

Е.В. Корюкина

## Многоуровневое приближение в расчете динамического эффекта Штарка для атома гелия

Томский государственный университет

Поступила в редакцию 17.12.2003 г.

Предлагается новый метод расчета динамического эффекта Штарка в циркулярно поляризованном электрическом поле произвольной напряженности и частоты. Приведены основные уравнения указанного метода. В рамках предлагаемого метода проведены расчеты сдвига и расщепления энергетических уровней атома гелия в циркулярно поляризованном электрическом поле.

### Введение

Известно, что при воздействии переменного электрического поля на атомы и ионы наблюдается динамический эффект Штарка. Сущность этого эффекта заключается в том, что переменное электрическое поле вызывает сдвиг и расщепление энергетических уровней атомов и ионов и образование спектра квазигармоник. Кроме того, наблюдается резонансное заселение уровней, которое может иметь место даже при весьма слабом электрическом поле при частоте электрического поля, близкой к частоте какого-либо перехода.

Представляет интерес исследовать зависимость динамического эффекта Штарка от частоты и интенсивности внешнего электрического поля. Для такого исследования необходимо решить нестационарное уравнение Шредингера для рассматриваемой системы

$$i \frac{\partial \psi_n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}(\mathbf{r}, t) \psi_n(\mathbf{r}, t), \quad (1)$$

где  $\hat{H}$  и  $\psi_n$  — гамильтониан системы и волновая функция для  $n$ -го состояния данной системы соответственно. Уравнение (1) решается в рамках нестационарной теории возмущения.

В поле, зависящем от времени, энергия системы не сохраняется. При определенных условиях, а именно в случае монохроматического внешнего поля, можно говорить о штарковском сдвиге энергетических уровней. Исходя из теоремы Флоке, для нахождения волновой функции системы, помещенной во внешнее монохроматическое поле, искомую функцию в уравнении Шредингера (1) можно представить в виде [1]:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\epsilon t} \varphi(\mathbf{r}, t), \quad (2)$$

где периодическая функция  $\varphi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r}, t + 2\pi/\omega)$  может быть разложена в ряд Фурье по времени, так что

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{-i\epsilon t} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} C_k(\mathbf{r}) e^{-ik\omega t}. \quad (3)$$

Из (3) видно, что волновая функция является суперпозицией ряда стационарных состояний с энергиями  $\epsilon + k\omega$ . Такая суперпозиция называется квазиэнергетическим состоянием, а величина  $\epsilon$  называется квазиэнергией системы [2]. Спектр значений  $\epsilon + k\omega$  называется спектром квазигармоник и представляет собой спектр состояний новой квантовой системы «атом + поле», или, как принято говорить, «атом, одетый полем» (dressed atom).

Решение уравнения (1) существенно зависит от того, как поляризовано поле (линейно, циркулярно или эллиптически), однако в любом случае при решении уравнения Шредингера имеется ряд проблем. Во-первых, это проблемы, связанные с необходимостью удовлетворения стандартных ограничений применимости теории возмущений, согласно которым:

1) напряженность электрического поля должна быть относительно мала и возмущение, индуцированное внешним электрическим полем, должно быть меньше расстояния между соседними энергетическими уровнями,

2) для рассмотрения резонансного и нерезонансного возмущений необходимо использовать разные методы расчета.

Во-вторых, в зависимости от того, является ли возбуждение полем низкочастотным или высокочастотным, также необходимо применять различные методы решения задачи.

### Метод расчета

Наиболее простым с точки зрения теоретического исследования динамического эффекта Штарка является случай циркулярной поляризации электрического поля. Если поле циркулярно поляризовано, расчеты значительно упрощаются, так как в этом случае возможно разделение пространственных

и временных переменных. В системе с центральным или аксиально-симметричным гамильтонианом невозмущенной системы уравнение для нахождения квазистационарных состояний и квазиэнергий существенно упрощается, так как нестационарное уравнение Шредингера (1) сводится к стационарному. Данное упрощение осуществляется при использовании приближения вращающейся волны [3].

Рассмотрим переход во вращающуюся систему координат. В циркулярно поляризованном электрическом поле уравнение Шредингера (1) запишется в виде

$$i \frac{\partial \psi_n(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = (\hat{H}_0(\mathbf{r}) - eF(x \cos \omega t \pm y \sin \omega t)) \psi_n(\mathbf{r}, t), \quad (4)$$

где  $\hat{H}_0(\mathbf{r})$  – гамильтониан невозмущенного атома; оператор  $-eF(x \cos \omega t \pm y \sin \omega t)$  описывает возмущение, вызванное взаимодействием атома с электрическим полем частоты  $\omega$  и напряженности  $F$ ; знак «+» соответствует правой поляризации поля, «-» – левой. Чтобы перейти в систему координат, которая вращается вокруг оси  $Z$  с частотой  $\omega$ , введем в этой системе волновую функцию

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \exp(i\omega t \hat{J}_z) \psi(\mathbf{r}, t), \quad (5)$$

где  $\hat{J}_z$  есть  $z$ -компонента оператора полного углового момента атома. После подстановки волновой функции (5) в (4) получим уравнение вида

$$i \frac{\partial \varphi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{Q} \varphi(\mathbf{r}, t), \quad \hat{Q} = (H_0 - \omega J_z \pm Fx). \quad (6)$$

Как видно из уравнения (6), оператор  $\hat{Q}$  не зависит от времени. Следовательно, в приближении вращающейся волны можно от нестационарного уравнения Шредингера (4) перейти к стационарному уравнению Шредингера вида

$$\hat{Q} \varphi(\mathbf{r}) = \varepsilon \varphi(\mathbf{r}). \quad (7)$$

Оператор  $\hat{Q}$  есть оператор квазиэнергии атома в электрическом поле, а  $\varepsilon$  и

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \exp(-i\varepsilon t) \varphi(\mathbf{r}) \quad (8)$$

есть квазиэнергия и волновая функция атома в электрическом поле во вращающейся системе координат. Очевидно, что  $\varepsilon$  и  $\varphi(\mathbf{r}, t)$  можно найти, используя для решения уравнения (7) стационарную теорию возмущения. Решение стационарного уравнения Шредингера существенно проще, чем нестационарного, однако и в рамках стационарной теории возмущений остается в силе ряд ограничений, присущих этой теории.

В теории взаимодействия атомов с полем предпринимались неоднократные попытки получить такие формулы, которые бы позволили провести расчет сдвигов и расщеплений атомных уровней в поле произвольной частоты и напряженности. Однако эти попытки были успешны только для некоторых частных случаев. Были получены формулы для

расчета сдвигов энергетических уровней для различных модельных систем [4], или для систем в одно- и двухуровневом приближении [5, 6]. В работах [7, 8 и ссылки там] такие формулы были выведены для частицы в короткодействующем потенциале и для отрицательного иона. В [9] были получены общие формулы для расчета сдвига и расщепления энергетических уровней атомов в электрическом поле, но эти формулы пригодны только в том случае, если рассматривается изолированный атомный уровень в отсутствие резонансов с полем.

В данной работе предлагается новый метод для исследования динамического эффекта Штарка в циркулярно поляризованном электрическом поле произвольной напряженности и частоты. В рамках этого метода предложено отказаться от теории возмущений при решении стационарного уравнения Шредингера (7), чтобы избавиться от проблем, связанных с необходимостью удовлетворения ограничений, присущих теории возмущения. Волновые функции и энергии атома в поле, являющиеся решением стационарного уравнения Шредингера (7), предлагается определять из диагонализации оператора квазиэнергии  $\hat{Q}$ . Запишем еще раз это уравнение для конкретных  $n$ -х состояний атома в электрическом поле с напряженностью  $F$  и частотой  $\omega$

$$\hat{Q} \varphi_n(\mathbf{r}) = \varepsilon_n \varphi_n(\mathbf{r}). \quad (9)$$

Волновые функции оператора квазиэнергии  $\hat{Q}$  будем искать в виде разложения по собственным функциям оператора  $\hat{H}_0(\mathbf{r})$

$$\varphi_n(\mathbf{r}) = \sum_k C_{kn} \varphi_k^{(0)}(\mathbf{r}). \quad (10)$$

Так как волновая функция (10) является собственной функцией оператора  $\hat{Q}$ , то матрица энергии атома в поле в этом представлении диагональна, т.е.

$$Q_{mn} = \langle \varphi_m(\mathbf{r}) | \hat{Q} | \varphi_n(\mathbf{r}) \rangle = \varepsilon_n \delta_{mn}, \quad (11)$$

где  $\varepsilon_n$  – квазиэнергия атома в электрическом поле. Поэтому задачу о нахождении собственных значений оператора  $\hat{Q}$  можно рассматривать как задачу о приведении матрицы этого оператора в каком-либо представлении к диагональному виду. В частности, это может быть представление невозмущенных волновых функций атома или иона, рассчитанных в отсутствие внешнего электрического поля. Оператор  $\hat{Q}$  – эрмитовский самосопряженный оператор, следовательно, всегда можно найти собственные значения и собственные функции этого оператора из диагонализации его матрицы. В представлении невозмущенных волновых функций матричные элементы оператора квазиэнергии  $\hat{Q}$  имеют вид

$$Q_{mn} = E_n^{(0)} \delta_{mn} - \omega \langle \varphi_m^{(0)}(\mathbf{r}) | \hat{J}_z | \varphi_n^{(0)}(\mathbf{r}) \rangle \pm F \langle \varphi_m^{(0)} | D_x | \varphi_n^{(0)} \rangle, \quad (12)$$

где  $E_n^{(0)}$  – энергия  $n$ -го состояния атома без внешнего электрического поля;  $D_x$  –  $x$ -компонента оператора дипольного перехода.

Диагонализация матрицы квазиэнергии с элементами (12) дает набор квазиэнергетических состояний, т.е. волновых функций системы в поле, и спектр квазиэнергий  $n$  состояний атома в поле. После диагонализации матрицы  $\hat{Q}$  получим квазиэнергии  $\epsilon_n$  и волновые функции

$$\varphi_n(\mathbf{r}, t) = e^{-i\epsilon_n t} \sum_k C_{nk} \varphi_k^{(0)}(\mathbf{r}) \quad (13)$$

для  $n$  состояний атома во внешнем электрическом поле частоты  $\omega$  и напряженности  $F$  во вращающейся системе координат. Для того чтобы получить квазиэнергии атома или иона в исходной системе координат, необходимо провести стандартное усреднение энергии системы в квазиэнергетическом состоянии по периоду колебаний. После этого усреднения энергия системы в поле в исходной системе координат запишется в виде

$$\begin{aligned} \bar{E}_n &= \langle \psi_n(\mathbf{r}, t) | \hat{H}(t) | \psi_n(\mathbf{r}, t) \rangle = \\ &= \epsilon_n + \omega \langle \varphi_n(\mathbf{r}) | \hat{J}_z | \varphi_n(\mathbf{r}) \rangle. \end{aligned} \quad (14)$$

Из формулы (14) очевидно, что  $\bar{E}_n$  не зависит от времени, что совпадает с результатом, полученным в [4].

Волновые функции  $\varphi_n^{(0)}$  и энергии  $E_n^{(0)}$  невозмущенного атома или иона рассчитываются либо методом Хартри–Фока, либо методом неортогональных орбиталей (в том случае, если возбужденные состояния имеют нижележащие состояния той же симметрии). Формула для расчета матричных элементов оператора дипольного перехода имеет вид

$$\begin{aligned} \langle \varphi_m^{(0)} | D_x | \varphi_n^{(0)} \rangle &= \langle \gamma J M | D_x | \gamma' J' M' \rangle = \frac{(-1)^{J-M}}{\sqrt{2}} \times \\ &\times \left[ \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & -1 & M' \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} J & 1 & J' \\ -M & 1 & M' \end{pmatrix} \right] \langle \gamma J \| D \| \gamma' J' \rangle, \end{aligned} \quad (15)$$

где зависимость от квантовых чисел  $JM$  вынесена в  $3j$ -символы согласно теореме Вигнера–Эккарта. Для переходов типа  $l_1^{N_1} l_2 - l_1^{N_1} l_3$  приведенные матричные элементы  $\langle \gamma J \| D \| \gamma' J' \rangle$  вычисляются по формуле

$$\langle \gamma J \| D \| \gamma' J' \rangle = Q(\alpha, \alpha', JJ') \langle n_2 l_2 \| r \| n_3 l_3 \rangle, \quad (16)$$

где  $Q(\alpha, \alpha', JJ')$  – множитель, зависящий от квантовых чисел рассчитываемого перехода;

$$\begin{aligned} \langle n_2 l_2 \| r \| n_3 l_3 \rangle &= \\ &= (-1)^{\frac{l_2+l_3+1}{2}+l_2} \sqrt{\max(l_2, l_3)} \langle R_{n_2 l_2} | r | R_{n_3 l_3} \rangle, \end{aligned} \quad (17)$$

$$\langle R_{n_l} | r | R_{n_l'} \rangle = \int_0^\infty R_{n_l}(r) r R_{n_l'}(r) r^2 dr. \quad (18)$$

## Результаты и их обсуждение

В настоящей статье приводятся некоторые результаты, полученные для атома He при расчете сдвига и расщепления уровней этого атома в циркулярно поляризованном электрическом поле с различными значениями частоты и в разных диапазонах напряженности электрического поля. Невозмущенные волновые функции рассчитывались вариационным методом с неортогональными орбиталями, радиальные интегралы перехода рассчитывались с аналитическими орбиталями

$$R_{nl}(r) = C_{nl} \sum_{i=1}^m a_i r^{n_i} e^{-\alpha_i r}$$

по формуле

$$\langle R_{n_l} | r | R_{n_l'} \rangle = C_{n_l} C_{n_l'} \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^{m'} a_i a_j \frac{(n_i + n_j + 1)!}{(\alpha_i + \alpha_j)^{n_i + n_j + 2}}.$$

При расчете матрицы квазиэнергии (12) учитывался 71 энергетический уровень атома He, в результате был рассчитан 361 магнитный подуровень для атома He в электрическом поле. Все расчеты для атома He проводились в LS-связи.

На рис. 1 приведены кривые, описывающие сдвиг уровней с  $J = 0$  в зависимости от напряженности электрического поля  $F$  при частоте поля  $\omega = 100$  МГц. Так как  $J = 0$ , эти уровни в электрическом поле только сдвигаются, но не расщепляются.

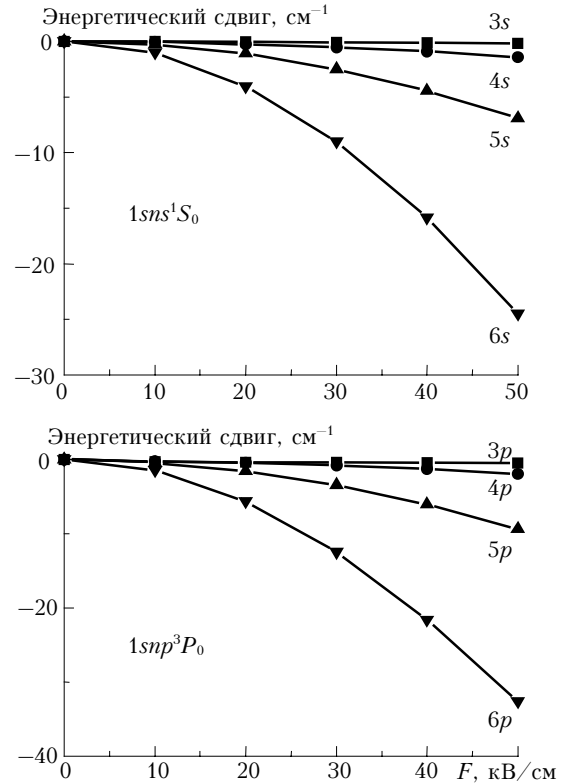


Рис. 1. Относительный сдвиг уровней с  $J = 0$  для атома He в зависимости от напряженности электрического поля

Как видно из рис. 1, для этих уровней наблюдается квадратичный эффект Штарка, причем чем выше рассматриваемый уровень, тем большее смещение он испытывает при увеличении напряженности электрического поля.

Далее рассмотрим уровни, которые расщепляются в электрическом поле. На рис. 2 приведен график, описывающий поведение  $1s2p^3P_1$  и  $1s2p^3P_2$  уровней атома He в зависимости от напряженности поля  $F$  при частоте поля  $\omega = 100$  МГц. Такое возбуждение является нерезонансным и низкочастотным (ближайший резонанс  $\omega = 0,13 \cdot 10^5$  МГц).

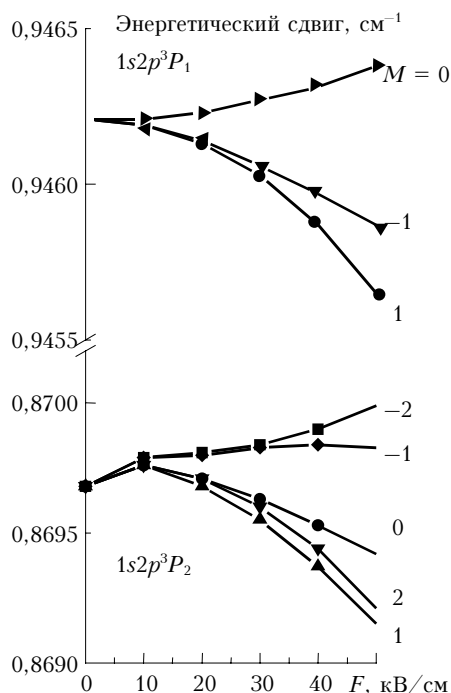


Рис. 2. Расщепление  $1s2p^3P$  уровней атома He в зависимости от напряженности электрического поля, приведен относительный сдвиг энергетических уровней ( $E_F - E_0 - 169086$ ),  $\text{см}^{-1}$

Как видно из рис. 2, наблюдается квадратичный эффект Штарка, причем происходит полное снятие вырождения по магнитному квантовому числу  $M$ . Этот результат находится в соответствии с выводами, известными из теории возмущения. Из приведенного рисунка видно, что расщепление уровней мало (порядка  $10^{-4}$   $\text{см}^{-1}$ ) даже при очень большой напряженности поля  $F = 50$  кВ/см. Небольшая степень расщепления объясняется тем, что рассматриваемые уровни являются одними из самых низколежащих уровней, которые малочувствительны к воздействию электрического поля.

Рассмотрим поведение более высоких энергетических уровней, например  $1s4p^1P_1$  и  $1s4d^1D_2$  в электрическом поле частоты  $\omega = 0,87 \cdot 10^7$  МГц. Эта частота соответствует частоте дипольного перехода  $1s4p^1P_1 - 1s4d^1D_2$ , так что расчет будет произведен для случая резонансного возбуждения электрическим полем. Результаты расчета приведены на рис. 3.

Из рис. 3 видно, что степень расщепления уровней в поле увеличилась по сравнению с предыдущим результатом (порядка  $0,5$   $\text{см}^{-1}$  при  $F = 50$  кВ/см). Кроме того, как и в предыдущем случае, наблюдается квадратичный эффект Штарка с полным снятием вырождения по квантовому числу  $M$ . Следует отметить, что в отличие от теории возмущений как резонансное, так и нерезонансное возбуждения рассчитываются единым образом как результат диагонализации матрицы  $\hat{Q}$ .

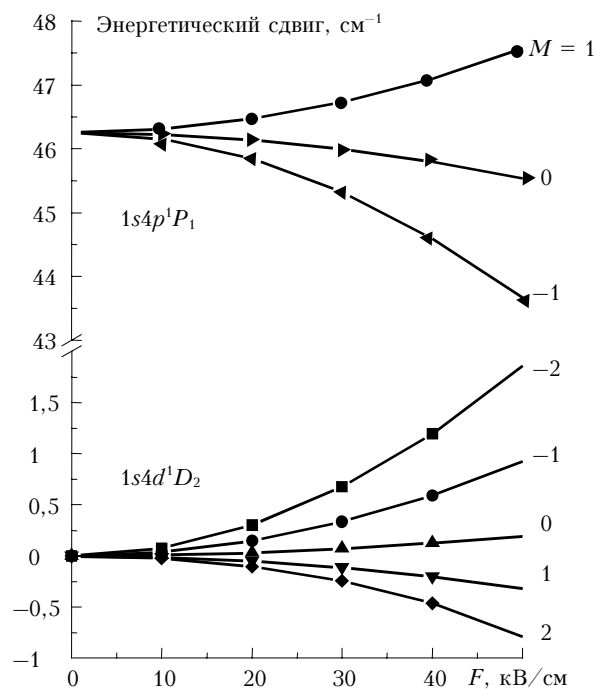


Рис. 3. Поведение  $1s4p^1P_1$  и  $1s4d^1D_2$  уровней атома He при резонансном возбуждении электрическим полем, приведен относительный сдвиг энергетических уровней ( $E_F - E_0 - 191446,55901$ ),  $\text{см}^{-1}$

Представляет интерес исследовать зависимость поведения энергетических уровней от частоты внешнего электрического поля. В качестве примера на рис. 4 приведена зависимость уровня  $1s6p^1P_1$  от напряженности поля  $F$  при разных значениях частоты поля  $\omega$ . Как уже было показано, чем выше энергетический уровень, тем он чувствительнее к воздействию электрического поля. Поэтому для изучения поведения этого уровня достаточен диапазон напряженности поля до 1 кВ/см, а не от 0 до 50 кВ/см, как для более низких энергетических уровней. Как видно из приведенных графиков, хотя поле слабое, даже для такого слабого поля наблюдаются заметное расщепление и сдвиг магнитных подуровней (порядка  $0,1$   $\text{см}^{-1}$ ).

На рис. 4, а–в показано поведение  $1s6p^1P_1$  уровня в случае нерезонансного возбуждения электрическим полем. Видно, что подуровень с  $M = 0$  практически нечувствителен к изменению частоты поля, сдвиг подуровня с  $M = -1$  уменьшается, а сдвиг подуровня с  $M = 1$  увеличивается с ростом частоты поля. В целом это приводит к тому, что при

нерезонансном возбуждении степень расщепления уровня уменьшается при увеличении частоты поля.

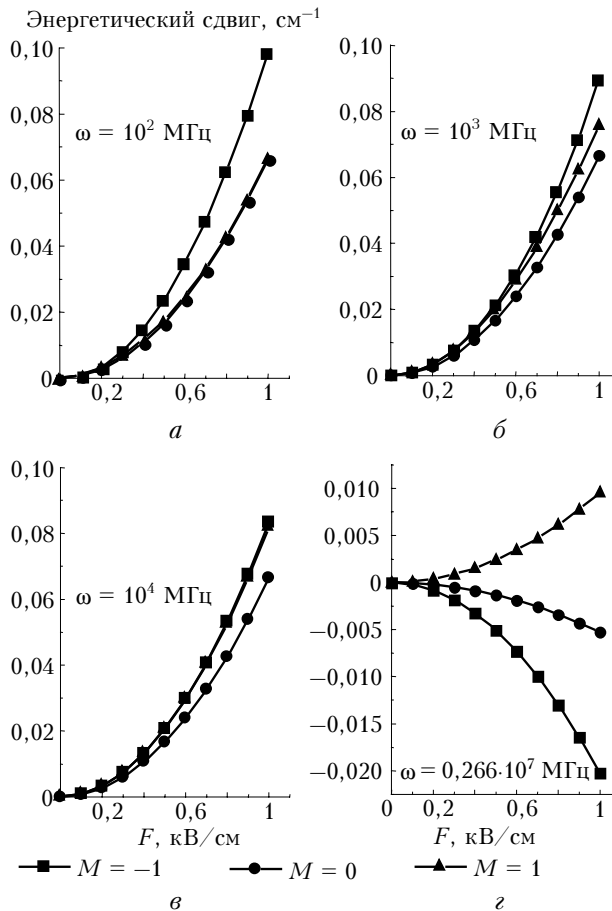


Рис. 4. Зависимость поведения  $1s6p^1P_1$  уровня атома He от частоты внешнего электрического поля

На рис. 4,г показано поведение этого же уровня при резонансном возбуждении полем частоты  $\omega = 0,266 \cdot 10^7$  МГц. Это частота дипольного  $1s6p^1P_1 - 1s6d^1D_2$  перехода. Из рис. 4,г видно, что степень расщепления уровня уменьшилась (по сравнению с предыдущими результатами) с меньшими частотами поля, однако магнитный подуровень с  $M = -1$  ведет себя не так, как при нерезонансном возбуждении.

Интересно отметить, что для всех приведенных уровней наблюдается следующая закономерность: когда возмущение электрическим полем нерезонансное, порядок следования магнитных подуровней произвольный, когда же возмущение резонансное, наблюдается упорядочивание магнитных подуровней относительно квантового числа  $M$ .

Общий анализ расчетов, проведенных для атома гелия, позволяет выявить ряд закономерностей для динамического эффекта Штарка для этого атома.

1. Из анализа волновых функций следует, что при увеличении напряженности электрического поля степень взаимодействия энергетических уровней возрастает, а при увеличении частоты электрического поля смешивание уровней уменьшается и в области

оптических частот  $\sim 10^8$  МГц мы имеем дело с практически изолированными уровнями.

2. Из анализа графиков, описывающих сдвиг и расщепление уровней атома He в электрическом поле различной интенсивности и частоты, следует, что в циркулярно поляризованном электрическом поле наблюдается квадратичный эффект Штарка с полным снятием вырождения энергетических уровней по магнитному квантовому числу.

3. Чем выше энергетический уровень, тем большее смещение он испытывает в электрическом поле. Увеличение частоты электрического поля приводит к уменьшению расщепления энергетического уровня при одной и той же напряженности поля.

Данные выводы согласуются с результатами теории возмущений, что еще раз говорит об адекватности предложенного подхода.

### Заключение

Как видно из приведенных рассуждений, предлагаемый подход к расчету спектров атомов и ионов в циркулярно поляризованном электрическом поле обладает следующими преимуществами по сравнению с теорией возмущений.

1. Данный подход свободен от ограничений, присущих теории возмущений, и может быть применен к расчету динамического эффекта Штарка для любого атома или иона, находящегося в циркулярно поляризованном электрическом поле произвольной напряженности и частоты. Кроме того, расчеты как резонансного, так и нерезонансного возбуждений рассчитываются из одного и того же уравнения и не требуют применения разных приближений, как это происходит в теории возмущений.

2. Весьма существенным представляется то, что в вычислительной процедуре учитываются не один, два или три уровня системы, а множество уровней, которые существуют для реальных атомов и ионов. Таким образом, в рамках предлагаемого подхода теоретический расчет эффекта Штарка проводится в многоуровневом приближении, что позволяет дополнительно оценить степень влияния взаимодействия атомных уровней на исследуемый эффект. Так как энергетические уровни атома в поле очень близки, учет их взаимодействия необходим.

3. Предлагаемый подход пригоден для расчета как низкочастотных, так и высокочастотных возбуждений.

Данный метод является весьма сложным при расчетах, однако для его реализации написан пакет программ STARKD, который позволяет значительно упростить все расчетные проблемы.

Как видно из приведенных результатов, на основании расчетов, проведенных в рамках предложенного метода, можно предсказать поведение спектральных линий атомов и ионов в циркулярно поляризованном электрическом поле произвольной напряженности и частоты.

Работа поддержана грантом INTAS № 01-0200.

1. *Bayfield J.E.* Excited atomic and molecular states in strong electromagnetic fields // *Phys. Reports.* 1979. V. 51. N 6. P. 318–391.
2. *Буреева Л.А., Лисица В.С.* Возмущенный атом. М.: Изд-во АТ, 1997. 463 с.
3. *Делоне Н.Б., Крайнов В.П.* Атом в сильном световом поле. М.: Энергоатомиздат, 1978. 288 с.
4. *Манаков Н.Л., Рапопорт Л.Б., Фанштейн А.Г.* Квази-энергетические состояния плоского ротатора в поле циркулярно поляризованной волны // *Теор. и мат. физ.* 1977. Т. 30. № 3. С. 395–407.
5. *Делоне Н.Б., Крайнов В.П.* Динамический штарковский сдвиг атомных уровней // *Успехи физ. наук.* 1999. Т. 169. Вып. 7. С. 753–772.
6. *Кочанов В.П.* Динамический эффект Штарка в двух- и одноуровневой квантовых системах в поле интенсивного излучения произвольной частоты // *Оптика и спектроскопия.* 1998. Т. 84. Вып. 1. С. 9–16.
7. *Манаков Н.Л., Рапопорт Л.Б.* Частица с малой энергией связи в циркулярно поляризованном поле // *Ж. эксперим. и теор. физ.* 1975. Т. 69. Вып. 9. С. 842–851.
8. *Делоне Н.Б., Зон Б.А., Крайнов В.П., Ходовой В.А.* Нерезонансное возмущение атомного спектра в сильном световом поле // *Успехи физ. наук.* 1976. Т. 120. Вып. 1. С. 1–54.
9. *Рапопорт Л.Б., Зон Б.А., Манаков Н.Л.* Теория многофотонных процессов в атомах. М.: Атомиздат, 1978. 182 с.

*E.V. Koryukina.* **The many-level approximation in calculations of the dynamic Stark effect for helium atom.**

A new method for calculation of the dynamic Stark effect in the circularly polarized electric field with arbitrary intensity and frequency is suggested. The basic equations are presented. In the framework of the suggested approach, calculations of shifts and splittings of energy levels for the He atom in the circularly polarized electric field are carried out.