

ЭФФЕКТ ШТАРКА В СИЛЬНОМ ПОЛЕ

B.M. Вайнберг, B.D. Мур¹⁾, B.C. Попов, A.B. Сергеев²⁾

Вычислены штарковские сдвиги и ширины основного и возбужденных состояний атома водорода. Используются два независимых метода расчета: суммирование расходящихся рядов теории возмущений и $1/n$ -разложение.

1. Эффект Штарка принадлежит к числу наиболее известных, но в то же время и наиболее трудных (за пределами области слабого поля) задач квантовой механики – см., например, 1 – 10. Для уровня с параболическими квантовыми числами n_1, n_2, m в атоме водорода ряд теории возмущений (ТВ) имеет вид¹:

$$E^{(n_1 \ n_2 \ m)}(\mathcal{E}) = \frac{1}{2n^2} \sum_{k=0}^{\infty} \epsilon_k^{(n_1 \ n_2 \ m)} F^k, \quad (1)$$

где $n = n_1 + n_2 + |m| + 1$ – главное квантовое число, $\epsilon_0 = -1$, $\epsilon_1 = 3(n_1 - n_2)/n$, ..., $F = n^4$ & и $\hbar = m = e = 1$ (единица напряженности электрического поля 1 а.у. = $m^2 c^5 / \hbar^4 = 5,142 \cdot 10^9$ В/см). В последние годы, благодаря развитию новых методов ТВ, вычислено большое число коэффициентов ТВ ϵ_k^{4-7} , вплоть до $k = 160$ в случае основного состоя-

¹⁾ Московский инженерно-физический институт.

²⁾ Государственный оптический институт им. С.И. Вавилова.

ния^{5, 6}. Однако, ряд (1) имеет нулевой радиус сходимости, а энергия $E(\xi)$ – существенную особенность при $\xi = 0$ и разрез $0 < \xi^2 < \infty$. Поэтому использование ТВ для вычисления сдвига и ширины ($E = E_0 - i\Gamma/2$) атомных уровней в сильном электрическом поле ξ невозможно без соответствующих методов суммирования расходящихся рядов.

С помощью аппроксимант Паде (АП) удается определить E_0 и Γ вплоть до $\xi \approx 0,1$ (см.⁶). Метод комплексных координат⁹ и преобразование Паде – Бореля¹⁰ позволили просуммировать ряды ТВ с высокой точностью, но также до $\xi = 0,1$ (и только для основного состояния). Имеющиеся в литературе результаты^{2, 3, 8} для $\xi \sim 0,2$ не согласуются между собой (различие особенно велико для ширины Γ). Между тем, ввиду развития лазерной техники и спектроскопии, представляет интерес вычисление E_0 и Γ и для интенсивных полей $\xi > 0,1$.

Мы использовали для этой цели аппроксиманты Паде – Эрмита¹¹ (АПЭ) и $1/n$ -разложение¹². Рассмотрим случай $n_1 = n_2 = 0$, $|m| = n - 1$, когда нечетные порядки ТВ обращаются в нуль, а все $\epsilon_{2k} < 0$ (т. е. ряд ТВ – знакопостоянный). К числу таких состояний относится и основной уровень, $n = 1$.

2. Методы расчета. Значения АПЭ $f_N(\xi^2)$ вычислялись из уравнения $P - Qf + Rf^2 = 0$, где P, Q, R – полиномы от ξ^2 степени N , коэффициенты которых однозначно определяются по коэффициентам ТВ из условия:

$$P - QE + RE^2 = O(\xi^{2(3N+2)}) , \xi \rightarrow 0 \quad (2)$$

где $E(\xi^2)$ – ряд (1). Обычные АП являются частным случаем (2) при $R \equiv 0$. Ясно, что $f_N(\xi^2)$, в отличие от АП $[P/Q](\xi^2)$, может иметь мнимую часть и в том случае, когда коэффициенты полиномов P, Q и R – вещественные¹³.

Другой подход (независимый от предыдущего) основан на $1/n$ -разложении¹². Используем тот факт, что при $n \gg 1$ применима модель атома Бора. В отсутствие электрического поля состоянию $(0, 0, m)$ отвечает круговая орбита электрона, перпендикулярная оси z (направление поля ξ). При включении поля классическая орбита смещается вдоль Oz и изменяет радиус, оставаясь круговой. Из этих соображений, после скейлинга $r \rightarrow n^2r$, $\epsilon = 2n^2E$, $F = n^4\xi$, приходим к уравнениям:

$$\epsilon = \epsilon^{(0)} + \frac{\epsilon^{(1)}}{n} + \frac{\epsilon^{(2)}}{n} + \dots , \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned} \epsilon^{(0)} &= 3u^3 - 4u^2 , \\ \epsilon^{(1)} &= u^3[(1 + 3\sqrt{1-u})^{1/2} + (1 - 3\sqrt{1-u})^{1/2} - 2] , \end{aligned} \quad (4)$$

а $u = u(F)$ – тот корень уравнения

$$u^4(1-u)^{1/2} = F,$$

который $\rightarrow 1$ при $F \rightarrow 0$. Следующие поправки $\epsilon^{(k)}$ вычисляются с помощью рекуррентных соотношений. При $u = 8/9$, или $F = F^* = 2^{1/2} \cdot 3^{-9} = 0,2081$ происходит столкновение двух классических решений², после чего у $\epsilon^{(k)}$ возникает мнимая часть. Разложение (3) можно получить и для других состояний, если $n_1, n_2 \ll n$.

$1/n$ -разложение быстро сходится при $n \gtrsim 5$, а метод АПЭ имеет преимущества для небольших n . Существенно, что имеется область перекрытия, в которой оба метода с высокой точностью согласуются между собой (а при $\xi \leq 0,1$ – и с другими расчетами^{9, 10}). Тем самым $1/n$ -разложение подтверждает выбранную нами процедуру суммирования расходящихся

¹³ В силу того, что все ϵ_k в (1) являются вещественными, определяемые из (2) полиномы P, Q, R имеют только вещественные коэффициенты. В то же время энергия E имеет мнимую часть $\Gamma/2$, отвечающую вероятности ионизации уровня электрическим полем, при любом $\xi \neq 0$. Это определяет преимущество АПЭ перед АП в задаче о штарк-эффекте.

ся рядов ТВ. См. таблицу, в которой первая строка отвечает АПЭ, а вторая — другим методам (в частности, $1/n$ -разложению).

Значения ϵ_n , взятые с обратным знаком

F	$n = 1$	$n = 10$
0,1	$1,054\ 84 + i\ 0,014\ 54$ $1,054\ 836 + i\ 0,014\ 538$ ^{10, 11}	$1,012\ 97$ $1,012\ 976 (1/n)$
0,25	$1,170 + i\ 0,189$ $1,172 + i\ 0,188$ ²	$1,099\ 766 + i\ 0,032\ 154$ $1,100 + i\ 0,032 (1/n)$
1,0	$1,3 + i\ 1,29$ $1,235 + i\ 1,286 (1/n)$	$1,2851 + i\ 0,6739$ $1,285\ 178 + i\ 0,673\ 874 (1/n)$

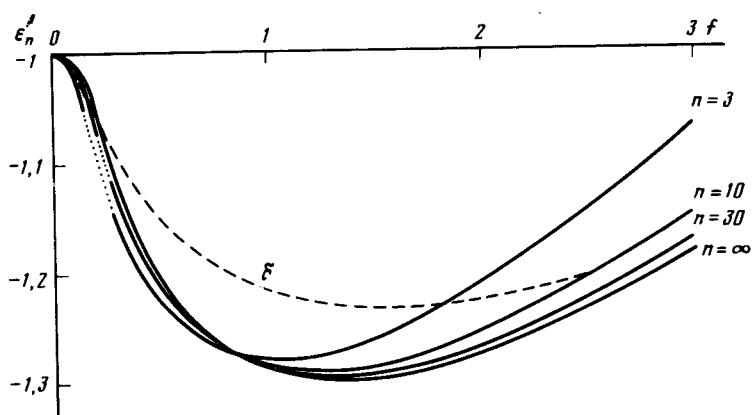


Рис. 1

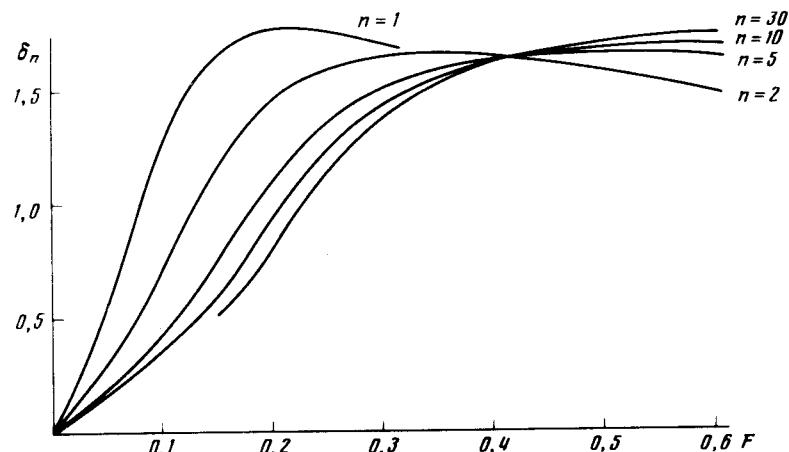


Рис. 2

Рис. 1 Вещественная часть энергии уровней $\epsilon'_n = 2n^2 \operatorname{Re} E^{(0, 0, n-1)}$ для состояний типа $(0, 0, n-1)$.

Кривая δ относится к одномерному дельта-потенциалу

Рис. 2. Функция $\delta_n(F)$, см. уравнение (6)

3. Результаты вычисления вещественной и мнимой части "приведенной энергии" уровня $\epsilon_n = 2n^2 E^{(0, 0, n-1)}$ см. на рис. 1 и рис. 2. Отметим, что в очень сильных полях шарковский сдвиг уровней $(0, 0, n-1)$ меняет знак. Ширину уровней удобно представить в виде

$$\Gamma^{(n_1 n_2 m)}(\xi) = \tilde{\Gamma}^{(n_1 n_2 m)}(\xi) \exp \left\{ -n \delta_{n_1 n_2 m}(\xi) \right\}, \quad (6)$$

²⁾ Аналогичное явление имеет место и в других задачах, например, для потенциалов Юкавы и Хюльтена¹².

где $\tilde{\Gamma}$ соответствует квазиклассической формуле ¹, асимптотически — точной в пределе $\epsilon \rightarrow 0$, а второй множитель включает поправки к квазиклассике. Для рассматриваемых состояний

$$\tilde{\Gamma}^{(0, 0, n-1)}(\epsilon) = \frac{2^{2n}}{n! n^{3n+2}} \epsilon^{-n} \exp\left\{-\frac{2}{3n^3\epsilon}\right\} \quad (7)$$

и $\delta_n = c_1 F + O(F^2)$ при $F \rightarrow 0$, где $c_1 = (33n^2 + 54n + 20) / 12n^2$. При малых ϵ в (6) существен лишь фактор $\tilde{\Gamma}(\epsilon)$, резко зависящий от поля и меняющийся на много порядков. Проведенный расчет, однако, показывает, что область применимости формулы (7) довольно узкая: $\epsilon \lesssim 0,1n^{-5}$. Для более сильных полей учет члена с δ_n необходим, особенно в случае ридберговских ($n \gg 1$) состояний. Соответственно, вероятность ионизации $\tilde{\Gamma}^{(0, 0, n-1)}(\epsilon)$ существенно меньше того значения, которое следует из квазиклассической оценки (7).

Здесь мы ограничились состояниями с $n_1 = n_2 = 0$. Обобщение на произвольные n_1, n_2 , m не встречает принципиальных затруднений; результаты будут приведены в более подробной публикации.

Авторы благодарны А.И.Шерстюку за полезное обсуждение, а также А.В.Шеблыкину, принимавшему участие в численных расчетах.

Литература

1. Ландау Л.Д., Либшиц Е.М. Квантовая механика, Физматгиз, М., 1963.
2. Hehenberger M., McIntosh H.V., Brändas E. Phys. Rev., 1974, A10, 1494.
3. Damburg R.J., Kolosov V. V. J. Phys., 1976, B9, 3149.
4. Silverstone H.J. Phys. Rev., 1978, A18, 1853.
5. Alliluev S.P., Eletsky V.L., Popov V.S. Phys. Lett., 1979, 73A, 103; 1980, 78A, 43.
6. Елецкий В.Л., Попов В.С. ДАН СССР, 1980, 250, 74.
7. Privman V. Phys. Rev., 1980, A22, 1833.
8. Dolgov A.D., Turbiner A.V. Phys. Lett., 1980, 77A, 15.
9. Maquet A., Chu S.I., Reinhardt W.P. Phys. Rev., 1983, A27, 2946.
10. Franceschini V., Grecchi V., Silverstone H.J. Phys. Rev., 1985, A32, 1338.
11. Della Dora J., Di-Crescendo C. Padé approximations and their applications, p. 85. Springer, 1979.
12. Попов В.С., Вайнберг В.М., Мур В.Д. Письма в ЖЭТФ, 1985, 41, 439.