Письма в ЖЭТФ, том 48, вып. 2, стр. 67 – 70 *25 июля 1988 г.*

СКЕЙЛИНГ ДЛЯ ЭФФЕКТА ШТАРКА В РИДБЕРГОВСКИХ АТОМАХ

В.Д.Мур, В.С.Попов

Получены уравнения, определяющие сдвиги и ширины ридберговских состояний в сильном электрическом поле (для произвольного атома), и соотношения скейлинга для околопороговых штарковских резонансов с $n_1 \sim n \gg 1$, n_2 и $m \sim 1$. Эти соотношения подтверждаются на эксперименте.

1. Исследование ридберговских состояний атомов и молекул вызывает в последние годы значительный интерес. Экспериментально обнаружены [1 - 5] резонансы в сечениях фотоионизации атомов в постоянном электрическом поле $\mathcal{E}$ при $n = 15 \div 40$ и $E \approx 0$. Численные расчеты для атома водорода [6, 7] показывают, что положения и ширины этих резонансов совпадают с комплексными энергиями $E^{(n_1 n_2 m)} = E_r - i\Gamma/2$ штарковских квазистационарных состояний. Это открывает возможность экспериментальной проверки теории эффекта Штарка в сильных полях.

Мы развили аналитическую теорию ридберговских состояний для произвольного атома, см. уравнения (2), (3). С помощью $1/n$-разложения получены соотношения скейлинга для околопороговых резонансов, которые хорошо согласуются с экспериментом и могут быть использованы для идентификации квантовых чисел резонансов.

Далее (если не оговорено особо) используются атомные единицы; $n = n_1 + n_2 + m + 1$ – главное квантовое число уровня, n_1, n_2 и m – параболические квантовые числа ($m \geqslant 0$).

2. При вычислении энергии состояний $(n_1 n_2 m)$ с $n \gg 1, m \ll n$ используем квазиклассические условия квантования (с учетом поправок порядка $\hbar^2$ [8] приближенное разделение переменных в области $r > r_a$ [1)] и "скрытую" симметрию кулоновского поля [9]. Пусть $\beta_{1,2}$ – константы разделения, ϵ и F – приведенные энергия и внешнее поле:

$$\epsilon = 2n^2 E^{(n_1 n_2 m)} = \epsilon' - i\epsilon'' ,$$
$$\epsilon'' = n^2 \Gamma^{(n_1 n_2 m)}, \quad F = n^4 \mathcal{E} , \tag{1}$$

$\Gamma^{(n_1 n_2 m)}(\mathcal{E})$ – ширина уровня $(n_1 n_2 m)$, связанная с ионизацией атома полем $\mathcal{E}$. Тогда ϵ, β_1 и β_2 определяются из уравнений:

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

вывод которых будет изложен в другом месте. Здесь $z_1 = -16\beta_1 F/\epsilon^2$, $z_2 = 16\beta_2 F/\epsilon^2$,

$$\nu_i = \left(1 - \frac{\delta}{n}\right)\left(n_i + \frac{m+1}{2}\right) / n, \qquad i = 1 \text{ и } 2,$$

---

1) Здесь r_a – радиус атомного остова; предполагается малость его по сравнению со средним радиусом ридберговских состояний $r \propto n^2$.

$\delta = \delta(n_1 n_2 m)$ выражается через квантовые дефекты δ_l [10] для свободного атома:

$$\delta(n_1 n_2 m) = \frac{1}{n} \sum_{l=m}^{n-1} (C^{JM}_{J, M-m; lm})^2 (2l+1) \delta_l , \tag{3}$$

$J = (n-1)/2$, $M = (n_1 - n_2 + m)/2$, а $f(z)$ и $g(z)$ выражаются через гипергеометрическую функцию: $f(z) = F(1/4, 3/4; 2; z)$, $g(z) = \frac{2}{3} F(3/4, 5/4; 1; z) + \frac{1}{3} F(3/4, 5/4; 2; z)$. Параметр δ учитывает отличие атомного поля от кулоновского (в области $r \lesssim r_a$). Появление в (3) коэффициентов Клебша – Гордана связано с группой "скрытой" симметрии атома водорода: $SO(4) = SO(3) \otimes SO(3)$, причем $\mathbf{L} = \mathbf{J}_1 + \mathbf{J}_2$ ($\mathbf{L}$ – орбитальный момент, $\mathbf{J}_i$ – генераторы одной из подгрупп $SO(3)$). Поскольку δ_l резко убывают с ростом l [10], то в сумме (3) фактически остается несколько первых членов. Асимптотически $\delta(n_1 n_2 m) \propto 1/n \to 0$ при $n \to \infty$, но при $n \sim 30$ они еще не малы [2)].

Неучтенные в (2) поправки не превосходят n^{-4} (при $m = 0$), поэтому точность системы (2) для ридберговских атомов достаточно высокая. При $\mathcal{E} \to 0$ решение (2) согласуется с рядом теории возмущений до членов порядка $\mathcal{E}^3$ включительно. Однако, с помощью (2) можно рассмотреть и случай сильного поля (вплоть до значений, сравнимых с полем на орбите электрона, $n^4 \mathcal{E} \sim 1$).

Хотя уравнение (2) можно решить численно, при $n \gg 1$ естественно использовать $1/n$-разложение. Для состояний с $n_1 \sim n \gg 1$, n_2 и $m \sim 1$ получаем:

$$\epsilon_{n_1 n_2 m} = \epsilon_0 + \frac{p}{n} \epsilon_1 + \frac{1}{n^2} (p^2 \epsilon_2 + \xi_2 + m^2 \eta_2) + \ldots , \tag{4}$$

$p = 2n_2 + m + 1$. В пределе $n \to \infty$ система (2) сводится к уравнению

$$(-\epsilon)^{1/2} = F(1/4, 3/4; 2; -16F/\epsilon^2), \tag{5}$$

решение которого обозначим через $\epsilon_{cl} \equiv \epsilon_0(F)$. Нетрудно показать, что ϵ_{cl} монотонно возрастает вместе с F, пересекает границу $\epsilon = 0$ при $F = F_* = 0{,}3834$ и остается вещественной при всех $0 < F < \infty$. У следующих членов $1/n$-разложения при $F > F_*$ возникает мнимая часть; при этом члены порядка $1/n$ и $1/n^2$ в (4) выражаются через $\epsilon_{cl}(F)$ и ее производные. Используя это, приходим к соотношениям скейлинга:

$$E_r^{(n_1 n_2 m)} = \frac{1}{2\tilde{n}^2} \epsilon_{cl} (\tilde{n}^4 \mathcal{E}) , \qquad \Gamma^{(n_1 n_2 m)} = \frac{p}{\tilde{n}^3} \left(1 - \frac{\delta}{n}\right) \gamma_{cl} (\tilde{n}^4 \mathcal{E}), \tag{6}$$

где $\tilde{n} = n_1 + \frac{m+1}{2} - \delta$, $\gamma_{cl}(F) = \theta(F - F_*) \left(F \frac{d}{dF} - 1\right) \epsilon_{cl}^{3/2}$ и $E > 0$. В подпороговой области $E < 0$ имеем:

$$E_r^{(n_1 n_2 m)} = \frac{1}{2\tilde{n}^2} \{ \epsilon_{cl} (\tilde{n}^4 \mathcal{E}) + \eta((\tilde{n} n_*)^2 \mathcal{E}) - (\tilde{n}/n_*)^2 \eta(n_*^4 \mathcal{E}) \} , \tag{7}$$

$n_* = \tilde{n} + p/2 = n - \delta$, $\eta(F) = [-\epsilon_{cl}(F)]^{3/2}$. Отметим, что в (6) и (7) входит лишь одна универсальная функция $\epsilon_{cl}(F)$, которая определяется из (5).

3. Сравнение с экспериментом. На рис. 1 проверяется выполнение скейлинга (6) для $E_r^{(n_1 n_2 m)}$. Экспериментальные точки: ○ – состояния $(n_1, 0, 0)$ в атоме водорода [4] при $\mathcal{E} = 6{,}5$ и $8{,}0$ кВ/см; □ – серии $(n_1, 0, 1)$ и $(n_1, 1, 0)$ в атоме водорода [4]; + – данные

[2)] Так, в атоме рубидия $\delta(n-1, 0, 0) = 0{,}768$, $0{,}538$ и $0{,}414$ при $n = 20, 30$ и 40.

для рубидия [1] при $\mathcal{E}$ = 2,189 кВ/см (левые четыре точки), а также $\mathcal{E}$ = 4,335 и 6,416кВ/см; * – состояния $(n_1, 0, 0)$ для натрия [2,3], $\mathcal{E}$ = 2,15 и 4,46 кВ/см.

Рис. 2 иллюстрирует выполнение (7) для подпороговых резонансов [1,2,4,5]. Число экспериментальных точек на рис. 1 и рис. 2 нетрудно было бы увеличить. Во всех рассмотренных нами случаях соотношения скейлинга подтверждаются с хорошей точностью – как для водорода, так и для других атомов [3)].

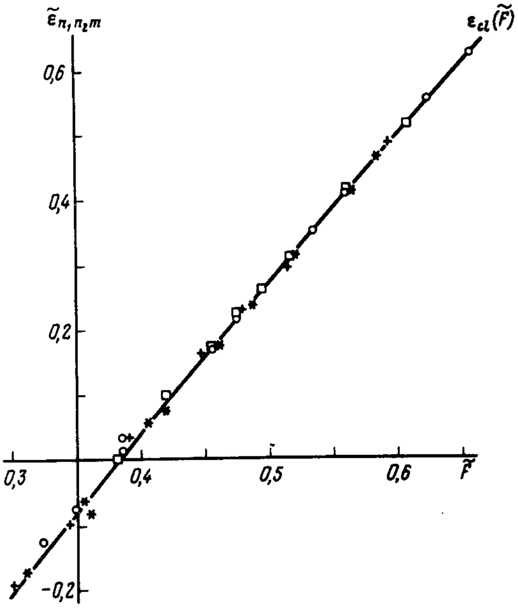

Рис. 1. Скейлинг для надпороговых резонансов. Сплошная кривая – $\epsilon_{cl}(\tilde{F})$, $\tilde{\epsilon}_{n_1 n_2 m} = 2\tilde{n}^2 E_r^{(n_1 n_2 m)}(\mathcal{E})$, $\tilde{F} = \tilde{n}^4 \mathcal{E}$. Обозначения экспериментальных точек даны в тексте

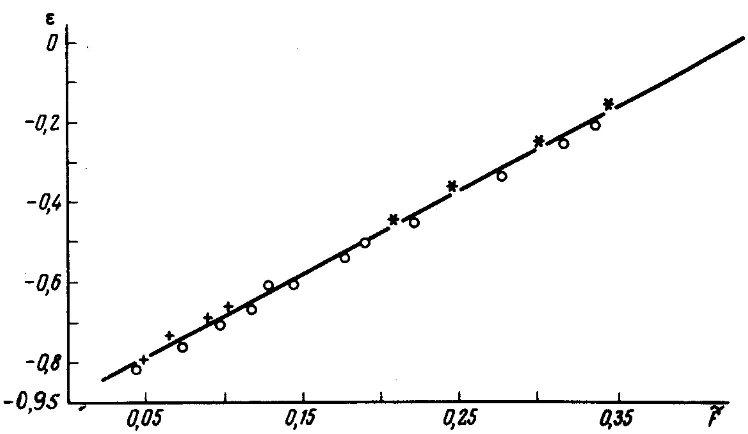

Рис. 2. Скейлинг (7) в подпороговой области. Данные для водорода взяты из [4,5] и обозначены ○ ; остальные обозначения те же , что и на рис. 1.

---

3) Для водорода квантовые дефекты равны нулю. В остальных случаях учет $\delta(n_1 n_2 m)$ в уравнениях (6) и (7) является существенным. За недостатком места, мы опускаем здесь некоторые детали, существенные для правильной интерпретации экспериментальных спектров в случае рубидия [1].

Что касается ширин резонансов, то при $F > 0{,}4$ экспериментальные точки [4] хорошо ложатся на универсальную кривую согласно (6), однако при меньших F наблюдаются отклонения от скейлинга. Здесь нужно учесть поправку к правилам квантования за счет конечной проницаемости барьера, что сводится к замене

$$\nu_2 \to \nu_2 - \frac{1}{2\pi n}\left\{\frac{1}{2i}\ln\left[\Gamma\left(\frac{1}{2}+ia\right)/\,\Gamma\left(\frac{1}{2}-ia\right)(1+e^{-2\pi a})\right] - a\ln a + a\right\}, \qquad (8)$$

$a = \frac{1}{\pi}\int_{\eta_1}^{\eta_2} |p_\eta|\,d\eta$ ($\eta_1 < \eta < \eta_2$ – подбарьерная область). При $\mathcal{E} \to 0$ отсюда следует известное [9] пороговое поведение ширин $\Gamma^{(n_1 n_2 m)}(\mathcal{E})$. Численное решение системы (2) с учетом (8) дает правильную интерполяцию между областью слабого поля и скейлинговой областью $F \gtrsim F_*$, см. рис. 3. Сравнение расчетов с экспериментальными данными по ширинам штарковских резонансов мы отложим до более подробной публикации.

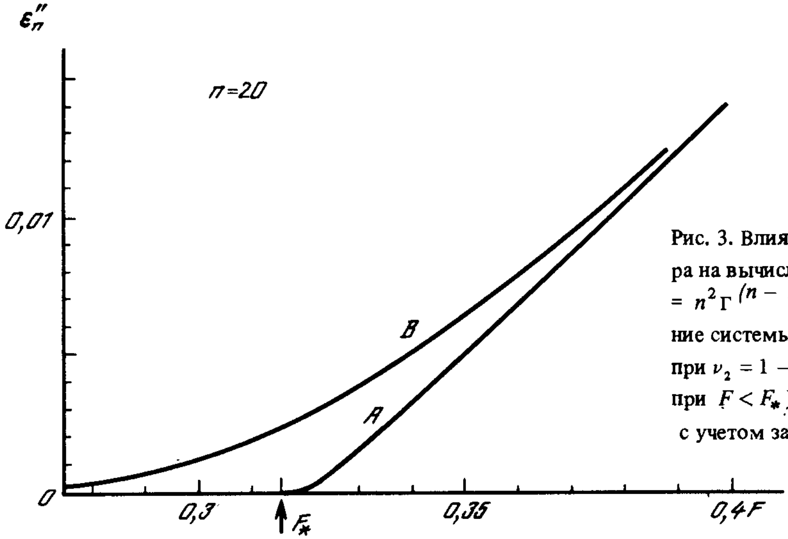

Рис. 3. Влияние проницаемости барьера на вычисление ширины уровня, $\epsilon_n'' = n^2\Gamma^{(n-1,\,0,\,0)}$. Кривая A – решение системы (2) в $1/n$-приближении при $\nu_2 = 1 - \nu_1 = 1/2n$ (здесь $\epsilon_n'' = 0$ при $F < F_*$); кривая B – решение с с учетом замены (8)

Авторы благодарны А.В.Сергееву и А.В.Щеблыкину за обсуждения в ходе работы и помощь в проведении численных расчетов.

Литература

1. *Freeman R.R., Economou N.P.* Phys. Rev., A, 1979, **20**, 2356.
2. *Luk T.S., Di Mauro L., Bergeman T., Metcalf H.* Phys. Rev. Lett., 1981, **47**, 83.
3. *Sandner W., Safinya K.A., Gallagher T.F.* Phys. Rev., A, 1981, **23**, 2448.
4. *Glab W.L., Ng K., Yao D., Nayfen M.N.* Phys. Rev., A, 1985, **31**, 3677.
5. *Ng K., Yao D., Nayfeh M.N.* Phys. Rev., A, 1987, **35**, 2508,.
6. *Колосов В.В.* Письма в ЖЭТФ, 1986, **44**, 457.
7. *Вайнберг В.М., Мур В.Д., Попов В.С., Сергеев А.В.* Письма в ЖЭТФ, 1987, **46**, 178.
8. *Bekenstein J..D., Krieger J.B.* Phys. Rev., 1969, **188**, 130.
9. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
10. *Радциг А.А., Смирнов Б.М.* Параметры атомов и атомных ионов. М.: Энергоатомиздат, 1986.

Поступила в редакцию
25 мая 1988 г.

Институт теоретической и экспериментальной физики