

ЭФФЕКТ ШТАРКА ДЛЯ РИДБЕРГОВСКИХ СОСТОЯНИЙ АТОМА ВОДОРОДА

В.М.Вайнберг, В.Д.Мур¹⁾, В.С.Попов, А.В.Сергеев

Вычислены штарковские сдвиги и ширины высоковозбужденных ($n = 15 \div 30$) состояний атома водорода в сильном электрическом поле, превышающем классический порог ионизации атома. Результаты расчетов находятся в согласии с экспериментом.

1. Исследование высоковозбужденных (ридберговских) состояний атомов и молекул вызывает в последние годы большой интерес; здесь получены значительные результаты¹⁻⁵. Недавно на эксперименте обнаружены резонансы в сечении фотоионизации атомов в электрическом поле, отвечающие $n \sim 15 \div 30$ и достаточно узкие даже при $E > 0$ (первоначально для рубидия, а затем и для водорода²⁻⁵). Существование таких (надбарьерных) резонансов совершенно непонятно с точки зрения классической модели ионизации, но может быть объяснено с помощью метода ВКБ, позволяющего получить приближенные формулы для энергии E_0 и ширины Γ ⁶. В работах^{4,7} указана связь между резонансами, экспериментально наблюдавшимися в водороде, и штарковскими квазистационарными состояниями, положения и ширины которых определялись путем численного решения уравнения Шредингера. Используя независимые методы расчета², мы вычислили комплексные энергии $E = E_0 - i\Gamma/2$ таких состояний в широком диапазоне значений n и \mathcal{E} . Основные результаты расчетов излагаются ниже.

2. Пусть $E^{(n_1 n_2 m)}$ – энергия уровня, \mathcal{E} – напряженность электрического поля, n_1, n_2, m – параболические квантовые числа ($m \geq 0$), $n = n_1 + n_2 + m + 1$ (мы используем атомные единицы, $\hbar = m_e = e = 1$, и те же обозначения, что и в⁸). Результаты расчетов будем выражать в “приведенных” переменных:

$$\epsilon^{(n_1 n_2 m)} = 2n^2 E^{(n_1 n_2 m)}, \quad F = n^4 \mathcal{E}, \quad \mu = m/n, \quad \nu_i = (n_i + 1/2)/n, \quad (1)$$

($\mu + \nu_1 + \nu_2 = 1$), которые особенно удобны в случае ридберговских ($n \gg 1$) состояний. Области сильного поля соответствует $F \gg F_*$, где F_* – “классический порог ионизации” в электрическом поле (для различных состояний атома водорода значения F_* лежат в интервале от 0,130 до 0,383⁸). Из всех n^2 состояний атома водорода $|n_1, n_2, m\rangle$ с данным главным квантовым числом n наиболее стабильны состояния с минимальными n_2 и m (что видно уже из асимптотики для ширины $\Gamma^{(n_1 n_2 m)}$ при $F \rightarrow 0$). Поэтому такие состояния представляют особый интерес для эксперимента.

Результаты расчета³ представлены на рис. 1 (для штарковских сдвигов, $\epsilon'_n = 2n^2 \operatorname{Re} E^{(n_1 n_2 m)}$) и рис. 2 (для “приведенных” ширин уровней $\epsilon''_n = n^2 \Gamma^{(n_1 n_2 m)}$). На рис. 1 показана также предельная кривая ($n = \infty$), определяемая из уравнения

$$(-\epsilon)^{1/2} = {}_2F_1 \left(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}; 2; -16F/\epsilon^2 \right) \quad (2)$$

(“ридберговский предел” $\nu_1 = 1, \nu_2 = \mu = 0$ – см.⁸). В интервале $0,3 < F < 0,8$ зависимость

1) Московский инженерно-физический институт.

2) А именно, суммирование расходящихся рядов теории возмущений (ТВ) Ралея – Шредингера и $1/n$ -разложение. Подробнее об этих методах см. в работах^{8,9}.

3) При суммировании рядов ТВ для энергии уровней использовались квадратичные аппроксиманты Падэ – Эрмита, см. уравнение (5) в⁹.

ϵ'_n от F близка к линейной. При $F = 0,4 \div 0,5$ вещественная часть энергии меняет знак⁴⁾, и получается уровень (квазистационарный) с положительной энергией.

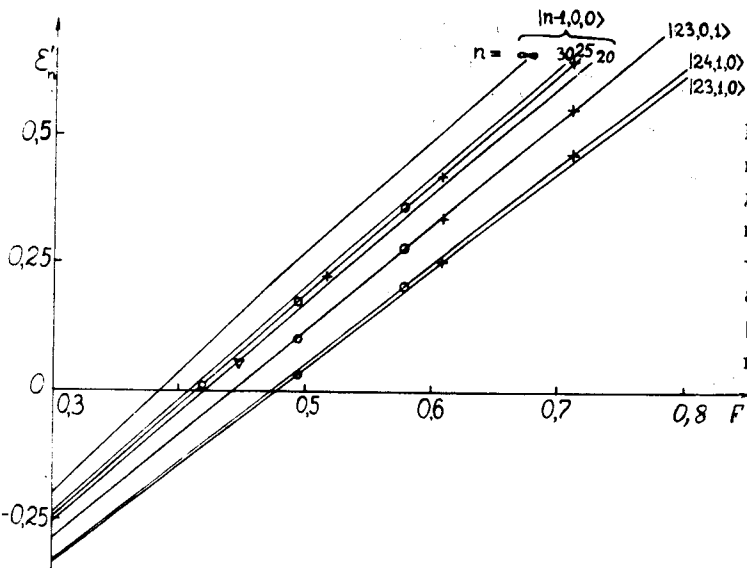


Рис. 1. Энергии штарковских резонансов в атоме водорода. Кривые — данный расчет, \circ — экспериментальные данные⁴ при $\mathcal{E} = 6,5$ кВ/см, $+$ — при $\mathcal{E} = 8,0$ кВ/см и ∇ — при $\mathcal{E} = 14,4$ кВ/см. Энергии состояний $|23, 1, 0\rangle$ и $|22, 0, 2\rangle$ совпадают, в пределах точности рисунка

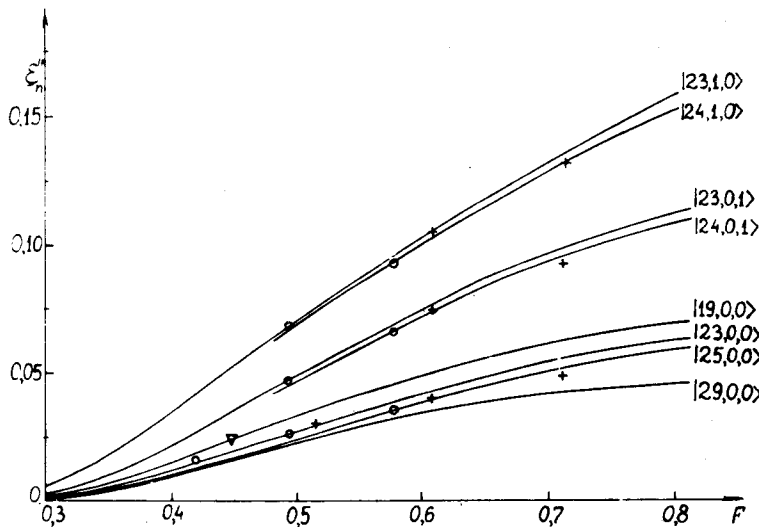


Рис. 2. Ширины штарковских резонансов, $\epsilon''_n = n^2 \Gamma(n_1, n_2, m)$. у кривых указаны параболические квантовые числа (остальные обозначения — те же, что и на рис. 1)

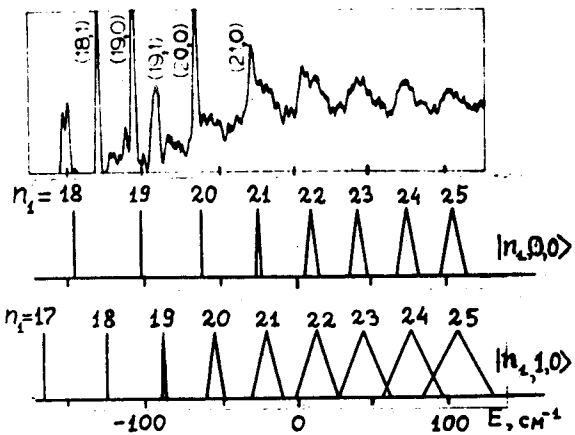


Рис. 3. Экспериментальный спектр⁴ фотоионизации атома водорода при $\mathcal{E} = 8,0$ кВ/см. Приведены также результаты расчета для двух серий состояний (вершина треугольника указывает E_0 , а его основание дает ширину уровня Γ)

⁴⁾ В частности, предельная кривая, отвечающая $n = \infty$, переходит через нуль при $F = F_0 = 0,3834 \dots$ (см. формулу (8)).

Из рис. 2 видно, что наименьшей вероятностью ионизации (при фиксированных n и F) обладают состояния $|n-1, 0, 0\rangle$. За ними следуют $|n-2, 0, 1\rangle$, потом идут $|n-3, 0, 2\rangle$ и $|n-2, 1, 0\rangle$, при этом величины ϵ''_n , и особенно ϵ'_n , для данной пары состояний очень близки. Последний факт нетрудно объяснить, рассматривая структуру рядов ТВ:

$$E^{(n, n_2 m)} = \frac{1}{2n^2} \sum_{k=0}^{\infty} \epsilon_k^{(n_1 n_2 m)} F^k, \quad (3)$$

где k — порядок ТВ,

$$\epsilon_k = \begin{cases} P_k(\kappa^2, \mu^2, 1/n^2), & k - \text{четное,} \\ \kappa P_k(\kappa^2, \mu^2, 1/n^2), & k - \text{нечетное,} \end{cases}$$

$\kappa = \nu_1 - \nu_2 = (n_1 - n_2)/n$ и P_k — полином степени $[k/2]$ от своих аргументов. Состояния $|n-2, 1, 0\rangle$ и $|n-3, 0, 2\rangle$ имеют одно и то же $\kappa = 1 - 3/n$ и отличаются лишь параметром μ^2 , т.е. членами $\propto 1/n^2$. С другой стороны, для серии состояний типа $|n-m-1, 0, m\rangle$ с $m = 0, 1, 2, \dots \ll n$ параметр $\kappa = 1 - (m+1)/n$, поэтому коэффициенты ϵ_k отличаются уже в членах порядка $1/n$.

На рис. 1 и 2 указаны значения ϵ'_n и ϵ''_n , пересчитанные из экспериментальных данных⁴ по фотоионизации атома водорода (для полей $\mathcal{E} = 6, 5$ и $8, 0$ кВ/см наши вычисления находятся в согласии с расчетом Колосова⁷, выполненным другим методом). Имеется несомненное согласие между теорией и экспериментом.

На рис. 3 вычисленные нами энергии штарковских резонансов сопоставлены с экспериментальным спектром, взятым из работы⁴. Видно, что положения максимумов соответствуют значениям ϵ'_n , а ширина пиков качественно согласуется с ϵ''_n . Аналогичные результаты были получены и для других данных, приведенных в²⁻⁵. Таким образом, теоретические расчеты штарковских резонансов в сильном электрическом поле согласуются с экспериментом, включая область $\epsilon'_n > 0$ (до тех пор, пока резонансы остаются еще изолированными).

3. Замечание о $1/n$ -разложении. Мы ограничимся здесь состояниями с $m = 0$. В этом случае интегралы, входящие в условие квантования Бора — Зоммерфельда и в поправку порядка \hbar^2 к нему¹⁰, вычисляются аналитически. Для определения энергии и констант разделения $\beta_{1,2}$ получаем уравнения:

$$\begin{aligned} \beta_1 (-\epsilon)^{-1/2} f(z_1) - \frac{1}{8n^2} F(-\epsilon)^{-3/2} g(z_1) &= \nu_1, \\ \beta_2 (-\epsilon)^{-1/2} f(z_2) + \frac{1}{8n^2} F(-\epsilon)^{-3/2} g(z_2) &= \nu_2, \end{aligned} \quad (4)$$

$$\beta_1 + \beta_2 = 1,$$

где $\nu_1 + \nu_2 = 1$ ($\mu = 0$), $z_1 = -16\beta_1 F/\epsilon^2$, $z_2 = 16\beta_2 F/\epsilon^2$, $f(z) = F\left(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}; 2; z\right)$,

$$g(z) = \frac{2}{3} F\left(\frac{3}{4}, \frac{5}{4}; 1; z\right) + \frac{1}{3} F\left(\frac{3}{4}, \frac{5}{4}; 2; z\right)$$

и $F \equiv {}_2F_1$ — гипергеометрическая функция. Отметим, что неучтенные в (4) поправки имеют порядок не выше n^{-4} , поэтому в случае ридберговских состояний точность системы (4) весь-
180

ма высокая. При $F \rightarrow 0$ из (4) следует:

$$\epsilon = -1 + 3\kappa F - \frac{1}{8} (17 - 3\kappa^2 + 19n^{-2})F^2 + \dots, \quad (5)$$

$$\beta_1 = \frac{1}{2} (1 + \kappa) + \frac{1}{8} [3(1 - \kappa^2) + n^{-2}]F - \frac{\kappa}{16} (1 - \kappa^2 + 6n^{-2})F^2 + \dots$$

(β_2 получается заменой $\kappa \rightarrow -\kappa$, $F \rightarrow -F$), что совпадает с разложениями ТВ в области слабого поля. При произвольном F уравнения (4) можно решить численно. Пока $F < F_*$ (ν_1, ν_2), решение $\epsilon(F)$ остается вещественным и согласуется с результатами метода АПЭ для ϵ'_n (тем самым подтверждая выбранную нами процедуру суммирования расходящихся рядов ТВ). В области $F > F_*$ решение становится комплексным, что позволяет вычислить этим методом не только сдвиг уровня, но и его ширину⁵⁾. Помимо чисто практического значения, этот факт представляет принципиальный интерес для самого $1/n$ -разложения. Такие расчеты в настоящее время проводятся.

4. В слабых полях расстояние между соседними уровнями ΔE растет линейно с \mathcal{E} . С другой стороны, для сильного поля

$$\Delta E = c\mathcal{E}^{3/4}, \quad (6)$$

причем ⁴ $c = 7,51 \pm 0,02$ для состояний с $n \sim 20$ и энергией E , близкой к нулю (здесь E – в см^{-1} , \mathcal{E} – в кВ/см). Эта зависимость легко объясняется с помощью $1/n$ -разложения:

$$\left. \frac{dE}{dn} \right|_{E=0} = c\mathcal{E}^{3/4}, \quad c = c_0 + \frac{c_1}{n} + \frac{c_2}{n^2} + \dots \quad (7)$$

Если $n_1 \rightarrow \infty$, а квантовые числа n_2 и m порядка единицы, то система (4) сводится к уравнению (2), откуда при $E = 0$:

$$F_0 = F_*(1, 0) = (2\gamma/9\pi)^2 = 0,383 \dots, \quad c_0 = (\pi\gamma/2)^{1/2} = 3,708 \dots \quad (8)$$

(в атомных единицах), где $\gamma = [\Gamma(1/4)/\Gamma(3/4)]^2$. Если энергию E измерять в см^{-1} , а \mathcal{E} – в кВ/см , то $c_0 = 7,54$, что близко к экспериментальному значению.

Считаем своим приятным долгом поблагодарить Е.А.Соловьева за обсуждение полученных результатов и полезные замечания, в том числе за указание на работы ⁶⁾.

Литература

1. Ридберговские состояния атомов и молекул. М.: Мир, 1985.
2. Koch P.M., Mariani D.R. Phys. Rev. Lett., 1981, 46, 1275.
3. Glab W.L., Nayfeh M.H. Phys. Rev., 1985, A31, 530.
4. Glab W.L., Ng K., Yao D., Nayfeh M.H. Phys. Rev., 1985, A31, 3677.
5. Rottke H., Welge K.H. Phys. Rev., 1986, A33, 301.
6. Kondratovich V.D., Ostrovsky V.N. J. Phys. B, 1984, 17, 1981, 2011.
7. Колосов В.В. Письма в ЖЭТФ, 1986, 44, 457.
8. Вайнберг В.М., Мур В.Д., Попов В.С., Сергеев А.В. Письма в ЖЭТФ, 1986, 44, 9; ЖЭТФ, 1987, 93, 450.
9. Попов В.С., Мур В.Д., Scheblykin A.V., Weinberg V.M. Preprint ИТЭР-125, М., 1986.

⁵⁾ $1/n$ -разложение дает наглядное объяснение причины возникновения надбарьерных квазистационарных состояний. При $F \rightarrow F_*$ происходит столкновение двух классических ($n \rightarrow \infty$) решений, после чего они выходят в комплексную плоскость. При этом у $\epsilon(F)$ появляется мнимая часть, которая связана с шириной надбарьерных резонансов. Отметим, что решение $\epsilon(F)$ системы (4) имеет в точке $F = F_*$ особенность того же типа, что и для других квантовомеханических задач (например, в случае потенциала Юкавы ¹¹⁾).

10. *Bekenstein J.D., Krieger J.V.* Phys. Rev., 1969, 188, 130.

11. *Попов В.С., Вайнберг В.М., Мур В.Д.* Письма в ЖЭТФ, 1985, 41, 439; ЯФ, 1986, 44, 1103.

Институт теоретической и экспериментальной физики

Московский

инженерно-физический институт

Поступила в редакцию

16 июня 1987 г.

6 августа 1987 г.
