Письма в ЖЭТФ, том 37, вып. 10, стр. 471 – 474 *20 мая 1983 г.*

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ РИДБЕРГОВСКИХ СОСТОЯНИЙ

А.П.Казанцев, В.Л.Покровский

Теория возмущений, развитая для высоковозбужденных состояний, применяется к атому водорода в магнитном поле. Найдены энергетическая плотность состояний и их поляризуемость.

В классической механике хорошо известна процедура разделения движений на быстрые и медленные [1,2], позволяющая редуцировать задачу, т. е. получить усредненный гамильтониан для медленного движения. Мы предлагаем аналог этой процедуры для высоковозбужденных состояний дискретного спектра. Если невозмущенная система допускает разделение переменных, то можно указать простые правила для нахождения изменения уровней энергии под действием возмущения и матричных элементов физических величин. Особый интерес представляет случай классически вырожденных частот в связи с проблемой атома водорода. С помощью предложенной теории мы рассмотрели задачу об атоме водорода в магнитном поле.

Линейный эффект Зеемана приводит к смещению уровней $m\omega_c/2$, где m – азимутальное квантовое число, ω_c – циклотронная частота. При этом остается $n - m$ кратное вырождение уровней, которое снимается за счет квадратичного эффекта. Квадратичный эффект Зеемана для ридберговских состояний экспериментально исследовался в работах [3–5], где было отмечено квазипересечение уровней при их изменении в магнитном поле. Теория квадратичного эффекта Зеемана предложена в работах [6–11]. В этих работах найдены квазиклассические условия квантования с учетом квадратичного зеемановского эффекта и отличающиеся только выбором переменных. В настоящей работе представлены результаты вычислений плотности состояний и поляризуемости ридберговского атома в магнитном поле. Гамильтониан задачи (атомные единицы) имеет вид:

$$H = H_0 + \frac{m\omega_c}{2} + V, \quad H_0 = \frac{p^2}{2} - \frac{1}{r}, \quad V = \frac{1}{8}\omega_c^2\rho^2,$$

где $\omega_c = \mathcal{H}/c$ – циклотронная частота, ρ – компонента радиуса вектора, перпендикулярная магнитному полю. В условиях применимости теории возмущений $(V \ll H_0)$ условие квантования в параболических координатах имеет вид [8,9]

$$\int\limits_{k_1}^{k_2} dk \arccos\left(\frac{\epsilon + \frac{3}{2}k^2}{r_+(k)r_-(k)}\right) = k_2\phi_2 - k_1\phi_1 + 2\pi s, \quad \epsilon = \frac{8E}{\omega_c^2 n^2} - \frac{3}{2}k^2 + \frac{1}{2}m^2, \tag{1}$$

$$r_\pm^2 = (n \pm k)^2 - m^2,$$

где E – энергия уровня, отсчитанная от кулоновской энергии $-1/2n^2$, n и m – главное и магнитное квантовые числа, k – "электрическое" квантовое число в параболических координатах, s – новый адиабатический инвариант, принимающий целые значения, точки поворота $k_{1,2}$ определяются обращением выражения под знаком arccos в ± 1, фазы $\phi_{1,2} = 0$ или π.

Условие квантования (1) выражается через полный эллиптический интеграл третьего рода, весьма сложный для анализа. Гораздо проще выглядит плотность состояний $\rho(\epsilon)$. Состояния ридберговского атома в магнитном поле являются симметричными относительно инверсии при $-n^2 + m^2 \leqslant \epsilon \leqslant n^2 - m^2$ и любых допустимых значениях $|m|/n$. Если

$|m|/n < 1/\sqrt{5}$, то часть состояний с энергиями $-\frac{3}{2}(n^2+m^2)+\sqrt{5}\,nm \leqslant \epsilon \leqslant -n^2+m^2$ являются асимметричными, двукратно вырожденными [8,9,11].

$$\rho(\epsilon) = \frac{\partial S}{\partial \epsilon} = \frac{8K(\lambda)}{\pi\omega_c^2 n^2 R}\ ; \qquad \lambda^2 = \frac{1}{2}\left(1 - \frac{2(n^2+m^2)+3\epsilon}{R^2}\right), \tag{2}$$

где $K(\lambda)$ — полный эллиптический интеграл первого рода и

$$R^2 = 2\left\{\left[\frac{3}{2}(n^2+m^2)+\epsilon\right]^2 - 5nm\right\}^{1/2}.$$

Формула (1) справедлива для симметричных состояний. Для асимметричных состояний имеем:

$$\rho(\epsilon) = \frac{16K(1/\lambda)}{\pi\omega_c^2 n^2\sqrt{R^2-[2(n^2+m^2)+3\epsilon]}}\ . \tag{3}$$

Плотность состояний (1) и (2) логарифмически обращается в бесконечность при $\epsilon = -n^2+m^2$ $(\lambda = 1)$. Более сильная особенность (корневая) возникает в особом случае $|m|/n = 1/\sqrt{5}$. Графики плотности состояний для $|m|/n = 1/\sqrt{2}$ *(2)*, $|m|/n = 1/\sqrt{5}$ *(1)* показаны на рис. 1. Рис. 2 изображает $\tilde{\rho}(\tilde{\epsilon})$ для случая $m = 0$. В качестве переменной энергии используется $\tilde{\epsilon} = \epsilon/n^2$, $\tilde{\rho} = \rho\,\omega_c^2 n^2/16$.

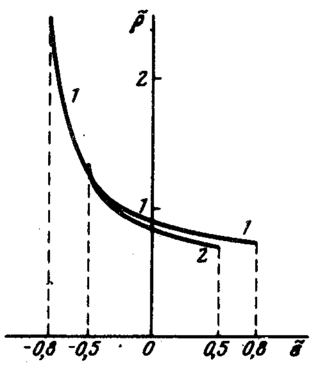

Рис. 1

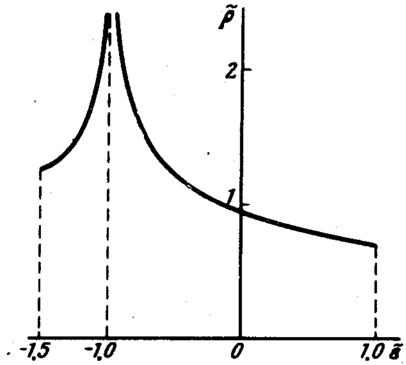

Рис. 2

Рассмотрим теперь вопрос о сдвиге уровней в слабом электрическом поле $\mathcal{E} \ll \mathcal{H}^2 n^2/c^2$. Как было указано в [8], при наложении поля в том же направлении, что и магнитное, эффект Штарка всегда квадратичен для симметричных и линеен для асимметричных состояний. Вычисляя среднее значение $z = {}^3/_2\,nk$, получим:

$$\mathcal{E}\langle z\rangle = \pm\frac{6}{\omega_c^2 n\rho(\epsilon)}\ . \tag{4}$$

Таким образом, между линейным штарковским сдвигом и плотностью состояний имеется простая связь (4), которую можно проверить экспериментально. В остальных случаях линейный штарк-эффект отсутствует. Приведем соотношения для квадратичных поправок к уровням $\delta\epsilon_\parallel$ и $\delta\epsilon_\perp$ при параллельной и перпендикулярной ориентации электрического и магнитного полей. В общем случае результат весьма громоздок, но для физически интересного случая $m \ll n$ который реализуется при оптическом возбуждении, он сильно упрощается, принимая вид:

$$\delta\epsilon_{\parallel} = \frac{9\mathcal{E}^2}{\omega_c^2}\left(1 - \frac{4}{5}\frac{E(\lambda)}{K(\lambda)}\right), \tag{5}$$

где $E(\lambda)$ – полный эллиптический интеграл второго рода. Сдвиг оказывается положительным и обратно пропорциональным $\mathcal{H}^2$. Вычисление поперечного сдвига приводит к следующему результату

$$\delta\epsilon_{\perp} = -\frac{9n^6\mathcal{E}^2}{32(1+4\lambda^2)}\left\{\frac{E(\lambda)}{K(\lambda)}\left[\frac{2(3+6\lambda^2+16\lambda^4)}{1+4\lambda^2} + \frac{4}{K(\lambda)\sqrt{1+4\lambda^2}}\int_0^{\lambda} j(\lambda')K(\lambda')d\lambda'\right] + 9 - 4\lambda^2\right\}, \tag{6}$$

где

$$j(\lambda) = \frac{\lambda(7 - 8\lambda^2 - 64\lambda^4)}{1 + 4\lambda^2}.$$

Поперечный сдвиг является отрицательным и независящим от магнитного поля. Поперечная поляризуемость в отношении $\omega_c^2 n^6 \ll 1$ меньше продольной. Отметим, что $\omega_c^2 n^6$ – параметр классической теории возмущений. Зависимости (5) и (6) показаны на рис. 3 ($\widetilde{\delta\epsilon}_{\parallel} = \delta\epsilon_{\parallel}\omega_c^2/9$, $\widetilde{\delta\epsilon}_{\perp} = -(\delta\epsilon_{\perp}\cdot 32/27n^6)$.

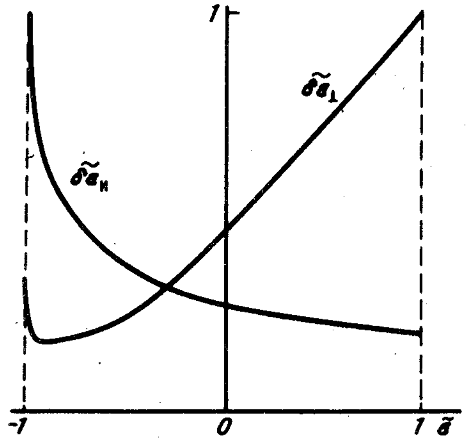

Рис. 3

Таким образом, свойства высоковозбужденных состояний атома водорода в магнитном поле можно описать весьма детально. Линейный штарковский сдвиг определяется плотностью состояний. Знаки квадратичных сдвигов оказываются различными: в продольном направлении атом является параэлектриком, а в поперечном – диаэлектриком.

Более подробное изложение методов вычислений будет опубликовано.

Литература

1. *Борн М., Паули В.* Z. Phys., 1922, **10**, 137; *Паули В.* Труды по квантовой теории, М.: Наука, 1975.
2. *Боголюбов Н.Н., Митропольский Ю.М.* Асимптотические методы в теории нелинейных колебаний. М.: Наука, 1974.
3. *Castro J.C., Zimmerman M.L., Hulet R.G., Kleppner D.* Phys. Rev. Lett., 1980, **45**, 1780.
4. *Zimmerman M.L., Kash M.M., Kleppner D.* Phys. Rev. Lett., 1980, **45**, 1092.
5. *Delande D., Gay J.C.* Phys. Lett., 1981, **82A**, 393, 399.
6. *Соловьев Е.А.* Письма в ЖЭТФ, 1981, **34**, 278; ЖЭТФ, 1982, **82**, 1762.
7. *Herrick D.R.* Phys. Rev., 1982, **A26**, 323.
8. *Kazantsev A.P., Pokrovsky V.L., Bergou J.* Preprint KFKI 01, Budapest 1983.
9. *Браун М.А.* ЖЭТФ, 1983, **84**, 850.

10. *Delos J.B., Kundson S.K., Noid D.N.* Phys. Rev. Lett., 1983, **50**, 583.
11. *Richards D.* J. Phys. 1983, **B16**, 749.

Институт теоретической физики
им. Л.Д.Ландау
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
24 марта 1983 г.