

文章编号: 1007-4627(2002)02-0128-03

能量 $\epsilon < 0$ 时 Li 原子在平行电磁场中的光吸收谱研究*

宋晓红, 林圣路

(山东师范大学物理系, 山东 济南 250014)

摘要:利用包括实散射的闭合轨道理论和分区自洽的迭代算法, 计算了标度能量为 $\epsilon = -0.03$, 标度电场 $\tilde{F} = 0.01$ 时的平行电磁场中 $n \approx 40, m = 0$ 的 Li 原子闭合轨道以及光吸收谱. 介绍了谱的标度特性, 它对理解量子与经典之间的对应关系具有重要的意义. 并与同样情况下的氢原子谱作了比较. 验证了离子实对光吸收过程的重要作用.

关键词: 闭合轨道理论; 光吸收谱; 分区自洽的迭代算; 实散射

中图分类号: O562.3 **文献标识码:** A

1 引言

里德堡原子由于其在研究混沌现象中的特殊作用, 近几年受到了广泛的关注. 在电离阈附近, 分离能级之间的跃迁不可分辨, 因此人们的注意力就自然而然的转到系统的总体性质上, 尤其是振荡幅度中的大标度结构. 半经典闭合轨道理论^[1, 2] 由于具有物理图像清晰、应用范围广泛的特点, 被普遍用来解释原子或离子在外场中的光吸收现象, 为研究量子谱的经典对应提供了强有力的工具, 在研究经典混沌的量子体现中已取得很大的成功. 该理论在研究 H^- 在各种外场下的光吸收^[3, 4] 以及氢原子、Li 原子^[5]、He 原子和 O_3 等在电场或磁场中的光激发、波包动力学等问题已经得到广泛的应用. 通过对多电子原子强场行为的实验和理论研究, 人们发现在回归谱中存在着由氢原子轨道不能解释的强共振结构. 这说明, 研究多电子原子必须考虑离子实的作用, 而且回归谱中应该有实散射峰的贡献. 对于 $\epsilon < 0$ 的情况, 离子实的作用比 $\epsilon > 0$ 时更为明显, 轨道也更加复杂, 而且更能反映原子的内部结构. 本文采用了量子实散射的分区自洽迭代方法^[6], 结合了 Houpper^[7] 的模型势, 考虑到轨道的多次重复和离子实的多次散射, 对 $\epsilon = -0.03$, 主量子数为 $n = 37-46, m = 0$ 的 Li 原子在平行电磁场中的回归谱进行了理论计算. 这是对电场、磁场单独存在情况的进一步推广, 具有重要的意义.

2 理论与方法

在原子单位中, 激发电子的哈密顿量可以写为

$$H = \frac{1}{2} \left(P_\rho^2 + \frac{L_z^2}{\rho^2} \right) + \frac{\gamma}{2} L_z + \frac{1}{8} \gamma^2 \rho^2 + \frac{1}{2} P_z^2 + F_z + V(r), \quad (1)$$

其中, $\gamma = B / (2.35 \times 10^5) T, L_z = 0$. 参照近年来对非氢原子的研究, 我们将势取为

$$V(r) = V_{\text{Coulomb}}(r) + V_{\text{core}}(r) = -\frac{1}{r} - \frac{Z-1}{r} e^{-r/a}, \quad (2)$$

其中, $Z=3$ 为 Li 原子的核电荷数, a 是由离子实范围决定的长度参数, 取为 $1/2.13$.

在量子力学中, 离子实效应完全是由量子亏损来描述的, 我们利用模型势求量子亏损的值, 计算中取 $\mu_0 = 0.40, \mu_1 = 0.06$ ^[7]. 平均振子强度密度包括一个光滑背景项加上振荡部分 $f(E)$,

$$f(E) = -\frac{2(E - E_i)}{\pi} \text{Im} \sum_j N_j \cdot (-1)^m \sqrt{8\pi} y^* (\theta_j^i). \quad (3)$$

我们把研究空间分成以下 3 个区域: (1) 在离子实区域 (约为 $r_0 \leq 1a_0$), 外场的作用可以忽略;

收稿日期: 2002-03-13; 修改日期: 2002-05-09

* 基金项目: 山东省自然科学基金资助项目 (Y98A06009)

作者简介: 宋晓红 (1978-), 女 (汉族), 山东威海人, 在读研究生, 从事强场中的原子动力学研究.

(2)在离子实周围的库仑区域(约为 $1a_0 \leq r \leq 50a_0$)，电子的受力主要由离子实的库仑力决定；(3)在库仑外部区域(约为 $50a_0 \leq r$)，外加电磁场对激发电子的作用至少和库仑作用相当。在实区域和绕实的库仑区域，我们用量子力学方法求解其波函数，在库仑外部区域用半经典方法求解，然后在库仑区合适的位置对解进行连接^[6]。同时引入标度变换： $\tilde{r} = r\gamma^{2/3}$ ， $\tilde{p} = p\gamma^{-1/3}$ ， $\epsilon = E\gamma^{-2/3}$ ， $f = F_0\gamma^{-4/3}$ ， $\tilde{t} = t\gamma$ ， $h_{\text{eff}} = \gamma^{1/3}$ ，最后得到标度后的系数 N_j 的第零阶近似为

$$N_{k_0}^{(0)} = h_{\text{eff}}^{v_0/2} D_{k_0} \tilde{A}_{k_0}^{n_0} e^{\Delta_{k_0}^{n_0}}, \quad (4)$$

其中，相位 $\Delta_j^n = (2\pi/h_{\text{eff}}) \tilde{S}_j^n - (\alpha_j^n \pi/2) - \phi_j$ ，因子 $h_{\text{eff}}^{v_0/2}$ 是由半经典振幅 \tilde{A}_j^n 作标度变换时产生的。第 p 阶近似为

$$N_{k_0}^{(p)} = N_{k_0}^{(p-1)} + h_{\text{eff}}^{(v_0 + \dots + v_p)/2} \sum_{k_p} \dots \sum_{k_0} D_{k_p} \times \tilde{A}_{k_p}^{n_p} \dots \tilde{A}_{k_0}^{n_0} B_{k_{p-1}}^{k_p} \dots B_{k_0}^{k_1} e^{i(\Delta_{k_p}^{n_p} + \dots + \Delta_{k_0}^{n_0})}. \quad (5)$$

由上式可知，对于比较小的 h_{eff} 来说，连续的迭代一定会导致 N 的收敛。而且，实散射对振荡强度至少有 $h_{\text{eff}}^{1/2}$ 倍的减小，这与阴影效应对回归谱强度有减弱的影响是一致的。因为 $f(E)$ 化简后的表达式形式上可以写为

$$f(E) = \sum_j C_j \sin\left(\frac{2\pi\tilde{S}_j}{h_{\text{eff}}} - \frac{\alpha_j \pi}{2} - \phi_j + 2\pi\mu_l\right). \quad (6)$$

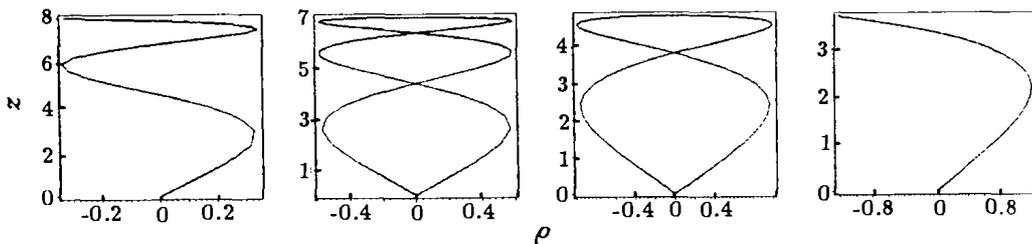


图 1 柱坐标 (ρ, z) 下的闭合轨道

根据所找到的轨道，我们计算了平行电磁场中 Li 原子的吸收谱。在图 2 中对 $\epsilon = -0.03$ 时氢原子的结果与包括实散射的结果即 Li 原子结果进行了比较。纵轴为傅立叶变换的模，横轴为标度经典作用量。图中的每一个尖峰都与一个闭合轨道相对应，尖峰的位置对应着该闭合轨道的标度经典作用量 \tilde{S}_j ，尖峰的强度与 A_j 成正比，库仑散射也就是轨道的单纯重复对应着 $n\tilde{S}_j$ 位置处的尖峰，实散射的贡献对应着 $\tilde{S}_j + \tilde{S}_k$ 位置处的尖峰。图 2 中单个数

令 $z \equiv \gamma^{-1/3}$ ，则有

$$f(z) = \sum_j C_j \sin(2\pi\tilde{S}_j z - \frac{\alpha_j \pi}{2} - \phi_j + 2\pi\mu_l). \quad (7)$$

在傅立叶变换间隔 $[z_1, z_2]$ 内，有 $\bar{z} = (z_1 + z_2)/2$ ，以及 $\Delta z = z_2 - z_1$ 。我们可以得到：

$$F(\tilde{S}) = \frac{1}{\Delta z} \int_{z_1}^{z_2} f(z) \exp\{2\pi i \tilde{S}(z - \bar{z})\} dz = \sum_j C_j \frac{\sin(\pi(\tilde{S} - \tilde{S}_j)\Delta z)}{2\pi(\tilde{S} - \tilde{S}_j)\Delta z} \exp\{i(-2\pi i \tilde{S}_j \bar{z} + \frac{\alpha_j \pi}{2} + \phi_j - 2\pi\mu_l)\}. \quad (8)$$

上式得出的 $F(\tilde{S})$ 为复数。我们研究的是它的模 $|F(\tilde{S})|$ 函数随着标度经典作用量 \tilde{S} 的变化。

3 结果

假定磁场 B 和电场 F 均沿 z 轴正方向，Li 原子位于坐标原点，根据正则方程可以求得电子轨道所满足的不可分离变量的偏微分方程组。我们给出了常标度能量 $\epsilon = -0.03$ ，常标度电场 $\tilde{F} = 0.01$ ， $\gamma^{-1/3}$ (近似等于 n) 的范围为 37.4—45.5 时的部分闭合轨道，如图 1 所示。

字标注的是氢原子的基本闭合轨道，即图 1 中的那些轨道。数字对或数字组标注的是基本闭合轨道的组合，即实散射造成的尖峰。如：标注为 (1, 4) 的尖峰，对应的是轨道 1 与轨道 4 经过一次实散射的组合，位置在 $\tilde{S}_1 + \tilde{S}_4 \approx 4.415$ 附近；标注为 (2, 3, 5) 的尖峰，对应的是轨道 2、轨道 3、以及轨道 5 经过二次实散射的组合，位置在 $\tilde{S}_1 + \tilde{S}_3 + \tilde{S}_5 \approx 8.63$ 附近。

从以上可以看出，我们得出的实散射对吸收谱

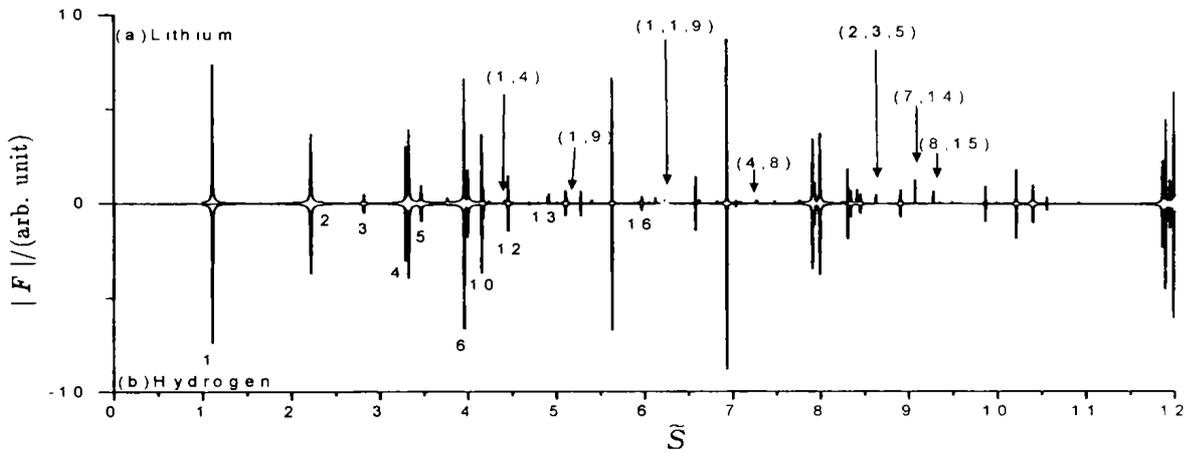


图 2 Li 原子在平行电磁场中常标度能量傅立叶变换谱($\epsilon = -0.03$, $\tilde{F} = 0.01$, $\gamma^{-1/3}$ 的范围 37.4—45.5)
 (a) 用包括实散射的闭合轨道理论得出的 Li 原子光谱; (b) 氢原子的标准闭合轨道理论得出的计算光谱.

的影响, 这一结果与预期的规律是符合的. 这说明 吸收谱的影响是重要的.
 了在研究外场中的多电子原子时, 离子实散射对光

参 考 文 献:

[1] Du M L, Delos J B. Effect of Closed Classical Orbits on Quantum Spectra: Ionization of atoms in a magnetic field. I Physical Picture and Calculations[J]. Phys Rev, 1988, **A38**(4): 1 896.
 [2] Du M L, Delos J B. Effect of Closed Classical Orbits on Quantum Spectra: Ionization of atoms in a magnetic field. II Derivation of Formulas[J]. Phys Rev, 1988, **A38**(4): 1 913.
 [3] Du M L. Photodetachment Spectra of H^- in Parallel Electric and Magnetic Fields[J]. Phys Rev, 1989, **A40**(3): 1 330.
 [4] Du M L, Delos J B. Photodetachment of H^- in an Electric Field[J]. Phys Rev, 1988, **A38**(11): 5 609.
 [5] Lin S L, Zhang Q J, Zhao K, *et al.* Semi Classical Calculations of Recurrence Spectra for Lithium Atom in Parallel Electric and Magnetic Fields[J]. Chin Phys Lett, 2002, **19**(1): 29.
 [6] Dando P A, Monteiro T S, Delande D, *et al.* Role of Core-scattered Closed Orbits in Nonhydrogenic Atoms[J]. Phys Rev, 1996, **A54**(1): 127.
 [7] Houpper B, Main J, Wunner G. Nonhydrogenic Rydberg Atoms in a Magnetic Field: A rigorous semiclassical approach [J]. Phys Rev, 1996, **A53**(2): 744.

Photoabsorption Spectra for Lithium Atom in Parallel Electric and Magnetic Fields*

SONG Xiao-hong, LIN Sheng-lu

(Department of Physics, Shandong Normal University, Jinan 250014, China)

Abstract: By employing the semiclassical closed-orbit theory including core-scattering and region-splitting consistent iterative method, we calculate the closed-orbits and the recurrence spectra of $n \approx 40$, $m = 0$ Li Rydberg atom in parallel electric and magnetic fields at scaled energy $\epsilon = -0.03$. The constant scaled electric field is $\tilde{F} = 0.01$. The novel spectral structures are compared with those of hydrogen obtained by standard closed orbit theory. The effect of the core-scattering has been discussed.

Key words: closed-orbit theory; recurrence spectrum; region-splitting consistent and iterative method; core-scattering

* Foundation item: Natural Science Foundation of Shandong Province of China (Y98A06009)