



МОСКОВСКИЙ ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО ЗНАМЕНИ  
ИНЖЕНЕРНО-ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

В. Д. Мур В. С. Попов

## ЭФФЕКТ ШТАРКА В СИЛЬНОМ ПОЛЕ: ТЕОРИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТ



ВСЕСОЮЗНАЯ  
ШКОЛА ПО  
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ  
ЯДЕРНОЙ ФИЗИКЕ  
им. В. М. ГАЛИЦКОГО

МОСКВА 1989

ГОСУДАРСТВЕННЫЙ КОМИТЕТ СССР  
ПО НАРОДНОМУ ОБРАЗОВАНИЮ

МОСКОВСКИЙ ОРДЕНА ТРУДОВОГО КРАСНОГО ЗНАМЕНИ  
ИНЖЕНЕРНО-ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

---

В.Д. Мур В.С. Попов

ЭФФЕКТ ШТАРКА В СИЛЬНОМ ПОЛЕ:  
ТЕОРИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТ

Текст лекции

*Утверждено  
рассоветом института*

Москва 1989

М у р В.Д., П о п о в В. С. Эффект Штарка в сильном поле: теория и эксперимент: Текст лекции, М.: МИФИ, 1989. — 24 с.

Дан обзор современного состояния теории эффекта Штарка в сильном поле (сравнимым по величине с атомным полем на орбите электрона). Рассмотрены следующие вопросы: расходимость рядов теории возмущений и методы их суммирования (в том числе и знакопостоянных рядов);  $1/\varepsilon$  — разложение; учет квантового дефекта; соотношения скейлинга для околовороговых резонансов. Теоретические расчеты штарковских сдвигов и ширин атомных уровней, а также и соотношения скейлинга хорошо согласуются с имеющимися экспериментальными данными.



Московский  
инженерно-физический  
институт, 1989 г.

## ВВЕДЕНИЕ

В последние годы привлекает значительный интерес исследование высоковозбужденных, или ридберговских ( $\kappa \gg 1$ ), состояний атомов и молекул, их свойств во внешних полях и т.п. (см., например, [1]). Развитие лазерной техники позволяет ставить весьма тонкие эксперименты, проведение которых представлялось нереальным с помощью классических оптических методов. Мы остановимся на одной проблеме такого рода — эффекте Штарка в сильном поле (вплоть до значений  $\kappa^4 E \sim 1$ , когда внешнее электрическое поле  $E$  сравнивается с атомным полем на соответствующей орбите электрона).

Экспериментально были обнаружены [2-7] резонансы в сечениях фотоионизации атомов в присутствии постоянного электрического поля. Эти резонансы лежат в области энергий, близких к ионизационному пределу  $E = 0$  (для свободного атома, т.е. при  $E = 0$ ). Покажем, что положения и ширины таких резонансов совпадают с комплексными энергиями  $E = E_p - i\Gamma/2$  штарковских квазистационарных состояний. Это открывает возможность проверки теории эффекта Штарка в сильном поле.

Особый интерес, с точки зрения эксперимента, представляют состояния с  $\kappa_1 \sim \kappa_2 \gg 1$ ,  $\kappa_2$  и  $m \sim 1$ , имеющие наименьшую вероятность распада среди всех  $\kappa(\kappa+1)/2$  подуровней с данным значением главного квантового числа  $\kappa$  (естественно, что именно такие состояния в первую очередь проявляются на эксперименте). Для них удается построить аналитическую теорию в области энергий  $E \approx 0$  и получить соотношения скейлинга для околовороговых резонансов, справедливые для произвольного атома. Эти соотношения находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными и могут быть использованы как при проверке численных расчетов, так и для идентификации пиков в сечениях фотоионизации.

Далее (если не оговорено особо) используем атомные единицы<sup>\*</sup>  $\hbar = m_e = e = 1$  и "приведенные" переменные

\* Единицей напряженности электрического поля является  $E_0 = m_e^2 e^5 / \hbar^4 = 5,142 \times 10^6 \text{ кВ/см}$ . Энергии и ширины резонансов экспериментаторы обычно приводят в спеклоскопических единицах,  $\text{см}^{-1}$ . Укажем соответствующие формулы пересчета:

$$E = 0,911 \cdot \kappa^2 E \cdot 10^{-5}, \quad F = 1,945 \cdot \kappa^4 E \cdot 10^{-7},$$

где энергия  $E$  измеряется в  $\text{см}^{-1}$ , поле  $E$  — в кВ/см, а  $F$  и  $E$  относятся к атомной системе единиц.

$$\varepsilon = 2\pi^2 E^{(n_1 n_2 m)} = 2\pi^2 (E_r - \varepsilon r/2), \quad F = \pi^4 \mathcal{E},$$

$n_1, n_2$  и  $m$  – параболические квантовые числа [8];  $n = n_1 + n_2 + |m| + 1$  – главное квантовое число уровня. Поскольку в однородном электрическом поле  $\mathcal{E}$  сохраняется вырождение состояний по знаку магнитного квантового числа  $m$ , то в дальнейшем считаем  $m > 0$  (с учетом этого, совокупность  $n^2$  вырожденных уровней атома водорода при  $\mathcal{E} \neq 0$  расщепляется на  $n(n+1)/2$  подуровней).

### 1. Ряды теории возмущений и их суммирование

Эффект Штарка принадлежит к числу классических (но в то же время и наиболее трудных, вне области слабого поля) задач квантовой механики (см., например, [9–13]). При  $\mathcal{E} \rightarrow 0$  энергия уровня  $(n_1 n_2 m)$  может быть разложена в (формальный) ряд теории возмущений (ТВ):

$$E^{(n_1 n_2 m)}(\mathcal{E}) = \frac{1}{2\pi^2} \sum_k \varepsilon_k F^k, \quad (1.1)$$

где  $k$  – порядок ТВ. Первые три порядка известны уже давно [9]:

$$\begin{aligned} \varepsilon_0 &= -1, \quad \varepsilon_1 = 3x, \quad \varepsilon_2 = -\frac{1}{8}(17 - 3x^2 - 9\mu^2 + 19n^{-2}); \\ \varepsilon_3 &= \frac{3}{16}x(23 - x^2 + 11\mu^2 + 39n^{-2}) \end{aligned} \quad (1.2)$$

(здесь  $x = (n_1 - n_2)/n$ ,  $\mu = m/n$ ). Четвертый порядок ТВ вычислили Аллилуев и Малкин [10], используя группу динамической симметрии  $O(4)$  атома водорода. Явные выражения для коэффициентов ТВ  $\varepsilon_k$  вплоть до  $k=7$  можно найти в работе Сильверстоуна [11], а до  $k=9$  – в [14]. Следует, однако, заметить, что аналитические формулы для  $\varepsilon_k$  уже при  $k=7$  становятся чрезвычайно громоздкими, так что по ним не так просто вычислить коэффициент  $\varepsilon_k$  для конкретного состояния  $(n_1 n_2 m)$ . Практически более удобно вычислять высшие порядки ТВ численно, используя рекуррентные соотношения. В частности, таким путем были проведены расчеты  $\varepsilon_k$  вплоть до  $k=160$  – в случае основного состояния [15, 16] и до  $k=100$  – для состояний с  $n=2$  [12].

Высшие порядки ТВ содержат в себе существенную информацию о поведении энергии атомных уровней в сильном поле. Однако при  $k \rightarrow \infty$  они растут факториально:

$$\varepsilon_k^{(n_1 n_2 m)} \propto k! \alpha^k k^{\beta} c_0 \left(1 + \frac{c_1}{k} + \frac{c_2}{k^2} + \dots\right) \quad (1.3)$$

(феномен Дайсона [17]). Здесь, в случае эффекта Штарка в атоме водорода,

$$\alpha = \frac{3}{2} n, \quad \beta = n + |n_1 - n_2| - 1,$$

а  $c_0, c_1, c_2, \dots$  — вычисляемые константы. Так, для основного состояния

$$\epsilon_k^{(0,0,0)} \approx k! / \left(\frac{3}{2}\right)^k \frac{3[1 + (-1)^k]}{\pi} \left[ 1 - \frac{107}{18} k^{-1} + \frac{7363}{648} k^{-2} + \dots \right]. \quad (1.3')$$

Таким образом, ряд (1.1) имеет нулевой радиус сходимости при всяком  $\mathcal{E} \neq 0$ , а энергия  $E(n_1, n_2, m)(\mathcal{E})$  — существенную особенность в точке  $\mathcal{E} = 0$  (и разрез вдоль вещественной оси). Поэтому использование высших порядков ТВ для вычисления штарковских сдвигов и ширин атомных уровней в сильном поле невозможно без соответствующих методов суммирования расходящихся рядов.

### Обычные полиномы ТВ

$$P_k(F) = \sum_{j=0}^k \epsilon_j F^j \quad (1.4)$$

определяют  $E_r(F)$  только в области слабого поля (рис. 1 и 2). Если поле достаточно мало, то на графиках видно четко выраженное плато. В этой области значений  $k$  устанавливается большое число знаков  $P_k(\mathcal{E})$ , что определяет приближенное значение штарковского сдвига уровня. Однако с увеличением поля плато исчезают, после чего определение энергии уровня с помощью полиномов ТВ становится невозможным. Кроме того,  $P_k(\mathcal{E})$  при любом сколь угодно большом  $k$  не определяют минимуму часть энергии, т.е. ширину уровня.

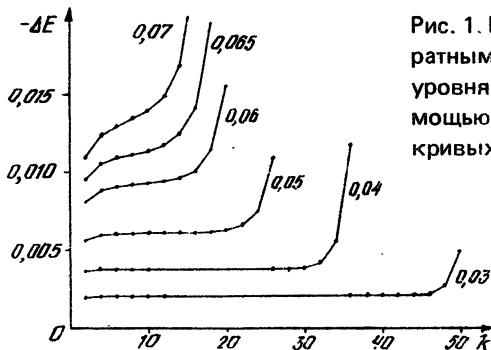


Рис. 1. Штарковский сдвиг (с обратным знаком) для основного уровня  $(0,0,0)$ , вычисленный с помощью полиномов ТВ  $P_k(\mathcal{E})$ . У кривых указаны значения  $\mathcal{E}$  (ат.ед.)

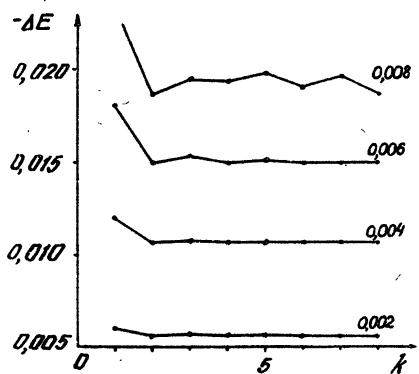


Рис. 2. Штарковский сдвиг (с обратным знаком) для уровня (1,0,0)  
с  $\varepsilon = 2$  ( $F = 16\delta$ )

С помощью аппроксимаций Паде (АП) удалось продвинуться до значений  $\delta \approx 0,1$  [16]. Кратко напомним определение АП (за дальнейшими подробностями отсылаем к превосходной монографии Бейкера и Грейвс-Морриса [18], недавно вышедшей в русском переводе).

По известным коэффициентам ТВ  $\varepsilon_k$  можно построить рациональную дробь

$$[L/M](F) = P_L(F) / Q_M(F),$$

где  $P_L$  и  $Q_M$  — полиномы степени  $L$  и  $M$ , однозначно определяемые по первым  $L+M+1$  коэффициентам  $\varepsilon_k$  из условия

$$\varepsilon(F) \equiv \sum_{k=0}^{\infty} \varepsilon_k F^k = [L/M](F) + O(F^{L+M+1}), \quad F \rightarrow 0 \quad (1.5)$$

(считаем, что  $Q_M(0) = 1$ ). С помощью (1.5) определение коэффициентов этих полиномов сводится к системе линейных уравнений; имеются эффективные алгоритмы для вычисления  $P_L$  и  $Q_M$  [18].

Таким образом, степенной ряд (1.1) заменяется рациональной дробью  $[L/M](F)$ , что позволяет аппроксимировать ближайшие особенности функции  $\varepsilon(F)$  и вычислить ее значения за пределами круга сходимости. Ины-

\* В том случае, когда эти особенности являются полюсами, с помощью АП можно учесть их точно. Если  $\varepsilon(F)$  является мероморфной функцией, то, в принципе, ее значения могут быть вычислены с помощью АП с любой точностью при произвольном  $F$  (если  $L$  и  $M$  достаточно велики). Функции, встречающиеся в физике, обычно имеют точки ветвления. АП аппроксимируют их следующим образом: с ростом  $L$  и  $M$  все большее число полюсов дроби  $[L/M](F)$  сгущается на разрезе, выходящем из точки ветвления. Поэтому АП применимы в этом случае, но качество аппроксимации, как правило, ухудшается (особенно вблизи разреза).

ми словами, АП представляют собой эффективный численный метод аналитического продолжения функции, заданной степенным рядом.

Для рядов с конечным радиусом сходимости восстановление функции по ее коэффициентам ТВ исследовано достаточно подробно [18]. В нашем случае, однако, ряды ТВ расходятся при всяком  $\mathcal{E} \neq 0$ . Кроме того, в случае эффекта Штарка возникает дополнительная трудность, так как необходимо суммировать знакопостоянные ряды. Так в случае основного состояния

$$E^{(0,0)}(\mathcal{E}) = -\frac{1}{2} - \frac{9}{4} \mathcal{E}^2 - \frac{3555}{64} \mathcal{E}^4 - \frac{2512779}{512} \mathcal{E}^6 - \dots$$

$$-\frac{13012777803}{16384} \mathcal{E}^8 - \frac{25497693122265}{131072} \mathcal{E}^{10} - \dots, \quad (1.6)$$

и, например,  $E_k^{(0,0,0)} = -3,279(73), -6,824(175)$  и  $-1,297(313)$  при  $k = 50, 100$  и  $160$  соответственно (здесь  $(n) \equiv 10^n$ ). Отсюда наглядно виден факториальный рост высших порядков ТВ.

Отметим, что несмотря на чрезвычайно большие значения  $|E_k|$  (числа такого порядка не часто встречаются в физике!), их вычисление по рекуррентным соотношениям [15] производится вполне надежно и, например, требует четырех часов на БЭСМ-6 для  $k = 160$  (оценка числа арифметических операций для достижения  $k$ -го порядка ТВ показывает, что время счета  $\tau \sim k^4$ ). Отсюда видно преимущество новых методов ТВ, развитых за последние 10–15 лет, по сравнению с обычным [8] аппаратом ТВ, включающим вычисление громоздких сумм по промежуточным состояниям.

В случае эффекта Штарка в атоме водорода

$$E^{(n_2 n_1 m)}(\mathcal{E}) = E^{(n_1 n_2 m)}(-\mathcal{E});$$

$$\epsilon_k^{(n_2 n_1 m)} = (-1)^k \epsilon_k^{(n_1 n_2 m)}$$

(см., например, [12]). Поэтому энергию состояния  $(n_2 n_1 m)$  при  $\mathcal{E} > 0$  можно рассматривать как аналитическое продолжение уровня  $(n_1 n_2 m)$  на отрицательные значения  $\mathcal{E}$ . В силу этой симметрии, состояния  $(n_1 n_2 m)$  и  $(n_2 n_1 m)$  следует рассматривать совместно. При вычислении  $\epsilon^{(n_1 n_2 m)}$  полагаем:

$$\epsilon^{(n_1 n_2 m)}(F) = \epsilon_+(F^2) + F \epsilon_-(F^2), \quad (1.7)$$

причем

$$\epsilon_+(F^2) = \frac{1}{2} \left[ \epsilon^{(n_1 n_2 m)}(F) + \epsilon^{(n_2 n_1 m)}(-F) \right] = \sum_{j=0}^{\infty} \epsilon_{2j}^{(n_1 n_2 m)} F^{2j},$$

$$\epsilon_-(F^2) = \frac{1}{2F} \left[ \epsilon^{(n_1 n_2 m)}(F) - \epsilon^{(n_1 n_2 m)}(-F) \right] = \sum_{j=0}^{\infty} \epsilon_{2j+1}^{(n_1 n_2 m)} F^{2j},$$

функции  $\epsilon_+(F^2)$  имеют существенную особенность при  $F = 0$ , и только правый разрез  $0 < F \leq \infty$ . Для суммирования этих рядов оказался удобным метод аппроксимант Паде-Эрмита (АПЭ)  $[L, M, N](F^2)$ . Значение АПЭ  $y(F^2) \equiv [L, M, N](F^2)$  вычисляется из уравнения

$$P_L - Q_M y + R_N y^2 = 0,$$

где  $P_L$ ,  $Q_M$  и  $R_N$  – полиномы степени  $L$ ,  $M$  и  $N$  от  $F^2$ , коэффициенты которых определяются аналогично (1.5). Заметим, что АП  $[L/M]$  являются частным случаем АПЭ при  $R_N \equiv 0$ .

АПЭ имеют важное преимущество по сравнению с АП, особенно существенное при суммировании рядов ТВ для эффекта Штарка. Как ясно из (1.8),  $\Upsilon_{[L, M, N]}$  может иметь мнимую часть и в том случае, когда все коэффициенты полиномов  $P_L$ ,  $Q_M$  и  $R_N$  вещественные. Заметим, что коэффициенты  $\epsilon_k^{(n_1 n_2 m)}$  являются вещественными по самому построению ТВ, в силу чего и полиномы  $P_L$ ,  $Q_M$  и  $R_N$  имеют только вещественные коэффициенты. В то же время энергия  $E^{(n_1 n_2 m)} = E_T - i\Gamma/2$  имеет мнимую часть, отвечающую вероятности ионизации уровня  $(n_1, n_2, m)$  внешним полем  $\mathcal{E}$ . Поэтому, если для суммирования рядов ТВ использовать обычные АП, то разрез  $0 < F \leq \infty$  имитируется сгущением полюсов АП, что приводит к численной неустойчивости при вычислении  $E_T$  и  $\Gamma$  (которые определяются на самом разрезе). Использование АПЭ позволяет избежать этой трудности.

Мы вычисляли последовательно АПЭ  $[L, L, L]$ ,  $[L+1, L, L]$ ,  $[L+1, L+1, L]$  и т.д. Исследование их сходимости с ростом  $L$  показывает, что значения АПЭ стабилизируются при  $L = 10 \div 12$ , и достигается точность вычисления энергии  $\sim 10^{-3} \div 10^{-4}$  (рис. 3). Из рисунка наглядно видно, что АПЭ имеют преимущество по сравнению с обычными АП и тем более с полиномами ТВ..

При этом в расчет вводится  $6L+4 \sim 60 \div 80$  порядков ТВ  $\epsilon_k$ . При столь высоких  $k$  точные коэффициенты ТВ уже выходят на асимптотику  $\epsilon_k$  (1.3) (см. рис. 4, из которого видно, в частности, что при  $n_2 > n_1$  коэффициенты  $\epsilon_k$  меняются немонотонно). Тем самым воспроизводится дайсоновская особенность энергии  $E^{(n_1 n_2 m)}(\mathcal{E})$  при  $\mathcal{E} \rightarrow 0$ :

$$\text{Im } E^{(n_1 n_2 m)}(F) \approx \text{const } F^{-(2n_2+m+1)} e^{-\frac{2n_1}{3F}}, \quad (1.8)$$

что очевидно является необходимым условием для правильного суммирования расходящихся рядов ТВ. Заметим, что в области слабого поля описанная выше процедура определяет мнимую часть энергии  $\epsilon_n'' = \kappa^2 \Gamma^{(n_1 n_2 m)}$  толь-

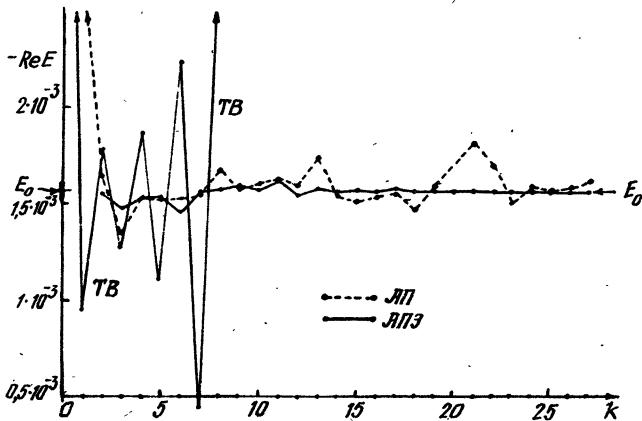


Рис. 3. Вычисление энергии состояния  $(9,0,0)$  при  $F=0.3$ . Показаны полиномы ТВ  $P_k(\mathcal{E})$ , аппроксиманты Паде (---) и аппроксиманты Паде—Эрмита (—)

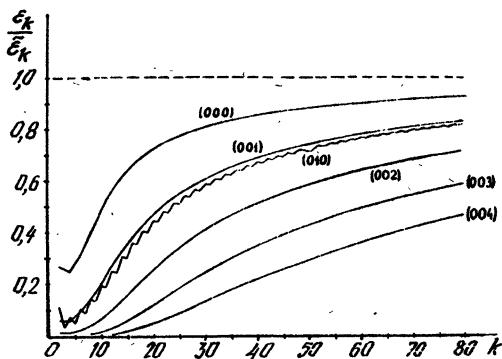


Рис. 4. Отношения  $\frac{E_k}{\bar{E}_k}$   
(см. уравнение (1.3) при  $c_1 = c_2 = \dots = 0$ );  $k$  — порядок ТВ. У кри-  
вых указаны параболические  
квантовые числа  $(n_1, n_2, m)$

ко в том случае, когда она превосходит  $10^{-8}$ , а в этой области уже работает асимптотическая формула (1.8) ( дальнейшие подробности — в [19, 20]).

Описанный выше метод позволяет эффективно вычислять положения и ширины штарковских резонансов  $(n_1, n_2, m)$  в атоме водорода. В качестве иллюстрации мы даем на рис. 5 приведенные энергии  $E'_n = 2\pi^2 Re E(n_1, n_2, m)$  для состояний  $(n_1, 0, 0)$  и  $(0, n_2, 0)$ , а на рис. 6 — траектории штарковских резонансов в комплексной плоскости  $\mathcal{E}$ . Другие примеры можно найти в [20–21].

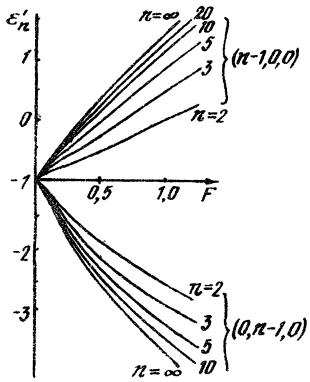


Рис. 5. Штарковские сдвиги для двух серий:  $(n-1, 0, 0)$  и  $(0, n-1, 0)$

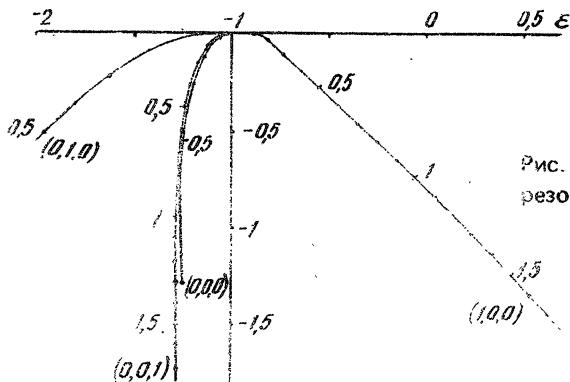


Рис. 6. Траектории штарковских резонансов  $n=1$  и  $2$  в плоскости  $\varepsilon = \varepsilon' - i\varepsilon''$

В заключение этого раздела сделаем два замечания.

1. В случае основного состояния (как и для состояний с  $\mu_1 = \mu_2$ ) все коэффициенты ТВ  $E_k$  отрицательны. В силу этого в области слабых полей штарковские сдвиги  $\Delta E^{(n_1, n_2 m)}(\mathcal{E}) = E(n_1, n_2 m)/\mathcal{E} - E^{(n_1, n_2 m)}/0 < 0$ . Однако, как видно из рис. 7, при значении  $F=1$  штарковские сдвиги уровней могут изменить свой знак.

2. Как уже отмечалось, для любых состояний  $(n_1, n_2 m)$  все коэффициенты  $E_k^{(n_1, n_2 m)}$  являются вещественными. Несмотря на это, с помощью АПЭ удается найти не только сдвиг, но и ширину уровня. При этом в области слабых полей вычислённые таким образом значения  $G^{(n_1, n_2 m)}(\mathcal{E})$  сбиваются с асимптотикой (1.8).

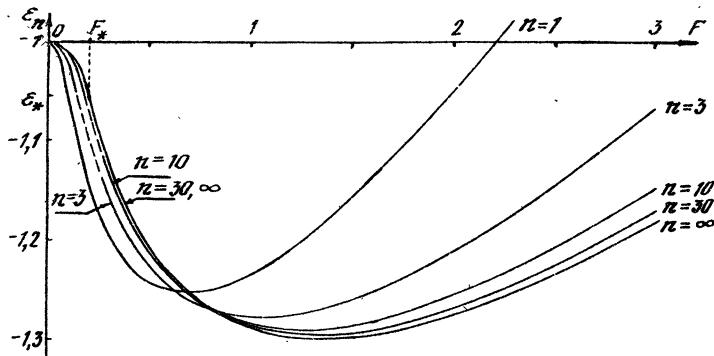


Рис. 7. Штарковские сдвиги для серии  $(0,0,n-1)$

## 2. $1/n$ -Разложение

Другой подход к вычислению  $E_r$  и  $\Gamma$  основан на  $1/n$ -разложении, которое в настоящее время широко используется в теоретической физике, включая квантовую механику и теорию поля (см., например, [22–24]). Обычно оно применяется к состояниям дискретного спектра. В [25] показано, что с помощью  $1/n$ -разложения можно рассчитать также  $E_r$  и  $\Gamma$  для резонансных уровней. Основываясь на этом замечании, мы применили этот метод к эффекту Штарка.

$1/n$ -Разложение для энергии имеет вид

$$E^{(n_1 n_2 m)}(F) = E^{(0)} + \frac{E^{(1)}}{n} + \frac{E^{(2)}}{n^2} + \dots . \quad (2.1)$$

Первый член  $E^{(0)}(F)$  отвечает пределу  $n \rightarrow \infty$  и может быть вычислен с помощью метода ВКБ [26]. Для состояний  $(0,0,n-1)$ , отвечающих круговым орбитам электрона ( $l/m \approx n$ ), перпендикулярным направлению поля  $\mathcal{E}$ , вычисление  $E^{(k)}$  сводится к решению алгебраических уравнений. При этом  $E^{(0)}$ ,  $E^{(1)}$  и  $E^{(2)}$  были получены аналитически, а следующие члены ряда (2.1) вычисляются последовательно с помощью рекуррентных соотношений [27]. В то время как коэффициенты ТВ  $E_k$  возрастают, начиная с  $k=0$ , коэффициенты  $E^{(k)}$   $1/n$ -разложения сначала уменьшаются на 2–3 порядка (вплоть до  $k \sim 5$ ) и начинают возрастать только при  $F \gtrsim 10$ . Поэтому ряд (2.1) может быть просуммирован с большей точностью, чем ряд ТВ (1.1), особенно в случае ридберговских ( $n \gg l$ ) состояний.

Сравнение результатов, полученных с помощью различных методов, приведено в табл. 1. Отметим, что  $1/\pi$ -разложение быстро сходится при  $F \geq 0.3$  и имеет особенно высокую точность для ридберговских состояний\*, а АПЭ имеют преимущества для небольших  $\pi$ . Существенно, что имеется область перекрытия (по параметрам  $F$  и  $\pi$ ), в которой оба метода с хорошей точностью согласуются между собой (а также и с расчетами других авторов [28–31]). Тем самым  $1/\pi$ -разложение подтверждает выбранную нами процедуру суммирования расходящийся рядов ТВ для эффекта Штарка.

Для сравнения с экспериментом особый интерес представляет  $1/\pi$ -разложение для состояний с  $\pi_1 > \pi_2, \pi$ .

При  $\pi = 0$  интегралы, входящие в условие квантования Бора–Зоммерфельда, могут быть вычислены аналитически. Мы учли также поправку, связанную с конечной проницаемостью барьера в эффективном потенциале [8]

$$U_2(\eta) = \frac{\pi^2 - 1}{8\eta^2} - \frac{\beta_2}{2\eta} - \frac{1}{8} \epsilon \eta, \quad \eta = r - z.$$

Уравнение Шредингера вблизи вершины барьера допускает точное решение (через функции параболического цилиндра), которое со стороны меньших  $\eta$  сливается с квазиклассической волновой функцией, а при  $\eta \rightarrow +\infty$  – переходит в расходящуюся волну (условие квазистационарного состояния). В итоге приходим к уравнениям

$$\begin{aligned} \beta_1(-\epsilon)^{1/2} f(x_1) &= \nu_1; \\ \beta_2(-\epsilon)^{-1/2} f(x_2) &= \nu_2 - \frac{1}{2\pi\pi} \varphi(\alpha), \end{aligned} \tag{2.2}$$

где  $\beta_i$  – константы разделения;  $\beta_1 + \beta_2 = 1$ ;

$$x_i = (-1)^i 16 \beta_i F / \epsilon^2, \quad \nu_i = (\pi_i + \frac{1}{2}) / \pi, \quad i = 1, 2,$$

$$f(x) = {}_2F_1\left(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}; 2; z\right);$$

$$\varphi(\alpha) = \frac{1}{2i} \ln \left[ \frac{\Gamma(\frac{1}{2} + i\alpha)}{\Gamma(\frac{1}{2} - i\alpha)(1 + e^{-2\pi\alpha})} \right] + \alpha(1 - 2\pi\alpha);$$

$$\alpha = \frac{1}{\pi} \int_{\eta_1}^{\eta_2} (-\rho_\eta^2)^{1/2} d\eta = \frac{\pi(-\epsilon)^{3/2}}{2^{3/2} F} (1 - x_2) f(1 - x_2). \tag{2.3}$$

\* См. случаи  $\pi = 3$  и  $\pi = 10$ , приведенные в табл. 1.

Таблица 1

Комплексные энергии для состояний  $(0, 0, \pi - 1)$  в атоме водорода,  
вычисленные разными методами

$F$	$\pi$	$-E^{(0,0,\pi-1)} = -2\pi^2 E^{(0,0,\pi-1)}$	Метод
0,1	1	1,0549 + $i$ 0,0145	[28] [29, 30] АПЭ
		1,054836 + $i$ 0,014538	
		1,05484 + $i$ 0,01454	
0,2	1	1,1411 + $i$ 0,1209	[28] АПЭ
		1,141 + $i$ 0,121	
0,25	1	1,172 + $i$ 0,188	[28] АПЭ
		1,170 + $i$ 0,189	
0,5	1	1,25 + $i$ 0,55	АПЭ $1/\pi$
		1,241 + $i$ 0,549	
	3	1,224 + $i$ 0,317	АПЭ $1/\pi$
		1,223675 + $i$ 0,316312	
1,0	1	1,235 + $i$ 1,286	$1/\pi$ [31]
		1,2487 + $i$ 1,2936	
	10	1,2851 + $i$ 0,6739	АПЭ $1/\pi$
		1,285178 + $i$ 0,673874	

При  $F \rightarrow 0$  из (2.2) следует разложение ТВ для  $E^{(n_1 n_2 0)}$ . В этом случае

$$\alpha \approx \pi / 3\ln F \rightarrow \infty, \quad \varphi(\alpha) \approx (24\alpha)^{-1} + \frac{i}{2} \exp(-2\pi i\alpha).$$

Учет экспоненциально малой мнимой части функции  $\varphi(\alpha)$  в уравнении (2.2) дает известное [32] пороговое поведение ширины атомных уровней,  $\Gamma^{(n_1 n_2 m)} \propto F^{-(n-n_1+n_2)} \exp(-2\pi/3F)$  при  $F \rightarrow 0$ . При конечных значениях  $F$  уравнения (2.2) были решены численно.

### 3. Ридберговские состояния произвольного атома

Для атомов, отличных от атома водорода, потенциал отличается от кулоновского при  $r \leq r_a$  ( $r_a$  – радиус атомного остова), что много меньше среднего радиуса ридберговских состояний  $\bar{r} \ll r^2$ . Поскольку штарковские сдвиги уровней значительно превышают расщепление тонкой структуры, то  $n_1, n_2, m$  – "хорошие" квантовые числа. Как известно, в кулоновском

поле имеется "случайное" вырождение уровней. Оно описывается группой скрытой симметрии  $SO(4) = SO(3) \otimes SO(3)$ , генераторами которой являются орбитальный момент  $L$  и вектор Рунге–Ленца  $J$ . Генераторами обеих подгрупп  $SO(3)$  являются  $J_{1,2} = \frac{1}{2}(L \pm J)$ . Поскольку  $L = J_1 + J_2$ , то переход от параболического базиса  $(n, n_2, m)$  к сферическому  $(nlm)$  эквивалентен сложению двух моментов  $j_1 = j_2 = (n-1)/2$  в группе  $SO(3)$ , вследствие чего

$$\delta(n, n_2, m) = \frac{1}{n} \sum_{l=m}^{n-1} (c_{J, M-m; l, m}^{JM})^2 (2l+1) \mu_l, \quad (3.1)$$

где  $\mu_l$  – квантовые дефекты для свободного атома;  $J = (n-1)/2$ ;  $M = (n_1 - n_2 + m)/2$ . Величины  $\mu_l$  табулированы [33] и резко убывают с ростом  $l$ , поэтому вычисление  $\delta(n, n_2, m)$  не представляет труда. Приведем для ориентировки следующие числа:  $\delta = 0,768$ ;  $0,538$  и  $0,414$  для состояний  $(n=1,0,0)$  с  $n=20, 30$  и  $40$  в атоме рубидия (для водорода, очевидно,  $\delta(n, n_2, m) = 0$ ).

Для интересующих нас состояний  $(n \sim n_2 \gg 1, n_2 \text{ и } m \ll n_2)$  можно исключить из квазиклассического импульса центробежный член, выполняя замену  $n_i + \frac{1}{2} \rightarrow n_i + \gamma$  в правилах квантования [34, 35] (значение константы  $\gamma$  определяется видом потенциала на малых расстояниях). В итоге снова приходим к уравнениям (2.2), где теперь

$$v_i = \left(1 - \frac{\delta}{n}\right) \left(n_i + \frac{m+1}{2}\right) / n \quad (3.2)$$

и  $\delta' = \delta(n, n_2, m)$ . Полученные уравнения справедливы для ридберговских состояний произвольного атома.

#### 4. Соотношения скейлинга для околопороговых резонансов

При  $n \rightarrow \infty$ ,  $n_2$  и  $m \sim 1$   $v_1 \rightarrow 1$ ,  $v_2 \rightarrow 0$  и нетрудно видеть, что  $\beta_1 = 1$ ,  $\beta_2 = 0$  при любом  $F$ . Поэтому система (2.2) в этом случае сводится к одному уравнению:

$$(-\epsilon)^{1/2} = {}_2F_1\left(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}; 2; -16F/\epsilon^2\right), \quad (4.1)$$

решение которого обозначим через  $\epsilon_{cl}$ . Первые члены  $1/n$ -разложения выражаются через функцию  $\epsilon_{cl}(F)$  и ее производные, например,

$$\epsilon^{(0)} = \rho \left\{ \left(1 - 2F \frac{d}{dF}\right) \epsilon_{cl} + \left(1 - F \frac{d}{dF}\right) (-\epsilon_{cl})^{3/2} \right\};$$

$$\rho = 2n_2 + m + 1.$$

Используя эти выражения, можно получить соотношения скейлинга для околопороговых резонансов. Выше порога,  $E > 0$ , имеем (с точностью до членов  $\sim 1/n^2$ )

$$\epsilon_r^{(n_1 n_2 m)} = \frac{1}{2n^2} \epsilon_{cl}(\tilde{n}^4 \mathcal{E}), \quad \Gamma^{(n_1 n_2 m)} = \frac{\rho n_*}{n \tilde{n}^3} \chi_{cl}'(\tilde{n}^4 \mathcal{E}), \quad (4.2)$$

где  $\tilde{n} = n_1 + \frac{m+1}{2} + \delta$ ,  $n_* = n - \delta$ ,  $\rho = 2n_2 + m + 1$  ( $\rho \ll n$ )

и

$$\chi_{cl}(F) = \begin{cases} (F \frac{d}{dF} - 1) [\epsilon_{cl}(F)]^{3/2}, & F > F_* = 0,383\dots; \\ 0, & F < F_* . \end{cases}$$

Заметим, что  $\epsilon_{cl}(F)$  монотонно возрастает вместе с  $F$  и не имеет особенностей при  $0 < F < \infty$ , а  $\chi_{cl}(F)$  имеет корневую особенность:  $\chi_{cl}(F) \propto (F - F_*)^{1/2}$  при  $F \rightarrow F_*$ . Таким образом,  $1/2$ -разложение определяет ширину  $\Gamma$  только при  $F > F_*$ . Как видно из уравнения (4.2), в этом приближении для рассматриваемых состояний  $\Gamma \propto \rho/n^3$ .

На эксперименте обычно фиксируют электрическое поле и наблюдают серию резонансов с данными квантовыми числами  $n_2$  и  $m$ . Из (4.2) следует, что пересечению уровнем  $(n_1 n_2 m)$  границы ионизационного предела (при отсутствии поля,  $\mathcal{E} = 0$ ) отвечает значение главного квантового числа

$$n = n^{(0)} = k \mathcal{E}^{-\frac{1}{4}} + n_2 + \frac{m+1}{2} + \delta \quad (4.3)$$

( $k = 0,787$  в атомных единицах и  $k = 37,5$ , если  $\mathcal{E}$  измеряется в кВ/см).

Среди штарковских резонансов с данным  $n_2$  наиболее долгоживущими являются состояния ( $n = 1,0,0$ ). Так, при  $m=0$  для отношения  $R_{n_2} = \frac{\Gamma(n_1 n_2 0)(\mathcal{E})}{\Gamma(n-1,0,0)(\mathcal{E})}$  имеем:

$$R_{n_2} = \begin{cases} \left[ \frac{1}{n_2!} \left( \frac{4\pi}{e^2 F} \right)^{n_2} \right]^{1/2}, & F < F_* \\ 2n_2 + 1, & F > F_* \end{cases} \quad (4.4)$$

Последнее соотношение, вытекающее из (4.2), согласуется с численными расчетами, выполненными для  $n_2 = 0$  и 1 с помощью АПЭ.

Ниже порога ( $E < 0$ ) соотношения скейлинга принимают несколько более сложный вид [37] и здесь не рассматриваются. Отметим лишь, что в них попрежнему входит только одна универсальная  $\epsilon_{cl}(F)$ , определяемая из уравнения (4.1).

## 5. Сравнение с экспериментом

На рис. 8 вычисленные значения  $E_r$  и  $\Gamma$  сравниваются с экспериментальными спектрами фотоионизации, взятыми из [5]. Видно, что положения максимумов соответствуют  $E_r^{(\pi_1 \pi_2 m)}$ , а ширина пиков качественно согласуется с  $\Gamma^{(\pi_1 \pi_2 m)}$ . При этом в области  $E > 0$  положения резонансов  $(\pi_1, 0, 0)$  и  $(\pi_1, 1, 0)$  сближаются, а их ширины относятся как 1:3, в соответствии с формулой (4.4).

Недавно были опубликованы [6] положения и ширины подпороговых резонансов с  $m=0$  в атоме водорода. В табл. 2 представлены две серии резонансов:  $\pi_1 >> \pi_2$  и  $\pi_1 < \pi_2$ . Теоретические значения  $E_r^{(\pi_1 \pi_2 0)}$  и  $\Gamma^{(\pi_1 \pi_2 0)}$  были рассчитаны двумя независимыми методами, описанными в разделах 1 и 2. Согласие теории с экспериментом следует признать хорошим\*.

Таблица 2

Энергии и полуширины штарковских состояний с  $m=0$  в атоме водорода

( $E = 16,8$  кВ/см)

$\pi_1 \pi_2$	$\pi$	$-E_r^{(\pi_1 \pi_2 0)}, \text{ см}^{-1}$			$\Gamma/2, \text{ см}^{-1}$		
		АПЭ	$1/\pi$	Эксперимент [6]	АПЭ	$1/\pi$	Эксперимент [6]
17,0	18	58,2	58,0	60,72	2,3	2,21	2,5
16,1	18	106,6	106,6	103,75	8,9	8,8	9
16,0	17	123,5	123,1	126,46	0,18	0,153	0,14
15,1	17	167,7	167,5	167,87	1,9	1,84	2,1
15,0	16	196,7	196,6	198,54	$< 10^{-2}$	$7 \cdot 10^{-4}$	$1,1 \cdot 10^{-4}$
14,2	17	211,6	211,5	210,09	5,7	5,64	6,6
14,1	16	235,3	235,2	238,12	0,012	0,020	0,016
13,2	16	274,3	274,2	275,81	0,28	0,275	0,23
13,1	15	315,2	315,1	314,81	$< 3 \cdot 10^{-3}$	$1,9 \cdot 10^{-4}$	—
12,3	16	313,8	313,7	314,81	1,3	1,29	1,6, 2,5
12,2	15	349,8	349,8	351,42	$< 10^{-3}$	$\sim 10^{-4}$	$5 \cdot 10^{-5}$
11,4	16	353,2	353,2	351,42	3,3	3,29	3,0
11,3	15	384,4	384,4	386,35	0,002	$1,9 \cdot 10^{-3}$	$1,8 \cdot 10^{-3}$
10,4	15	419,2	419,1	419,23	0,03	0,02	0,032

\* Особенno для  $E_r^{(\pi_1 \pi_2 m)}$  (см. табл. 2). Погрешность экспериментальных значений  $E_r$  может достигать  $\sim 2 \text{ см}^{-1}$ , поэтому соответствующие числа в табл. 2 были нами окружлены. Ширины резонансов в настоящее время определяются не очень надежно.

Продолжение табл. 2

$n_1, n_2, \pi$	$-E_r^{(n_1, n_2, \pi)}, \text{см}^{-1}$			$\Gamma/2, \text{см}^{-1}$		
	АПЭ	$1/\pi$	Эксперимент [6]	АПЭ	$1/\pi$	Эксперимент [6]
0,13 14	781,8	781,9	781,64	0,57	0,570	0,62
1,12 14	750,9	750,9	751,7	0,27	0,268	0,25
2,11 14	720,0	720,0	721,0	0,11	0,105	0,11
3,10 14	689,1	689,1	689,1	0,033	0,034	0,04
5,8 14	627,3	627,3	629,0	—	$1,9 \cdot 10^{-3}$	0,002
6,7 14	596,3	596,3	597,7	0,003	—	0,003
7,6 14	565,2	565,2	566,0	$10^{-4}$	$4 \cdot 10^{-5}$	$1,5 \cdot 10^{-5}$
6,8 15	558,8	558,8	566,0	2,3	2,30	2,1, 3,2
8,6 15	488,9	488,9	490,92	0,44	0,445	0,38
9,5 15	453,9	453,9	455,5	0,11	0,118	0,13

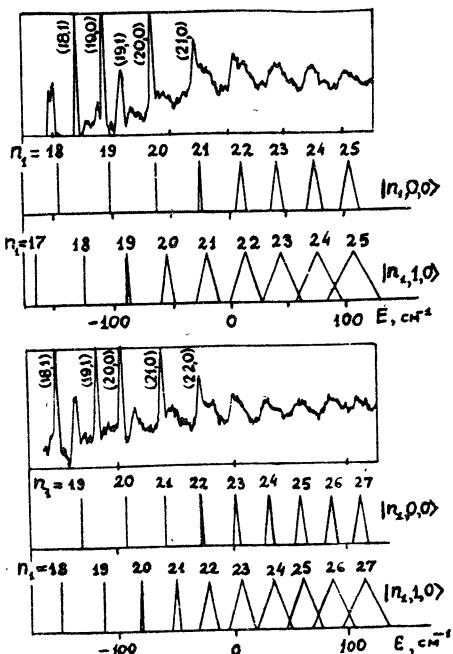


Рис. 8. Экспериментальные спектры [5] фотоионизации водорода при  $E=8,0 \text{ кВ/см}$  (вверху) и  $E=6,5 \text{ кВ/см}$  (внизу). Результаты вычисления энергии состояний  $(n_1, 0, 0)$  и  $(n_1, 1, 0)$  с помощью АПЭ представлены в виде треугольников: вершина треугольника указывает положение резонанса  $E_r$ , а его основание определяет ширину  $\Gamma$ .

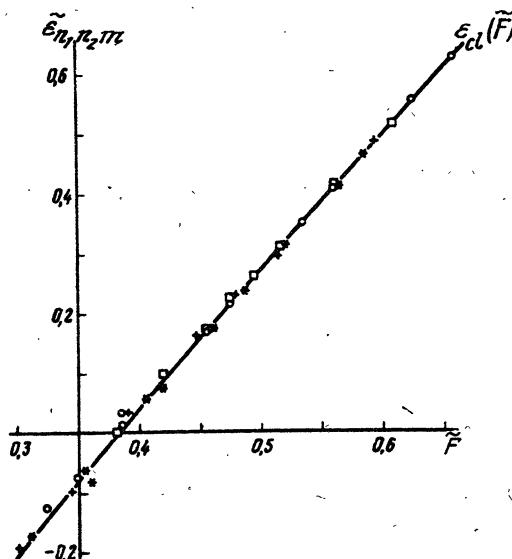


Рис. 9. Скейлинг для надпороговых резонансов. Сплошная кривая —  $\epsilon_{cl}(\tilde{F})$ .  
 $\tilde{\epsilon}_{n_1, n_2 m} = 2\tilde{n}^2 E_r^{(n_1, n_2 m)} / \tilde{E}$ ,  $\tilde{F} = \tilde{n}E$ . Обозначения экспериментальных точек  
даны в тексте

Рис. 9 иллюстрирует выполнение скейлинга (4.2) в надпороговой области для  $E_r^{(n_1, n_2 m)}$ . Экспериментальные точки:  $\circ$  — состояния  $(n_1, 0, 0)$  в атоме водорода [5] при  $E = 6,5$  и  $8,0$  кВ/см;  $\square$  — серии  $(n_1, 0, 1)$  и  $(n_1, 1, 0)$  в атоме водорода [5];  $+$  — данные для рубидия [2] при  $E = 2,189$  кВ/см (левые четыре точки), а также  $E = 4,335$  и  $6,419$  кВ/см;  $*$  — состояния  $(n_1, 0, 0)$  для натрия [3, 4],  $E = 2,15$  и  $4,46$  кВ/см. При этом главное квантовое число  $n$  меняется в пределах  $20 \div 35$ .

Что касается ширины резонансов, то при  $F > 0,5$  экспериментальные точки [5, 6] ложатся на универсальную кривую согласно уравнению (4.2) (рис. 10). Однако при меньших значениях  $F$  наблюдаются отклонения от скейлинга, связанные с влиянием конечной проницаемости барьера. Численное решение системы (2.2) дает правильную интерполяцию между областью слабого поля и скейлинговой областью  $F > F_*$  и, как видно из рисунка, согласуется с экспериментом.

Число экспериментальных точек на рис. 9 и 10 нетрудно было бы увеличить. Во всех рассмотренных нами случаях согласие теории с экспериментом является хорошим и не оставляет сомнения в том, что наблюдаемые пики в сечениях фотоионизации соответствуют штарковским квазистационарным состояниям. Соотношения скейлинга могут быть использованы как для контроля численного счета, так и для идентификации квантовых чисел  $(n_1, n_2 m)$  пиков в спектрах фотоионизации.

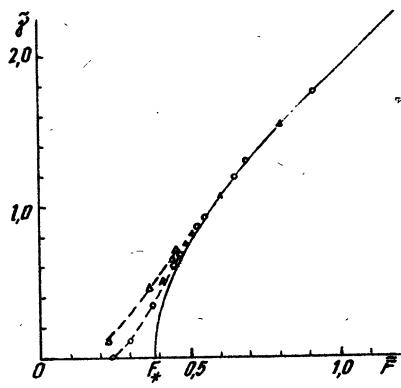


Рис. 10. Скейлинг (4.2) для ширин штарковских резонансов (атом водорода,  $\delta=0$ ). Сплошная кривая  $-\tilde{\delta}_{cl}(F)$ .  $\tilde{\delta} = (2n_2 + m + 1)^{-1} \times [n_1 + (m+1)/2]^3 \Gamma(n_1, n_2, m)$  где  $\Gamma(n_1, n_2, m)(\delta)$  —ширина уровня в атомных единицах. Экспериментальные точки [5, 6] относятся к  $\delta = 6,5$  и  $8,0$  кВ/см и к трем сериям состояний: ○ —  $(n=1, 0, 0)$ ,  $n=23 \div 28$ ; ▲ —  $(n=2, 0, 1)$ ,  $n=24, 25$ ; △ —  $(n=2, 1, 0)$ ,  $n=24, 25$

Таким образом, в последние годы эффект Штарка в сильном поле был детально исследован как в экспериментальном, так и в теоретическом отношении. Имеются также красивые и нетривиальные эффекты в спектрах ридберговских атомов при наличии магнитного поля. Соответствующие результаты, вместе с необходимыми литературными ссылками, можно найти в [1, 38].

#### Список литературы

1. Rydberg States of Atoms and Molecules, ed. by Stebbings R.F., Danning F.B. Cambridge Univ. Press, 1983.
2. Freeman R.R., Economou N.P. // Phys. Rev. 1979, v. A20, p. 2356.
3. Luk T.S., Di Mauro L., Bergeman T. et al. // Phys. Rev. Lett. 1981, v. 47, p. 83.
4. Sandner W., Safinya K.A., Gallagher T.F. // Phys. Rev. 1981, v. A23, p. 2448.
5. Glab W.L., Ng K., Yao D., Nayfeh M.H. // Phys. Rev. 1985, v. A31, p. 3677.
6. Ng K., Yao D., Nayfeh M.H. // Phys. Rev. 1987, v. A35, p. 2508.
7. Yao D., Ng K., Nayfeh M.H. // Phys. Rev. 1987, v. A36, p. 4072.
8. Ландау Л. Д., Ли фшиц Е. М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). М.: Наука, 1974.

9. Б е т е Г.А., С алп и т е р Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. М.: Физматгиз, 1960.
10. А ллилуев С.П., М алкин И.А.//ЖЭТФ, 1974, т. 66, с. 1283.
11. Silvesterstone H.J. //Phys. Rev. 1978, v. A18, p. 1853.
12. А ллилуев С. П., Вайнберг В.М., Елецкий В. Л., П о -  
п о в В.С.// ЖЭТФ. 1982, т. 82, с. 77.
13. Franceschini V., Grecchi V., Silverstone H.J. //Phys.  
Rev. 1985, v. A32, p. 1338.
14. Hoe N., D'Etat B., Coulard G. // Phys. Lett. 1981,  
v. A85, p. 327.
15. Alliluev S.P., Eletsky V.L., Popov V.S. // Phys. Rev.  
Lett. 1979, v. A73, p. 103. 1980, v. A78, p. 43.
16. Елецкий В.Л., Попов В.С.// ДАН СССР. 1980, т. 250, с. 74.
17. Dyson F.J. // Phys. Rev. 1952, v. 85, p. 631.
18. Б ейкер Д., Грейвс - Моррис П. Апроксимация Паде. М.:  
Мир, 1986.
19. Popov V.S., Mur V.D., Weinberg V.M., Shcheklykin A.V.  
Preprint ITEP. № 125. М., 1986.
20. Вайнберг В. М., Мур В. Д., Попов В. С., Сергеев А. В.//  
ЖЭТФ, 1987, т. 93, с. 450.
21. Popov V.S., Mur V.D., Sergeev A.V., Weinberg V.M.  
Preprint ITEP. № 177. М., 1987.
22. Witten E. Recent Developments in Gauge Theories.  
Ed. 't Hooft G. N.Y.: Plenum Press, 1980.
23. Dolgov A.D., Popov V.S. // Phys. Lett. 1979, v. B86, p. 185.
24. M odinov L.D., Papanicolaou N. // Ann. Phys. 1980,  
v. 128, p. 314.
25. П опов В.С., Вайнберг В. М., Мур В. Д.//Письма в ЖЭТФ, 1985  
т. 41, с. 439; ЯФ, 1986, т. 44, с. 1103.
26. Вайнберг В. М., Мур В. Д., Попов В.С., Сергеев А. В.//Пись-  
ма в ЖЭТФ. 1986, т. 44, с. 9, ЖЭТФ, 1987, т. 93, с. 450.
27. Popov V.S., Mur V.D., Shcheklykin A.V., Weinberg  
V.M. // Phys. Lett. 1987, v. A124, p. 77.

28. Hohenberger M., Mc Intosh H.V., Brandas E. // Phys. Rev. 1974, v. A10, p. 1494.
29. Maquet A., Chu S.I., Reinhardt W.P. // Phys. Rev. 1983, v. A27, p. 2946.
30. Franceschini V., Grecochi V., Silverstone H.J. // Phys. Rev. 1985, v. A32, p. 1338.
31. Benassi L., Grecochi V. // J. Phys. 1980, v. B.13, p. 911.
32. Yamabe T., Tachibana A., Silverstone H.J. // Phys. Rev. 1977, v. 16, p. 877.
33. Радциг А.А., Смирнов Б.М. Параметры атомов и атомных ионов. М.: Энергоатомиздат, 1986.
34. Marinov M.S., Popov V.S. // J. Phys. 1975, v. A8, p. 1575.
35. Друкарев Г.Ф. // ЖЭТФ, 1978, т. 75, с. 473.
36. Вайнберг В.М., Мур В.Д., Попов В.С., Сергеев А.В. // Письма в ЖЭТФ, 1987, т. 46, с. 178.
37. Мур В.Д., Попов В.С. // Письма в ЖЭТФ. 1988, т. 48, с. 67; ЖЭТФ, 1988, т. 94, с. 125.
38. Лисица В.С. // УФН, 1987, т. 153, с. 379.

## **СОДЕРЖАНИЕ**

<b>Введение.....</b>	<b>3</b>
<b>1. Ряды теории возмущений и их суммирование.....</b>	<b>4</b>
<b>2. <math>1/\pi</math>-Разложение.....</b>	<b>11</b>
<b>3. Ридберговские состояния произвольного атома .....</b>	<b>13</b>
<b>4. Соотношения скейлинга для оклопороговых резонансов. ....</b>	<b>14</b>
<b>5. Сравнение с экспериментом.....</b>	<b>16</b>
<b>Список литературы.....</b>	<b>19</b>

Вадим Давыдович Мур  
Владимир Степанович Попов

ЭФФЕКТ ШТАРКА В СИЛЬНОМ ПОЛЕ:  
ТЕОРИЯ И ЭКСПЕРИМЕНТ

Редактор Е.Г. Станкевич  
Техн. редактор Н.М. Воронцова  
Корректор М.В. Макарова

Тем. план 1989 г., поз. 5Д

Л.-21042

---

Подписано в печать 12/У-89г. Формат 60x84 1/16      Объем 1,5 п.л.  
Уч.-изд.л. 1,25      Тираж 220 экз.      Изд. № 076-1      Заказ 1284  
Цена 10 коп.

---

Московский инженерно-физический институт. Типография МИФИ.  
115409, Москва, Каширское шоссе, 31