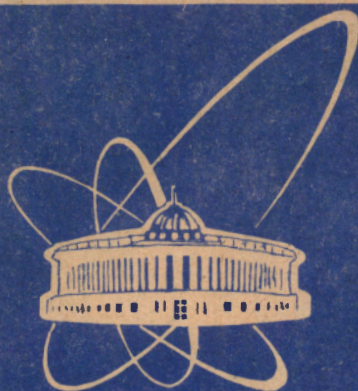


7-173



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P4-97-173

М.Динейхан*

ЭФФЕКТ ШТАРКА
В СИЛЬНОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ
В МЕТОДЕ ОСЦИЛЛЯТОРНОГО ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

Направлено в журнал «Ядерная физика»

*ИЯФ, Национальный ядерный центр, Алма-Ата, Казахстан

1997

1. Введение

Эффект Штарка является одной из классических задач квантовой механики (см., например, [1]- [5]). В то же время, в случае сильного электрического поля, этот эффект в полной мере не исследован. Эффект Штарка в атоме водорода в области сильных полей рассматривался в работах [2]-[5] главным образом для основного состояния. Для вычисления энергии E и ширины Γ использовался метод Вейля [2], численное решение уравнения Шредингера [3], модифицированная теория возмущений [4] и борелевское суммирование рядов теории возмущений (ТВ) для констант разделения β_1, β_2 [5]. При напряженности внешнего поля $F \leq 0.1$ результаты всех авторов почти совпадают.

В последнее время успешно использовался метод $1/N$ -разложения [6], [7]. Однако $1/N$ -разложение неприменимо при $F \simeq F_*$, где F_* - классический порог ионизации.

Уравнение Шредингера для атома водорода в однородном электрическом поле имеет вид

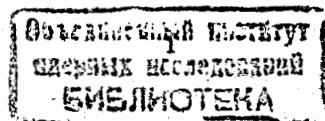
$$\left[\frac{1}{2m_e} \vec{p}^2 - \frac{e^2}{r} + eFz \right] \Psi(\vec{r}) = E\Psi(\vec{r}), \quad (1.1)$$

где F - однородное электрическое поле, направленное вдоль оси z . В нашем вычислении будем использовать следующую систему единиц: $\alpha^2 m_e c^2$ - энергия Хартри, $w = F/F_0$, - напряженность электрического поля ($F_0 = \alpha^3 m_e^2 c^3 / (e\hbar) = 5.142 \cdot 10^9$ b/cm), $a_0 = \hbar / \alpha m_e c$ - радиус Бора. Энергия уровня атома водорода с параболическими квантовыми числами n_1, n_2, m может быть разложена в ряд теории возмущений

$$E_{n_1, n_2, m}(w) = \frac{1}{2n^2} \sum_{k=0}^{\infty} \epsilon_k w^k, \quad (1.2)$$

где $n = 1 + n_1 + n_2 + |m|$ - главное квантовое число, k - порядок ТВ.

Первые три порядка ТВ известны давно [1]. Четвертый порядок для состояний с произвольными n_1, n_2, m вычислен в работе [8] с использованием группы динамической симметрии атома водорода. Явные выражения для коэффициентов ТВ вплоть до $k = 7$ и $k = 10$ получены в работах [9], [10]. Однако при $k \rightarrow \infty$ высшие порядки ТВ факториально растут (феномен Дайсона [11]). Таким образом, ряды ТВ имеют нулевой радиус сходимости, поэтому использование ТВ для вычисления штарковских сдвигов и



ширины уровней в сильном поле требует суммирования асимптотических рядов (подробно см. в [7] и [12]).

В данной работе метод осцилляторного представления ([13], [14]) применен к вычислению энергетического спектра атома водорода во внешнем однородном электрическом поле. Работа построена следующим образом. Во втором разделе получена основная формула для спектра в слабом электрическом поле. Третий раздел посвящен изучению атома водорода в сильном электрическом поле как в основном, так и в возбужденном состояниях. В четвертом разделе подытожены основные результаты.

2. Атом водорода в слабом электрическом поле

Уравнение Шредингера (1.1) в параболической системе координат записывается в следующем виде [1]:

$$\begin{cases} \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\xi} \cdot \frac{\partial}{\partial \xi} - \frac{m^2}{4\xi^2} \right) - \frac{E}{4} - \frac{\beta_1}{2\xi} + \xi \cdot \frac{w}{8} \right] \psi_1(\xi) = 0, \\ \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \eta^2} + \frac{1}{\eta} \cdot \frac{\partial}{\partial \eta} - \frac{m^2}{4\eta^2} \right) - \frac{E}{4} - \frac{\beta_2}{2\eta} - \eta \cdot \frac{w}{8} \right] \psi_2(\eta) = 0. \end{cases} \quad (2.1)$$

Здесь β_j - параметры разделения переменных

$$\beta_1 + \beta_2 = 1. \quad (2.2)$$

Волновая функция исходной системы (1.1) представляется в стандартном виде

$$\psi(\vec{r}) = \frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}} \cdot \psi_1(\xi) \cdot \psi_2(\eta). \quad (2.3)$$

Сформулируем задачу следующим образом. Используя метод осцилляторного представления (ОП) из (2.1), определяем параметры разделения β_j и соответствующие волновые функции ψ_j . Энергия E исходной системы (1.1) определяется из (2.2).

Будем считать, что электрическое поле слабо. В этом приближении динамика системы определяется кулоновским взаимодействием, т.е. асимптотическое поведение волновых функций ψ_j является кулоновским.

Идея метода ОП заключается в следующем [13]: проводится замена переменных для (η, ξ) в уравнении (2.1) таким образом, чтобы получить осцилляторное асимптотическое

поведение волновой функции преобразованного уравнения. Такое преобразование для (2.1) имеет вид

$$\xi = q^2, \quad \psi_1(\xi) \rightarrow \psi_1(q^2) = q^{|m|} \Phi_1(q^2). \quad (2.4)$$

Учитывая (2.4), после некоторых упрощений получаем из (2.1) модифицированное уравнение Шредингера во вспомогательном пространстве R^d

$$\begin{cases} H^{(1)} \Phi_1 = \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{d-1}{q} \cdot \frac{\partial}{\partial q} \right) - E q^2 - 2\beta_1 + \frac{1}{2} \cdot w q^4 \right] \Phi_1(q^2) = 0, \\ H^{(2)} \Phi_2 = \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial Q^2} + \frac{d-1}{Q} \cdot \frac{\partial}{\partial Q} \right) - E Q^2 - 2\beta_2 - \frac{1}{2} \cdot w Q^4 \right] \Phi_2(Q^2) = 0. \end{cases} \quad (2.5)$$

где $d = 2 + 2|m|$. Переменные (q_j, Q_j) представляют собой векторы в R^d . Оператор

$$\Delta_d = \left(\frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{d-1}{q} \cdot \frac{\partial}{\partial q} \right)$$

можно рассматривать как радиальную часть d -мерного лапласиана, поскольку волновая функция Φ_k зависит только от радиуса $|q|$.

Из (2.5) видно, что азимутальное квантовое число m оказалось поглощено в размерность вспомогательного пространства R^d . Будем считать, что параболические квантовые числа n_1 и n_2 определяют радиальные возбуждения, т.е.

$$|n_k\rangle = C_{n_k} (a_j^\dagger a_j^\dagger)^{n_k} |0\rangle, \quad k = 1, 2, \quad C_n^{-2} = 2^{2n} n! \frac{\Gamma(d/2 + n)}{\Gamma(d/2)}, \quad (2.6)$$

где a_j^\dagger - оператор рождения, а $|0\rangle$ - вакуумное состояние, т.е. $a_j|0\rangle = 0$ и $\langle 0|0\rangle = 1$.

В низшем порядке ОП [13] спектр радиальных возбуждений определяется следующим образом:

$$\varepsilon_j^{[n_k]}(\beta_k) = \langle n_k | H | n_k \rangle. \quad (2.7)$$

Согласно (2.5) параметр β_k с учетом параболического квантового числа, введенного в (2.6), определяется из уравнения

$$\varepsilon_k^{[n_k]}(\beta_k) = 0. \quad (2.8)$$

Для решения уравнения (2.5) представим канонические переменные (p, q) осциллятора через операторы рождения и уничтожения a_j^\dagger и a_j

$$q_j = \frac{1}{\sqrt{2\omega}} \cdot (a_j^\dagger + a_j), \quad p_j = \sqrt{\frac{\omega}{2}} \cdot \frac{a_j - a_j^\dagger}{i}, \quad j = 1, 2, \dots, d. \quad (2.9)$$

Подставляя (2.9) в (2.5) и проводя нормальное упорядочение операторов рождения и уничтожения, представим гамильтониан в виде

$$H^{(k)} = H_0^{(k)} + H_I^{(k)} + \varepsilon_0^{(k)}(E, \beta_k), \quad k = 1, 2,$$

где

$$\begin{aligned} H_0^{(1)} &= \omega(a_j^\dagger a_j), & H_0^{(2)} &= \Omega(A_j^\dagger A_j), \\ \varepsilon_0^{(1)}(E, \beta_1) &= \frac{d}{4} \cdot \omega - 2\beta_1 - \frac{dE}{2\omega} + \frac{wd(d+2)}{8\omega^2}, \\ \varepsilon_0^{(2)}(E, \beta_2) &= \frac{d}{4} \cdot \Omega - 2\beta_2 - \frac{dE}{2\Omega} - \frac{wd(d+2)}{8\Omega^2}, \end{aligned} \quad (2.10)$$

$$H_I^{(1)} = \frac{1}{2} \cdot w : q^4 : , \quad H_I^{(2)} = -\frac{1}{2} \cdot w : Q^4 : . \quad (2.11)$$

Здесь * : - символ нормального упорядочения. Из условия осцилляторного представления, т.е.

$$\frac{\partial}{\partial \omega} \varepsilon_0(\beta_1) = 0, \quad \frac{\partial}{\partial \Omega} \varepsilon_0(\beta_2) = 0, \quad (2.12)$$

получаем уравнения для частоты осциллятора

$$\begin{aligned} \frac{d}{4} \cdot \omega + \frac{dE}{2\omega} - \frac{wd(d+2)}{4\omega^2} &= 0, \\ \frac{d}{4} \cdot \Omega + \frac{dE}{2\Omega} + \frac{wd(d+2)}{4\Omega^2} &= 0. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Ограничиваясь низшим порядком по w , из условия осцилляторного представления (2.13) находим

$$\begin{aligned} \omega &= v + w \cdot \frac{d+2}{2v^2} - \frac{3}{8} \cdot \frac{(d+2)^2}{v^5} \cdot w^2 + O(w^3), \\ \Omega &= v - w \cdot \frac{d+2}{2v^2} - \frac{3}{8} \cdot \frac{(d+2)^2}{v^5} \cdot w^2 + O(w^3), \end{aligned} \quad (2.14)$$

где использовано обозначение $v = \sqrt{-2E}$.

Вторая поправка, которая связана с гамильтонианом взаимодействия $H_I^{(k)}$, определяется следующим образом [13]:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{(2)}^{[n_k]}(E, \beta_k) &= \varepsilon_0^{(k)}(E, \beta_k) + 2n_k \omega(E, \beta_k) + \langle n_k | H_I^{(k)} | n_k \rangle \\ &- \langle n_k | \left(H_I^{(k)} - \langle n_k | H_I^{(k)} | n_k \rangle \right) \frac{1}{H_0^{(k)} - 2n_k \omega(E, \beta_k)} \left(H_I^{(k)} - \langle n_k | H_I^{(k)} | n_k \rangle \right) | n_k \rangle, \end{aligned} \quad (2.15)$$

где n_k ($k = 1, 2$) - радиальное квантовое число в параболической системе координат.

Учитывая (2.10) и (2.15), для параметра β_1 получаем из (2.8)

$$\begin{aligned} \beta_1 &= \frac{d}{8} \cdot \omega - \frac{dE}{4\omega} + \frac{wd(d+2)}{16\omega^2} + n_1 \omega(E, \beta_1) + \frac{1}{2} \langle n_1 | H_I^{(1)} | n_1 \rangle \\ &- \frac{1}{2} \langle n_1 | \left(H_I^{(1)} - \langle n_1 | H_I^{(1)} | n_1 \rangle \right) \frac{1}{H_0^{(1)} - 2n_1 \omega(E, \beta_1)} \left(H_I^{(1)} - \langle n_1 | H_I^{(1)} | n_1 \rangle \right) | n_1 \rangle. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Детали вычисления матричного элемента $\langle n_1 | H_I^{(1)} | n_1 \rangle$ приведены в приложении. Расчет второй поправки можно найти в работе [13].

Параметр β_2 вычисляется аналогичным образом. В итоге находим

$$\begin{aligned} 1 &= \beta_1 + \beta_2 = nv + \frac{3(n_1 - n_2)n \cdot w}{2v^2} \\ &- \frac{w^2 \cdot n}{16 \cdot v^5} \cdot [17n^2 + 51(n_1 - n_2)^2 - 9m^2 + 19] + O(w^3), \end{aligned} \quad (2.17)$$

где $n = 1 + n_1 + n_2 + |m|$. Из (2.17) получаем энергию E_n исходной системы

$$\begin{aligned} E_n &= -\frac{1}{2n^2} + \frac{3}{2} wn(n_1 - n_2) \\ &- \frac{w^2 n^4}{16} [17n^2 - 3(n_1 - n_2)^2 - 9m^2 + 19] + O(w^3). \end{aligned} \quad (2.18)$$

Уравнение (2.18) воспроизводит известный результат для спектра атома водорода в слабом электрическом поле. При этом энергия E_n вещественна. Обычно для нахождения ширины уровней используют квазиклассическое приближение. Ниже мы покажем, как ширина уровней может быть рассчитана без такого приближения.

3. Атом водорода в сильном электрическом поле

Рассмотрим гамильтониан

$$H = \frac{1}{2} \vec{p}^2 + V(\vec{r}). \quad (3.1)$$

Пусть потенциал $V(\vec{r})$ представляется в следующем виде:

$$V(\vec{r}) = V_1(\vec{r}) + g \cdot V_2(\vec{r}), \quad (3.2)$$

где g - некоторая константа. Когда g достаточно мала, то вклад второго слагаемого рассматривается как малое возмущение. Например, ангармонический осциллятор

$$V(\vec{r}) = r^2 + \lambda \cdot r^4 \quad (3.3)$$

или атом водорода во внешнем электрическом поле определяются потенциалами типа представленного в (3.2). Предположим, что при $g \ll 1$ или $g \gg 1$ асимптотическое поведение волновой функции, соответствующей гамильтониану (3.1), имеет вид

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \Psi \sim \exp\{-r^{\alpha_1}\}, \quad \text{при } g \ll 1,$$

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \Psi \sim \exp\{-r^{\alpha_2}\}, \quad \text{при } g \gg 1.$$

Таким образом, при возрастании константы g асимптотика волновой функции гамильтониана (3.1) меняется. Если мы предположим, что асимптотическое поведение волновой функции может быть представлено при любых g в виде

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \Psi \sim \exp\{-r^\alpha\}, \quad (3.4)$$

то параметр α при возрастании константы g будет изменяться в интервале $[\alpha_1, \alpha_2]$. В частности, для ангармонического потенциала (3.3) $1 \leq \alpha \leq 3$.

Основная идея метода осцилляторного представления состоит в том, что в исходном уравнении Шредингера необходимо провести замену переменных таким образом, чтобы преобразованное уравнение обладало решениями, имеющими гауссовскую асимптотику.

Согласно (3.4) такая замена переменных имеет вид

$$r^\alpha = q^2, \quad r = q^{2\rho}, \quad \rho = \frac{1}{\alpha}.$$

Предполагается, что параметр ρ является функцией константы связи g . Эта зависимость дает возможность перехода от одного режима взаимодействия к другому при изменении константы взаимодействия. В методе осцилляторного представления этот прием был апробирован в случае ангармонического потенциала [15]. Применим этот метод для вычисления спектра и ширины уровней атома водорода в сильном электрическом поле.

В случае слабого поля динамика системы определяется кулоновским взаимодействием, а при наличии сильного поля динамику определяют те слагаемые потенциала, которые пропорциональны напряженности внешнего поля. Таким образом, из (2.1) видно, что при возрастании внешнего поля асимптотика волновой функции переходит от кулоновской к асимптотике соответствующей линейному потенциалу. Переход к модифицированному уравнению Шредингера осуществляется следующими заменами переменных:

$$\xi = q^{2\rho}, \quad \psi_1(\xi) \rightarrow \psi_1(q^2) = q^{\rho|m|} \Phi_1(q^2), \quad (3.5)$$

где $2/3 \leq \rho \leq 1$. Подставляя (3.5) в (2.1) и производя некоторые упрощения, находим

$$\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial q^2} + \frac{d-1}{q} \frac{\partial}{\partial q} \right) - \frac{E\rho^2}{q^{2(1-2\rho)}} - \frac{2\beta_1\rho^2}{q^{2(1-\rho)}} + \frac{w\rho^2}{2} q^{2(3\rho-1)} \right] \Phi_1 = 0, \quad (3.6)$$

$$\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial Q^2} + \frac{d-1}{Q} \frac{\partial}{\partial Q} \right) - \frac{E\rho^2}{Q^{2(1-2\rho)}} - \frac{2\beta_2\rho^2}{Q^{2(1-\rho)}} - \frac{w\rho^2}{2} Q^{2(3\rho-1)} \right] \Phi_2 = 0.$$

где $d = 2 + 2\rho|m|$. Асимптотическое поведение собственных волновых функций преобразованного уравнения Шредингера является гауссовым для любых w .

Подставляя (2.9) в (3.6) и проводя нормальное упорядочение операторов рождения и уничтожения, имеем

$$H^{(1)} = H_0^{(1)} + H_1^{(1)} + \varepsilon_0^{(1)},$$

где

$$H_0^{(1)} = \omega (a^\dagger a), \quad (3.7)$$

$$\varepsilon_0^{(1)} = \frac{d\omega}{4} - \frac{E\rho^2}{\omega^{2\rho-1}} \frac{\Gamma(\frac{d}{2} + 2\rho - 1)}{\Gamma(\frac{d}{2})} - \frac{2\beta_1\rho^2}{\omega^{\rho-1}} \frac{\Gamma(\frac{d}{2} + \rho - 1)}{\Gamma(\frac{d}{2})} + \frac{w\rho^2}{2\omega^{3\rho-1}} \frac{\Gamma(\frac{d}{2} + 3\rho - 1)}{\Gamma(\frac{d}{2})},$$

$$H_1^{(1)} = \int_0^\infty dx \int \left(\frac{d\eta}{\sqrt{\pi}} \right)^d e^{-\eta^2(1+x)} : c_2^{-2i\sqrt{x}\omega(qm)} :$$

$$\left[-\frac{E\rho^2 x^{-2\rho}}{\omega^{2\rho-1}\Gamma(1-2\rho)} - \frac{2\beta_1\rho^2 x^{-\rho}}{\omega^{\rho-1}\Gamma(1-\rho)} + \frac{1}{2} \frac{w\rho^2 x^{-3\rho}}{\omega^{3\rho-1}\Gamma(1-3\rho)} \right]$$

Рассмотрим частный случай $n_1 = 0$, $n_2 = 0$. Согласно (2.8), с учетом условия осцилляторного представления (2.12), получаем систему уравнений для β_1 и частоты осциллятора ω . Решение системы принимает вид

$$\beta_1 = v \left[\frac{x}{4\rho} \frac{\Gamma(2 + |m|\rho)}{\Gamma(\rho + |m|\rho)} + \frac{1}{4x} \frac{\Gamma(2\rho + |m|\rho)}{\Gamma(\rho + |m|\rho)} + \frac{f}{4x^2} \frac{\Gamma(3\rho + |m|\rho)}{\Gamma(\rho + |m|\rho)} \right], \quad (3.8)$$

где x является решением следующего алгебраического уравнения:

$$x^3 - x\rho^2 \frac{\Gamma(2\rho + |m|\rho)}{\Gamma(2 + |m|\rho)} - 2\rho f \frac{\Gamma(3\rho + |m|\rho)}{\Gamma(2\rho + |m|\rho)} = 0. \quad (3.9)$$

Частота осциллятора определяется формулами

$$\omega^\rho = xv \quad \text{где } v = \sqrt{-2E}, \quad f = \frac{w}{v^3}. \quad (3.10)$$

Второе уравнение решается аналогично. Параметр β_2 имеет вид

$$\beta_2 = v \left[\frac{y}{4\rho} \frac{\Gamma(2 + |m|\rho)}{\Gamma(\rho + |m|\rho)} + \frac{1}{4y} \frac{\Gamma(2\rho + |m|\rho)}{\Gamma(\rho + |m|\rho)} - \frac{f}{4y^2} \frac{\Gamma(3\rho + |m|\rho)}{\Gamma(\rho + |m|\rho)} \right], \quad (3.11)$$

где y является решением следующих алгебраических уравнений:

$$\Omega^2 = yv, \quad y^3 - y\rho^2 \frac{\Gamma(2\rho + |m|\rho)}{\Gamma(2 + |m|\rho)} + 2\rho f \frac{\Gamma(3\rho + |m|\rho)}{\Gamma(2\rho + |m|\rho)} = 0. \quad (3.12)$$

где Ω - частота осциллятора. Энергия исходной системы, определяемая из (2.2), равна

$$E = \min_{\rho} \left(-\frac{1}{2A^2} \right) = -E_0 - \frac{i}{2}\Gamma, \quad (3.13)$$

где

$$E_0 = -ReE, \quad \Gamma = -2ImE,$$

$$A = \frac{x + y}{4\rho} \frac{\Gamma(2 + |m|\rho)}{\Gamma(\rho + |m|\rho)} + \frac{1}{4} \left(\frac{1}{x} + \frac{1}{y} \right) \frac{\Gamma(2\rho + |m|\rho)}{\Gamma(\rho + |m|\rho)} + \frac{f}{4} \left(\frac{1}{x^2} - \frac{1}{y^2} \right) \frac{\Gamma(3\rho + |m|\rho)}{\Gamma(\rho + |m|\rho)}. \quad (3.14)$$

Численные результаты приведены в таблице 1.

Теперь рассмотрим случай $n_1 \neq 0$, $n_2 \neq 0$. Учитывая (3.7), путем преобразований, аналогичных вышеприведенным, из (2.6) получаем

$$\varepsilon_1^{[n_1]}(\beta_1) = \left(\frac{d}{4} + 2n_1 \right) \omega - \frac{E\rho^2}{\omega^{2\rho-1}} \frac{\Gamma(\frac{d}{2} + 2\rho - 1)}{\Gamma(\frac{d}{2})} [1 + S_{n_1}(1 - 2\rho)] - \frac{2\beta_1\rho^2}{\omega^{\rho-1}} \frac{\Gamma(\frac{d}{2} + \rho - 1)}{\Gamma(\frac{d}{2})} [1 + S_{n_1}(1 - \rho)] + \frac{w\rho^2}{2\omega^{3\rho-1}} \frac{\Gamma(\frac{d}{2} + 3\rho - 1)}{\Gamma(\frac{d}{2})} [1 + S_{n_1}(1 - 3\rho)], \quad (3.15)$$

где

$$S_n(\tau) = \frac{\Gamma(\frac{d}{2})}{\Gamma(\frac{d}{2} + \tau)} \int_0^{\infty} \frac{dx}{\Gamma(\tau)} x^{-1+\tau} \int \left(\frac{d\eta}{\sqrt{\pi}} \right)^d e^{-\eta^2(1+x)} \langle n | : e^{-2i\sqrt{x}\omega(q\eta)} : | n \rangle. \quad (3.16)$$

Детали вычисления приведены в приложении. В этом случае частоты осцилляторов ω и Ω также даются формулами (3.10) и (3.12), куда следует подставить

$$x = x_{n_1} \cdot \sqrt{D(n_1)}, \quad \text{и} \quad y = y_{n_1} \cdot \sqrt{D(n_2)},$$

а x_{n_1} и y_{n_1} определить из уравнений

$$x_{n_1}^3 - x_{n_1} - f \cdot \frac{B(n_1)}{[D(n_1)]^{3/2}} = 0, \quad y_{n_2}^3 - y_{n_2} + f \cdot \frac{B(n_2)}{[D(n_2)]^{3/2}} = 0. \quad (3.17)$$

Таблица 1. Энергия атома водорода во внешнем электрическом поле для состояний $m = 0, 1, 2, 9$ и $n_1 = n_2 = 0$

	w	f	ρ	$-E$	Γ
$m = 0$	0.04	0.0396	1.00	0.5033	$7 \cdot 10^{-8}$
				0.5037718	$3.9 \cdot 10^{-6}$ [2]
	0.08	0.0767	1.00	0.5170	$6.8 \cdot 10^{-6}$
				0.51756	$4.54 \cdot 10^{-3}$ [2]
	0.12	0.1075	0.99	0.5370	0.0117
				0.5372	0.0299 [2]
				0.53557	0.0294 [3]
				0.5554	0.0714 [2]
	0.16	0.1372	0.97	0.54778	0.07195 [3]
				0.5744	0.1112
				0.5705	0.1209 [2]
				0.55260	0.12493 [3]
0.20	0.1625	0.92	0.5858	0.160	
			0.5830	0.174 [2]	
			0.55082	0.18927 [3]	
			0.5985	0.2224	
$m = 1$	0.004	0.0315	1.00	0.1261	$4 \cdot 10^{-8}$
				0.1263169	$4 \cdot 10^{-7}$ [16]
	0.008	0.06	1.00	0.1263169	$4 \cdot 10^{-7}$ [3]
				0.1310	$1.05 \cdot 10^{-5}$
	0.012	0.083	0.93	0.1312615	$1.036 \cdot 10^{-3}$ [16]
				0.1311886	$1.012 \cdot 10^{-3}$ [3]
				0.1378	0.0048
				0.137578	0.0061 [16]
	0.016	0.105	0.88	0.135972	0.0058 [3]
				0.1427	0.0127
				0.1427216	0.01347 [16]
				0.136437	0.013776 [3]
0.020	0.1127	0.855	0.1460	0.021	
			0.146729	0.021853 [16]	
			0.13150	0.02594 [3]	
			0.059	$1.16 \cdot 10^{-4}$	
$m = 2$	0.002	0.05	0.98	0.0646	0.0074
	0.004	0.085	0.93	0.0691	0.0179
	0.008	0.155	0.90	0.00642	0.0038
$m = 9$	0.0001	0.06906	1.00	0.006426	0.00337 [16]
				0.006426	0.003369 [17]
				0.00697	0.0045
				0.0002	0.1216

Здесь использованы следующие обозначения:

$$D(n) = 2\rho^2 \cdot \frac{\Gamma(2\rho + \rho|m|)}{\Gamma(2 + \rho|m|)} \cdot \frac{\rho + (1 - \rho)S_n(1 - 2\rho) - (1 - 2\rho)S_n(1 - \rho)}{(\rho + S_n(1 - \rho)) - \frac{4(1 - \rho)^n}{1 + \rho|m|}}$$

и

$$B(n) = 2\rho^2 \cdot \frac{\Gamma(3\rho + \rho|m|)}{\Gamma(2 + \rho|m|)} \cdot \frac{2\rho + (1 - \rho)S_n(1 - 3\rho) - (1 - 3\rho)S_n(1 - \rho)}{(\rho + S_n(1 - \rho)) - \frac{4(1 - \rho)^n}{1 + \rho|m|}}$$

Результаты вычислений приведены в таблице 2.

Таблица 2. Энергия атома водорода во внешнем электрическом поле для состояний $m = 0$, и $n_1 = n_2 \neq 0$

w	n_1	f	ρ	$-E$	$\Gamma \cdot 10^6$
$1.8 \cdot 10^{-4}$	2	0.02207	1.00	0.02062	1.28
				0.020622	2.22 [18]
				0.020623	2.282 [3]
$1.0 \cdot 10^{-5}$	5	0.0132	1.00	0.004356	2.71
				0.0043566	2.82 [18]
				0.04377	2.815 [3]
$3.0 \cdot 10^{-6}$	7	0.0099	1.00	0.00235	1.36
				0.002353	1.35 [18]
				0.002533	1.338 [3]

Решения уравнений (3.17) могут быть найдены аналитически и записываются следующим образом:

$$y_1 = a + b, \quad (3.18)$$

$$y_{2,3} = -\frac{1}{2} \cdot (a + b) \pm \frac{i\sqrt{3}}{2} \cdot (a - b),$$

где

$$a = \sqrt[3]{-\frac{f}{2} \frac{B(n_2)}{[D(n_2)]^{3/2}} + \sqrt{\frac{f^2 B^2(n_2)}{4 D^3(n_2)} - \frac{1}{27}}}, \quad (3.19)$$

$$b = \sqrt[3]{\frac{f}{2} \frac{B(n_2)}{[D(n_2)]^{3/2}} - \sqrt{\frac{f^2 B^2(n_2)}{4 D^3(n_2)} - \frac{1}{27}}}.$$

Решение для x_{n_1} получается из (3.18) заменой $f = -f$ и $n_1 \rightarrow n_2$, и оно положительно для любых значений параметра $f \geq 0$. Если $f = 0$, то из (3.18) имеем

$$y_1 = 0, \quad y_{2,3} = \mp 1. \quad (3.20)$$

В нашем подходе частота осциллятора должна быть положительной. Зависимость y_j от f изображена на рис.1 и 2 при $n_2 = 0$. Существует такое значение параметра $f = f_*$, при котором решения y_j уходит в комплексную плоскость. Переходное значение параметра f равно

$$f_* = \frac{[D(n_2)]^{3/2}}{B(n_2)} \cdot \frac{2}{\sqrt{27}}. \quad (3.21)$$

$$f_* = \rho \frac{\Gamma(2\rho + \rho|m|)}{\Gamma(3\rho + \rho|m|)} \sqrt{\frac{\Gamma(2\rho + \rho|m|)}{\Gamma(2 + \rho|m|)}} \frac{1}{\sqrt{27}}, \quad \text{при } n_2 = 0.$$

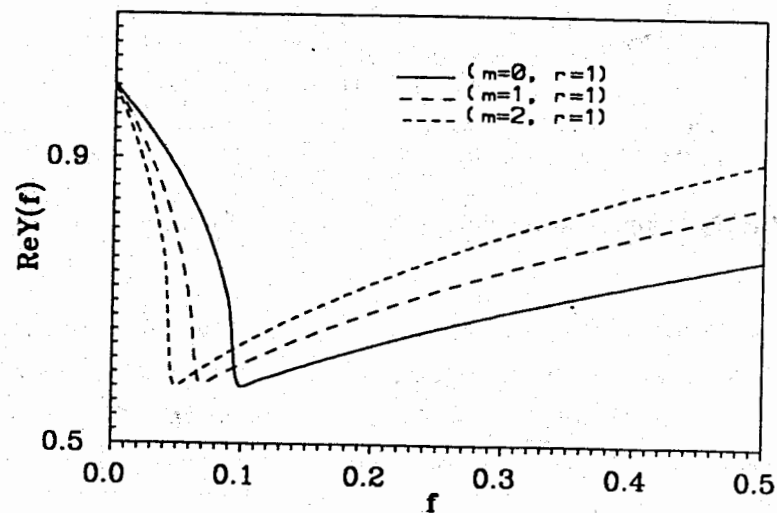


Рис.1. Зависимость y_3 от f при $n_2 = 0$. Существует такое значение параметра $f = f_*$, при котором решения y_3 уходит в комплексную плоскость

При $f \leq f_*$ решения y_j - вещественные, а при $f \geq f_*$ у частоты осциллятора Ω возникает мнимая часть, что позволяет рассчитать не только спектр, но и ширины уровней. При $f = f_*$, $n_1 = n_2 = 0$ и $\rho = 1$, имеем

$$E_* = \frac{2^7}{3^5} \cdot \frac{1}{(1 + |m|)^2}, \quad (3.22)$$

$$w_* = \frac{2^{12}}{3^9} \cdot \frac{1}{(1 + |m|)^3(2 + |m|)}.$$

Из (3.22) видно, что при возрастании m под пороговый переход осуществляется при несильных электрических полях.

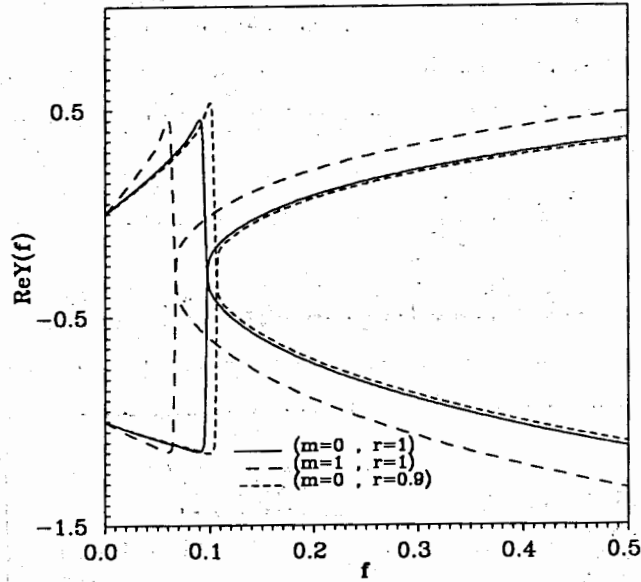


Рис.2. Изображена зависимость y_1 и y_2 от f при $n_2 = 0$

Энергетический спектр и ширины уровней в нашем подходе вычисляются аналитически как в слабом, так и в сильном внешнем электрическом поле. Результаты для энергий и ширины атома водорода в основном и возбужденном состояниях приведены в таблицах 1 и 2. Из таблиц видно, что в случае сильного и слабого поля наши результаты хорошо согласуются с результатами других авторов.

4. Обсуждение

Подведем итоги.

1. Параметр ρ , который связан с асимптотическим поведением волновой функции, контролирует переход от одного режима взаимодействия к другому. Из таблиц 1 и 2 видно, что при возрастании напряженности внешнего электрического поля параметр ρ уменьшается от 1 до 0.85. Согласно (3.5) поведение волновой функции при возрастании напряженности электрического поля переходит от кулоновского к поведению линейного потенциала.

2. Энергетический спектр атома водорода вычислен аналитически (формула (3.13)) и нет необходимости суммирования расходящихся рядов.

3. Из (3.20) видно, что переход $w \rightarrow 0$ в нашем подходе осуществляется без трудностей, и мы получаем обычный кулоновский спектр атома водорода. Конечно, в этом пределе $\rho = 1$. При $w = w_*$, т.е. около порогового значения напряженности электрического поля, уровень энергии может быть вычислен. Частное значение ($\rho = 1$) приведено в (3.22).

Автор считает своим приятным долгом выразить искреннюю благодарность Г.В.Ефимову, С.Н. Неделько, В.С. Мележику и Р.Г. Назмитдинову за обсуждение и полезные советы. Работа поддержана грантом РФФИ No. 96-02-17435-а.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Приведем некоторые детали вычисления поправки $\langle n_r | H_I | n_r \rangle$. Прежде всего представим в нормальной форме произведения канонических переменных $q^{2\tau}$, где τ может принимать любые значения. Пусть $\tau = 1, 2, 3, \dots$, тогда, учитывая (2.9), имеем

$$\begin{aligned}
 q^2 &= \frac{d}{2\omega} + : q^2 : , & (A.1) \\
 q^4 &= \frac{d(d+2)}{4\omega^2} + \frac{d+2}{\omega} : q^2 : + q^4 : , \\
 q^6 &= \frac{d(d+2)(d+4)}{8\omega^3} + \frac{3(d+2)(d+4)}{4\omega^2} : q^2 : + \frac{3(d+4)}{2\omega} : q^4 : + : q^6 : .
 \end{aligned}$$

Если $\tau < 0$, то будем использовать следующее представление:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{q^{2\tau}} &= \int_0^\infty \frac{dx}{\Gamma(\tau)} x^{\tau-1} e^{-q^2 x} = \int_0^\infty \frac{dx}{\Gamma(\tau)} x^{\tau-1} \cdot \int \left(\frac{d\eta}{\sqrt{\pi}} \right)^d \cdot \frac{e^{-\eta^2(\frac{1}{2} + \frac{1}{\omega})}}{x^{d/2}} : e^{-2iq\eta} : \\
 &= \omega^\tau \cdot \frac{\Gamma(d/2 - \tau)}{\Gamma(d/2)} : q^{2\tau} : \omega^{\tau+1} \cdot \frac{\Gamma(d/2 - \tau)}{\Gamma(1 + d/2)} \\
 &+ \omega^\tau \int_0^\infty \frac{dx}{\Gamma(\tau)} x^{-1+\tau} \int \left(\frac{d\eta}{\sqrt{\pi}} \right)^d e^{-\eta^2(1+x)} : e_2^{-2i\sqrt{x\omega}(q\eta)} : . & (A.2)
 \end{aligned}$$

При вычислении матричного элемента $\langle n_r | H_I | n_r \rangle$ используем следующее тождество:

$$\begin{aligned}
 e^{i\vec{k}\vec{a}} e^{i\vec{p}\vec{a}^\dagger} &= e^{i\vec{p}\vec{a}^\dagger} e^{i\vec{k}\vec{a}} e^{-(\vec{k}\vec{p})} , & (A.3) \\
 e^{i\vec{k}\vec{a}} \vec{a}^\dagger e^{i\vec{k}\vec{a}} &= \vec{a}^\dagger + i\vec{k} , \\
 e^{\alpha\vec{a}^\dagger} \vec{a} e^{-\alpha\vec{a}^\dagger} &= \vec{a} e^{-\alpha} .
 \end{aligned}$$

Учитывая (2.8) и (A.3) в (A.1), получаем следующие соотношения:

$$\begin{aligned} \langle n_r | : q^2 : | n_r \rangle &= \frac{2n_r}{\omega}, \\ \langle n_r | : q^4 : | n_r \rangle &= \frac{n_r}{\omega^2} [d + 6n_r - 4], \\ \langle n_r | : q^6 : | n_r \rangle &= \frac{2n_r(n_r - 1)}{\omega^3} [3d + 10n_r - 8]. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Рассмотрим

$$S_n(\tau) = \frac{\Gamma(d/2)}{\Gamma(d/2 + \tau)} \int_0^\infty \frac{dx}{\Gamma(\tau)} x^{\tau-1} \int \left(\frac{d\eta}{\sqrt{\pi}} \right)^d e^{-\eta^2(1+x)} \langle n | : e_2^{-2i\sqrt{x}\omega(q\eta)} : | n \rangle. \quad (\text{A.5})$$

Учитывая (A.3), после некоторых упрощений имеем

$$\langle n | : e_2^{-iB(\alpha+\eta) - iB(\alpha\eta)} : | n \rangle = C_n^{2n} \frac{\partial^{2n}}{\partial \alpha^n \partial \beta^n} \sum_{j=2}^{2n} \frac{(B^2 \eta^2)^j}{j!} \frac{(\alpha + \beta - 4\alpha\beta)^j}{(1 - 4\alpha\beta)^{j+d/2}} \Big|_{\alpha, \beta=0}, \quad (\text{A.6})$$

где B – некоторая константа.

При вычислении поправки встречается следующее выражение :

$$T_n(x) = \int \left(\frac{d\eta}{\sqrt{\pi}} \right)^d e^{-\eta^2(1+x)} \langle n | : e_2^{-2i\sqrt{x}\omega(q\eta)} : | n \rangle. \quad (\text{A.7})$$

Легко видеть, что $T_0(x) = 0$. Учитывая (A.3) и (A.6) в (A.7), имеем

$$T_n(x) = \sum_{k=2}^{2n} \sum_{s=0}^n (-1)^k \frac{x^k}{(1+x)^{k+d/2}} \frac{\Gamma(1+n)}{\Gamma(n+d/2)} \frac{2^{2s-k}}{\Gamma(n-s+1)} \frac{\Gamma(k+n-s+d/2)}{\Gamma^2(k-s+1)\Gamma(2s-k+1)}. \quad (\text{A.8})$$

Согласно (A.7)

$$S_n(\tau) = \frac{\Gamma(d/2)}{\Gamma(d/2 + \tau)} \int_0^\infty \frac{dx}{\Gamma(\tau)} x^{-1+\tau} \cdot T_n(x). \quad (\text{A.9})$$

Учитывая (A.8) в (A.9), окончательно получаем

$$S_n(\tau) = \frac{\Gamma(d/2)}{\Gamma(\tau)} \frac{\Gamma(1+n)}{\Gamma(n+d/2)} \sum_{k=2}^{2n} \frac{\Gamma(\tau+k)}{\Gamma(k+d/2)} \sum_{s=0}^n (-1)^k \frac{2^{2s-k}}{\Gamma(n-s+1)} \frac{\Gamma(k+n-s+d/2)}{\Gamma^2(k-s+1)\Gamma(2s-k+1)}. \quad (\text{A.10})$$

Литература

- [1] Bethe, H.A., Salpeter, E.E.: Quantum Mechanics of one- and two-electron atoms. Springer-Verlag, 1957.

- [2] Hehenberger M., McIntoch H.V., Brändas E.: Phys. Rev. **A12**, 1(1975).
- [3] Damburg R. J., Kolosov V.V.: J. Phys. **B9**, 3149(1978); **B11**, 1921(1979); **B12**, 2637(1979).
- [4] Dolgov A.D., Turbiner A.V.: Phys. Lett. **A77**, 15(1980).
- [5] Benassi L., Grecchi V., Silverstone H..J.: J. Phys. **B13**, 911(1980).
- [6] Вайнберг В.М. и др.: ЖЭТФ **93**, 450(1987);
- [7] Popov V.S., et al.: Phys. Lett. **A224**, 15(1996/97).
- [8] Аллилуев С.П., Малкин И.А.: ЖЭТФ **66**, 1283(1978).
- [9] Silverstone H., J.: Phys. Rev. **A18**, 1853(1978).
- [10] Hoc N., D'Etat B., Couland G.: Phys. Lett. **A85**, 327(1981).
- [11] Dyson F.J.: Phys. Rev. **85**, 631(1952).
- [12] Попов В.С., и др. ЯФ, **44**, 1103(1986);
Вайнберг В.М. Попов В.С.: ДАН СССР. **272**, 336(1983).
- [13] Dineykhon, M., Efimov, G.V., Ganbold, G. and Nedelko, S.N.: Oscillator Representation in Quantum Physics, Lecture Notes in Physics, **m 26** Springer Verlag. (1995).
- [14] Dineykhon, M., Efimov, G.V.: Few-Body Systems **16**, 59(1994); ЯФ. **57**, 220(1994);
Dineykhon, M., Nazmitdinov, R.G.: Phys. Rev. **B55**, 13707 (1997).
- [15] Динейхан М., Ефимов Г.В.: ЯФ, **58**, 1614(1995).
- [16] Fernandez F.M.: Phys. Rev. **A54**, 1206(1996).
- [17] Popov V.S., et al.: Phys. Lett. **A149**, 418(1990).
- [18] Popov V.S., et al.: Phys. Lett. **A124**, 77(1987).

Рукопись поступила в издательский отдел
30 мая 1997 года.

Динейхан М.

P4-97-173

Эффект Штарка в сильном электрическом поле
в методе осцилляторного представления

В рамках метода осцилляторного представления рассмотрен атом водорода в электрическом поле. В случае внешнего слабого электрического поля вычислен энергетический спектр в рамках теории возмущений. При наличии сильного поля предложен способ вычисления уровней, энергии и ширины. Уровни энергии при пороговом значении электрического поля найдены аналитически. Показано, что при выключении электрического поля воспроизводится точный кулоновский спектр.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики им. Н.Н.Боголюбова ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 1997

Перевод автора

Dineykhon M.

P4-97-173

Strong Stark Effect in the Oscillator Representation

The oscillator representation is applied to calculate the energy spectrum and width of the hydrogen atom in an external electric field. For the strong electric field, a new approach is suggested for the calculation of the energy and width. The energy level of the classical ionization threshold is calculated analytically. The results of the zeroth approximation of oscillator representation are in good agreement with the exact values.

The investigation has been performed at the Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 1997