

А.В. Игнатенко, к.ф.-м.н., Л.А. Витавецкая, к.ф.-м.н., Т.А. Флорко, асс.
Одесский государственный экологический университет

МЕТОД КОМПЛЕКСНЫХ КООРДИНАТ ДЛЯ МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ РИДБЕРГОВСКИХ АТОМОВ В ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ

Изложены основы нового подхода к описанию динамических характеристик многоэлектронных ридберговских атомов в сильном электромагнитном поле, базирующегося на методе комплексных координат и приближении квантового дефекта.

***Ключевые слова:** метод комплексных координат, ридберговский атом, электромагнитное поле*

Введение. В математической физике и квантовой механике для решения фундаментальной задачи об эффекте Штарка для атома в слабом электрическом (электромагнитном) поле обычно используется стандартный аппарат квантово-механической теории возмущений (ТВ) по потенциалу внешнего электрического поля, а также квазиклассическое приближение и асимптотические подходы (см. [1-24]). Искомые методы первоначально были разработаны в основном для задачи об эффекте Штарка для атома водорода [2,3]. Параллельно эти подходы адаптировались к общему классу квантово-механических задач о квазистационарных состояниях атома, включая класс задач о рассеянии электронов на атомах. Здесь традиционно рассчитывается зависимость асимптотической фазы функции состояния рассеиваемого электрона от его энергии. Как показывают оценки энергий и ширин соответствующих резонансов, окончательные результаты оказываются очень чувствительными к качеству используемых волновых функций и в случае близко расположенных резонансов не дают адекватной точности описания [1-5]. В случае многоэлектронных атомов ситуация существенно усложняется по сравнению с атомом водорода. Здесь необходимым является адекватный учет многоэлектронности задачи (и связанной с этим необходимости учета и межэлектронных корреляций, а в случае тяжелых атомов и релятивизма). В настоящее время эта ситуация по-прежнему крайне драматической, несмотря на появление очень важных и принципиально новых подходов [1,5,9-14].

Следует напомнить, что ключевые проблемы классических методов в задаче Штарка (обычная ТВ, квазиклассика, асимптотические подходы) связаны с принципиальной неприменимостью указанных подходов в случае достаточно сильного внешнего поля. Действительно, классические условия применения квазиклассического приближения, а также асимптотических методов фактически сводятся к известному требованию хорошей разделенности рассматриваемых резонансов друг от друга. Это условие легко выполняется для случая слабого внешнего поля. На языке квантово-электродинамической терминологии [10] условие неперекрывания резонансов формулируется как условие малости вклада интерференционных эффектов в соответствующие амплитуды процесса. К настоящему времени в задаче Штарка для атома водорода случай слабого поля исследован достаточно детально [2-5]. В последние годы крайне актуальным является исследование свойств атомов, особенно многоэлектронных, ридберговских, как раз в критической области спектра, когда имеет место постепенное размывание резонансов вплоть до их полного слияния друг с другом (в континууме). И хотя новые подходы [1,5,10-14] отчасти преодолевают указанные выше принципиальные трудности, случай высоко возбужденных атомных систем, т.е. систем в ридберговских состояниях, рассмотрен явно недостаточно. В этой статье, опираясь на работы [20-24], мы изложим основы нового подхода к описанию

динамических характеристик многоэлектронных ридберговских атомов в сильном электромагнитном поле, базирующегося на методе комплексных координат и приближении квантового дефекта.

Основные уравнения метода. Естественным стартовым приближением является известный формализм квазистационарных квазиэнергетических состояний Зельдовича [6]. В его рамках уравнение для квазистационарных состояний многоэлектронного атома имеет вид (здесь используются атомные единицы)

$$(-1/2 \cdot \nabla^2 + V_{at}(r) + \omega L_z + F_0 z) \Psi_E(r) = E \Psi_E(r), \quad (1)$$

где F_0 – напряженность электрического поля, V_{at} – атомный потенциал, учитывающий многоэлектронность задачи. Как правило, в качестве V_{at} обычно используется некий затравочный потенциал типа хартри-фоковского, учитывающий многоэлектронные эффекты. Для определенности ниже мы рассмотрим так называемые одно-или-двух-квазичастичные атомные системы, т.е. системы, состоящие из одного (двух) внешних электронов над остовом заполненных электронных оболочек (естественный пример таких систем – щелочные атомы). Поскольку мы ограничиваем себя рассмотрением класса ридберговских многоэлектронных систем, то удобным стартовым приближением здесь является известное приближение квантового дефекта.

Идея квантового дефекта восходит еще к пионерским работам Ридберга по анализу спектров щелочных элементов, выполненных еще в 19 столетии. Изучение водородоподобных спектров щелочных атомов показало, что для спектров этих атомов (в большей степени для ридберговских состояний) может быть использована формула

$$E_{alk} = -\frac{1}{2n_{eff}^2} = -\frac{1}{2(n - \delta_l)^2}, \quad n \in N, \quad (2)$$

где n_{eff} – эффективное квантовое число, в общем случае отличное от целочисленного значения, δ_l – величина, называемая квантовым дефектом, сильно зависящая от орбитального квантового числа, но медленно меняющаяся с ростом главного квантового числа n . Многочисленные работы (см., напр., [4,5]) по атомным спектрам доказали, что высоковозбужденные (ридберговские) состояния свободных щелочных атомов достаточно корректно описываются формулой (2). Для достижения более высокой точности определения величины квантового дефекта обычно используют разложение по энергии (известная формула Ритца)

$$\delta_l = \delta_l^{(0)} + \sum_{i=1}^M \delta_l^i E^i. \quad (3)$$

С физической точки зрения, квантовый дефект для связанных состояний фактически характеризует влияние некулоновой части атомного потенциала. Для состояний непрерывного спектра роль квантового дефекта δ_l для связанных состояний играет асимптотический фазовый сдвиг τ . Согласно известной теореме Ситона, связь между фазовым сдвигом и квантовым дефектом дается формулой: $\tau = \delta_l \cdot \pi$.

В приближении квантового дефекта в уравнении (1) естественно появляется кулоновский потенциал

$$(-1/2 \cdot \nabla^2 - r^{-1} + \omega L_z + F_0 z) \Psi_E(r) = E \Psi_E(r). \quad (4)$$

После комплексного преобразования координат уравнение (4) на собственные значения и собственные функции принимает вид

$$(-1/2 \cdot \nabla^2 e^{-2i\theta} - r^{-1} e^{-i\theta} + \omega L_z + F_0 z e^{i\theta}) \Psi_E(re^{i\theta}) = (E - E_{(alk)n}) \Psi_E(re^{i\theta}), \quad (5)$$

где E_{alk} – невозмущенное значение энергии.

Квадратичная интегрируемость функций квазистационарных состояний обеспечивается при значениях угла комплексного вращения координат φ , определяемых неравенствами

$$|\arg[-(E + k\omega)]|^{1/2} < \theta < \pi/2 - \arg\{-[E + (k-1)\omega]\}^{1/2}, \quad (6)$$

где k - пороговое число фотонов, необходимое для ионизации.

При выборе конечного базиса, на котором диагонализуется (5), комплексные собственные значения зависят от φ как от параметра. Далее можно задаться определенной точностью вычисления и размер базиса выбирать таким образом, чтобы его вариации не изменяли точности результата. Эффективным является использование соответствующего базиса операторной теории ТВ [10]. Классический подход к определению базиса в задаче об атоме водорода в поле заключается в использовании системы функций задачи Штурма-Лиувилля атома водорода (обобщенной в рамках теории квантового дефекта). В конечном счете основная задача далее сводится к стационарной задаче на собственные значения и собственные векторы матрицы A (причем достаточно рассмотреть одну-две флюксовские зоны)

$$(A - E_j B)|E_j\rangle = 0, \quad (7)$$

где матричные элементы A имеют вид

$$A_{nlm, n_1 l_1 m_1} = \delta_{l, l_1} \delta_{m, m_1} \{ \langle nlm | n_{1l_1 m_1} \rangle \cdot [(n_1 + l_1 + 1)/v \cdot \exp(-2i\theta) - \exp(-i\theta)] + \delta_{n, n_1} (E_n^0 - 1/2v^2 + \omega m) \} + F_0 \exp(-i\theta) \langle nlm | z | n_{1l_1 m_1} \rangle, \quad (8)$$

где $|nlm\rangle$ - радиальная часть волновой функций электрона.

Решение искомой задачи дает набор значений квазиэнергий E_j , скоростей распада Γ_j ($E \rightarrow E - i\Gamma/2$) и соответствующие собственные вектора $|E_j\rangle$. Характеристика, которая обычно измеряется в эксперименте, есть вероятность ионизации (усредненная по начальной фазе внешнего переменного поля) в зависимости от времени, если в начальный момент атом находился в состоянии $|n_0 l_0 m_0\rangle$. Искомая величина определяется как

$$P_{ion}(t) = 1 - \sum_{E_j} w_j \exp(-i\Gamma_j t) \quad (9)$$

с w_j определяющими перекрытие функции начального состояния атома с собственными векторами $|E_j\rangle$ системы «атом-поле». Суммирование в (7), естественно, проводится по всем состояниям в одной флюксовской зоне. Разумеется, величины w_j и Γ_j вычисляются для фиксированного значения напряженности поля, поэтому конечным временем включения поля, когда амплитуда возрастает от 0 до F_0 , пренебрегают (как это делается в любом эксперименте). Рассмотрим далее особенности численной реализации изложенного подхода.

Численная реализация и выводы. Естественно, полная диагонализация матрицы (8) представляет собой достаточно сложную задачу. Упрощенная процедура типа [11,22] сводится к поиску лишь одного собственного значения, переходящего при включении поля в основное состояние E_n^0 . Решение задачи отыскания максимального собственного значения и соответствующего собственного вектора осуществляется стандартными итерационными методами. Указанная схема, однако, как правило, не дает необходимой точности вычисления для последующего сравнения данных с соответствующими экспериментальными значениями. В [3,11] такая методика применялась для изучения ионизации атома водорода в переменном электрическом

поле, и полученные результаты носили в большей степени качественный, чем количественный характер.

В качестве базиса разложения в нашем подходе целесообразным является использование системы штурмовских функций [22-24]

$$\langle r, \theta, \phi | S_{n,l,m}^\alpha \rangle = D(n,l) \exp\left(\frac{-r}{\alpha}\right) \left(\frac{2r}{\alpha}\right)^l L_{n-l-1}^{(2l+1)}\left(\frac{2r}{\alpha}\right) Y_{l,m}(\theta, \phi) \quad (10)$$

$$D(n,l) = \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}}, \quad |m| \leq l < n,$$

где L – полиномы Лаггерра, Y – обычные сферические гармоники, α - параметр, определяющий масштаб осцилляций штурмовских функций (удобная оценка определяется простым соотношением $E_n = -1/(2n^2\alpha)$). Согласно численным оценкам в случае атома водорода в основном состоянии [11] размер базиса для достижения точности вычисления собственных значений $\sim 10^{-2}$ составляет $l_{max}=4$, $n_{max}=10$ и ранг матрицы равен при этом $R=(l_{max}+1)(l_{max}+2)(n_{max}+1)/2=165$. Очевидно, что указанная схема не обеспечит приемлемой точности в случае ридберговских систем.

Согласно более аккуратным оценкам (см., напр., [23,24]), значения $l_{max}>50$, $n_{max}>100$. Для флюксовской зоны соответствующее значение: $n_{size}>40$. Касательно параметра θ , для атома водорода в основном состоянии имеет место соотношение $0.4 < \theta < 0.7$. Для атома в ридберговском состоянии с главным квантовым числом $\sim 30-70$ $0.02 < \theta < 0.07$ [23]. Приемлемые значения всех соответствующих параметров схемы уточняются эмпирически в конкретных расчетах.

Итак, мы изложили новый подход к описанию динамических характеристик многоэлектронных ридберговских атомов в сильном электромагнитном поле, базирующегося на методе комплексных координат и приближении квантового дефекта. По сравнению со стандартными методами, в случае ридберговских атомов он имеет очевидные методические и численные преимущества, связанные с использованием приближения квантового дефекта. Разумеется, для низко лежащих уровней энергии д многоэлектронных атомов в электромагнитном поле изложенный выше подход будет, очевидно, менее точным и эффективным по сравнению с наиболее известными современными и чаще всего используемыми методами описания атома в электромагнитном поле, в частности, методом прямого численного решения соответствующего уравнения Шредингера [1,3,5,12], формализмом операторной теории возмущений [5,9], улучшенными квазиклассическими моделями [10].

В заключение авторы выражает глубокую благодарность проф. Глушкову А.В. за постановку задачи, полезные советы и критические замечания.

Список литературы

1. Ullrich C., Erhard S., Gross E., Superintense Laser-Atom Physics, N-Y: AIP, 2007.-650P.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М., Квантовая механика.-М.: Наука, 1977.-700С.
3. Лисица В.С., Новое в эффектах Штарка и Зеемана для атома водорода//УФН.-1987.-Т. 153.-С.379-422.
4. Летохов В.С., Нелинейные селективные фотопроцессы в атомах и молекулах.-М.:Наука.-1983.-408С
5. Глушков А.В., Атом в электромагнитном поле.- Киев: КНТ, 2005.- 450С.
6. Зельдович Я.Б., Квазиэнергия квантово-механической системы в периодическом поле//ЖЭТФ.-1967.-Т.26.-С.1006-1018.
7. Baldwin G.G., Salem J.C., Goldansky V.I., Approaches to development of gamma ray lasers // Rev.Mod.Phys.-1981.-Vol.53,N4.-P.687-742.

8. Гольданский В.И., Летохов В.С., О воздействии лазерным излучением на процессы распада ядер//ЖЭТФ.-1974.-Т.67.-С.513-516.
9. Ivanov L.N., Letokhov V.S., Spectroscopy of autoionization resonances in heavy elements// Com.Mod.Phys.D.:At.Mol.Phys.-1985.-Vol.4.-P.169-184.
10. Glushkov A.V., Ivanov L.N., DC Strong-Field Stark-Effect: New consistent quantum-mechanical approach// J.Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-1993.-Vol.26.-P.L379-386.
11. Преображенский М.А., Панопорт Л.П., Квазистационарные состояния атома водорода в поле сильной монохроматической волны//ЖЭТФ-1990.-Т.78.-С.929-935.
12. Popov V.S., Mur V.D., Sergeev A.V., Weinberg V.M., Strong field Stark effect: perturbation theory and $1/n$ expansion //Phys.Lett.A.-1990.-V.149.-P.418-424.
13. Gallagher T. F., Noel M.W., Griffith M.W., Classical subharmonic resonances in microwave ionization of Li Rydberg atoms// Phys. Rev. A.-2000.-Vol.62.-P.063401.
14. Walther H., Benson O., Buchleitner A., Raithel G., Arndt M., Mantegna R., From coherent to noiseinduced microwave ionization of Rydberg atoms//Phys.Rev.A-1995.-Vol.51.-P.4862-4876.
15. Grutter M., Zehnder O., Soffley T.P., Merkt F., Spectroscopic study and multichannel quantum defect theory analysis of the Stark effect in Rydberg states of neon// J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-2008.-Vol.41.-P.115001 (8p).
16. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Loboda A.V., Svinarenko A.A., QED approach to atoms in a laser field: Multi-photon resonances and above threshold ionization//Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics (Berlin, Springer).-2008.-Vol.18.-P.501-558.
17. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Malinovskaya S.V., Optics and spectroscopy of cooperative laser-electron nuclear processes in atomic and molecular systems - New trend in Quantum Optics// European Physical Journal ST.-2008.-Vol.160.-P.195-204.
18. Ignatenko A.V., Prepelitsa G.P., Perelygina T.B., Buyadzhi V.V., Optical bi-stability effect for multi-photon absorption in atomic ensembles in strong laser field// Photoelectronics.-2009.-N18.-P.71-76.
19. Dunning F.B., Mestayer J.J., Reinhold C.O., Yoshida S., Burgdorfer J., Engineering atomic Rydberg states with pulsed electric fields// J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-2009.-Vol.42.-P.022001 (10p).
20. Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Ignatenko A.V., Korchevsky D.A., DC strong field Stark effect for non-hydrogenic atoms: new consistent quantum mechanical approach// Int. Journal of Quantum Chem.-2004.-Vol.99.-P.936-948.
21. Glushkov A.V., Lepikh Ya.I., Fedchuk A.P., Ignatenko A.V., Khetselius O.Yu., Ambrosov S.V., Wannier-Mott excitons and atoms in a DC electric field: photoionization, Stark effect, resonances in the ionization continuum// Sensor Electr. and Microsyst. Techn.-2008.-N4.-P.5-11.
22. Rusov V.D., Glushkov A.V., Korchevsky D., Vaschenko V.N., Ignatenko A.V., Stochastic dynamics of the atomic systems in the crossed electric and magnetic field: the rubidium atom recurrence spectra// Вісник Київського уні-ту. Сер.фіз.-мат.-2004.-№4.-524-532.
23. Ambrosov S.V., Ignatenko A.V., Korchevsky D.A., Kozlovskaya V.P., Sensing stochasticity of atomic systems in crossed electric and magnetic fields by analysis of level statistics for continuous energy spectra// Sensor Electr. and Microsyst. Techn.-2005.-N2.-P.19-23.
24. Ignatenko A.V., Probabilities of the radiative transitions between Stark sublevels in spectrum of atom in an DC electric field: new approach// Photoelectronics.-2007.-N16.-P.71-74.

Метод комплексних координат для багатоелектронних рідбергівських атомів у електромагнітному полі. Ігнатенко Г.В., Вітавецька Л.А., Флорко Т.О.

Викладені основи нового підходу до опису динамічних характеристик багатоелектронних рідбергівських атомів у сильному електромагнітному полі, який базується на методі комплексних координат та наближенні квантового дефекту.

Ключові слова: метод комплексних координат, рідбергівський атом, електромагнітне поле

The complex coordinates method for multielectron Rydberg atoms in an electromagnetic field.

Ignatenko A.V., Vitavetskaya L.A., Florco T.O.

The bases of a new approach to multielectron Rydberg atom in a strong electromagnetic field are presented. The approach is based on the complex coordinates method and quantum defect approximation.

Keywords: complex coordinates method, Rydberg atom, electromagnetic field.