

平行电磁场中 He_2^+ 的回归谱与闭合轨道的研究*

王晓艳† 王鹏程 冯圣平 谢晋东

(泰山医学院放射学院, 泰安 271016)

(2007 年 3 月 12 日收到, 2007 年 4 月 27 日收到修改稿)

利用半经典闭合轨道理论和分区自洽迭代方法计算了 Rydberg 态下 He_2^+ 在平行电磁场中的回归谱与闭合轨道. 为了模拟分子实的散射作用, 引入一个包含电子交换势的新势能. 利用这一新势能结合多通道量子亏损和分子闭合轨道理论, 讨论了分子实散射效应对平行电磁场中 He_2^+ 的回归谱与闭合轨道的影响.

关键词: 回归谱, 分子半经典闭合轨道, 交换势, 实散射

PACC: 0365S, 3190

1. 引 言

近年来, 高里德伯(Rydberg)态原子在强外场中的光吸收现象引起人们广泛关注, 由 Du 和 Delos 等人提出的半经典闭合轨道理论^[1,2]被普遍用来解释此现象, 该理论很好地解释了单电子原子在外场中的激发等问题^[3-7]. 但是对于多电子原子, 由于原子实的存在会使闭合轨道产生多次重复, 而且会引起电子波函数的相移(量子亏损). 在回归谱中会出现一些附加峰. 为了解释这些附加峰发展了两种方法: 一种是把原子实与里德伯电子的作用用一个短程的原子实模型势来模拟^[8]. 另一种是将研究空间分为三部分^[9,10]: 在原子实和绕原子实的库仑区域(忽略外场影响)采用量子力学处理; 在原子外采用半经典方法处理, 并且在适当地方使其对接. 关于强外场中里德伯分子的回归谱的半经典计算, 目前的研究还处于初始阶段: Matzkin 和 Monteiro 等人利用多通道量子亏损将闭合轨道理论从原子推广到分子, 并且计算了 H_2 分子在磁场中的回归谱^[11,12]. 在他们的计算过程中, 寻找闭合轨道, 仅仅考虑了库仑势的作用, 没有考虑分子实对激发态电子的作用. 本文引入一个能考虑分子实散射效应的势能计算 He_2^+ 在平行电磁场中的回归谱和闭合轨道.

2. 理论与方法

对于 He_2^+ , 三个电子处于两个能级上, 最外层的一个电子激发到 Rydberg 态后, 剩下的两个电子与 Rydberg 态电子还存在复杂的相互作用. 在原子单位制中, 处于外加的沿 z 轴的平行电磁场中, Rydberg 态电子的 Hamiltonian 量可以写为

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{\gamma}{2} l_z + \frac{1}{8} \gamma^2 (x^2 + y^2) + Fz + B_r N^2 + V(r), \quad (1)$$

其中 $\gamma = B/2.35 \times 10^5$ (B 是磁场强度), F 是电场强度, $B_r = 2.6522 \times 10^{-4}$ a.u. 是核的转动常数. $V(r_1)$ 是处在位置 r_1 处 Rydberg 态电子与其余部分的相互作用, 其形式为^[13]

$$V(r_1) = V_{r_1} + V_{es} + V_{ex}, \quad (2)$$

$$\text{其中, } V_{r_1} = - \sum_A \frac{z_A}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_A|},$$

z_A 是原子核 A 的电荷数, \mathbf{r}_1 和 \mathbf{R}_A 表示 Rydberg 态电子和第 A 个原子核的坐标. V_{es} 表示 Rydberg 态电子与其余电子之间的相互作用, 它的表示形式为

$$V_{es} = \int \frac{\rho(r_2)}{r_{12}} dr_2,$$

$\rho(r_2)$ 为其余电子的态密度. r_{12} 为 Rydberg 态电子与其余电子的相对距离. V_{ex} 是具有 α 自旋的电子与其余具有 α 自旋的电子之间的交换作用, 其形式为

* 泰山医学院基金(批准号 029)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail: xywjxc@126.com

$$V_{\text{ex}} = - \frac{\sum_i \sum_j n_{ia} n_{jb} \phi_i(r_2) \phi_j^*(r_2)}{\sum_i n_{ia} \phi_i(r_1) \phi_j^*(r_1)} \times \int \frac{\phi_i(r_2) \phi_j^*(r_2)}{|r_1 - r_2|} dr_2,$$

$\phi_i(r)$ 是第 i 条轨道的波函数.

本文采用标度能量谱方法,引入标度变换 $\tilde{r} = r\gamma^{2/3}$, $\tilde{p} = p\gamma^{-1/3}$, $\tilde{\epsilon} = E\gamma^{-2/3}$, $\tilde{f} = F\gamma^{-4/3} = 0.01$, $\tilde{t} = t\gamma$ 和 $\tilde{B} = B_r\gamma^{-2/3}$ 后,得到标度后的 Hamiltonian 为

$$\tilde{H} = \frac{\tilde{p}^2}{2} + \frac{1}{2} \tilde{l}_z + \frac{1}{8} \tilde{\rho}^2 + \tilde{f} \tilde{z} + \tilde{B}_r N^2 + V(\tilde{r}), \quad (3)$$

其中 $\tilde{l}_z = \tilde{x} \tilde{p}_y - \tilde{y} \tilde{p}_x$.

略去“ \sim ”并把 \tilde{H} 写为 ϵ , 我们可以得到标度 Hamiltonian 为

$$\epsilon = \frac{p^2}{2} + \frac{1}{2} l_z + \frac{1}{8} \rho^2 + fz + B_r N^2 + V(r). \quad (4)$$

考虑到激发态电子的动力学性质,我们把研究空间分为 3 个区域: 1) 分子实区域,在该区域激光场和分子实的作用存在而外场可以忽略,电子的动力学和分子实的转动相耦合; 2) 绕核库仑区域,激发态电子的动力学特性主要由离子实的库仑力所决定; 3) 外部区域,外场的影响和离子实的库仑力作用相当,在这一区域,分子的波函数用未耦合的结构描述. 我们的方法是在分子实和分子实周围的库仑区域用量子力学的方法处理,在库仑区域和外部区域用半经典方法解决,然后在两种方法都适用的库仑区域将两个解进行对接.

光吸收率的振荡部分 $F(\gamma, \epsilon)$ 可以表示为

$$F(\gamma, \epsilon) = 2^{19/4} \pi^{3/2} \sum_j \sum_\alpha \sum_{\alpha'} \text{Im} \left\{ \alpha | j \right. \\ \times C_\alpha C_{\alpha'} e^{i\pi(u_\alpha + u_{\alpha'})} j | \alpha' \sum_k \tilde{R}_k^j(\epsilon_j) \\ \left. + \hbar_{\text{eff}}^{1/2} 2^{11/4} \pi^{3/2} \sum_j \left[j' | \alpha' T_{j'j} \sum_k \tilde{R}_q^j(\epsilon_f) \right. \right. \\ \left. \left. \times \sum_q \tilde{R}_q^j(\epsilon_f) \right] \right\}, \quad (5)$$

$\hbar_{\text{eff}} = \gamma^3 \hbar$, \tilde{R}_k^j 可用经典的标度变量 $\tilde{s}_k^j = \hbar_{\text{eff}} s_k^j / 2\pi\hbar$ 和 $\tilde{r}_f A_k^j = 12^{1/2} \cos(\theta_{ik}/2) \cos(\theta_{jk}/2) m_{12} |^{-1/2}$ 描述,

$$\tilde{R}_k^j(\epsilon_f) = | \sin\theta_{ik} \sin\theta_{jk} |^{1/2} \\ \times \sum_{l_f'} (-1)^{l_f'+l_f} Y_{l_f', m_f'}(\theta_{ik}) Y_{l_f', m_f'}^*(\theta_{jk}) \\ \times \tilde{r}_f^{1/4} A_k^{N_f m_f'}(r_f, \theta_{jk}) \\ \times \exp(i(2\pi\tilde{s}_k^{N_f m_f'} / \hbar_{\text{eff}} - w_k^{N_f m_f'} \pi / 2 - 3\pi/4)),$$

其中 $l_f, l_f' \geq |m_f|$, $m_f = m_f, m_{12}$ 是半抛物坐标系下的单值矩阵元^[14], θ_{ik} 和 θ_{jk} 是第 k 条闭合轨道相对于磁场方向的初始和返回角. 傅里叶变换回归谱在 $[z_1, z_2]$ 间隔内进行计算,令 $z = \gamma^{-1/3}$, $\bar{z} = \frac{1}{2}(z_1 + z_2)$ 及 $\Delta z = z_1 - z_2$ 得到

$$F(\bar{z}) = \left| \frac{1}{\Delta z} \int_{z_1}^{z_2} F(\gamma, \epsilon) e^{2\pi i \bar{z} (z - \bar{z})} dz \right|^2. \quad (6)$$

3. 结 果

利用(6)式,在图 1—4 中我们列出了核间距在

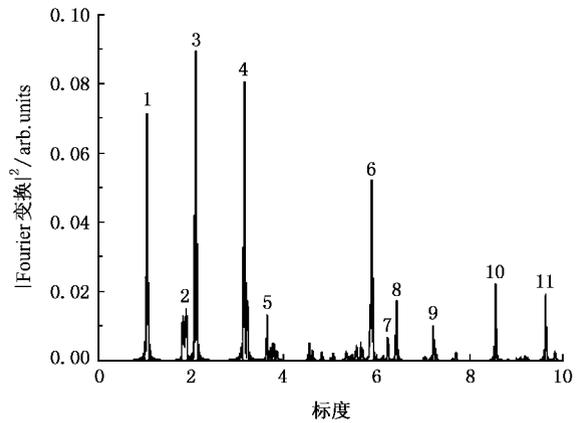


图 1 He₂⁺ 在平行电磁场中没有量子亏损情况下的常标度变化下的 Fourier 变换谱 ($\epsilon_{N=0} = -0.3$, $\epsilon_{N=2} = -0.8$, $f = 0.01$, $\gamma^{-1/3} \equiv 60-120$)

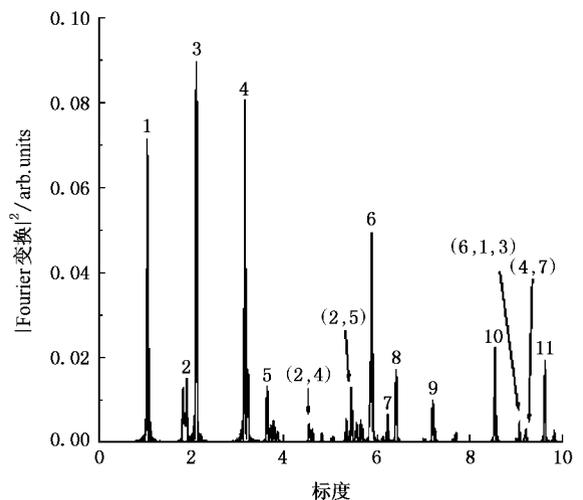


图 2 He₂⁺ 在平行电磁场中在量子亏损 $\mu_\Sigma = \mu_\pi = 0.5$ 下的常标度变化下的 Fourier 变换谱 ($\epsilon_{N=0} = -0.3$, $\epsilon_{N=2} = -0.8$, $f = 0.01$, $\gamma^{-1/3} \equiv 60-120$)

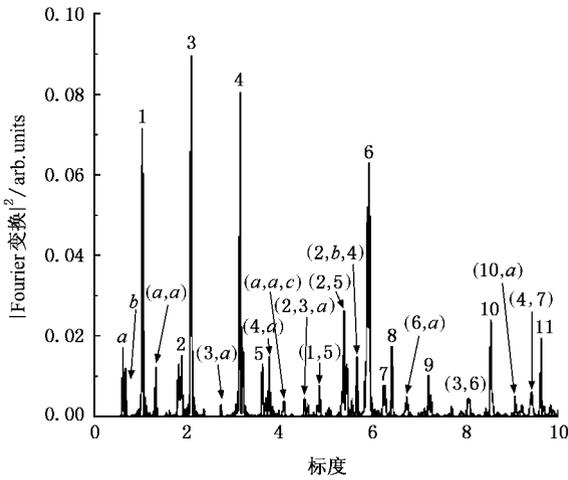


图3 He_2^+ 在平行电磁场中在量子亏损 $\mu_\Sigma = 0.5, \mu_\pi = 0$ 下的常标度变化下的 Fourier 变换谱($\epsilon_{N=0} = -0.3, \epsilon_{N=2} = -0.8, f = 0.01, \gamma^{-1/3} \cong 60-120$)

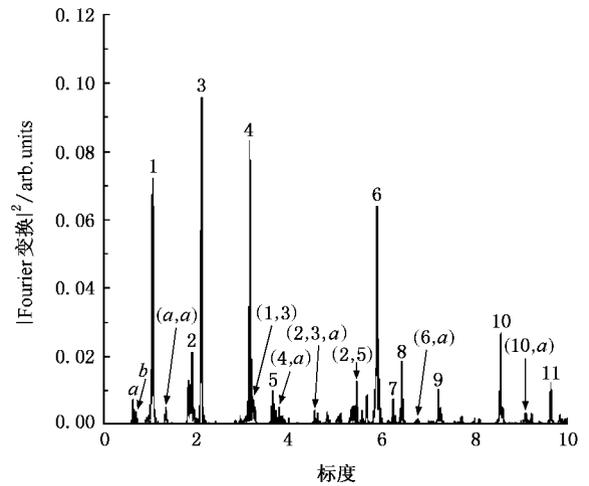


图4 He_2^+ 在平行电磁场中在量子亏损 $\mu_\Sigma = -0.2427, \mu_\pi = 0.01943$ 下的常标度变化下的 Fourier 变换谱($\epsilon_{N=0} = -0.3, \epsilon_{N=2} = -0.8, f = 0.01, \gamma^{-1/3} \cong 60-120$)

平衡位置($R = 2.0431 \text{ a. u.}$)的具有不同量子亏损的 Rydberg 态分子离子在 $B_r = 0, \epsilon_{N=0} = -0.3$ 和 $\epsilon_{N=2} = -0.8, f = 0.01, \gamma^{-1/3} \cong 60-120$ 条件下的部分闭合

轨道和回归谱. 回归谱中每一条尖峰代表一条经典闭合轨道的贡献; 实散射的贡献对应着轨道之间的组合. 图中的整数表示主要的闭合轨道(1, 2, 3, ...

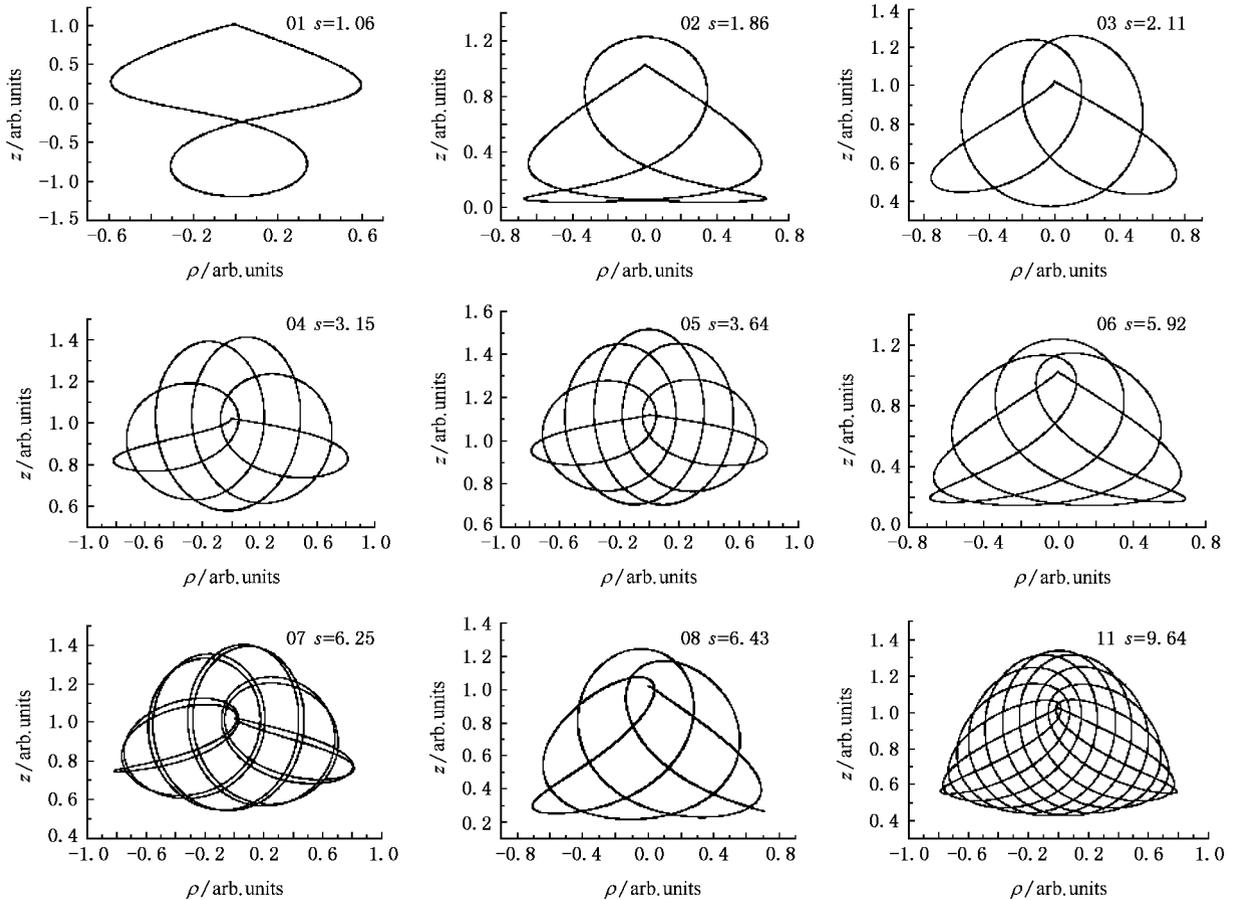


图5 相应于图1的部分闭合轨道(s 是标度作用量)

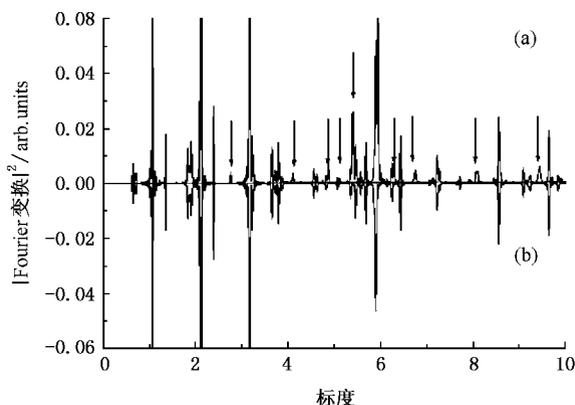


图 6 He_2^+ 在平行电磁场中在量子亏损 $\mu_\Sigma = -0.2427$, $\mu_\pi = 0.01943$ 下的常标度变化下的 Fourier 变换谱(其中 $\epsilon_{N=0} = -0.3$, $\epsilon_{N=2} = -0.8$, $f = 0.01$, $\gamma^{-1/3} \approx 60-120$. 用箭头标注的峰是由于分子实散射造成的) (a) 包含交换势 (b) 不包含交换势

对应着 $\epsilon_{N=0} = -0.3$ 的闭合轨道, a, b, c, \dots 对应着 $\epsilon_{N=2} = -0.8$ 的闭合轨道) 标注为(1 2) 的尖峰对应的是轨道 1, 轨道 2 经过一次实散射的组合 (1 2 3) 为轨道 1, 2, 3 经过两次实散射的组合. 图 5 给出了相应的闭合轨道. 为了表示电子之间的交换势对回归谱的影响. 图 6 中我们讨论了在 $\mu_\Sigma = -0.2427$,

$\mu_\pi = 0.01943$, $\epsilon_{N=0} = -0.3$, $\epsilon_{N=2} = -0.8$ 的回归谱. 通过(a)和(b)的比较我们发现考虑实散射后闭合轨道数目有所增加.

4. 讨 论

本文通过计算平行电磁场中 He_2^+ 的闭合轨道和回归谱, 把闭合轨道理论推广到多电子体系的分子离子情况, 进一步验证了闭合轨道理论的正确性. 在计算过程中我们考虑了分子实散射以及电子之间的交换作用对吸收谱的影响, 对于分子中原子核之间距离的变化对回归谱的影响, 我们将进一步研究.

从理论上说, He_2^+ 作为一个准分子体系是比 H_2 稍微复杂的重要体系, 是研究分子实散射对回归谱影响的一个重要体系, 对以后研究更复杂的分子体系具有重要的参考价值. 从结构上说, He_2^+ 三个电子处于两个能级上, 最外层的一个电子激发到 Rydberg 态后, 剩下的基态的两个电子与激发态电子还存在复杂的相互作用. 这种复杂性使得 He_2^+ 这个体系的精确计算与实验研究至今仍是一个难题. 希望本结果能对未来研究有所帮助.

- [1] Du M L, Delos J B 1988 *Phys. Rev. A* **38** 1896
 [2] Du M L, Delos J B 1988 *Phys. Rev. A* **38** 1913
 [3] Du M L 1989 *Phys. Rev. A* **40** 1330
 [4] Du M L 1988 *Phys. Rev. A* **38** 5609
 [5] Song X H, Zhang Q J, Lin S L 2002 *Chin. Phys.* **11** 7
 [6] Wang D H, Lin S L 2004 *Chin. Phys.* **13** 464
 [7] Song X H, Lin S L 2003 *Acta Phys. Sin.* **52** 1611 (in Chinese)
 [宋晓红、林圣路 2003 物理学报 **52** 1611]

- [8] Hupper, Main J, Wunner G 1995 *Phys. Rev. Lett.* **74** 2650
 [9] Dando P A, Monteiro T S, Deland D, Taylor K T 1996 *Phys. Rev. A* **54** 127
 [10] Wang D H, Ding S L 2004 *Chin. Phys.* **13** 30
 [11] Matzkin A, Monteiro T S 2001 *Phys. Rev. Lett.* **87** 143002
 [12] Matzkin A, Dando P A, Monteiro T S 2002 *Phys. Rev. A* **66** 13410
 [13] Wang D H, Ding S L 2005 *Phys. Rev. A* **71** 13420
 [14] Matzkin A 1999 *Phys. Rev. A* **59** 2043



Recurrence spectra and closed orbits of He_2^+ in parallel electric and magnetic fields ^{*}

Wang Xiao-Yan[†] Wang Peng-Cheng Feng Sheng-Ping Xie Jin-Dong

(*Department of Radiology, Taishan Medical School, Tai'an 271016, China*)

(Received 12 March 2007 ; revised manuscript received 27 April 2007)

Abstract

By the semi-classical closed orbit theory and region-splitting consistent iteration method, we calculated the recurrence spectra and closed orbits of He_2^+ in parallel electric and magnetic fields. Using the new potential with electronic exchange interaction, complex channel quantum defects and molecular closed orbits theory, we discussed the influence of molecular core to the recurrence spectra and closed orbits.

Keywords : recurrence spectra, molecular semi-classical closed orbits, exchange potential, core scattering

PACC : 0365S, 3190

^{*} Project supported by the Taishan Medical College Foundation (Grant No. 029).

[†] E-mail : xywjxc@126.com