磁 场 中 的 原 子

杜 孟 利

（中国科学院理论物理研究所，北京 100080）

本文简要地描述了关于磁场中原子问题的研究进展，介绍了此问题与可积性和混沌之间的关系，并着重说明了电离阈附近吸收谱振荡现象的封闭轨道理论.

Abstract

Recent developments of studies on the problem of atoms in magnetic fields and its connection with integrability and chaos are briefly discussed. The closed orbit theory for the oscillatory absorption spectra near ionization threshold is explained in detail.

磁场在原子物理的发展历史中有着极其重要的地位. 1896 年，当塞曼（Zeeman）把光源放在电磁铁极之间，观察到谱线分裂时，就发现了以他的名字命名的这个效应. 塞曼效应给光的电磁性提供了一个直接证据. 这种塞曼效应是由所谓原子的顺磁作用引起的，其大小和磁场强度的一次方成比例. 然而原子与磁场之间还有一个抗磁作用，它的大小与磁场强度的二次方成比例，并随原子中电子离开原子核的距离增加而增大，因而也叫二次塞曼效应.

在世界各地的实验室里产生的稳定磁场通常只有几个特斯拉. 对基态原子来说，顺磁作用比原子核的静电吸引作用小得多，可以把它看成微扰，而抗磁作用比顺磁作用又小得多，则可忽略不计.

在实验室里研究强磁场中的原子是通过把原子激发到高激发态来进行的. 激发态原子中的电子大部分时间处于离原子核距离较远的地方，因而原子核库仑力的作用就减弱了，抗磁作用则大大加强了. 如果磁场强度为几个特斯拉，那么当电子可以运动到离开原子核几千个基态原子尺度的地方时，磁场对电子的作用力就可以和原子核的库仑力相比较.

1969 年，美国阿贡（Argonne）国家实验室的加顿（Garton）和汤姆金斯（Tomkins）报告了他们观察到的未曾预想到的现象[1]. 当他们把钡原子放在 2.4T 的磁场里，测量其从基态跃迁到具有不同能量末态的光吸收谱时，低激发态的在无磁场时的每条谱线都变成了好几十条谱线，形成谱线簇，这个区域被称为角量子数混合区. 对于更高的激发态，相邻的谱线簇开始重叠，使得谱线变得很复杂，这个区域后来被称为主量子数混合区. 在电离阈附近，吸收谱变成在平坦的背景上叠加一个振荡. 这个振荡一直延续到电离阈之上的正能量区. 振荡的周期也就是吸收谱相邻极大值的能量差，约为 1.5 倍朗道能级间距. 所谓朗道能级间距指的是一个电子在同样强度的磁场里运动时，垂直于磁场方向运动所具有的等距离能级间的间距. 由于这个原因，人们很快地把上面描述的振荡叫做准朗道振荡.

加顿和汤姆金斯的发现极大地刺激了科学家对磁场中的原子这一问题的研究. 虽然这个问题看来简单，但它却没有一个一般解. 美国麻省理工学院（MIT）的克莱普诺（Kleppner）教授甚至认为这是单电子原子基本量子力学留下的主要问题. 人们对 1969 年加顿和汤姆金斯观察到的现象的理解花了将近二十年时间，

这些理解把我们带到了现代物理所关心的一些基本问题中[2].

角动量混合区的谱线分裂是最容易理解也是最早被理解的.因为它没有超出微扰论的范围.无磁场时,原子的态可用主量子数、角量子数及磁量子数标记.有相同主量子数的态的能量很接近,近似简并.当原子处于磁场中时,对于低激发态来说,磁场的作用就是把近似简并的有相同主量子数而有不同角量子数的态混合起来,使得每一个混合后的态都含有各种角动量分量,而能量相差不大.选择定则告诉我们,无磁场时,如果原子能够从初态跃迁到角动量为1的末态,那么有磁场时,原子就可跃迁到含有角动量为1这个分量的所有混合态.

自由氢原子的能量、总角动量和角动量在任一方向的分量都是电子运动的守恒量.磁场中氢原子的能量和角动量在磁场方向的分量仍然是精确的守恒量.但是,总角动量不再守恒.角动量混合区谱的规则性似乎暗示着有一未被发现的守恒量.经过努力,在80年代初,苏联的索罗维耶夫(Solov'ev)找到了一个用龙格-兰兹(Runge-Lenz)向量分量表示的近似守恒量[3].

一个体系有无等于自由度数目的守恒量是至关重要的.如果有,则体系可积,否则体系是不可积的.可积体系和不可积体系的运动有着本质的区别.

可积体系的运动在相空间被限定在一个环形曲面(torus)上.具有两个自由度的可积体系在坐标空间的轨迹就象蜘蛛网一样整齐规则.这种运动叫准周期运动.与爱因斯坦(Einstein)、布里渊(Brillouin)、凯勒(Keller)、马斯洛夫(Maslov)和马库斯(Marcus)等名字连在一起的一个环形曲面的量子化规则使我们可以得到体系的能级.通过量子化了的环形曲面也可以建造出相应的本征波函数来.这种可积系统的本征波函数可以用一组量子数来标记.坐标空间里的波函数在各方向的零点数目与相应的量子数对应.

然而并不是所有的体系都可积.过去十几年的研究已经完全改变了经典力学教科书给我们留下的不正确图象.混沌这个词汇的普遍使用就标志着我们观点的改变.现在我们知道大多数体系都是不可积的.不可积体系的运动不存在相空间的一个环形曲面.一个二维不可积体系在坐标空间运动的轨迹看起来好象一团乱麻——这时体系的运动一般都是混沌的.体系不可积时,上面提到的量子化规则及建造波函数的过程全不成立.混沌是对经典运动或宏观运动而言的.当一个体系的经典运动出现了混沌,它所对应的量子行为到底会怎样,这是目前物理学的热门研究课题之一.

在过去几年时间里,人们对原子在磁场中问题的兴趣随着对混沌及其量子表现的兴趣的增加而与日俱增.这是因为在80年代初,人们发现磁场中原子的经典运动既有规则的也有混沌的.事实上,角量子数混合区的运动为规则运动,这种规则运动在主量子数混合区内改变了性质,有一部分变得不规则.这个转变伴随着角动量混合区的近似守恒量的破坏.在电离阈附近的准朗道振荡区,运动变成完全的混沌运动.

那么到底准朗道振荡的物理本质是什么?我们通过对这个问题的研究学到了什么呢?

对1969年加顿和汤姆金斯发现的准朗道振荡的最早解释是由英国的爱德蒙(Edmonds)在1970年提出的[4].爱德蒙从准朗道振荡对吸收光偏振方向的依赖性得到了启发.如果原子的初态为各向同性的S态,那么,实验发现,假如光偏振方向即光的电场矢量方向与磁场方向垂直时则有振荡,但当偏振方向与磁场平行时则振荡消失.由此爱德蒙认为准朗道振荡与电子在通过原子核并垂直于磁场方向的平面上的运动密切相关.他把简单的一维量子化规则用在这个平面上电子离开原子核的距离变量上,得到了"能级"和"能级"间距,与实验的1.5倍朗道能级间距符合很好.

然而80年代初,当人们发现了准朗道振荡区的运动为完全混沌以后,爱德蒙的作法似乎就失去了理论基础.但爱德蒙的理论为什么和实验符合却是个谜.

直到1986年在实验上首先出现了新的突破[5]. 德国彼乐费尔德（Bielefeld）大学威尔格（Welge）教授领导的小组首次用氢原子做这方面的实验. 当他们把能量分辨率提高了很多倍后，首先看到在没有1.5倍朗道能级间距振荡情形时，出现了另外一个0.63倍朗道能级间距的新振荡！当能量分辨率进一步提高后，电离阈附近的振荡突然消失，测到的吸收谱简直就像噪音一样！当把实验上测到的吸收谱作为能量的函数通过傅里叶变换变成时间的函数时，威尔格小组发现在很多分立时间尺度上变换后的函数都有尖峰！这表明看起来像噪音的吸收谱里隐藏着许多不同频率的振荡，而1.5倍和0.63倍朗道能级间距的振荡只不过是其中两个频率最低的振荡.

1986年秋，我告诉我的导师戴劳斯（Delos）教授想认真地做一篇博士论文. 他让我考虑准朗道振荡现象，特别是关于威尔格小组的新发现. 我含糊地答应了. 因为我当时觉得这个问题很难. 从1969年到那时已近20年了，但问题仍未解决. 我担心在短时间内不能作出有意义的工作，难以获得学位. 1986年的秋天正好是我的导师休学术假的时候，他要去设在美国科罗拉多（Colorado）大学的联合天体物理研究所，为了讨论问题方便，我也一起去了.

我是从了解磁场中原子这个问题的历史开始研究的. 另外，我也同时仔细地研读几篇看来与磁场中的原子这个题目无关的经典文章. 它们是所谓态密度的周期轨道理论. 60年代末70年代初，在国际商用机器公司（IBM）工作的古茨维乐（Gutzwiller）[6]、法国的贝林（Balian）和布洛克（Bloch）[7] 发现一个体系的态密度作为体系能量的函数，可以表示成一个光滑项加上很多余弦振荡项. 基本上可以认为光滑项就是相空间一定大小的区域对应于一个量子态的费米近似. 每一个余弦振荡项都与体系的一个周期轨道对应. 周期轨道的稳定性决定了振幅的大小，沿着周期轨道的作用量积分即动量乘以速度对时间的积分加上一点小的修正就是余弦的相位. 可以证明当体系可积时，态密度的周期轨道理论给出和环形曲面量子化同样的能级.

我用了近两个月时间才弄懂了态密度的周期轨道理论. 当我把我的理解讲给戴劳斯教授时，他非常高兴. 后来他说他曾经花了好几个月的时间来阅读这些文章，但最后还是把它们扔在了一边. 不过他确信这些文章里边有东西. 的确弄懂了态密度的周期轨道理论之后，我们关于吸收谱的封闭轨道理论的物理图象很快就形成了.

当原子吸收了光时，原来处于很小空间区域的电子就获得了能量，电子以电子波形式从原子核向外传播. 电子在原子核附近只感觉到库仑力的存在. 随着电子离原子核距离的增加，库仑力变得越来越弱，电子越来越感觉到磁场的存在. 电子的运动受库仑力和洛伦兹力的共同作用. 电子沿垂直于磁场方向不能走向无限远处. 因而，沿某些特定方向离开原子核的电子就在短时间内被挡回到原子核上.

这些开始于原子核然后又回到原子核的电子轨道叫做封闭轨道. 由于沿着这些封闭轨道传播的电子波又回到了产生这些波的波源即原子核处，这样就产生了量子干涉效应. 要建立定量关系，需要能够定量地描述三个过程：第一，原子吸收光之后产生向外传播的电子波；第二，这个向外传播的波沿着封闭轨道的传播；第三，沿封闭轨道传播的波回到原子核附近的行为.

第一步和第三步涉及到量子力学里特别是库仑场里散射问题的非标准描述. 第二步则要用到多维空间波函数的半经典近似，它属于很专门的一些知识，懂的人不多. 很巧，我的导师在这方面很有研究. 连续好几年，他的背包里总放着译成英文的一本书，它就是苏联马斯洛夫所著的《量子力学中的半经典近似》. 象苏联的很多书一样，这本书也很数学化. 不过经过几年的努力，他终于弄懂了书中的要点，并把它用物理语言介绍给了物理学家. 我在接触磁场中原子问题之前，从戴劳斯教授那里学到了这方面的知识，这很幸运. 这样我们在1987年初

就把封闭轨道理论以数学公式的形式表达了出来[8].

根据封闭轨道理论，磁场中原子的吸收截面作为能量的函数可以表示成无场时的光滑吸收截面加上很多正弦振动项.每一个振动项都与电子在库仑场和磁场作用下的一个封闭轨道对应. 振动的振幅取决于封闭轨道的稳定性，也取决于原子吸收光以后产生的向外传播电子波的角分布以及封闭轨道的出射角和入射角. 封闭轨道越稳定，它的出射角和入射角越接近角分布的极大值，则相应的振幅就越大. 正弦函数的相位为波函数沿着封闭轨道传播的相位改变，其数值等于沿封闭轨道作用量积分加上马斯洛夫修正.

如果磁场固定，由经典力学里的一个定理知道，沿封闭轨道作用量积分的改变等于沿封闭轨道的时间乘以能量的改变. 由于振幅和轨道时间随着能量变化得较慢，这样每个封闭轨道给出具有一定能量间距的振荡，能量间距等于 2π 除以轨道时间. 现在我们知道，1969年发现的1.5倍朗道能级间距的振荡是由电子沿着垂直于磁场的方向离开原子核，然后又返回原子核的封闭轨道所引起的. 这个封闭轨道时间最短也最稳定，这就决定了它所引起的振荡具有最大的振幅和最小的频率，因而是历史上首先看到的. 1986年威尔格小组发现的0.63倍朗道能级间距的振荡对应于体系的第二个最稳定，也是轨道时间第二长的封闭轨道. 对于其他振荡以及振荡的其他性质也都可以用封闭轨道理论作仔细的说明.

更好地比较封闭轨道理论和实验结果要利用标度吸收谱[9]，它的思想很简单. 当磁场固定而能量改变时，每一个封闭轨道的时间随能量的变化虽慢但却不是常数. 标度谱就是利用两个新变量代替磁场和能量以使得当其中一个转变量固定，而另外一个新变量改变时，封闭轨道理论里的正弦函数的相位的变化是线性的. 通过考虑电子在库仑场和磁场里经典运动方程的相似变换，可以找出符合上面要求的两个新变量. 其中一个是标度能量 ε，它是磁场强度和体系能量的函数，另一个是 γ，它仅是磁场强度的函数.

实验上测量标度谱时，要同时改变体系能量和磁场强度，但要保持标度能量 ε 为常数. 吸收强度作为 γ 的函数即为标度谱. 标度谱的傅里叶变换很干净，每一个峰对应一个封闭轨道. 当标度能量改变时，峰的位置及高度也随之变化. 在某些特殊的标度能量处，一个峰会分成为两个峰. 有时候新峰也会突然出现. 这就给我们勾画出体系的封闭轨道演化图. 实验上得到的分叉图与理论符合得相当好. 据作者所知，这是微观保守系统分叉理论得到证实的第一个例子.

封闭轨道理论由于其思想的一般性，现已被用来成功地解释负离子在静电场中光剥离截面的振荡[10]以及臭氧吸收谱的振荡[11]等现象. 所以，封闭轨道理论的建立在物理学领域具有重要意义.

致谢：我在写作这篇文章时得到了鲁俐在语言方面的帮助，在此表示感谢.

[1] W. R. S. Garton and F. S. Tomkins, *Astrophys. J.*, **158** (1969), 839.
[2] H. Friedrich and D. Wintgen, *Phys. Rep*, **183** (1989), 37, M C Gutzwiller, *Chaos in Classical and Quantum Mechanics*, Springer-Verlag, New York, (1990).
[3] E. A. Solov'ev, *JETP Lett.*, **34**(1981), 265
[4] A. R. Edmonds, *J. Physique Colloq.*, **31**(1970), C4—71.
[5] A. Holle, et al., *Phys. Rev. Lett.*, **56** (1986), 2594; J. Main et al., *Phys. Rev. Lett.*, **57**(1986), 1789.
[6] M. C Gutzwiller, *J. Math. Phys.*, **8** (1967), 1979; **11** (1970), 1791.
[7] R. Balian and C. Bloch, *Ann. Phys.* (*NY*), **69** (1972), 76.
[8] M. L. Du and J. B Delos, *Phys. Rev. Lett.*, 58 (1987), 1731; M. L. Du and J B. Delos, *Phys Rev. A*, **38** (1988), 1896, 1913.
[9] A. Holle et al., *Phys Rev Lett.*, 61 (1988), 161.
[10] M. L. Du and J. B. Delos, *Phys. Rev. A*, **38** (1988), 5609.
[11] B. R. Johnson and J. L. Kinsey, *Phys. Rev. Lett.*, **62** (1989), 1607.