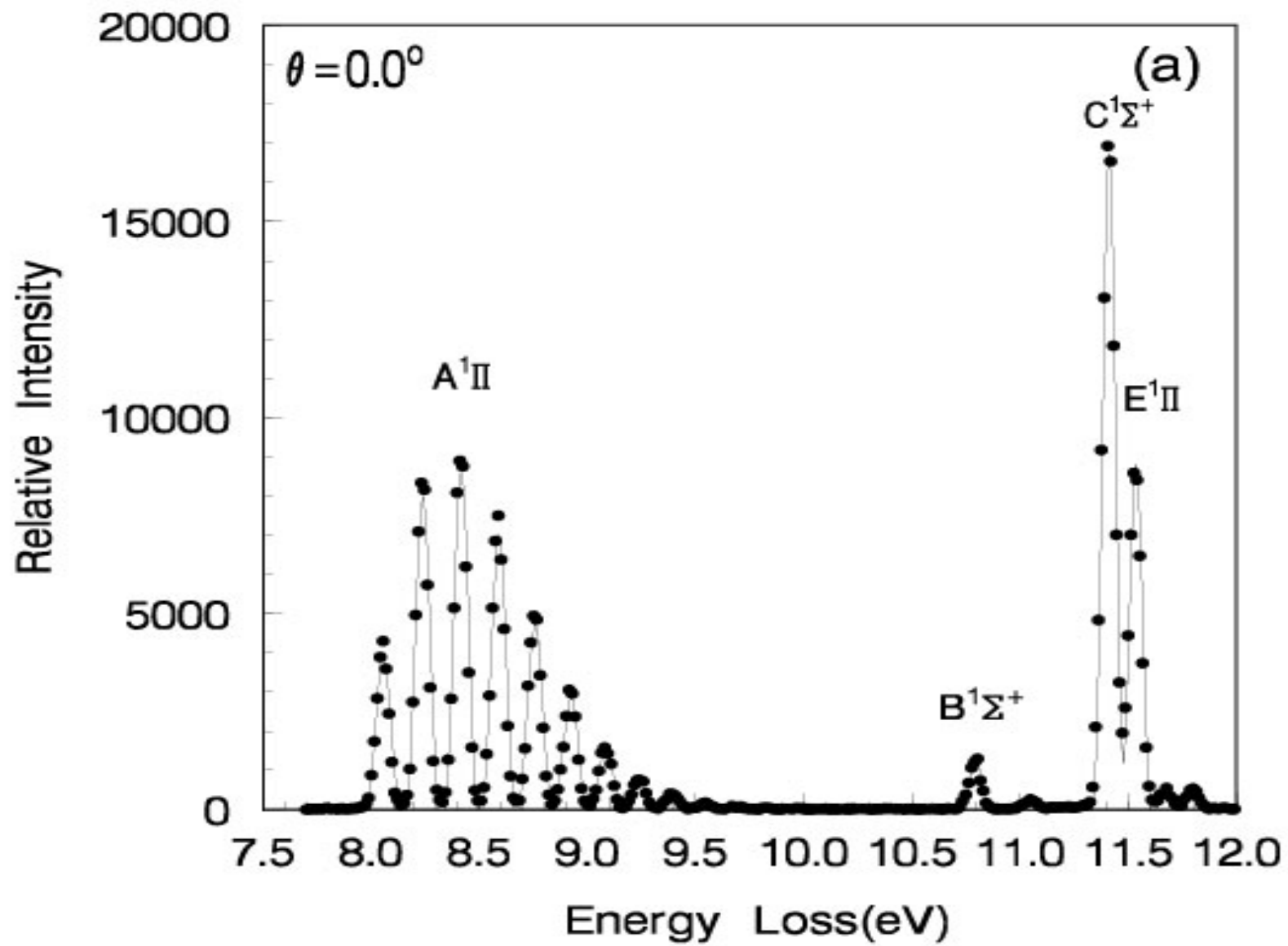
- 广义振子强度：**Bethe**类比光学振子强度描述原子吸收光子的跃迁概率而定义广义振子强度来描述原子的电子碰撞跃迁概率：

$$f(E_j, K) \equiv \frac{2E_j}{K^2} |\varepsilon_j(K)|^2 = \frac{E_j K^2}{2} \frac{p_0}{p_a} \frac{d\sigma}{d\Omega} \quad \Rightarrow$$

- 光学振子强度：绝对光学振子强度代表了原子分子的电子跃迁概率，

$$\lim_{K \rightarrow 0} f(E_j, K) = f_0(E_j) \quad \Rightarrow$$

- 寿命  $\Rightarrow$  ... ..



The Energy Loss Spectrum For CO at 0 Degree



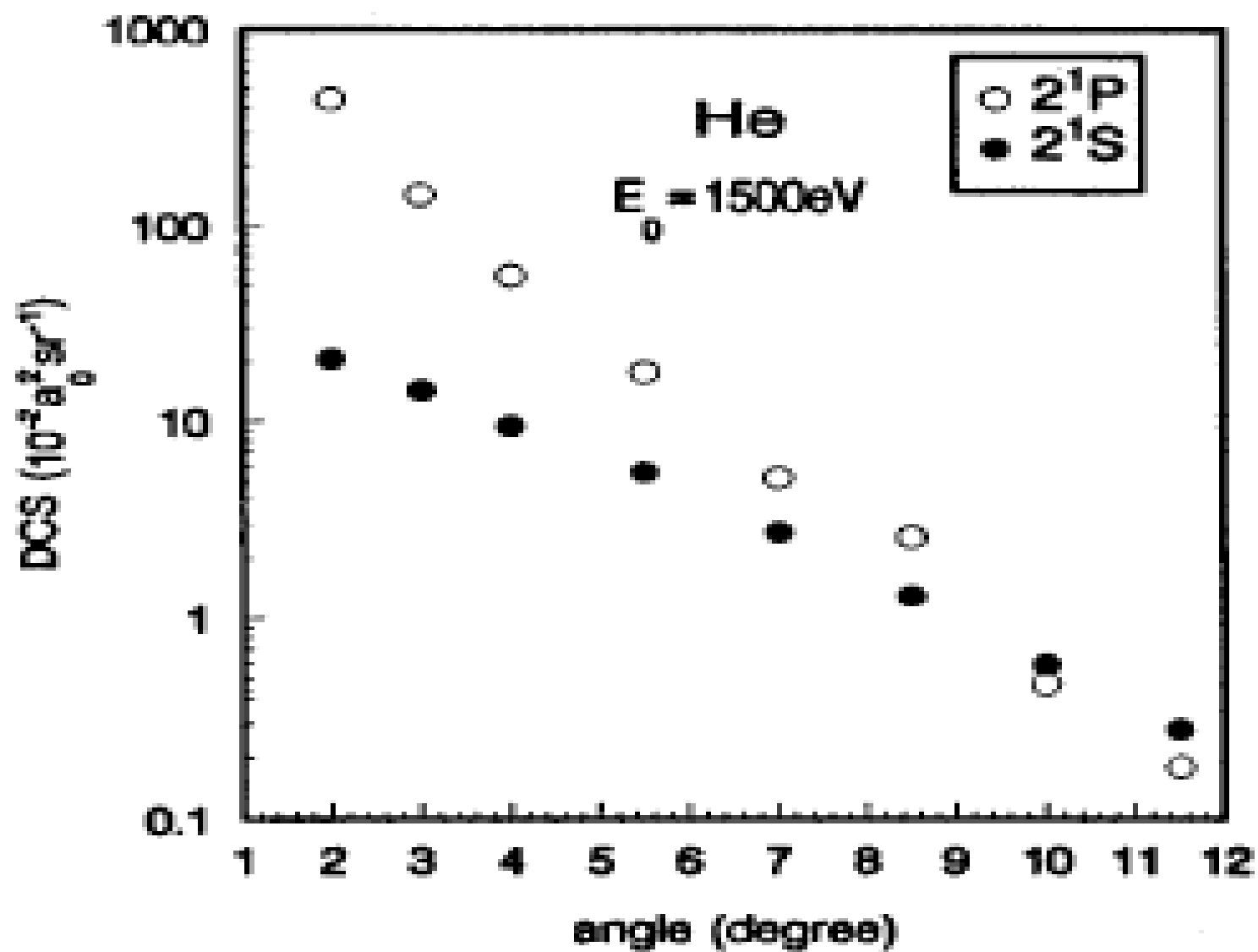


FIG. 5. Absolute DCS's of the  $2^1P$  and  $2^1S$  excitations.





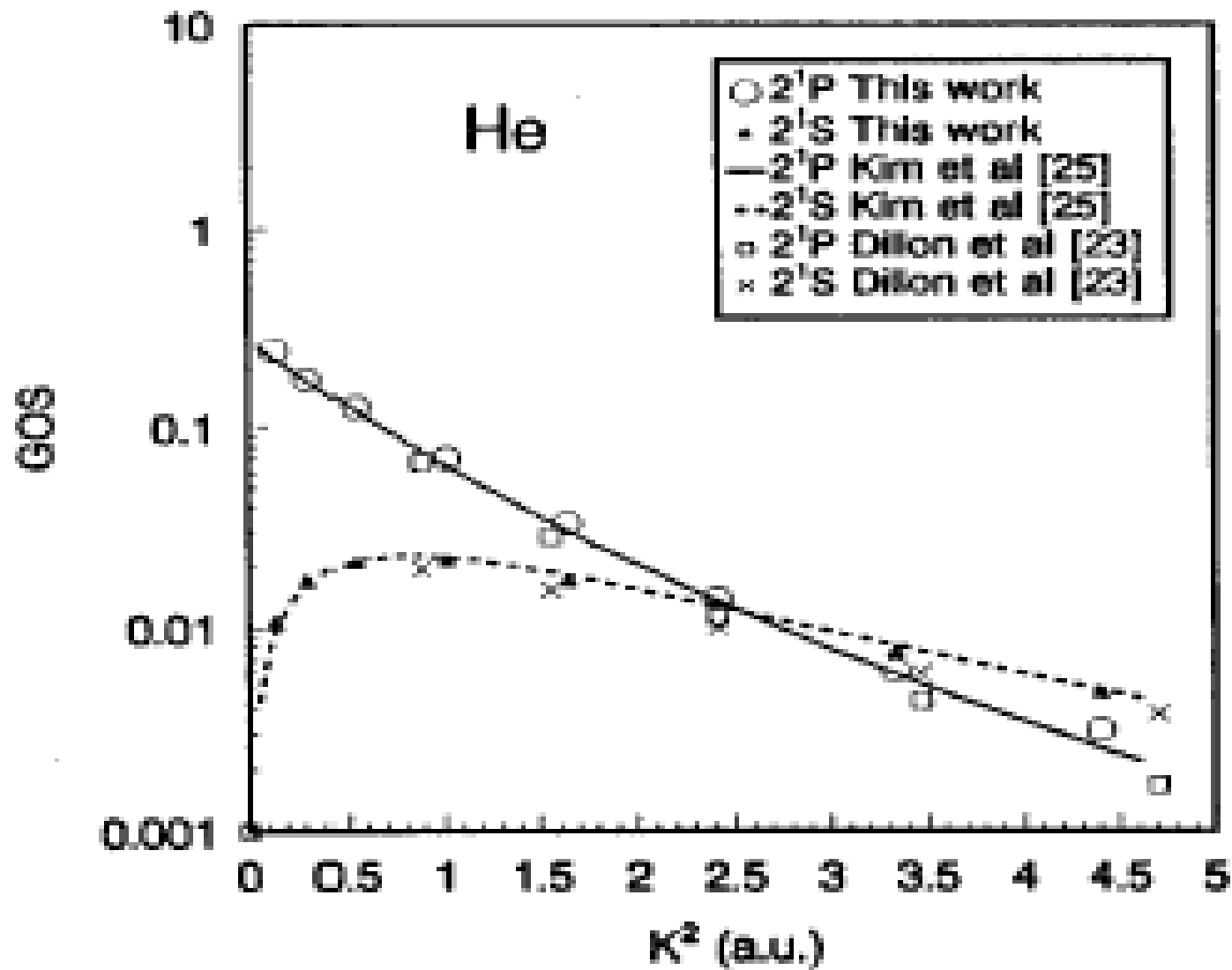


FIG. 4. Absolute GOS's of the  $2^1P$  and  $2^1S$  excitations (present, Ref. [23], Ref. [25]).  $\Rightarrow$

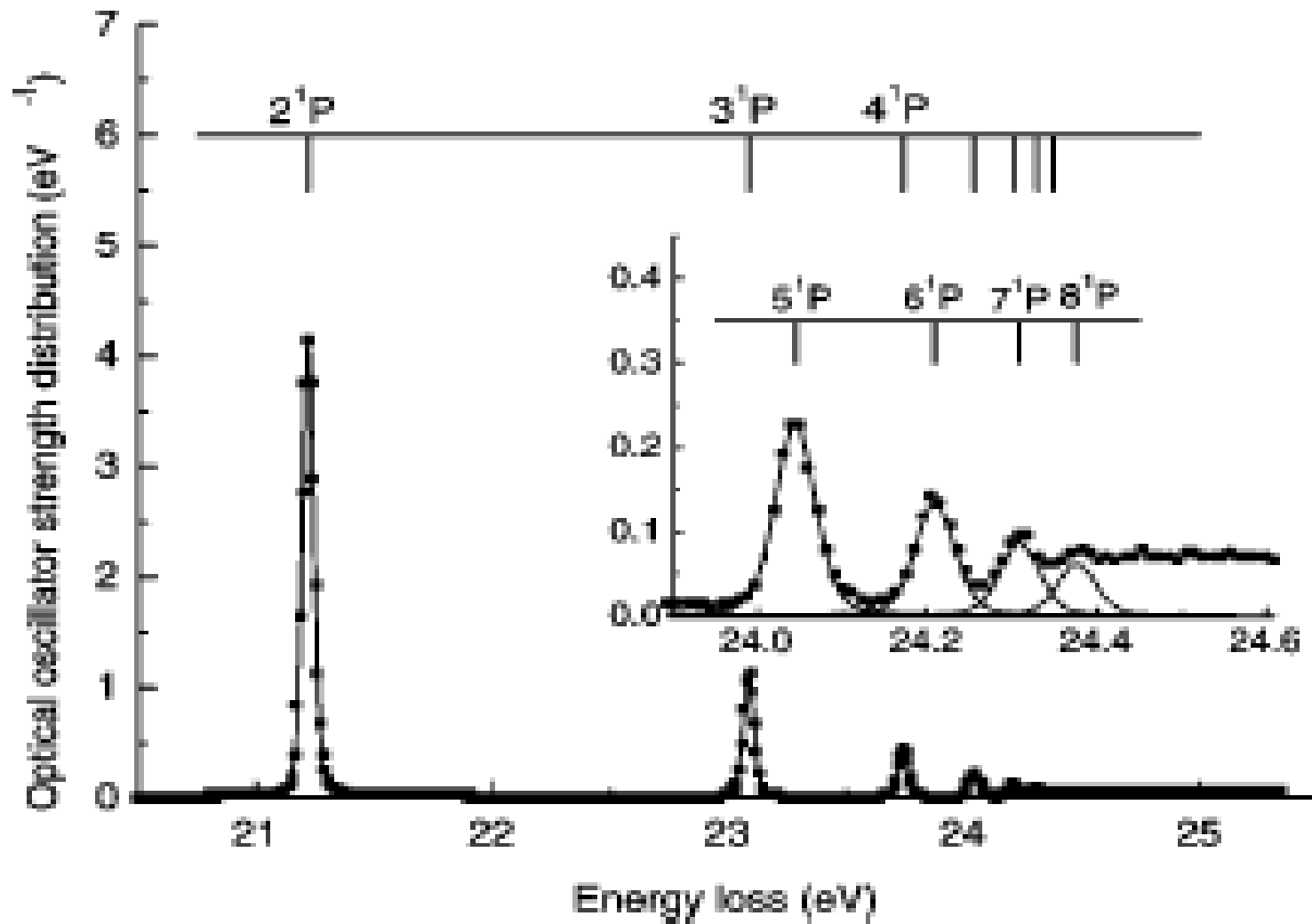


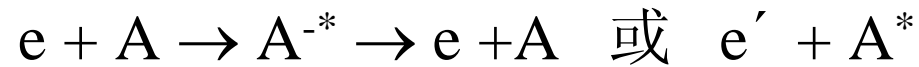
FIG. 7. Optical oscillator strength distributions for discrete valence shell of He: Rydberg series of He  $n^1P(n=2-8) \leftarrow 1^1S$ .



## 二、碰撞·物理现象

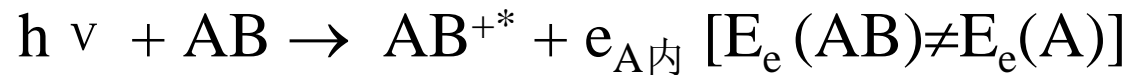
1. 超弹性散射  $e + A^* \rightarrow e' + A$

2. Feshback共振

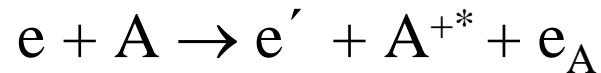


3. 形状共振

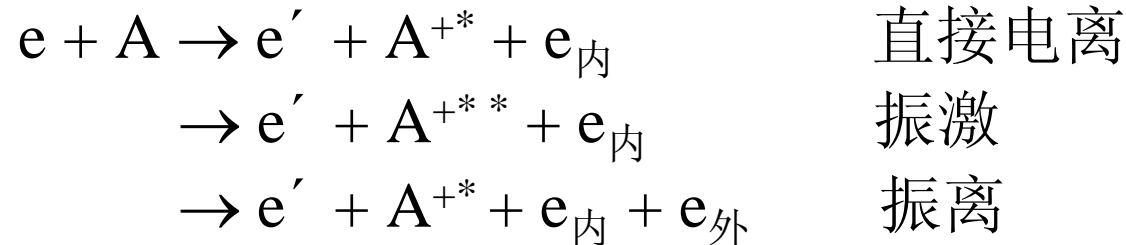
4. 化学位移



5. 电离激发



6. 振激和振离



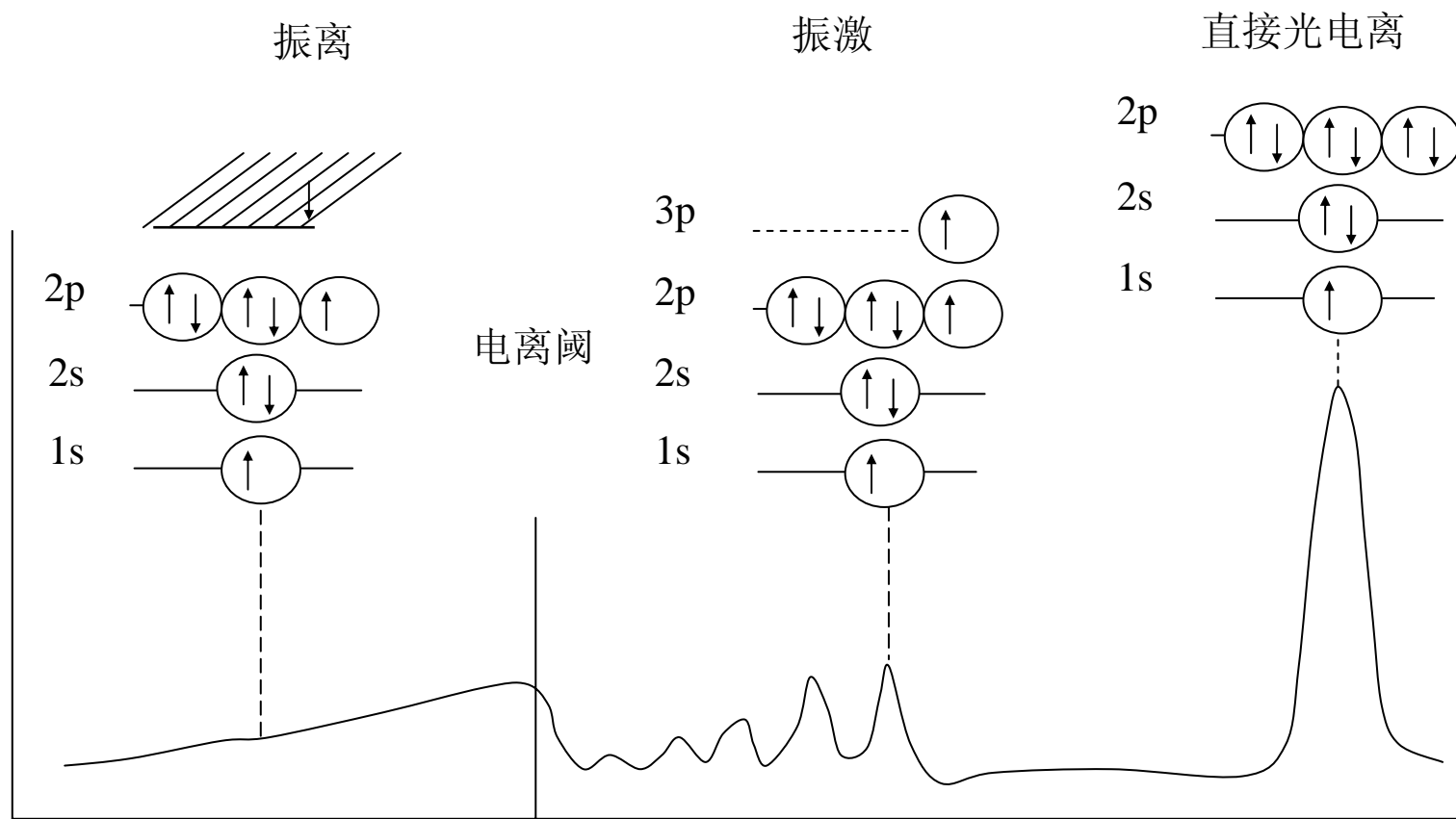


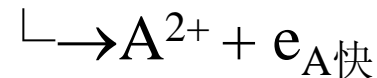
图1.3.2 氖原子 $1s$ 光电子能谱图上出现的直接光电离和振激、振离伴线

## 二、碰撞·物理问题和新现象

7. 共振俄歇效应



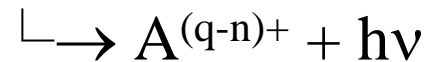
8. 后碰撞作用  $h\nu + A \rightarrow A^{+*} + e_{A慢}$



9. Jahn-Teller效应

10. 彭宁电离  $A^* + M \rightarrow A + M_i^+ + e$

11. 束箔光谱  $A^{q+} + B \rightarrow A^{(q-n)+*} + B^{n+}$

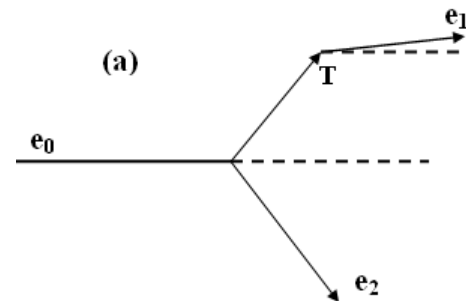
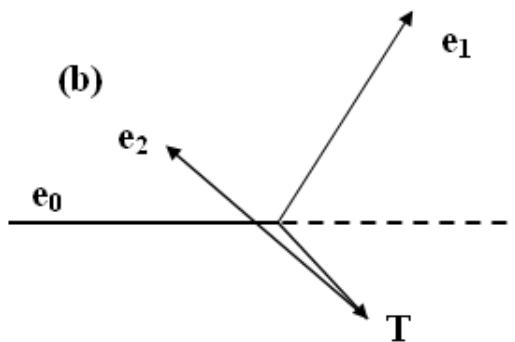
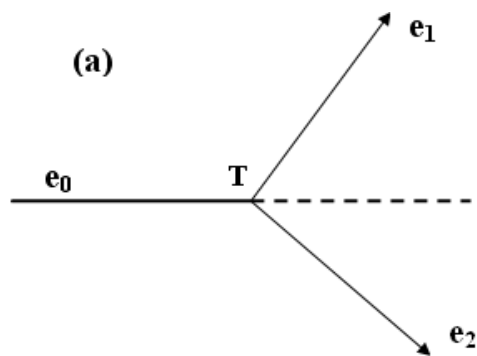


12. 辐射复合  $A^{q+} + B \rightarrow A^{(q-1)+} + h\nu + B^+$

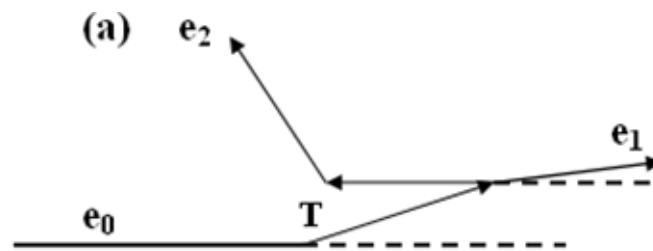
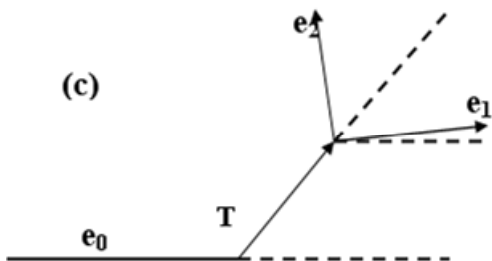
和双电子复合  $A^{q+} + B \rightarrow A^{(q-1)+**} + B^+$

13. 负离子脱附  $A^- \rightarrow A + e$

14. 电离机制 单次两体碰撞，两次两体碰撞，三次两体碰撞



(a) 单次两体碰撞过程 (b) 第一种两次两体碰撞过程 © 第二种两次两体碰撞过程



(d) 第三种两次两体碰撞过程

(e) 三次两体碰撞过程

# 三、原子分子的能壳分辨波函数

- 概述:

波函数是量子力学最基本的物理量, 用 (e, 2 e) 电子动量谱仪能得到原子和分子的电子动量谱和能壳分辨波函数

- 电子动量谱仪 →

- 原子和分子的电子动量谱和能壳分辨波函数

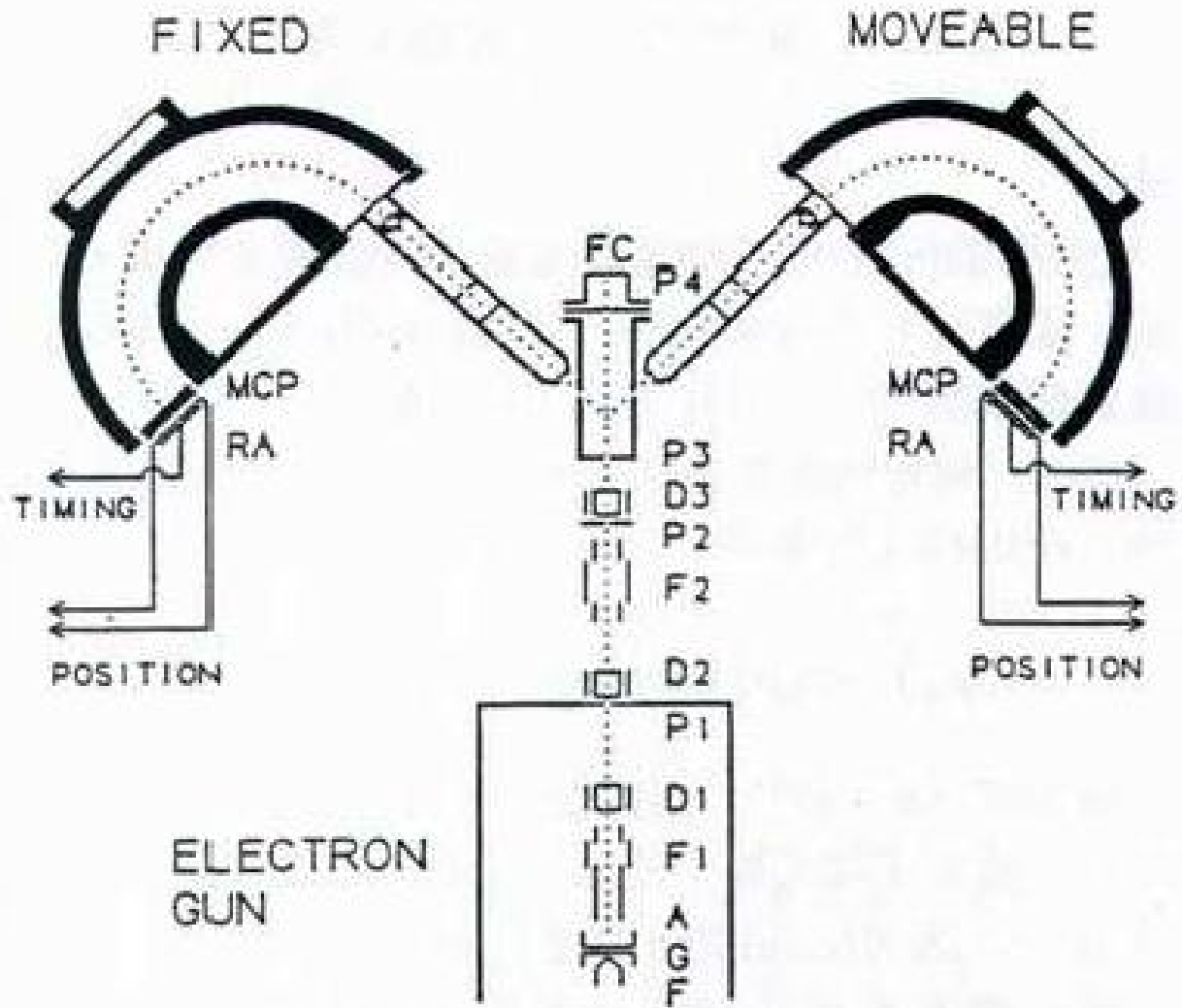
- \* 电离能谱

- \* 普通原子和分子的电子动量谱和能壳分辨波函数 →

- \* 生物分子的电子动量谱和能壳分辨波函数 →

- \* 固体的电子动量谱和能壳分辨波函数 →

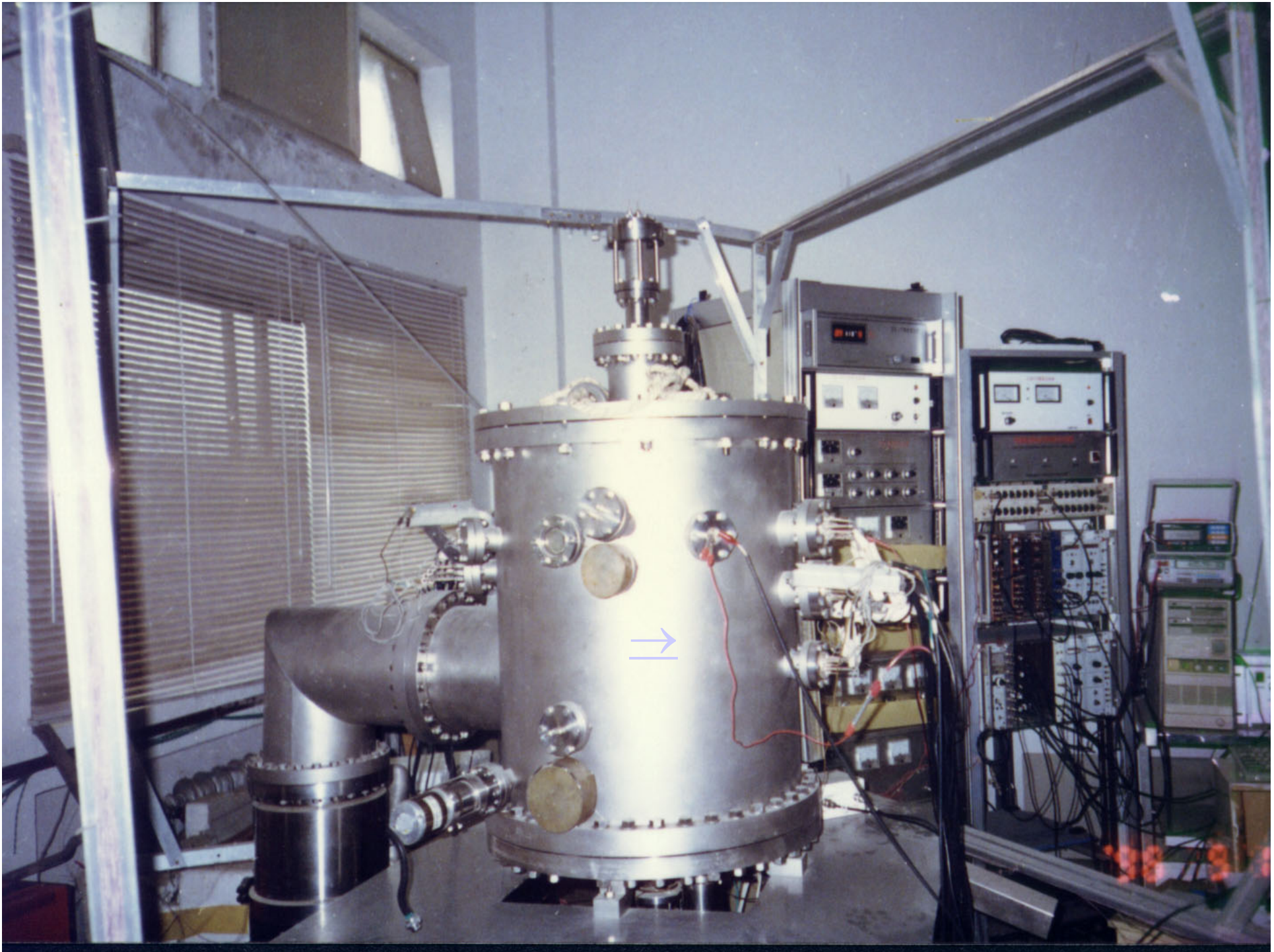
- 可以用来检验量子力学和量子化学理论计算、确定分子能级排序和分子构形 →

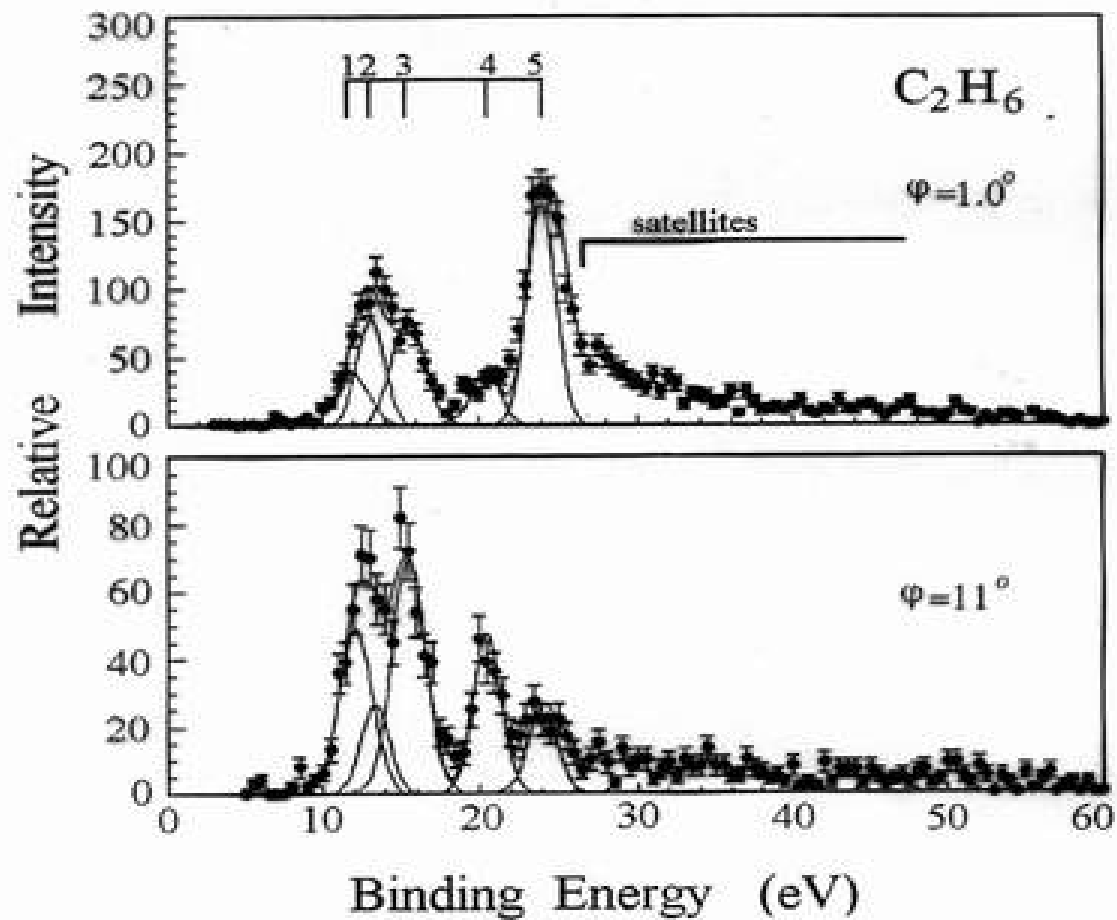


对称不共面几何条件的(e,2e)电子动量谱仪

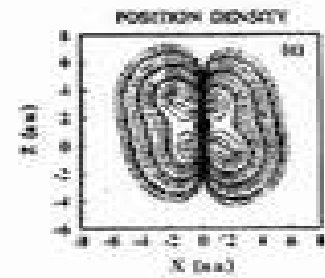
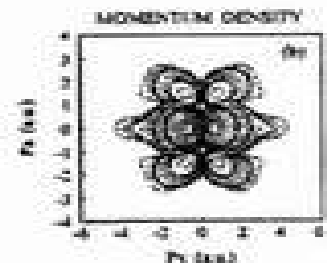
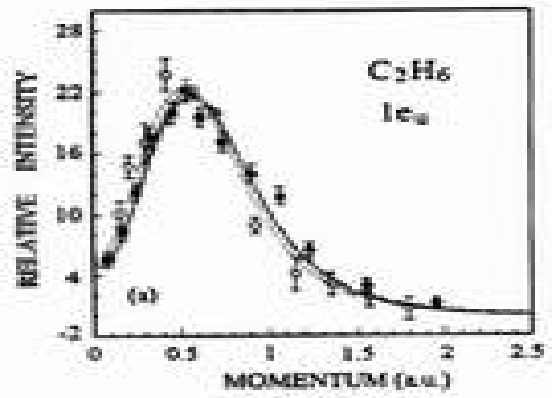
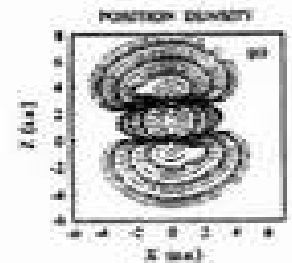
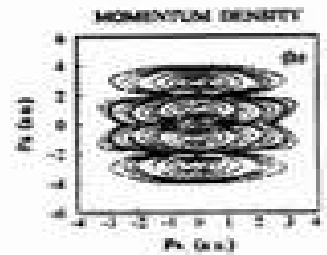
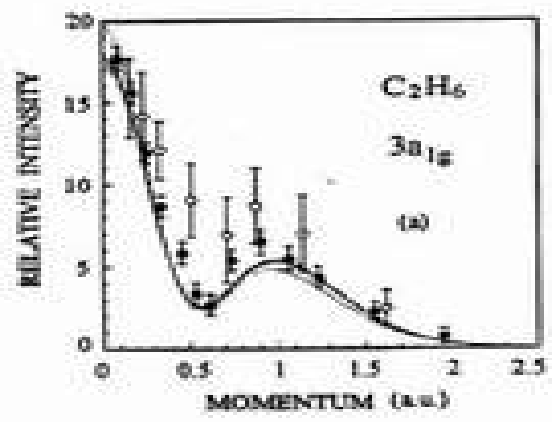
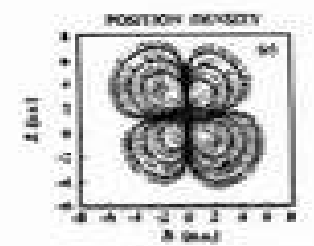
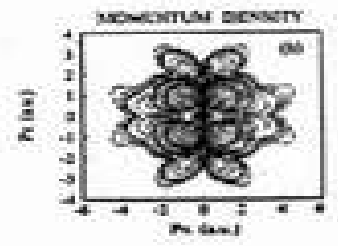
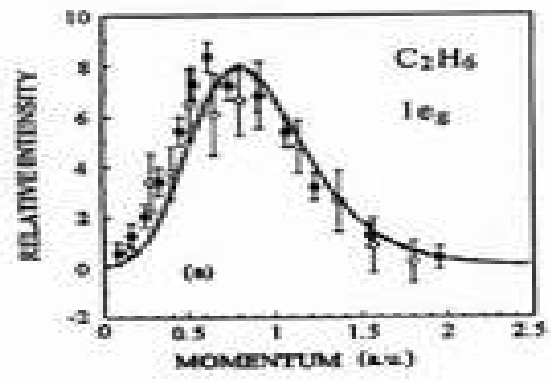
A symmetrical no-coplanar (e,2e) electron momentum spectrometer

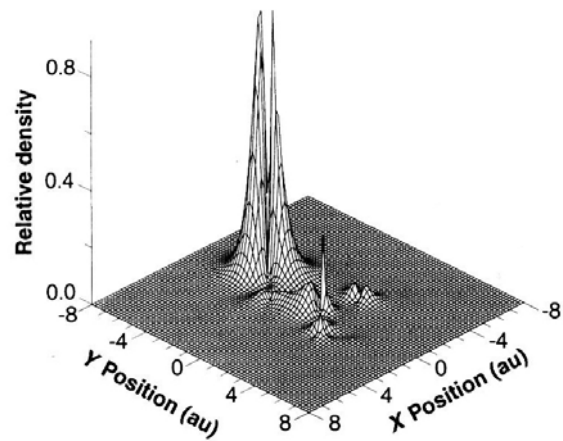
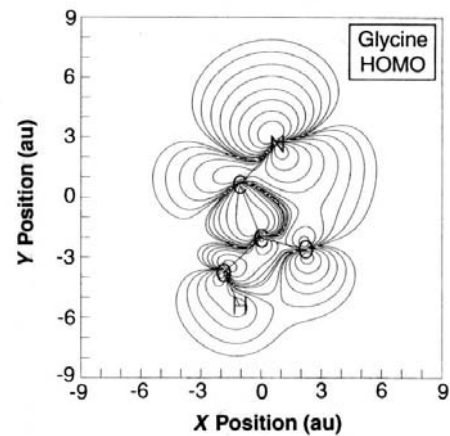
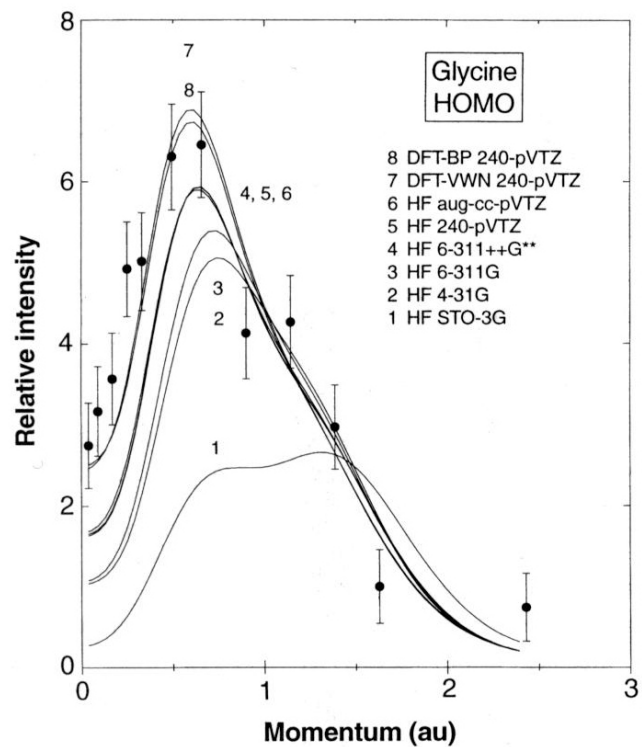






Peak1:  $1e_g$ ; Peak2:  $3a_{1g}$ ; Peak3:  $1e_u$ ; Peak4:  $2a_{2u}$ ; Peak5:  $2a_{1g}$

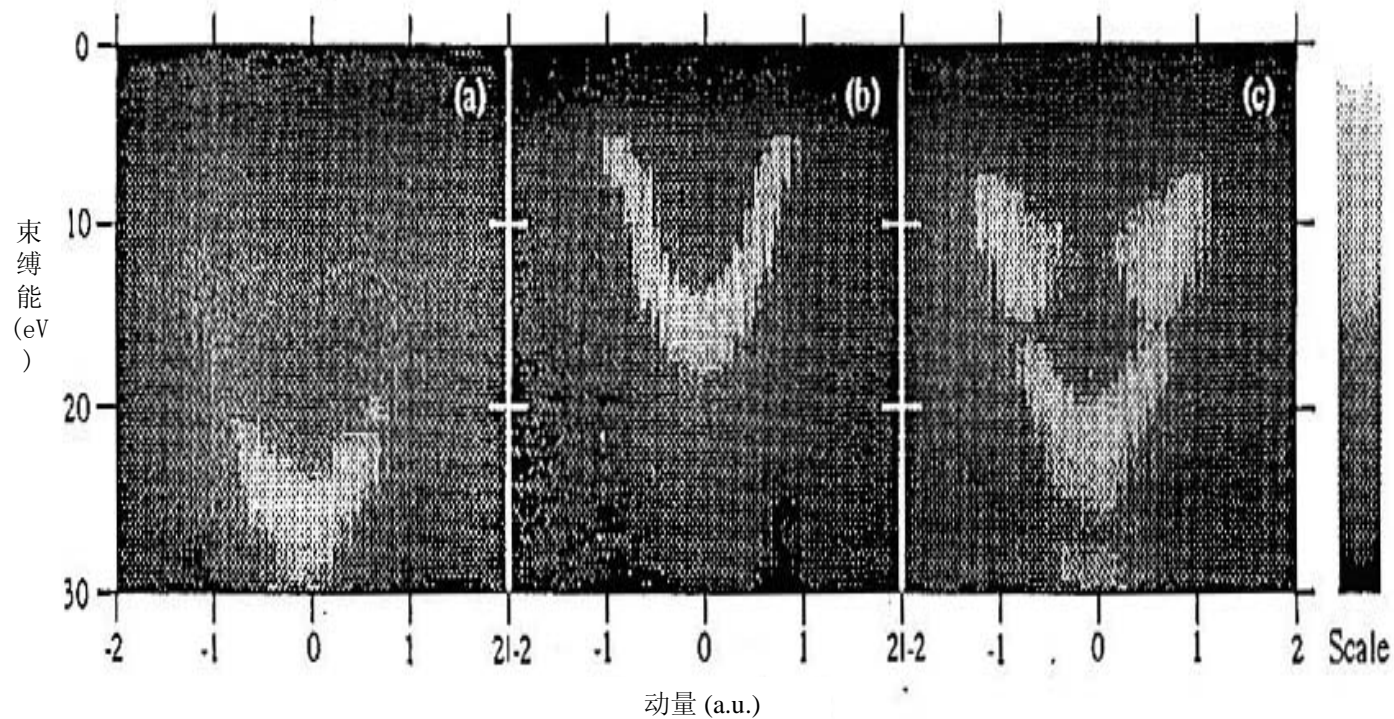




等高线为最大密度的0.01,0.03,0.1,.03,1.0,3,10,30和99%

甘氨酸的HOMO轨道电子动量谱和位置密度图(NH<sub>2</sub>CH<sub>2</sub>COOH)



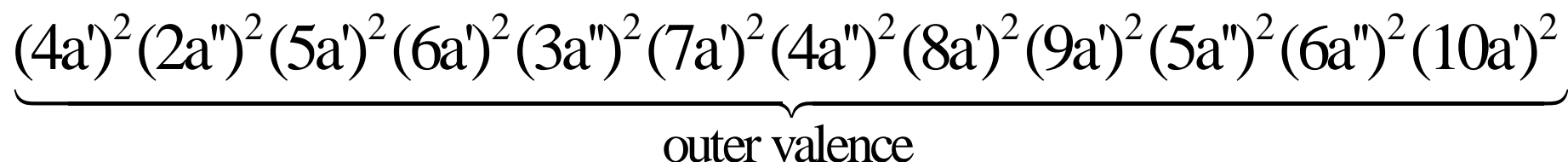
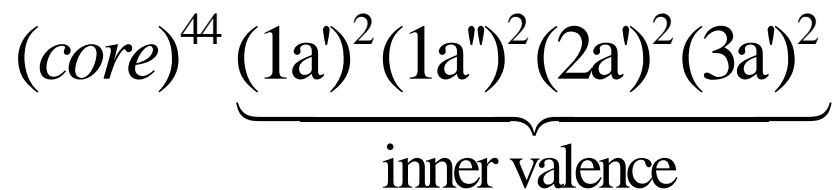


非晶纳米碳膜(a)、非晶碳膜上蒸一层3nm厚硅膜(b)和碳膜加温退火后形成的多晶碳化硅(c)的价带电子的能量-动量密度分布



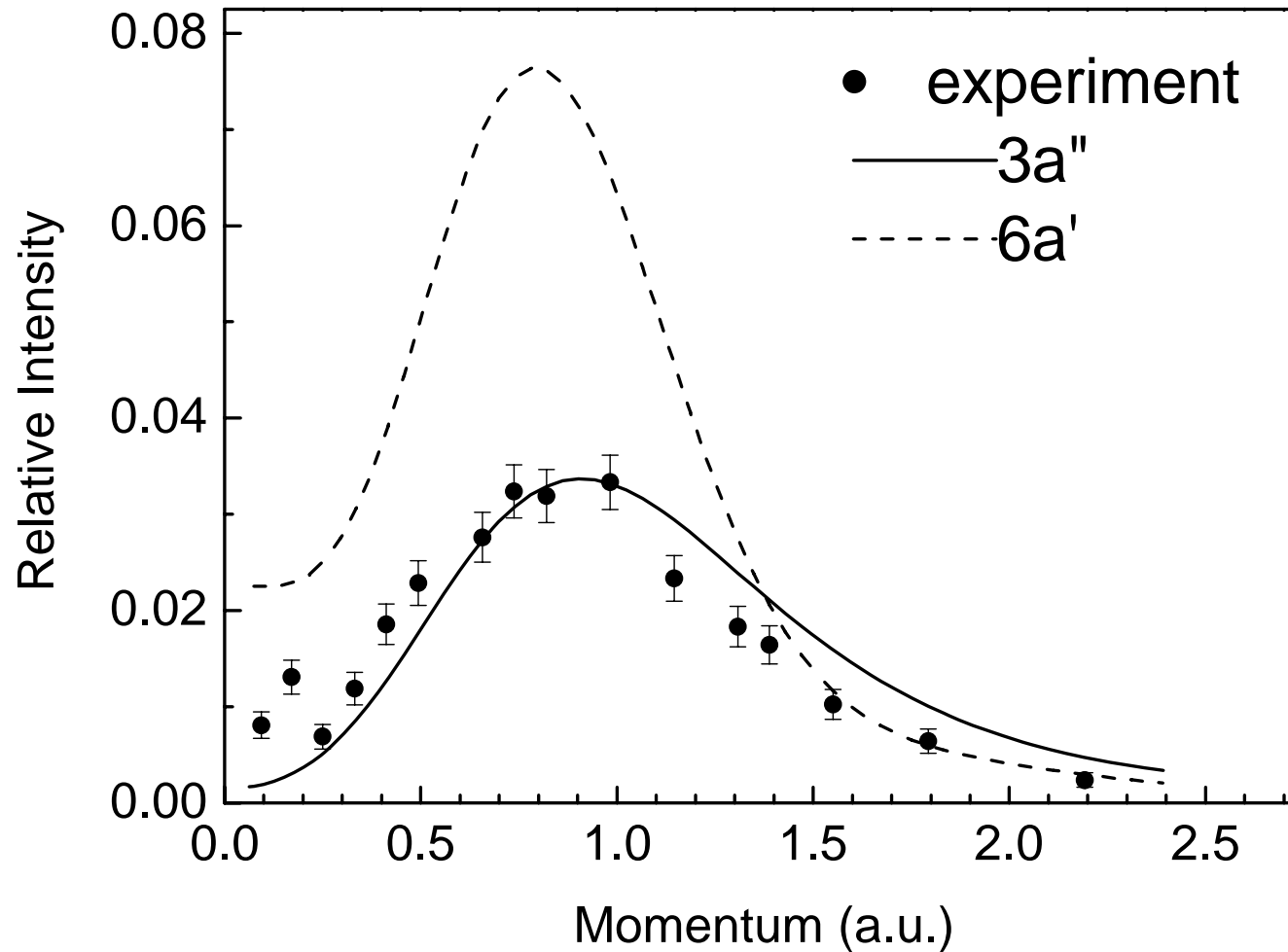
# CF<sub>2</sub>BrCl分子的3a''和6a'轨道的先后排序

CF<sub>2</sub>BrCl分子具有C<sub>s</sub>点群对称性，其基态的电子组态为：



Cvitaš等人在高分辨光电子谱中将16.8eV处的能峰标识为6a'轨道的电离，19.0eV处的能峰标识为(3a'' + 5a')轨道的电离。

我们的B3LYP/6-311+G (3df) 计算结果表明16.8eV处的能峰对应3a''轨道的电离，19.0eV处的能峰对应(6a' + 5a')轨道的电离



图：电离能在16.8eV处能峰的实验动量分布和3a''与6a'轨道的理论计算结果

Cvitaš等人在高分辨光电子谱中将16.8eV处的能峰标识为6a'轨道的电离，19.0eV处的能峰标识为(3a'' + 5a')轨道的电离。而我们的计算结果表明16.8eV处的能峰对应3a''轨道的电离，19.0eV处的能峰对应(6a' + 5a')轨道的电离。

## 四、团簇

- 原子和分子团簇 →

- $C_{60}$ 团簇和团簇固体

1984年 E.A.Rohlfing在激光照石墨的产物中得到

1985年 H.W.Kroto,R.E.Smalley,R.F.Curl重新仔细做并给出了笼形结构 →

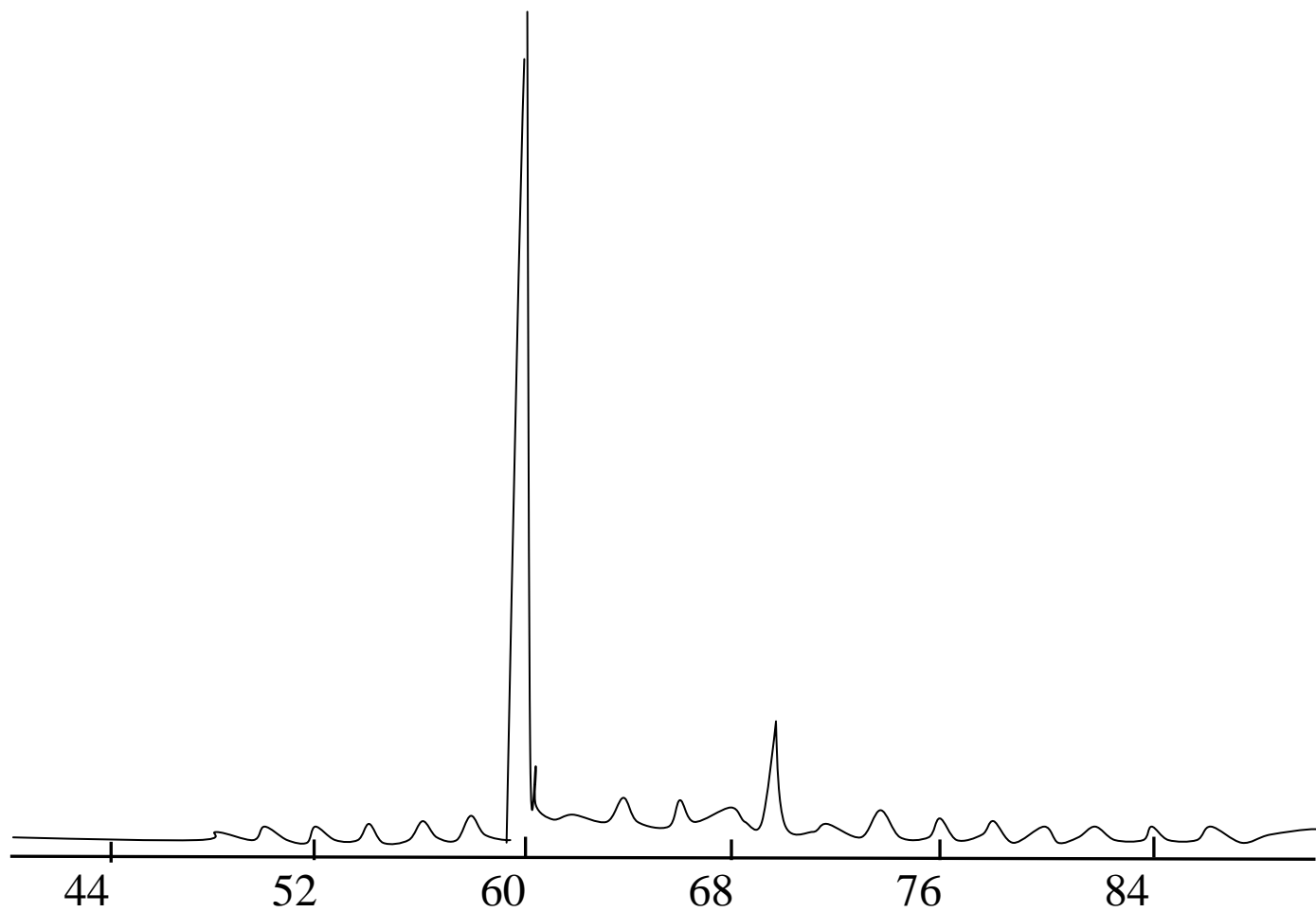
- $C_{60}$ 纳米管、纳米洋葱 →



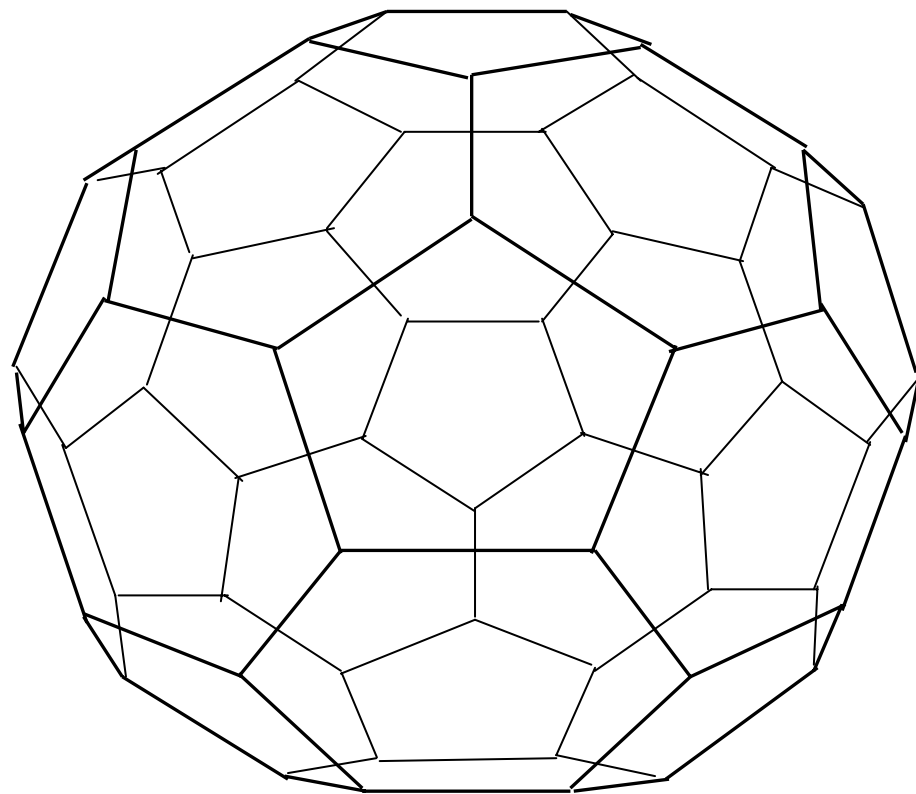
## 四、团簇

- 若干个原子或分子聚合形成的微小集团称为团簇 (Cluster), 它是一种特殊的集团分子, 包含几个一直到成千上万个同种原子或分子。
- 1942年第一篇报道, 1984年发现 $C_{60}$ 后形成高潮, 已有各种金属与非金属团簇及团簇固体。
- 团簇介于单个原子和凝聚态之间, 有人称它为介于物质气态和固态之间的“物质第五态”。
- 团簇有许多有趣的性质, 如存在幻数; 用Al, Co, Fe, Ti等团簇作成薄膜产生巨磁阻现象。





$C_{60}$ 和 $C_{70}$ 的质谱图



$C_{60}$ 的中空封闭笼形结构

**fullerene** ,  $\phi = 0.71\text{nm}$   
**布基球(Bucky-Ball)**

1990年发现用石墨棒电弧放电可以大量产生由C<sub>60</sub>团簇构成的C<sub>60</sub>固体, 这种稳定的C<sub>60</sub>固体成为继金刚石和石墨之后碳的第三种同素异构体。

C<sub>60</sub>固体为面心立方密堆积, 非常软。纯净的C<sub>60</sub>晶体不导电, 如在固体C<sub>60</sub>中掺入碱金属后, 常温下呈金属电导性, 低温下出现超导性, 其超导转变点温度T<sub>c</sub>(K)分别为19(K<sub>3</sub>C<sub>60</sub>), 30(Cs<sub>3</sub>C<sub>60</sub>), 33(RbCs<sub>2</sub>C<sub>60</sub>), 显然已大大打破有机物超导体的T<sub>c</sub>最高记录。



除了 $C_{60}$ 外,还有一系列的椭球状笼形结构,如 $C_{60}$ ,  $C_{70}$ ,  $C_{78}$ ,  $C_{80}$ ,  $C_{90}$ ,  $C_{96}$ 。如果增加的圈数很多,就形成管状碳纳米管,直径仅有几到几十nm、管壁厚度仅有几nm、长度可达几十 $\mu\text{m}$ 、甚至几mm的微管,最小的外径仅1nm,也称碳纳米丝。

碳纳米管有很奇异的导电性,它可以是半导体,绝缘体,或是金属导体。甚至在同一根碳纳米管上,由于结构的变化,在碳纳米管的不同部位也可以呈现出不同的导电性质,形成一个异质结,具有整流作用。

碳纳米管还具有非凡的力学性质。由一层碳原子卷曲而成的单层碳纳米管的强度估计为钢的100倍,而比重只有钢的六分之一。它的最大延伸率可达20%。它的热稳定性也很好,是复合材料中加强材料的优秀候选者。

1992年D.Ugarte用强电子束辐照方法轰击碳纳米管,使它的结构发生畸变后逐渐非晶化,继而收缩趋于球形,最后得到一些封闭的多层石墨的球形笼子结构,称为碳纳米洋葱。

## 五、精密测量

- 原子分子束磁共振装置和离子阱 →
- 量子电动力学检验： $g$ 因子测量 →
- 原子钟和计量标准 →

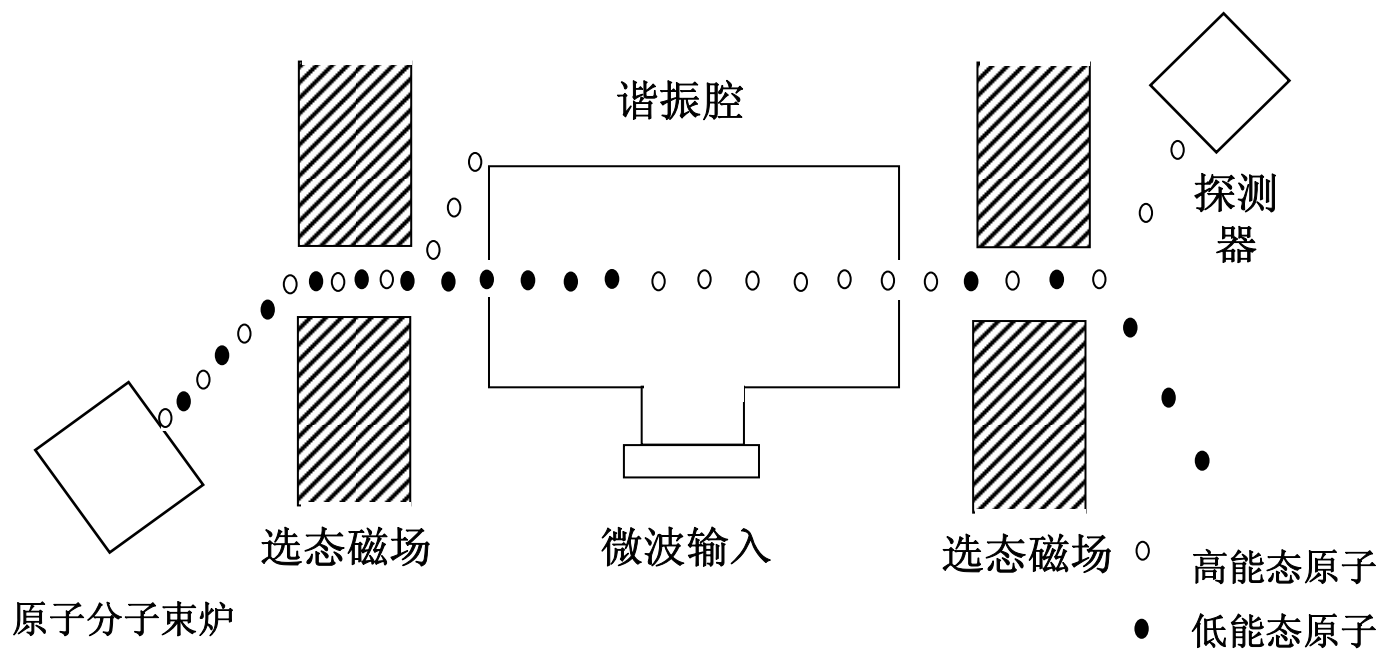


图 原子分子束磁共振测量原理

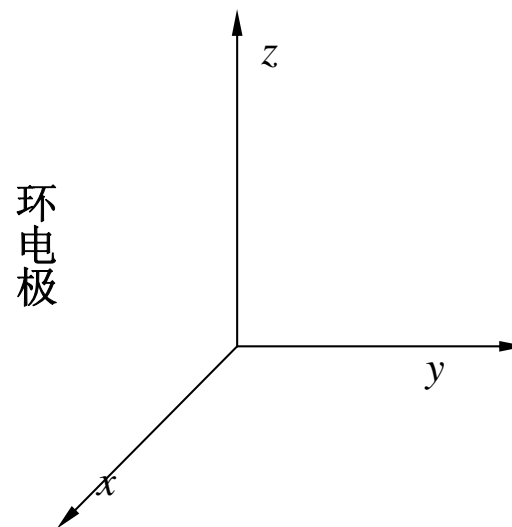
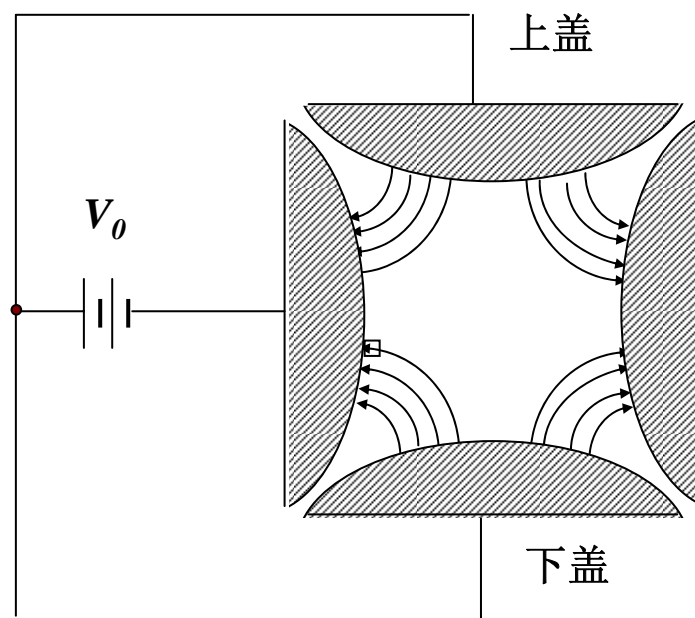


图 潘宁阱





- 量子电动力学检验： g因子测量

$$\boldsymbol{\mu} = -g(e/2m)\mathbf{I}$$

对电子自旋，量子力学理论 $g=2$ ，实际上  $a=g/2-1 \neq 0$ ，  
可用量子电动力学理论解释

$$a_e(\text{实}) = 1159652188.4(4.3) \times 10^{-12}$$

$$a_e(\text{理}) = 1159652232(31) \times 10^{-12}$$

$$(g_e(\text{理})-g_e(\text{实}))/g_e(\text{实})=1 \times 10^{-10}=\text{百亿分之一}$$



# • 计量标准和原子钟

每个物理量都可表示为一个纯数和一个计量单位的乘积，计量单位用“国际单位制”，包括7个基本单位（长度、质量、时间等）、二个辅助单位和47个导出单位。

计量单位的标准正在由过去的用宏观实物和物理现象来定义转变到用微观物理量（如原子跃迁能量或频率）和基本常数来定义。

\* 秒 1899年 (1/86400) 平均太阳日

1956年 (1/315569259747) 1900年的太阳回归年

1967年  $(9192631770) \times {}^{133}\text{Cs}$ 的 $6^2\text{S}_{1/2}(F=4 \rightarrow F=3)$ 跃迁周期  $\Rightarrow$

\* 米 1899年 铂铱合金米棒

1960年  $(1650783.73) \times {}^{86}\text{Kr}$ 的 $5\text{D}_5 \rightarrow 2\text{P}_{10}$ 跃迁的波长

1983年 (1/299792458)秒光走过的路程

\* 电压 1990年 交流约瑟夫森效应  $2eV/h = n v = K_J V$

\* 电阻 1990年 量子霍尔效应  $\rho_{xy} = -V/I = h/ie^2 = R_K/i$   $\Rightarrow$

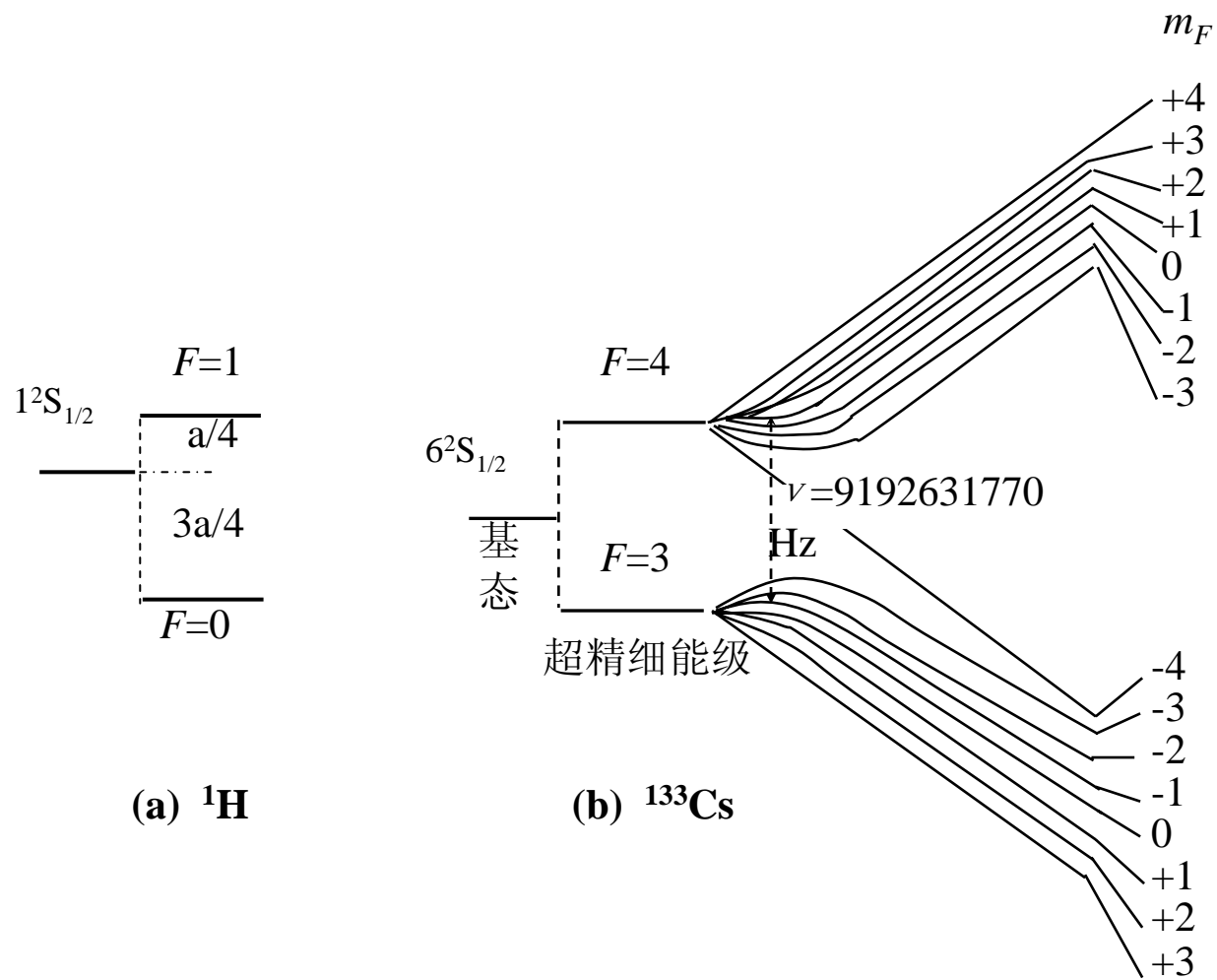


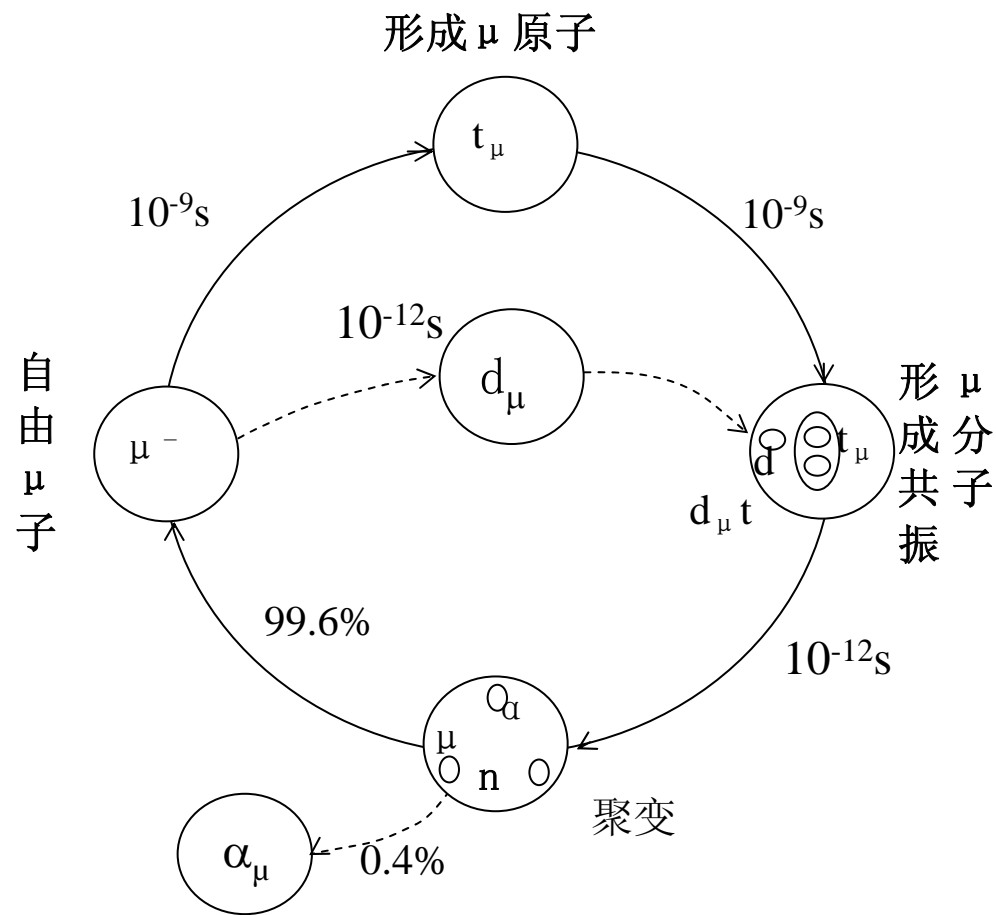
图  $^1\text{H}$ 和 $^{133}\text{Cs}$ 原子基态超精细结构



## 六、奇特原子分子

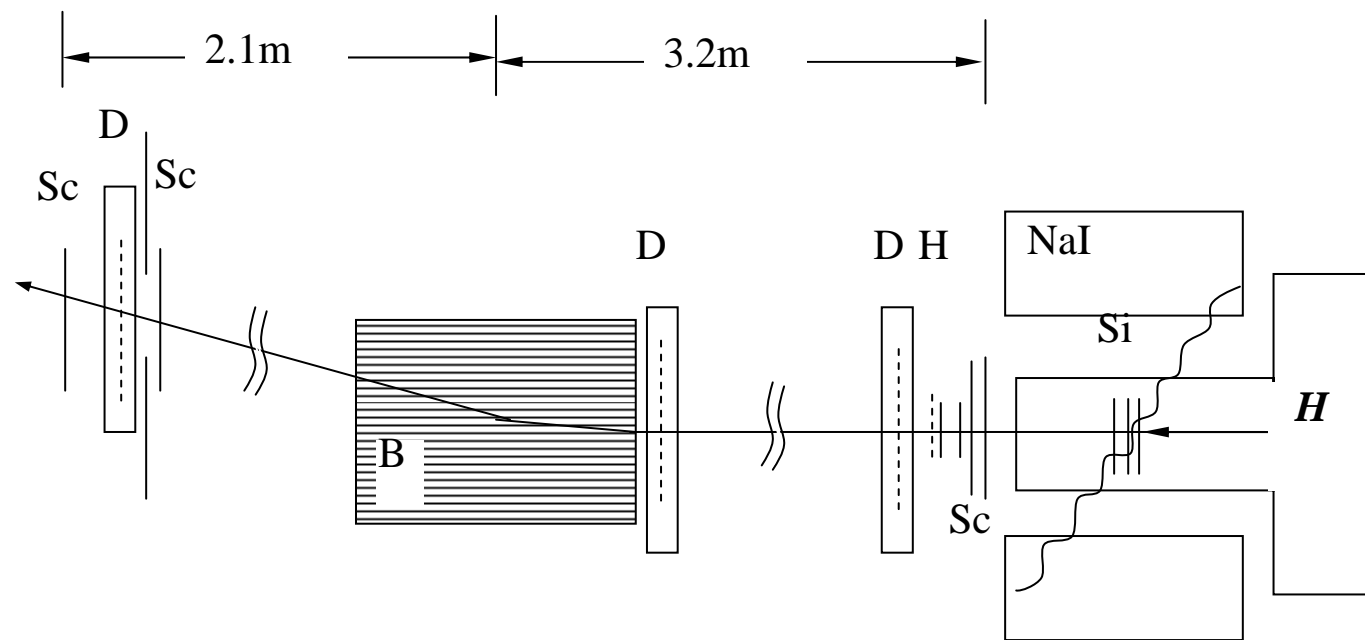
不是由正常的电子和原子核组成的原子分子

- 中子星
- 奇特原子和  $\mu^-$  子催化受控聚变反应  $\Rightarrow$   
 $\mu^-$  子原子,  $\pi^-$  子原子, K-介子原子, 反质子原子  
 $(d_\mu t) \rightarrow \alpha + n + \mu^- + 17.6\text{MeV}$
- 反氢原子  $\bar{\text{H}}$   $\Rightarrow$   
 $p^- + Z \rightarrow p^- \gamma \gamma Z \rightarrow p^- e^+ e^- Z \rightarrow \bar{\text{H}} e^- Z \rightarrow \text{H}^- + e^- + Z$
- 电子偶素  $\Rightarrow$



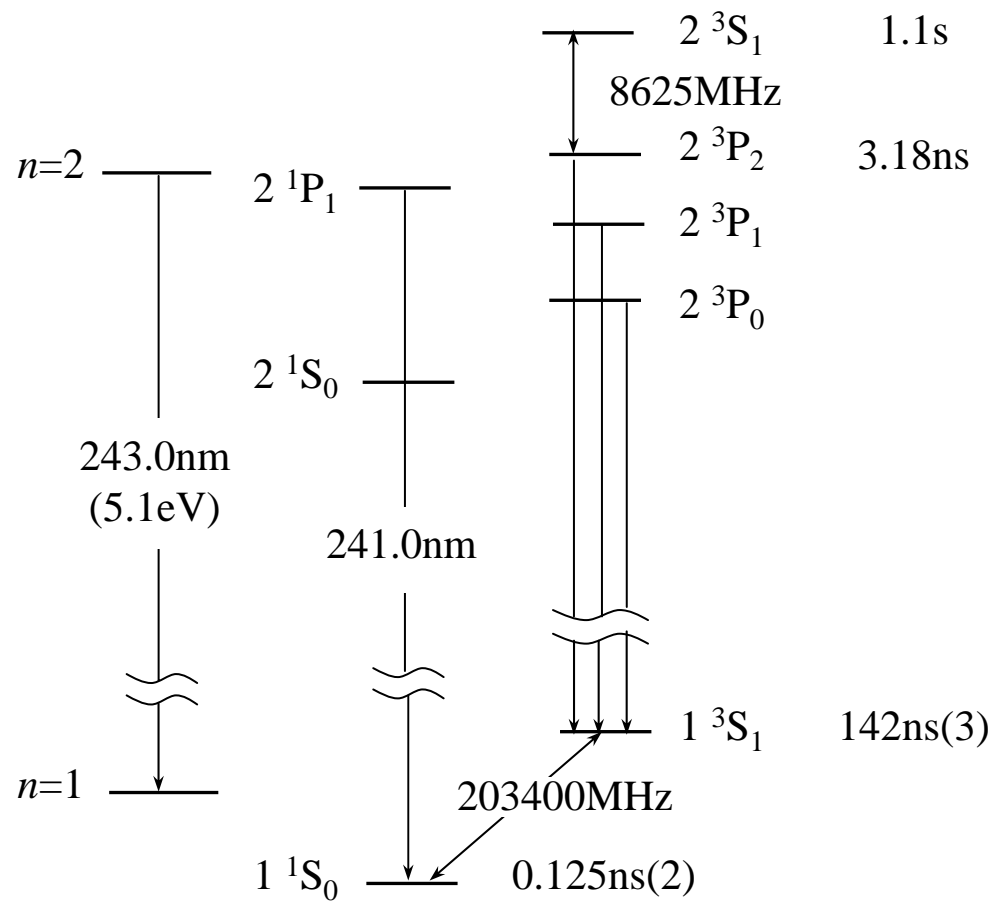
$\mu$  子催化核聚变





反氢原子的鉴别实验装置





电子偶素的能级图

# 七、强场效应

- 强电、磁场中的原子

目前地球上所能产生的电、磁场对原子作用都是微扰

$B=10\text{T}$ 产生能级塞曼分裂 $1\text{meV}$

$E(\text{H基态电子受到的})=5.14*10^9\text{V/cm}$

只有用里德伯原子研究强电、磁场效应

磁场：在实验上发现准朗道振荡，用封闭轨道理论

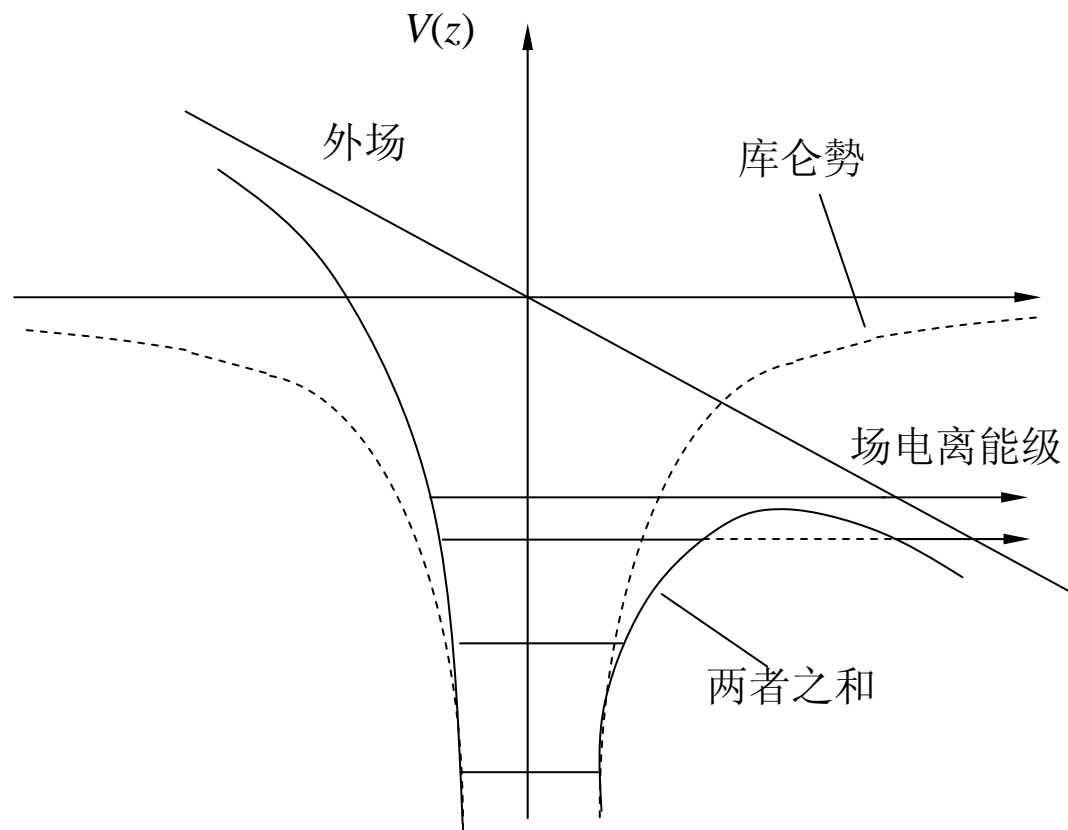
电场：产生非线性斯塔克效应

- 强激光场中的原子



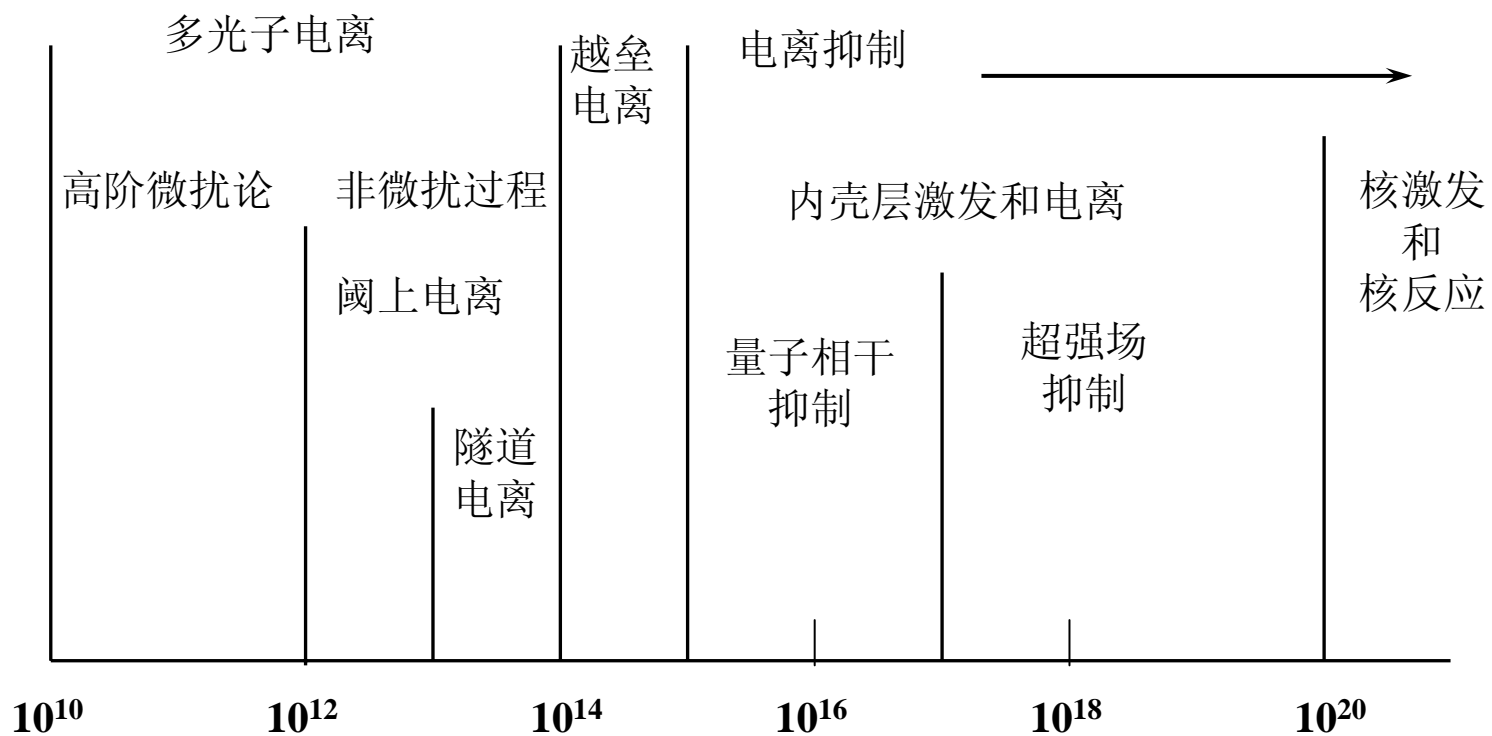
$$I = (c/8\pi)E^2 = \text{功率/焦斑面积 (W/cm}^2) \geq 10^{10}\text{W/cm}^2$$



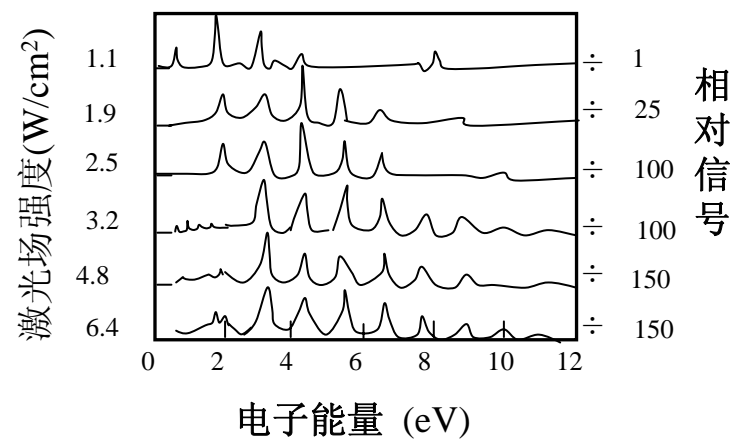
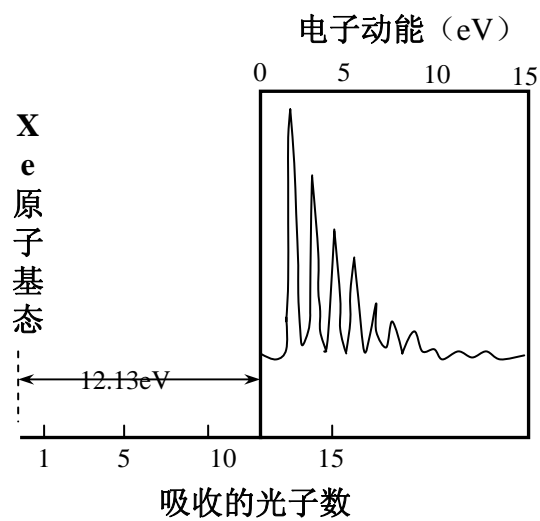


外静电场对原子电离的影响





强激光场与原子相互作用区域



## Xe原子的阈上电离光电子能谱

$$E_e = nh\nu - E_i$$

$$E_{ATI} = E_e + nh\nu = N h\nu - E_i$$



# 八、单原子分子测控

- 导言 →
- 扫描探针显微镜 (SPM) →
- 单原子分子成像和移动 →  
    成像、写字、量子围栏、C<sub>60</sub>分子成像
- 单分子的操纵 →  
    分子旋转、分子化合、分子拆分
- 原子分子识别 →
- 原子级器件的组成 →

# 八、单原子分子测控

## • 导言

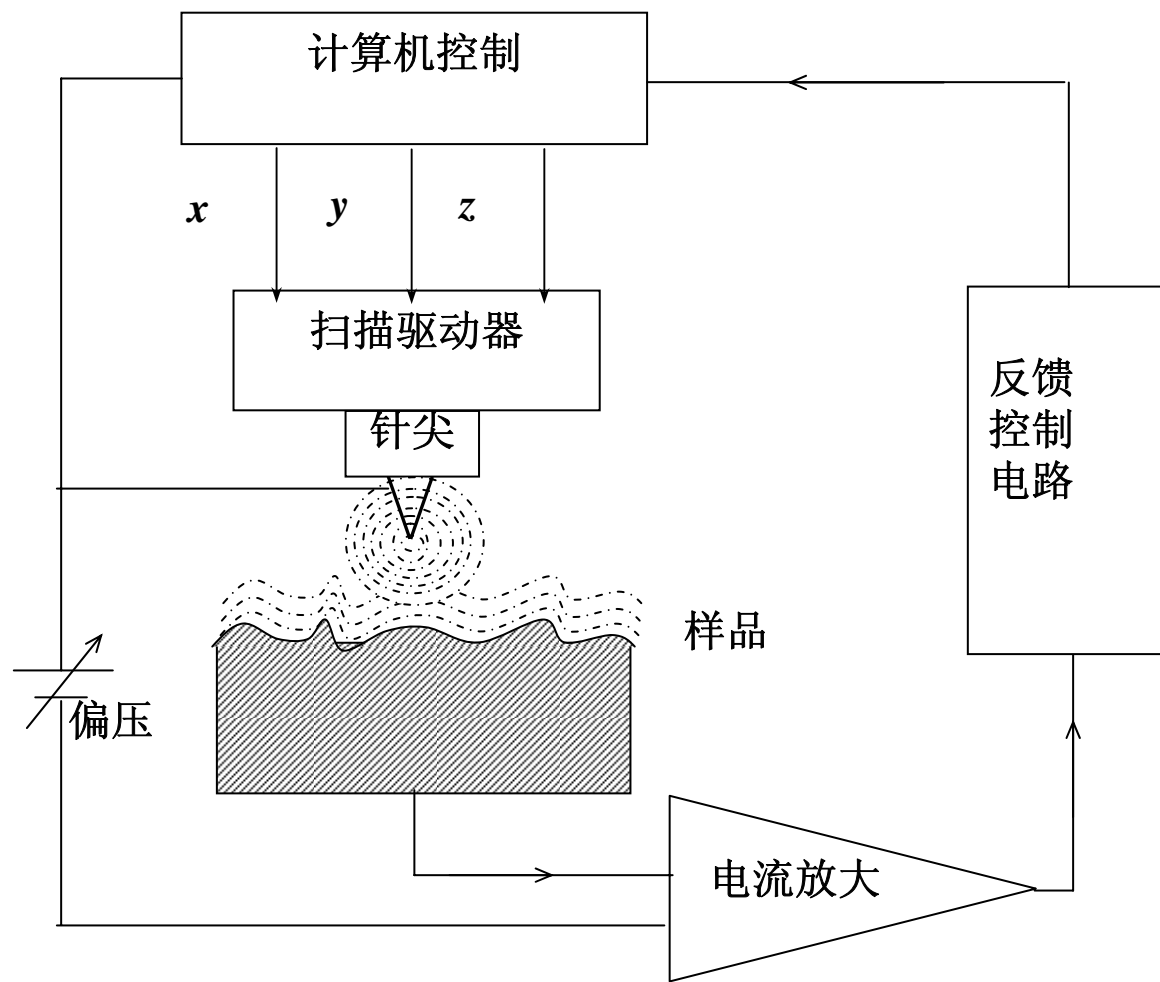
- 在1959年12月召开的美国物理年会上，著名物理学家、诺贝尔奖得主费曼在演讲中为人们描述了这样一个梦想：“如果有一天可以按人的意志安排一个个原子，将会出现什么样的奇迹？...这些物质将有什么性质？这是十分有趣的物理问题。虽然我不能精确地回答它，但我绝不怀疑当我们能在如此小尺寸上进行操纵时，将得到具有大量独特性质的物质。”
- 按人的意愿实现对单原子分子的测控是人类梦寐以求的理想。这种单原子分子测控应该包括以下几方面：
  - 成像（利用一定手段看到单个原子分子）
  - 识别（识别所看到的是何种原子分子）
  - 操纵（对单原子分子的捕获、移动及转动）
  - 组合分解（将不同的单个粒子重新排列组合以形成新的分子或器件，或者将单分子分解为多个粒子）。



# 九、单原子分子测控

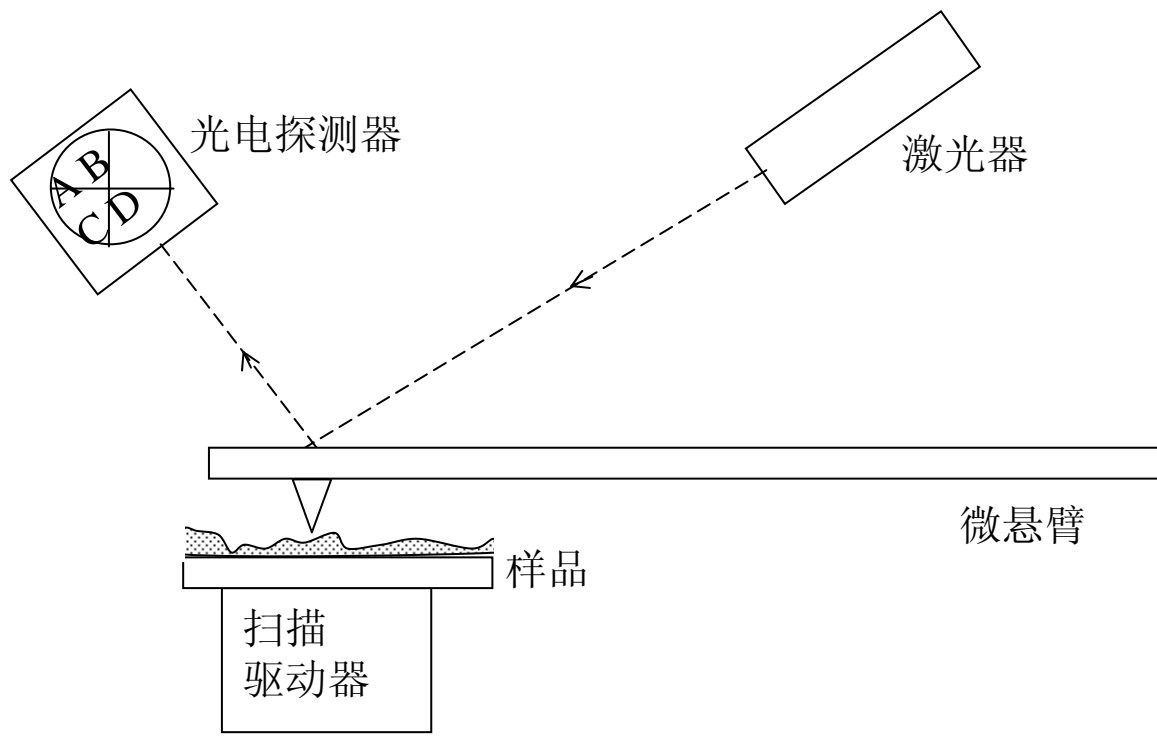
## • 扫描探针显微镜

- 扫描隧道显微镜 (STM) ⇒  
扫描力显微镜 (SFM)
- 原子力显微镜 (AFM) ⇒  
磁力显微镜 (MFM)  
静电力显微镜 (EFM)  
摩擦力显微镜 (LFM)
- 扫描近场光学显微镜 (SNOM) ⇒  
扫描近场微波显微镜 (SNMM)



扫描隧道显微镜的工作原理

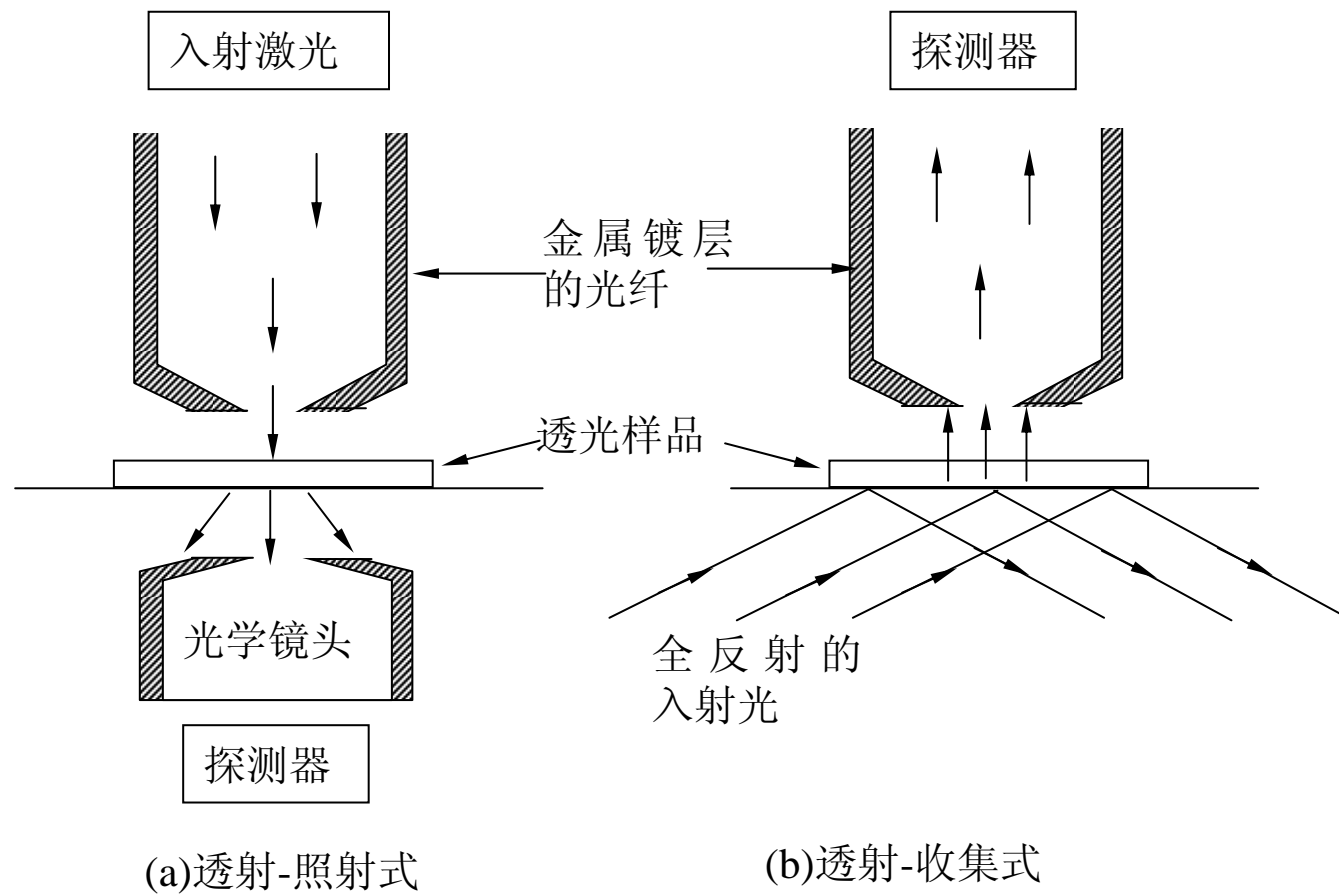




原子力显微镜的工作原理

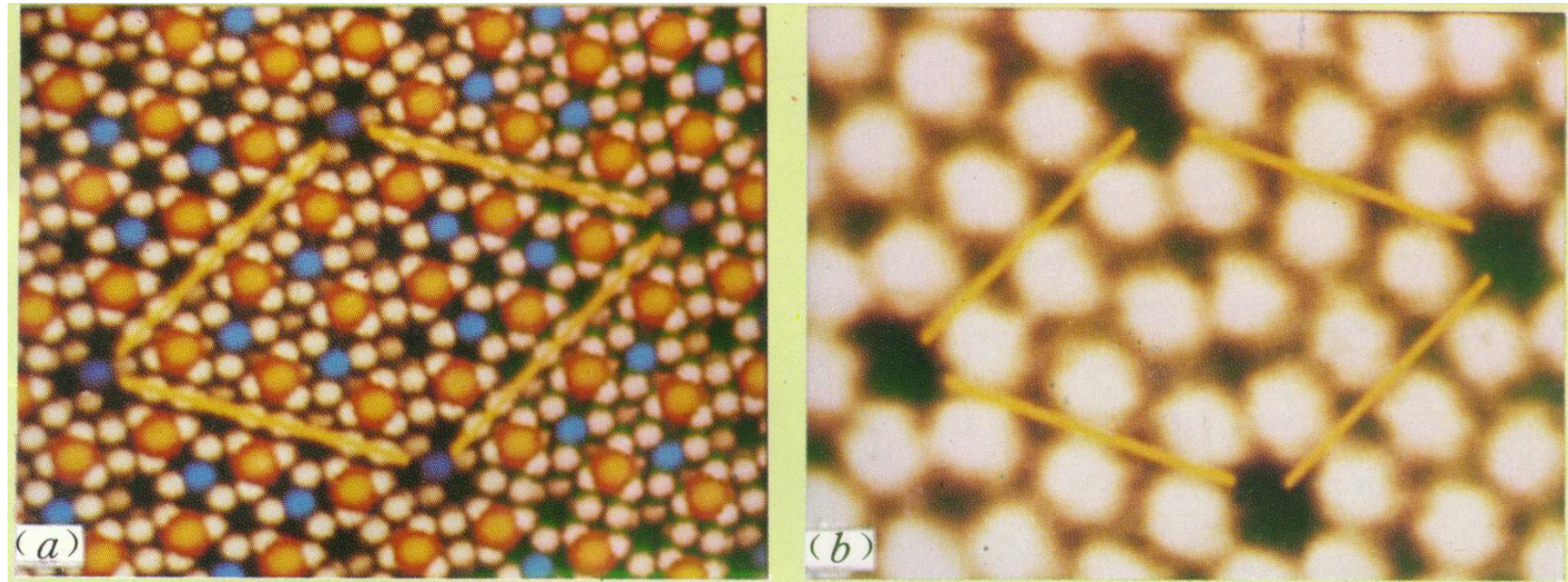






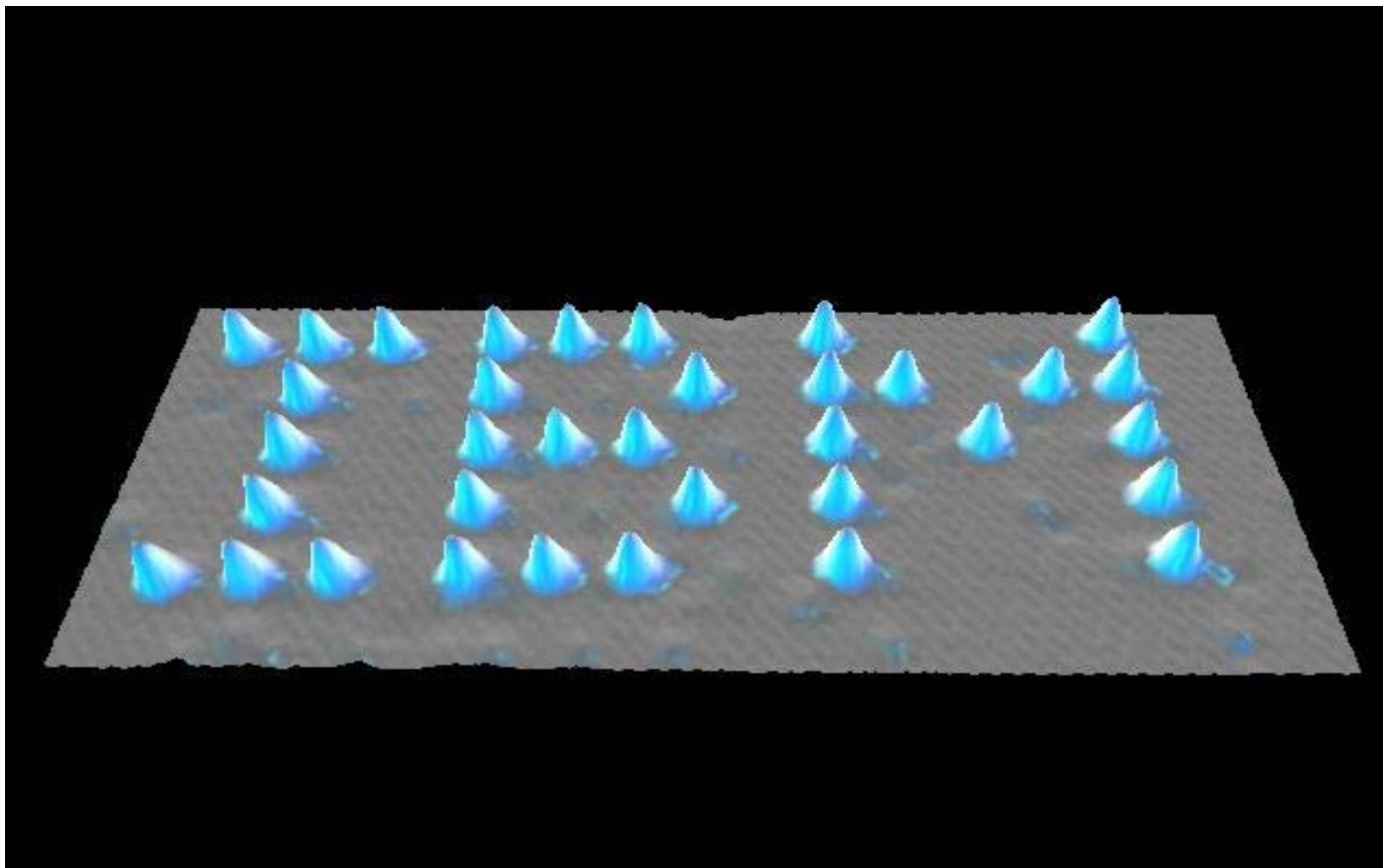
近场光学显微镜的两种典型光路



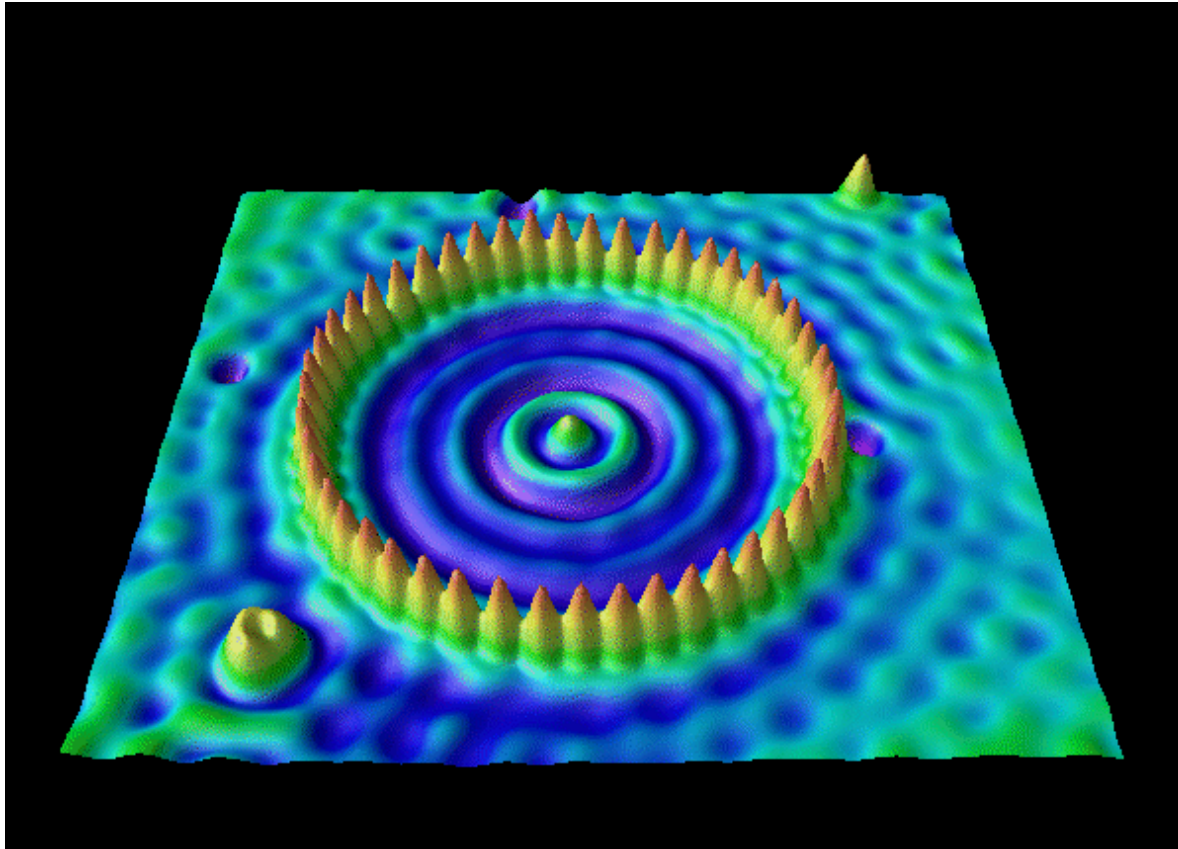


## Si(111)7×7重构图

(a)是用计算模拟的顶视图，用从小到大的球来表示硅原子离表面的远近  
(b)是用扫描隧道显微镜得到的表面形貌图，表面元胞内12个凸起的原子清晰可见

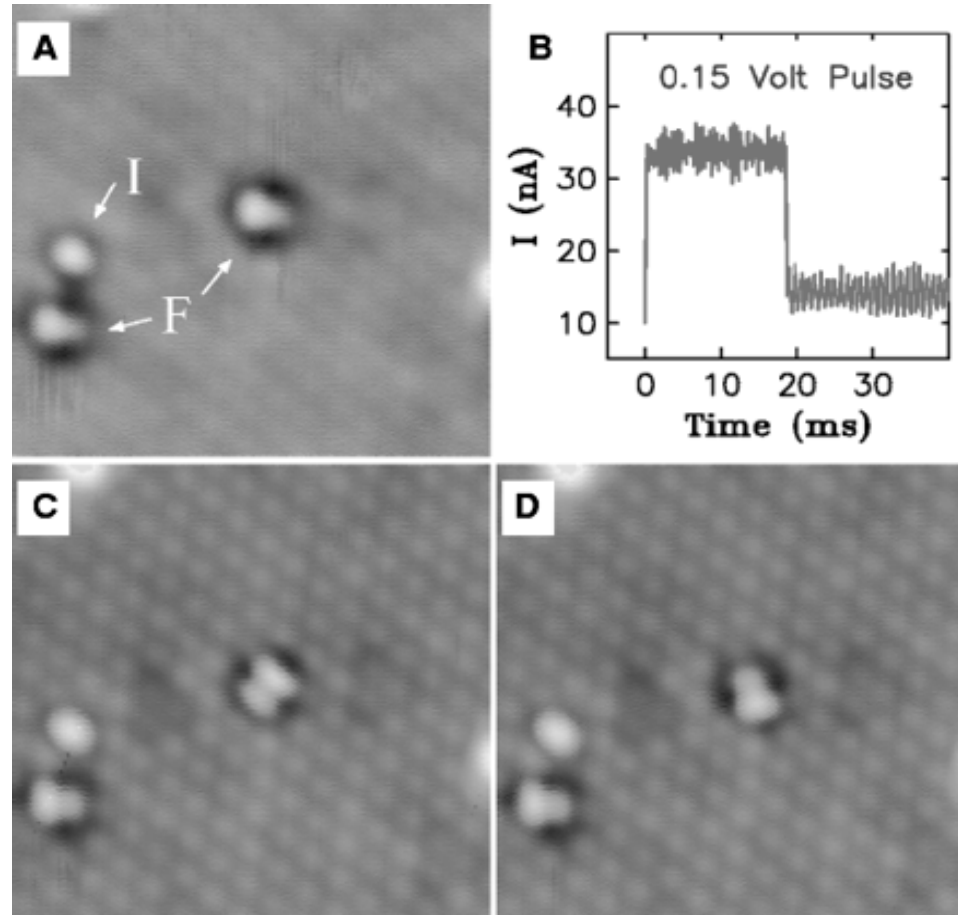


利用STM移动Ni (110) 表面上的35个Xe原子，组成IBM三个字



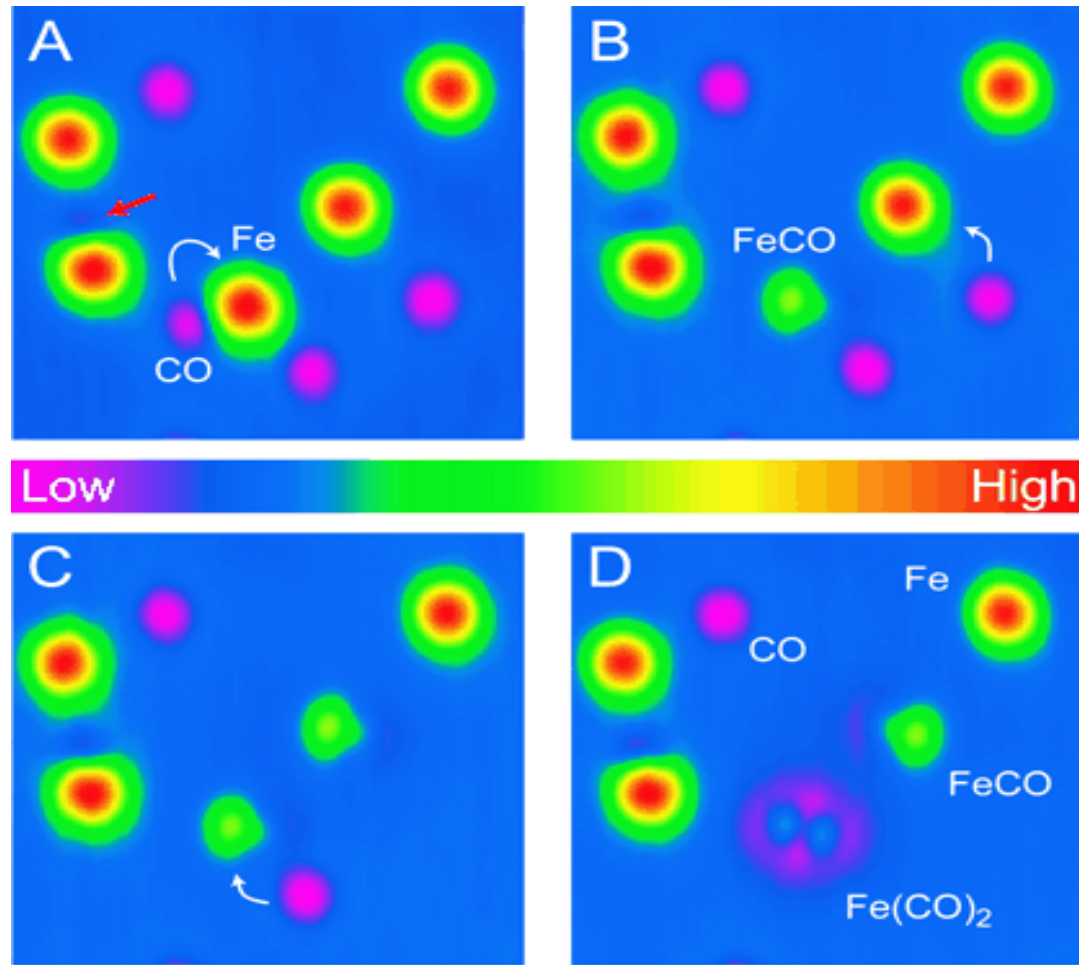
利用STM操纵48个Fe原子在Cu(111)表面构成的量子围栏，将一个表面态电子围在内而形成驻波





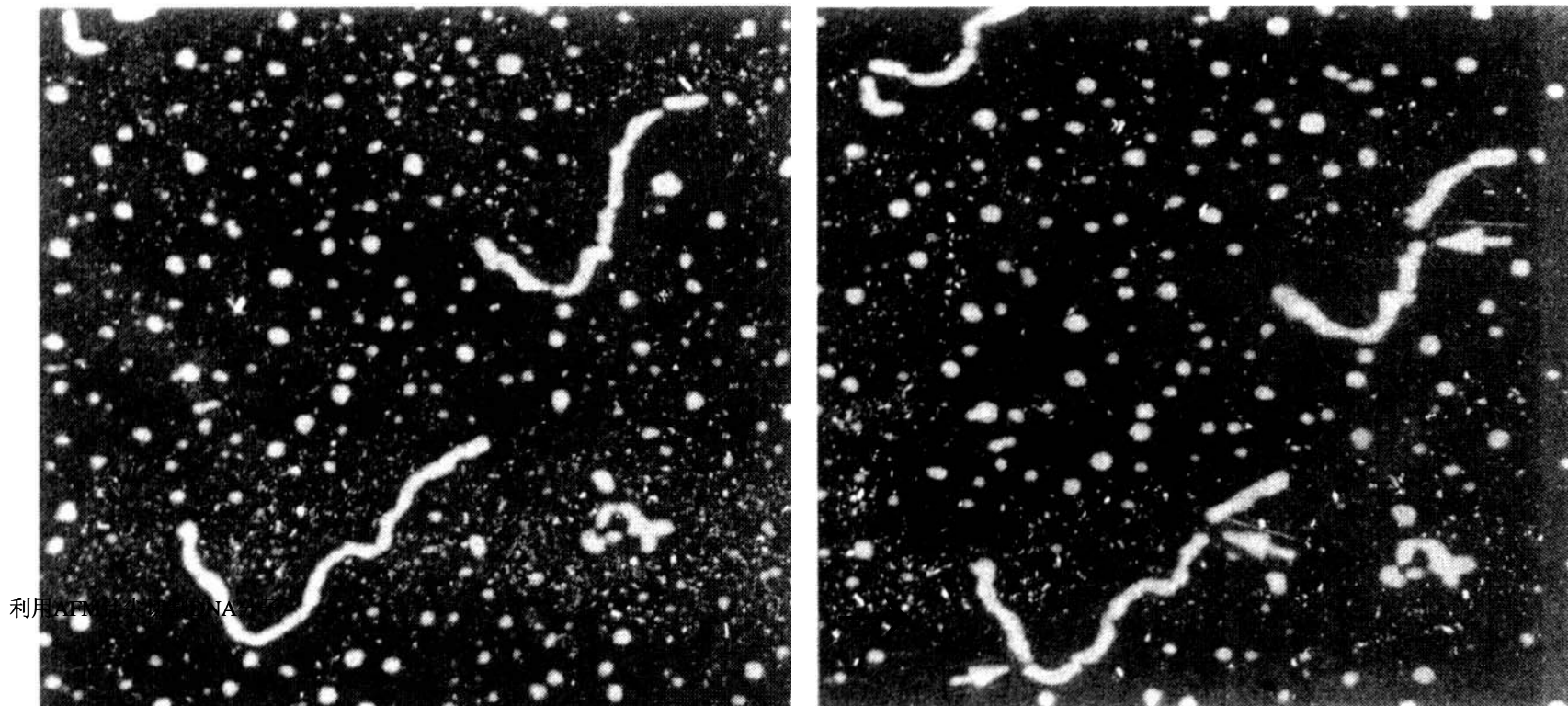
利用STM进行的氧分子旋转操作

图a是两个梨型的氧分子在Pt(111)面上的STM像（图中用F标出），I是一个缺陷，用来作为标记。对其中的一个氧分子（右边的）连续加脉冲，可以从图c及图d中看出，这个氧分子发生了旋转，而没有加脉冲的那个氧分子（左边的）则保持原来的取向不变。



分子化合实验过程的STM像。其中，Fe原子表现为突起，CO原子为下陷。白色箭头标明了操作内容。

图A：实验提取一个吸附在Ag（110）表面的CO分子到STM针尖上，然后移动STM针尖到一个同样吸附在Ag（110）表面的Fe原子上方，使针尖上的CO分子与Ag表面的Fe原子成键，生成Fe（CO）即图B



利用AFM针尖切割DNA分子

### 利用AFM针尖切割DNA分子

开环线形pBR322质粒DNA分子被AFM针尖剪切的图像。图a是剪切前的AFM像，图b是剪切后的。图b中的箭头标明了剪切的位置，可以看出，共有三处被AFM针尖切断。



# 八、单原子分子测控

## • 原子分子识别

- 单原子、分子的识别要难得多，仍未能解决  
    要求原子级的空间分辨、单原子元素分析及无损探测
- 微区元素分析的进展：
  - 扫描质子束荧光分析，空间分辨达到0.1微米
  - 扫描俄歇技术，空间分辨达到几十纳米，使用了场发射针尖电子枪和磁平行器的高分辨扫描俄歇谱仪，其空间分辨小于10nm。
- 单原子识别上的进展 →
- 单分子识别上的进展 →



# 八、单原子分子测控

## 单原子识别上的进展

- 使用了场发射针尖电子枪的高分辨扫描俄歇谱仪，其空间分辨能达到10-1nm
- 原子探针场离子显微镜(APFIM,AP) (TOF+FIM)，具有高空间分辨和单原子元素分析的优点，但缺点是样品必须制成针尖的形状，很难有选择地对某个特定的原子进行测量，在测量后将被测原子“丢失”。
- **STM+TOF**  
利用STM的针尖扫描可以找到样品上我们感兴趣的原子，然后加脉冲电压将原子从样品上转移到STM的针尖上。以后的过程与AP测量类似，用强场使针尖上的吸附原子解吸附（场蒸发），进入飞行时间谱仪进行质谱分析，从而鉴别出原子种类。仍有在测量后将被测原子“丢失”的缺点。
- **STM+STS, STM+EES（电子能谱），均未实现。** →

# 八、单原子分子测控

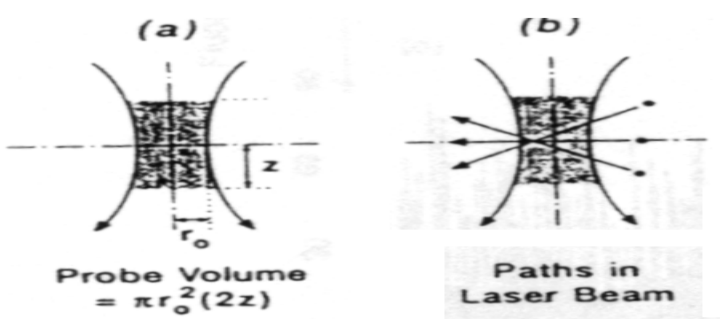
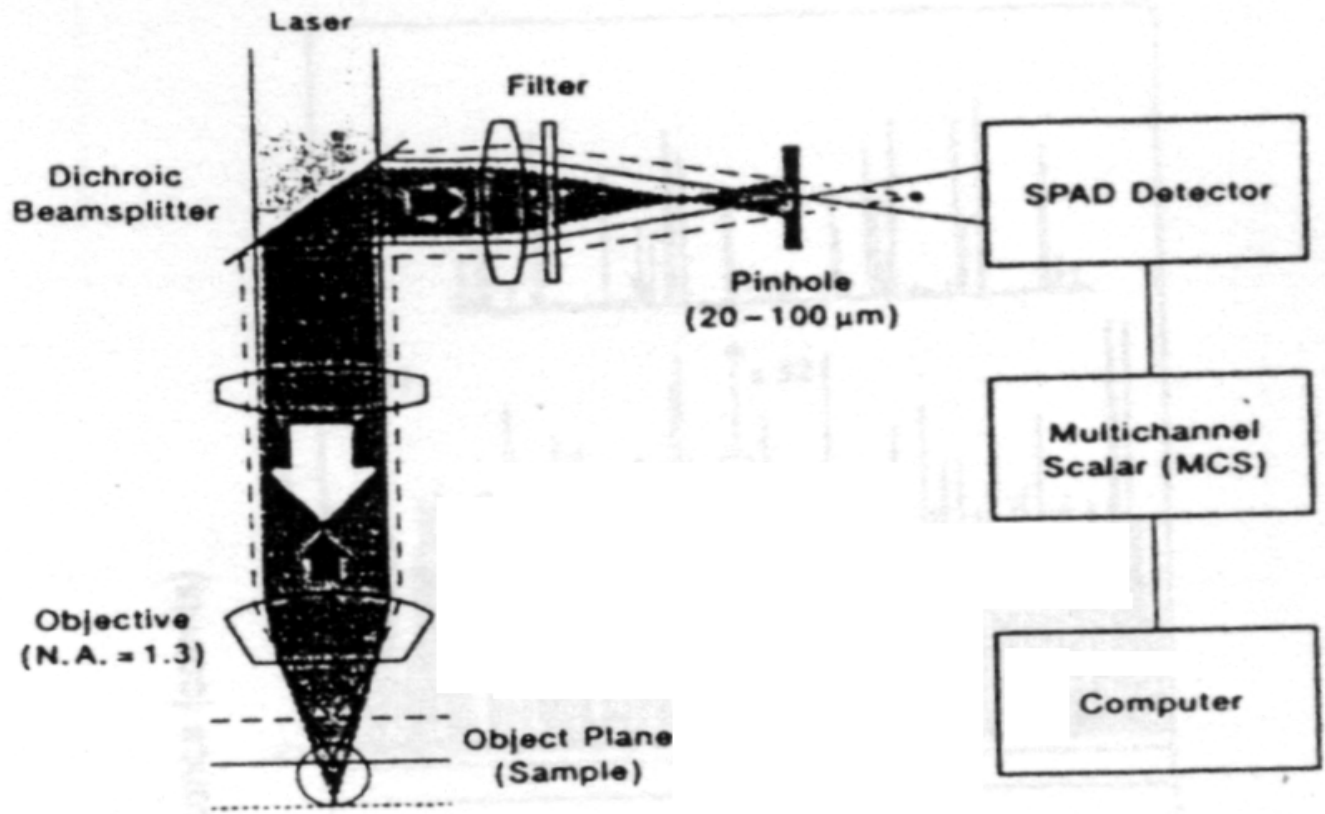
## 单分子识别上的进展

- 用扫描共焦荧光显微镜对一些大分子进行单分子荧光分析 →

光学方法的能量分辨很高，扫描共焦荧光显微镜的光收集效率很高，因此它可以探测到单分子发出的荧光。但空间分辨还不够高，因此只适用孤立的或相互距离较远的大分子，特别是用在单个生物大分子的研究上。

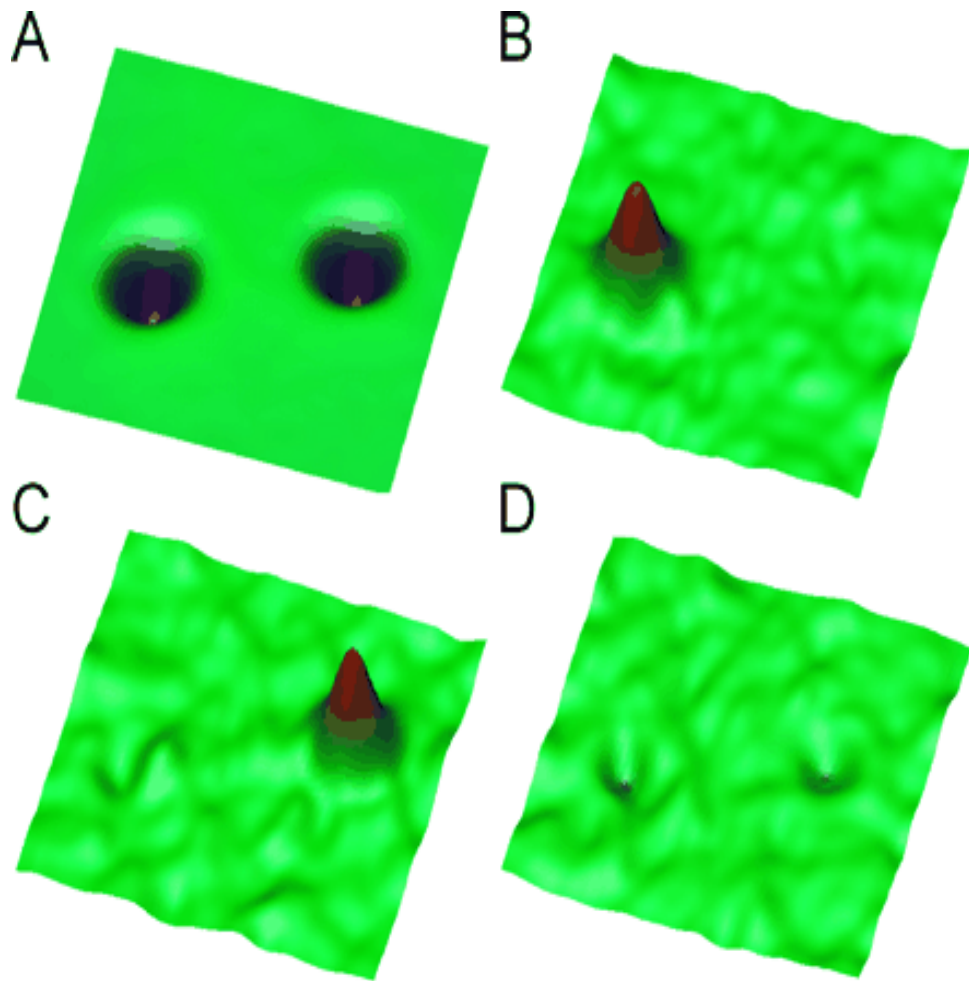
- 用STM的STS进行的单分子振动能谱测量

扫描隧道谱（STS）由于受到隧道偏压的限制，最高只能测量几个eV的电子能量，因此对于原子识别非常困难。但在分子方面，几eV已经能够激发一些分子的振动能级，所以对单分子进行STS测量就有可能得到单分子的振动谱。 →



**Figure 1.** Schematic diagram of the confocal fluorescence microscopy system: (a) probe volume; (b) trajectories across the probe volume.





图是实验得到的 $C_2H_2$ 分子和 $C_2D_2$ 分子的各种扫描隧道图象。A图是普通的扫描隧道图象（用隧道电流 $I$ 做反馈控制），B、C、D均是用 $d^2I/dV^2$ 信号进行反馈控制得到的扫描图像，其中B图为扫描偏压358mV(对应C-H键分布)，C图266mV(对应C-D键分布)，D图311mV。

$C_2H_2$ 分子和 $C_2D_2$ 分子的各种扫描隧道图象



# 八、单原子分子测控

- 原子级器件的组成

- 单原子（离子）原子钟

已用激光冷却的单离子作为时间标准取得较大进展。实验对接近绝对零度下的近似无速度、无电磁场的孤立离子测得的频率为：

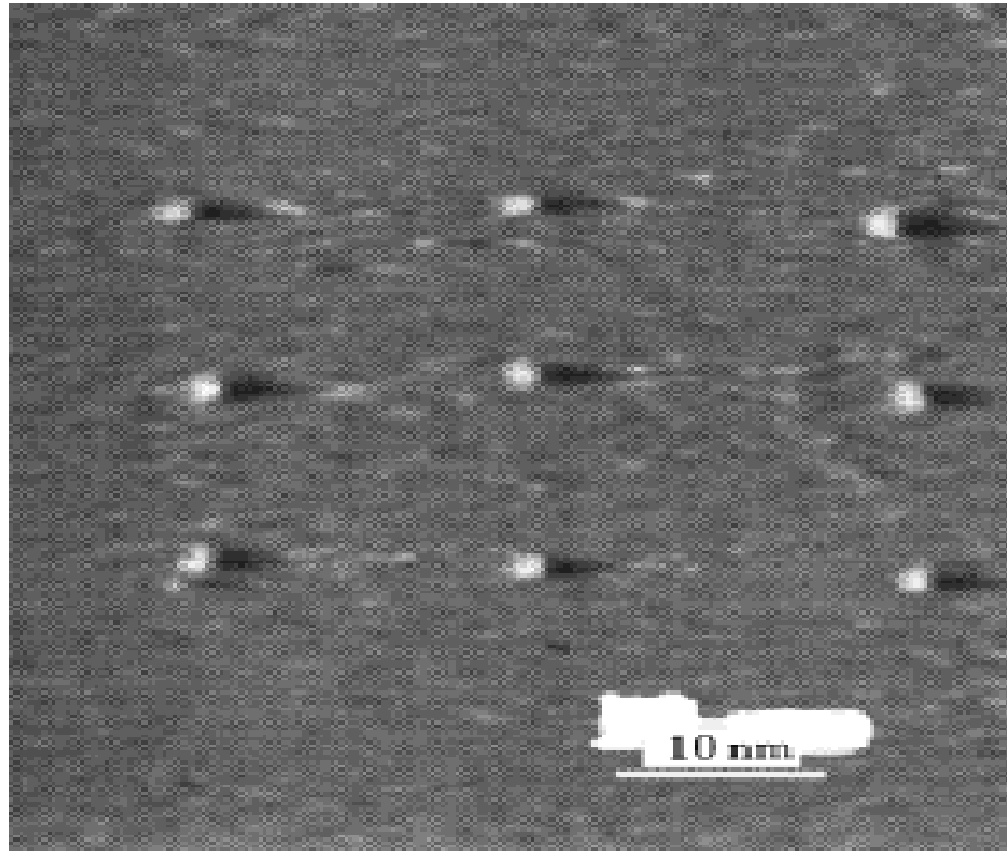
12,642,812,118.468±0.0016 Hz，这样的精度虽然比目前精度最高的铯钟（ $\sim 2 \times 10^{-14}$ ）差了将近一个数量级，但已经超过了氢钟的精度（ $\sim 7 \times 10^{-13}$ ）

- 超高密度数据存储材料 →

- 分子转子 →

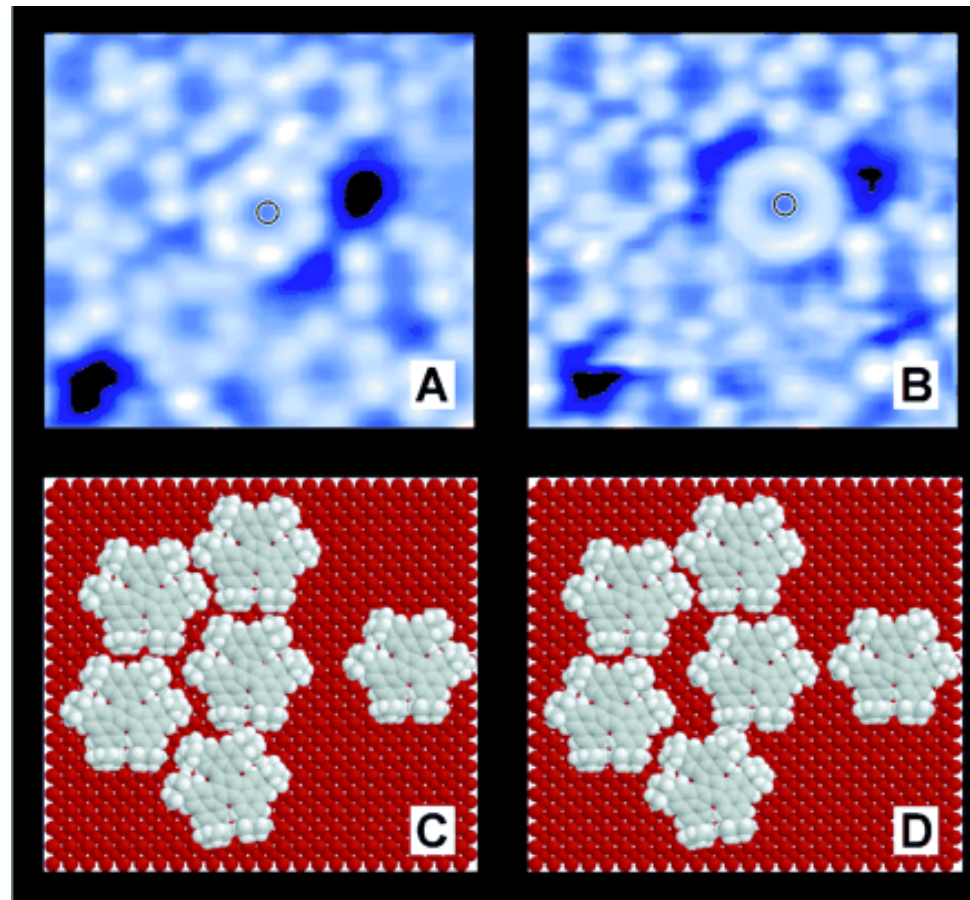
- 分子电子学器件 →

- 量子计算机 →



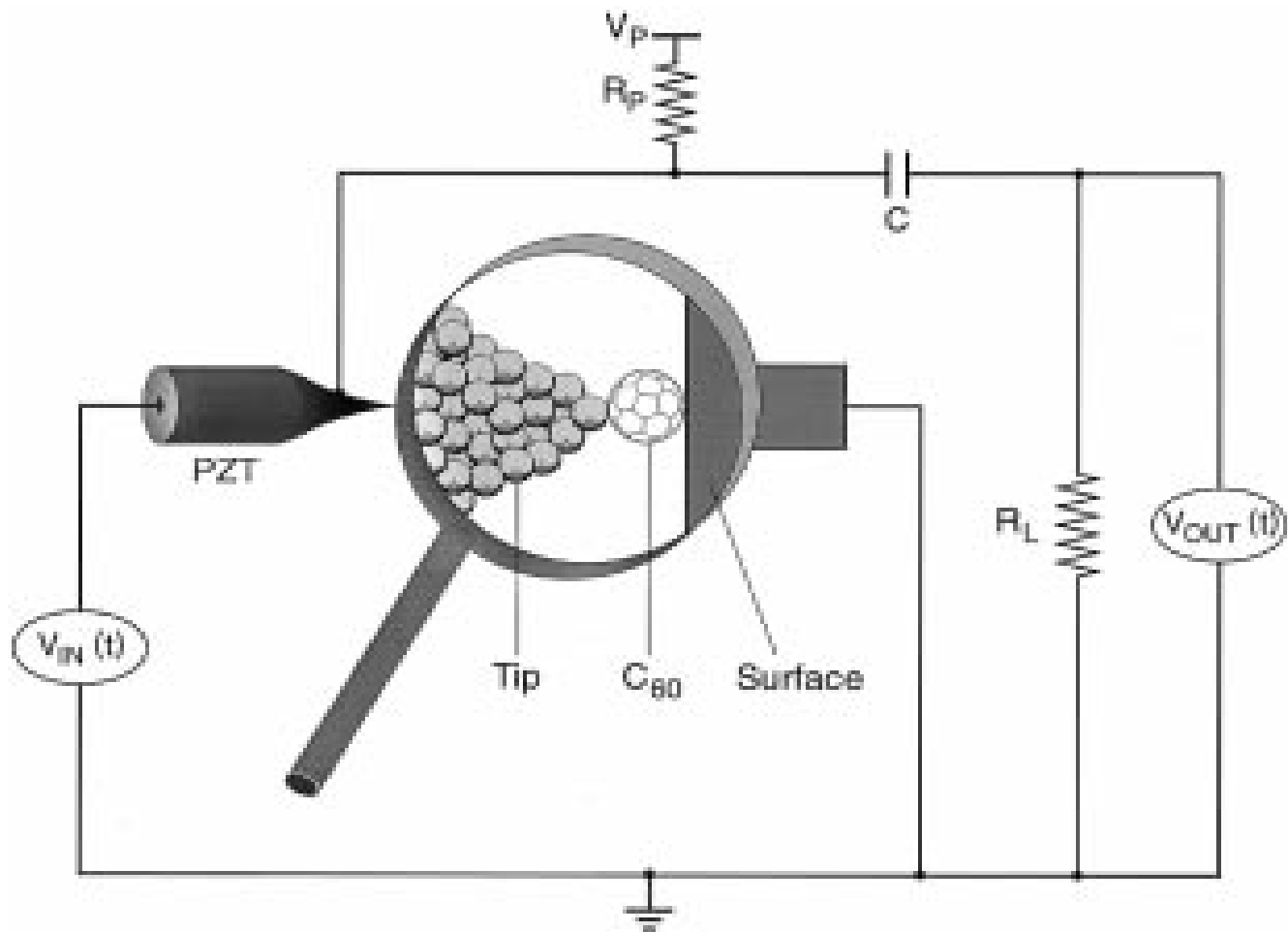
直径为1.3nm的信息存储点的简单点阵的STM像

图中的亮点导电性好，是电学双稳态中的“1”态；而暗区（即背景）导电性差，是电学双稳态中的“0”态。对亮点和暗区进行的扫描隧道谱（STS）测量证明了这一点。图中亮点边上的阴影是STM在进行恒流模式扫描时，由于针尖在亮点处提起而未能及时还原造成的。另外，实验还证实，“1”、“0”两种状态转换的时间为几十纳秒，这样信息的写入速度可达到10Mbit/s。



### 分子转子的STM图及理论计算模型

STM图A：HD-DC分子应该呈现出由6个亮圆点构成的六边形。图B：在一些对称性低的吸附位置，HD-DC分子发生了快速旋转，结果在图中成为一个圆环。为了确定圆环是由完整的HD-DC分子旋转形成的，而不是分子分解或分子结构改变的结果，实验利用单分子操纵技术将图B中圆环处的分子平移了0.26nm（即衬底Cu一个晶格的距离），得到图A。可以看出，B中的圆环经平移后在A中呈现明确的六角形结构，说明了HD-DC分子在不同的吸附位置会有不同的运动状态：固定和旋转。图C、D分别是A、B的理论模拟模型。



单分子电压放大器的示意图



利用输入电压 $V_{in}$ 驱动STM的针尖向隧道结中的 $C_{60}$ 分子移动，造成 $C_{60}$ 分子的形变，以改变通过隧道结的电流。实验证明，STM针尖向下移动0.1nm，会使经过 $C_{60}$ 分子这条支路的电流强度增加2个数量级。通过偏置电阻和负载电阻，将电流转换成电压输出 $V_{out}$ ，达到电压放大的目的。





# 八、单原子分子测控

- 量子计算机

- 原理 
- 实现的方法: 
  - \* 光腔
  - \* 离子阱
  - \* 液体核磁共振
  - \* 量子点
  - \* 硅基核磁共振
  - \* 超导量子干涉
  - \* 电子自旋共振



# 量子计算机的原理

- 二进制的经典存储器：经典位(**bit**)是两个数0或1之一，它们正交但无叠加。
- 二进制的量子存储器：量子位(**qubit**)是两个正交态  $|0\rangle$  和  $|1\rangle$  的任意叠加态

$$|\psi\rangle = a|0\rangle + b|1\rangle, \quad |a|^2 + |b|^2 = 1$$

因此量子计算机的存储量大得多。

- 具有任意两态的量子体系都可成为量子位的载体，如二能级的原子，光子的两个偏振态，自旋为1/2的粒子。



# 十一、量子计算机的实现方法

光腔**QED**方法利用的是原子与光腔光子的相互作用。原子的能级、光子的偏振都可以作为量子位，量子位之间的耦合通过原子与光腔作用或光子与光腔作用实现。这种方法的主要问题是很难实现量子门之间的连接，无法形成网络。而且光腔的制作要求很高，受环境的影响也很大，要达到实用阶段非常困难。而且超导光腔需要极低温，因此这并不是实现量子计算机的最佳方案。

离子阱方法用束缚在冷阱中排成一线的离子的超精细结构能级作为量子位，用两束频率相差很小的激光诱导喇曼(**Raman**)跃迁来控制量子位的状态。调节激光的作用时间，就可以实现对单量子位态的任意旋转操作。离子通过相互间的库仑力耦合而成集体振动。激光的作用能同时影响离子内部的能级和外部的水平集体声子振动，从而使二者耦合起来。通过离子的水平集体声子振动，量子位之间实现了相互纠缠。由于多个离子规则排列、多位激光寻址等技术上的困难，因此很难实现很多量子位。另外，离子必须冷却至基态，因此需要超低温。

核磁共振方法利用分子的核自旋在磁场中的超精细结构分裂作为量子位，量子位的操纵由射频场完成。它不是基于单原子(光子、离子)的，而是利用了大量分子的统计特性来作为量子位，实验是在室温下进行的，因此受外界干扰很小，而且测量对态的影响也很小。用这种方法，退相干几乎不用考虑。另外，各逻辑门间的连接也较容易，使它成为实现量子计算机的较现实的一种手段。已经实现了7个量子位的计算机，并实现了最简单的Deutsch算法及 Grover快速查找算法。

## 九、玻色-爱因斯坦凝聚和原子激光器

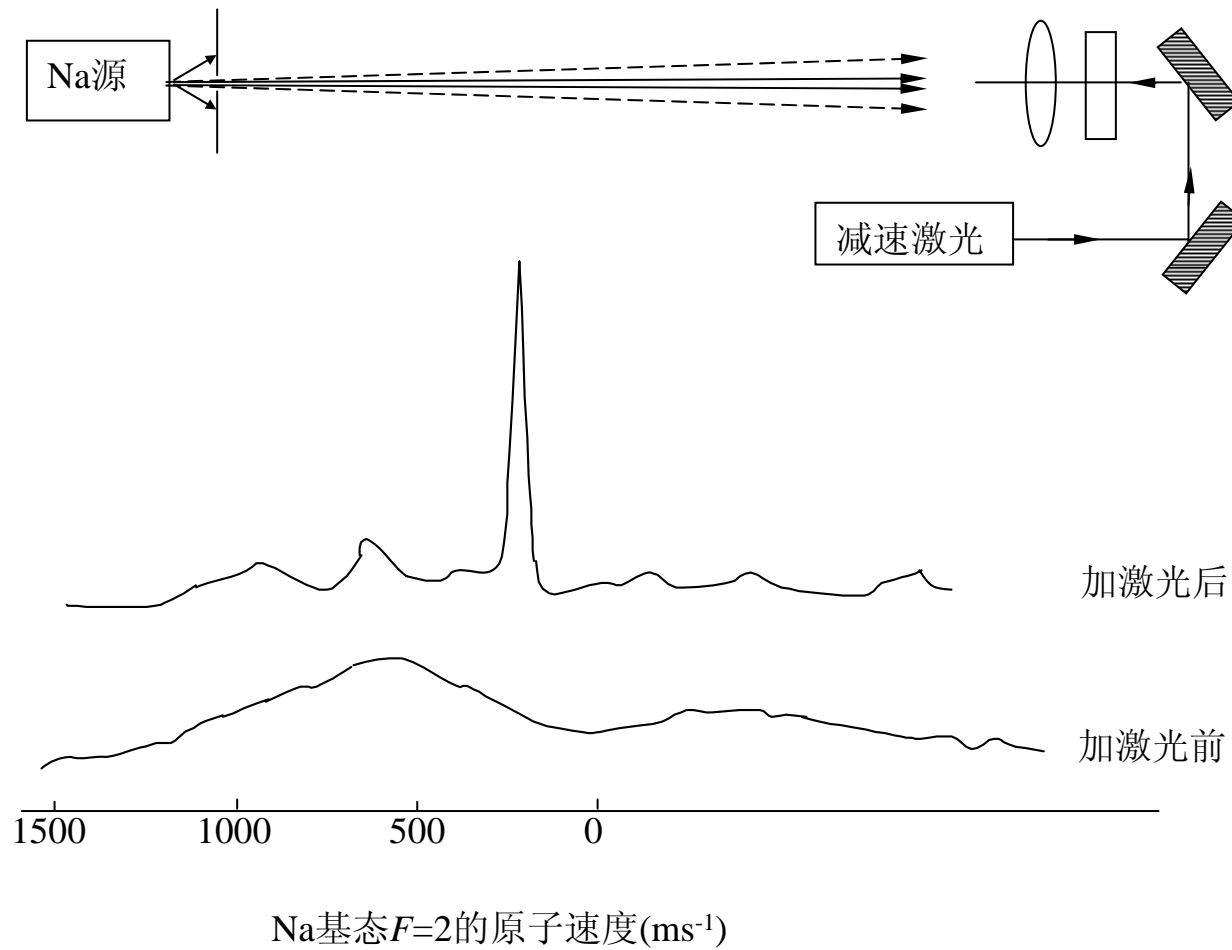
- 原子减速和冷却  $\Rightarrow$
- 玻色-爱因斯坦凝聚  $\Rightarrow$
- 原子激光器  $\Rightarrow$

激光冷却原子是一种巧妙的方法，它不仅能减小原子分子的动能，使它们的速度减小到甚至零，还能使它们保持相对独立，而且可以减小它的无序度。→

现在已经实现了在三维冷却装置中把铯的温度降到2.8nK,氦降到180nK。激光冷却已经发展到能对中性原子分子进行减速、准直、反射、聚焦和捕陷，从而形成一门原子光学。

真正的激光阱除具有激光冷却机制外（原子受到的是与速度方向相反的阻滞力），还要形成激光势能区（原子受到空间位置的恢复力）。现在已做成三维激光阱，阱深最深的一种是磁光阱，它可以将减束到2m/s的钠原子束注入阱中而被捕陷，阱深0.4K，在 $\varphi=320\ \mu\text{m}$ 球形区捕获 $10^7$ 个原子，密度达 $10^{11}\text{cm}^{-3}$ ，有效温度600 $\mu\text{K}$ ，捕陷时间约100s。

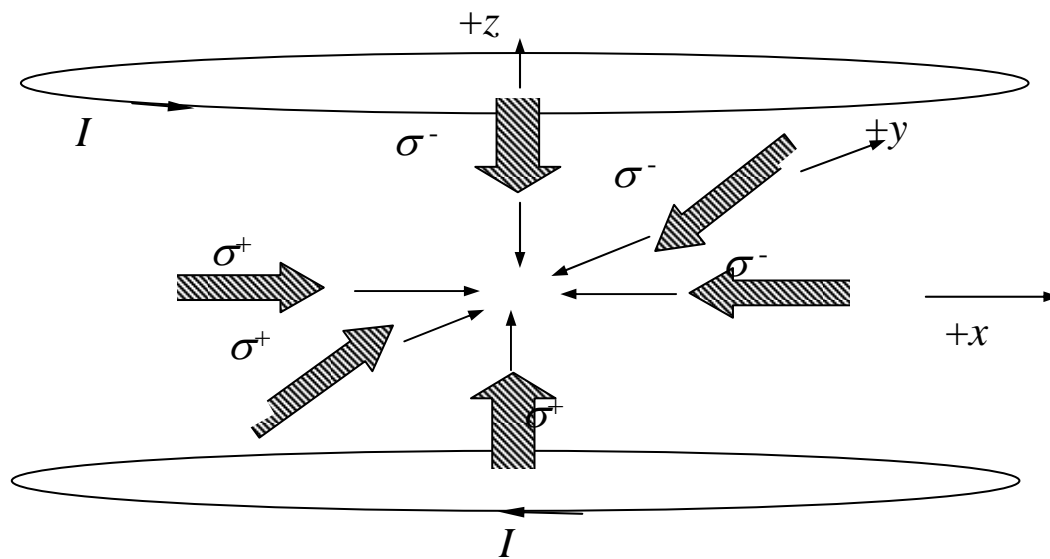
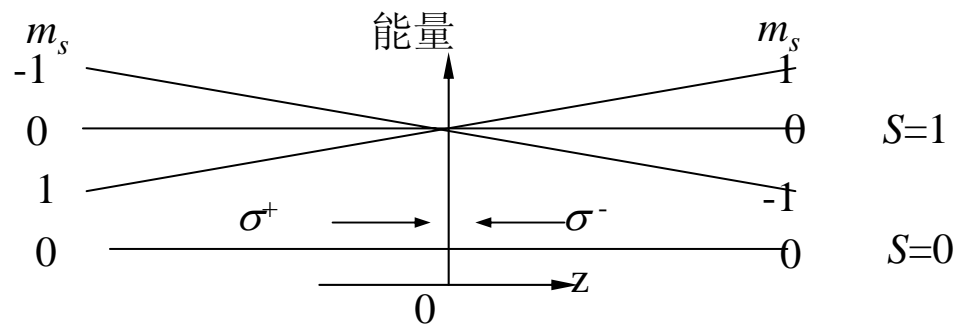
磁光阱是四极磁阱和激光阱组合的联合阱。它的原理是这样的：在三对相向激光作用的区域上加三对载有相反方向电流的线圈产生弱四极磁场，使具有磁偶极矩的原子感受到磁场梯度，在不同位置有不同的塞曼频移。→



## Na原子的激光减速

平均速度从840m/s减速至210m/s。不仅平均速度减小，而且速度分布也大大减小。





磁光阱及其中能级劈裂

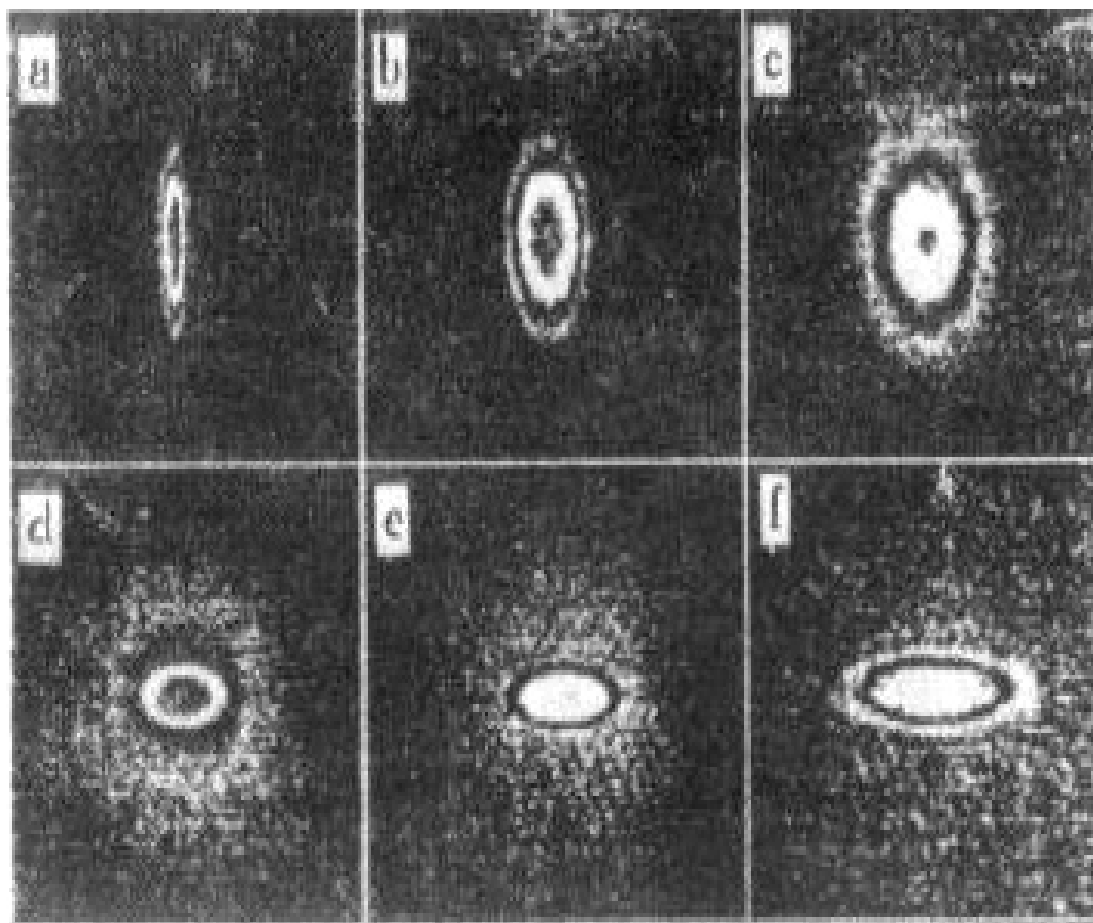


# • 玻色-爱因斯坦凝聚

由整数自旋粒子组成的玻色子系统不受泡利不相容原理的限制，在同一个单粒子态上所占据的粒子数不受限制，在极低温下粒子会向动量和能量为零的最低能态即基态聚集，这就是在**1925**年由爱因斯坦预言的玻色-爱因斯坦凝聚**BEC**。

实现玻色-爱因斯坦凝聚的关键是提高玻色气体的无量纲相空间密度，也就是要把玻色气体捕获和囚禁起来，增加囚禁的粒子数以提高粒子数密度，并降低气体温度。目前人们用激光冷却和囚禁技术获得大数目、高密度和超冷玻色原子气体，最后实现玻色-爱因斯坦凝聚。





玻色-爱因斯坦凝聚成像及随时间扩散



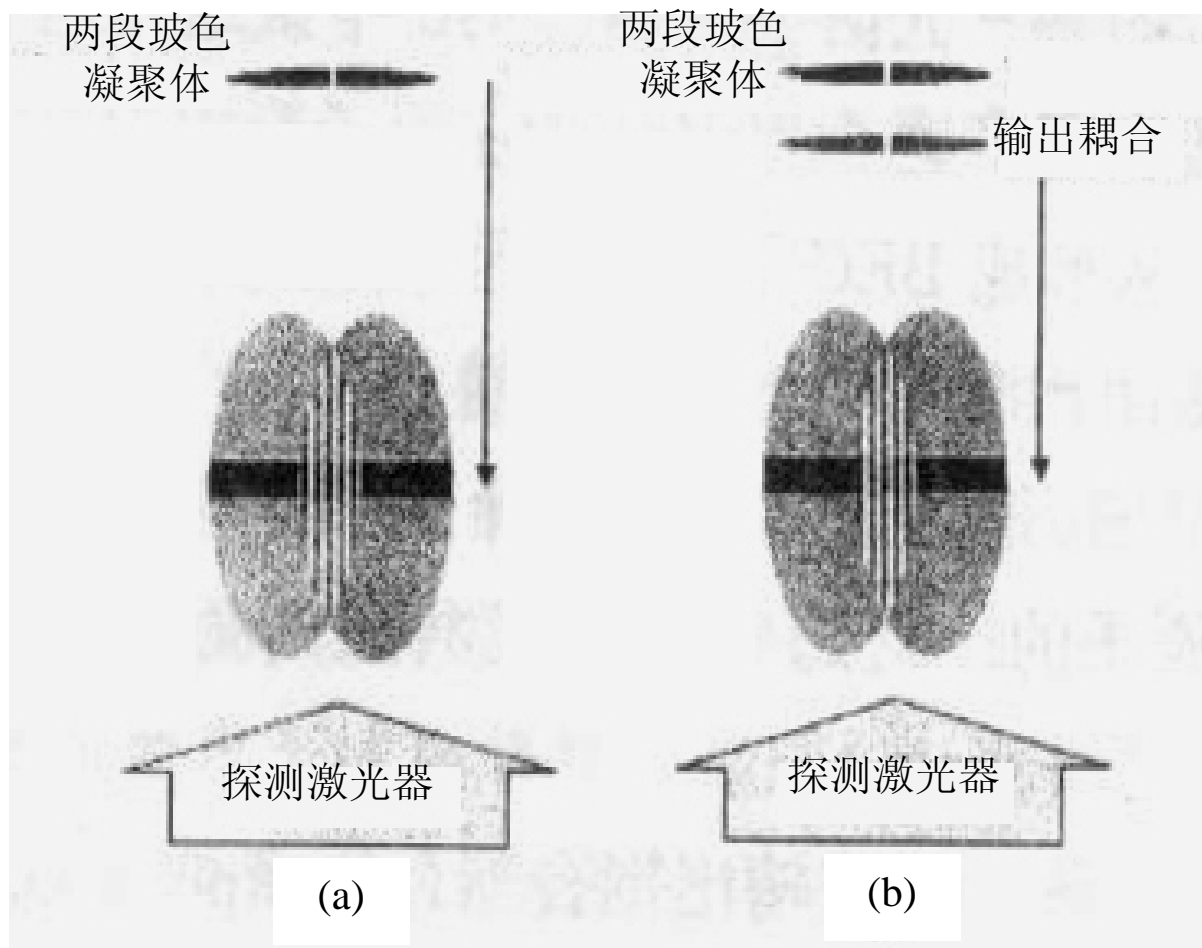
# • 原子激光器

原子激光器是一个相干原子束发生器，它发射的原子都处于同一量子态，因此，原子激光器具有量子性、波动性、相干性、单色性和方向性特点。

目前唯一的途径就是将玻色原子制备成玻色-爱因斯坦凝聚态。类似激光器由谐振腔、激活介质和输出耦合器构成一样，原子激光器中谐振腔是囚禁原子的磁阱，激活介质是玻色-爱因斯坦凝聚原子团，而输出耦合器用了射频脉冲。除重力方向输出相干原子束外，现已实现全方向、可调谐、高准直的准连续运转的原子激光器。



相干Na原子团脉冲成像图



玻色-爱因斯坦凝聚体的原子干涉  
(a) 关闭磁阱 (b) 射频式耦合器输出

谢谢！