

Ba Rydberg 原子 $M = 0$ 电场常数标度能谱*

倪 霓 曹俊文 王 川 詹明生

(中国科学院武汉物理与数学研究所波谱与原子分子物理国家重点实验室, 武汉 430071)

(2003 年 5 月 13 日收到, 2003 年 8 月 5 日收到修改稿)

选择激光偏振方向, 同步改变激发激光的波长(即原子的激发能量 E) 和外加电场强度 F , 使标度能 $\epsilon = E/\sqrt{F}$ 保持为常数, 得到了原子束中 Ba Rydberg 原子在标度能 $\epsilon = -3.00$ 时 $M = 0$ 激发的常数标度能谱. 由实验标度能谱的 Fourier 变换得到的回归谱与氢的均匀化近似后的闭合轨道理论计算相比较, 发现实验回归谱的峰值位置与理论计算符合较好, 而峰值强度则与理论相差较大, 分析认为是由于受到核散射和双电子微扰态的影响所致.

关键词: 标度能谱, 闭合轨道理论

PACC: 3260

1. 引 言

经典与量子的对应一直是物理学的前沿课题. 20 世纪 80 年代, Du 和 Delos 等在经典周期轨道理论基础上发展出了闭合轨道理论^[1-4]. 它将量子谱与经典电子轨道结合起来, 认为每个在核处闭合的经典轨道都对振子能量密度贡献出与能量有关的一个正弦振荡项. 使用该理论解释外场中原子吸收谱的演化, 不仅简化了计算, 而且建立了外场中原子激发跃迁的半经典图像, 加深了人们对原子外场光谱和外场效应的理解.

外场中 H 原子的经典哈密顿量经过一定的标度变换后, 不再单独地依赖电场和磁场, 体系的动力学演化将由惟一的参量——标度能 ϵ 决定. 在纯均匀电场中 $\epsilon = E/\sqrt{F}$, 其中 E 是原子的激发能(电离阈值处为零点), F 是外加电场强度. 因此当固定标度能为常数时, 外场中 H 原子的正则方程就惟一确定了. 实验中, 同步改变激光扫描波长和外加电场强度, 保持标度能不变, 进而得到可与理论直接比较的原子外场吸收谱的方法就叫标度能谱法.

目前, 国际上已有几个实验组利用标度能谱技术对原子外场谱开展了研究. Eichmann 等^[5]使用脉冲激光两步激发 Na 原子, 得到在标度能为 -2.5 处的复杂末态 ($|M| = 0, 1, 2$) 的 Na 原子标度能谱, 其中 $M_l = 0$ 的贡献较小. 理论与实验符合较好.

Courtney 等^[6,7]以外电场中 Li 原子为研究对象, 得到了一组标度能在 -0.37 到 -2.1 之间的 $M_l = 0$ 标度能谱, 研究了分岔前后回归峰的强度变化, 理论计算与实验一致. Kips 等^[8]选择了 He 进行实验研究, 将考虑了原子实效应的闭合轨道的分岔理论计算与 $M_l = 0$ 的实验回归谱进行了比较, 理论实验取得了很好的一致. 但是, 到目前为止无论理论上还是实验上, 对碱土金属原子来说, 原子中的电子相关及大的原子实效应对 Rydberg 原子的动力学行为的影响都有待探讨. Kuik 等^[9]对 Ba 进行了实验研究, 但是他们选择的是多步激发, 导致末态较复杂, 且能量区域在单电子电离阈值以上, 不利于与理论做对比. Kips 等^[10]继续对 Ba 的研究表明理论计算与实验有很大不同, Ba 有明显的原子核散射. 我们研究了 Sr 原子在电离阈值附近的常数电场标度能谱^[11-13], 发现原子核散射导致的轨道组合和强度分布变化在 Sr 中也同样存在. 以上这些结果及解释都建立在单电子的 H 原子闭合轨道理论基础上.

Ba 原子与 Sr 原子虽然都为碱土金属原子, 有较大的原子实, 外层有两个电子, 但两者也有两点明显的不同之处: 一是 Ba 原子的量子数亏损接近整数^[14], 而 Sr 原子较偏离整数^[15]; 二是 Ba 原子在第一电离阈值以下存在双电子激发态, 这些态对单电子 Rydberg 系列形成扰动. 基于这些考虑, 我们最近研究了 Ba 原子在单电子电离阈值以下能量附近的电场标度能谱, 以通过与 Sr 的类似工作的比较, 研

* 国家自然科学基金(批准号: 10074072)资助的课题.

究双电子激发的微扰态对单电子运动动力学的影响.

本文从理论与实验两方面研究 Ba 原子基态单光子激发的标度能谱. 实验获得了 Ba 原子在标度能为 -3.00 时的常数标度能谱, 同时将闭合轨道的分岔理论计算与得到的实验谱进行了比较.

2. 半经典闭合轨道理论

按照 H 原子的单电子闭合轨道理论^[1-4, 8]我们将原子实外部空间划分为两个区域: 第一个是近核区域 ($r < r_b$, $r_b \sim 50a_0$, a_0 是 Bohr 半径), 在这个区域需要用量子力学来进行描述; 第二个是远核区域 ($r > r_b$, $r_b \sim 50a_0$), 在这个区域, 原子的行为可以做半经典的描述. 在 H 的闭合轨道理论的物理图像中, 外场中的原子吸收一个光子后激发出一个电子, 该电子以近零能库仑波的形式离开近核区, 出射角为 θ_i . 在远核区域处, 电子沿着经典轨道运动, 它的动力学行为由该量子系统的经典对应的哈密顿方程决定. 最后电子在库仑场和外电场的共同作用下回到近核区, 并被库仑场散射, 库仑散射波可用量子力学的方法写出. 回来的波和向外出射的波在核处相干涉产生振荡.

在实验吸收谱中我们测得的是平均振子能密度, 它包含了电子所有闭合轨道的贡献, 即

$$D_f(E, F) = D_{f_0}(E, F) + \sum_k \sum_n D_{kn} \sin(n\tilde{S}_k F^{-1/4} - \phi_{kn}) \quad (1)$$

其中 $D_{f_0}(E)$ 表示振子强度分布中的慢变背景光吸收, 对应电场为零时的振子强度, k 标记某条闭合轨道, n 是该轨道重现次数, \tilde{S}_k 是每个闭合轨道首次回归的标度作用量, D_{kn} 表示第 k 个轨道的第 n 次重现对吸收谱贡献的振荡的振幅大小, 并且

$$D_{kn} = \begin{cases} \frac{2^{9/4} \pi^{3/2} |\gamma(\theta_i^k) \dot{\gamma}(\theta_i^k)| F^{1/8} \sin(\theta_i^k/2)}{\sqrt{J_{12}}}, & \theta_i^k \neq 0, \pi, \\ \frac{2^{3/4} \pi |\gamma(\theta_i^k) \dot{\gamma}(\theta_i^k)| F^{1/4}}{J_{12}}, & \theta_i^k = 0, \pi, \end{cases} \quad (2)$$

其中 $\gamma(\theta_i^k)$ 对应电子出射波的角分布, J_{12} 是与闭合轨道的稳定性有关的量, 对上行轨道 ($\theta_i^k = 0$) 和下行轨道 ($\theta_i^k = \pi$) 而言,

$$J_{12} = \frac{|\sin(\sqrt{2|\epsilon|} n\tau)|}{\sqrt{2|\epsilon|}}, \quad (3)$$

τ 是上行(下行)轨道的首次往返时间.

对于 $|M| = 1$ 光激发的情形, 由于中心势垒的存在, 只需考虑非平行轨道对吸收谱的贡献. 对 $M = 0$ 的情形, 由于平行轨道的存在, 问题变得复杂.

可以看到当 n 为 $\frac{\pi}{\sqrt{2\epsilon\tau}}$ 的整数倍时, 原始公式计算到

的 D_{kn} 存在奇点, 即平行轨道的第 n 次重现的振幅发散, 分岔就从这里产生. 对平行轨道及其分岔而言, $1/J_{12}$ 的值越大, 该轨道就越接近分岔.

在零场电离阈以上 ($\epsilon > 0$), 仅仅存在平行于电场的平行闭和轨道. 当 $\epsilon < 0$ 时, 上行轨道与其相邻轨道在原子核附近形成尖点, 随着标度能的减小, 尖点沿 z 轴运动, 在上行轨道及其重现的分岔能量处, 尖点顶端到达原子核, 于是新的闭合轨道产生. 通常采用有理数 m/n 来标识其形状, 在半抛物坐标系中 (u, v), 一个 m/n 的轨道表明该轨道 m 次回到 $u = 0$, n 次回到 $v = 0$. m/n 轨道产生于上行轨道的第 n 次重现的分岔处, 在该分岔标度能处, m/n 轨道与上行轨道的第 n 次重现重合, 当标度能 ϵ 进一步减小, 新轨道的出射方向与 z 轴的夹角逐渐增大, 在低于鞍点 ($\epsilon = -2$) 的某个标度能处, 出射角增大到 π , 这时它将与下行轨道的第 m 次重现重合并被其破坏掉.

从上面的描述中可以看到, 在分岔附近, 新轨道与平行轨道的重现会在原子核处聚焦, 正是这种聚焦效应导致了原始公式在分岔处的发散. Gao 和 Delos 注意到这与几何光学中的平面波聚焦现象类似, 于是采用了与几何光学类似的处理方法, 在分岔处, 将电子波的散射效应考虑进来, 对闭合轨道理论的原始公式进行了均匀化近似处理.

均匀化近似下, 分岔附近的振子能密度应包含平行轨道和接近于该分岔的新轨道的共同贡献, 于是

$$D_f(E, F) = D_{f_0}(E, F) + 2^{-1/4} \pi \times \text{Im}[\mathcal{K}(\lambda, a) e^{i(\tilde{S}_0 F^{-1/4} - \mu_0 \pi/2 - \pi)}]. \quad (4)$$

按照 Shaw 等人的讨论, 当平行轨道的标度作用量与新轨道标度作用量 \tilde{S}_{new} 之间的差异满足不等式 $|\tilde{S}_{\text{new}} - \tilde{S}_0| \leq F^{1/4}$ 时, 应当采用均匀化近似后的公式.

3. 实 验

Ba 原子电场标度能光谱实验是在一个原子-激

光交叉束真空装置中进行的. 实验装置的详细描述见文献 [11—13].

实验中, Ba 原子由原子炉(直热式, 加热电流为 130A 左右)产生. 真空紫外激光由染料激光器(型号 HD500 染料为 Coumarin 480)输出经晶体 BBO 倍频后产生. 经过聚焦的激光在两块 Stark 板中心处与基态 Ba 原子发生相互作用. 调整入射光的偏振方向使之平行于电场 F 方向, 根据选择定则, Ba 原子从基态 1S_0 态吸收单个光子激发至磁量子数为 $M = 0$ 的末态. 高激发态 Ba 原子进一步飞行到下游在探测区域发生场电离, 离子信号由电子通道倍增器 CEM 接收, 再经前置放大器后送入 BOXCAR 进行采样、平均以及数字滤波等信号与数据处理.

实验过程中, 由于需要大能量范围扫描, 为了保证标度能值 $\epsilon = E/\sqrt{F}$ 为常数, 需要对激光器波长和电场强度作精确的控制. 在本实验中, 一方面, 将 Ba 的零场实验谱与已知精确谱进行比较, 得到激光实际输出的波长与标准波长的拟合参数, 再对 HD500 的调谐系统进行控制, 以保证激光器扫描时保持较好的线性, 同时利用高精度的 WA4500 波长计对 HD500 实际输出的激光波长进行监测, 并对激光的跳模现象进行观察, 以便对实验数据出现的异常情况做出判断. 另一方面, 电场强度是经过 A/D 转换, 控制输出电压, 经 PZT 放大后得到. 根据直流放大器的放大系数, 对放大后的电压与计算机输出的信号进行回归拟合, 以保证计算机输出到极板上电压与当前要求的扫描电压是一一对应关系. 这样, 计算机就可以精确地对染料激光器扫描波长和外加电场强度的变化进行同步控制.

4. 结果与讨论

图 1 给出了标度能为 -3.00 时的 Ba 原子 $M = 0$ 实验标度能谱. 染料激光输出波长在 476.5772—478.2790nm 之间扫描, 经 BBO 倍频后可将 Ba 原子从 $6s6s^1S_0$ 基态激发到主量子数 $n = 27—45$ 范围的高激发 Rydberg 态 $6snp^1P_1$. 相应电场强度 F 的扫描范围是 56.88—561.70V/cm ($F^{-1/4}$ 的变化范围为 54.88—97.5), $F^{-1/4}$ 的扫描步长为 0.02. BOXCAR 的门宽档设为 300ns, 门延迟为 100 μ s, 为了提高信噪比, 每数据点平均采样累计次数为 300 次.

从图 1 可以看出, 虽然主量子数仍能较好分辨, 但高激发态能级的角量子数发生了混合, 各子能

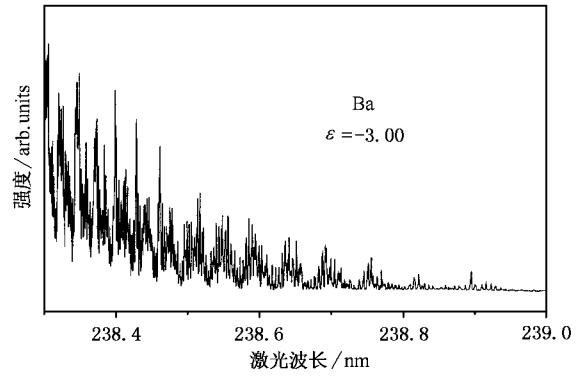


图 1 标度能为 -3.00 时的实验常数标度能谱

级已很难清楚地分辨了. 而且, 吸收谱的强度受到调制, 强度随主量子数递减而递减. 这种递减的包络与 Ba 原子的零场谱结构类似.

对实验谱以 $F^{-1/4}$ 为变量进行 Fourier 变换, 得到 Ba 原子标度能为 -3.00 的电子回归谱(如图 2(a)所示). 对 H 原子采用均匀化近似后的闭合轨道理论计算的结果如图 2(b)所示. 在理论计算中, 忽略了 Ba 原子的原子实效应. 考虑到实验中激光器的分辨率, 由吸收谱的 Fourier 变换得到的回归谱只能分辨较小作用量的峰, 而这时原子实对回归谱峰的位置的影响较小, 采用这种简化计算是可行的.

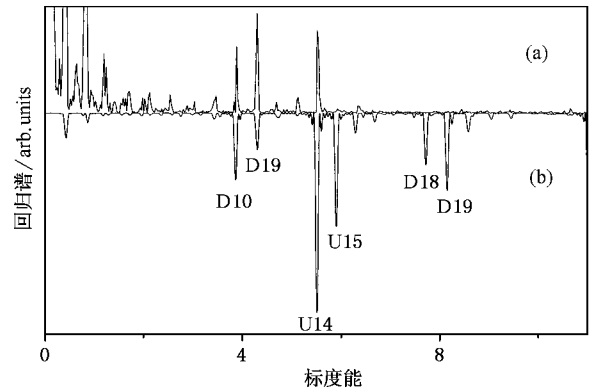


图 2 标度能为 -3.00 时回归谱的实验与理论比较 (a) 实验回归谱 (b) 闭合轨道理论计算

在图 2 中, 低标度作用量的峰结构对应于实验过程中的慢变化振荡分量, 如光强、原子束变化等形成的背景噪声. 这里主要考虑高标度作用量的峰结构. 可以看到, 实验与理论峰的位置的偏差最小为零, 最大为 0.02. 考虑到回归谱的线宽, 这样的偏差有可能是由实验控制精度引起的. 但是峰的强度和理论计算并不是符合得很好. 即使在均匀化近似之

后 ,U14 ,U15 ,D18 ,D19 的强度与实验仍有一定不同. 这有可能是我们忽略了原子核散射效应所导致的. 我们的实验并未看到核散射所导致的组合峰, 是因为组合峰对应的标度作用量等于某两个峰的标度作用量之和^[11-13,16-18], 因此它所对应的是高标度作用量的峰. 而在本实验中, 标度作用量大于 5.7 的峰似乎突然消失, 辨认不出峰的结构. 在前人的工作中, 对碱金属原子, 实验与不考虑核效应的简化计算之间的峰值强度并没有太大不同. 即使是考虑了核效应的理论计算与未考虑核效应的理论计算相比也仅属强度的微调. 在我们以前 Sr 的实验中^[11-13]就很清晰地分辨出了标度作用量小于 12 的所有的峰. 而在 Ba 的实验中, 峰强衰减到在标度作用量大于 5.7

时甚至无法辨认出任何一个理论中所预测的峰, 显然用核散射效应的存在来解释是不够的. 事实上, 在 Ba 的零场光谱里^[19-22], $6snp^1P_0$ 系列中有很多的微扰系, 如 $5d8p^1P_1$ 就正好在 $6s$ 的电离限处, 并与高 Rydberg 态的 $6snp^1P_0$ 系列相互作用. 图 1 中的轮廓与 Ba 的零场光谱相似. 表面上从强度上看就表现出了微扰态对常数标度能谱的影响. 但通过数据分析判断, 大作用量处回归谱的消失不是强度的分布引起的. H 原子单电子闭合轨道理论与 Ba 实验谱的明显不一致预示着现存的理论的局限性, 也可能预示着电子相关对单电子运动的强烈的影响. 这方面的深入研究正在进行之中.

- [1] Du M L and Delos J B 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 1731
 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] Gao J ,Delos J B and Baruch M 1992 *Phys. Rev. A* **46** 1449
 Gao J and Delos J B 1992 *Phys. Rev. A* **46** 1455
 Gao J and Delos J B 1994 *Phys. Rev. A* **49** 869
- [3] Mao J M ,Shaw J and Delos J B 1992 *J. Stat. Phys.* **68** 51
- [4] Gao J and Delos J B 1997 *Phys. Rev. A* **56** 356
- [5] Eichmann U ,Richter K ,Wintger D and Sandner W 1988 *Phys. Rev. Lett.* **61** 2438
- [6] Courtney M ,Jiao H ,Spellmeyer N and Kleppner D 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 1538
- [7] Courtney M ,Jiao H ,Spellmeyer N and Kleppner D 1994 *Phys. Rev. Lett.* **73** 1340
- [8] Kips A ,Vassen W ,Hogervorst W 1999 *Phys. Rev. A* **59** 2948
- [9] Kuik G J ,Kips A ,Vassen W and Hogervorst W 1996 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **29** 2159
- [10] Kips A ,Vassen W and Hogervorst W 2000 *J. Phys. B :At. Mol. Opt. Phys.* **33** 109
- [11] Zhan M S ,Liu X J ,Cao J W and Connerade J P 2001 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **34** 1175
- [12] Liu X J ,Cao J W ,Zhan M S and Connerade J P 2002 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **35** 2069
- [13] Liu X J ,Cao J W ,Wang J ,Zhao H T and Zhan M S 2000 *Acta Phys. Sin.* **49** 1447 (in Chinese) 柳晓军、曹俊文、王 瑾、赵宏太和詹明生 2000 *物理学报* **49** 144]
- [14] Rao J G and Taylor K T 1997 *J. Phys. B :At. Mol. Opt. Phys.* **30** 3627
- [15] Connerade J P ,Zhan M S ,Rao J G and Taylor K T 1999 *J. Phys. B :At. Mol. Opt. Phys.* **32** 2351
- [16] Dando P A ,Monteiro T S ,Delande D and Taylor K T 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 1099
- [17] Hüpper B ,Main J and Wünnen G 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 2650
- [18] Courtney M ,Spellmeyer N ,Jiao H and Kleppner D 1995 *Phys. Rev. A* **51** 3604
- [19] Gardon W R and Colding K 1966 *Proc. Phys. Soc.* **75** 87
- [20] Connerade J P ,Ma H ,Shen N and Stavrakas T A 1988 *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **21** L241
- [21] Connerade J P and Lane A M 1988 *Rep. Prog. Phys.* **51** 1439
- [22] Armstrong J A and Wynne J J 1979 *J. Opt. Soc. Am.* **69** 211

Scaled-energy spectroscopy of barium $M = 0$ Rydberg atoms in an electric field^{*}

Ni Ni Cao Jun-Wen Wang Chuang Zhan Ming-Sheng

(*State Key Laboratory of Magnetic Resonance and Atomic and Molecular Physics ,Wuhan Institute of Physics and Mathematics ,Chinese Academy of Sciences ,Wuhan 430071 ,China*)

(Received 13 May 2003 ; revised manuscript received 5 August 2003)

Abstract

Choosing the polarization of the laser ,changing the wavelength of the excitation laser and the strength of an external electric field synchronously to keep scaled-energy constant ,we have measured $M = 0$ constant scaled-energy absorption spectra of barium Rydberg atoms at scaled-energy $\epsilon = - 3.00$. Fourier transformed recurrence spectra were compared with the closed-orbit calculation for hydrogen atom in the uniform approximation. The positions of experimental recurrence peaks fit well the theoretical ones ,but the peak strengths differ remarkably ,especially in the region of scaled-action larger than 5. This may indicate a large effect of the barium core and the electron correlation on the electron dynamics.

Keywords : scaled-energy spectroscopy , closed-orbit theory

PACC : 3260

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China(Grant No. 10074072).