

镓原子的 Stark 能级结构

董慧杰 王新宇 李昌勇 贾锁堂

Stark structure of atomic gallium

Dong Hui-Jie Wang Xin-Yu Li Chang-Yong Jia Suo-Tang

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 64, 093201 (2015) DOI: 10.7498/aps.64.093201

在线阅读 View online: <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.093201>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn/CN/Y2015/V64/I9>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

铯 47D 精细能级超冷里德堡原子自由演化的动力学研究

Spontaneous evolution of Cs 47D Rydberg atoms at different fine levels

物理学报.2015, 64(2): 023201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.64.023201>

高激发态原子间的范德瓦尔斯相互作用

Van der Waals interaction between high excited states

物理学报.2014, 63(13): 133201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.63.133201>

铯 Rydberg 原子 Stark 态的避免交叉

Observation of the avoided crossing of Cs Rydberg Stark states

物理学报.2013, 62(1): 013201 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.62.013201>

铯原子里德堡态 Stark 能量及电偶极矩的测量和理论计算

Measurement and theoretical calculation for Stark energy and electric dipole moment of Cs Rydberg state

物理学报.2012, 61(16): 163202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.61.163202>

超冷铯 Rydberg 原子寿命的测量

Measurement of lifetime of ultracold cesium Rydberg states

物理学报.2011, 60(7): 073202 <http://dx.doi.org/10.7498/aps.60.073202>

镱原子的Stark能级结构*

董慧杰 王新宇 李昌勇[†] 贾锁堂

(量子光学和光量子器件国家重点实验室, 山西大学激光光谱研究所, 太原 030006)

(2014年10月9日收到; 2014年12月16日收到修改稿)

里德伯原子的Stark效应在偶极偶极相互作用、量子信息和量子调控等方面具有潜在的应用前景. 本文首先根据零场时镱原子的能级数据, 通过非线性拟合方法获得了镱原子各态的量子亏损, 仔细分析了量子亏损随主量子数的变化特征; 然后利用Numerov算法计算了镱原子的径向波函数; 最后采用矩阵对角化方法, 数值计算了镱原子高里德伯态在场强范围 $F = 0-3000 \text{ V}\cdot\text{cm}^{-1}$ 时 $n = 7$ 和 $n = 18$ 附近的Stark能级结构. 结果显示在主量子数 $n = 7$ 多重态以上的能级结构中, $(n+1)P$ 态的能级接近并大于 nD 态的能级, 在 $n = 7$ 多重态以下的能级结构中, $(n+1)P$ 态的能级接近并小于 nD 态的能级. 这一现象不同于通常的碱金属原子的Stark结构, 论文对该现象及其他Stark能级结构特征进行了详细分析, 为相关研究工作提供了重要参考价值.

关键词: 里德伯原子, Stark效应, 数值计算, 矩阵对角化

PACS: 32.60.+i, 32.80.Ee, 32.80.Xx, 31.15.ap

DOI: 10.7498/aps.64.093201

1 引言

里德伯原子具有巨大的电偶极矩, 在量子信息等应用领域具有潜在应用前景, 是目前物理学前沿研究的热点课题. 许多科研工作者已对里德伯原子的Stark效应进行了相关研究. Silverstone用微扰理论计算了氢原子在外场中的Stark能量^[1]; Zimmerman等计算了碱金属原子里德堡态在 $n = 15$ 附近的Stark结构, 他们也通过实验观测了铯原子 $|m| = 0, 1$ 以及铷原子 $|m| = 1/2$ 的Stark结构^[2]; Hu等运用分子束技术研究了铯原子里德伯态 $n = 21-23$ 在外电场范围为 $0-600 \text{ V}\cdot\text{cm}^{-1}$ 时的Stark光谱和能量^[3]; 王丽梅等通过实验观测了铯原子里德伯态Stark能级的避免交叉^[4]; 朱兴波等从理论和实验上对铯39D态里德伯原子在弱电场作用下的Stark效应做了详细研究^[5]; Singer等研究了铷原子 $n = 79, 80$ 的Stark结构及相应光

谱^[6]; 鄧妙婵等对碱土金属里德伯态的Stark结构进行了系统研究^[7]; Yiang等观测了钡原子高里德伯态在 $n = 35$ 时的Stark光谱^[8]; Kampschulte等研究了氦原子在外电场中的Stark效应^[9]. 近年来我们也对单价电子体系, 譬如氢原子、碱金属原子等的Stark效应进行了详细研究^[10-14]. 以上这些工作主要是关于碱金属、碱土金属和惰性气体原子的研究, 至于其他原子Stark效应的研究则还相对较少. 本文的目标是研究第三主族元素镱原子在较大场强范围的Stark效应. 弱电场中原子的Stark能级移动一般根据二阶微扰理论进行计算, 强场中通常采用矩阵对角化方法进行计算. 我们首先仔细分析了镱原子的量子亏损随主量子数的变化情况, 采用矩阵对角化方法数值计算了镱原子高里德伯态的Stark能级结构, 发现了不同于碱金属原子能级结构的特征, 详细分析和讨论了计算结果, 对深入了解原子结构、高激发态中电子和原子实的相互作用具有重要意义.

* 国家重点基础研究发展计划(批准号: 2012CB921603)、国家自然科学基金(批准号: 61378039, 61078013, 61178009, 11274209)、教育部长江学者和创新研究团队发展计划(批准号: IRT13076)、国家自然科学基金国家基础科学人才培养基金(批准号: J1210036)和山西省自然科学基金(批准号: 2012011003-2)资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: lichyong@sxu.edu.cn

2 计算方法

采用 Zimmerman 等介绍的数值计算方法 [2], 相关计算细节已在先前发表的文章中作了介绍 [12-14], 以下简单说明计算要点.

1) 通过 Numerov 算法求解径向薛定谔方程, 径向坐标起点 r_1 取 $2n(n+15)$, 起点波函数 X_1 取为 0, 波函数第二点 X_2 取 $(-1)^{(n-l+1)} \times 10^{-10}$, 第三点 X_3 依据 X_1 和 X_2 及 Numerov 公式获得, 其他点以此类推, 步长取 0.01, 当径向波函数变得发散或振荡时停止计算.

2) 从 NIST 原子光谱数据库或原始相关文献中获得镓原子在未加电场时的能级数据, 零场时各态的能级数据满足公式

$$E = E_\infty - \frac{R_{\text{Ga}}}{(n - \delta_{nlj})^2}, \quad (1)$$

其中 $E_\infty = 48387.6146 \text{ cm}^{-1}$ 为镓原子电离能, $R_{\text{Ga}} = 109736.438599 \text{ cm}^{-1}$ 为镓原子的里德伯常数, 通过公式 $R_{\text{Ga}} = R \frac{m - m_e}{m}$ (镓原子质量 $m = 68.925580 \text{ u}$, 电子质量 $m_e = 5.485799 \times 10^{-4} \text{ u}$, $R = 109737.315685 \text{ cm}^{-1}$) 计算获得, δ_{nlj} 为量子亏损, 其对 Stark 结构的计算起着决定性作用, 满足高精度的修改的 Ritz [15] 公式:

$$\delta_{nlj} = a + b/(n-a)^2 + c/(n-a)^4 + d/(n-a)^6$$

表 1 非线性拟合获得的量子亏损表达式的系数

Table 1. Quantum defect expansion coefficients for Ga I determined by the nonlinear least-squares-fitting algorithm.

	$^2S_{1/2}$	$^2P_{1/2}$	$^2P_{3/2}$	$^2D_{3/2}$	$^2D_{5/2}$	$^2F_{5/2,7/2}$
a	2.7915	2.27506	2.26568	1.33307	1.32828	0.02926
b	0.1659	0.28109	0.27886	-3.00767	-2.92182	-0.12323
c	0.4346	0.70338	0.72517	12.84101	12.43239	0.05283
d	-0.00685	0.00027	-0.00223	-0.5844	-0.52684	-0.0041
e	-0.03689	0.00764	0.00508	-2.78834	-2.51556	-0.00542
f	-0.08476	0.03614	0.02474			

3) 加入外电场时的薛定谔方程如下:

$$(H^0 + H^S) |\psi_i\rangle = \varepsilon_i |\psi_i\rangle, \quad (3)$$

其中 H^0 是零场时的哈密顿算符, $H^S = e\mathbf{r} \cdot \mathbf{E} = eEz$ (电场取 Z 轴方向), 为外场与里德伯原子的相互作用, \mathbf{E} 为电场矢量, \mathbf{r} 是原子中里德伯电子的位置矢量. $|\psi_i\rangle = \sum_{n=1}^N a_{in} |\varphi_n\rangle$ 为加入外电场时的波函数, 其中 φ_n 为零场时的波函数, $a_{in} \leq 1$ 为波

$$+ e/(n-a)^8 + f/(n-a)^{10} + \dots \quad (2)$$

函数. ε_i 为加外电场时的本征能量. (3) 式两边左乘 $\langle \varphi_m |$ (m 取 1, 2, \dots , N), 得到矩阵方程 (久期方程):

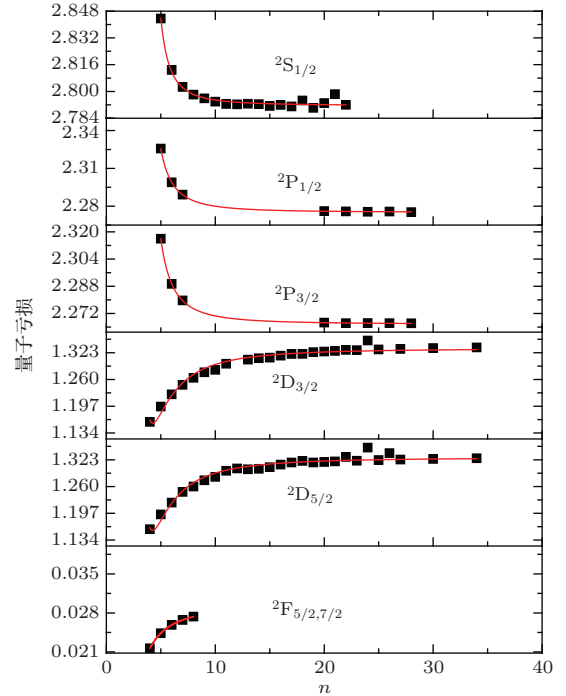


图 1 (网刊彩色) 按照 Ritz 公式非线性拟合获得的量子亏损曲线

Fig. 1. (color online) Quantum defect curves fitted according to the modified Ritz formula(2) for all series of gallium atom.

函数. ε_i 为加外电场时的本征能量. (3) 式两边左乘 $\langle \varphi_m |$ (m 取 1, 2, \dots , N), 得到矩阵方程 (久期方程):

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_1^0 + H_{11}^S & \cdots & H_{1N}^S \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ H_{N1}^S & \cdots & \varepsilon_N^0 + H_{NN}^S \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{i1} \\ \vdots \\ a_{iN} \end{pmatrix}$$

$$= \varepsilon_i \begin{pmatrix} a_{i1} \\ \vdots \\ a_{iN} \end{pmatrix}, \quad (4)$$

其中 $H_{mn}^S = \langle \varphi_m | H^S | \varphi_n \rangle$, 通过求解矩阵方程获得 Stark 能量 ε_i .

3 结果与讨论

从图 1 中拟合产生的量子亏损曲线可以看出, S 态、P 态的量子亏损较大, 且随着主量子数 n 的增大先迅速下降, 当 n 接近 10 时逐渐趋于稳定, 这主要是由于 S 和 P 轨道的偏心率很大, 电子有较大的概率穿过原子实, 引起轨道贯穿, 使原子能量降低, 导致量子亏损较大; 随着 n 的增大, 电子运动的平均半径增大, 深入原子实内层的相对概率减小, 从而量子亏损逐渐减小, 当 $n > 10$ 时, 轨道贯穿的概率趋于稳定, 量子亏损趋于恒定; F 态的量子亏损随 n 的增加先增加, 在 n 接近 10 时趋于稳定, 最终趋向于 0.03. 这是由于 F 态轨道偏心率较小, 但也不是圆形轨道, 随着 n 的增大, 由于某一确定的 n 所容纳的轨道数量也在增加, 导致偏心率随 n 增大而增大, 从而导致价电子靠近原子实的概率增加, 原子实的极化程度增大, 使原子能级下移, 量子亏损增大, 当 n 增大到一定值时, 譬如镓原子 $n = 10$ 时, 轨道半径增大, 导致原子实的极化度逐渐趋于稳定; D 态的电子有一定的轨道贯穿概率, 而且随 n 增大, 轨道相对偏心率增大, 轨道贯穿概率增加, 导致量子亏损增加, 由于轨道半径增加会使电子轨道贯穿概率降低, 所以到接近 $n = 20$ 时量子亏损趋于稳定. 其中原子实的极化对量子亏损的增加应该也有一定贡献^[11], 但贡献占比不大, 对于镓原子的 S, P 和 D 态, 量子亏损主要是由于价电子的轨道贯穿引起.

图 2 和图 3 分别是通过计算获得的镓原子 $n = 7$ 和 $n = 18$ 附近的能级结构, 可以看出当能级高于主量子数 $n = 7$ 的多重态时, 具有相同角量子数的态具有相似的能级结构, 如 21P 态、20P 态和 10P 态具有相似结构, 20D 态、19D 态和 9D 态具有相似结构. 随着场强的增大, P 态能级先有上升趋势, 而 D 态能级则先有下降趋势, 且 $(n + 1)P$ 态的能级接近并大于 nD 态的能级, 如 $21P > 20D$, $10P > 9D$. 当能级低于主量子数 $n = 7$ 的多重态时, P 态和 D 态的变化趋势跟上述情况相反, 即随

着场强的增大, P 态能级先有下降趋势, 而 D 态能级则先有上升趋势, 且 $(n + 1)P$ 态的能级接近并小于 nD 态的能级, 如 $9P < 8D$. 这一能级相对顺序随 n 的增加改变的现象不同于碱金属原子, 后者的能级相对次序不随 n 改变. 这主要是由于量子亏损的小数部分的大小次序引起. 对于碱金属原子, 其不同角动量态量子亏损的小数部分的大小次序不随 n 发生改变, 所以能级相对次序一直保持不变^[11]. 而对于镓原子, 在 P 态和 D 态能级顺序改变点附近, 量子亏损 $\delta_{9P} \approx 2.277$, $\delta_{8D} \approx 1.270$, 9 P 态量子亏损的小数部分大于 8D 态, 所以 9P 能级低于 8D; 若主量子数都增加 1, 则各态量子亏损 $\delta_{10P} \approx 2.275$, $\delta_{9D} \approx 1.284$, 10P 态量子亏损的小数部分小于 9D 态, 所以 10P 能级高于 9D. 即对于镓原子, 当 $n > 8$ 时, $(n + 1)P$ 的能级高于 nD ; 当 $n \leq 8$ 时, $(n + 1)P$ 的能级低于 nD . 这一能级高低次序随主量子数改变的现象及规律应该是一个特例, 可能只对少数原子适用.

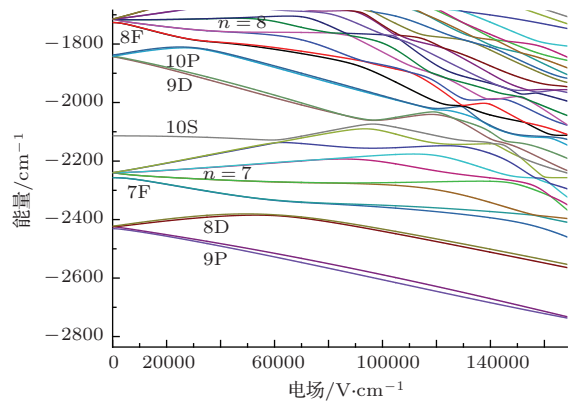


图 2 (网刊彩色) 镓原子 $n = 7$ ($|m| = 1/2$) 附近的 Stark 能级结构

Fig. 2. (color online) Stark energy structure of gallium atom in the vicinity of $n = 7$ ($|m| = 1/2$).

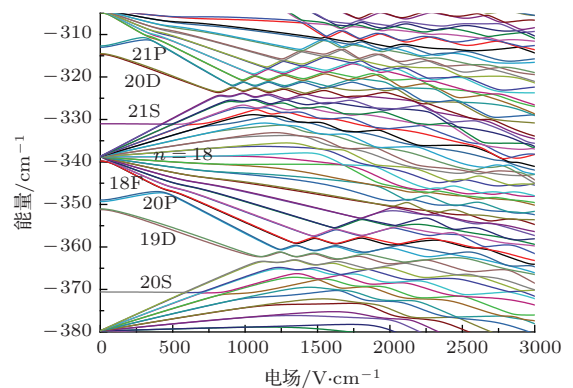


图 3 (网刊彩色) 镓原子 $n = 18$ ($|m| = 1/2$) 附近的 Stark 能级结构

Fig. 3. (color online) Stark energy structure of gallium atom in the vicinity of $n = 18$ ($|m| = 1/2$).

从图2和图3中还可以看出,在低场强时量子亏损为0的各态($n = 18$ 和 $n = 7$ 的多重态), Stark能级分布呈扇形状.对于S, P和D态,量子亏损破坏了能级结构的对称性,导致了与相邻能级的反交叉,说明了Stark相邻能级之间存在较大的相互作用;F态的量子亏损非常小,约为0.03,所以它的能级几乎与多重态简并,接近于相邻的多重态,并且与多重态反交叉.图4是镓原子20D态和21P态的 $|m| = 1/2, 3/2, 5/2$ 的Stark能级(分别用实线、虚线、点线表示),可以明显看到由于量子亏损的影响,具有相同磁量子数 $|m|$ 的能级反交叉,而不同 $|m|$ 值的能级相互交叉,这是由于不同 $|m|$ 的态之间的矩阵元为零,不会发生相互作用.譬如 $20D_{3/2}(|m| = |1/2|)$ 与 $20D_{5/2}(|m| = |1/2|)$ 能级反交叉,而与 $20D_{5/2}(|m| = |3/2|, |m| = |5/2|)$ 均交叉.

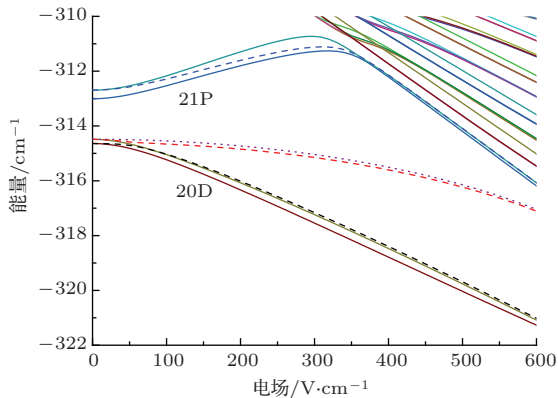


图4 (网刊彩色) 镓原子20D态和21P态的Stark能级. 实线、虚线、点线分别代表 $|m| = 1/2, 3/2, 5/2$ 的能级
Fig. 4. (color online) 20D and 21P states Stark energy levels for atomic Gallium. Solid, dashed, and dotted lines represent $|m| = 1/2, 3/2, 5/2$ components, respectively.

4 结 论

用数值方法计算了镓原子 $n = 7$ 和 $n = 18$ 附近的Stark能级,价电子的轨道贯穿和原子实的极化程度不同导致了镓原子量子亏损随主量子数变化的趋势不同.随着主量子数增加,电子轨道半径

增大,电子与原子实的相互作用趋于稳定.当主量子数接近10时,角量子数相同的量子亏损近似为常数.量子亏损的小数部分决定了相邻能级的高低次序,当主量子数 $n \leq 8$ 时,镓原子各 $(n + 1)P$ 态的能级低于 nD 态能级,当主量子数 $n > 8$ 时,各 $(n + 1)P$ 态能级高于 nD 态能级.磁量子数 $|m|$ 值相同的Stark能级反交叉, $|m|$ 值不同的能级相互交叉.

参考文献

- [1] Silverstone H J 1978 *Phys. Rev. A* **18** 1853
- [2] Zimmerman M L, Littman M G, Kash M M, Kleppner D 1979 *Phys. Rev. A* **20** 2251
- [3] Hu Z F, Zhao H T, Zhou S K, Gong S S, Shan M S 2000 *Chin. Phys. B* **9** 805
- [4] Wang L M, Zhang H, Li C Y, Zhao J M, Jia S T 2013 *Acta Phys. Sin.* **62** 013201 (in Chinese) [王丽梅, 张好, 李昌勇, 赵建明, 贾锁堂 2013 物理学报 **62** 013201]
- [5] Zhu X B, Zhang H, Feng Z G, Zhang L J, Li C Y, Zhao J M, Jia S T 2010 *Acta Phys. Sin.* **59** 2405 (in Chinese) [朱兴波, 张好, 冯志刚, 张临杰, 李昌勇, 赵建明, 贾锁堂 2010 物理学报 **59** 2405]
- [6] Singer K, Reetz-Lamour M, Amthor T, Folling S, Tschernack M, Weidemüller M 2005 *J. Phys. B* **38** S321
- [7] Zhi M C, Dai C J, Li S B 2001 *Chin. Phys. B* **10** 929
- [8] Yang H F, Gao W, Cheng H, Liu X J, Liu H P 2013 *Chin. Phys. B* **22** 013202
- [9] Kampschulte T, Schulze J, Luggenholtscher D, Bowden M, Czarnetzki U 2007 *New J. Phys.* **9** 18
- [10] Li C Y, Hao T, Zhang H, Zhu X B, Tao G Q, Zhang L J, Zhao J M, Jia S T 2012 *J. Phys. Soc. Jpn.* **81** 044302
- [11] Li C Y, Zhang L J, Zhao J M, Jia S T 2012 *Acta Phys. Sin.* **61** 163202 (in Chinese) [李昌勇, 张临杰, 赵建明, 贾锁堂 2012 物理学报 **61** 163202]
- [12] Dong H J, Wang T, Li C Y, Zhao J M, Zhang L J 2013 *Chin. Phys. B* **22** 073201
- [13] Dong H J, Huang K S, Zhao J M, Zhang L J, Jia S T 2014 *Chin. Phys. B* **23** 093202
- [14] Tao G Q, Li C Y, Zhang L J, Zhao J M, Jia S T 2009 *Acta Sinica Quantum Optica* **15** 185 (in Chinese) [陶冠奇, 李昌勇, 张临杰, 赵建明, 贾锁堂 2009 量子光学学报 **15** 185]
- [15] Weber K H, Sansonetti C J 1987 *Phys. Rev. A* **1987** **35** 4650

Stark structure of atomic gallium*

Dong Hui-Jie Wang Xin-Yu Li Chang-Yong[†] Jia Suo-Tang

(State Key Laboratory of Quantum Optics and Quantum Optics Devices, Institute of Laser Spectroscopy,
Shanxi University, Taiyuan 030006, China)

(Received 9 October 2014; revised manuscript received 16 December 2014)

Abstract

The Stark effect in Rydberg atoms has potential applications in the areas of dipole-dipole interaction, quantum information, quantum control, and so on. Many relevant theoretical calculations and experimental studies about the Stark effect of alkali metal and alkali earth metals have been reported, but the other atom's Stark effect is studied still relatively less. Our goal in this paper is to research the third main group atom's Stark effect in a large electric field. First, according to the level data of gallium atom in zero-field, we obtain the quantum defects from the modified Ritz formula in each state by using a nonlinear least-squares-fitting algorithm. The quantum defects as a function of the principal quantum number are analyzed in detail. Influences of both the core polarization and the penetrating valence electron on the quantum defect are discussed according to the fitting results. Then we use the Numerov algorithm to calculate the radial wave functions of atomic gallium. Finally, the Stark structures of Rydberg states around $n = 7$ and $n = 18$ are numerically calculated by matrix diagonalization. Results show that at the levels above $n = 7$ manifold states, $(n + 1)P$ is higher than nD state, and it is in contrast to the levels below the $n = 7$ manifold states. This phenomenon is different from the usual Stark structure of alkali metal atoms, the level's order of which does not change with the principal quantum number. The Stark levels with the identical $|m|$ anti-cross each other, and those with different $|m|$ cross. Our results give an important reference for related researches, and are of great significance for insight into the atomic structure and the interaction between the atomic core and the highly excited electrons.

Keywords: Rydberg atom, Stark effect, numerical calculation, matrix diagonalization

PACS: 32.60.+i, 32.80.Ee, 32.80.Xx, 31.15.ap

DOI: 10.7498/aps.64.093201

* Project supported by the National Basic Research Program of China (Grant No. 2012CB921603), the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 61378039, 61078013, 61178009, 11274209), the Program for Changjiang Scholars and Innovative Research Team in University of Ministry of Education of China (Grant No. IRT13076), the Fund for Fostering Talents in Basic Science of the National Natural Science Foundation of China (Grant No. J1210036), and the Natural Science Foundation of Shanxi Province, China (Grant No. 2012011003-2).

[†] Corresponding author. E-mail: lichyong@sxu.edu.cn