

外电场中 Li 原子回归谱的分岔效应*

宋晓红 林圣路†

(山东师范大学物理系, 济南 250014)

(2002 年 7 月 26 日收到, 2002 年 11 月 26 日收到修改稿)

半经典闭合轨道在外场和激光参数的某些值附近发生分岔, 导致波函数的发散, 使原有的半经典闭合轨道理论失效. 计算了高激发的 Li 原子在标度能量为 $\epsilon = -2.94$, 标度电场在 $135.86 < F^{-1/4} < 160.11$ 范围内光吸收谱的 Fourier 变换, 分析了轨道分岔现象及其影响, 并采用了一种适用于不同能域的统一近似方法修正了分岔点附近波函数. 计算中考虑了原子实多重散射组合回归效应, 并把所得回归谱与用标准半经典闭合轨道理论对 Li 原子及 H 原子的计算结果相比较, 证明了轨道分岔效应的重要性.

关键词: 分岔, 统一近似, 半经典闭合轨道理论, 回归谱

PACC: 0547, 0365S, 3290

1. 引 言

近年来, 强场中原子光吸收谱的强共振特性已引起人们的广泛关注. 这种现象涉及高里德伯态原子结构和极端条件下物质的抗磁性、电子关联及运动规律等基本问题. 半经典闭合轨道理论由于具有物理图像清晰、应用范围广泛等特点被普遍用来解释原子或离子在强外场中的光吸收现象, 成为研究量子混沌的一个典型实例.

半经典闭合轨道理论是由 Du 等人在研究磁场中的 H 原子时提出的^[1]. 在过去十几年里, 人们采用这种方法先后对 H⁻ 离子和 H 原子在各种外场中的光剥离特性作了广泛的研究^[2-6], 不仅从各个角度验证了理论的正确性, 而且发展了回归谱学、标度律、能级统计学等理论方法. 但是, 由于轨道分岔效应, 返回波函数会变成无限大, 半经典闭合轨道理论在分岔点附近不再适用. 这种分岔效应可以通过构造统一近似的半经典解来加以修正^[7,8]. 这种方法曾被广泛应用于原子和分子散射、平行电磁场中 H⁻ 离子的光剥离^[9]、含时波包传播^[10] 及连续 Stark 谱^[11] 等多个领域的计算中. 1997 年, Gao 和 Delos^[12] 采用统一近似方法, 得出了电场中 H 原子分岔点附近的回归谱. 1998 年, Shaw 和 Robicheaux^[13] 把 Dando

等人的分区自洽迭代方法^[14] 和统一近似方法相结合, 使得在分岔点附近的非 H 原子回归谱的计算成为可能. 本文进一步将统一近似方法应用到 Li 原子体系中, 计算了标度能量 $\epsilon = -2.94$ 时 Li 原子 Stark 谱. 这里同时考虑了实散射的组合回归效应, 由此可以看出, 分岔效应及原子实散射对回归谱的重要作用. 本工作既是半经典理论的完善和验证, 又是对原有分岔理论处理方法的发展. 另外, 因为 Li 原子体系是一个在实验上可以被测量的体系, 所以本文得到的结果对于实验研究具有一定参考意义.

2. 电场中轨道分岔现象

当系统的固定参数, 如能量、激光频率、外场强度改变时, 新的闭合轨道就会产生或湮没. 这种现象称之为分岔. 分岔是位形、动量混合空间中一个非常典型的现象.

采用柱坐标系, 不考虑原子实影响时, Li 原子在沿 z 轴方向的电场中运动的哈密顿量为 ($L_z = 0$, 采用原子单位: $e = \hbar = m = 1$)

$$H = \frac{1}{2}(p_z^2 + p_\rho^2) - \frac{1}{(\rho^2 + z^2)^{1/2}} + Fz.$$

做如下标度变换^[15,16]:

$$\tilde{\rho} = \rho F^{1/2}, \quad \tilde{z} = z F^{1/2},$$

* 山东省自然科学基金(批准号: Y98A06009)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: slin@sdu.edu.cn

$$\begin{aligned} \tilde{p}_\rho &= p_\rho F^{-1/4}, \quad \tilde{p}_z = p_z F^{-1/4}, \\ \tilde{t} &= t F^{3/4}, \quad \epsilon = EF^{1/2}, \quad \tilde{h}_{\text{eff}} = F^{1/4}, \end{aligned} \quad (1)$$

其中 \tilde{h}_{eff} 为有效普朗克常数. 由此得到标度后的哈密顿量为

$$\tilde{H} = HF^{-1/2} = \frac{1}{2}(\tilde{p}_z^2 + \tilde{p}_\rho^2) - \frac{1}{(\tilde{\rho}^2 + \tilde{z}^2)^{3/2}} + \tilde{z}, \quad (2)$$

取如下半抛物坐标:

$$\begin{aligned} u &= (\tilde{r} + \tilde{z})^{1/2}, \quad v = (\tilde{r} - \tilde{z})^{1/2}, \\ \tilde{z} &= \frac{1}{2}(u^2 - v^2), \quad \tilde{\rho} = uv, \\ p_u &= \tilde{p}_\rho v + \tilde{p}_z u, \quad p_v = \tilde{p}_\rho u - \tilde{p}_z v, \\ \frac{d\tilde{t}}{d\tau} &= u^2 + v^2, \end{aligned} \quad (3)$$

其中 τ 为半抛物坐标中的时间. 由此可得哈密顿量为

$$\begin{aligned} h &= \frac{1}{2}(p_u^2 + p_v^2) + \mathcal{V}(u, v) = 2, \\ \mathcal{V}(u, v) &= \frac{1}{2}(u^4 - v^4) - \epsilon(u^2 + v^2). \end{aligned} \quad (4)$$

在半抛物坐标中, 位置矢量与 u 轴的夹角用 Θ 表示, 而在柱坐标中, 它与 z 轴的夹角为 θ , $\theta = 2\Theta$. z 轴的正半轴对应于半抛物坐标的 u 轴, 而负半轴对应于 v 轴. ρ 轴变成了 $u = v$ 直线. 此时, 哈密顿方程可分离变量

$$h_v(p_v, v) = \frac{1}{2}p_v^2 + V_v(v) = e_v = \text{const}; \quad (5a)$$

$$h_u(p_u, u) = \frac{1}{2}p_u^2 + V_u(u) = e_u = \text{const}; \quad (5b)$$

$$V_v(v) = -\epsilon v^2 - \frac{1}{2}v^4; \quad (5c)$$

$$V_u(u) = -\epsilon v^2 + \frac{1}{2}u^4; \quad (5d)$$

$$e_u + e_v = 2. \quad (5e)$$

当 $\epsilon > 0$ 时, $V_v(v) < 0$, 唯一存在的闭合轨道就是上升的平行闭合轨道 (uphill orbit), 当 $\epsilon < 0$ 时, $V_v(v)$ 有可能大于零, 因此, 沿着与 u 轴夹角为 $\Theta > 0$ 方向出射的轨道才有可能返回原点, 产生新的轨道. 当能量 $\epsilon \leq -2$ 时, 在 v 轴上也会有闭合轨道产生, 称为下降轨道 (downhill orbit).

若 u, v 轴运动的周期比 T_u/T_v 恰好等于有理分数 m/l 时, 就会产生分岔. 在分岔点, 新产生的轨道与上升轨道的第 l 次重复重合, 不可分辨, 当能量低于分岔点的能量时, 新的轨道与原来的上升轨道分

离, 新的闭合轨道产生, 称为 m/l (或 $m:l$) 轨道. 当能量继续降低, 使得 T_u/T_v 又等于 m/l 时, 这条新的轨道与下降轨道的第 m 次重复重合, 轨道湮没, 称为反分岔.

以 9/10 轨道为例, 如图 1 所示, 当能量 $\epsilon = -2.342$ 时, T_u/T_v 等于 9/10, 分岔产生. 随能量的逐渐降低, 轨道的出射角逐渐增大, 即 9/10 轨道的出射方向逐渐与 u 轴 (即上升轨道) 偏离, 而向 v 轴 (即下降轨道) 靠拢, 直到能量 $\epsilon = -3.025$ 时, T_u/T_v 又等于 9/10, 此时轨道突然湮没, 称为反分岔.

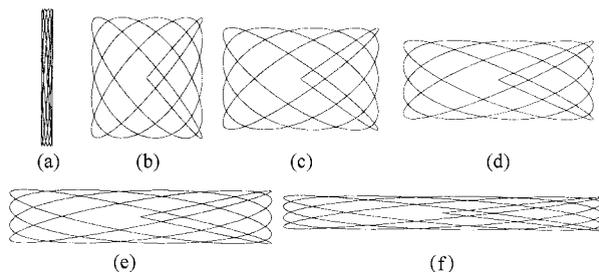


图 1 9/10 轨道图像随能量的变化 (横轴为 v 轴, 纵轴为 u 轴) (a) 为 $\epsilon = -2.35$, (b) 为 $\epsilon = -2.50$, (c) 为 $\epsilon = -2.65$, (d) 为 $\epsilon = -2.80$, (e) 为 $\epsilon = -2.95$, (f) 为 $\epsilon = -3.00$

图 2 给出分岔点附近 T_u/T_v 与 ϵ 的关系. 图 2 上面曲线上的点表示轨道的分岔点, 下面曲线上的点表示轨道的反分岔点. 在分岔点附近, 闭合轨道周围许多毗邻轨道形成一个尖端结构, 这种聚焦效应导致当标度能量经过分岔点时, 其回归谱的强度显著增强. 闭合轨道理论应用的一个必要条件是毗邻的闭合轨道相互独立. 判断轨道是否独立要看其作用量之差与有效普朗克常数的比. 如果闭合轨道与其毗邻轨道满足方程

$$2\pi | \hat{S}_k' - \hat{S}_k^n | \geq F^{1/4} = \tilde{h}_{\text{eff}} \quad (6)$$

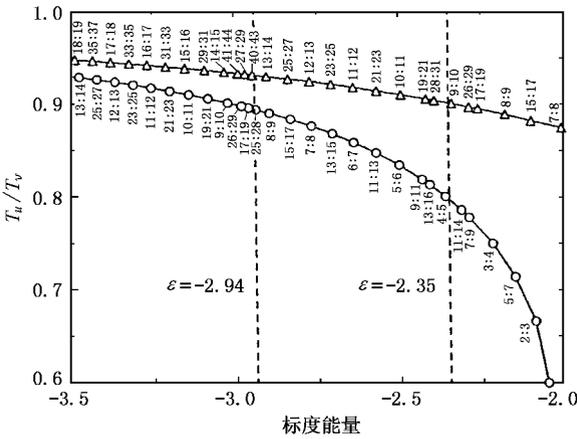
时, 则认为轨道 k 与 k' 相互独立^[17]. 在分岔点附近, 闭合轨道与其毗邻轨道有基本相等的作用量, 闭合轨道不再独立, 理论失效.

从闭合轨道公式来看, 半经典闭合轨道理论得到的振子强度密度的振荡部分为

$$\mathcal{J}(E) = \frac{-\mathcal{X}(E - E_i)}{\pi} \text{Im} \sum_j N_j \sqrt{8\pi} \mathcal{Y}(\theta). \quad (7)$$

对于上升轨道或下降轨道

$$N_j = -4\pi \mathcal{Y}(\theta) \frac{F^{1/4}}{\sqrt{2} J_{12}} \exp[\mathcal{Y}(2\pi \tilde{S}_j F^{-1/4} - \mu_j \pi/2 - \pi/2)], \quad (8)$$

图2 T_u/T_v 与标度能量的对应关系

其中 J_{12} 决定轨道的稳定性,

$$J_{12} = \frac{\sin(\sqrt{|2\epsilon|} n\tau)}{\sqrt{|2\epsilon|}}. \quad (9)$$

对于其他轨道

$$N_j = -2^{9/4} \pi^{3/2} \Upsilon(\theta) \frac{\sin(\theta)}{\cos(\theta/2)} \frac{F^{1/8}}{(\sqrt{2} J_{12})^2} \times \exp[\Upsilon(2\pi\tilde{S}_j F^{-1/4} - \mu_j \pi/2 - 3\pi/4)] \quad (10)$$

其中 τ 为上升轨道(或下降轨道)第一次返回原点时所用的时间.显然, J_{12} 越小,就说明这个重复的上升轨道(或下降轨道)越接近分岔点.当能量 ϵ 选取适当的值使得 $\sqrt{|2\epsilon|} n\tau$ 恰好为 π 的整数倍时, $J_{12} = 0$, N_j 就会趋于无穷大,振幅发散,此时半经典闭合轨道理论就不再适用.

3. 包括实散射效应的统一近似方法

Gao 和 Delos 用统一近似方法给出了在位形、动量混合的统一坐标空间中分岔点附近的波函数^[12]:

$$\psi_{\text{unif}}^0(u, v) = D' \int_{p_v} A(p_v) \exp(iF(p_v)) \Upsilon(\theta_i) \times J_0(p_v v/\hat{h}) J_0(p_u u/\hat{h}) p_v dp_v, \quad (11)$$

其中

$$A(p_v) = \left| \frac{p_{v_i}}{p_{v_f}} \frac{\partial p_{v_i}}{\partial p_{v_f}} \right|^{1/2}, \quad (12)$$

$$F(p_v) = \left\{ \tilde{S}_0^n(\epsilon) - \frac{a_1(\epsilon)}{2} p_v^2 - \frac{a_3(\epsilon)}{4} p_v^4 \right\} / \hat{h}_{\text{eff}} - v \frac{\pi}{2}, \quad (13)$$

$$D' = -\pi 2^{3/2}, \quad (14)$$

$$v = \mu_0 + 2, \quad (15)$$

μ_0 为分岔产生新轨道之前中心轨道的马斯洛夫指标 $J_0(p_u u/\hat{h})$ 和 $J_0(p_v v/\hat{h})$ 均为 Bessel 函数, $\hat{h} = \hbar_{\text{eff}}$. 由此可得光吸收谱公式为

$$f(E) = -2\pi^{-1} (E - E_i) \text{Im} \sum_{k,n} R_k^n, \quad (16)$$

其中

$$R_{k,\text{amif}}^n = D\psi_i | \psi_{\text{unif}}^0 \rangle = \frac{4\pi}{\sqrt{2}} D' \int_{p_v} g(p_v) \exp(iF(p_v)) p_v dp_v \quad (17)$$

$$g(p_v) \equiv A(p_v) \Upsilon(\theta_i) \Upsilon(\theta_f). \quad (18)$$

做统一近似展开,得

$$f(E) = (E - E_i) \pi 2^3 \times \text{Im} \left\{ \sqrt{\frac{\pi}{\lambda}} \exp[-\Upsilon(a_1^2/4a_3) F^{-1/4}] g(-a) \times \left[\frac{1}{2} - C\left(\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} a\right) + \frac{1}{2} i - S\left(\sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} a\right) i \right] + \frac{i}{\lambda} g'(-a) \right\}, \quad (19)$$

其中第一项 $C(s)$, $S(s)$ 为 Fresnel 积分,第二项为 Bleistein 修正项,它比第一项小得多. a_1 为一个参数,它取决于距分岔点的远近. a 与新产生轨道的 v 方向动量有关.

$$g'(-a) = \frac{g(-a) - g(0)}{-a}, \quad (20)$$

$g(-a)$ 为新产生轨道的振幅, $g(0)$ 为上升轨道的振幅.在距分岔较远的地方,传统的闭合轨道理论结果与统一近似方法一致.

本文计算的是 Li 原子回归谱,在我们以前的文章中已看到其原子实的重要影响^[18].根据分区自洽迭代方法,在原子实外部区域,多电子原子轨道与 H 原子轨道近似相等,原子实的作用就是将电子从一条轨道散射到其他轨道上形成“组合轨道”,实散射项可写为

$$F_{k',k}^n = \frac{i}{\tilde{y}(\theta_i) \Upsilon(\theta_f)} \frac{1}{4} \sum_{l \geq |m_l|} (e^{2\pi i \mu_l - 1}) \times Y_{lm}^*(\theta_f, \rho) Y_{lm}(\theta_i, \rho).$$

Li 原子的量子亏损 μ_l 可以由

$$\mu_l = \frac{\sqrt{2}}{\pi} \lim_{R \rightarrow \infty} \left[\int_{r_0, c}^R \sqrt{-V(r) - \frac{(l+1/2)^2}{2r^2}} dr - \int_{r_0}^R \sqrt{\frac{1}{r} - \frac{(l+1/2)^2}{2r^2}} dr \right] \quad (21)$$

得到^[19],而振子强度密度为

$$f(E) = -2\pi^{-1} (E - E_i) \text{Im} \sum_{k,n} R_k^n, \quad (22)$$

R_k^n 为多重散射的“回归积分”,可写为

$$\begin{aligned}
 R_k^n &= R_{k_{j+1}}^{n_{j+1}} \left[\prod_{j=0}^J (F_{k_j^{n_j}}^{n_j} R_{k_j}^{n_j}) \right] \\
 &= \sum_{k_1, n_1} R_{k_1}^{n_1} + \sum_{n_2, k_2, n_1, k_1} R_{k_2}^{n_2} F_{k_2}^{n_2} R_{k_1}^{n_1} \\
 &\quad + \sum_{n_3, k_3, n_2, k_2, n_1, k_1} R_{k_3}^{n_3} F_{k_3}^{n_3} F_{k_2}^{n_2} R_{k_2}^{n_2} F_{k_1}^{n_1} R_{k_1}^{n_1} + \dots,
 \end{aligned}
 \tag{23}$$

其中 J 为实散射的总次数,如果 $J=0$,即为不包含实散射的回归积分.在分岔点附近,用统一近似的回归积分代替闭合轨道理论的回归积分.

4. 结果与讨论

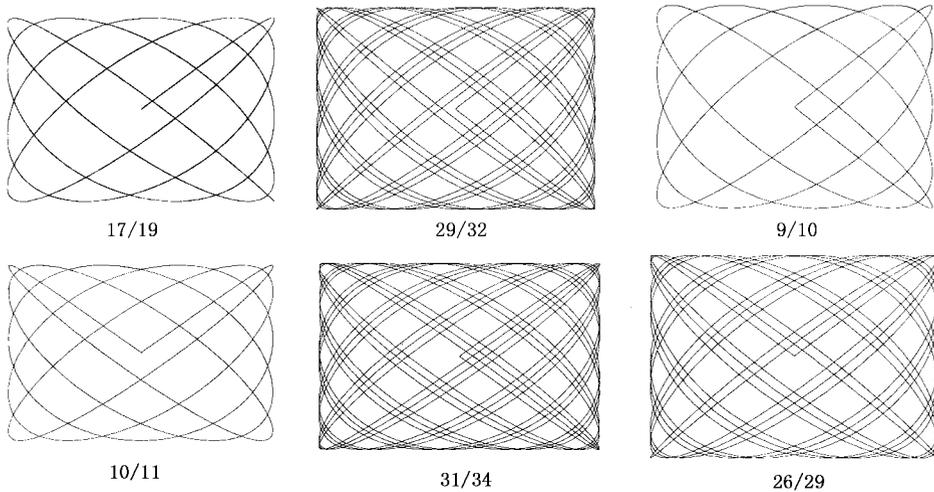


图 3 半抛物坐标中的闭合轨道

其次,进行了回归谱计算,图 4 给出部分结果.其中 (a) 为包括实散射的一般闭合轨道理论计算的 Li 原子回归谱 (b) 为用统一近似方法修正过的 Li 原子回归谱.从图 4 可以清楚地看出两者振幅强度的差别.在图 4 (a) 中,用 D_m 或 U_l 标记的那些峰表示由分岔产生的,且处于分岔点附近的轨道的贡献.图 4 (b) 中与之相对应的峰表示用统一近似方法修正过的结果.如 U_{14} 来自上升轨道的第 14 次重复产生的 13/14 轨道,在用闭合轨道理论计算的回归谱 (图 4 (a)) 中这条轨道对应的峰振幅发散,这种现象在实验上是没有的.采用统一近似方法修正后 (图 4 (b)),其强度明显减弱,这与预期结果相符合. D_{26} 相应于下降轨道的第 26 次重复产生的 26/29 轨道,其分岔能也在 $\epsilon = -2.94$ 附近.图 4 (b) 中 a, b, c, d 所标记的那些峰与经过一次实散射形成的组合轨道相

由图 2 可以看出,在 $\epsilon = -2.94$ 附近分岔轨道较密集.本文计算了在这个能量下,标度电场取 $135.86 < F^{-1/4} < 160.11$ 时的包括实散射的 Li 原子回归谱,利用统一近似方法进行了修正,并与推广的闭合轨道理论结果作了比较.同时还与相同情况下的 H 原子的结果作了比较,突出表现了 Li 原子实散射在回归谱中的重要作用.

首先,我们在半抛物坐标下找到所有稳定轨道,其中部分闭合轨道如图 3 所示,纵轴为 u 轴,横轴为 v 轴.

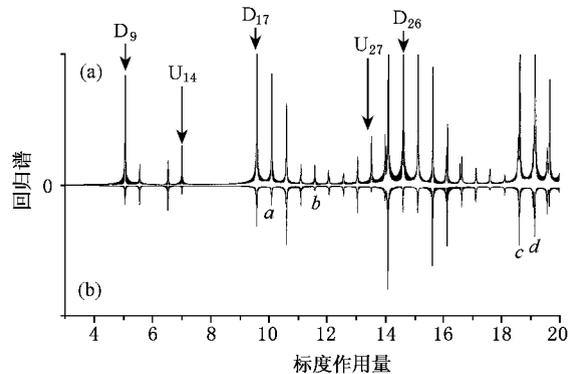


图 4 电场中 Li 原子常标度能量回归谱 ($\epsilon = -2.94, 135.86 < F^{-1/4} < 160.11$) (a) 为用推广的半经典闭合轨道计算的 Li 原子回归谱 (b) 为用统一近似方法修正的 Li 原子回归谱

对应.如 a 对应的是由于实散射作用形成的 $D_9 \oplus D_{10}$ 组合轨道, b 对应的是 $D_9 \oplus U_{13}$ 组合轨道, c 对应

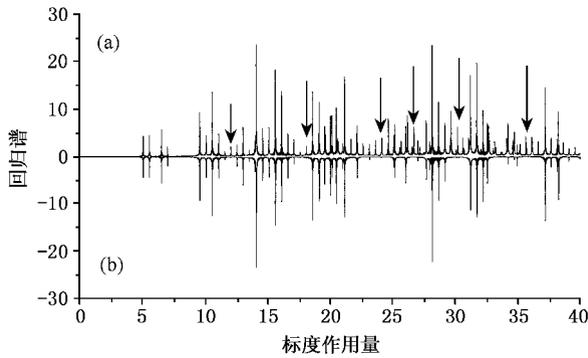


图 5 $\epsilon = -2.94$, $135.86 < F^{-1/4} < 160.11$ 时包含实散射且已用统一近似方法修正过的 Li 原子回归谱(a)和用统一近似方法修正过的 H 原子回归谱(b)

的是 $U_{27} \oplus D_9$ 组合轨道, d 对应的是 $U_{27} \oplus U_{12}$ 组合轨道.

图 5(a)为 $\epsilon = -2.94$, $135.86 < F^{-1/4} < 160.11$ 时包含实散射且已用统一近似方法修正过的 Li 原子回归谱, (b)为相同条件下用统一近似方法修正过的 H 原子回归谱. 从图 5 可以看出, Li 原子回归谱中存在着一些 H 原子所没有的峰(用箭头标记), 这些差别正是实散射作用造成的. 当 $\tilde{S} < 10$ 时, 两图基本没有差别, \tilde{S} 越大, 差别也就越明显. 由此证明了分岔时原子实在回归谱中同样具有不可忽视的作用.

- [1] Du M L and Delos J B 1988 *Phys. Rev. A* **38** 1896
Du M L and Delos J B 1988 *Phys. Rev. A* **38** 1913
- [2] Du M L 1988 *Phys. Rev. A* **38** 5809
- [3] Du M L 1991 *Phys. Rev. A* **134** 467
- [4] Peters A D and Delos J B 1993 *Phys. Rev. A* **47** 3036
- [5] Liu Z Y *et al* 1996 *Phys. Rev. A* **54** 4078
Liu Z Y *et al* 1997 *Phys. Rev. A* **55** 4605
Liu Z Y *et al* 1997 *Phys. Rev. A* **56** 2670
- [6] Chen B Z 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 674 [in Chinese] 陈宝振 2000 物理学报 **49** 674]
- [7] Berry M V and Mount K E 1972 *Rep. Prog. Phys.* **35** 315
- [8] Connor J N L 1976 *Mol. Phys.* **31** 33
- [9] Peters A D, Jaffe C and Delos J B 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 2825
- [10] Beims M W and Alber G 1993 *Phys. Rev. A* **48** 3123
- [11] Courtney M, Jiao H, Spellmeyer N, Kleppner D, Gao J and Delos J B 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 1538
- [12] Gao J and Delos J B 1997 *Phys. Rev. A* **56** 356
- [13] Shaw J A and Robicheaux F 1998 *Phys. Rev. A* **58** 3561
- [14] Dando P A, Monteiro T S, Delande D and Taylor K T 1996 *Phys. Rev. A* **54** 127
- [15] Delande D and Buchleitner A 1994 *Classical and Quantum Chaos in Atomic Systems* (Paris : France) p91
- [16] Jia Y W *et al* 2002 *Acta Phys. Sin.* **51** 201 [in Chinese] 贾艳伟等 2002 物理学报 **51** 201]
- [17] Shaw J A and Robicheaux F 1998 *Phys. Rev. A* **58** 1910
- [18] Song X H, Zhang Q J, Xue Y L, Zhao K, Li Y and Lin S L 2002 *Chin. Phys.* **11** 656
- [19] Houpper B, Main J and Wunner G 1996 *Phys. Rev. A* **53** 744

A study of the bifurcation effect of closed orbits on the recurrence spectra of Li Rydberg atoms in an external electric field^{*}

Song Xiao-Hong Lin Sheng-Lu

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

(Received 26 July 2002 ; revised manuscript received 26 November 2002)

Abstract

The semiclassical closed-orbit theory begins to fail when the returning wave becomes infinite near the core , and this is the typical situation when bifurcations of closed-orbits occur. We describe the phenomena of bifurcations and calculate the recurrence spectra of Li Rydberg atoms in the vicinity of the bifurcation energy using the uniform approximation method. The spectra with a constant energy $\epsilon = -2.94$, and a constant scaled electric field $135.86 < F^{-1/4} < 160.11$ are recorded and the effect of the core-scattering is taken into account. The recurrence spectra are compared with those obtained by the primary extended closed-orbit theory and those of hydrogen atoms. The results display the important contributions of bifurcations and core-scattering to the recurrence spectra of Li Rydberg atoms.

Keywords : bifurcation , uniform approximation , semiclassical closed-orbit theory , recurrence spectra

PACC : 0547 , 0365S , 3290

^{*} Project supported by the Natural Science Foundation of Shandong Province , China (Grant No. Y98A06009).