

# 强光场中基态氢原子\*

陈 宝 振

(北京师范大学低能核物理研究所, 北京 100875)

(1994 年 1 月 3 日收到)

根据文献[11]中的微扰方法, 利用变分原理计算了光场中基态氢原子的能级. 同高频近似给出的非微扰结果相比符合得较好. 同高频近似不同, 现在的方法能同时并解析地给出能量本征值和波函数.

PACC: 3280F

## 1 引 言

由于激光技术的进步, 实验室中的激光束已达到很高的强度 ( $10^{15}$ — $10^{17}$ W/cm<sup>2</sup>, 甚至更高). 在这样强的光场中, 即使是基态氢原子, 其感受到核库仑吸引也不比其所感受到的光场作用强, 甚至还更弱. 因此, 强光场中的原子过程和行为将会出现全新的特点是很自然的事. 从理论和实验两个方面研究强光场中的原子是近年来原子物理学和光物理学的一个热门课题. 实验上发现并证实了的原子阈上电离就是一个突出的例子<sup>[1-9]</sup>.

同弱光场中原子光电子谱的单峰结构形成鲜明的对照, 强光场中原子阈上电离谱是多峰结构, 同时高阶峰会比低阶峰强. 最近的实验还表明各峰还有细结构<sup>[9]</sup>, 阈上电离现象大体在光强  $10^{13}$ W/cm<sup>2</sup> 以上就会发生.

从理论的角度看, 在强光场上, 传统的微扰论(即把光-原子相互作用哈密顿量作为微扰的微扰论)不适用是预料之中的事. 我们知道, 光强的原子单位是  $3.5 \times 10^{16}$ W/cm<sup>2</sup>, 即在这样强的光强下, 基态氢原子所感受到的光场作用和它感受的库仑作用相当. 因此, 在这样强的光强下, 传统微扰论不适用是普遍接受的观点. 阈上电离实验表明当光强达到或超过  $10^{13}$ W/cm<sup>2</sup> 时, 传统的微扰论就不适用. 当光强只有千分之一原子单位时, 传统的微扰论就不适用. 这是出乎预料的事.

完全理解阈上电离, 需要强光场中原子薛定谔方程的精确解. 但是, 强光场中的原子(即使是最简单的氢原子)也是一个不可分离变量的强耦合的量子体系, 它的精确解现在还没有希望得到.

从文献上看, 大量的处理强光场中原子的工作是在三个方向上进行: 1) 对传统微扰论进行改进, 主要要考虑高阶项的影响<sup>[6]</sup>; 2) 寻找非微扰近似解<sup>[7-9]</sup>; 3) 数值解<sup>[10]</sup>.

\* 国家自然科学基金资助的课题.

同上述三个方向不同,文献[11]提出了处理强光场中原子的新的微扰论,并取得了初步的应用。同传统的微扰论不同,新微扰论不是用光-原子相互作用哈密顿量作微扰展开的小参量,而是寻找新的参量( $\alpha_0/r$ )作微扰展开的小参量,因此适当地选取微扰参量是新微扰论的核心。本文将在这方面作新的尝试。

## 2 理论的表达

### 2.1 光场中氢原子的薛定谔方程

严格的光-原子相互作用的理论要求同时用量子理论来处理光场、原子及它们间的相互作用。在光场很强的情况下,在考虑光场中的原子过程时,将光场作为经典外场来处理是一个很好的近似。在这样一个半经典理论框架内,光场中氢原子的薛定谔方程可以写为

$$i \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) = \left[ (\hat{p} - \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)/c)^2 - \frac{1}{r} \right] \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t), \quad (1)$$

这里  $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$  是光场的矢量势。在上式中已采用原子单位 ( $e = m = \hbar = 1$ ), 本文中如无特别说明,所有量都采用原子单位。

为简化讨论,对光场作如下近似: 单色、偶极近似,即

$$\begin{aligned} \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{A}_0(\mathbf{e}_x \cos \omega t - \mathbf{e}_y \sin \omega t) \quad (\text{圆极化}), \\ \mathbf{A}(\mathbf{r}, t) &= \mathbf{A}_0 \cos \omega t \quad (\text{线极化}), \end{aligned} \quad (2)$$

在这样的近似下,方程(1)可改写为

$$i \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) = [H_0 + H_1] \tilde{\psi}(\mathbf{r}, t), \quad (3)$$

这里  $H_0 = -\frac{\Delta}{2} - \frac{1}{r}$  是氢原子哈密顿量,  $H_1 = \mathbf{A}^2/2c^2 + i\mathbf{A} \cdot \nabla/c$  是光场和原子相互作用哈密顿量。

### 2.2 Kramers 变换和相位变换

如上述,方程(3)中的  $H_1$  项在强光情况下不能简单地取作微扰展开的小参量,同时  $H_1$  项中的  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}$  使得方程失去了球对称性质。这些都大大地增加了求解的难度。方程(3)的精确解析解目前还没有找到。这里采用 Kramers 变换和相位变换的方法来讨论方程(3)的近似解法。这个变换方法已被前人多次采用<sup>[12-14, 16, 17]</sup>。为文章的完整起见,简述如下: Kramers 变换是指对波函数  $\tilde{\psi}$  作的下述变换:

$$\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) = \exp \left[ -i \int^t \mathbf{A}(t') \cdot \hat{p}/c \cdot dt' \right] \tilde{\phi}(\mathbf{r}, t), \quad (4)$$

这个变换将方程(3)变为

$$i \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\phi}(\mathbf{r}, t) = \left[ \frac{-\Delta}{2} - \frac{1}{|\mathbf{r} + \boldsymbol{\alpha}|} + \frac{A^2}{2c^2} \right] \tilde{\phi}(\mathbf{r}, t). \quad (5)$$

相位变换是指下列的变换:

$$\tilde{\psi}(\mathbf{r}, t) = \exp \left[ -i \int^t dt' A^2(t')/2c^2 \right] \psi(\mathbf{r}, t). \quad (6)$$

相位变换将方程(5)变为

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left[ \frac{-\Delta}{2} - \frac{1}{|\mathbf{r} + \boldsymbol{\alpha}|} \right] \psi(\mathbf{r}, t), \quad (7)$$

这里

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{cases} \alpha_0 [\mathbf{e}_y \cos \omega t + \mathbf{e}_z \sin \omega t] & (\text{圆极化}), \\ \alpha_0 \sin \omega t & (\text{线极化}), \end{cases} \quad (8)$$

$$\alpha_0 = \frac{A_0}{c\omega}, \quad \alpha_0 = \frac{A_0}{c\omega}.$$

### 2.3 微扰变分解法

在讨论(7)式的微扰变分解法之前,为便于比较,先简述文献[11]中的微扰方法。

1) 微扰方法简介 文献[11]中的基本思路是: 注意到场级库仑势  $V_t = \frac{-1}{|\mathbf{r} + \boldsymbol{\alpha}|}$  是时间  $t$  的周期函数, 因此可对波函数  $\psi(\mathbf{r}, t)$  和场级库仑势作如下的 Floquet 展开, 以消除时间  $t$ :

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} F_n(\mathbf{r}) e^{-i(E+n\omega)t}, \quad (9)$$

$$V_t = - \sum_{n=-\infty}^{\infty} V_n e^{-in\omega t}.$$

将(9)式代入(7)式, 得

$$(E + n\omega)F_n = \frac{\hbar^2}{2} F_n + \sum_m F_{n-m} V_m. \quad (10)$$

在圆极化光的情况下,  $V_n$  具有下列收敛性质:

$$|V_n| \leq \sum_{k=0}^{\infty} \begin{cases} \frac{1}{r} (|\alpha_0|/r)^{|n|+2k} & r > |\alpha_0|, \\ \frac{1}{|\alpha_0|} (r/|\alpha_0|)^{|n|+2k} & r < |\alpha_0|. \end{cases} \quad (11)$$

$V_n$  的这一性质提示我们可用  $r/|\alpha_0|$  或  $|\alpha_0|/r$  作为小参量对方程(10)进行微扰迭代求解。方程(10)的零阶近似方程为

$$\left( \frac{-\nabla^2}{2} + V_0^{(0)} \right) F_n^{(0)} = (E_n^{(0)} + n\omega) F_n^{(0)}. \quad (12)$$

在求解(12)式的基础上, 文献[12]提出了对 KFR 理论的改进, 并且在改进的 KFR 理论的基础上, 借用文献[14]中的数据较好地解释了最近的关于氢原子阈上电离实验所观察到的阈上电离谱的细结构。

上述微扰论的初步成功表明: 不用光-原子相互作用哈密顿量作微扰展开的小参量, 而是寻找新的微扰展开的小参量, 可能是处理强光场中原子状态的理论方法中不可忽视的可能取得成功的一个方向。

如上所述,新的微扰论只是提出了一个新的理论框架,在将它用于具体问题时,还没有具体可用的解,还要借用其它理论方法的结果。这就是说,新的微扰论还有待发展,以便自身能构成一个完备的理论体系。这就是本文要解决的一个主要问题。

2) 微扰变分法 这节讨论方程(12)的变分法。作为一个解法的讨论,我们考虑  $n=0$  的情况。这样方程(12)可改写为

$$(-\Delta/2 + V_0^{(0)})F^{(0)} = E^{(0)}F^{(0)}, \quad (13)$$

这里

$$V_0^{(0)} = \begin{cases} -\frac{1}{r} & r > |\alpha_0|, \\ -\frac{1}{\alpha_0} & r < |\alpha_0|. \end{cases} \quad (14)$$

由于  $V_0^{(0)}$  的球对称性质,我们寻找方程(13)的如下形式的解:

$$F^{(0)}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (15)$$

将(15)式代入(13)式,得  $R_{nl}(r)$  满足如下的方程:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR_{nl}}{dr} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} R_{nl} - V_0^{(0)} R_{nl} = -2E_{nl}^{(0)} R_{nl}. \quad (16)$$

先讨论(16)式的最简单的形式,即  $n=1, l=0$ , 这样(16)式简化为

$$\left[ \frac{d^2}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d}{dr} - 2V_0^{(0)} \right] R_{10} = -2E_{10}^{(0)} R_{10}. \quad (17)$$

得到(17)式这样的简单方程的精确的解析解仍然不是一件容易的事。现在通行的处理方法是数值积分的方法。这种数值积分方法可以得到  $E_{10}^{(0)}$  的具体数值,但不能给出  $R_{10}$  的具体的解析表达。这对于很多方面的应用是很不方便的。

这里我们采用变分法求解(17)式,它可同时给出  $E_{10}^{(0)}$  的数值和  $R_{10}$  的解析表达式。设  $R_{10}$  的试探形式为

$$R_{10}' = e^{-\beta r}, \quad (18)$$

按变分原理,  $\beta$  的数值由下列方程确定:

$$\frac{\partial}{\partial \beta} \varepsilon(\beta) = 0, \quad (19)$$

这里

$$\varepsilon(\beta) = [\varepsilon_1(\beta) + \varepsilon_2(\beta) + \varepsilon_3(\beta)]/I(\beta), \quad (20)$$

$$\varepsilon_1(\beta) = \int_0^\infty e^{-\beta r} \left( \frac{d^2 e^{-\beta r}}{dr^2} \right) r^2 dr = \frac{1}{4\beta}, \quad (21)$$

$$\varepsilon_2(\beta) = \int_0^\infty e^{-\beta r} \cdot \frac{2}{r} \frac{de^{-\beta r}}{dr} \cdot r^2 dr = -\frac{1}{2\beta}, \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \varepsilon_3(\beta) &= \frac{2}{\alpha_0} \int_0^{\alpha_0} e^{-2\beta r} r^2 dr + 2 \int_{\alpha_0}^\infty e^{-2\beta r} \cdot \frac{1}{r} \cdot r^2 dr \\ &= 2 \int_0^\infty e^{-2\beta r} r dr + 2 \int_0^{\alpha_0} \left( \frac{1}{\alpha_0} - \frac{1}{r} \right) r^2 dr e^{-2\beta r} \\ &= \frac{1}{2\beta^3 \alpha_0} - e^{-2\beta \alpha_0} \left[ \frac{1}{2\beta^2} + \frac{1}{2\beta^3 \alpha_0} \right], \end{aligned} \quad (23)$$

$$I(\beta) = \int_0^{\infty} e^{-2\beta r} r^2 dr = \frac{1}{4\beta^3}, \quad (24)$$

$$I_1 = \int_0^{\alpha_0} \left( \frac{1}{\alpha_0} - \frac{1}{r} \right) r^2 e^{-2\beta r} dr, \quad I_2 = \int_0^{\alpha_0} \left( \frac{1}{\alpha_0} - \frac{1}{r} \right) r^3 e^{-2\beta r} dr. \quad (25)$$

利用这些关系式[(20)–(25)式]

$$\varepsilon(\beta) = -\beta^2 + \frac{2}{\alpha_0} - e^{-2\beta\alpha_0} \left[ 2\beta + \frac{2}{\alpha_0} \right], \quad (26)$$

$$\frac{\partial \varepsilon(\beta)}{\partial \beta} = -2\beta + 2\alpha_0 \left[ 2\beta + \frac{2}{\alpha_0} \right] e^{-2\beta\alpha_0} - 2e^{-2\beta\alpha_0} = 0. \quad (27)$$

确定变分参量  $\beta$  的方程(27)是一个超越方程, 我们可以用数值的方法来解这个方程. 将由方程(27)确定的  $\beta_0$  代入方程(26), 即可得到能量本征值  $E_{10}^{(0)}$ , 即最后结果可写为

$$E_{10}^{(0)} = -\frac{1}{2} \varepsilon(\beta_0), \quad (28)$$

$$R_{10} = e^{-\beta_0 r}. \quad (29)$$

对于其它的  $R_{nl}$  和  $E_{nl}^{(0)}$  可用与上面类似的方法得到. 当然, 不同的  $n, l, R'_{nl}$  的表达式是不同的,  $\varepsilon_{nl}(\beta)$  的表达式也要随之变化, 同时随着  $n, l$  的增大,  $\varepsilon_{nl}(\beta)$  和  $R'_{nl}$  的表达式变得越来越复杂, 工作量会越来越大. 但是, 从原则上看, 处理其它的  $R_{nl}$  和  $E_{nl}^{(0)}$  并没有原则上的困难. 为了节省篇幅, 我们不再在这里仔细讨论.

## 2.4 强光场中氢原子的状态

至此, 我们可将微扰变分法得到的结果归结如下: 求得了(22)方程的解

$$R_{10}(r) = e^{-\beta_0 r}.$$

将它代入(20)式, 即得方程(19)的解

$$\phi_{10}(\mathbf{r}) = e^{-\beta_0 r} Y_{00} \quad (30)$$

或(17)式的解.

$$\phi_{10}(\mathbf{r}, t) = e^{-\beta_0 r - iE_{10} t} Y_{00}. \quad (31)$$

由于这个解在  $\alpha_0$  趋于零时, 即光场趋于零时, 变为无光场氢原子基态波函数, 所以, 我们把它称为光场中氢原子零阶近似基态定态波函数. 应强调的是, 不应将  $\phi_{10}$  与光场中氢原子基态波函数混为一谈. 光场中氢原子基态波函数应为方程(1)的解  $\tilde{\Psi}_{10}(\mathbf{r}, t)$ . 由(4)和(6)式知

$$\tilde{\Psi}_{10}(\mathbf{r}, t) = \exp \left[ -i \int^t \mathbf{A}(t') \cdot \hat{p}/c dt' \right] \cdot \exp \left[ -i \int^t A^2(t')/2c^2 dt' \right] \cdot \phi_{10}. \quad (32)$$

这表明, 光场中氢原子基态波函数  $\tilde{\Psi}_{10}$  是光场中氢原子零阶近似基态定态波函数  $\phi_{10}$  再加上相位变换和 Kramers 变换得到. 这里我们指出了光场中氢原子基态波函数和光场中氢原子零阶近似基态定态波函数之间的区别和联系, 这一点无论是对正确处理光场中力学量的平均值, 还是对正确处理光场中跃迁过程都是至关重要的. 显然, 将两者混为一谈是错误的<sup>[13,14]</sup>. 对于这一问题的细致讨论将另文给出.

### 3 数值结果与讨论

#### 3.1 光场中氢原子基态零阶近似定态解的能量本征值 $E_{10}^{(0)}$

表 1 中 (92A) 行中给出的是文献[15]中的结果; (HFA) 行中给出的是文献[14]中的结果; (PR) 行中给出的是现在的变分法算得的结果。现在的计算结果可以给出三位有效数字。文献[15]中的结果不全; 文献[14]中的结果是由图线上读出来的, 由于标度的关系,  $\alpha_0 < 5.0$  的值不易读准。表 1 中的  $E_{10}^{(0)}$  以里德伯单位给出。表 1 中  $\alpha_0$  的取值范围是 0.1—50 玻尔半径, 对应的光强范围(当  $\omega = 0.1$  时)是  $10^{11}$ — $10^{16}$  W/cm<sup>2</sup>。

表 1 不同  $\alpha_0$  对应的  $E_{10}^{(0)}$

	$\alpha_0$	0.1	0.5	1.0	1.5	5.0	10.0	15.0	20.0	30.0	50.0
$E_{10}^{(0)}$	(92A)					0.21	0.12	0.09			
	(HFA)					0.27	0.16	0.11	0.09	0.06	0.04
	(PR)	0.988	0.844	0.678	0.564	0.264	0.153	0.109	0.0845	0.0587	0.0366

由表 1 可见, 在  $\alpha_0$  或光强的这样大的范围内, 现在的变分方法给出的  $E_{10}^{(0)}$  的值定性上是合理的。这个合理性表现为当  $\alpha_0$  趋于零时,  $E_{10}^{(0)}$  趋于无光场时氢原子基态能量值; 当  $\alpha_0$  变得越来越大时,  $E_{10}^{(0)}$  与无光场时氢原子基态能量值的偏离也越来越大, 即氢原子所受到的扰动越来越严重。同时可见现在的变分结果和两个数值结果定性上是一致的。

#### 3.2 变分参数 $\beta_0$

不同  $\alpha_0$  对应的  $\beta_0$  值列于表 2。

表 2

$\alpha_0$	0.1	0.5	1.0	1.5	5.0	10.0	15.0	20.0	30.0	50.0
$\beta_0$	0.983	0.806	0.636	0.529	0.263	0.164	0.121	0.0979	0.0721	0.0479

文献[14]和[15]中都没有给出这个数据, 所以无法同它们比较。

由表 2 可见,  $\beta_0$  的数值在  $\alpha_0$  这样大的变化范围内定性上是合理的, 因为当  $\alpha_0$  趋于零时, 尝试波函数  $R_{10}' = e^{-\beta_0 r}$  趋向于无光场时氢原子基态波函数  $R_{10} = e^{-r}$ ; 当  $\alpha_0$  变大时, 尝试波函数  $R_{10}'$  对基态波函数  $R_{10}$  的偏离也越大。显然, 从定性上看这个结果是合理的。

#### 3.3 传统微扰论适用的判据

引言中提到, 当光强接近或超过一个原子单位光强时, 以光-原子相互作用哈密顿量作为微扰的传统微扰论将不适用。这是预料之中的事。但是阈上电离实验表明, 当光强超过  $10^{13}$  W/cm<sup>2</sup>, 即大约 0.0003 个原子单位, 传统微扰论就不适用。这是一个令人吃惊的结果。

按照微扰论的一般规则和本文的微扰变分法, 可以提出如下的传统微扰论不适用的判据: 当光场引起的氢原子能级改变大于能级间距时, 传统微扰论就不适用。按照这一判据, 对于  $\omega = 2.34\text{eV}$ , 即  $\omega = 0.086$  原子单位时的光

$$I_r = \alpha_{cr}^2 \cdot 7 \times 10^{16} \cdot \omega^4, \quad (33)$$

即  $I > I_r$  时传统微扰论就不适用。

由表 1 可知,  $\alpha_{cr} \sim 5$ 。此时, 基态的能量  $E_{10}^{(0)} \sim -0.25$ 。和无光场氢原子的第一激发态已接近或相等。由此可得

$$I_r \sim 9 \times 10^{13} \text{W/cm}^2. \quad (34)$$

文献[18]对  $I_r$  也作过较为直观的定性估计, 给出  $I_r \sim 10^{13} \text{W/cm}^2$ 。值得提出的是, 他们估计的  $I_r$  与  $\omega$  无关, 而我们的估计与  $\omega$  有很强的依赖性, 例如, 如果我们取  $\omega = 1.17\text{eV}$ , 即  $\omega = 0.043$  原子单位, 那么(34)式就应由(35)式代替

$$I_r \sim 6 \times 10^{12} \text{W/cm}^2. \quad (35)$$

作者感谢黄祖洽教授的指导。

- [1] P. Agostini *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **42** (1979), 1127.
- [2] P. Kruit *et al.*, *Phys. Rev.*, **A28** (1983), 248.
- [3] H. J. Humpert *et al.*, *Phys. Rev.*, **A32** (1985), 3787.
- [4] P. H. Bucksbaum *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **58** (1987), 349.
- [5] H. Rottke *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **64** (1990), 404.
- [6] Y. Gontier and M. Trahin, *J. Phys. B*, **13** (1980), 4381.
- [7] Z. Deng and J. H. Eberly, *Phys. Rev. Lett.*, **53** (1984), 1810.
- [8] H. R. Reiss, *J. Opt. Soc. Am.*, **B4** (1987), 726.
- [9] B. Chen *et al.*, *Phys. Rev.*, **A37** (1987), 4091.
- [10] J. H. Eberly *et al.*, *J. Opt. Soc. Am.*, **B6** (1989), 1289.
- [11] 陈宝振, 物理学报, **40**(1991), 1749.
- [12] 陈宝振, 物理学报, **42**(1993), 237.
- [13] Dimou and F. H. M. Faisal, in: *Collisions and Half-Collisions with Laser*.
- [14] M. Pont *et al.*, *Z. Phys. D*, **9** (1988), 297.
- [15] T. C. Landgrat *et al.*, *Phys. Lett.*, **92A** (1982), 131.
- [16] F. H. M. Faisal, *J. Phys. B*, **6** (1973), L89.
- [17] 全晓明、李家明, 物理学报, **40**(1991), 190.
- [18] J. H. Eberly *et al.*, *Phys. Repts.*, **204** (1991), 333.

## GROUND STATE H-ATOM IN STRONG LASER FIELDS

CHEN BAO-ZHEN

*(Institute of Low Energy Nuclear Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875)*

(Received 3 January 1994)

### ABSTRACT

On the basis of perturbative theory in Ref.[11], the H-atom ground state energy in laser fields is calculated with the variational Method and a good agreement with the previous nonperturbative results by high frequency approximation theory (HFAT) is obtained. In contrast with HFAT, the eigen energy and wavefunction are given analytically and simultaneously by the present method.

**PACC:** 3280F