

强 场 中 的 原 子

潘 少 华

(中国科学院物理研究所)

近几年来,具有强激光和高激发态原子的实验,增长了人们对强场中原子结构的研究兴趣.即使是最基本的原子系统,在强场中,也会显示非预期的有时甚至是戏剧性的效应.

一、电场中的原子能级结构

原子在 z 方向均匀电场 F 作用下,相互作用哈密顿函数为

$$H_F = eF \sum_j z_j,$$

式中 j 表示对所有电子求和, e 表示电子电荷绝对值.除氢原子以外,宇称不同的能级是非简并的,由于上式 H_F 是坐标 z_j 的奇函数,它的对角矩阵元素为零,而须引用二阶微扰理论,求得能级 a 的能量移位为

$$\Delta E_a = e^2 F^2 \sum_b' \frac{|z_{ab}|^2}{E_a - E_b},$$

其中 $z = \sum_j z_j$, z_{ab} 是 z 的非对角矩阵元, E_a

和 E_b 分别表示能级 a 和 b 的能量, \sum_b' 表示求和时 $E_b \neq E_a$.从物理上看,上式二阶斯塔克移位是电场使原子极化所造成的效应.它可自然地写成

$$\Delta E_a = \frac{1}{2} \alpha_a F^2, \quad (1)$$

式中 α_a 是原子静电极化率,对比以上二式,它可写成

$$\alpha_a = \frac{2}{3} e^2 \sum_b' \frac{|r_{ab}|^2}{E_a - E_b}. \quad (2)$$

极化率具有体积的量纲.对于单电子原子的基态, α 粗略地等于原子体积.例如,氢的基态极化率是 $4.5a_0^3$, 这里 a_0 是波尔半径 [原子“体积”为 $(4\pi/3)a_0^3 = 4.2a_0^3$]. 在通常场强条件下,基态斯塔克移位是小得观察不到的.

激发态的极化率一般比基态的大,特别是当附近有宇称相反的能级时,从(2)式可见,其数值可以大得多.例如单次离化氫,由于在 3d 能级之下仅 13cm^{-1} 距离处有 4p 能级,导致 3d 能级极化率为 $3 \times 10^4 a_0^3$. 在 100 kV/cm 电场中,它的斯塔克移位为 1.2cm^{-1} , 这是易被观察的,尽管如此,它仍然是小的.

光学斯塔克移位小的基本原因是,相对原子内场来说,通常的外电场是很小的.例如, 10^6 V/cm 这个从实验室标准来看是足够大的场强,比之电场的原子单位即氢原子基态电子所受内电场 ($=e/a_0^2 = 5.14 \times 10^9 \text{ V/cm}$) 来说却是很弱的.因此,如果我们的目标是严重扰乱原子和根本改变它的结构,以理解原子在强场中的行为,那末我们应从别处着眼.

为了使方程取最简单形式,下文采用原子单位.在这种单位系统中 $e = \hbar = m_e = 1$, 这里 \hbar 是普朗克常数除以 2π , m_e 是电子质量;距离的单位是波尔半径 $a_0 = 5.29 \times 10^{-9} \text{ cm}$, 能量的单位是 $e^2/a_0 = 27\text{eV}$. 因为精细结构常数 $\alpha = e^2/\hbar c = (137)^{-1}$, 故光速 c 在此单位中应为 $c = \alpha^{-1} = 137$. 在这种单位中,氢原子能量为

$$E_n = -\frac{1}{2n^2},$$

式中 n 是主量子数. 角动量 l 取值为 $0, \dots$,

$n-1$, 而角动量的 z 分量 m 取值为 $-l, \dots, +l$. 对于氢, 给定 n 的所有能级是简并的. 对硷原子, 对 l 的简并解除, 而能量可以写成

$$E_n(l) = -\frac{1}{2} \frac{1}{(n - \delta_l)^2}, \quad (3)$$

式中 δ_l 是量子数亏损, 它是个常数或者是个随 n 很慢变化的函数. 当 l 大于 2 或 3, 量子亏损一般比 1 小得多.

量子亏损所导致的能级分裂, 对强场中的原子行为, 可以起着重要作用. 对于高激发态, 能级 (n, l) 与 (n, l') 之间的能量间距近似地为

$$\Delta E_n \approx \frac{\delta}{n^3}, \quad (4)$$

式中 $\delta = \delta_l - \delta_{l'}$. 由于以下理由, 这样的能级具有反常极化率: 波尔原子的平均半径近似地为 n^2 , 因此纯粹就其尺度来说, 我们可以认

为, 类氢原子能级 (n, l) 与 $(n, l' = l \pm 1)$ 之间的径向矩阵元有 n^2 那样的大小, 即认为 $|r_{ll'}|$ 粗略地为 n^2 . 将这个关系以及 (4) 式用于 (2) 式, 我们得

$$\alpha_n \propto \frac{|r|^2}{\Delta E} \propto n^7 / \delta. \quad (5)$$

可见, 极化率与 n^7 成正比, 这意味着二阶斯塔克效应 ΔE_n 可以变得很可观^[4], 特别是当我们讨论多大的场强可以使得 ΔE_n 等于能级间距时就更明显了. 现在让 $(1/2)\alpha_n F^2 = \Delta E_n$, 得

$$F \propto \delta n^{-5}. \quad (6)$$

所以, 随着 n 的增加, F 将迅速减小. 例如当 $\delta = 0.1$ 和 $n = 30$ 时, $F = 20 \text{V/cm}$. 也就是说, 仅 20V/cm 的电场就足以使斯塔克移位大到等于能级间距. 这时原子不只是受扰动, 而是大为变形了. 人们熟知的其它许多性质也可望发生根本变化. 同时从理论上, (1) 式的二

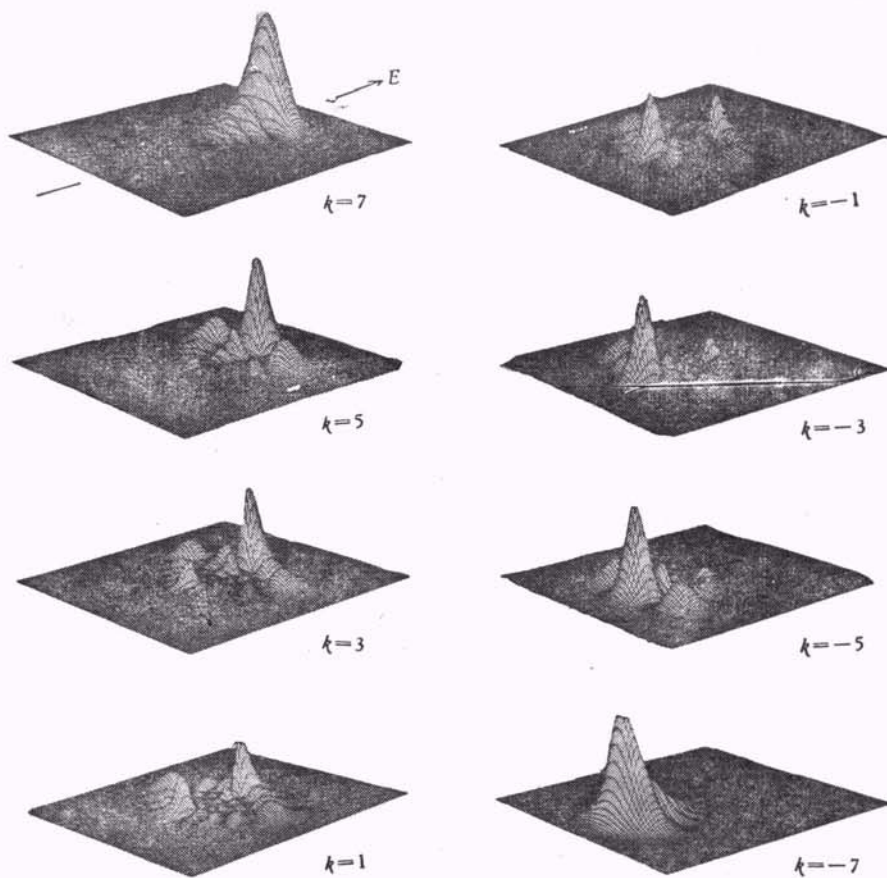


图1 氢原子 $n=8, m=0, |k|=1-7$ 态的电荷分布

阶微扰公式已不够精确。

氢原子混合宇称的态是简并的。例如， $n = 2$ 的二个本征态 $\phi_{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} [(2, 0, 0) \pm (2, 1, 0)]$ ，这里用 (n, l, m) 表示态， ϕ_+ 和 ϕ_- 都是由宇称奇偶性相反的二个态 $(2, 0, 0)$ 和 $(2, 1, 0)$ 相混合的。由于氢原子的本征态具有混合宇称，并因此显示固有的电偶极矩。故在电场中将产生线性斯塔克效应，电场的作用可以大到使原子完全变“形”。用球坐标表示，例如 $(2, 0, 0)$ 和 $(2, 1, 0)$ ，同抛物坐标表示，例如 ϕ_+ 和 ϕ_- ，是氢问题解答的两种基本表象。图 1 给出，当外场不存在时，抛物坐标表示中氢原子电子的几率分布图，即通常所说的电荷分布图，它是由电子计算机帮助绘出的。图象表示过 z 轴平面的电荷密度 $|\phi|^2$ (图中 E 表示 z 轴)。电荷密度已被乘上 r^2 ，使得特征看得更清楚。真正的电荷密度具有环绕 z 轴的方位对称性。电偶极矩可以从图上清楚看出。可以证明，“电荷中心”位于

$$\langle z \rangle = \frac{3}{2} nk, \quad (7)$$

(7)式中抛物量子数取值为 $k = n - |m| - 1, n - |m| - 3, \dots, -n + |m| + 1$ 。上式意味着抛物能级具有永久电偶极矩。氢原子的二阶斯塔克效应比一阶小得多，即使电场增加到足以使氢原子离化时(见下节)，二阶量仍小于一阶量的 4%，因此一阶能量在能级结构图中起主要作用。这是氢原子斯塔克结构的主要特

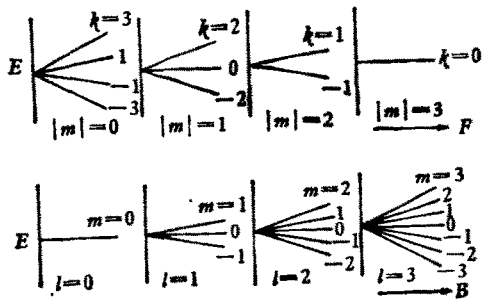


图 2 氢 $n=4$ 的能级图

上: 在电场中;
下: 在磁场中

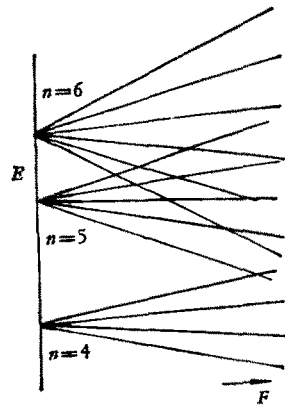


图 3 氢 $n=4-6, m=0$ 态在电场中的能级图

征。一阶斯塔克能量可表示为

$$E_1 = \frac{3}{2} nFk, \quad (8)$$

从(7)式来看，上式关系是显然的，因为 $E_1 = e\langle z \rangle F$ ，而在原子单位中 $e = 1$ 。图 2 是根据上式绘出的氢原子 $n=4$ 的能量随电场 F 的变化。作为对比，同时给出在低磁场 B 中的能级图象，相应的哈密顿量，当忽略自旋时，为 $H_m = g_l \mu_0 B m$ 。(8)式和图 2 表明，斯塔克相互作用如何将能级 n 区分成定标为 $|m| = 0, 1, \dots, n-1$ 的一系列能级簇，而每个能级簇又被分裂成一系列子能级。图 3 给出氢在 $n=4$ 至 6 范围内 $m=0$ 态的斯塔克结构。其特征为：当不同能级之间交叉时，能量曲线(直线)间没有出现任何相互排斥。这点应与以下所说的斯塔克结构比较。

锂原子 l 从 0 至 3 能级的量子亏损约为： $\delta_0 = 0.4; \delta_1 = 0.05; \delta_2 < 0.01; \delta_3 < 0.01$ 。当 l 继续增大，量子亏损迅速减小。图 4 为锂原子 $n=15$ 邻域 $m=0$ 态的斯塔克结构，它是根据计算机数值计算结果画出的^[2]。由于 s 态量子亏损为 0.4， s 能级几乎位于相邻主量子数的 $m=0, l=1, 2, \dots$ 能级簇之间。例如图中 $16s$ 位于 $n=15$ 和 $n=16$ 能级簇之间。 δ_l 的效应在零场时也显然可见，由于 $\delta_1 = 0.05$ 远大于 $\delta_l (l \geq 2)$ ，从图可见 $15p$ 显然在 $n=15$ ，

$m = 0, l = 2, \dots, 14$ 能级簇以下. 由于 $l \geq 2$ 的 δ_l 可以忽略, $l = 2, \dots, 14$ 能级簇是简并的. 图 4 结构的有趣之处在于: 尽管由于 s 能级受到上下 p 能级几乎相等的排斥, 使 s 能级本身在低电场中仅显示极弱的二阶斯塔克效应, 但是 s 能级 $\delta_0 = 0.4$ 这个大的量子亏损却戏剧性地改变了所有能级的斯塔克结构, 并使各能级间强烈排斥. 这点是与无量子亏损的氢的能级结构(图 3) 显然不同的. 文献 [2] 的作者还用调频激光作用于锂原子束, 使它共振跃迁, 产生数以千计的长寿命的里德伯态原子, 然后在强的静电场中观测其斯塔克结构. 实验结果与图 4 的理论计算在激光器分辨率的限度内是相符的.

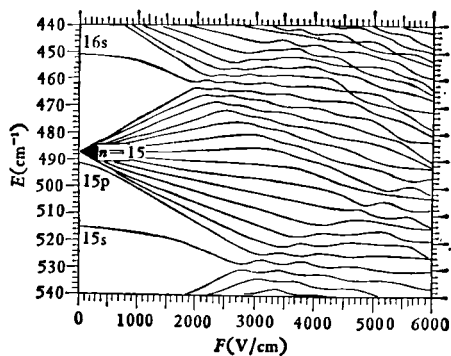


图 4 锂原子 $n = 15$ 邻域和 $m = 0$ 态的斯塔克结构
横坐标是电场;纵坐标是能量

二、原子在静电场中的离化

当外加电场足够大时, 原子开始离化, 即相应的电子脱离被束缚的状态. 以下介绍的场致离化经典模型, 是仅仅从能量考虑导出的. 这种模型虽然非常简单, 却十分有益, 在许多应用方面, 它甚至会比用量子力学处理更有效.

在原子核库仑场和沿负 z 方向均匀外电场 F 的共同作用下, 单电子势能为

$$V_F(\mathbf{r}) = -\frac{1}{r} + Fz, \quad (9)$$

V_F 于 z 轴上有个极大值, 在 $z = -1/\sqrt{F}$ 处, 由于当离开 z 轴时 V_F 增加, 这个极大值点实

物理

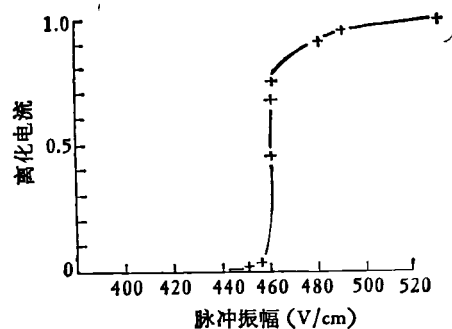


图 5 钠原子 s 态离化信号同脉冲电场振幅的关系
离化电流信号用相对单位, 它正比于原子被离化的几率

际上是个鞍点. 将以上 z 值代入(9)式, 得鞍点势能为

$$V_{sp} = -2\sqrt{F}. \quad (10)$$

可以简单地认为, 要使电子处于束缚态, 它的能量必须低于 V_{sp} , 即

$$E < -2\sqrt{F}.$$

将上式改为等式, 并记这时的 F 为 F_c , 得下式

$$F_c = E^2/4.$$

根据上述论据, 我们可以认为, 假如作用于里德伯原子的外电场是逐渐增加的, 则当电场达到临界值 F_c 时原子将离化. 为了对临界值作粗略估计, 我们可忽略斯塔克效应而简单地让 $E = -1/(2n^2)$, 代入上式, 得

$$F_c^* = 1/(16n^4), \quad (11)$$

改用实验室单位, $F_c^* = 3.2 \times 10^8/n^4 \text{V/cm}$, 例如当 $n = 30$ 时, $F_c^* = 400 \text{V/cm}$. 在许多情况中离化果真在接近 F_c^* 的电场时发生, 图 5 给出这种阈值行为的一个例子, 而图 6 将所测阈值场对钠 s 态有效主量子数的关系绘出. 对于铯原子 s 态电子, 我们可以期望用有效主量子数 $n^* = n - \delta_0$ 来取代主量子数, 于是(11)式变成 $F_c^* = 1/16n^{*4}$. 图 6 中实验点证明所预期的 $1/n^{*4}$ 依从关系. 实验点与理论直线之间有一段平移, 鉴于我们曾经忽略由于斯塔克效应所造成的能量移位, 存在这种偏差是不足为奇的. 至少图 6 的数据证实: 场致离化遵循简单的很确定的比例定律. 事实上阈值场是如此地确定, 使得我们常常可以通过测量它来决

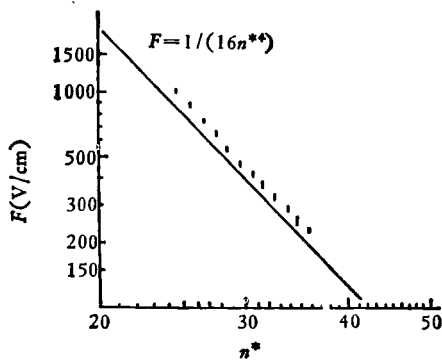


图6 阈值场对钠s态有效主量子数的关系

定原子能级。从离子性质来分析原子能级的这种能力，使得场离子化已成了研究里德伯原子的极重要方法。

场离子化之所以成为在实验上探测里德伯原子的吸引人的方法，还因为：(1)它是极有效的，在临界场之上实际上每个里德伯原子被离子化，而由此产生的电子和离子又以接近100%的效率被电子倍增器或其它电荷敏感器件所探测；(2)场离子化是高度选择性的，处于低能级的原子被离子化的几率实际上等于零。

三、强磁场中的原子

由于我们的目标是了解高场行为，在高场条件下，由电子的和原子核的自旋而来的自旋-轨道相互作用和超精细相互作用，远小于场同原子的相互作用，因此可以忽略电子的和核的自旋效应，而将氢原子的哈密顿量表示为

$$H = \frac{p^2}{2} - \frac{1}{r} + \frac{\alpha}{2} \mathbf{L} \cdot \mathbf{B} + \frac{1}{8} \alpha^2 B^2 r^2 \sin^2 \theta, \quad (12)$$

式中右端头两项分别表示自由原子的动能和势能。第三项表示轨道顺磁作用， $\alpha/2 = \mu_0$ 称玻耳磁子， \mathbf{L} 为轨道角动量， \mathbf{B} 是均匀外磁场的磁感应强度。第四项表示抗磁作用， \mathbf{r} 是从原子核到电子的矢径， θ 是 \mathbf{B} 与 \mathbf{r} 之间的夹角。

在弱场条件下，我们可以忽略(12)式右端末项，即抗磁作用项。同时，可以将第三项即顺

磁项当作微扰处理，于是我们得到原子能量与磁场的关系：

$$E(n, l, m) = -\frac{1}{2n^2} + \frac{\alpha}{2} mB. \quad (13)$$

上式右端第二项表示大家所熟悉的线性塞曼效应，它把每个 (n, l) 能级簇分裂成 $2l + 1$ 个子能级， m 取值为 $-l, -l + 1, \dots, +l$ 。

随着磁场的增加，与场强平方成正比的抗磁项的贡献也相对增长，以至当场强足够大时，可将(12)式右端第三项忽略，而保留最后项。但这时相应的本征值方程

$$H\psi = E\psi$$

缺乏解析解。上式 ψ 为原子波函数， E 为能量本征值。因此，能量 E 与场强 B 的关系只能由数值计算给出。图7给出一组数值计算结果^[3]，

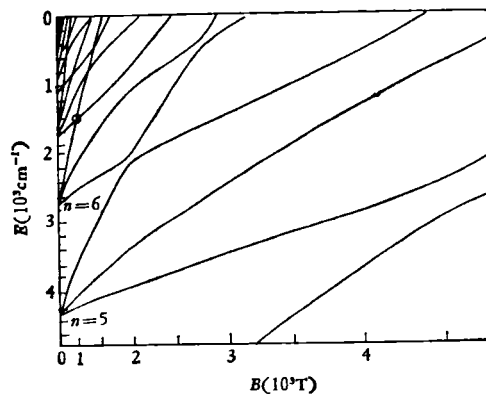


图7 氢在 $n=6$ 邻域，偶宇称， $m=0$ 态的能级图。纵坐标是能量，横坐标以 B 的平方定标

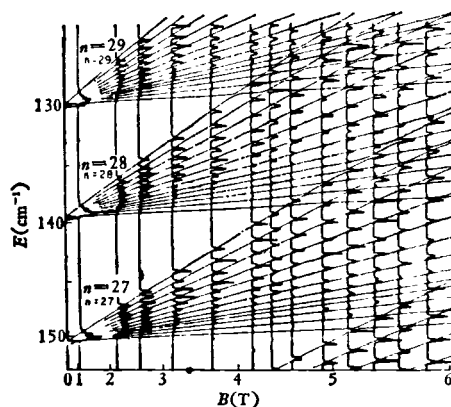


图8 钠的偶宇称， $|m|=1$ 态，计算的和观察的抗磁结构，纵坐标是能量，横坐标以 B 平方定标

对应于 $n = 6$ 邻域, $m = 0$ 和偶宇称. 从图可以看出, 当能级将交迭时, 能级间出现强烈排斥, 使图象失去规则性. 有点出乎意料的是, 对较高 n 值, 能级图象显得简单, 例如图 8 所给的 $n = 28$ 邻域, 偶宇称, $m = 1$ 的能级结构. 在本情况下, 甚至当能级曲线(直线)交叉时, 仍保持与 B^2 的比例关系, 显示其抗磁作用的简单规律性(图 7 和图 8 都是按磁场平方定标的). 图 8 中与理论曲线(直线)重迭的实验能谱是关于钠的^[4].

这里需要补充说明一点, 前段所述的线性塞曼效应来源于轨道磁矩(它比例于轨道角动量)在低磁场下的取向作用, 这时轨道角动量的绝对值可以认为是保持不变的, 即通常所说的, 轨道角动量 l 保持是个好量子数. 相反地, 抗磁作用 $H_d = \alpha^2 B^2 r^2 \sin^2 \theta / 8 \mu_0 r^2$ 来源于磁场对原子的诱导磁化, 它将 $\Delta l = 0, \pm 2$ 的态耦合在一起, 这时只有 m_l 和宇称是好的量子数. 图 7 和图 8 的说明就指明这二个量子数.

在极高磁场下, 外磁场作用超过库仑势场, 因而可近似地将(12)式右端第二项忽略, 也就是说将系统简单地看成沿 z 方向均匀磁场中的自由电子, 它的能量可表示为

$$E = E_z + E_n, \quad (14)$$

式中 $E_z = \hbar^2 k^2 / 2$ 是沿场方向自由运动的能量(动能), 传播矢量 k 可以取任意值. (14) 式中的

$$E_n = \left(n_c + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c, \quad (15)$$

其中 n_c 是正整数, ω_c 是电子沿垂直于 z 轴的平面作匀速旋转的圆频率, 称为回旋频率, $\omega_c = eB/m_1c$ ($=\alpha B$ 原子单位). 上式表明, 在量子力学中, 回旋电子的能量只取分立值, 上式右端常数项 $\left(\frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c$ 称为零点能. 从上式可见, 当

激光能量等于 $\hbar \omega_c$ 的整数倍时, 可诱导电子从较低回旋能级向较高回旋能级的跃迁, 因此原子在极高磁场的吸收谱应出现周期性调制现象, 即当激光频率大约相隔 $\hbar \omega_c$ 时将呈现吸收的峰值. 这种现象称为准朗道共振, 它已为实验所证实. 最后说明一点, 本段所说极高磁场的条件, 对基态或低激发态来说是难以达到的. 但是, 对高激发态来说是可以实现的, 这因为一方面高激发态原子的抗磁磁化率可以变得很大, 另一方面由于高激发态的电子矢径 r 比基态大很多, 因而(12)式右端第二项所表示的库仑作用相对大为减弱, 以致可以使这一项远小于外磁场的作用能. 这就造成了在极高磁场下研究原子的机会.

参 考 文 献

- [1] C. Fabre and S. Haroche, *Opt. Commun.*, **15** (1975), 254.
- [2] M. L. Zimmerman et al., *Phys. Rev. A*, **20** (1979), 2251.
- [3] M. L. Zimmerman et al., *Phys. Rev. Lett.*, **45** (1980), 1092.
- [4] M. L. Zimmerman et al., *Phys. Rev. Lett.*, **40** (1978), 1083.