

电场中里德伯原子动力学性质的半经典理论研究^{*}

高 嵩[†] 徐学友 周 慧 张延惠 林圣路

(山东师范大学物理与电子科学学院, 济南 250014)

(2008 年 5 月 22 日收到, 2008 年 8 月 24 日收到修改稿)

利用闭合轨道理论和 Poincaré 截面两种方法研究了鞍点附近电场中高里德伯态 Li 原子的动力学性质. 由于原子实的作用, 体系是混沌的, 闭合轨道和周期轨道在混沌体系中并存, 但二者在 Poincaré 截面上的反映是不同的. 讨论了两种半经典理论在研究混沌体系时的联系, 得到了仅靠闭合轨道理论得不到的信息.

关键词: Poincaré 截面, 回归谱, Stark 效应

PACC: 0545, 3260S, 0365S

1. 引 言

静电磁场中里德伯碱金属原子对于研究量子混沌具有重要意义. 与 H 原子相比较而言, 由于原子实的存在, 使得外场中碱金属原子构成的体系本质上是混沌的, 因此这成为研究量子混沌的典型问题. 人们对于此类问题已经从理论和实验上进行了大量的研究, 如 Li 原子, Ba 原子, He 原子等在电场或磁场中的光吸收性质^[1-4], 自电离现象等等^[5,6]. 闭合轨道理论和经典相空间的 Poincaré 截面方法是解决此类问题有效而常用的两种方法^[7-10]. 二者之间有怎样的联系? 闭合轨道理论中通过 Fourier 变换得到的闭合轨道在 Poincaré 截面上是如何反映出来? 或者 Poincaré 截面中的结构对于闭合轨道有怎样的意义? 这些问题还没有人进行研究和讨论. 电场中的 Li 原子, 虽然结构上相对简单, 但依然具有混沌的本质, 尤其在鞍点附近, 更是显示出丰富的动力学性质, 周期轨道, 闭合轨道, 开轨道等在这里都有体现. 因此本文以电场中的 Li 原子为研究对象, 采用上述两种方法研究其在外加强电场中的动力学性质, 计算了在不同标度能量下的 Poincaré 截面和光吸收的回归谱, 对二者的对应关系做了分析, 研究结果有助于人们更好地理解“量子混沌”的含义.

2. 原理与方法

2.1. Hamiltonian 和 Poincaré 映射

原子处于外加静电场中, 电场 F 沿 z 轴正方向. 采用线性极化的激光把 Li 原子激发到高里德伯态. 激发电子的哈密顿量为^[11]

$$H = \frac{p_\rho^2 + p_z^2}{2} + Fz + V, \quad (1)$$

其中, F 为电场强度, V 为势函数.

参照近年来的研究结果, 考虑到激发电子的贯穿以及内层电子的极化效应, 我们引进模型势

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

其中, $Z=3$ 为 Li 原子的核电荷数, a 是决定离子实范围的长度参数, 取为 $1/2 \cdot 13^{[12]}$. 引入标度变量 $w = F^{-1/2}$ 并进行标度变换, $r = w \tilde{r}$, $p = w^{-1/2} \tilde{p}$, 标度以后的哈密顿量为

$$\tilde{H} = Hw = \frac{1}{2}(\tilde{p}_z^2 + \tilde{p}_\rho^2) \\ + \tilde{z} - \frac{1}{\tilde{r}} - \frac{Z-1}{\tilde{r}} e^{-w\tilde{r}/a}. \quad (3)$$

系统性质就由对能量 E 主要与原子主量子数 n 有

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 10774093, 10374061, 10504017)资助的课题.

[†] 通讯联系人. E-mail: gaosong29@yahoo.com.cn

关和电场强度 F 的依赖,变为了仅对标度能量 ϵ 的依赖,从而减少了一个参数.为消除库仑势在坐标原点处的奇异性,进一步作如下的半抛物坐标变换 $u = (\tilde{r} + \tilde{z})^{1/2}$, $v = (\tilde{r} - \tilde{z})^{1/2}$, 此时的哈密顿量进一步写做

$$h = \frac{1}{2}(p_u^2 + p_v^2) + \frac{1}{2}(q_u^4 - q_v^4) - \epsilon(q_u^2 + q_v^2) - \chi(Z-1)\exp\left(-\frac{1}{2}(q_u^2 + q_v^2)w/2.13\right). \quad (4)$$

在远离核的地方, Li 原子的动力学行为与 H 原子相近,上式中的第四项可以略去,利用极值条件可以算得电场中鞍点能量为 $E_c = -2\sqrt{F}$, 标度后为 $\epsilon_c = -2$. 当用激光把价电子从基态激发到激发态,各方向的电子波包将在电场力和库仑力的作用下沿经典轨迹向外传播.其中沿 v 轴的为下降轨道,即出射方向与电场力方向一致,沿 u 轴的为上升轨道,出射方向与电场力方向相反.当能量小于 ϵ_c 时,所有轨道都被束缚在有限空间内,所有轨道为闭合的或周期,准周期的;而当能量高于鞍点能量,下降轨道将不会再回到核附近,发生自电离现象,有开轨道产生.所以在鞍点附近,体系中有三种轨道,即闭合轨道,周期轨道和开轨道.

在相空间中进一步做出它的 Poincaré 截面.电场中的原子是个二维的哈密顿系统,其相空间是四维的.当能量一定时,运动被限制在一个三维的能量壳层中.本文利用平面 $u = 0$ 截取相空间,在满足 $p_u > 0$ 的情况下,记录每次轨道经过此平面时相应的 v 和 p_v 的值,这样就可以得到一个二维的 Poincaré 截面 Σ . 设 γ 是相空间中的某个流 Ψ , 它在向量场中满足的函数关系为 f, x 是截面上的任意一点,只要满足 $f(x) \cdot n(x) \neq 0$ 时,就可以得到交点 $p(n(x))$ 是截面在 x 处的单位法线). $U \subseteq \Sigma$ 为 p 的临域,于是 Poincaré 映射 $P: U \rightarrow \Sigma$ 对一点 $q \in U$ 的定义为 $P(q) = \Psi(q), \tau = \tau(p)$ 是轨道基于 q 点首次返回到 Σ 上所需的时间.如果轨道是周期性的,经过一个周期后它将回到原来的状态,因此它只能与 Poincaré 截面交于一些固定点;若轨道是准周期的,在截面上得到的将是一条不变的曲线,而若轨道是混沌的,在截面上只会得到毫无规律的分散的点.因此利用 Poincaré 映射可以研究体系的动力学特征.

2.2. 包括核散射的闭合轨道理论

由于 Li 原子具有原子实,所以当闭合轨道回到

核附近时将被它向各个方向散射.于是在相应的回归谱中出现许多在 H 原子中没有的组合回归峰.为说明问题的方便,我们先回顾一下包括核散射的闭合轨道理论.

半经典闭合轨道理论中,平均振子强度密度可写为

$$f(E) = -2\pi^{-1}(E - E_i)\text{Im} \sum_{k,m} R_k^n, \quad (5)$$

式中 R_k^n 称作“回归积分”.以相同情况下 H 原子的轨道作为基本轨道.在碱金属原子的体系中,第 k 条基本闭合轨道经过实散射后将会沿着其他各个基本轨道向外传播,形成出射波.这些出射波在外场的作用下又会回到核的附近,产生新的回归.这些组合回归由 H 原子轨道标记 $(k_2 n_2; k_1 n_1)$, n_1 和 n_2 分别为第 k_1 和 k_2 条轨道的重复次数.多重散射的“回归积分”可写为

$$R_k^n = R_{k+1}^{n+1} \left[\prod_{j=0}^J (F_{k+1, k_j}^{n_j} R_{k_j}^{n_j}) \right], \quad (6)$$

J 为散射的总次数,散射项可写为^[13]

$$F_{k, k}^{n, k} = \frac{i}{\tilde{y}(\theta_i)\gamma(\theta_f)} \frac{1}{4} \sum_{l \geq |m_l|} (e^{2i\delta_l - 1}) \times Y_{lm}^*(\theta_f, \rho) Y_{lm}(\theta_i, \rho). \quad (7)$$

如果 $J = 0$, 即为不包含实散射的回归积分,结果为

$$R_k^n = D\psi_i | \psi_{\text{return}}^{k, n} = \frac{4\pi}{\sqrt{2}} \gamma(\theta) N_j, \quad (8)$$

其中 $\gamma(\theta)$ 为角函数^[8]. 系数 N_j 为

$$N_j = -4\pi \chi(\theta) \frac{F^{1/4}}{\sqrt{2} J_{12}} \times e^{(2\pi S_j F^{-1/4} - \mu_j \pi/2 - \pi/2)} (\varphi = 0, \varphi = \pi),$$

$$N_j = -2^{9/4} \pi^{3/2} \chi(\theta) \frac{\text{sin}(\theta)}{\cos(\theta/2)} \frac{F^{1/8}}{(\sqrt{2} J_{12})^{1/2}} \times e^{(2\pi S_j F^{-1/4} - \mu_j \pi/2 - 3\pi/4)},$$

$$(\varphi \neq 0, \varphi \neq \pi), \quad (9)$$

J_{12} 决定轨道的稳定性,

$$J_{12} = \frac{\text{sin}(\sqrt{|2\epsilon|} n\tau)}{\sqrt{2\epsilon}}. \quad (10)$$

而若 $J \neq 0$ (6) 式可以进一步化简为

$$\sum_{n, k} R_k^n = \sum R_{k_1}^{n_1} + \sum \sum R_{k_2}^{n_2} F_{k_2, k_1}^{n_1} R_{k_1}^{n_1} + \sum \sum \sum R_{k_3}^{n_3} F_{k_3, k_2}^{n_2} R_{k_2}^{n_2} F_{k_2, k_1}^{n_1} R_{k_1}^{n_1} + \dots \quad (11)$$

所以在求 Li 原子的回归谱时,情况要比 H 原子

复杂得多. 除了有回到核附近的基本闭合轨道及其自身的重复, 还有从一条基本轨道被随机地散射到其他轨道的组合轨道. 散射的情况毫无规律可言, 这是 H 原子体系中不存在的.

3. 结果与讨论

3.1. 不同标度能量下 Li 原子的回归谱变化

利用激光将 Li 原子从 $2s$ 态激发到 n_p 态, 首先计算了在各个标度能量下的所有能够回到核附近的闭合轨道, 它们包括基本轨道, 基本轨道的重复和组

合轨道, 并计算出各个轨道所对应的振幅, 标度作用量. 利用闭合轨道理论做出了电场中 Li 原子在各个标度能量下的回归谱, 标度能分别是 $\epsilon = -2.7$, $\epsilon = -2.3$, $\epsilon = -2.0$, $\epsilon = -1.9$, $\epsilon = -1.5$ 和 $\epsilon = -1.3$. 结果如图 1 所示. 根据我们的计算结果可以发现随着标度能量的增加, 无论是回归谱的振幅还是回归谱中闭合轨道的条数都发生了极大的变化, 原因在于闭合轨道发生分岔和反分岔^[14]. 根据闭合轨道理论, 振幅反应轨道的稳定性, 振幅越大说明轨道的稳定性越低, 反之, 振幅越小, 轨道越稳定, 所以在轨道分岔处, 回归谱将显示出极大的峰值. 因此标度能的变化定然要影响到回归谱的形状. 对比图 1 中各图,

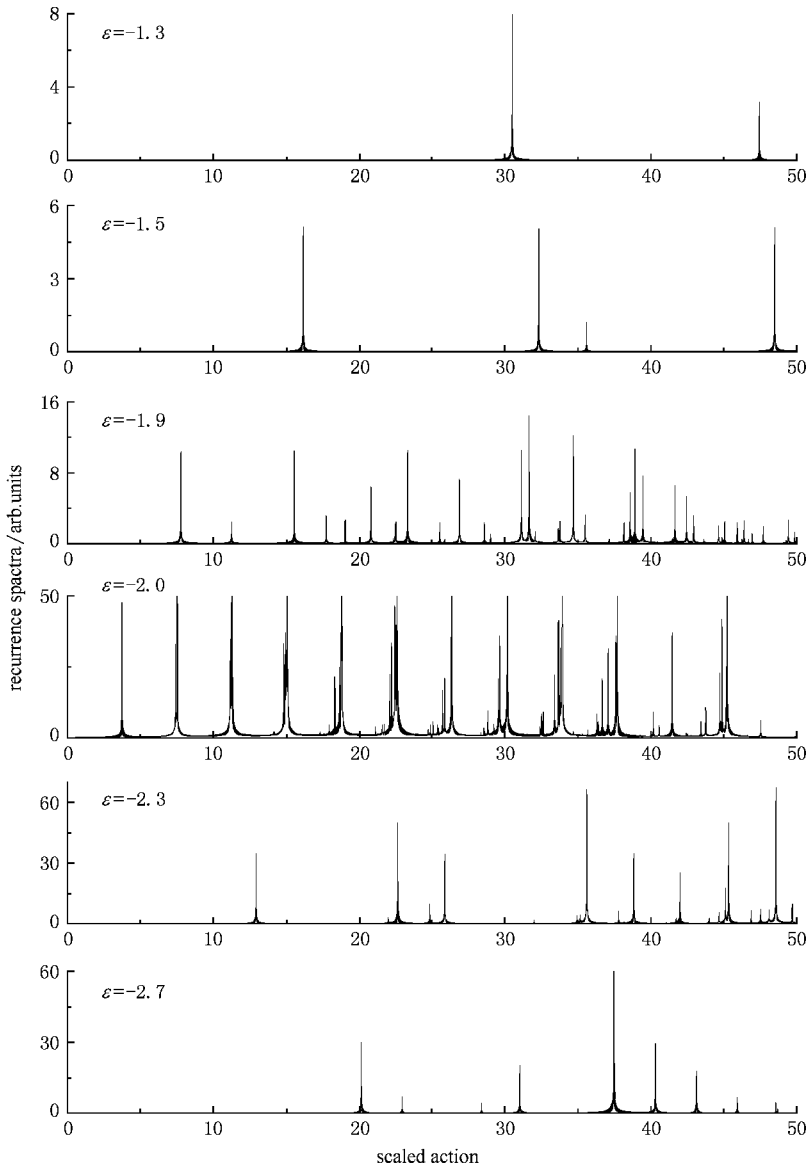


图 1 不同能量下的 Li 原子的回归谱(各图的标度能量在左上方标出). 回归谱在标度能量为 -2.0 时最为复杂

可以看出回归谱的变化趋势不是单调的,当标度能小于 -2.0 轨道数随着能量的增加而增大,而当能量大于 -2.0 时,轨道数又随着能量的增大而减小.大量的轨道将在鞍点 $\varepsilon = -2.0$ 附近产生发生分岔和反分岔,稳定性小,因此此处的回归谱最为复杂,各轨道的振幅较之其他能量下的轨道振幅也是大了很多.

那么,如果利用平面 $u = 0$ 截取相空间,得到一个二维的 Poincaré 截面,闭合轨道在截面上会有怎样的反映呢?

3.2. Poincaré 截面和三种轨道的 Poincaré 映射

图 2 是电场中 Li 原子在各个标度能下的

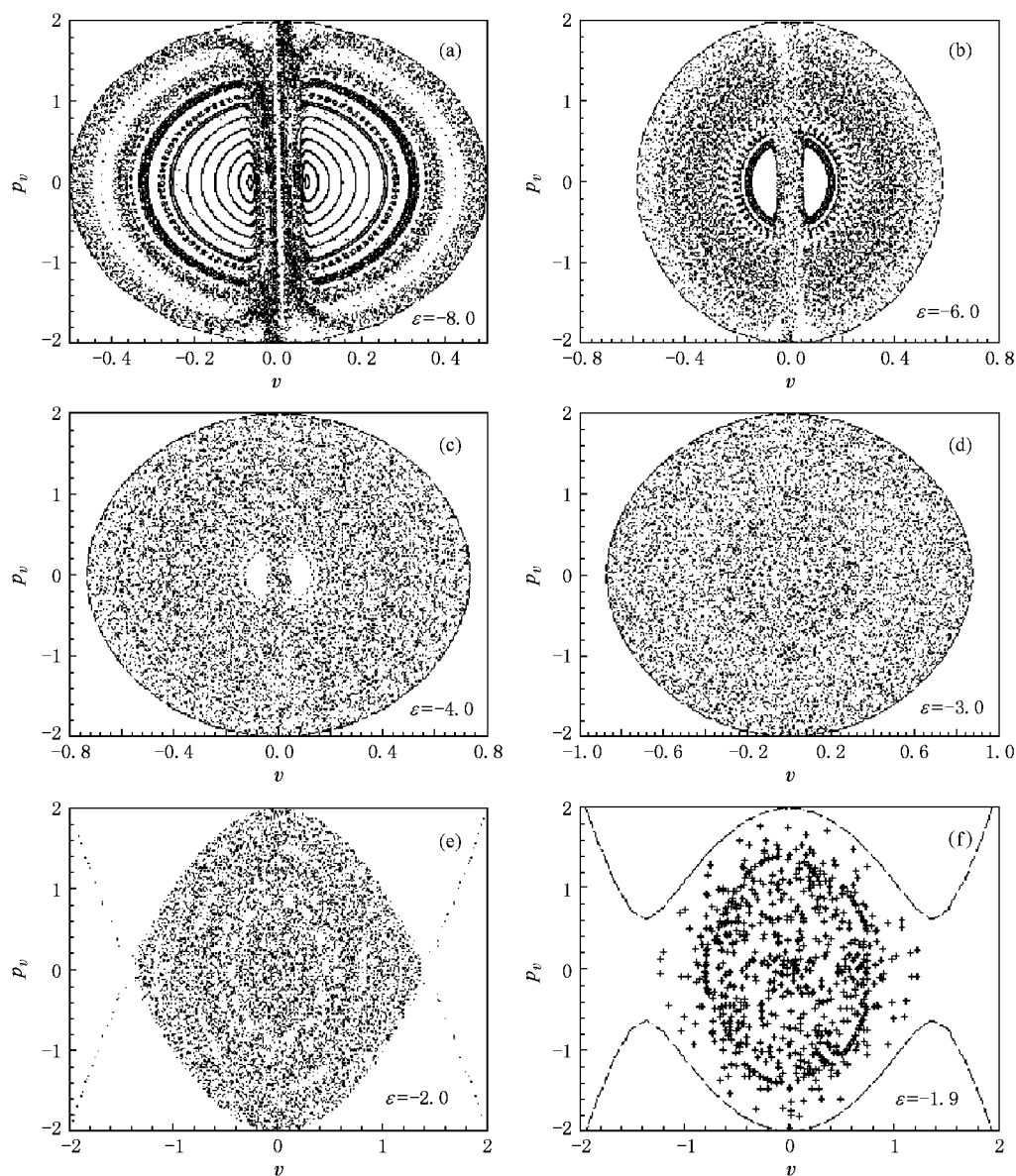


图 2 电场中 Li 原子的 Poincaré 截面.由(a)到(d)标度能量逐渐增大,分别为 $\varepsilon = -8.0$, $\varepsilon = -6.0$, $\varepsilon = -4.0$, $\varepsilon = -3.0$, $\varepsilon = -2.0$, $\varepsilon = -1.9$.(外面的虚线为相同标度能的情况下, H 原子的电子轨道经典允许区的边界)

Poincaré 截面.外面的虚线为相同标度能的情况下 H 原子的电子轨道经典允许区的边界.从图中可以清楚地看出,当处于较强电场中时,高激发态的 Li 原子与 H 原子的经典允许边界基本是一致的,说明在远离核的地方激发电子的运动情况基本相同.与电场中的 H 原子 Poincaré 截面的环状结构相比较^[15],由于 Li 原子存在着原子实,在近核处二者有很大差异. Li 原子在能量比较低的时候,如 $\varepsilon = -8.0$,在中心区域也存在着混沌,在此区域之外的大多数轨道是规则的.随着能量的增加,规则区域的边界开始模糊,到标度能为 $\varepsilon = -3.0$ 时,已经看不到规则的岛屿存在,系统进入了整体混沌阶段.随着能量的提

高 轨道将变得更为混乱,但是由于轨道之间的相互纠缠,使得截面并没有显得更为“混乱”.如图 2(e)所示,在 $\epsilon = -2.0$ 时,截面中又有结构出现,这却不能说其混沌的程度有所削弱.当能量进一步增加,如图 2(f)中 $\epsilon = -1.9$,此时下降轨道已不能闭合,有自电离现象发生,导致闭合轨道数目的减少,这就是为什么图 2(f)的轨道存在范围不再是封闭的原因.随着能量的增加,发生自电离的轨道越来越多,能回到核附近的闭合轨道也越来越少,回归谱将随着能量的增加变得简单,这也正是图 1 中 $\epsilon = -1.5$ 和 $\epsilon = -1.3$ 所反映的情况.

由于体系的混沌是由于原子实的散射作用,轨

道只有在核附近才会出现不稳定,因此所有的闭合轨道都是混沌的,在 Poincaré 截面中留下的是弥散的点.但是图 2 中的截面还给我们展示出另外一种轨道,即周期轨道.这种轨道不通过原子实区,随着时间的推移,它沿着自己的轨迹周而复始地运动,这是混沌体系中唯一的不变的因素,它在 Poincaré 截面上留下的是一系列有规律的分立的点.图 3 给出了三维相空间中三种轨道及其 Poincaré 映射.图 3(a)和(c)是回到核附近又被散射出去的轨道情况.再次被散射出去时,当能量小于鞍点能量,如图 3(a)所示 $\epsilon = -2.01$,回到核附近的闭合轨道被核散射到其他基本轨道上,这种轨道始终是闭合的,而对

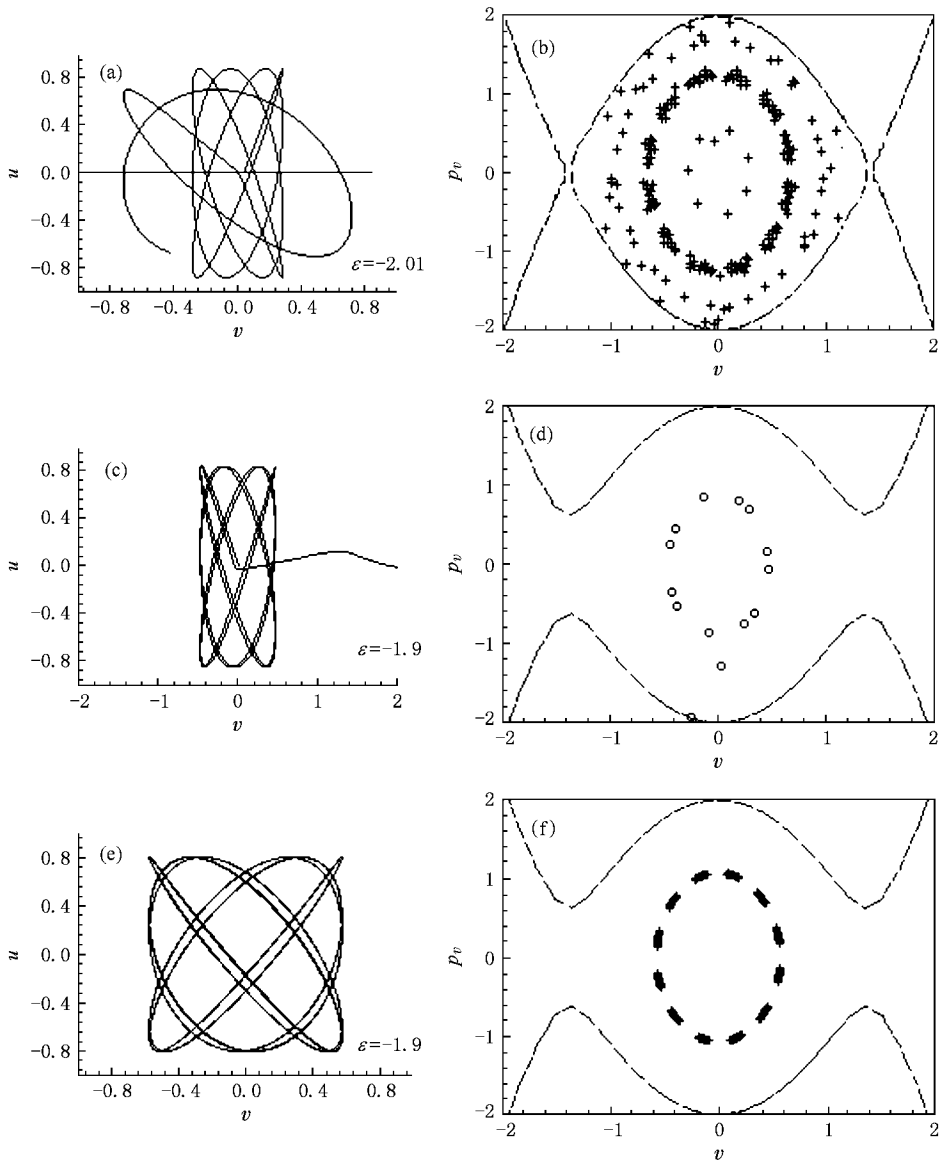


图 3 三种轨道及 Poincaré 映射 (a) 轨道是标度能量为 -2.01 时的一条轨道,每当到达核的附近就被随机地散射到其他轨道.(c)和(e)的标度能量为 -1.9 (c)为开轨道 (e)为周期轨道.(b)(d)(f)分别为相应的 Poincaré 映射

图 3(c) 来说, 由于能量在鞍点以上, 即使轨道在初始是可以回到核附近的, 但当它再次回来, 有可能被散射到电离轨道上, 即在散射后发生了电离, 这种轨道即为开轨道. 这两种轨道的 Poincaré 映射情况分别由图 3(b) 和 (d) 所示, 这两个图中点是弥散的, 为清楚起见 (d) 图中的点用圆圈表示. (b) 是 (a) 轨道随时间演化了 300 个时间单位的得到的 Poincaré 映射. 即使演化的时间再长, 它也只能被限制在核周围的区域里, 但是由于核散射的不确定性, 其运动轨迹将毫无规则地在各个基本轨道之间跳转, 以至随着时间的延长, 它在 Poincaré 截面上打出的点将布满整个经典允许区. (c) 是一条开始闭合然后又被散射的轨道, 它演化了 20.8 个时间单位的 Poincaré 映射如 (d) 图所示, 最后一个点已经打在了边缘上, 下一个时刻它将发生电离. (f) 轨道是周期轨道, 它始终不经过原点 (0, 0), 即核所在的位置, 正是因为如此它才不会被随机地散射出去, 因此它的运动是周期的.

由闭合轨道理论得到的回归谱反映的是能够回到核附近的轨道的情况, 对于图 3(a) 的轨道, 每次回到核附近, 就可以在回归谱上引起一个共振峰; 对于图 3(c) 而言, 仅当轨道未电离时在回归谱中才能有所反映, 而图 3(e) 图所示的周期轨道, 由于它不会回到核的附近, 所以不会被核随机地散射, 它是稳定的, 但是在回归谱上却得不到它的有关信息.

4. 结 论

我们用两种方法分析了电场中高里德伯态 Li 原子在鞍点附近的动力学的性质: 做出了不同标度能量下的电场中的 Poincaré 截面和回归谱. 由于存在着原子实, 所以体系是混沌的, 这两种方法都表现

出动力学性质敏感地依赖于初条件的特点. 当能量逐渐增加, 体系逐渐趋于混沌, 当标度能量达到 -3.0 左右时, Poincaré 截面上的映射点已布满整个空间 (如图 3(d) 所示). 但能量继续增加时, Poincaré 截面又出现了结构, 如图 3(e) 所示, 说明量子定域化的增强, 高激发态的电子的轨道越来越被束缚在一定的范围里, 但这并不意味着混沌程度的降低. 相反, 从相应的回归谱来看, 此时的轨道数最多, 而且稳定性最差. 而当能量大于 -2.0 时, 下降轨道已不能闭合, 有自电离现象发生, 导致回归闭合轨道数目的减少, 回归谱变得简单. 所选体系在鞍点, 标度能为 -2.0 附近, 无论是回归谱还是 Poincaré 截面都显示出对能量变化的敏感性, 究其原因, 是在这个能量区域中轨道的稳定性变得极差, 对闭合轨道而言, 能量变化极小的时候, 也会有大量的轨道发生分岔和反分岔, 在核附近被散射后情况会变得更加复杂, 所以各种形式的轨道: 闭合轨道, 周期轨道, 开轨道等等都会产生.

不论经典运动是规则的还是混沌的, 相空间中都会有周期轨道存在. 表征规则运动的岛型结构出现在椭圆形周期轨道周围. 在相空间的混沌区域, 密集地存在着大量的周期轨道^[16-18]. 因此周期轨道对于混沌体系来说具有极为重要的意义. 周期轨道和闭合轨道在我们所选取的体系中是两类不同的轨道, 它们在 Poincaré 截面上的反映是不同的, 周期轨道是一系列有规律的连续的或间断的点, 而闭合轨道要回到核附近, 将被核随机的散射, 造成了核周围的区域始终是混沌的, 并且它在 Poincaré 截面上打出来的是弥散的点. 所以利用闭合轨道理论做出来的回归谱反映的是体系混沌的一面, 而周期轨道对于混沌体系也有着非常重要的作用, 我们将在以后的工作中对这一方面展开深入的研究.

[1] Jensen R V, Flores-Rueda H, Wright J D, Keeler M L, Morgan T J 2000 *Phys. Rev. A* **62** 053410

[2] Kips A, Vassen W, Hogervorst W 2000 *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **33** 109

[3] Kips A, Vassen W, Hogervorst W 1999 *Phys. Rev. A* **59** 2948

[4] Courtney M, Jiao H, Spellmeyer N, Kleppner D, Gao J, Delos J B 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 1538

[5] Lankhuijzen D M, Noordam L D 1996 *Phys. Rev. Lett.* **76** 1784

[6] Mitchell K A, Handley J P, Tighe B, Flower A, Delos J B 2007 *Phys. Rev. A* **70** 043407

[7] Du M L, Delos J B 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 1731

[8] Du M L, Delos J B 1988 *Phys. Rev. A* **38** 1896
Du M L, Delos J B 1988 *Phys. Rev. A* **38** 1913

[9] Salas J P, Simonovic N S 2000 *J. Phys. B* **33** 291

[10] Ge M H, Zhang Y H, Wang D H, Du M L, Lin S L 2005 *Sci. China Ser G-Phys. Mech. Astron.* **48** 667

[11] Hüpper B, Main J, Wunner G 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 2650

[12] Delande D, Taylor K T, Halley M H, van der Veldt T, Vassen W, Hogervorst W 1994 *J. Phys. B* **27** 2771

[13] Robicheaux F, Shaw J 1997 *Phys. Rev. A* **56** 278

- Shaw J , Robicheaux F 1998 *Phys. Rev. A* **58** 3561 [宋晓红、林圣路 2003 物理学报 **52** 1611]
- [14] Bartsch T ,Main J ,Wunner G 2003 *J. Phys. B* **36** 1231 [17] Berry M V ,Keating J P ,Prado S D 1998 *J. Phys. A* **31** L245
- [15] Gao J ,Delos J B 1994 *Phys. Rev. A* **49** 869 [18] Lin S L ,Li H Y ,Wang D H *et al* 2004 *Sci. China Ser G-Phys. Mech. Astron* **47** 477
- [16] Song X H ,Lin S L 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1611 (in Chinese)

The dynamics of Rydberg atom in an electric field near the saddle point^{*}

Gao Song[†] Xu Xue-You Zhou Hui Zhang Yan-Hui Lin Sheng-Lu
(College of Physics and Electronics Shandong Normal University ,Jinan 250014 ,China)
(Received 22 May 2008 ; revised manuscript received 24 August 2008)

Abstract

The system composed of Rydberg Li atom in an electric field is chaotic because of the core scattering. The period orbits and the closed orbits both exist near the saddle point. The dynamics of this system is studied with the closed-orbit-theory and Poincaré SOS method. The relations of the two methods are discussed for the first time and new information is obtained which can't be retrieved from the recurrence spectra.

Keywords : Poincaré SOS , recurrence spectra , Stark effect

PACC : 0545 , 3260S , 0365S

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10774093 ,10374061 ,10504017).

[†] E-mail : gaosong29@yahoo.com.cn