

类氢原子的强电场电离

李介平

(北京师范大学低能核物理所 北京 100875)

摘 要 强电场情况下,微扰论不再适用,要精确求解 Schrödinger 方程.本课题组用数值方法对强电场下类氢原子电离进行了计算,得到基态氢原子的共振态解,与更精确的结果作了比较,证明 Breit-Wigner 近似在一定误差下是可以接受的.

关键词 类氢原子 强电场电离 数值方法

分类号 O561.4

1 前 言

类氢原子是最简单的原子体系,可以用量子力学成功地描述.然而外场中的原子体系,即使是最简单的原子体系,在最简单的恒电场中的 Schrödinger 方程求解,仍存在困难,需要研究解决,而对较复杂的外场,如光场,则问题的解决还有待更多的努力.

早年,实验上的外场,强度较低,可以视为弱外场(相对原子中电子感受到原子势场),因此,可用微扰法求解 Schrödinger 方程.计算得到原子能级在弱外场下的移动、劈裂、展宽,可以和实验结果很好地一致^[1].然而随着外场强度的增大,外场不能再视为“微扰”,需要严格求解含外场的 Schrödinger 方程.对最简单的光场下氢原子情形,也涉及到三维含时 Schrödinger 方程的解,直接数值方法计算量很大.但是,激光物理、可控聚变发展要求人们回答强场下原子的行为.

对圆极化光场下类氢原子的讨论,在偶极近似下,外场项可以约化为等效恒电场和等效磁场项^[2].这样,在一定近似下,恒电场下的原子行为,可以帮助人们了解圆极化光场对类氢原子的物理作用.因此有必要研究强的恒电场下类氢原子的行为,作为例子,来讨论强电场对类氢原子的电离.

2 方程及边界条件

恒电场下类氢原子的 Schrödinger 方程可以在旋转抛物坐标下形式上分离变量,并得到如下联立常微分方程^[1]:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\chi_1}{d\xi^2} + \left(\frac{E}{2} + \frac{\beta_1}{\xi} - \frac{m^2 - 1}{4\xi^2} - \frac{\epsilon}{4}\xi\right)\chi_1 &= 0 \\ \frac{d^2\chi_2}{d\eta^2} + \left(\frac{E}{2} + \frac{\beta_2}{\eta} - \frac{m^2 - 1}{4\eta^2} + \frac{\epsilon}{4}\eta\right)\chi_2 &= 0 \end{aligned} \quad (1)$$

联立条件为 $\beta_1 + \beta_2 = Z$. 其中, E 为能量, Z 为原子序, ϵ 为电场强度,使用原子单位.下面给出边界条件.零边界条件为 $\chi_1(0) = \chi_2(0) = 0$. 由渐近行为和电离问题的物理要求,有如下远端边界条件.在 ξ 方向, $\chi_1(\infty) = 0$; 而在 η 方向,远端渐近解包含出射波和入射波两特解,电离问题要求远端入射波振幅为零.一般来说,这样的复边界条件将给出复的能量本征值 $E = E_0 - i\Gamma/2$, 所以外场下原子状态是不稳定的,最终将由于电离而衰变.严格求复的能量本征值计算量相当大,根据文献^[1]的讨论,在引入 Breit-Wigner 近似后,就可以在 E 为实域内求解微分方程,这时 η 方向的远端渐近解为^[3,4]

$$\begin{aligned} \chi_2(\eta) = \frac{\sqrt{a_2^2 + b_2^2}}{\eta^{1/4}} &[\sin(Q + \delta) \sum \frac{d_{2k}}{\eta^k} \\ &+ \cos(Q + \delta) \sum \frac{d_{2k+1}}{\eta^{(k+1/2)}}] \end{aligned} \quad (2)$$

其中, $Q = \sqrt{\epsilon\eta} \left(\frac{\eta}{3} + \frac{E}{3}\right)$, 而递推关系为

$$\begin{aligned} d_{k+3} = \frac{(4\beta_2 - E^2/\epsilon)d_{k+2} + (-1)^k \frac{2E}{\epsilon}(k+2)d_{k+1}}{(-1)^{k+1}} \rightarrow \\ \leftarrow \frac{+ [(2k+1)(2k+5)/4 - (m^2 - 1)]d_k}{2\sqrt{\epsilon}(k+3)} \end{aligned}$$

并且有 $\tan\delta = a_2/b_2$; 而 δ 称为渐近相移. $B^2(E) = a_2^2 + b_2^2$ 称为渐近振幅平方. Breit-Wigner 近似给出如下关系式:

$$\tan(\delta - \delta_0) = \frac{\Gamma}{2(E_0 - E)} \quad (3)$$

$$B^2(E) = B_0^2[(E_0 - E)^2 + \Gamma^2/4] \quad (4)$$

其中 δ_0 和 B_0 为常数. 通过上述的边界条件和方程(1)的求解, 加上(2)式可得到相移和振幅 $B^2(E)$. 而根据(4)式, 由 $B^2(E)$ 的极小值确定 E_0 . 然后由(3)式得到 Γ 值, 这样的结果近似满足电离问题的远端边界条件.

3 微分方程的求解

微分方程(1)的求解, 要用数值方法, 参看文献[3]、[4]. 但与文献[4]不同, 本课题组给出常用旋转抛物坐标下的公式, 用级数方法自零边界逐点数值求解. ξ 方向, 自 $\xi=0$ 开始, 级数方法为

$$\chi_1(\xi) = \xi^{(|m|+1/2)} \sum_{n=0}^{nm} A_{0n} \xi^n \quad (5)$$

其中递推关系为

$$A_{0(n+3)} = \frac{\frac{\epsilon}{4} A_{0n} - \frac{E}{2} A_{0(n+1)} - \beta_1 A_{0(n+2)}}{(n+3)(n+3+|m|)}$$

$$\xi_i \neq 0, \quad \chi_1(\xi) = \sum_{n=0}^{nm} A_{in} (\xi - \xi_i)^n \quad (6)$$

也有类似递推关系. 当给定 m, ϵ 可以逐点计算得到 $\chi_1(\xi_i)$ 及 $\frac{d\chi_1(\xi_i)}{d\xi}$, 然后利用边界条件 $\chi_1(0) = \chi_1(\infty) = 0$ 确定本征值关系式 $\beta_1 = \beta_1(E)$.

关于 η 方向问题, 利用(1)式 $\beta_2 = Z - \beta_1$ (特别对氢原子 $Z=1$) 同样可用级数方法计算 $\chi_2(\eta)$ 及 $\frac{d\chi_2(\eta)}{d\eta}$, 只要在(5)、(6)式中将 β_1 换为 β_2, ϵ 换为 $-\epsilon$, 并设定在 $\eta = \eta_0 \gg 1$ 级数解与渐近解(2)式光滑连接 [$\chi_2(\eta)$ 及其导数连续], 可以得到指定 E 值下的 δ 及 $B_2(E)$, 对一串 E 值重复上述过程, 可以从(3)、(4)式计算出 E_0 及 Γ 值.

4 结果及讨论

对强电场情形 $\epsilon \ll 1$ 计算了基态氢原子 $m=0$ 的能级 E_0 和宽度 Γ 的值, 结果列在附表中, 同时在附表中列出严格计算结果(不使用

Breit-Wigner 近似), 可以看出这些值基本上一致.

严格的数值计算结果^[5], 是由联立常微分方程(1)和边界条件构成的复本征值问题的数值求解得到. 实际计算时要在复平面上反复迭代求解微分方程, 直到求出复本征值. 这样的数值求复根过程, 其收敛都十分缓慢, 计算要耗费大量机时, 特别要提高计算结果的精度时尤为困难. 因此, 也发展了一些其它方法.

将 Breit-Wigner 近似用于强电场得到的结果不错, 其计算量由于局限于实域求解联立微分方程, 并且代替在复平面上求根, 在实轴上求极小值以确定 E_0 及 Γ . 因此, 计算量大为减少.

附表 基态氢原子在强电场下的共振电离态

ϵ	E_0		Γ	
	本工作	文献[5]	本工作	文献[5]
0.8	-0.630390	-0.6304	1.15	1.0046
1.0	-0.624334	-0.6243365	1.32	1.2936
1.5	-0.589415	-0.589412	1.86	1.9883
2.0	-0.538888	-0.538886	2.65	2.6489

然而由于一般光场问题都区别于恒电场情形, 含时 Schrödinger 方程没有定态解, 一般也不能分离变量, 所以数值求解过程和计算量都更为复杂和庞大, 恒电场情形可用的方法能否推广适用, 仍需加以研究.

参 考 文 献

- 1 Landan L D, Lifshitz E M. Quantum Mechanics. Oxford Pergamon 1958
- 2 李介平, 丁鄂江. 圆极化光场下的类氢原子. 原子与分子物理 CAMP-VII, 1994, 306~307
- 3 李介平, 田人和, 顾永倜. 类氢原子强电场电离问题的计算. 高科技研究中的数值计算(二), 1996: 215~217
- 4 Dumburg R J, Kolosov V V. Rydberg States of Atoms and Molecules, Edited by (下转第 136 页)

等国以及香港、台湾等地区的研究机构开展广泛的科研合作和联合培养人才,取得了积极成果.今后,将继续努力把开放实验室办成代表国家水平的基础性研究基地、高层次人才培养基地和学术活动中心,是本所(中心)的奋斗目标和宗旨.

1994年10月国家科委和教委聘请了以闵乃本院士为评议组长,李恒德院士、苏肇冰院士为副组长的专家评议组,对本所(中心)进行了全面评议.专家们一致认为“为了稳定基础研究队伍,提高研究水平,推动我国基础研究与高级人才培养相结合,使高校教育水平不断提高,选择北京师范大学低能核物理

所(北京市辐射中心)作为高等学校基础研究所改革试点单位是合适的”.本所(中心)已被国家科委确定为第一批基础性研究改革试点单位.两年来在科委和教委支持下,在改革的道路上走出了第一步,“九五”期间要认真学习 and 贯彻国务院关于深化科技体制改革的决定,结合研究所(中心)自身特点,在人事制度、人才分流、学科调整等方面加快改革步伐,使本所(中心)在加强基础研究、应用研究和发 展高新技术方面发挥更大作用,为国民经 济发展和增强社会主义祖国综合实力做出应有的贡献.

(上接第 141 页)

Stebbing R F and Dunning F B (London Cambridge University Press 1983)

5 Kolosov V V. A Hydrogen Atom in a Strong Electric Field. J Phys B, 1987, 20: 2259~2367

Ionization of Hydrogen-like Atoms in a Strong Electric Field

LI Jieping

(Institute of Low Energy Nuclear Physics, Beijing Normal University, Beijing 100875)

Abstract The Schrödinger equation of hydrogen-like atoms in a strong electric field is solved by the numerical method instead of perturbation. The resonance ionization of hydrogen atom ground state is computed and comparing with exact result and Breit-Wigner parametrisation is useful.

Key Words hydrogen-like atoms strong electric field ionization numerical method