

原子在强磁场中的能谱特征*

何兴虹 周凤晴¹⁾ 李白文 张承修

中国科学院武汉物理研究所 波谱与原子分子物理开放研究实验室, 武汉 430071

1990年8月6日收到; 1991年7月19日收到修改稿

本文使用一种微扰法计算强磁场中的 Na 原子 ($m = -2$, s 宇称 $\pi_s = +$) 在强场混合区的能级位置和振子强度。理论能谱的一些特征可以较好地描述一些实验能谱的特征。对得到的能谱所做的傅里叶变换分析表明, 除了传统的准朗道共振外(在零场电离阈附近间距近似为 $1.5\hbar\omega_c$, ω_c 为电子迴旋频率), 还存在有一系列大小与磁场强度无关的“共振”间距, 与其他理论所给出的相一致, 还从所用微扰法中的零级能量公式出发, 对这些间距给予量子力学解释。

PACC: 3260V; 3150

一、引言

对于强磁场中的氢原子, 当抗磁势和库仑势量级相同时, 二者都不能单独作为微扰处理, 直到数年前一直被认为是单电子原子唯一没有解决的量子力学难题^[1]。

与理论上的复杂性相反, 1969年 Garton 和 Tomkins^[2] 的实验显示原子在强磁场中的能谱具有较简单的总体结构: 能级呈现近似等间距的准朗道共振 (QLR) 特征, 此间距在零场电离阈附近为 $1.5\hbar\omega_c$, 其中 ω_c 为电子迴旋频率。这一发现极大地引起了人们的兴趣。不仅如此, 对原子在强磁场中的效应的研究在其他许多领域如天体物理、固体物理、表面物理以及等离子体物理中都有广泛的应用^[3]。因此, 多年来这一问题一直是原子物理研究(包括理论和实验)中十分活跃的领域之一^[1, 3-6]。

1980年, Castro 等人^[7]利用染料激光器, 采用两步激发的方法观察 Na 原子处于 $B = 4.2\text{T}$ 的磁场中的能谱。在零场电离阈下, $m = -2$ 的偶宇称态的谱呈现出明显的准朗道共振特征。近年来, Main 和 Holle 等人^[8, 25, 9]利用真空紫外 (VUV) 和紫外 (UV) 激光激发, 得到氖原子在强磁场中的能谱, 并发现除了传统的间距为 $1.5\hbar\omega_c$ 的 QLR 谱线外, 还有一系列新的等间距谱线。

从理论上考虑处于均匀磁场 B (沿 z 方向) 中的氢原子, 不考虑核和电子的自旋, 并假定核质量为无限大, 其非相对论性的哈密顿量为(里德伯原子单位)

$$H = -\nabla^2 - 2/r + \gamma L_z + \gamma^2(x^2 + y^2)/4 \equiv -\nabla^2 + H_c + H_p + H_d, \quad (1)$$

其中 $\gamma = B/B_0$, $B_0 = 2.35 \times 10^5\text{T}$, H_c, H_p, H_d 分别为库仑势、顺磁势和抗磁势。在 H_d

* 国家自然科学基金资助的课题。

1) 现在地址: 华中理工大学激光技术国家实验室, 武汉 430074。

不可忽略时, 由于 H_c 和 H_a 具有不同的对称性, 一直未用分离变量法求解。

近十几年来, 人们采取不同的办法来处理。半经典的二维 WKB 法^[10,11]考虑电子局限于 $z = 0$ 的平面上, 成功地解释了 $1.5\hbar\omega_c$ 的 QLR 特征, 但无法给出谱线强度以及谱线的细结构。目前对激发态的定量计算大都采用完备基展开法如球坐标下的广义 Laguerre 函数基^[1,9,12]、半抛物坐标下的二维振子基^[13,14]以及柱坐标下的朗道基^[4], 特别是 Holle 等人的工作^[9], 他们取了多达 6400 个广义 Laguerre 函数基, 用能量矩阵对角化的方法, 确定在给定的 m 及宇称下的最初 600 个本征态的本征值和本征矢, 并进而求得各态的所考虑跃迁下的振子强度。从而得以使理论与实验进行态-态比较, 结果二者符合得非常好。文献 [8,25] 和 [15] 还分别从实验和理论能谱发现一系列共振间距, 并用经典的周期轨道理论对它们作出解释。这些工作不失为非常成功的工作, 但是计算量非常大, 而物理图象却不够清晰。

为了建立一种物理图象较清晰的量子力学的理论描述, 张宇和张承修^[16,17]提出一种斜坐标表述的微扰法。这种方法虽比较粗糙, 但在一定情形下能展示在这个坐标系中哈密顿量是可以近似分离的, 能给出零级能量和波函数表达式, QLR 的生成, 近似标度律 $\nu^3\gamma \approx 1$, 并可看出这个系统的近似动力学对称性, Wang 和 Greene^[24]也提出一种在柱坐标系中的绝热表述, 一种可以定量计算的, 可以清楚看出条理的量子力学的方法。用此法也可解释 QLR。

本文利用张宇和张承修^[16,17]提出的方法, 对 Na 原子 ($m = -2$, 偶宇称态) 在强磁场中的能谱特征 ($H_c \sim H_a$ 情形) 进行研究, 与相应的实验结果^[7]作比较, 并从零级能量公式和振子强度作了能谱及其傅里叶变换, 分析能谱的结构特点。由于此法的零级波函数只是近似正交, 故 $\langle H' \rangle$ 并非真正的一级微扰能, 因此, 本文并不准备与实验进行线-线比较。

二、方法简介

针对(1)式的特点, 文献 [16,17] 选用一个斜坐标系 (r, ρ, φ) 。这种坐标系与常用直角坐标系的关系为

$$\begin{aligned} r &= (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}, \rho = (x^2 + y^2)^{1/2}, \varphi = \arctan(y/x), \\ x &= \rho \cos \varphi, y = \rho \sin \varphi, z = (r^2 - \rho^2)^{1/2}. \end{aligned} \quad (2)$$

(1) 式可变换为如下形式: $H = H_0 + H' + H_p$,

$$\text{其中 } H_0 = -\left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{2}{r}\right) - \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - \frac{1}{4} \gamma^2 \rho^2\right),$$

$$H' = -2 \frac{\rho}{r} \frac{\partial^2}{\partial r \partial \rho}, H_p = \gamma L_z. \quad (3)$$

计算表明^[20], 对于 $|m| > 0$ 的态, 在很大的能量范围内, H' 的贡献很小, 可当作微扰处理。(3)式零级哈密顿量 H_0 的能量为

$$\begin{aligned} \epsilon^{(0)} &= (N + 1/2)2\gamma - 1/\nu^2, N = \mu + (|m| + m)/2, \\ \mu &= 0, 1, 2, \dots, m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \nu = 1, 2, 3, \dots, \end{aligned} \quad (4)$$

其中包括顺磁项 H_p 的贡献。零级波函数为

$$\begin{aligned} \psi_{\nu N m}^{(0)}(r, \rho, \varphi) &= C_{\nu N m} F_{\nu}(r) K_{N m}(\rho) e^{i m \varphi}, \quad F_{\nu}(r) = e^{-r/\nu} L_{\nu-1}^1(2r/\nu), \\ K_{N m}(\rho) &= e^{-\gamma \rho^2/4} \rho^{|m|} L_{N-|m|}^{|m|}(\gamma \rho^2/2), \end{aligned} \quad (5)$$

其中 L_n^k 为拉盖尔多项式, $C_{\nu N m}$ 为归一化常数。详细情况可参阅文献[16,17]。

二维半经典 WKB 方法的计算以及量子力学的计算表明^[1,3], QLR 中各主谱线大都是由各 ν 簇中(ν 为主量子数) $k=1$ 的态所产生(量子数 k 为强磁场中同一 ν 簇中的能级标志, $k=1$ 对应于能量最高的能级), 这些态的波函数所代表的概率分布集中在 $z=0$ 的平面上或在 $z=0$ 的平面附近^[10]。文献[17]从旧量子理论出发, 认为在 (r, ρ, φ) 坐标系中 $k=1$ 相应于 $k=\langle \rho \rangle / \langle r \rangle = 1$, 利用这一关系, 由旧量子论找出相应于 $k=1$ 的态的 ν 和 N 所满足的方程

$$2N+1 = \gamma \nu^4. \quad (6)$$

并且从物理上考虑, 认为对于给定的磁场强度 γ 和量子数 ν , 量子数 N 的取值范围为: 对于 $m \leq 0, 0 \leq N \leq N_1$; 对于 $m > 0, m \leq N \leq N_1, N_1$ 由方程(6)确定。这些态 (ν, N) 对能谱都有贡献。

此法的特点是物理图象比较清晰, 计算量较小, 在磁场强度极限情况下都能得到相应的正确渐近形式, 能较自然地得到 QLR 的间距^[17]。其缺点是理论比较粗糙, 对 $m=0$ 的态, 计算得到的微扰能较大(约有几个 cm^{-1} 大小); 不能处理 $\pi_z = -1$ 的字称态。本文将该法应用于对 Na 原子 $m = -2$ 的偶宇称态的能谱特征的研究。

按照正常的微扰论, $|\nu N m\rangle$ 态的一级微扰能为 $\langle \nu N m | H' | \nu N m \rangle$, 但在此情况下量子数 ν, N 不同的态并不严格正交, 而只是近似正交。因此, 它只是一级微扰能的近似表式, 文献[17]中给出它的积分的表式[(18)式, 此式有错], 但如用它计算收敛慢, 不如直接用下面的一重积分计算较为方便省时:

$$\begin{aligned} \langle H' \rangle &\equiv \langle \nu N m | H' | \nu N m \rangle = 4\sqrt{\pi} C^2 \int_0^{\infty} dr e^{-2r/\nu} e^{-\gamma r^2/2} \\ &\quad \cdot \left[\left(\frac{r}{\nu} - 1 \right) L_{\nu-1}^1 \left(\frac{2r}{\nu} \right) + \nu L_{\nu}^0 \left(\frac{2r}{\nu} \right) \right] L_{N-|m|}^{|m|} \left(\frac{2r}{\nu} \right) r^{2|m|} I_0, \\ I_0 &= \sum_{i=0}^{\mu} \sum_{j=0}^{\mu-1} \left(-\frac{\gamma r^2}{2} \right)^{i+j} \binom{\mu+|m|}{\mu-i} \binom{\mu+|m|}{\mu-j-1} \frac{(i+j+|m|+1)!}{i!j!\Gamma(i+j+|m|+5/2)} \\ &\quad \cdot {}_1F_1(1/2, i+j+|m|+5/2, \gamma r^2/2) + \sum_{i=0}^{\mu} \sum_{j=0}^{\mu} \left(-\frac{\gamma r^2}{2} \right)^{i+j} \binom{\mu+|m|}{\mu-i} \\ &\quad \cdot \binom{\mu+|m|}{\mu-j} \frac{(i+j+|m|)!}{i!j!\Gamma(i+j+|m|+5/2)} [(i+j+|m|+1) {}_1F_1(1/2, i \\ &\quad + j + |m| + 5/2, \gamma r^2/2) - (i+j+|m|+3/2) {}_1F_1(1/2, i \\ &\quad + j + |m| + 3/2, \gamma r^2/2)], \end{aligned} \quad (7)$$

其中 C 为归一化常数, ${}_1F_1$ 为合流超几何函数。因此, 包括一级微扰近似值 $\langle H' \rangle$ 后的能量近似表式为

$$\varepsilon^{(1)} = \varepsilon^{(0)} + \langle H' \rangle. \quad (8)$$

为了与文献[7]的实验相比较, 用上述方法计算了 Na 原子在 $B = 4.2\text{T}$ 的磁场中从 $3P$ 态跃迁到 $m = -2$ 的诸偶宇称态 $|\nu N - 2\rangle$ 的能谱。对能谱有贡献的态根据

如下条件选取: $-65\text{cm}^{-1} \leq \epsilon^{(1)} - m\gamma \leq 0$, $\nu = 30 - 100$, $N = 0 - N_1$. N_1 由(6)式定, $\epsilon^{(1)}$ 如(8)式所示, $m\gamma$ 为顺磁能. 在计算振子强度时, 因为场强为 4.2T 的磁场对于 3P 态来说是非常小的, 其影响在此可忽略不计, 所以 3P 态波函数选用无磁场时由一种唯象势模型得到的 Na 原子波函数^[19],

$$\psi_{3p-1} = R_{31}(r)Y_{1-1}(\theta, \varphi),$$

$$R_{31}(r) = C_{3p} \exp(-r'/2) r'(r' + \xi)^i (r' + \xi)^u \sum_{i=0}^l a_i (r')^i, \quad (9)$$

其中 $r' = \alpha r$, $\alpha = 2/(n - \delta_{nl})$, δ_{nl} 为 3P 态的量子数亏损, ξ, ζ, i, u 和诸 a_i 都可由 δ_{nl} 的实验值确定.

末态波函数直接用(5)式所示的零级波函数, 这是因为 $m = -2$ 的偶宇称末态含有角动量 $l = 2, 4, 6, \dots$ 等的分波, 这些分波中的最大量子数亏损值小于 0.015, 其行为与氢原子很相近. 于是振子强度 f 的表式为

$$f = \frac{1}{3} (E_{\nu N-2} - E_{3p-1}) |\langle \nu N - 2 | r | 3P - 1 \rangle|^2 = \frac{1}{4} \pi^2 C_{\nu N-2}^2 (E_{\nu N-2} - E_{3p})$$

$$\cdot \left[\int_0^\infty dr \exp\left(-\frac{r}{\nu} - \frac{\gamma r^2}{4}\right) r^2 L_{\nu-1}^1(2r/\nu) R_{31}(r) I_0 \right]^2, \quad (10)$$

其中
$$I_0 = \sum_{i=0}^{\mu} \binom{\mu+2}{\mu-i} \left(-\frac{\gamma r^2}{4}\right)^i \frac{(i+2)!}{i! \Gamma\left(i + \frac{7}{2}\right)} {}_1F_1\left(\frac{1}{2}, i + \frac{7}{2}, \frac{\gamma r^2}{4}\right).$$

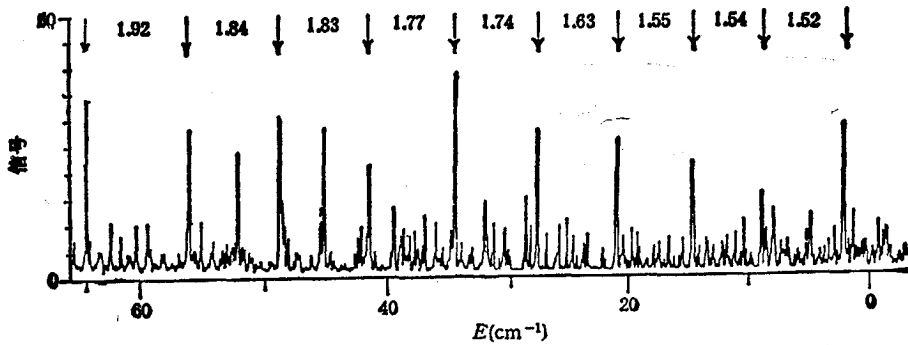
三、能谱的特征

图 1 画出在磁场 $B = 4.2\text{T}$ 情况下 Na 原子 $m = -2$ 偶宇称态的实验谱 (图 1(a))^[7] 与理论谱 (图 1(b)), 其中顺磁能 $m\gamma$ 和零点能已被扣除. 理论谱线共 419 条, 由(8)式算得, 包括零级能量 $\epsilon^{(0)}$ 和一级微扰能的近似值 $\langle H' \rangle$ [(7)式]. 横坐标是各态 $|\nu N m\rangle$ 的能量 $E = \epsilon^{(1)} - m\gamma - \gamma$, 纵坐标是由 3P 态跃迁至各态的振子强度 $f_{3p \rightarrow \nu N m}$. 从图 1(b) 可以看出, 在 $E > -30\text{cm}^{-1}$ 范围内振子强度的分布已处于混沌状态, 但仍呈现出某些有规律的特征.

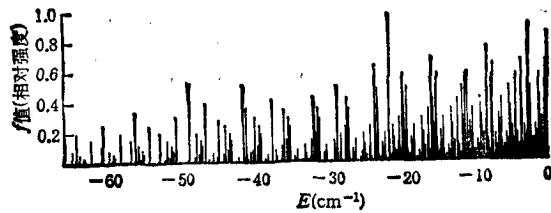
本文的目的不是像文献[25]那样用能量矩阵对角化的方法精确计算出每个态的能量和波函数与实验能谱作态-态比较, 而是根据零级能量公式(4)得出一些定性和半定量的结果, 描述能谱的一些重要特征, 以帮助我们理解这些特征的物理意义和由来.

1. 关于准朗道共振 (QLR)^[2,26]

从旧量子论考虑, 对 QLR 有贡献的各态应在 $k = 1$ 线上 (见(6)式), 即在 $z = 0$ 平面上. 以 N 和 $1/\nu^2$ 为坐标, 将(6)式 $(2N+1)(1/\nu^2)^2 = \gamma$ 画在图 2(a) 上^[26]. 表 1 列出 $k = 1$ 线上和 $N = 9-18$ 诸整数值相应的 $1/\nu^2$ 值和 ν 值 (非整数). 由这些 N 和 $1/\nu^2$ 可用(4)式算得与各点相应的零级能量 $\epsilon^{(0)}$ 和 $E^{(0)} = \epsilon^{(0)} - m\gamma - \gamma$ (不包括顺磁能和零

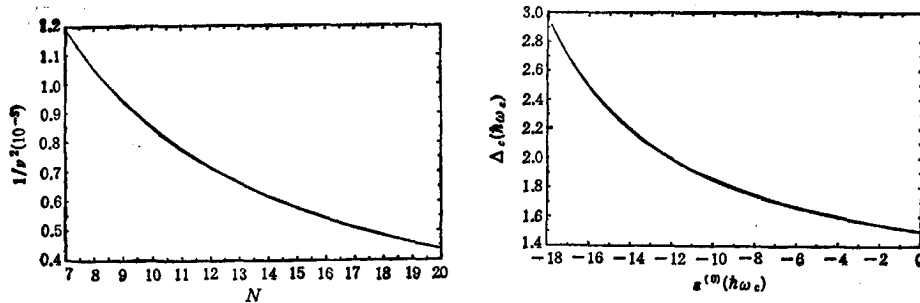


(a) 为实验谱(不含 Zeeman 项),取自文献 [7]



(b) 为本文计算得到的理论线谱,共 419 条

图 1 Na 原子在 $B = 4.2\text{T}$ 的磁场中从 $3P(m = -1)$ 态跃迁到 $m = -2$ 的偶宇称态的能谱(以 cm^{-1} 为单位)



(a) 为(6)式的曲线,其中纵坐标为 $1/\nu^2$ (b) 为(11)式的曲线,其中横坐标为 $\epsilon^{(0)}$, 纵坐标为 Δ_c .

图 2 $k = 1$ 的曲线上的态所对应的量子数标记 (ν, N) 及间距与能量的关系

点能). 由这些 $E^{(0)}$ 或 $\epsilon^{(0)}$ 可求得相邻二 QLR 峰的间距 Δ_c , 在 $\epsilon^{(0)} \approx 0$ 处 Δ_c 应为 $\frac{3}{2} \hbar\omega_c$, 在 $\epsilon^{(0)} < (>) 0$ 区中 Δ_c 应按下式随 $\epsilon^{(0)}$ 的减小(增大)而单调增大(减小)

$$\epsilon^{(0)} = \left(\frac{\gamma}{2}\right)^{2/3} \frac{3 - 2\Delta_c}{(\Delta_c - 1)^{2/3}} \quad (11)$$

以 $\epsilon^{(0)}$ 为横坐标, Δ_c 为纵坐标, 可画出代表上式的曲线(图 2(b)), 可以看出 QLR 二邻峰中间的 $\epsilon^{(0)}$ 和此二峰的间距 Δ_c 正好都落在曲线(11)式上.

表 1 中还列出各共振峰的实验值 $E_{\pi}^{(7)}$, 其中 8 个 ($N = 11-18$) 与相应的理论值 $\epsilon^{(0)}$ 相差都在 1cm^{-1} 以下, 只有 $N = 9, 10$ 两个相差较大, 这可能是因此二态(32.11, 9),

(32.92,10)在准朗道区下端,接近 n 混合区,而本文所用的理论主要是适用于准朗道共振区。

表1 准朗道共振峰(未标*的态)的位置(以 cm^{-1} 为单位)

N	ν	$\epsilon^{(0)}$ (cm^{-1})	$E^{(0)}$ (cm^{-1})	Δ_c (cm^{-1})	E_*	Δ_*	Δ_{**}	$\frac{E_* - E^{(0)}}{E^{(0)}}$
18	37.93	-3.71	-1.75	1.54	-2.2	1.61	1.52	-0.45
17	37.41	-9.77	-7.81	1.60	-8.5	1.61	1.54	-0.69
16	36.86	-16.04	-14.08	1.65	-14.8	1.61	1.55	-0.72
15	36.29	-22.53	-20.57	1.72	-21.1	1.76	1.63	-0.54
14	35.69	-29.28	-27.32	1.80	-28.0	1.68	1.74	-0.68
13	35.06	-36.32	-34.36	1.89	-34.6	1.79	1.77	-0.24
12	34.39	-43.75	-41.79	1.04	-41.5		1.83	+0.29
*13	33	-47.81	-45.85	0.97	-45.2	0.94	1.8	+0.65
11	33.68	-51.63	-49.67	1.03	-48.7	0.89	1.84	+0.97
*11	33	-55.66	-53.70	1.13	-52.0	0.84	1.96	+1.70
10	32.92	-60.07	-58.11	2.15	-56.4	1.12	1.94	+1.71
9	32.11	-69.17	-67.21	2.32	-64.0		1.92	+3.21

实验数据取自图 1(a); $E^{(0)}$ 为不包括顺磁能和零点能的零级能量; Δ 代表相邻共振峰间距 (以 $\hbar\omega_c = 3.92 \text{ cm}^{-1}$ 为单位); 标有*的二态为“五指区”中第二和第四两指的位置。

表 1 中还列出文献 [7] 图 1 中的所标的间距 Δ_{**} , 这些数值与同一图中二邻峰能量 E_* 之差 Δ_* 并不一致, 而且图下方的标尺也不是很均匀的, 其中 0 至 -10 和 -20 至 -30 两段比其他各段都小 $\sim 0.5 \text{ cm}^{-1}$ 。

以上是用量子力学算得的零级能量辅以旧量子论的观点给予 QLR 的解释, 这些非整数的 ν 值可看作是有效量子数 $\nu^* = \nu - \delta$, 其中 ν 为整数, δ 为量子数亏损, 至于这些 δ 的由来则有待进一步探索。

2. 关于“五指区”

由图 1(a) 可见, 在 $\epsilon^{(0)} = -40$ 至 -60 cm^{-1} 区间有明显的五个峰, 其一、三、五, 三个峰是 QLR 的三个峰, 其二、四两个峰不属于 QLR, 这一特征不仅在 Na 原子谱中有, 在 Ba 原子谱中也明显^[24]。根据上面的计算, 在这一区域 QLR 的间距已接近 $2\hbar\omega_c$, 第二和第四两峰和各自的邻峰相间距 $\sim 1\hbar\omega_c$ 。此第二、四两峰可能为 (33,11) 和 (33,13) 二态, 它们相距正好为 $2\hbar\omega_c$, 每态距其 QLR 邻峰 $\sim 1\hbar\omega_c$, 而第一、三两个峰除了有别的能量很接近的态的贡献外, 也有 (33,10), (33,12) 二态的贡献, 第五个峰距 (33,12) 已超过 $1\hbar\omega_c$, 其右侧一小峰为 (33,14)。

3. 关于其他与磁场有关的共振

由图 1(b) 可看出, 在 $E < -20 \text{ cm}^{-1}$ 范围内有明显的间距为 $1\hbar\omega_c = 3.92 \text{ cm}^{-1}$ 的共振, 它是来自 $\epsilon^{(0)}$ 公式中 $\Delta\nu = 0, \Delta N = 1$ 的各对能级的间距, 这些峰在 -50 cm^{-1} 以下就逐渐减弱, 逐渐消失。

4. 关于其他共振

除了间距近似为 $1.5\hbar\omega_c$ 的共振峰外,近年的实验结果与理论计算还发现有大量的能级间距较小的共振系列^[8,15]. Wintgen 和 Friedrich^[15,21] 以及 Main 等人^[8]从经典周期轨道理论出发,解释他们所得到的谱中的“共振”间距. 他们把每一个“共振”间距与所对应的跃迁末态的不稳定周期轨道运动的周期相联系,周期的倒数即间距. 这些不稳定的周期轨道运动对应于经典力学中的混沌运动状态. 这些经典理论解释是成功的,但还未见有完全基于量子力学的理论解释.

要发现有哪些共振系列和能量间距,只要对理论或实验能谱作傅里叶变换即可得知,但这不能解释这些共振是如何形成的. 为了研究和分析这些新的共振系列,我们对理论谱(图 1(b))作傅里叶变换(FT),结果示于图 3. 图 3 中横坐标时间轴以 $1/\hbar\omega_c$ 为单位,因此,图 3 中每一个峰的位置 t , 的倒数 $\Delta \equiv 1/t$, 就代表变换前原谱(图 1(b))中间距为 Δ (单位为 $\hbar\omega_c$) 的共振^[8-9,15,21-23].

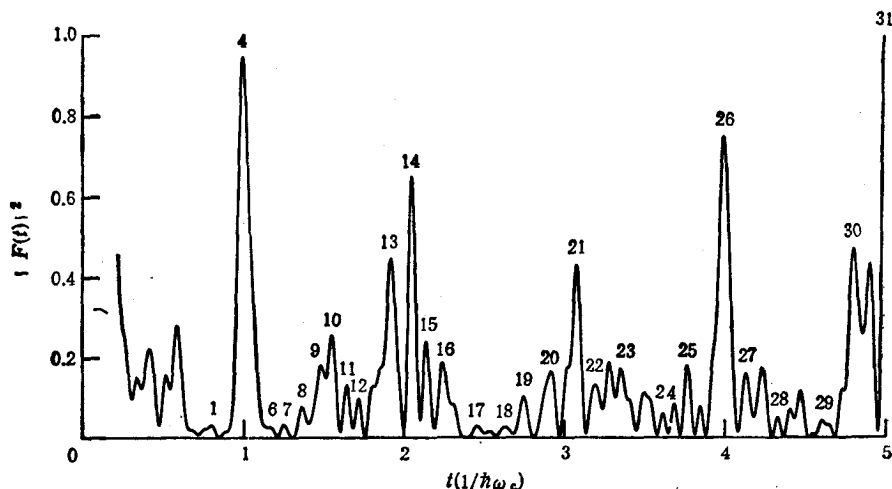


图 3 理论谱(图 1(b))的傅里叶变换 横坐标时间轴以 $1/\hbar\omega_c$ 为单位;纵坐标为傅里叶变换振幅的平方;标了号的峰值位置,可由文中零级能量公式分析得到

从图 1(b) 可见,各谱线参差不齐,但混乱中仍有显著的规律性. 例如对于一系列 $\Delta\nu = 0, \Delta\nu = 1$ 的能级间距

$$\Delta_{\nu,N} \equiv \varepsilon_{\nu+1,N}^{(0)} - \varepsilon_{\nu,N}^{(0)} = \frac{1}{\nu^2} - \frac{1}{(\nu+1)^2} \quad (12)$$

是不随 N 和 γ 改变的. 如果考虑 $\nu = 38$ 的情形, 则可见 $\Delta_{38,N} = 3.506 \times 10^{-5} \text{ Ry} = 3.847 \text{ cm}^{-1}$, 而 $\Delta_0 \equiv \varepsilon_{\nu,N+1}^{(0)} - \varepsilon_{\nu,N}^{(0)} = 3.922 \text{ cm}^{-1}$, 即前一个 $\Delta_{38,N}$ 的末端 $\varepsilon_{38,N}^{(0)}$ 和后一个 $\Delta_{38,N+1}$ 的始端 $\varepsilon_{38,N+1}^{(0)}$ 几乎相重, 于是这一系列等间距的 $\Delta_{38,N}$ ($N = \text{一系列正整数}$) 就形成一组间距约为 3.847 cm^{-1} 的共振峰(见图 4(a)). 对于 $\nu < 38$ 的情况, 则 $\Delta_{\nu,N} > \Delta_0$, 即 N 相邻的两段 $\Delta_{\nu,N}$ 有一部分重叠. 例如 $\nu = 35$ 时, $\Delta_{\nu,N}$ 和 Δ_0 的关系如图 4(b) 所示. 对于 $\nu > 38$ 的情况, $\Delta_{\nu,N} < \Delta_0$, N 相邻的两段 $\Delta_{\nu,N}$ 不相衔接, 如图 4(c) 所示. 但是有趣的是对上述两情形, 其 FT 的幅的平方含有 $\cos^2(k\Delta_{\nu,N}/2)$

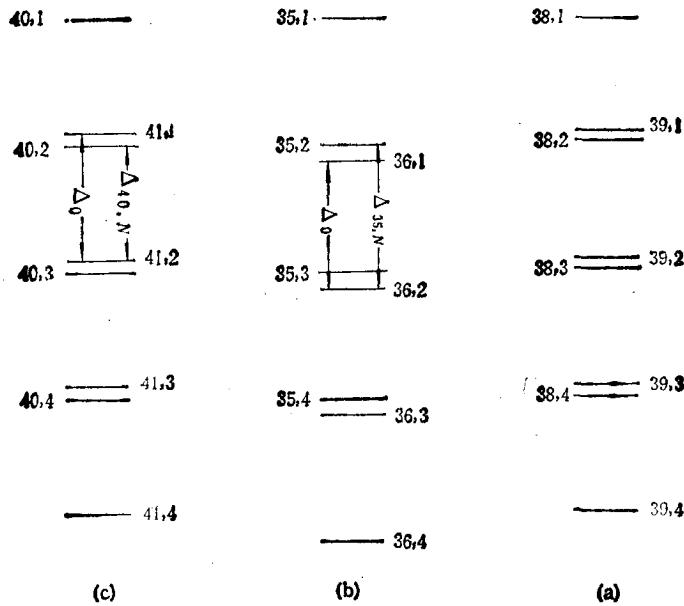


图4 不同 ν 时, $\Delta_{\nu,N}$ 和 Δ_0 (定义见正文)的相对关系 (a) $\nu = 38$ 时, $\Delta_{\nu,N} \approx \Delta_0$; (b) $\nu < 38$ 时, $\Delta_{\nu,N} > \Delta_0$; (c) $\nu > 38$ 时, $\Delta_{\nu,N} < \Delta_0$; 图中各竖线的位置不代表真实情况下的数值, 仅起示意作用

$[\sin(mk\Delta_0/2)/\sin(k\Delta_0/2)]^2$, 对于足够大的 m (m 为在作 FT 时所取 $\Delta_{\nu,N}$ 的个数), 其第一个极大值在 $k = 2\pi/\Delta_{\nu,N}$ 处产生, 因此, 对于上述三种情形都可用 FT 定出间距 $\Delta_{\nu,N}$.

归结起来, 这些“共振”有如下特点:

1) 虽然 FT 能帮助我们定出一系列的间距 $\Delta_{\nu,N}$, 但是严格说来在大多数情况下它们并不是两两相连的等间距共振, 而是两两有一部分重叠或不相衔接的等间距系列。

2) 这些“共振”系列的间距是与场强 B 无关的, 它们在这一点上是和与 B 有关的间距为 $1.5\hbar\omega_c$ 的 QLR 完全不同的, 尽管在本文中有时沿用 $\hbar\omega_c$ 作为能量单位来表征这些“共振”间距的大小。

3) 对于氢以外的原子, “共振”间距 $\Delta_{\nu,N}^* = \frac{1}{(\nu - \delta_1)^2} - \frac{1}{(\nu + 1 - \delta_1)^2}$, δ_1 为量子数亏损。与氢原子的 $\Delta_{\nu,N}$ 约差百分之几到十几。

4) 计算得知, N 相同而 $\Delta\nu = 1$ 的两个 $\langle H' \rangle$ 在较广的范围内相差很小, 一般只有 0.01cm^{-1} 左右。因此 $\langle H' \rangle$ 对间距 $\Delta_{\nu,N}$ 的值影响很小。

5) 虽然由(4)式的 $\varepsilon^{(0)}$ 求得这些“共振”间距, 但实际只要 $\varepsilon = F(N, \gamma) - 1/\nu^2$, $F(N, \gamma)$ 为 N 的任意函数, 都可得出同样的“共振”间距 $\Delta_{\nu,N}$ 。

表2列出由(12)式算出的 $\Delta_1 = \Delta_{\nu,N}$, 由图3FT 诸峰定出的 $\Delta_2 \equiv 1/t$, (二者 $B = 4.2\text{T}$), 由 $B = 5.96\text{T}$ 的实验谱经 FT 得出的一些共振间距 $\Delta_B^{[8]}$ 及标记, 文献[15]中经典理论算得的共振间距 Δ_c 及其相应的标记。表2中的标号1, 2, 3, ... 对应于图3中诸峰的标号。

表 2 除 QLR 以外的其他一些共振间距; Δ_1 为由(12)式计算所得数值; Δ_2 为取自图 2; Δ_B 为取自文献[8]; Δ_c 为取自文献[15], 标记为文献[15]所用标记; ν 为(12)式中的量子数

编号	ν (12)式中的 量子数	Δ_1 (cm^{-1})	Δ_1 $\hbar\omega_c (= 3.92$ $\text{cm}^{-1})$	Δ_2 $\hbar\omega_c (= 3.92$ $\text{cm}^{-1})$	Δ_B $\hbar\omega_c (= 5.57$ $\text{cm}^{-1})$	Δ_c $\hbar\omega_c (= 5.59$ $\text{cm}^{-1} = \nu_{10c})$	标记
	30	8.288	2.114		1.50①	1.489	I ₁
0	33	5.841	1.489				
	34	5.347	1.364				
1	35	4.908	1.252	1.252			
2	36	4.515	1.152				
3	37	4.163	1.061				
4	38	3.847	0.981	1.003			
5	39	3.562	0.908		0.64③	0.637	I ₂
6	40	3.305	0.843	0.857			
7	41	3.072	0.783	0.799			
8	42	2.860	0.729	0.733			
9	43	2.667	0.680	0.674		0.465	IIb ₁
10	44	2.491	0.635	0.644			
11	45	2.330	0.594	0.609		0.424	IIa ₁
12	46	2.183	0.557	0.553	0.39③	0.388	I ₃
13	47	2.048	0.522	0.520			
14	48	1.924	0.491	0.487		0.348	III ₁
						0.346	III ₁
15	49	1.810	0.461	0.467		0.329	IIb ₁
						0.328	III ₁
16	50	1.704	0.435	0.444		0.313	III ₁
17	51	1.607	0.410	0.407		0.289	IIa ₂
						0.282	III ₁
18	52	1.517	0.387	0.380		0.279	III ₁
					0.28④	0.279	I ₄
19	53	1.434	0.365	0.364		0.258	III ₂
						0.251	IIb ₂
20	54	1.356	0.346	0.343	0.24*	0.240	III ₁
21	55	1.285	0.327	0.325			
22	56	1.217	0.310	0.313	0.22⑤	0.220	IIa ₂
						0.217	I ₅
23	57	1.155	0.294	0.298		0.206	III ₂
24	58	1.096	0.280	0.277	0.19*	0.203	IIb ₂
25	59	1.042	0.266	0.265			
26	60	0.991	0.253	0.250	0.18⑥	0.18	I ₆
						0.178	IIa ₂
27	61	0.944	0.241	0.242	0.17*	0.171	IIb ₂
28	62	0.899	0.229	0.231			
29	63	0.857	0.219	0.217	0.15⑦	0.151	I ₇
30	64	0.818	0.209	0.208			
31	65	0.781	0.199	0.200			

将 Δ_c 列的数值乘以相应的 $\hbar\omega_c \approx 5.59\text{cm}^{-1}$ 所得的值与 Δ_1 列 (cm^{-1}) 的值头两位完全相同。例如标号为 20 的 $\Delta_c = 0.240\hbar\omega_c = 1.337\text{cm}^{-1}$, 与同行的 $\Delta_1 = 1.356\text{cm}^{-1}$

头二位相同,其他各行也如此,因此可以认为它们都是源于同一 $\Delta_{\nu,N}$ 的

从表 2 及图 3 可看出,根据零级能量公式算得的 $\Delta_{\nu,N}$ 能描述与 FT 中大多数峰对应的间距,图中另有一部分未标号的峰,可能是其他系列的间距形成的,本文未予探讨。在图 2 中缺标号为 2,3,5 的峰,它们对应的间距分别为 $\Delta_{36,N}$ 、 $\Delta_{37,N}$ 和 $\Delta_{39,N}$, 其原因是可能该峰被另一个既高又宽的 4 号强峰所覆盖。4 号峰的横坐标为 1.003,从(4)式可知,这刚好对应于 $\Delta\nu = 0, \Delta N = 1$ 的那些间距 Δ_0 。由于具有这一间距 Δ_0 的能级对的数量很大,再加上标识为 4 的那一类间距 $\Delta_{38,N}$, 故在此处呈现一个极强的峰。

因此间距 $\sim 1\hbar\omega_c$ 的共振的两个来源,一是不随 B 变的 $\Delta_{38,N}$, 另一是正比于 B 的 Δ_0 。而间距 $\sim 1.5\hbar\omega_c$ 的共振除了与 B 成正比的 QLR 外,对于某些给定的 B 可找到一个 ν 使 $\Delta_{\nu,N} \approx 1.5\hbar\omega_c$; 如对于 $B = 4.2\text{T}, \nu = 33$, 对于 $B = 5.96\text{T}, \nu = 30$ 。因此对于这类与 B 无关的共振最好不用 $\hbar\omega_c$ 来表述而用 $\Delta_{\nu,N}(\text{cm}^{-1})$ 或 ν 来表述。

这一系列 $1.50, 0.64\hbar\omega_c$ 的共振,未必对于任何磁场都存在,例如对于 4T 的情形, $\hbar\omega_c = 3.733\text{cm}^{-1}$, 而 $1.5\hbar\omega_c = 5.60\text{cm}^{-1}$, $0.64\hbar\omega_c = 2.39\text{cm}^{-1}$, 因后者与 $\nu = 44, 45$ 的间距 2.491, 2.330 很接近,可能有 $0.64\hbar\omega_c$ 这一间距存在,而前者处于 $\nu = 33$ 和 34 的间距 5.84 和 5.34cm^{-1} 之间,和二者相差较大,因此只有 $1.5\hbar\omega_c$ 的 QLR, 没有不随 B 变的共振间距 5.60cm^{-1} 。

从表 2 还可见,文献[15]的间距大多可由(12)式得到,且符合很好。但我们得到的“共振”间距数目比它多,这一现象有待更进一步的探讨。

四、结 语

本文用文献[16,17]提出的方法计算 Na 原子 $m = -2$ 的偶宇称态的能谱和“共振”间距,并对后者作出量子力学的解释,与实验符合较好。这种方法虽然有它的缺点,例如只能描述 π, \pm 的宇称态,本征函数不严格正交,但它能对强磁场中原子的行为给出一个简单清晰的图象,能较清楚地表述 QLR, 给出近似标度律。本文又说明用它得到的能谱特征和一系列“共振”间距与实验符合较好,并对后者给予量子力学的解释。因此,这种方法在一定范围内还是比较成功的。

本文计算工作在本所 VAX-11/785 计算机上进行,并得到机房大力支持。谨此致谢。

- [1] D. Kleppner, M. G. Littman and M. L. Zimmerman, Rydberg States of Atoms and Molecules, R. F. Stebbings and F. B. Dunning eds., Cambridge University Press, London and New York, (1983), p. 73.
- [2] W. R. S. Garton and F. S. Tomkins, *Astrophys. J.*, 158(1969), 839.
- [3] D. Delande, F. Biraben and J. C. Gay, New Trends in Atomic Physics, G. Grynberg and R. Stora eds, Elsevier Science Publishing, Amsterdam, (1984), p. 351.
- [4] C. W. Clark, K. T. Lu and A. F. Starace, Prog. At. Spectrosc. Pt. C, H. J. Beyer and H. Kleinpoppen eds, Plenum, New York, (1984), p. 247.
- [5] J. C. Gay, *ibid.*, p. 177.
- [6] H. Friedrich and D. Wintgen, *Phys. Rep.*, 183(1989), 37.
- [7] J. C. Castro, M. L. Zimmerman, R. G. Hulet, D. Kleppner and R. R. Freeman, *Phys. Rev. Lett.*, 45

- (1980), 1780.
- [8] J. Main, G. Wiebusch, A. Holle and K. H. Welge, *Phys. Rev. Lett.*, **50**(1986), 2789.
- [9] A. Holle, G. Wiebusch, J. Main, K. H. Welge, G. Ziller, G. Wunner, T. Ertl and H. Ruder, *Z. Phys. D*, **5**(1987), 279.
- [10] A. R. Edmonds, *J. Phys. (France)*, **31**(1970), C4.
- [11] J. A. C. Gallas, E. Gerck and R. F. O'Connell, *Phys. Rev. Lett.*, **50**(1983), 324.
- [12] C. W. Clark and K. T. Taylor, *J. Phys. B*, **15**(1982), 1175.
- [13] D. Wintgen and H. Friedrich, *J. Phys. B*, **19**(1986), 1261.
- [14] D. Wintgen and H. Friedrich, *J. Phys. B*, **19**(1986), 991.
- [15] D. Wintgen and H. Friedrich, *Phys. Rev.*, **A36**(1987), 131.
- [16] Zhang Yu and Zhang Chengxiu, *Chinese Phys. Lett.*, **2**(1985), 329.
- [17] Zhang Yu and Zhang Chengxiu, *Commun. Theor. Phys. (Beijing, China)*, **8**(1987), 255.
- [18] D. Delande and J. C. Gay, *Phys. Lett.*, **82A**(1981), 393.
- [19] Xinghong He, Baiwen Li, Aiqiu Chen and Chengxiu Zhang, *J. Phys. B*, **23**(1990), 661.
- [20] 周风晴, 中国科学院武汉物理研究所硕士论文, (1987).
- [21] D. Wintgen and H. Friedrich, *Phys. Rev. Lett.*, **57**(1986), 571.
- [22] A. Holle, G. Wiebusch, J. Main, B. Hager, H. Rottke and K. H. Welge, *Phys. Rev. Lett.*, **56**(1986), 2594.
- [23] P. F. O'Mahony, *Phys. Rev. Lett.*, **63**(1989), 2653.
- [24] Qiaoling Wang and Chris H. Greene, *Phys. Rev.*, **A40**(1989), 742.
- [25] J. Main, A. Holle, G. Wiebusch and K. H. Welge, *Z. Phys. D*, **6**(1987), 295.
- [26] K. T. Lu, F. S. Tomkins and W. R. S. Garton, *Proc. Roy. Soc. Lond.*, **A362**(1978), 421.

SPECTRUM CHARACTERISTICS OF AN ATOM IN A STRONG MAGNETIC FIELD

HE XING-HONG ZHOU FENG-QING* LI BAI-WEN ZHANG CHENG-XIU

*Laboratory of Magnetic Resonance and Atomic and Molecular Physics, Wuhan Institute of Physics, Academia
Sinica, Wuhan 430071*

(Received 6 August 1990; revised manuscript received 19 July 1991)

ABSTRACT

A perturbation method is used to evaluate the energy levels and oscillator strengths of sodium atoms ($m = -2, \pi_2 = +$) in a strong magnetic field. The main features of the calculated spectra which lie in the strong-field-mixing regime agree well with the corresponding experimental results. Besides the conventional quasi-Landau resonance with spacing equal to $1.5\hbar\omega_c$ (ω_c is the electron cyclotron frequency) near the zero field ionization limit, a series of resonance spacings are found and analysed using the zero order energy formula and the Fourier transform technique. The values of these spacings are in consistent with other theoretical results. Based on the perturbation method, a quantum mechanical explanation for the spacings is given. These resonance spacings are independent of the applied external magnetic field.

PACC: 3260V; 3150

* Present address: National Laboratory of Laser Technology, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074.