

## 外电场中金属表面附近里德堡氢原子的动力学行为\*

李洪云<sup>†</sup> 岳大光 梁志强 伊长虹 陈建中

(山东交通学院理学院, 济南 250357)

(2012年12月24日收到; 2013年6月27日收到修改稿)

利用相空间分析方法研究了外电场中金属表面附近里德堡氢原子的动力学性质. 结果表明, 体系的动力学性质敏感地依赖于原子与金属表面间的距离和电场强度. 通过固定原子与金属表面间的距离, 分析了外加电场作用下里德堡电子的 Poincaré 截面和运动轨迹的演化过程. 研究表明: 电场的出现加速了金属表面对电子的吸附, 随着电场强度的增加, 体系的动力学性质由原子与金属表面间的距离控制逐渐变为由电场起主导作用, 体系逐渐由不可积变为可积, 电子的运动轨道最终全部变为振动型轨道.

关键词: Poincaré 截面, 相空间分析方法, 里德堡氢原子

PACS: 34.35.+a, 05.45.Mt, 03.65.Sq

DOI: 10.7498/aps.62.203401

## 1 引言

金属表面附近的里德堡体系是一个非常重要的理论模型, 近年来受到研究者的广泛关注, 许多物理学家从实验上、理论上采用多种方法对其加以研究<sup>[1-6]</sup>. 由于里德堡电子距离原子核较远, 金属表面与原子间的距离很大程度上影响了体系的动力学性质, 当金属表面与原子间的距离较近时, 体系变得较为复杂. 金属表面附近的里德堡体系可以描述瞬态的偶极相互作用的 van der Waals 力<sup>[7,8]</sup>; 可以模拟强磁场中的抗磁效应和强电磁场中的 Stark-Zeeman 效应<sup>[9]</sup>. 当里德堡原子处于金属表面附近, 如果再加上一个稳恒的电场后, 问题会变得更为复杂, 体系的动力学性质敏感地依赖于金属表面和电场的共同作用. Nordlander 和 Dunning<sup>[10]</sup> 运用从头计算方法研究了在外加电场情况下里德堡原子与金属表面的相互作用. Nedeljkovic<sup>[11]</sup> 研究了弱电场下里德堡电子在金属表面附近的电离距离. Wang 和 Wu<sup>[12]</sup> 利用闭合轨道理论分析计算了该体系的回归谱. 本文运用相空间分析方法, 研究了金属表面附近外加的电场对体系动力学性质的影响, 通过分析 Poincaré 截面的变

化、轨道的演变, 说明了金属表面和电场共同作用下的里德堡氢原子的动力学性质.

## 2 理论与方法

如图 1 所示, 假设氢原子核位于坐标原点, 电子与核之间的距离为  $r$ , 金属表面垂直于  $z$  轴, 且  $z = -d$ ,  $d$  为金属表面与原子核间的垂直距离, 电场垂直于金属表面, 且方向沿  $z$  轴正方向. 对于金属表面对里德堡电子的影响, 本文应用静电镜像理论<sup>[13]</sup>, 体系的哈密顿量有动能和势能两部分组成, 可以写为 (除特别说明外, 本文中各量均采用原子单位):

$$H = \frac{p^2}{2} + U(\rho, z), \quad (1)$$

其中, 第一项  $\frac{p^2}{2}$  为动能项, 采用柱坐标系,  $p^2 = p_\rho^2 + \frac{l_z^2}{\rho^2} + p_z^2$ , 第二项  $U(\rho, z)$  为势能项, 具体写为

$$U(\rho, z) = -\frac{1}{r} + \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (2d+z)^2}} - \frac{1}{4(d+z)} + Fz, \quad (2)$$

\* 国家自然科学基金 (批准号:10774093) 和山东交通学院博士基金资助的课题.

<sup>†</sup> 通讯作者. E-mail: li5776@163.com

上式中,  $r = (\rho^2 + z^2)^{1/2}$ ; 第一项为库仑势; 第二、三项由金属表面引起, 称为镜像势, 这里忽略了镜像势的高阶项; 最后一项为电场的作用. 由于轴对称性, 角动量的  $z$  分量  $l_z$  是守恒量, 本文只考虑  $m = 0$  态, 即  $l_z = 0$  的情况, 则体系的哈密顿量变为

$$H = \frac{p_\rho^2 + p_z^2}{2} - \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + z^2}} + \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (2d+z)^2}} - \frac{1}{4(d+z)} + Fz. \quad (3)$$

为消除奇异性, 引入半抛物坐标  $u^2 = r + z$ ,  $v^2 = r - z$ ,  $P_u = du/d\tau$ ,  $P_v = dv/d\tau$ , 此时新的时间变量变为  $d\tau = \frac{1}{u^2 + v^2} dt^{[14]}$ . 由 (3) 式可以得到

$$h = \frac{1}{2}(p_u^2 + p_v^2) - E(u^2 + v^2) + \frac{2(u^2 + v^2)}{\sqrt{(u^2 + v^2)^2 + 8(u^2 - v^2)d + 16d^2}} - \frac{u^2 + v^2}{2(2d + u^2 - v^2)} + \frac{1}{2}F(u^4 - v^4) = 2, \quad (4)$$

式中  $h$  称为贖能, 恒为固定的常数 2. 里德堡电子所有的运动轨道是贖能恒等于 2 的情况下随着有效势演化的. 通过上式可以看出, 经过半抛物变换后, 库仑奇点已被消除.

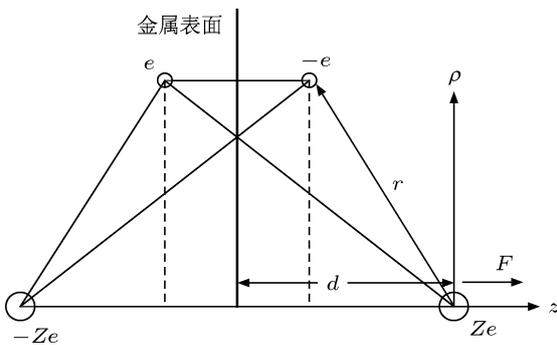


图 1 在电场中距离金属表面距离为  $d$  的氢原子及其静电像模型

研究表明, 通过观察相空间的 Poincaré 截面可以分析体系的动力学性质. 在相空间中适当选取一截面, 在此截面上取某一对共轭变量为固定值, 相空间的连续轨迹与截面的交点称为截点, 截点组成了 Poincaré 截面. 当 Poincaré 截面上有且只有一个不动点或少数离散点时, 运动是周期的; 当 Poincaré 截面上是一封闭曲线时, 运动是准周期的; 当 Poincaré 截面上是一些成片的具有分形结构的密集点时, 运动便是混沌的. 相空间分析方法是分

析体系动力学性质的有效方法之一. 对于两个自由度的四维相空间哈密顿体系, 给定电子的能量后, 经典运动会局限在一个三维的能壳中. 取  $u, v$  之一为某个固定值时, 得到二维 Poincaré 截面. 因为是二维截面, 所以很容易分析其性质, 通常有很多方法选取截面, 本文采用 (4) 式的哈密顿量, 选取  $p_v > 0, u = 0$ , 从而获得关于  $v, p_v$  的 Poincaré 截面. 此时截面的边界可以通过下式获得:

$$p_v^2 - 4 - 2Ev^2 + \frac{4v^2}{4d - v^2} - \frac{v^2}{2d - v^2} - Fv^4 = 0. \quad (5)$$

从上式可以看出, 如果固定了电子的能量  $E$ , 则截面边界是由金属表面与原子间的距离  $d$  和外加电场  $F$  共同决定的. 当边界形状呈椭圆状时, 边界是闭合的, 说明里德堡电子只能在椭圆范围内存在, 不存在电子被吸附的现象. 当截面的边界呈开放型时, 说明里德堡电子有可能被金属表面吸附. 边界的开口越大, 被吸附的概率也越大.

### 3 计算结果与分析

自由的氢原子是可积体系, 单纯电场中的氢原子也是可积的; 但对于金属表面附近的氢原子而言, 由于镜像势的影响, 体系受金属表面的作用, 体系不再是可积的. 当原子与金属表面的距离较远时, 镜像势的影响较小, 体系是近可积的; 但当原子与金属表面间的距离较近时, 里德堡电子受金属表面的影响较大, 电子可能会被金属表面吸附, 从而体系变为混沌状态. 本文假设连续激光将氢原子从基态激发到  $n = 25$  的里德堡态. 当电场强度  $F = 0$ , 即氢原子只处于金属表面附近时, 通过计算得到金属表面与原子间的临界距离  $d_c = 1865$  a.u.<sup>[15]</sup>, 此时镜像势和库仑势的影响相当. 当原子与金属表面间的距离  $d > d_c$  时, 镜像势的作用较小, 里德堡电子被束缚于核周围. 当  $d < d_c$  时, 镜像势的作用大于库仑势的影响, 里德堡电子可能被金属表面吸附. 当原子与表面间的距离恰好为临界距离, 即  $d = d_c = 1865$  a.u. 时, 刚好没有吸附行为, 截面边界是呈椭圆型的闭合状态, 如果在  $d = 1865$  a.u. 时外加电场, 电场会对里德堡电子的动力学性质有一定的影响. 图 2 给出了当  $d = 1865$  a.u. 时不同电场作用下的 Poincaré 截面, 图中虚线表示边界线. 从图中可以看出, 加了电场后, 原本闭合的边界线呈开放性, 说明有电子被吸附, 但开口较小, 说明电子被吸附的概率不大, 而且随着电场的逐渐增加, 开

口有轻微的增大, 说明吸附概率增大. 因为电场方向沿  $z$  轴正方向, 电子受到的电场力是朝向金属表面的, 电场力会加速金属表面对电子的吸附, 电场强度越大, 电子越容易被吸附, 边界因此呈开放型,

这一点从势能曲线上也可以看出. 图 3 给出了当  $d = 1865$  a.u. 时, 电场强度分别为 0 和 60 V/cm 时的等势线图. 为了方便对比, 两图中相对应的每条线的势能大小都相等. 从图中可以看出, 电场强度

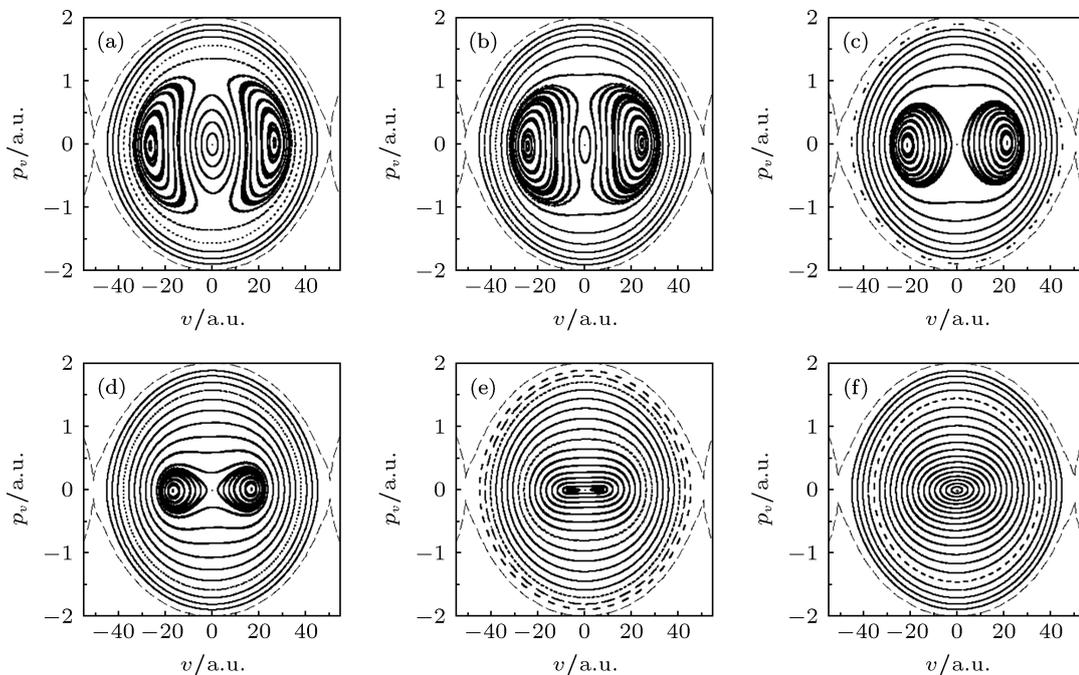


图 2  $d = 1865$  a.u. 时不同电场下的 Poincaré 截面的演化 (a)  $F = 10$  V/cm; (b)  $F = 20$  V/cm; (c)  $F = 30$  V/cm; (d)  $F = 40$  V/cm; (e)  $F = 50$  V/cm; (f)  $F = 60$  V/cm

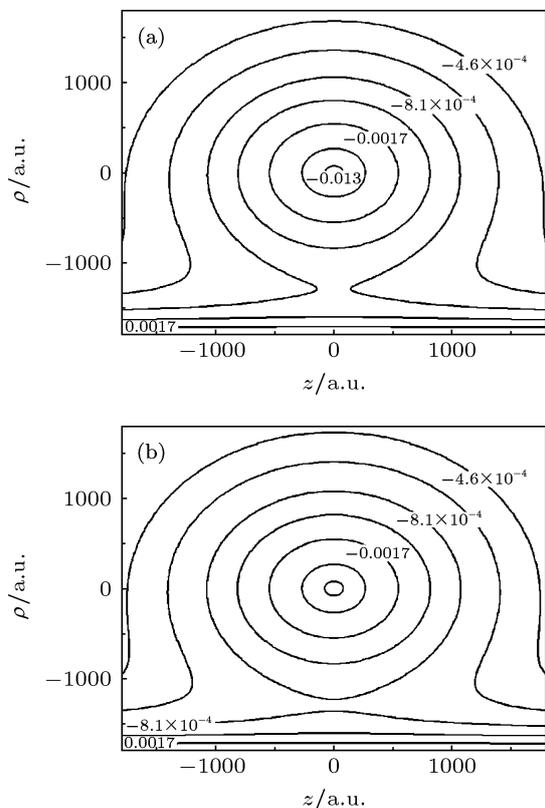


图 3  $d = 1865$  a.u. 时不同电场下的等势线 (a)  $F = 0$ ; (b)  $F = 60$  V/cm

轻微地改变了该体系的等势线, 当然, 如果继续加大电场强度, 会有更大的差别. 观察图 2 中 Poincaré 截面随电场强度变化的演化过程发现, 当电场强度较小时, 电场力影响较小, 电子主要是受镜像势和库仑势的作用, 其截面呈现图 2(a) 的形式, 与不存在外加电场时几乎相同 [15], 除固定点外, 截面主要由一个个封闭的曲线组成, 说明体系做周期运动或者准周期运动. 截面中的截点由两种类型的轨道截点组成, 最外圈的圆环和中心圆环为振动型轨道截点, 但振动方向不同, 外圈的轨道沿负  $z$  轴方向, 中心点附近的轨道沿正  $z$  轴方向, 在两振动轨道中间的左右对称的扁环为转动型轨道截点. 为便于比较分析, 图 2(a)—(f) 中除电场强度不同外, 其他参数均相同, 即每一个截面对应相同的初始条件  $(u, v)$ , 每个截面图均由 20 个轨道的截点组成. 从图中可以看出, 由于外加电场强度的方向沿  $z$  轴正方向, 随着电场强度的逐渐增大, 电子受沿负  $z$  轴方向的电场力增大, 沿正  $z$  轴方向的振动轨道在电场力的作用下逐渐变为转动轨道, 所以 Poincaré 截面图中中心部分圆环逐渐变少并且消失; 同时, 处于较外层的转动轨道在电场力的作用下, 轨道类型也发生了

变化, 逐渐变为外层的振动轨道 (图 2(b)—(e)); 随着电场强度的进一步增大, 所有的轨道全部变为了振动轨道 (图 2(f)). 此时金属表面的作用可以忽略,

里德堡电子主要受到电场的作用, Poincaré 截面变成一个规则的椭圆环, 整个体系近似变为可积体系.

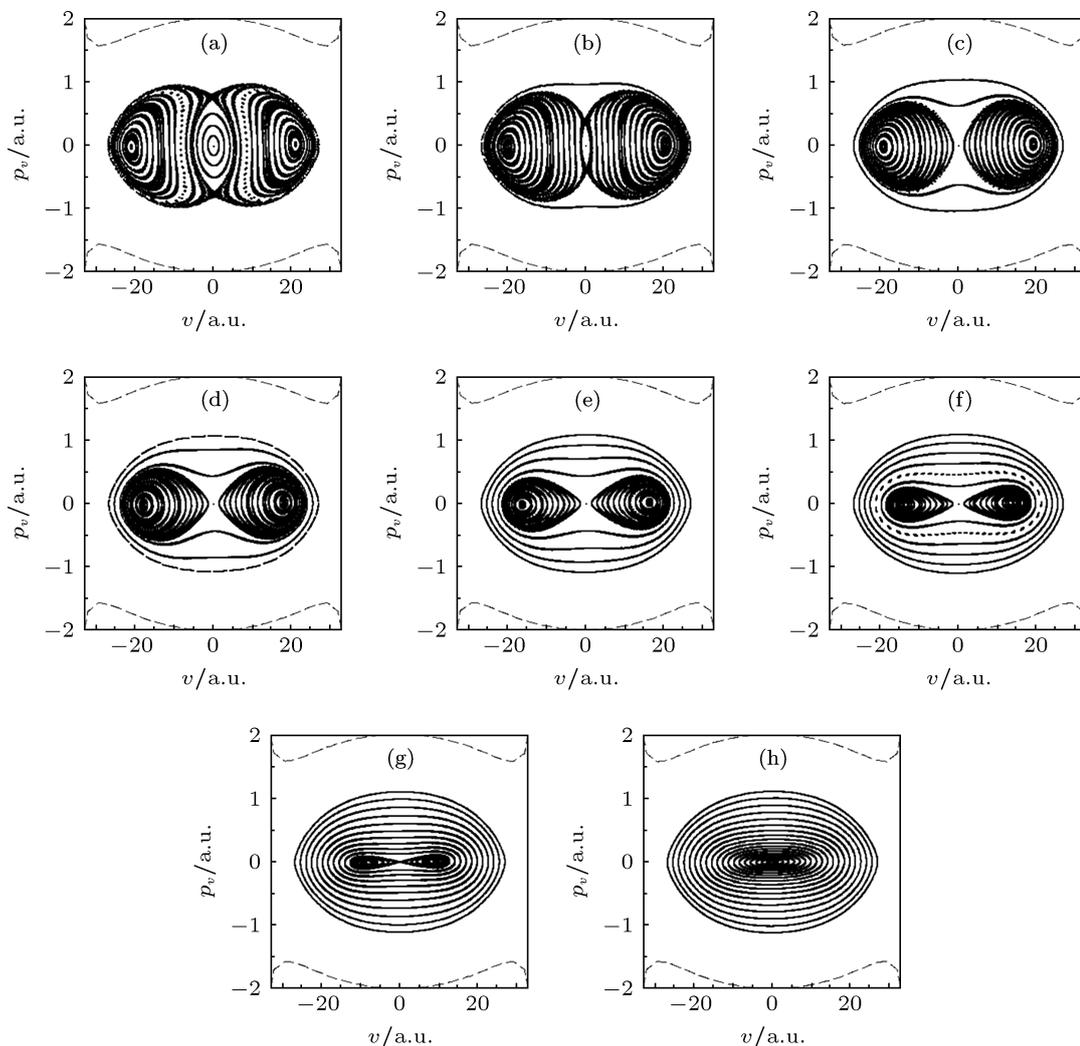


图 4  $d = 700$  a.u. 时不同电场下的 Poincaré 截面的演化 (a)  $F = 50$  V/cm; (b)  $F = 100$  V/cm; (c)  $F = 150$  V/cm; (d)  $F = 200$  V/cm; (e)  $F = 250$  V/cm; (f)  $F = 300$  V/cm; (g)  $F = 350$  V/cm; (h)  $F = 400$  V/cm

为了进一步体现电场对体系动力学性质的影响, 图 4 给出了当原子与金属表面间的距离  $d = 700$  a.u. 时不同电场强度的 Poincaré 截面的变化过程. 当  $d = 700$  a.u.,  $F = 0$  时, 镜像势的作用远远大于库仑势的作用, 里德堡电子会被金属表面吸附. 从文献 [15] 中的 Poincaré 截面可以看出, 此时在双曲固定点附近出现密集的有些杂乱的截点, 说明体系出现混沌现象. 而添加外电场后, 因为外电场的作用, 从图 4(a) 中可以看出, Poincaré 截面在双曲固定点附近没有密集的截点, 呈现较规则的状态, 混沌现象消失, 体系的运动是准周期的. 为了便于分析比较, 和图 2 相同, 图 4(a)—(f) 中除电场强度不同外, 选取的其他参数均相同, 每个截面

图也是由 20 个轨道的截点组成. 但由于原子与金属表面间距离比较近, 里德堡电子受金属表面的影响较大, 所以必须增加电场强度的大小才能看出电场的影响, 因此图 4 中  $d = 700$  a.u. 时所加的电场比图 2 中  $d = 1865$  a.u. 时加的电场大很多. 当  $F = 50$  V/cm,  $d = 1865$  a.u. 时的 Poincaré 截面已经几乎完全变为规则的 (图 2(e)), 此时电场已起主要作用; 而当  $F = 50$  V/cm,  $d = 700$  a.u. 时, 体系还是相对复杂的 (图 4(a)), 此时金属表面的影响较大. 图 2 和图 4 相比较, Poincaré 截面的变化趋势是相同的, 随着电场强度的增加, 电场逐渐起主要作用, 截面的形状发生同样的变化, 轨道也发生同样的变化, 体系慢慢由不可积变为近可积, 最后直至可积体系.

但图 4 相比于图 2, 图 4 中的分界线呈较大的开放型, 而且出现较大的空白处, 称为捕获区, 电子不可能进入该区域, 这是因为当金属表面距离氢原子较近时, 由于较强的镜像势作用, 电子会被金属表面吸附. 图 4(a) 中, Poincaré 截面存在 5 个固定点, 三个稳定的椭圆固定点和两个不稳定的双曲固定点.

随着电场强度的逐渐增大, 除中心固定点之外, 其他固定点的位置都向中心靠拢, 首先是上下方的双曲固定点消失, 如图 4(c) 所示, 然后两侧的椭圆固定点也逐渐消失, 最后只剩下中心的椭圆固定点, 如图 4(h) 所示, 此时的 Poincaré 截面也成为电场完全控制状态下的情形.

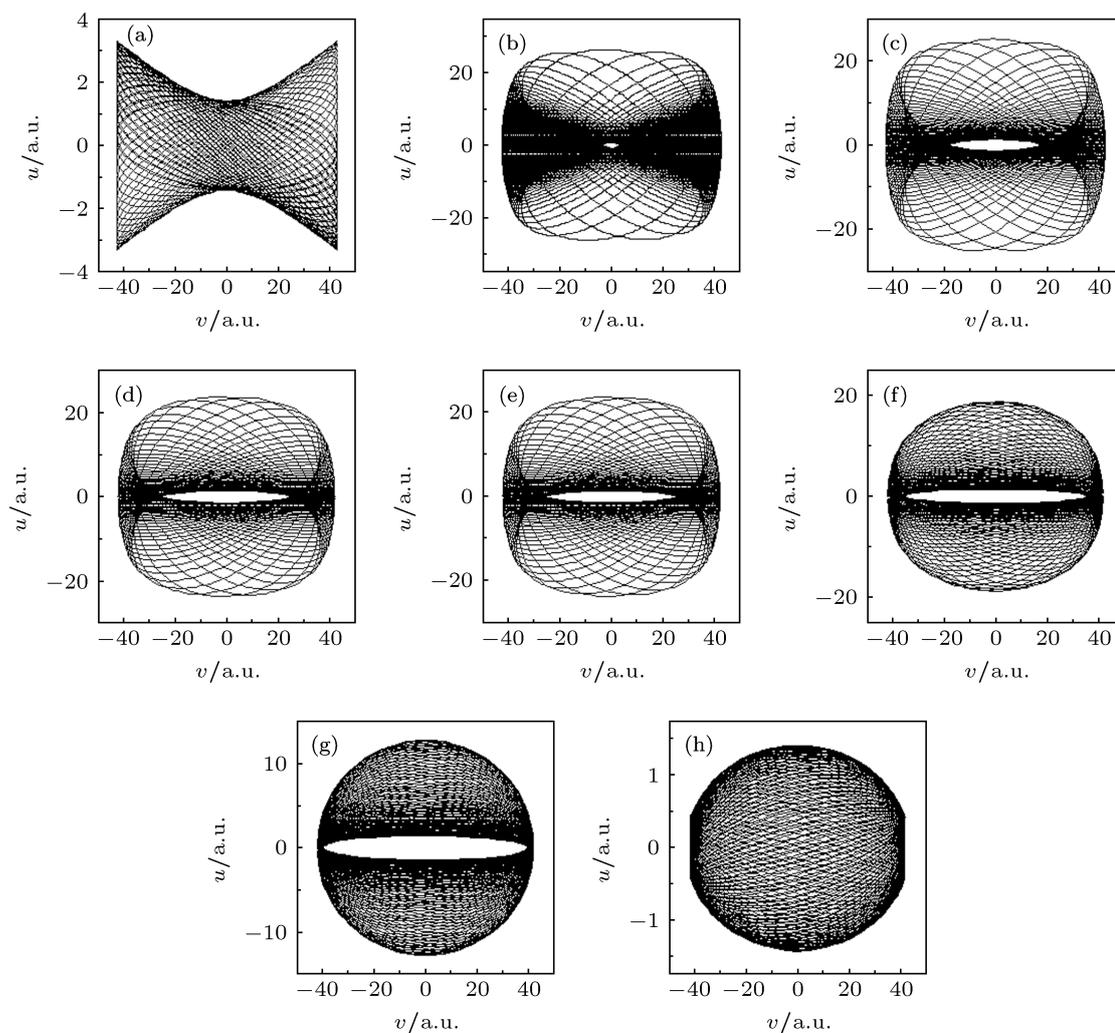


图 5  $d = 700$  a.u. 时不同电场下的轨迹的演化 (a)  $F = 50$  V/cm; (b)  $F = 100$  V/cm; (c)  $F = 150$  V/cm; (d)  $F = 200$  V/cm; (e)  $F = 250$  V/cm; (f)  $F = 300$  V/cm; (g)  $F = 350$  V/cm; (h)  $F = 400$  V/cm

通过图 4 各图的 Poincaré 截面比较, 可以看出电场的变化对 Poincaré 截面影响较大, 同时也说明电场对电子运动轨迹的影响较大. 下面通过其中一条轨道的轨迹变化进一步说明电场的影响. 图 5 给出了当  $d = 700$  a.u., 初始点为  $u = 0, v = 1.421052632$  时, 不同电场作用下的电子运行轨道, 即图 4 中除中心点外第一个截面的运动轨道. 当  $F = 50$  V/cm 时, 图 4(a) 中表现为椭圆状截面, 处于中心处附近, 轨道是典型的振动轨道 (图 5(a)), 由于金属表面与原子核之间的距离较近, 影响较大,

所以运动范围特别小,  $u$  轴方向上不超过 4 a.u.. 随着电场的逐渐增加, 外场和镜像势的共同作用使轨道发生明显的变化, 当  $F = 100$  V/cm 时, 截面变为双曲分界线 (图 4(b)), 图形变为转动轨道 (图 5(b)), 运动的范围变大,  $u$  轴方向已经超过 20 a.u.. 随着电场的进一步增加, 轨道一直为转动轨道, 但由于受电场力的影响, 运动的范围逐渐变小, 而且图形中间空白区域越来越大, 直到  $F = 400$  V/cm 时, 截面又变为椭圆环状 (图 4(h)), 轨道又变成了振动轨道 (图 5(h)), 此时运动范围变得非常小,  $u$  轴方向上不

到 2 a.u., 这是由于强电场的作用, 电子被束缚于很小的范围内振动, 此时整个 Poincaré 截面也全部变成规则的椭圆环状 (图 4(h)), 电场完全控制着体系的动力学性质, 体系做规则运动.

## 4 结论

本文通过相空间分析方法研究了金属表面和电场共同作用下里德堡氢原子的动力学行为. 研究表明: 金属表面和电场共同影响着体系的动力学行为, 在它们的共同作用下, Poincaré 截面形状不

同, 电子的轨迹演化不同; 当电场强度比较小时, 体系的动力学性质类似于金属表面附近的动力学性质; 当电场强度足够大时, 整个体系的动力学行为类似于纯电场的行为, Poincaré 截面呈现规则的圆环状, 体系也变成规则的; 当固定金属表面与原子间的距离, 电场加速了金属表面对电子的吸附; 随着电场的增大, 轨道类型发生着振动、转动之间的转换, 最终所有的轨道均为振动型轨道. 本文的研究可以对外场中里德堡原子体系的实验研究提供一定的理论基础.

- 
- [1] Landragin A, Courtois J Y, Labeyrie G, Vansteenkiste N, Westbrook C, Aspect A 1996 *Phys. Rev. Lett.* **77** 1464
  - [2] Iñarrea M, Salas J P, Lanchares V 2002 *Phys. Rev. E* **66** 056614
  - [3] Wang D H 2007 *Chin. Phys.* **16** 692
  - [4] Yang H F, Wang L, Liu X J, Liu H P 2011 *Chin. Phys. B* **20** 063203
  - [5] Tang T T, Wang D H, Huang K Y, Wang S S 2011 *Chin. Phys. B* **20** 063205
  - [6] Wang D H, Huang K Y 2010 *Chin. Phys. B* **19** 063402
  - [7] Salas J P, Simonovic N S 2000 *J. Phys. B* **33** 291
  - [8] Ganesan K, Taylor K 1996 *J. Phys. B* **29** 1293
  - [9] Salas J P, Deprit A, Ferrer S, Lanchares V, Palacián J 1998 *Phys. Lett. A* **242** 83
  - [10] Nordlander P, Dunning F B 1996 *Phys. Rev. B* **53** 8083
  - [11] Nedeljkovi N N, Nedeljkovi L D 2005 *Phys. Rev. A* **72** 032901
  - [12] Wang D H, Wu A L 2008 *J. Electron Spec. Rel. Phen.* **165** 36
  - [13] Simonovic N S 1997 *J. Phys. B* **30** L613
  - [14] Gao J, Delos J B 1992 *Phys. Rev. A* **46** 1455
  - [15] Liu W, Li H Y, Yang S Y, Lin S L 2011 *Chin. Phys. B* **20** 033401

# Dynamical properties of Rydberg hydrogen atom interacting with a metal surface and an electric field\*

Li Hong-Yun<sup>†</sup> Yue Da-Guang Liang Zhi-Qiang Yi Chang-Hong Chen Jian-Zhong

(School of Science, Shandong Jiaotong University, Jinan 250357, China)

(Received 24 December 2012; revised manuscript received 27 June 2013)

## Abstract

The dynamical properties of Rydberg hydrogen atom in an electric field near a metal surface are presented by analyzing the phase space. The dynamical behavior of the excited hydrogen atom depends sensitively on the atom-surface distance and the electric field strength. The evolutions of the Poincaré surface of section and the electric orbit are analyzed for a certain atom-surface distance and different electric field strengths. The results indicate that the electric field accelerates the adsorption of electron. With the increase of the electric field strength, the controlling factor of dynamical behavior changes from the atom-surface distance to the electric field strength. As the electric field strength becomes very large, the system is integrable and all the electric orbits become vibrational type of orbits.

**Keywords:** Poincaré surface of section, the method of analyzing phase space, Rydberg hydrogen atom

**PACS:** 34.35.+a, 05.45.Mt, 03.65.Sq

**DOI:** 10.7498/aps.62.203401

---

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10774093) and the Doctor Foundation of Shandong Jiaotong University, China.

<sup>†</sup> Corresponding author. E-mail: li5776@163.com