

539.187.27/.28

**НОВОЕ В ЭФФЕКТАХ ШТАРКА И ЗЕЕМАНА  
ДЛЯ АТОМА ВОДОРОДА****В. С. Лисица****СОДЕРЖАНИЕ**

1. Введение . . . . .	379
2. Эффект Штарка . . . . .	381
2.1. Водородоподобные атомы в электрическом поле. Общие соотношения.	
2.2. Радиационные времена жизни состояний. 2.3. Интенсивности штарковских компонент. 2.4. Слабое поле. Асимптотическая теория распада атома. 2.5. Классическая теория распада атома в электрическом поле. 2.6. Распад уровней вблизи критического значения электрического поля. 2.7. Квазиклассическая теория для атомных состояний в электрическом поле. 2.8. Результаты численных расчетов.	
3. Эффект Зеемана . . . . .	396
3.1. Атом в магнитном поле. 3.2. Адиабатическая теория. 3.3. Пересечение термов и «скрытая» симметрия атома в магнитном поле. 3.4. Силы осцилляторов переходов. 3.5. Классические траектории атомного электрона в магнитном поле. 3.6. Стохастизация движения электрона в кулоновском и магнитном полях. 3.7. Численные расчеты спектров атома в магнитном поле. 3.8. Одновременное воздействие полей $F$ и $B$ на атом.	
4. Заключение . . . . .	420
Список литературы . . . . .	420

**1. ВВЕДЕНИЕ**

Исследование расщепления энергетических уровней атомов в электрическом  $F$  (штарк-эффект, 1913 г.) и магнитном  $B$  (зееман-эффект, 1896 г.) полях явилось одним из важных подтверждений справедливости основных положений созданной квантовой теории. Основы квантовой теории эффектов Штарка и Зеемана подробно изложены в известной монографии Бете и Солпитера<sup>1</sup>, а также в курсах по квантовой механике и теоретической спектроскопии<sup>2, 3</sup>.

В последующие годы интерес к этим эффектам переместился в область прикладных исследований. При этом обнаружилось, что многие результаты теории оказываются либо малоприменимыми для конкретных расчетов, либо вообще незавершенными вплоть до последнего времени. Дальнейшее развитие теории связано в основном с исследованиями атомных спектров в достаточно сильных полях  $B$  и  $F$  и для высоковозбужденных состояний с  $n \gg 1$ . Интерес к этим проблемам связан с широким кругом приложений: ионизацией в электрическом поле ридберговских атомных состояний, селективно заселяемых лазерным излучением<sup>4, 5</sup>, спектрами поглощения экситонов в магнитном поле<sup>6, 7</sup>, структурой атомов в сверхсильных магнитных полях на поверхности нейтронных звезд<sup>8-10</sup>, расщеплением и уширением атомных спектральных линий в электрических и магнитных полях плазмы<sup>3, 11, 12</sup>, структурой радиолиний, излучаемых высоковозбужденными атомами в межзвездной среде<sup>13, 14</sup>, и др.

Современные эксперименты с ридберговскими атомами связаны с широким кругом теоретических проблем, включающих метод квантового дефекта<sup>15</sup>, вопросы динамических эффектов Штарка и Зеемана в переменных

полях  $F$  и  $B$  (см. <sup>16</sup>) и другие вопросы (см. монографию <sup>17</sup>). Среди этих проблем важное место занимают исследования простейшей атомной системы — атома водорода, которому и посвящен данный обзор.

В лабораторных условиях регистрируется селективное заселение водородных состояний с  $n \sim 10\text{--}50$  (см. обзор Коча в <sup>17</sup>, с. 445). Эти опыты открывают принципиальную возможность прецизионных измерений фундаментальных атомных постоянных. Атом водорода представляет большой интерес и для астрофизических исследований, где достижимы величины  $n \sim 100\text{--}400$  (см. обзор Далгарно в <sup>17</sup>, с. 9). Для интерпретации как лабораторных, так и астрофизических данных требуется детальная информация о зависимости атомных параметров как от величин внешних полей, так и от индивидуальных квантовых чисел атомных состояний. Поэтому изложение материала ниже рассчитано не только на введение в общие принципы теории, но и на получение конкретных аналитических и численных результатов, пригодных к использованию в многочисленных приложениях. Одновременно мы старались не упустить и проблемы принципиального характера. К ним относится, прежде всего, вопрос о существовании дополнительного интеграла движения для электрона, движущегося в кулоновском и магнитном полях, а также возможность стохастизации его движения в этом случае. Эти вопросы тесно связаны с фундаментальной проблемой квантования систем с неразделяющимися переменными.

Удивительно, что, несмотря на традиционность вопросов, связанных с эффектами Штарка и Зеемана, здесь обнаружен целый ряд новых результатов и явлений. При этом выявились большие возможности квазиклассических и чисто классических методов решения. Успех классических подходов обусловлен, по-видимому, известной незавершенностью классических методов описания атома, вытесненных «слишком ранним» созданием аппарата квантовой теории. Квантовомеханические расчеты, основанные на теории возмущений, асимптотическом подходе, а также путем численного решения уравнения Шрёдингера подробно отражены в монографии <sup>17</sup>. Поэтому ниже мы основное внимание уделяем именно полуклассическим методам.

Ниже нередко без оговорок используется атомная система единиц (а.е.). Вместе с тем, в ряде случаев удобно сохранить размерные единицы. Поэтому сразу укажем характерные масштабы полей  $F$  и  $B$ . Так, внутриатомное электрическое поле  $F_A$  равно

$$F_A = ea_0^{-2} \approx 5,1 \cdot 10^{11} \text{ В/м}, \quad (1.1)$$

где  $e$ ,  $m$  — заряд и масса электрона,  $a_0 = \hbar^2/me^2$  — боровский радиус.

Для магнитного поля удобно ввести величину поля  $B_0$  такого, в котором магнитное взаимодействие  $\mu_B B_0$  ( $\mu_B = e\hbar/2mc$  — магнетон Бора) сравнимо с масштабом энергии атома  $Ry = me^4/2\hbar^2$ :

$$B_0 = \frac{Ry}{\mu_B} = 2,35 \cdot 10^5 \text{ Тл}. \quad (1.2)$$

Магнитное поле внутри атома  $B_A$  в действительности меньше в  $(\hbar c/e^2) \approx \approx 137$  раз вследствие нерелятивистского характера движения электрона:

$$B_A \approx \frac{B_0}{137} \approx 1,7 \cdot 10^3 \text{ Тл}. \quad (1.3)$$

Значения (1.1) — (1.3) величин  $F_A$ ,  $B_0$  весьма велики и достижимы в достаточно экзотических условиях. Следует, однако, иметь в виду, что соответствующие значения резко уменьшаются с ростом главного квантового числа  $n$  атома. Так, критическое значение  $F_c$  электрического поля, при котором пропадает потенциальный барьер для атомного электрона, равно

$$F_c = \frac{F_A}{16n^4}, \quad (1.4)$$

что при  $n \approx 10$  на пять порядков меньше величины атомного поля  $F_A$ .

Аналогично, водородоподобные образования в твердом теле (экситоны) вследствие уменьшения эффективной массы электрона и большой величины диэлектрической проницаемости отвечают эффективным значениям  $B_0 \sim 10 - 10^3$  Тл. Таким образом, многие из рассматриваемых ниже эффектов, отвечающих значениям  $F$  и  $B$  вблизи критических, оказываются реально наблюдаемыми.

## 2. ЭФФЕКТ ШТАРКА

### 2.1. Водородоподобные атомы в электрическом поле. Общие соотношения

2.1.1. Основы теории для водородоподобного атома в электрическом поле  $F$  хорошо известны и подробно изложены, например, в<sup>1-3</sup>. Вместе с тем, с точки зрения практических приложений многие вопросы этой теории оставались, как отмечалось, незавершенными вплоть до последнего времени. Это, в первую очередь, относится к интерпретации спектров высоковозбужденных атомов, где высокая кратность вырождения водородных уровней приводит к чрезмерному усложнению расчетов, основанных на прямом использовании общих формул для интенсивностей переходов и т.п. Ниже излагается ряд новых результатов теории для спектра водородного атома в электрическом поле, приводящих к простым и надежным аналитическим результатам для практически интересных случаев.

2.1.2. В основе теории штарк-эффекта лежит возможность разделения переменных в уравнении Шрёдингера для водородного атома в параболических координатах  $\xi$  и  $\eta$ <sup>2</sup>:

$$\frac{d^2\chi_1}{d\xi^2} + \frac{1}{4} \left( 2E + \frac{4\beta_1}{\xi} - \frac{m^2-1}{4\xi} - F\xi \right) \chi_1 = 0, \quad (2.1)$$

$$\frac{d^2\chi_2}{d\eta^2} + \frac{1}{4} \left( 2E + \frac{4\beta_2}{\eta} - \frac{m^2-1}{\eta^2} + F\eta \right) \chi_2 = 0; \quad (2.2)$$

здесь  $\chi_1(\xi) = f_1/\xi^{1/2}$  и  $\chi_2(\eta) = f_2/\eta^{1/2}$  — приведенные волновые функции (см.<sup>2</sup>),  $E$  — энергия;  $\beta_1, \beta_2$  — постоянные разделения переменных  $\beta_1 + \beta_2 = = 1$ ,  $m$  — магнитное квантовое число.

Уравнения (2.1) — (2.2) имеют вид одномерных уравнений с эффективными потенциалами

$$V_\xi = \frac{m^2-1}{8\xi^2} - \frac{\beta_1}{\xi} + F\xi, \quad V_\eta = \frac{m^2-1}{8\eta^2} - \frac{\beta_2}{\eta} - F\eta, \quad (2.3)$$

определяемыми на малых расстояниях кулоновским и центробежным членами, а на больших — членом, содержащим поле  $F$  (рис. 1). Как видно из рис. 1, потенциальный барьер по переменной  $\eta$  обладает конечной проницаемостью, что обуславливает возможность выхода атомного электрона в непрерывный спектр — распад атома.

Удобно переписать уравнения (2.1) — (2.2) в безразмерных переменных  $x = v^{-1}\xi$  и  $y = v^{-1}\eta$ , где  $v$  — эффективное главное квантовое число уровня, учитывающее его смещение в электрическом поле  $F$ :

$$v = (-2E)^{1/2}. \quad (2.4)$$

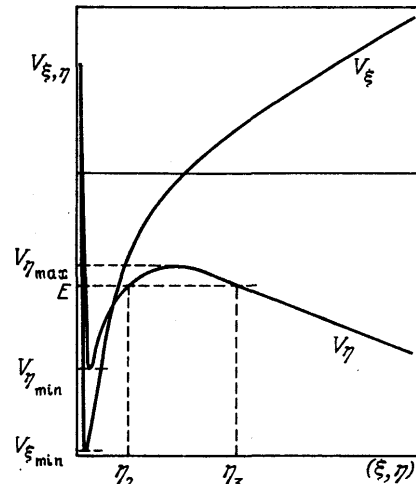


Рис. 1. Потенциалы  $V_\xi = V_1(\xi)$ ,  $V_\eta = V_2(\eta)$  для движения электрона с энергией  $E$  в электрическом поле в параболических координатах  $\xi$  и  $\eta$

Вводя далее приведенную напряженность поля  $w = Fv^3$  и новые константы разделения  $\alpha_1, \alpha_2$  ( $\alpha_1 + \alpha_2 = v$ ), получим уравнения для приведенных волновых функций  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$ <sup>18</sup>

$$\frac{d^2\varphi_1}{dx^2} + \frac{1}{4} \left( -1 + \frac{4\alpha_1}{x} - \frac{m^2-1}{x^2} - wx \right) \varphi_1 = 0, \quad (2.5)$$

$$\frac{d^2\varphi_2}{dy^2} + \frac{1}{4} \left( -1 + \frac{4\alpha_2}{y} - \frac{m^2-1}{y^2} + wy \right) \varphi_2 = 0. \quad (2.6)$$

Состояния водородного атома в поле  $F$  характеризуются, как известно<sup>1-3</sup>, параболическими квантовыми числами  $n_1, n_2$  и магнитным квантовым числом  $m$ , связанными соотношением

$$n_1 + n_2 + |m| = n - 1. \quad (2.7)$$

Удобно ввести так называемое «электрическое» квантовое число  $k = n_2 - n_1$ , определяющее величину проекции дипольного момента атома  $er$  на направление электрического поля  $F$ :

$$\langle n_1 n_2 m | erF | n_1 n_2 m \rangle = eF \langle n_1 n_2 m | z | n_1 n_2 m \rangle = -\frac{3}{2} n k e a_0 F. \quad (2.8)$$

Уровни энергии вплоть до второго порядка по интенсивности поля  $F$  записываются (в а.е.) в виде

$$E = -\frac{1}{2n^2} - \frac{3}{2} F n k - \frac{1}{16} F^2 n^4 (17n^2 - 3k^2 - 9m^2 + 19). \quad (2.9)$$

Параболические волновые функции  $\Psi_{n_1 n_2 m}$  отвечают определенной проекции на направление электрического поля  $F$  векторов дипольного  $d$  и орбитального  $I$  моментов атома. Специфические свойства симметрии кулоновского поля позволяют простым образом выразить параболические функции через сферические  $\Psi_{nlm}$ , отвечающие определенным значениям  $l$  и  $m$  (§ 37):

$$\Psi_{n i_1 i_2} = \sum_{l=0}^{n-1} C(l, i_1 + i_2 | i_1, i_2) \Psi_{nlm}, \quad (2.10)$$

где  $i_{1,2} = [m \pm (n_1 - n_2)]/2$ ,  $C(l, m | l_1, l_2)$  — коэффициенты Клебша — Гордана.

Интенсивности  $I$  штарковских компонент определяются матричными элементами координаты  $r$  атомного электрона:

$$I(n n_1 n_2 m \rightarrow n' n'_1 n'_2 m') = \frac{4e^4 \omega_0^4}{3c^3} \left| \langle n n_1 n_2 m | r | n' n'_1 n'_2 m' \rangle \right|^2, \quad (2.11)$$

где  $\omega_0$  — невозмущенная частота перехода  $n \rightarrow n'$ .

В зависимости от поляризации (линейная,  $\Delta m = 0$ , или круговая,  $\Delta m = \pm 1$ ) штарковские компоненты делятся на  $\pi$ -и  $\sigma$ -компоненты. Интенсивности  $\pi$ -компонент определяются матричными элементами  $z$ -компоненты  $r$ , а интенсивности  $\sigma$ -компонент —  $x$  (или  $y$ )-компонентами  $r$ . Общие формулы для матричных элементов были получены Гордоном (см.<sup>1</sup>, § 65) и выражаются через гипергеометрическую функцию

$$\Psi_m(n_i, n'_i) = F \left( -n_i, -n'_i, m+1, -\frac{4nn'}{(n-n')^2} \right). \quad (2.12)$$

Для параболических квантовых чисел  $n_1, n_2$  (в отличие от сферического квантового числа  $l$ ) не существует строгих правил отбора для дипольного излучения. Тем не менее распределение интенсивности штарковских  $\pi$ -и  $\sigma$ -компонент подчиняется определенным закономерностям, на которых мы остановимся ниже (раздел 2.3). Формулы Гордона весьма громоздки и пригодны, по существу, для расчетов лишь в немногих частных случаях (см.<sup>1</sup>). Соответствующие формулы для интенсивностей в сферических координатах могут быть существенно упрощены в квазиклассической области<sup>20</sup>. Поскольку связь параболического и сферического базисов определяется коэффициен-

тами Клебша — Гордана (см. 2.10)), свойства которых известны, можно рассчитывать на получение хороших квазиклассических выражений для матричных элементов и в параболических координатах. Эта программа, однако, пока не была реализована.

## 2.2. Радиационные времена жизни состояний

Рассмотрим простейшую радиационную характеристику подуровней — их времена жизни, обусловленные всевозможными радиационными переходами в нижележащие состояния.

Вероятность радиационных переходов  $A_{nn'}^l$  и времена жизни  $T_{nl}$  возбужденных атомных состояний анализируются обычно для сферических квантовых чисел атомов  $nl$  (см. <sup>1</sup>). Буревой<sup>19</sup> были получены общие квазиклассические формулы, для расчетов вероятностей радиационных переходов  $A_{nn'}^l$ . Гореславский, Делоне и Крайнов<sup>20</sup> вывели простые аналитические результаты для  $A_{nn'}^l$ , дающие высокую точность даже при не слишком больших значениях чисел  $n$  и  $l$ . Структура этих формул тесно связана с известными выражениями для классической интенсивности излучения в кулоновском поле (см. <sup>21</sup>, § 70). Квантовые поправки к этим вероятностям найдены в <sup>22,23</sup>.

В работе <sup>24</sup> приведены простые зависимости вероятностей  $A_{nl}$  от орбитального момента  $l$  в диапазоне  $3 \leq n \leq 25$ :

$$A^0(l) \approx A(1) \frac{1}{[1 + \alpha(l-1)]^2}, \quad (2.13)$$

где численный коэффициент  $\alpha$  подобран так, чтобы совпадать с точным результатом для  $l = n - 1$ :

$$\alpha = 0,7148 \pm 0,0004. \quad (2.14)$$

Если воспользоваться точным результатом для вероятности перехода при  $l = n - 1$  (см. <sup>1</sup>), то для  $l > 0$  получим выражение

$$A^0(l > 0) = 2,6759 \cdot 10^9 \text{ с}^{-1} \cdot \left[ \frac{1 + \alpha(n-2)}{1 + \alpha(l-1)} \right]^2 \frac{(2n-1)(2n^2-n-1)}{n^6(n-1)^2}. \quad (2.15)$$

Формула (2.15) обеспечивает высокую точность: максимальные отклонения в несколько процентов происходят при  $l < n/2$ .

Для  $l = 0$  численные данные хорошо аппроксимируются формулой <sup>25</sup>

$$A^0(0) \approx 5,97 \cdot 10^8 \text{ с}^{-1} \cdot \frac{1}{n^2(n+1,46)}. \quad (2.16)$$

Определим теперь, следуя Херрику<sup>24</sup>, вероятность перехода  $B(nkm, n')$  из параболического состояния  $|nkm\rangle$  во все состояния, принадлежащие уровню  $n'$ :

$$B(nkm, n') = w(n, n') \sum_{k', m'} |\langle nkm | \mathbf{r} | n'k'm' \rangle|^2, \quad (2.17)$$

где

$$w(n, n') = \frac{4e^2 a_0^2}{3\hbar c^3} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{n'^2} \right)^3. \quad (2.18)$$

Тогда полная вероятность перехода  $B(k, m)$  из данного штарковского подуровня на все нижние уровни равна

$$B(k, m) = \sum_{n'=|m|+1}^{n-1} B(nkm, n'). \quad (2.19)$$

Соответствующее время жизни равно

$$\tau(nkm) = B^{-1}(k, m). \quad (2.20)$$

Формулы (2.19), (2.20) являются «параболическими» аналогами соответствующих сферических величин  $A_{nl}$  и  $T_{nl} = A_{nl}^{-1}$ . Используя известную

связь параболических и сферических функций (2.10), найдем связь между обоими типами вероятностей:

$$B(k, m) = \sum_{l=|m|}^{n-1} A(n, l) [C(n, k | lm)]^2. \quad (2.21)$$

Из свойств коэффициентов Клебша — Гордана  $C(n, k | lm)$  следуют свойства симметрии

$$B(k, m) = B(-k, m) = B(k, -m). \quad (2.22)$$

Суммирование по всем значениям  $k$  и  $m$  дает, очевидно, полное время жизни уровня  $A(n)$ , не зависящее от выбора базиса суммирования:

$$A(n) = \sum_{k, m} B(k, m) = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) A(n, l). \quad (2.23)$$

Важное правило сумм получается из (2.21), если просуммировать по всем  $k$  и  $m$  так, чтобы оставалось постоянным значение либо  $k+m$ , либо  $k-m$ :

$$n^{-1} A(n) = B(k, 0) + \sum_{m=1}^{(n-1-k)/2} B(k+m, m) + \sum_{m=1}^{(n-1+k)/2} B(k-m, m). \quad (2.24)$$

Если просуммировать (2.24) по всем  $n$  значения числа  $k = n-1, n-3, \dots, -(n-1)$ , то вернемся к (2.23).

Из (2.24) следует, что распределение вероятностей перехода при  $m=0$  однозначно определяется распределениями  $B(k, m)$  при  $m \neq 0$ . Эти последние оказываются слабо зависящими от «электрического» квантового числа  $k$ . Удобно поэтому ввести средние (по « $k$ ») значения  $B(k, m)$ , равные

$$\bar{B}(m) = \frac{1}{n-|m|} \sum_k B(k, m) = \frac{1}{n-|m|} \sum_{l=|m|}^{n-1} A(n, l). \quad (2.25)$$

Поскольку для  $m \neq 0$  с хорошей точностью  $B(k, m) = \bar{B}(m)$ , можно найти  $B(k, 0) \approx B^0(k, 0)$  из (2.24), что дает

$$B^0(k, 0) = n^{-1} A(n) - \sum_{m=1}^{(n-1-k)/2} \bar{B}(m) - \sum_{m=1}^{(n-1+k)/2} \bar{B}(m). \quad (2.26)$$

Для  $k = n-1$  это соотношение сводится к

$$B^0(n-1, 0) = n^{-1} A(n) - \sum_{m=1}^{n-1} \bar{B}(m). \quad (2.27)$$

Для меньших значений  $k < n-1$  величины  $B^0(k, 0)$  определяются из рекурсивного соотношения

$$B^0(k-2, 0) = B^0(k, 0) - \bar{B}\left(\frac{n+1-k}{2}\right) + \bar{B}\left(\frac{n-1+k}{2}\right). \quad (2.28)$$

Величины  $\bar{B}(m)$  могут быть найдены из (2.25) с помощью аппроксимационных формул (2.13) для  $A(n, l)$ :

$$\bar{B}(m) = \frac{A^0(m)}{n-m} + \frac{A^0(1)}{n-m} \frac{n-1-m}{\{1+\alpha[m-(1/2)]\} \{1+\alpha[n-(1/2)]\}}, \quad m > 0. \quad (2.29)$$

Сравнение результатов для  $\bar{B}(m)$  и  $B(k, 0)$ , основанных на использовании аппроксимации (2.28), (2.29), с результатами точных расчетов представлено в табл. I. Как видно из табл. I, использованные аппроксимации обеспечивают высокую точность. Таким образом, изложенный метод позволяет определить

Таблица I

Сравнение вероятностей радиационных переходов  $\bar{B}(i)$  и  $B(i, 0)$ , полученных на основе аппроксимационных формул (2.28), (2.29) (столбцы A) с точными данными<sup>25</sup> (столбцы B) для уровня  $n = 10$  водорода (по<sup>24</sup>)

$i$	$B(i)$		$B(i, 0)$	
	A	B	A	B
1	1,0905	1,0871	0,4753	0,4806
2	0,5472	0,5523		
3	0,3623	0,3658	0,5666	0,5685
4	0,2703	0,2722		
5	0,2155	0,2163	0,7757	0,7706
6	0,1791	0,1794		
7	0,1532	0,1532	1,1891	1,1733
8	0,1338	0,1338		
9	0,1186	0,1188	2,1610	2,1473

времена жизни  $B(k, m)$  штарковских подуровней водородного атома на основе простых аналитических формул, избегая тем самым прямого суммирования рядов (2.21) с коэффициентами Клебша — Гордана.

### 2.3. Интенсивности штарковских компонент

Интенсивности штарковских компонент определяются общими формулами Гордона (см. <sup>1</sup>) для матричных элементов компонент радиуса-вектора атомного электрона в параболических координатах. Использование этих формул, однако, требует весьма громоздких численных расчетов, особенно для высоковозбужденных уровней. Ситуация усложняется также отсутствием строгих правил отбора для параболических квантовых чисел.

Для больших значений  $n \gg 1$  можно установить простые закономерности распределения интенсивности компонент для переходов с небольшим изменением квантового числа  $n - n' \equiv \Delta n \ll n$ , представляющих практический интерес. Мы остановимся, следуя Гуляеву<sup>14,26</sup>, на этих закономерностях для высоковозбужденных линий  $H_{n\alpha}$  ( $\Delta n = 1$ ) и  $H_{n\beta}$  ( $\Delta n = 2$ ), наблюдаемых в астрофизических условиях.

Изменение частоты  $\Delta\omega$  перехода в электрическом поле  $F$ , отвечающее штарковской компоненте  $n_1 n_2 m \rightarrow n'_1 n'_2 m'$ , согласно (2.9), равно

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_F} = n(n_1 - n_2) - n'(n'_1 - n'_2), \quad \omega_F \equiv \frac{3}{2} \frac{ea_0}{\hbar} F. \quad (2.30)$$

Интенсивности компонент оказываются чувствительными функциями комбинаций квантовых чисел  $K \equiv (n_1 - n_2) - (n'_1 - n'_2) = k - k'$  и  $i \equiv n'_1 - n'_2 \equiv k'$ , в которых  $\Delta\omega$  принимает вид

$$\frac{\Delta\omega}{\omega_F} = Kn + \Delta n \cdot i. \quad (2.31)$$

Параметр  $K$ , меняющийся от  $-(2n - 2 - \Delta n)$  до  $(2n - 2 - \Delta n)$ , группирует компоненты в  $2(2n - 2 - \Delta n)$  серий, в каждую из которых входит  $2(n - \Delta n) - (K + 1)$  компонент, нумеруемых параметром  $i$ . На рис. 2, 3 показана группировка компонент для линий  $H_{5\alpha}$  и  $H_{5\beta}$ ,  $H_{6\beta}$ . Видно, что четность (или нечетность) числа  $K$  отвечает  $\sigma(\pi)$  — поляризации компонент линий  $H_{\alpha}$  и  $H_{\beta}$ . Расстояние между компонентами внутри серии  $\Delta\omega_i$  и расстояние  $\Delta\omega_k$  между центрами серий равны

$$\Delta\omega_i = \omega_F \Delta n, \quad \Delta\omega_k = \omega_F n = \frac{\Delta\omega_i n}{\Delta n}. \quad (2.32)$$

Рассмотрим характер изменения интенсивностей с увеличением номера  $K$ . Для этого используем тот факт, что аргументы гипергеометрических функций (2.12), входящих в формулы Гордона <sup>1</sup>, при  $1 \sim \Delta n \ll n \sim n'$  оказываются велики, так что эти функции можно заменить последними (наибольшими) членами:

$$\Psi_m(n_i, n'_i) \approx \frac{n'_i! m!}{(n'_i - n_i)! (m + n_i)!} b^{2n_i} (-1)^{n_i}, \quad (2.33)$$

где  $b = 4nn'/(n - n')^2 \gg 1$  (для определенности принято  $n'_i \geq n_i$  и вместо  $|m|$  здесь и ниже будем писать просто  $m$ ).

Приближение (2.33) позволяет получить простые аналитические выражения для мат-

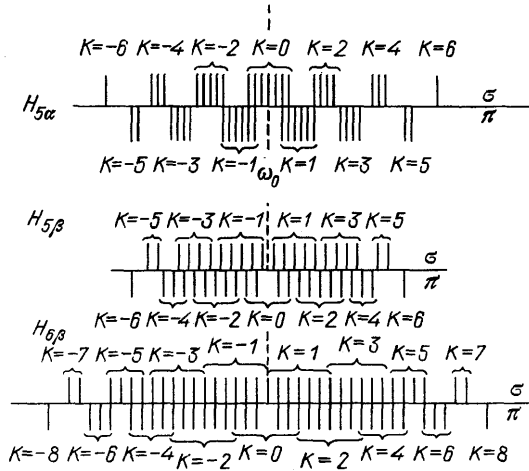


Рис. 2. Штарковское расщепление линий  $H_{5\alpha}$  (Брэкетт  $\alpha$ ) и  $H_{5\beta}$ ,  $H_{6\beta}^{14,26}$ . Верхние линии отвечают  $\sigma$ -компонентам, нижние —  $\pi$ -компонентам

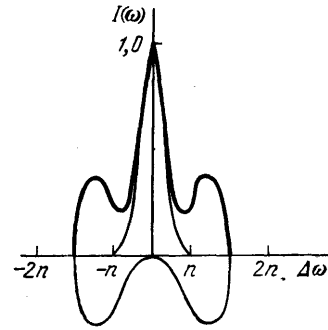


Рис. 3. Распределение интенсивности  $I(\omega)$  в зависимости от сдвига частоты  $\Delta\omega$  (в единицах  $3/2 e a_0 F / \hbar$ ) для линий  $H_{n\alpha}$  при  $n \gg 1$  <sup>14,26</sup>.

Тонкие линии — огибающие  $\sigma$  (вверху)- и  $\pi$  (внизу)-компонент, жирная линия — суммарный контур линии

ричных элементов координаты, определяющих интенсивности  $\pi$ - и  $\sigma$ -компонент. Рассмотрим конкретные переходы  $\Delta n = 1$  ( $H_{n\alpha}$ -линии) и  $\Delta n = 2$  ( $H_{n\beta}$ -линии).

### 2.3.1. Линии $H_{n\alpha}$ (переходы с $\Delta n = 1$ )

Центральную серию ( $K = 0$ ) здесь образуют  $\sigma$ -компоненты, для переходов которых справедливы соотношения

$$\begin{aligned} n_1 &= n'_1, & n_2 &= n'_2 & \text{для } m \rightarrow m-1, \\ n_1 &= n'_1 + 1, & n_2 &= n'_2 + 1 & \text{для } m \rightarrow m+1. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Следующая серия ( $K = \pm 1$ ) отвечает  $\pi$ -компонентам, для которых аналогичные условия имеют вид

$$\begin{aligned} n_1 &= n'_1 + 1, & n_2 &= n'_2 & \text{для } K = +1, \\ n_1 &= n'_1, & n_2 &= n'_2 + 1 & \text{для } K = -1. \end{aligned} \quad (2.35)$$

Используя приближение (2.33) и соотношения (2.34), (2.35), получаем из формулы Гордона простые выражения для матричных элементов:

$$x_m^{m-1} = \frac{a_0}{4} b [(n_1 + m)(n_2 + m)]^{1/2} \left[ 1 - \frac{(n_1 + 1)(n_2 + 1)}{b^2} \right], \quad (2.36)$$

$$x_m^{m+1} = \frac{a_0}{4} b (n_1 n_2)^{1/2} \left[ 1 - \frac{(n_1 + m)(n_2 + m)}{b^2} \right], \quad (2.37)$$

$$z_m^m = \frac{a_0}{4} b \{ [n_1(n_1 + m)]^{1/2} \delta_{K, +1} + [n_2(n_2 + m)]^{1/2} \delta_{K, -1} \}. \quad (2.38)$$



Спад интенсивности с увеличением номера  $K$  определяется соотношением

$$\frac{[(x_m^{m+1})^2 + (x_m^{m-1})^2]_{K+2}}{[(x_m^{m+1})^2 + (x_m^{m-1})^2]_K} \approx \frac{n_1(n_1+m)n_2(n_2+m)}{b^4}, \quad (2.39)$$

которое, по крайней мере, меньше величины  $2^{-8} \sim 4 \cdot 10^{-3}$  (аналогичная оценка справедлива и для  $z_m^m$ ). Таким образом, практический интерес представляют ближайшие  $\sigma$ - и  $\pi$ -серии, отвечающие нескольким первым значениям  $K$  \*).

Для вычисления интенсивности линии, смещенной на заданное значение  $\Delta\omega = \omega_F(Kn + i)$ , нужно просуммировать квадраты матричных элементов с учетом остающегося вырождения по  $m$ . Такое суммирование для центральной  $\sigma$ -серии ( $K = 0$ ) и заданного  $i$  дает

$$I_i^\sigma \propto \sum_m [(x_m^{m-1})^2 + (x_m^{m+1})^2] \approx \frac{a_0^2}{24} n^2 (2n^3 - 3n^2i + i^3). \quad (2.40)$$

Аналогично для ближайшей  $\pi$ -серии ( $K = 1$ ) имеем

$$I_i^\pi \propto \sum_m (z_m^m)^2 \approx \frac{a_0^2}{24} n^2 (n^3 + 3n^2i - 3ni|i| - i^2|i|). \quad (2.41)$$

На рис. 3 показана схема расщепления линии  $H_{n\alpha}$  при  $n \gg 1$ .

Указаны центральная ( $K = 0$ )  $\sigma$ -серия, ближайшие к ней ( $K = \pm 1$ )  $\pi$ -серии и распределение полной (суммарной по  $K$ ) интенсивности. Интенсивность  $\sigma$ -серии уменьшается вдвое на ширине  $\Delta\omega_{1/2} = (n/3)\omega_F$ . Максимум интенсивности  $\pi$ -серии достигается на частоте  $4\Delta\omega_{1/2}$  и составляет примерно 40 % максимальной интенсивности центральной  $\sigma$ -серии.

### 2.3.2. Линии $H_{n\beta}$ (переходы $\Delta n = 2$ )

Для нечетных  $n$  компоненты  $\pi$ -серий для этих линий нигде не совпадают с компонентами  $\sigma$ -серий (см. рис. 2). Начиная с линии  $H_{6\beta}$ , члены серий с  $K = +1$  и  $-1$ , отвечающие  $\sigma$ -поляризации, начинают перекрываться. Это перекрытие определяет ненулевую интенсивность в центре линии ( $\Delta\omega = 0$ ), поскольку интенсивность  $\pi$ -компонент центральной ( $K = 0$ ) серии при  $\Delta\omega = 0$  обращается в нуль.

Аналогично проведенной выше для линии  $H_{n\alpha}$  процедуре, рассчитываются последовательно интенсивности серий  $I_{\pi_0}$  ( $K = 0, \Delta m = 0$ ),  $I_{\sigma_1}$  ( $K = \pm 1, \Delta m = \pm 1$ ),  $I_{\pi_2}$  ( $K = \pm 2$ ) и т. д. Структура линий  $H_{n\beta}$  приведена на рис. 4, где показан также вклад отдельных  $\pi$ - и  $\sigma$ -серий \*\*). Положения максимумов линий отвечают частотам  $\Delta\omega_n = \pm 1,6n'$ . Их ширина на половине высоты равна  $2,85 n\omega_F$ . Интенсивность в центре независимо от номера  $n$  составляет 13 %  $I_{\max}$ . Полуширина линии  $\Delta\omega_{1/2} = 3,6\omega_F$ .

## 2.4. Слабое поле.

### Асимптотическая теория распада атома

Поведение атома в электрическом поле  $F$  зависит от отношения величины  $F$  к критической напряженности  $F_c \sim 1/16n^4$  (см. (1.4)), при которой барьер по координате  $\eta$  для данного уровня  $n$  исчезает и становится возможным классическое надбарьерное движение электрона (см. рис. 1). При  $F \ll F_c$  ширина барьера достаточно велика и энергетические уровни электрона хорошо локализованы, т.е. их ширина  $\Gamma$  экспоненциально мала. Для этого

\*) Справедливость приближений (2.33), (2.36) — (2.39) была обоснована Гуляевым<sup>14,16</sup> путем их прямого сравнения с результатами численных расчетов по формулам Гордона. Вместе с тем, остается проблема аналитического обоснования этих приближений с помощью классического метода.

\*\*) Интенсивность  $I_{\pi_0}$  и  $I_{\sigma_1}$  серий численно малы и потому не приведены на рис. 4.

случая Смирновым и Чибисовым<sup>27</sup> был развит асимптотический метод расчета атомных параметров. Дамбург и Колосов<sup>28</sup> предложили метод, в основе которого лежит сходство задач распада с рассеянием электрона на квазидискретном уровне. В обоих случаях мы имеем дело с резонансным энергетическим уровнем, лежащем на фоне непрерывного спектра (континуума). При приближении энергии электрона  $E$  к энергии дискретного уровня  $E_0$  фаза  $\varphi$  волновой функции испытывает резкий скачок<sup>\*</sup>):

$$\varphi = \varphi_0 + \arctg \frac{\Gamma}{2(E - E_0)}. \quad (2.42)$$

Определив волновую функцию, можно затем найти параметр  $\Gamma$  и  $E_0$  из формулы (2.42).

Нахождение волновой функции атомного электрона в пределе малых значений  $F$  основано в<sup>28</sup> на сшивке решений в областях малых и больших значений координаты  $\eta$  (вдоль которой возможен выход электрона в континуум).

Детали метода подробно изложены в обзоре Дамбурга и Колосова (см.<sup>17</sup>, с. 42). Результат имеет вид

$$\Gamma = (4R)^{2n_2+m+1} e^{-2R/3} \times \\ \times [n^3 n_2! (n_2 + m)!]^{-1}, \quad (2.43)$$

где  $R = (-2E_0)^{3/2}/F$ . Результат (2.43) был получен впервые в<sup>27</sup>, где, однако,

в качестве  $E$  использовалось невозмущенное значение. В действительности, члены порядка  $F$  в разложении энергии существенны в показателе экспоненты, а члены более высокого порядка — в поправочных членах. В<sup>17, 27, 28</sup> приведены разложения  $\Gamma$  вплоть до членов порядка  $F^2$ . Результаты асимптотической теории хорошо подтверждаются численными расчетами в области  $F \ll F_c$  (см.<sup>17,28</sup>).

## 2.5. Классическая теория распада атома в электрическом поле

Увеличение электрического поля  $F$  приводит к понижению эффективного потенциального барьера  $V_\eta$  по координате  $\eta$ . Для высоковозбужденных состояний атома возможна ситуация, когда уровень энергии совпадает с максимумом потенциального барьера, т.е.  $E_c = V_{\eta \max}$  (см. рис. 1). Это критическое значение энергии отвечает определенному критическому значению электрического поля  $F_c$ , в котором две точки пересечения прямой  $V_\eta = E$  с потенциалом  $V_\eta$  совпадут (корни  $\eta_2$  и  $\eta_3$  на рис. 1 сливаются). В этом случае, очевидно, становится возможным надбарьерный выход электрона из атома, разрешенный законами классической механики. Отсюда ясно, что критические значения параметров  $E_c$ ,  $F_c$  можно определить на основе чисто классических расчетов. Это было сделано Бэнксом и Леопольдом<sup>31</sup>, которым мы следуем ниже.

Разделение переменных в параболических координатах  $\xi$  и  $\eta$  для электрона в кулоновском поле  $e^2/r$  и внешнем электрическом поле  $F$  приводит,

<sup>\*</sup>) Отметим, что впервые трансформация волновой функции при приближении энергии  $E$  к энергии  $E_0$  анализировалась Л. И. Мандельштамом и М. А. Леонтовичем в 1928 г. (см.<sup>30</sup>).

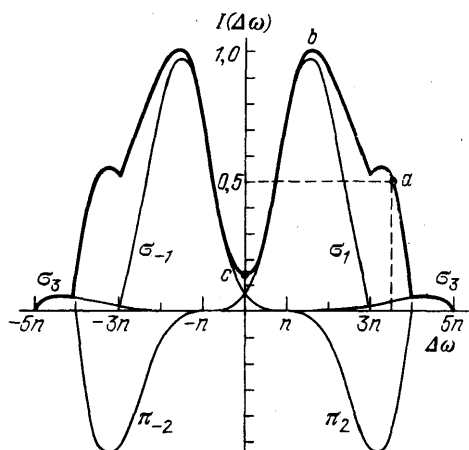


Рис. 4. Структура линий  $H_{n\beta}$  при  $n \gg 1$ <sup>14,28</sup>.

Обозначения те же, что и на рис. 3. Точки:  $a$  — уровень половинной интенсивности  $I_{\max}/2$ ,  $b$  — максимальная интенсивность,  $c$  — центральный провал

как отмечалось в разделе 2.1, к его движению в эффективных потенциалах (2.3) Удобно ввести импульсы  $p_\eta$  и  $p_\xi$  по каждой переменной  $\eta$  и  $\xi$ , определяемые формулами

$$\frac{p_\xi^2}{2m} + V_\xi(\xi) = E, \quad \frac{p_\eta^2}{2m} + V_\eta(\eta) = E, \quad (2.44)$$

где  $E$  — полная энергия электрона в атоме. Для связанных состояний значение  $E$  заключено в диапазоне (см. рис. 1)

$$\max(V_{\xi \min}, V_{\eta \min}) \leq E \leq V_{\eta \max} \leq 0. \quad (2.45)$$

Для данного значения  $E$  точки пересечения прямой  $E = \text{const}$  с кривыми эффективного потенциала  $V_\xi$  и  $V_\eta$  определяются кубическими уравнениями, имеющими по три корня каждое:  $\xi_1, \xi_2, -\xi_3, \eta_1, \eta_2, \eta_3$ .

Нашей задачей является определить зависимость критических параметров  $E_c, F_c$  от классических переменных действия  $I_\varphi, I_\xi, I_\eta$ , характеризующих состояния электрона в атоме. Эту связь удобно искать в параметрическом виде, выражая все зависимости через корни уравнений  $V_\xi = E$  и  $V_\eta = E$  и требуя затем совпадения корней  $\eta_2 = \eta_3$  для критического значения параметров  $E_c, F_c$ .

Выражения для классических действий  $I_\xi$  и  $I_\eta$ , выраженные через корни  $\xi_i, \eta_i$ , имеют вид

$$I_\xi = \frac{1}{2\pi} \oint p_\xi d\xi = \frac{(2meF)^{1/2}}{\pi} \int_{\xi_1}^{\xi_2} [(\xi_2 - \xi)(\xi - \xi_1)(\xi + \xi_3)]^{1/2} \frac{d\xi}{\xi}, \quad (2.46)$$

$$I_\eta = \frac{1}{2\pi} \oint p_\eta d\eta = \frac{(2meF)^{1/2}}{\pi} \int_{\eta_1}^{\eta_2} [(\eta_2 - \eta)(\eta - \eta_1)(\eta_3 - \eta)]^{1/2} \frac{d\eta}{\eta}, \quad (2.47)$$

$$I_\varphi = \text{const}. \quad (2.48)$$

Формулы (2.46) — (2.48) совместно с уравнениями для корней и условием  $\eta_2 = \eta_3$  дают параметрическую связь критических параметров  $E_c, F_c$  с переменными действия. Эта связь может быть записана в виде

$$F_c = \frac{m^2 e^5}{I^4} \Phi_c(u, v), \quad (2.49)$$

$$E_c = -\frac{me^4}{2I^3} \mathcal{E}_c(u, v), \quad (2.50)$$

где введены полное действие  $I = I_\xi + I_\eta + I_\varphi$  и параметры  $u = I_\eta/I$  и  $v = I_\xi/I$ , значения которых заключены в треугольной области:

$$\Delta \{u \geq 0, v \geq 0, u + v \leq 1\}. \quad (2.51)$$

Функции  $\Phi_c(u, v), \mathcal{E}_c(u, v)$  в общем случае определяются путем численного решения указанных выше уравнений. Для наиболее интересных предельных случаев классические значения критических параметров равны

$$\begin{aligned} n^4 F_c &= \frac{2^{10}}{3^4 \pi^4} = 0,13, & |E_c| n^2 &= \frac{2^8}{3^2 \pi^2} = 0,72 \quad \text{при } n_1 = n, \\ n^4 F_c &= 0,3834, & E_c &= 0 \quad \text{при } n_2 = n, \\ n^4 F_c &= \frac{2^{12}}{3^9} = 0,208, & |E_c| n^2 &= \frac{2^7}{3^5} = 0,527 \quad \text{при } m = n. \end{aligned} \quad (2.52)$$

Изложенный классический метод расчета эффективен для оценок ионизации атома из высоковозбужденных состояний  $n \gg 1, l \gg 1$ , где применение общей квантовомеханической теории связано со значительными вычислительными трудностями. Найденные критические значения параметров (2.52) хорошо согласуются с квантовомеханическими расчетами в соответствующей области параметров (см. ниже, раздел 2.6).

## 2.6. Распад уровней вблизи критического значения электрического поля

Классические результаты раздела 2.5 для характеристик атома в поле  $F$  могут быть обобщены с учетом квантовых (туннельных) эффектов в квазиклассическом приближении. Согласно правилам квантования Бора — Зоммерфельда величины действий (2.46), (2.47) связаны с параболическими квантовыми числами соотношениями

$$I_{\xi} = \pi \left( n_1 + \frac{1}{2} \right), \quad I_{\eta} = \pi \left( n_2 + \frac{1}{2} \right). \quad (2.53)$$

Условия (2.53) неоднократно использовались в литературе, см. <sup>17</sup>. Так, Зарецкий и Крайнов <sup>32</sup> применили (2.53) для определения поведения атома в низкочастотном электрическом поле. Кадомцев и Смирнов <sup>33</sup> исследовали

атомные параметры вблизи критического поля  $F_c$ .

Определим, следуя <sup>33</sup>, поле  $F_c$ , при котором пропадает барьер, на основе квазиклассических условий квантования (2.53), уравнений (2.1), (2.2) и дополнительного условия

$$\left. \frac{dp_{\eta}}{d\eta} \right|_{\eta=\eta_2} = 0, \quad (2.54)$$

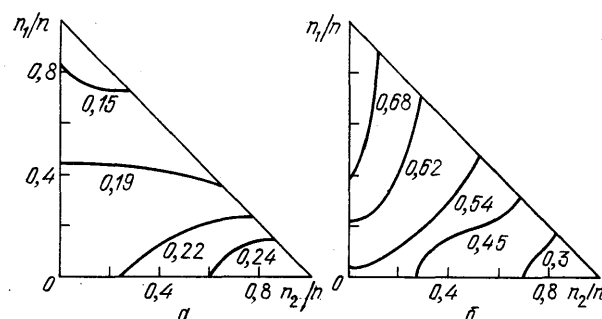


Рис. 5. Приведенные значения критической напряженности электрического поля  $F_c n^4$  (а) и энергии уровня  $E n^2$  (б) на плоскости квантовых чисел  $n_1$  и  $n_2$  <sup>33</sup>

где  $p_{\eta}$  — импульс электрона в  $\eta$ -пространстве,  $\eta_2$  — правая точка поворота, совпадающая при  $F = F_c$

с максимумом эффективной потенциальной энергии. Перечисленные уравнения устанавливают однозначную связь между константами разделения  $\beta_1$ ,  $\beta_2$ , энергией электрона  $E$  и критической напряженностью  $F_c$ .

Решение этой системы уравнений наиболее просто при  $m = 0$ . Так, при  $n_2 \rightarrow 0$  это решение дает <sup>33</sup>

$$F_c n^4 = \frac{2^{10}}{3^4 \pi^4} \left( 1 + 0,4 \frac{n_2}{n} \right), \quad |E_c| n^2 = \frac{2^7}{3^2 \pi^2} \left( 1 - 0,4 \frac{n_2}{n} \right). \quad (2.55)$$

Видно, что нулевые члены разложения в точности совпадают с результатами классического рассмотрения (2.52). При  $n_2 \rightarrow 0$  получаем:

$$F_c n^4 \approx 0,383 \left[ 1 - 1,75 \left( \frac{n_2}{n} \right)^{2/3} \right]^6, \quad \frac{n_2}{n} \ll 1, \quad (2.56)$$

$$|E_c| n^2 \approx 1,48 \left( \frac{n_1}{n} \right)^{2/3} \left[ 1 - 1,1 \left( \frac{n_2}{n} \right)^{2/3} \right]^2. \quad (2.57)$$

Эти результаты в предельном случае также согласуются с (2.52). Приведенные в квадратных скобках поправочные множители получены Друкаревым <sup>18</sup>; см. также раздел 2.7.

Решение системы квазиклассических уравнений в общем случае  $m \neq 0$  оказывается достаточно громоздким и было проведено <sup>32</sup> численно. Для случая  $m = n$  результаты квазиклассического рассмотрения совпадают с классическими формулами (2.52).

Проведенное рассмотрение позволяет построить значения критической напряженности  $F_c$  и соответствующие им энергии  $|E_c|$  на всей плоскости переменных  $n_1$ ,  $n_2$  (рис. 5). Соответствующие классические результаты (2.52) отвечают углам треугольников на рис. 5 и области  $n_1 \approx n_2$  (при  $n \approx m$ ).

Развитый метод позволяет рассчитать скорость распада  $\Gamma$  атома вблизи критического значения поля  $|F - F_c| \ll F_c$ .

В основе расчета<sup>33</sup> лежит аппроксимация барьера параболой вблизи его максимума с последующим вычислением коэффициента подбарьерного прохождения. Не останавливаясь на деталях, приведем значение скорости распада  $\Gamma$  для  $F = F_c$  и  $n_2 = n$ :

$$\Gamma \approx \frac{1}{3,27n^3 \ln(3\pi n/4)}. \quad (2.58)$$

Видно, что скорость распада отнюдь не экспоненциально мала (как в слабом поле  $F \ll F_c$ ) и, более того, сравнима с периодом движения электрона по орбите.

Интересно оценить отношение ширины уровня  $\Gamma$  к его энергии  $E_c$  в критической точке. Согласно (2.57) и (2.58), имеем

$$\frac{\Gamma}{E_c} = \frac{1}{2,35n \ln(3\pi n/4)} \ll 1. \quad (2.59)$$

Таким образом, отношение неопределенности энергии уровня к самой энергии составляет  $1,8 \cdot 10^{-3}$  для  $n = 50$  и  $5,5 \cdot 10^{-3}$  для  $n = 20$ .

## 2.7. Квазиклассическая теория для атомных состояний в электрическом поле

### 2.7.1. Основы квазиклассического метода

Рассмотрим более общую квазиклассическую теорию распада уровней в электрическом поле, позволяющую проследить плавный переход от случая слабых полей  $F \ll F_c$  к полям, сравнимым с критическим. Следует отметить, что, хотя основы квазиклассической теории были заложены Лангосом<sup>34</sup> еще в 30-х годах, конкретные расчеты оставались в значительной мере незавершенными. В последние годы такие расчеты были выполнены, как отмечалось, более точными методами; см.<sup>17, 18, 31, 32</sup>. Ниже мы следуем результатам работ Друкарева<sup>18</sup>, проведшего последовательный расчет энергий и ширин уровней квазиклассическим методом.

В основе квазиклассической теории лежат правила квантования (2.46) — (2.48), (2.53). При достаточно малых  $|m|/|n| \ll 1$  интегралы (2.46), (2.47) представляются в виде

$$L_1(x_1) = \frac{1}{2} \int_0^{x_1} \left( -1 + \frac{4\alpha_1}{x} - wx \right)^{1/2} dx = \left( n_1 + \frac{|m|+1}{2} \right) \pi, \quad (2.60)$$

$$L_2(y_1) = \frac{1}{2} \int_0^{y_1} \left( -1 + \frac{4\alpha_2}{y} + wy \right)^{1/2} dy = \left( n_2 + \frac{|m|+1}{2} \right) \pi, \quad (2.61)$$

где мы используем обозначения (2.5), (2.6) для констант разделения переменных  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$  и поля  $w$ .

В этом приближении энергия  $E$  (или эффективное главное квантовое число  $\nu$ ) оказываются функциями двух параметров

$$S = \frac{n_1 - n_2}{n}, \quad T = 4n^4 F. \quad (2.62)$$

Для нахождения  $\nu$  заметим, что интегралы (2.60), (2.61) выражаются через гипергеометрическую функцию  $F(-1/2, 1/2, 2, +z); \equiv F(+z)$  так, что

$$L_1 = \pi \alpha_1 (1 - z_1) F(-z_1), \quad L_2 = \pi \alpha_2 (1 + z_2) F(z_2), \quad (2.63)$$

где

$$z_1 = \frac{(1+16\alpha_1 w)^{1/2} - 1}{(1+16\alpha_1 w)^{1/2} + 1}, \quad z_2 = \frac{1 - (1-16\alpha_2 w)^{1/2}}{1 + (1-16\alpha_2 w)^{1/2}}. \quad (2.64)$$

Учитывая условия квантования (2.60), (2.61), найдем

$$\alpha_1 = \frac{n_1 + (1/2)(|m| + 1)}{(1 - z_1)^{1/2} F(-z_1)}, \quad \alpha_2 = \frac{n_2 + (1/2)(|m| + 1)}{(1 + z_2)^{1/2} F(z_2)}. \quad (2.65)$$

Отсюда видно, что

$$\alpha_1 \geq n_1 + \frac{|m| + 1}{2}, \quad \alpha_2 \leq n_2 + \frac{|m| + 1}{2}. \quad (2.66)$$

Выразим далее  $\alpha_1 w$  и  $\alpha_2 w$  через  $z_1$  и  $z_2$  с помощью (2.64) и подставим выражения (2.65) для  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$ , что дает

$$\left(n_1 + \frac{|m| + 1}{2}\right) w = \frac{z_1}{4(1 - z_1)^{3/2}} F(-z_1), \quad (2.67)$$

$$\left(n_2 + \frac{|m| + 1}{2}\right) w = \frac{z_2}{4(1 + z_2)^{3/2}} F(z_2). \quad (2.68)$$

Из последнего соотношения следует, что максимальное значение достигается при  $z_2 = 1$  и равно

$$w_c = \left[3\pi \sqrt{2} \left(n_2 + \frac{|m| + 1}{2}\right)\right]^{-1}. \quad (2.69)$$

Величина  $w_c$  определяет, очевидно, критическое значение поля  $E_c$ , для нахождения которого надо найти энергию  $E$  (параметр  $v$ ).

С помощью (2.69) соотношение (2.68) принимает вид

$$\frac{w}{w_c} = \frac{3\pi \sqrt{2}}{4} \frac{z_2}{(1 + z_2)^{3/2}} F(z_2). \quad (2.70)$$

### 2.7.2. Уровни энергии

Найдем уравнения для определения эффективного главного квантового числа  $v = (-2E)^{1/2}$ . Для этого воспользуемся связью  $\alpha_1 + \alpha_2 = v$  констант разделения и формулами (2.65), что дает связь  $v/n$  с параметром  $S$  (2.62) и переменными  $z_1, z_2$  (2.64).

Далее, соотношения (2.67), (2.68) дают два других уравнения, связывающих параметры  $T, S$  и  $v$  с комбинациями функций  $F(-z_1)$  и  $F(z_2)$ . Эти три уравнения с помощью несложных преобразований дают параметрическую связь  $v/n$  с параметрами  $S$  и  $T$ <sup>18</sup>.

$$\frac{v}{n} = \frac{v}{n}(z_1, z_2),$$

$$S = S(z_1, z_2), \quad T = T(z_1, z_2). \quad (2.71)$$

Процедура нахождения  $v$  с помощью уравнений (2.71) сводится к следующему: по данным  $S$  и  $T$  из (2.7) находятся параметры  $z_1$  и  $z_2$ ; подставив затем их в выражение для  $v/n$ , находим искомую величину. Эта процедура в общем случае проводится численно. В<sup>18</sup> представлена зависимость  $z_1$  и  $z_2$  от  $T$  при различных  $S$ . Некоторые численные данные для параметра  $v/n$  приводятся ниже в табл. II.

Сравним результаты квазиклассической теории (2.71) с данными классического расчета (2.52) для  $m = 0, n_2 = n$  и  $F = F_c$ , см.<sup>18</sup>. Для этого положим параметр  $z_2$  в (2.71) равным единице, что соответствует согласно (2.64) критическому значению поля  $F = F_c$  ( $w = w_c$ ). Учитывая, что  $F(z_2 = 1) = 8/3\pi$  из (2.71), получаем  $v/n = 3\pi \cdot 2^{-7/2}$ , откуда энергия  $E = -v^2/2$  оказывается в точности совпадающей с соответствующей классической величиной (2.52). Находя из (2.69) величину критического поля  $F_c = w_c v^{-3}$ , убеждаемся, что она также совпадает с классической оценкой (2.52).

Таблица II

Сравнение квантовомеханических<sup>28</sup> и квазиклассических<sup>18</sup> расчетов

$n, F$	$\nu$		$\Gamma, 10^{-6} \text{ с}^{-1}$	
	По 28	По 18	По 28	По 18
$n=5, F=1.8 \cdot 10^{-4}$	4,9240	4,929	2,282	2,55
$n=11, F=10^{-5}$	10,6882	10,722	2,815	3,3
$n=15, F=3 \cdot 10^{-6}$	14,5771	14,619	1,338	1,74

## 2.7.3. Скорости распадов

Расчет скорости распадов  $\Gamma$  в<sup>18</sup> основан на нахождении асимптотического вида волновой функции на основе квазиклассического метода<sup>36</sup>. Нахождение асимптотики квазиклассической функции связано с задачей об определении проницаемости потенциального барьера  $V(y)$  в  $y$ -пространстве. Эта задача может быть решена точно либо для барьера параболической формы, либо в предельном случае малой проницаемости (большой ширины) барьера. В нашем случае форма барьера близка к параболической вблизи его вершины, тогда как вдали от нее проницаемость барьера мала. В итоге, можно построить единое аналитическое выражение, приближенно справедливое при произвольной проницаемости барьера.

Если  $K$  и  $\Phi$  — параметры, определяющие проницаемость барьера и фазу волновой функции,

$$K = \int_{y_1}^{y_2} p(y) dy, \quad \Phi = \int_{y_{\min}}^{y_1} p(y) dy + \delta(K), \quad (2.72)$$

где  $y_{1,2}$  — точки поворота слева и справа от барьера ( $p(y)$  — импульс в  $y$ -пространстве), то приближенное выражение для  $\Gamma$  принимает вид

$$\Gamma \approx e^{-2K} \left[ 2 \left( \frac{d\Phi}{dE} \right)_{E_n} \right]^{-1}. \quad (2.73)$$

Физический смысл (2.73) ясен: скорость распада  $\Gamma$  пропорциональна частоте движения электрона в потенциальной яме  $(d\Phi/dE)_{E_n}^{-1}$ , умноженной на вероятность распада  $e^{-2K}$  при подходе к барьеру. Оба эти параметра могут быть выражены аналогично в разделе 2.7.1 через аналитические функции  $h(z_2)$  и  $g(z_2)$ , связанные с гипергеометрическими функциями:

$$\Gamma = \frac{\exp[-g(z_2)/w]}{v^3 h(z_2)}. \quad (2.74)$$

Общий вид функций  $h$  и  $g$  приведен в<sup>18</sup>. При слабых полях  $F \ll F_c$ , пользуясь связью (2.64) между параметром  $z_2$  и полем  $w$ , легко найти асимптотическое выражение для параметра распада  $\Gamma$ , совпадающее, как и должно быть, с результатами асимптотической теории.

При полях  $F$ , близких к критическому полю  $F_c$  ( $F_c - F \ll F_c$ ), параметр  $z_2$  близок к единице:  $1 - z_2 \ll 1$ . В этом случае

$$g(z_2) \approx \frac{\pi}{2^{1/6} \cdot 16} (1 - z_2)^2. \quad (2.75)$$

Предельное значение функции  $h(1)$  равно

$$h(1) = \sqrt{2} \left[ 6 - \ln(32 \sqrt{2} w_c) - \Psi\left(\frac{1}{2}\right) \right] \quad (2.76)$$

( $\Psi$  — логарифмическая производная  $\Gamma$ -функции).

Интересно сравнить значение  $\Gamma$  в точке  $F = F_c$  с результатами (2.58) в разделе 2.6. Подставляя (2.75), (2.76) в формулу (2.74), убеждаемся, что оба результата для ширины линии расходятся примерно в 2,5 раза. Это расхождение может быть вполне обусловлено различием аналитических аппроксимаций (см. <sup>18</sup>).

В табл. II из <sup>18</sup> приведено сравнение результатов квазиклассической теории <sup>18</sup> для параметров  $\nu$  и  $\Gamma$  с квантовомеханическими расчетами <sup>28</sup>.

## 2.8. Результаты численных расчетов

Численные методы расчетов были развиты в ряде работ <sup>29, 36–38</sup>, причем их результаты в целом неплохо согласуются друг с другом и заметно отличаются от результатов расчетов по более раннему методу Ланчоса, (см. <sup>17</sup>). Численные результаты удобно представить, имея в виду многочисленные приложения, в полуаналитической форме, основанной на теории возмущений по величине поля <sup>37</sup>. Энергии  $E(n_1, n_2, m, \lambda)$  и ширины  $\Gamma(n_1, n_2, m, \lambda)$  штарковских подуровней записываются в виде степенных рядов по параметру  $\lambda = n^3 F/4$ :

$$E(n_1, n_2, m, \lambda) = -\frac{1}{2n^2} \left( 1 + 4 \sum_p c_p(n_1, n_2, m) \lambda^p \right), \quad (2.77)$$

где коэффициенты  $c_p$  вычисляются методами возмущений <sup>37</sup>. Первые три из них имеют вид

$$\begin{aligned} c_1 &= -3(n_1 - n_2), \quad c_2 = \frac{1}{2} [17n^2 - 3(n_1 - n_2)^2 - 9m^2 + 19], \\ c_3 &= -3(n_1 - n_2) [23n^2 - (n_1 - n_2)^2 + 11m^2 + 39]. \end{aligned} \quad (2.78)$$

Первые два отвечают, очевидно, хорошо известным линейному и квадратичному эффектам Штарка. В <sup>37</sup> коэффициенты  $c_p$  приведены вплоть до 9-го порядка \*).

Аналитические выражения для ширин  $\Gamma$  уровней тесно связаны с частотой движения электрона в потенциальной яме, определяемой производной  $\partial E/\partial n_2$ :

$$\Gamma(n_1, n_2, m, \lambda) = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial E(n_1, n_2, m, \lambda)}{\partial n_2} \exp[-K(n_1, n_2, m, \lambda)]. \quad (2.79)$$

Функция  $K(n_1, n_2, m, \lambda)$  определяет, очевидно, проникаемость барьера. Производная  $\partial E/\partial n_2$  находится дифференцированием ряда (2.77).

Функция  $K$ , определяющая проникаемость барьера, находится с помощью асимптотического ряда для  $\Gamma$  вида (ср. раздел 2.4)

$$\Gamma(n_1 n_2 m \lambda) = \frac{\exp[3(n_1 - n_2) - (1/6)\lambda]}{n^3 n_2! (n_2 + m)! \lambda^{2n_2 + m + 1}} \sum_{k \geq 0} a_k(n_1 n_2 m) \lambda^k, \quad (2.80)$$

где коэффициенты  $a_k(n_1 n_2 m)$  выражаются через коэффициенты (2.77) из дисперсионного соотношения

$$c_p(n_1 n_2 m) = \frac{n^2}{4\pi} \int_0^{+\infty} [\Gamma(n_1 n_2 m \lambda) + (-1)^p \Gamma(n_1 n_2 m \lambda)] \frac{d\lambda}{\lambda^{p+1}}. \quad (2.81)$$

Соотношение (2.81) устанавливается из условия аналитичности энергии в плоскости комплексных значений поля  $F$  (подробнее см. <sup>17</sup>, с. 78).

\*) Полное разложение (2.77) с учетом (2.78) идет, конечно, по степеням классического параметра  $F n^4$ .



Сравнение коэффициентов  $a_k$  с коэффициентами  $c_p$  из (2.81) позволяет получить следующее соотношение для функции  $K$ :

$$K(n_1 n_2 m \lambda) = (6\lambda)^{-1} + \ln [\lambda^{2n_2+m+1} n_2! (n_2+m)! (2\pi)^{-1}] + 3(n_2 - n_1) - \\ - \frac{1}{6} \int_0^\lambda \left[ n^3 \frac{\partial E(n_1 n_2 m \lambda')}{\partial n_2} - 1 + 6(2n_2 + m + 1) \lambda' \right] \frac{d\lambda'}{\lambda'^2}. \quad (2.82)$$

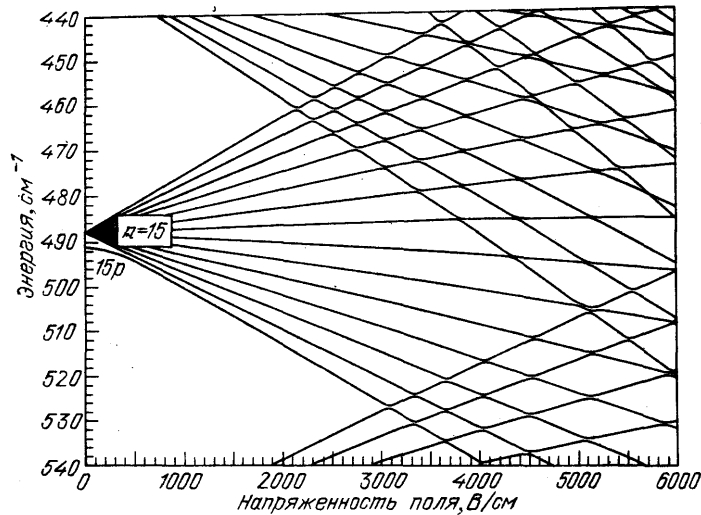
Таким образом, табулированные в <sup>37</sup> коэффициенты  $c_p$  позволяют найти уровни энергии (2.77) частоты движения внутри барьера и, наконец, ширины распадов из формул (2.79) и (2.82).

Таблица III

Скорости ионизации  $\Gamma$  состояний, относящихся к уровню  $n=10$ , в электрическом поле (по <sup>37</sup>)

$n_1 n_2 m$	$F, 10^4 \text{ В/см}$	$\Gamma, \text{ с}^{-1}$		
		По <sup>36</sup>	По <sup>28</sup>	По <sup>37</sup>
090	4,058	8,236(2)	—	6,889(3)
	4,603	8,015(5)	7(6)	7,090(6)
	5,178	1,425(8)	1,310(9)	1,344(9)
	5,814	7,560(9)	6,707(10)	7,611(10)
900	8,082	1,539(7)	6(6)	5,802(6)
	9,134	8,525(8)	3,170(8)	3,272(8)
	10,81	1,802(10)	6,585(9)	7,675(9)

В табл. III из <sup>37</sup> представлено сравнение результатов численных расчетов <sup>28</sup> и <sup>37</sup> для скоростей ионизации уровня  $n = 10$ , а также данные <sup>36</sup>, основанные на теории Ланчоса. Видно хорошее согласие данных <sup>28</sup> и <sup>37</sup> и существенное отличие их от более ранних данных <sup>36</sup>, основанных на теории Ланчоса.

Рис. 6. Штарковское расщепление высоковозбужденного атома лития (по данным <sup>38</sup>)

На рис. 6 показана рассчитанная штарковская структура высоковозбужденного атома лития <sup>38</sup>. Показан массив штарковских компонент, отвечающих проекции магнитного квантового числа  $|m| = 1$ . Этот массив (в силу

малости квантового дефекта р-состояний) оказывается очень близким к картине штарковского расщепления в водороде. Отличие наблюдается лишь для самых малых полей, где заметен квантовый дефект р-уровня. Ясно видна картина пересечения штарковских компонент различных уровней. Расталкивание пересекающихся термов обусловлено отличием от нуля квантового дефекта и в целом растет с его ростом \*). В отличие от неводородных атомов, в нерелятивистской теории водородного атома возможно точное пересечение уровней. Такая возможность связана с наличием дополнительного вырождения: пересекающиеся уровни, помимо параболических квантовых чисел  $n_1, m$ , могут иметь разные значения дополнительного интеграла движения — константы разделения переменных  $\alpha_{1,2}$  (см. (2.1), (2.2)).

В целом рассчитанная картина штарковского расщепления очень хорошо подтверждается экспериментально<sup>17,38</sup>.

### 3. ЭФФЕКТ ЗЕЕМАНА

#### 3.1. Атом в магнитном поле

##### 3.1.1. Вводные замечания

Воздействие магнитного поля  $B$  на атом приводит к хорошо известному зеемановскому расщеплению атомных уровней на отдельные компоненты, отвечающие определенным значениям проекции орбитального момента атома  $m$  на направление поля  $B$ .

Особенности эффекта Зеемана, обусловленные, в частности, спин-орбитальным взаимодействием, подробно изложены в целом ряде учебников и монографий<sup>1-3</sup>. Поэтому ниже мы остановимся на менее известных аспектах при больших значениях напряженности поля  $B$ .

Наложение магнитного поля на атом приводит к дополнительному ограничению движения электрона поперек поля, а при дальнейшем увеличении напряженности поля — к резкому уменьшению поперечного движения электрона и, как следствие, — превращению трехмерной потенциальной ямы атома в одномерную. Следствием этого может быть сильное изменение энергетического спектра атома.

Рассмотрим вначале эффект Зеемана первого порядка для простейшего бесспинового одноэлектронного (водородного) атома. Гамильтониан возмущения  $V$ , обусловленный взаимодействием орбитального момента  $I$  электрона с полем  $B$ , имеет вид

$$V = -\mu_B I B, \quad (3.1)$$

где  $\mu_B = e\hbar/2mc$  — магнетон Бора.

Для определения собственных значений энергий, т. е. диагонализации возмущения (3.1), достаточно выбрать волновые функции, отвечающие определенной проекции  $I$  на направление  $B$ . Обычно в качестве таких функций выбираются сферические волновые функции  $\Psi_{nlm}$ , отвечающие определенным значениям полного момента  $l^2 = l(l+1)$  и его проекции  $l_z = \hbar m$ . Для водородного атома зеемановские подуровни, отвечающие определенному  $m$ , остаются вырожденными по квантовому числу  $l$ . Эта специфика кулоновского вырождения проявляется также в том, что в качестве диагонализующих (3.1) волновых функций можно выбрать параболические волновые функции  $\Psi_{n_1 n_2}$  с осью  $Oz$  вдоль поля  $B$ . Эти состояния в силу соотношения  $n_1 + n_2 + |m| = n - 1$  при данном  $m$  остаются вырожденными по значениям  $n_1$  и  $n_2$ , отвечающим их одинаковой сумме  $n_1 + n_2$ . Таким образом, зеемановская компонента водородного уровня характеризуется не одной, а, вообще

\*) Видимые на рис. 6 большие величины расталкивания термов в действительность иллюзорны и обусловлены неточностью численной процедуры расчета (см.<sup>38</sup>).

товоря, несколькими волновыми функциями. Интенсивность компоненты определяется суммой по вырожденным состояниям, причем эта сумма уже не должна зависеть от выбора базиса (сферическое или параболическое квантование).

В простейшем случае линии  $L_\alpha$  (переход  $2 \rightarrow 1$ ) состоянию с  $m = 0$  отвечают две параболические функции с  $n_1 + n_2 = 1$  и двумя значениями  $n_1 - n_2$ , равными  $+1$  и  $-1$ , которые отвечают двум различным проекциям дипольного момента атома на направление поля  $\mathbf{B}$ . Ясно, что сумма интенсивностей переходов из этих двух состояний равна интенсивности перехода из одного «сферического» р-состояния с  $l = 1$ ,  $m = 0$ . В общем случае переход от параболического к сферическому базису определяется формулами (2.10).

### 3.1.2. Спектр энергии нижних состояний

Рассмотрим кратко вопрос об эволюции нижних состояний энергетического спектра водородоподобного атома при увеличении напряженности  $B$  магнитного поля до величин, сравнимых (и превышающих) с величиной внутриатомного электрического поля. Этот вопрос приобрел, как отмечалось, интерес в связи со спектром поглощения экситонов — образований «электрон — дырка» с весьма малой (вследствие большой диэлектрической проницаемости и малой эффективной массы электрона в среде) энергией связи, сравнимой с энергией электрона в магнитном поле умеренной напряженности ( $10\text{--}10^2$  Тл). В качестве меры напряженности поля введем параметр

$$\gamma = \frac{\mu_B B}{Ry} \approx 4,26 \cdot 10^{-6} B \text{ (Тл)}, \quad (3.2)$$

где  $Ry \approx 13,6$  эВ — постоянная Ридберга.

Гамильтониан атома в поле  $\mathbf{B}$  имеет вид \*)

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \mathbf{p} + \frac{1}{2} \frac{e}{c} [\mathbf{Br}] \right)^2 - \frac{e^2}{r}. \quad (3.3)$$

В силу инвариантности  $\hat{H}$  относительно вращения вокруг оси  $Oz$ , параллельной полю  $\mathbf{B}$  и проходящей через ядро атома,  $z$ -компонента орбитального момента  $L_z = \hbar M$  является сохраняющейся величиной. Вводя цилиндрическую систему координат с осью  $Oz \parallel \mathbf{B}$  и учитывая, что зависимость волновой функции  $\Psi$  от угла поворота  $\varphi$  вокруг оси  $z$  тривиальна:  $\Psi \sim e^{iM\varphi}$ , запишем уравнение Шрёдингера в виде

$$\left[ \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \frac{M^2}{\rho^2} - 4\gamma^2 \rho^2 + \frac{4}{r} + \left( \frac{E}{Ry} - \gamma M \right) \right] \Psi(\rho, z) = 0. \quad (3.4)$$

Двумерное уравнение (3.4) не решается аналитически в общем виде, поскольку член кулоновского взаимодействия, содержащий  $r = (\rho^2 + z^2)^{1/2}$ , препятствует разделению переменных. Поэтому мы продемонстрируем характер решения при  $\gamma \ll 1$  и  $\gamma \gg 1$  и некоторые аппроксимационные формулы для переходной области  $\gamma \sim 1$ .

В области  $\gamma \ll 1$  члены, содержащие  $\gamma$ , можно учесть по теории возмущений. Для основного состояния атома водорода это дает <sup>40</sup>

$$E_{100} = -1 + \frac{\gamma^2}{2} - \frac{53}{96} \gamma^4 + \frac{5581}{2304} \gamma^6 - \frac{21577397}{1105920} \gamma^8 + O(\gamma^{10}). \quad (3.5)$$

Выражение (3.5) хорошо совпадает с численными расчетами вплоть до  $\gamma \sim \sim 0,1$  (т. е.  $B \sim 10^4$  Тл). Аналогичные результаты были получены в <sup>40</sup> для  $n = 2$ .

\*) Спин электрона не учитывается, поскольку его учет приведет лишь к сдвигу энергии уровней на постоянную величину. Отметим также, что понятие «сильное магнитное поле» модифицируется при переходе к многоэлектронному атому <sup>39</sup>.

В области  $\gamma \gg 1$  движение электрона поперек магнитного поля определяется размером его циклотронной орбиты  $\lambda = (\hbar c / eM)^{1/2}$ , а вдоль поля — кулоновским взаимодействием. При этом потенциал этого «продольного» кулоновского взаимодействия может быть получен путем усреднения полного кулоновского потенциала  $e^2 (\rho^2 + z^2)^{-1/2}$  по малому размеру поперечного движения. Таким образом, учитывая, что в среднем  $\langle \rho^2 \rangle \sim \lambda \ll \langle z^2 \rangle$ , продольное движение электрона происходит в одномерном кулоновском потенциале.

Последовательное разделение поперечного и продольного движений в уравнении (3.4) при  $\gamma \gg 1$  достигается с помощью представления волновой функции  $\Psi(\rho, z)$  в виде произведения волновой функции  $\Psi_{NM}(\rho)$  поперечного движения электрона в магнитном поле на функцию  $\chi'_{NM}(z)$  его продольного движения в одномерном «продольном» потенциале.

Поперечное движение электрона в магнитном поле эквивалентно, как видно из (3.4), движению осциллятора, волновые функции которого хорошо известны<sup>2,7</sup>:

$$\begin{aligned} \Psi_{NM}(\rho) &= \left[ \frac{(N-M)!}{2\pi\lambda^2 (N!)^3} \right]^{1/2} (-i)^N \sigma^{M/2} e^{-\sigma/2} L_N^M(\sigma), & M \geq 0, \\ &= \left[ \frac{(N-M)!}{2\pi\lambda^2 ((N-M)!)^3} \right]^{1/2} (-i)^N \sigma^{-M/2} e^{-\sigma/2} L_{N-M}^{-M}(\sigma), & M < 0, \end{aligned} \quad (3.6)$$

где  $N = 0, 1, 2, \dots$  — целые числа, определяющие номер энергетического уровня (уровня Ландау) в магнитном поле,  $|M| \leq N$ ,  $L_N^M(\sigma)$  — полиномы Лагерра,  $\sigma \equiv \rho^2 / 2\lambda^2$ . Соответственно, уровни энергии поперечного (осцилляторного) движения электрона равны

$$E_N = \text{Ry} \gamma \left( N + \frac{1}{2} \right). \quad (3.7)$$

Уравнение для волновых функций  $\chi_{NM}^i(z)$  продольного движения получается из (3.4) после усреднения по функциям (3.6) поперечного движения<sup>6,7</sup>:

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + V_{NM}(z) \right) \chi_{NM}^i = E_{NM_i}^z \chi_{NM}^i, \quad (3.8)$$

где энергия продольного движения  $E_{NM_i}^z$  должна быть добавлена к энергии поперечного движения (3.7), а усредненный потенциал определяется формулой

$$V_{NM}(z) = \int \Psi_{NM}^*(\rho) \frac{e^2}{(\rho^2 + z^2)^{1/2}} \Psi_{NM}(\rho) \rho \, d\rho. \quad (3.9)$$

Явный вид потенциала (3.9) достаточно сложен для того, чтобы уравнение (3.8) допускало аналитическое решение. Однако его хорошо аппроксимируют функции вида<sup>7</sup>

$$V(z) = -\frac{e^2}{a + |z|} + \frac{Aae^2}{(a + |z|)^2}, \quad (3.10)$$

где размер  $a \sim \lambda$  и коэффициенты  $A$  подбираются для каждого  $NM$  так чтобы лучше аппроксимировать истинный потенциал (3.9).

При достаточно малых значениях параметра  $a$  потенциал  $V(z)$  близок, как видно из (3.10), к одномерному кулоновскому потенциалу  $e^2/|z|$ . Поэтому, по аналогии с трехмерной кулоновской задачей, запишем продольную энергию  $E_{NMn^*}^z$  в виде

$$E_{NMn^*}^z = -\frac{\text{Ry}}{n^{*2}}, \quad (3.11)$$

где эффективное «главное квантовое число»  $n^*$  определится из граничных условий.

Вводя далее переменную  $x = (mc^2/\hbar)^{1/2} (a + z)/n^*$  и ограничиваясь первым членом в потенциале (3.10), приведем уравнение (3.8) к виду

$$\frac{d^2\chi}{dx^2} - \left(\frac{1}{4} - \frac{n^*}{x}\right)\chi = 0, \quad (3.12)$$

решением которого являются функции Уиттекера  $W_{n^*, 1/2}(x)$ . Учитывая далее, что потенциал  $V(z)$  не меняется при замене  $z \rightarrow -z$ , найдем, что решения (3.12) должны быть либо четными, либо нечетными по  $z$ . Требование непрерывности функций и их производных при  $z = 0$  приводит для нечетных состояний к условию

$$W_{n^*, 1/2}\left(2\frac{a}{a_0 n^*}\right) = 0, \quad (3.13)$$

а для четных — к условию

$$\frac{d}{dz} W_{n^*, 1/2}\left(2\frac{a+z}{a_0 n^*}\right)\Big|_{z=0} = 0. \quad (3.14)$$

Условия (3.13), (3.14) дают значения чисел  $n^*$ , определяющих число узлов волновых функций и последовательность энергетических уровней.

В пределе  $\gamma \rightarrow \infty$  все энергетические уровни продольного движения водородоподобны, т. е.  $n^* = 1, 2, \dots$ , за исключением основного состояния, энергия которого логарифмически убывает с ростом  $\gamma$  (см.<sup>2</sup>, задача 3 к § 112), а также ниже, формулы (3.70), (3.71).

Существует однозначная связь между состояниями в слабом и сильном магнитных полях. Эта связь устанавливается с помощью подсчета числа узлов волновой функции в обоих пределах. Действительно, увеличение магнитного поля деформирует сферическую симметрию водородного атома в цилиндрическую. Учитывая, что у свободного атома имеется  $n_p = n - l - 1$  узлов радиальной волновой функции, отвечающих  $n_p$  узловым сферам, и  $l - |M|$  узлов угловой функции, отвечающих конусам с осью  $z$ , а в сильном магнитном поле — соответственно  $N - (|M| + M)/2$  узловых цилиндров ( $p = \text{const}$ ) и  $2n^*$  (для четных) или  $2n^* - 1$  (для нечетных состояний) узловых плоскостей, пересекающих ось  $Oz$ , найдем, следуя Праддо<sup>41</sup>,

$$\begin{aligned} l - |M| &= 2n^* && \text{— четные,} \\ &= 2n^* - 1 && \text{— нечетные,} \\ n - l - 1 &= N - \frac{|M| + M}{2}, && m = M. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Например, нижнее четное состояние  $N = 0$ ,  $M = 0$ ,  $n^* = 0$  соответствуют  $n = 1$ ,  $l = 0$ ,  $M = 0$  атома водорода.

Поведение энергии  $E$  с изменением параметра  $\gamma$  определяется формулой

$$\frac{\tilde{E}(\gamma)}{\text{Ry}} = \frac{1}{\text{Ry}} (E_N + E_{NMn^*}^z - \gamma M) = \gamma \left(N - M + \frac{1}{2}\right) - \frac{1}{2n^{*2}}. \quad (3.16)$$

Для расчета поведения первых нескольких уровней Галиндо<sup>40</sup> были предложены аппроксимационные формулы, основанные на интерполяции между пределами  $\gamma \rightarrow 0$  и  $\gamma \rightarrow \infty$ .

Следует отметить, что вопрос о соответствии термов и возможности их точных пересечений все еще остается открытым. Дело в том, что в магнитном поле переменные не разделяются (в отличие от электрического), и единственными сохраняющимися величинами наряду с энергией являются проекция момента и четность. В этом случае казалось бы применима теорема о непересечении Вигнера — Неймана (см.<sup>2</sup>, § 79). Однако для атома в магнитном поле существует, по-видимому, дополнительный приближенный интеграл движения (см. раздел 3.3), что может приводить, очевидно, к возможности точных (или исчезающе мало расталкивающихся) пересечений термов. Вплоть до окончательного выяснения этого вопроса мы придерживаемся изложенной схемы идентификации термов. Обсуждение этого вопроса содержится в<sup>42</sup>.

## 3.2. Адиабатическая теория

Результаты раздела 3.1 допускают интересное обобщение для больших квантовых чисел  $n$ , отвечающих движению в кулоновской яме, или при быстром вращении в магнитном поле ( $N \gg 1$ ). Оно было сделано Жиличем и Монозоном<sup>44</sup>, которым мы следуем ниже.

В основе подхода<sup>44</sup> лежит использование медленности (адиабатичности) движения электрона вдоль магнитного поля (оси  $z$ ) по сравнению с его вращением в поперечной плоскости. Сравнивая классическую частоту движения в кулоновском поле  $\omega_n = me^4/\hbar^3 n^3$  с ларморовской частотой  $\omega_L = eB/mc$ , приходим к условию

$$\frac{\omega_n}{\omega_L} = \frac{m^2 e^3 c}{\hbar^3 n^3 B} \ll 1. \quad (3.17)$$

Условие (3.17) медленности движения по координате  $z$  позволяет сохранить параметрическую зависимость от  $z$  в волновых функциях поперечного движения, т. е. считать

$$\chi_{Nn}(\rho, z) = R_N(\rho, z) W_{Nn}(z). \quad (3.18)$$

Тогда для  $R_N$  и  $W_{Nn}$  из (3.4) следуют уравнения

$$\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho \frac{dR_N}{d\rho} + \left[ -\frac{M^2}{\rho^2} + \frac{4}{(\rho^2 + z^2)^{1/2}} 4\gamma^2 \rho^2 + q_N^2(z) \right] R_N = 0, \quad (3.19)$$

$$-\frac{d^2 W_{Nn}}{dz^2} + (k^2 - q_N^2(z)) W_{Nn} = 0, \quad k^2 = 2E - \gamma M, \quad (3.20)$$

где собственные значения  $q_N^2(z)$  можно при  $n \gg 1$  определить из условий квантования Бора — Зоммерфельда

$$\int_{\rho_1(z)}^{\rho_2(z)} \left[ q_N^2(z) + \frac{4}{(\rho^2 + z^2)^{1/2}} - \frac{M^2}{\rho^2} - 4\gamma^2 \rho^2 \right]^{1/2} d\rho = \pi \left( N + \frac{1}{2} \right) \quad (3.21)$$

( $\rho_1(z) < \rho_2(z)$  — классические точки поворота — корни подынтегрального выражения).

Простые результаты получаются из (3.21) в двух предельных случаях  $|z| \gg \rho_2(0)$  и  $|z| \ll \rho_1(0)$ .

При  $|z| \gg \rho_2(0)$  из (3.21) следует разложение для собственных значений

$$q_N^2(z) = -\frac{2}{|z|} + \left( \gamma + \frac{2}{\gamma} \frac{1}{|z|^3} \right) (2N + |m| + 1), \quad (3.22)$$

определяющее вид эффективного потенциала в (3.20). Удобно заменить этот потенциал более общим потенциалом вида

$$\frac{2}{(z^2 + b_N^2)^{1/2}}, \quad b_N^2 = \frac{2}{\gamma} (2N + |m| + 1), \quad (3.23)$$

совпадающим при разложении в области  $z \gg b_N$  с (3.22) с точностью до членов  $|z|^{-3}$ . После этой замены уравнение (3.20) принимает вид

$$-\frac{d^2 W_{Nn}(z)}{dz^2} + \left[ \frac{2}{(z^2 + b_N^2)^{1/2}} - p_{Nn}^2 \right] W_{Nn}(z) = 0, \quad (3.24)$$

$$p_{Nn}^2 = -k^2 + \gamma (2N + |m| + 1). \quad (3.25)$$

При  $B \rightarrow \infty$  уравнение (3.24) сводится, очевидно, к уравнению (3.12) с одномерным кулоновским потенциалом, имеющему решения (3.13), (3.14). Параметр  $b_N$  определяет размер той области по  $z$ , в которой потенциал близок к кулоновскому. Видно, что с ростом числа  $N$  размер кулоновской ямы все более сужается.

Учет поправок следующего порядка по параметру адиабатичности (3.17) позволяет найти квантовые дефекты  $\delta n_{u,g}$  для уровней, обусловленные

отклонением поля от чисто кулоновского:

$$(p_{Nn}^2) = \frac{1}{(n + \delta n_{u,g})^2} \quad (n=0, 1, 2 \dots). \quad (3.26)$$

Нахождение величин  $\delta n_{u,g}$  для четных и нечетных состояний основано на решении уравнения (3.24) (сводящегося после замены  $x^2 = 4p_{Nn}^2(z^2 + b_N^2)$  к уравнению для функций Уиттекера) с условиями квантования (3.13), (3.14). Результат имеет вид

$$\delta n_u = 2b_N, \quad (3.27)$$

$$\delta n_g = -\left(\ln \frac{2b_N}{n}\right)^{-1}. \quad (3.28)$$

Таким образом, каждый дублетный уровень водородоподобного атома в магнитном поле расщепляется на два, соответствующие квантовым дефектам (3.27), (3.28). В пределе  $B \rightarrow \infty$  оба условия сливаются в двукратно вырожденный водородоподобный уровень (3.16).

В случае  $|z| \ll \rho_1(0)$  в условии квантования (3.21) можно воспользоваться разложением по прямым степеням  $(z/\rho)^2$ . Наиболее просто получить решение для  $M=0$  (когда  $\rho_1(0)=0$ ), считая параметр  $q_N^2$  (пропорциональный  $N$ ) большим:

$$q_N^2 = \frac{2}{\rho_2(0)} - \frac{z^2}{\rho_2^3(0)} = \gamma(2N+1), \quad (3.29)$$

$$\rho_2(0) = \frac{2q_N}{\gamma}.$$

Решая (3.29) методом последовательных приближений, найдем

$$q_N^2(z) = \gamma(2N+1) - \frac{\gamma}{2(2N+1)^{1/2}} + \frac{\gamma^{3/2}}{8(2N+1)^{3/2}} z^2. \quad (3.30)$$

Как видно, эффективный потенциал по оси  $z$  совпадает в данном случае с осцилляторным потенциалом. Уравнение для движения по оси  $z$  приобретает вид

$$\frac{d^2 W_{Nn}}{dz^2} - \Omega_N^2 z^2 W_{Nn} + p_{Nn}^2 W_{Nn} = 0, \quad (3.31)$$

где характерная частота  $\Omega_N$  движения электрона по оси  $z$  равна

$$\Omega_N = \frac{\gamma^{3/4}}{2\sqrt{2}(2N+1)^{3/4}} \text{ (а.е.)}, \quad (3.32)$$

а

$$p_{Nn}^2 = k^2 - \gamma(2N+1) + \frac{\gamma^{1/2}}{(2N+1)^{1/2}}. \quad (3.33)$$

Спектр энергетических уровней  $E$  совпадает в рассматриваемом случае со спектром осциллятора<sup>44</sup>;

$$E = \frac{\hbar e B}{2mc} (2N+1) - e^2 \left[ \frac{eB}{4\hbar c (2N+1)} \right]^{1/2} + \hbar \left[ \frac{e^7 B^3}{m^2 \hbar^3 c^3 2^6 (2N+1)^3} \right]^{1/4} \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad (3.34)$$

Условием реализации спектра (3.34) служит требование малости частоты  $\Omega_N$  по сравнению с ларморовской частотой, т. е.

$$\frac{\Omega_N}{\omega_L} \sim \left( \frac{m^2 e^3 c}{32 \hbar^3 B N^3} \right)^{1/4} \ll 1. \quad (3.35)$$

Таким образом, спектр связанных электронов на достаточно высоком уровне Ландау  $N \gg 1$  плавно меняется от низколежащих уровней осцилляторного типа до высоковозбужденных водородоподобных уровней ( $n \gg 1$ ), сгущающихся к границе серии (рис. 7).

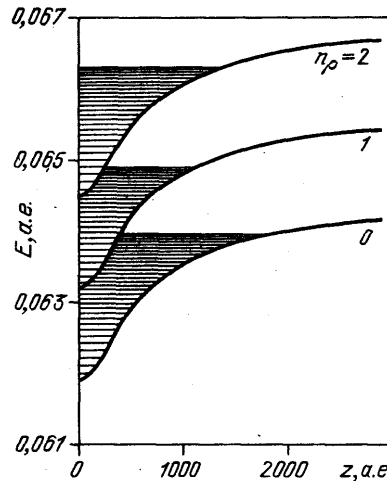


Рис. 7. Схема энергетических уровней возбужденного атома в сильном магнитном поле на достаточно высоком уровне Ландау

### 3.3. Пересечение термов и «скрытая» симметрия атома в магнитном поле

Гамильтониан  $\hat{H}$  водородного атома в магнитном поле  $B$ , направленном вдоль оси  $z$ , имеет вид

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2} - \frac{1}{r} + \frac{1}{2} \omega^2 \rho^2 + i\omega \hat{l}_z, \quad (3.36)$$

где  $\hat{l}_z$  — оператор проекций орбитального момента  $l$  на направление магнитного поля  $B$  (ось  $Oz$ ),  $\omega = B/c$  (а. е.).

Уравнения движения атомного электрона в магнитном поле не допускают (в отличие от электрического поля) разделения переменных в какой-либо

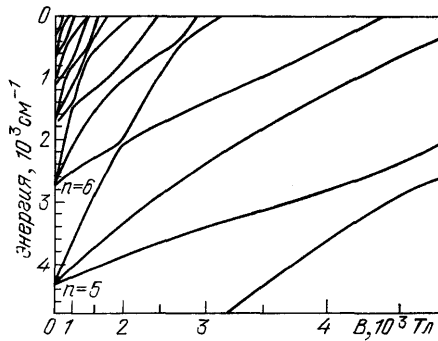


Рис. 8. Пересечение зеемановских подуровней энергии  $E$  ( $\text{см}^{-1}$ ) атома с увеличением магнитного поля  $B$  для малых значений главных квантовых чисел<sup>45</sup>

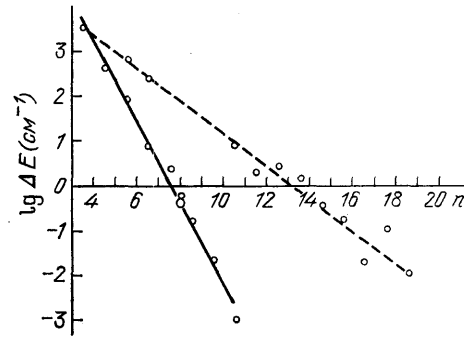


Рис. 9. Изменение величины расщепления  $\Delta E_n$  в точках пересечения зеемановских подуровней с ростом главного квантового числа  $n$ <sup>45</sup>

системе координат и, следовательно, не содержат дополнительных интегралов движения типа констант разделения переменных. Поэтому при перекрытии зеемановской структуры одного из уровней с другой в точках пересечения не следует ожидать точного совпадения значений энергии (как это было в электрическом поле). Тем не менее, при численных расчетах зеемановской структуры Циммерманом и др.<sup>45</sup> была обнаружена приближенная симметрия атома водорода в магнитном поле. Она проявляется в резком (экспоненциальном) убывании величины расщепления  $\Delta E_n$  в точках пересечения зеемановских подуровней от величины главного квантового числа  $n$ . На рис. 8 из<sup>45</sup> показана картина пересечения зеемановских подуровней для малых и больших значений квантовых чисел  $n$ . Видно, что «антипересечение» при небольших  $n$  сменяется картиной почти полного пересечения при увеличении  $n$ . Изменение величины  $\Delta E_n$  с ростом  $n$  показано на рис. 9 для пересечений крайних (сплошная линия) и крайней со средней зеемановских компонент. Видна явная экспоненциальная зависимость от номера уровня.

Среди ряда предложенных объяснений<sup>45–49</sup> приближенной симметрии остановимся на результатах Соловьева<sup>47</sup>, связывающих обнаруженное изменение  $\Delta E_n$  с наличием дополнительного интеграла движения  $\hat{\Lambda}$  для атома водорода в магнитном поле (см. также работу Херрика<sup>48</sup>). Интеграл  $\hat{\Lambda}$  можно получить, следуя<sup>47</sup>, на основе классических уравнений движения для орбитального момента и вектора Рунге — Ленца  $\mathbf{A} = [\mathbf{p}l] - (\mathbf{r}/r)$  (см.<sup>50</sup>) в магнитном поле ( $\rho = x + y$ )

$$\frac{d\mathbf{l}}{dt} = -\omega^2 [\mathbf{r}\rho], \quad \frac{d\mathbf{A}}{dt} = -\omega^2 \{[\mathbf{p} [\mathbf{r}\rho]] + [\rho [\mathbf{r}\rho]]\}. \quad (3.37)$$

Усредняя (3.37) по периоду движения на невозмущенной траектории (кеплеровскому эллипсу), приходим к системе уравнений, описывающих изменение траектории под действием магнитного поля.



С помощью этих уравнений можно убедиться в наличии интеграла движения

$$\Lambda = 4A^2 - 5A_z^2, \quad (3.38)$$

сохраняющегося наряду с энергией  $E$  и проекцией орбитального момента  $l_z$ . Сохранение  $\Lambda$  справедливо вплоть до членов порядка  $\omega^4$ . Учитывая, что  $A^2$  меняется в интервале  $0 \leq A^2 \leq 1$ , найдем область изменения  $\Lambda$ :  $-1 \leq \Lambda \leq 4$ .

Наличие интеграла движения  $\Lambda$  приводит к дополнительным условиям квантования по угловым переменным. Действительно, пусть  $\theta$  — угол между векторами  $\mathbf{B}$  и  $\mathbf{A}$ ; тогда

$$\Lambda = A^2 (4 - 5 \cos^2 \theta). \quad (3.39)$$

При  $\Lambda = 0$  вектор  $\mathbf{A}$  находится на двойной конической поверхности, задаваемой условием  $\text{ctg } \theta_0 = 2$ . Сохранение  $\Lambda$  означает, что все траектории движения разбиваются на два класса: траектории внутри двойного конуса (при  $0 \leq \theta \leq \theta_0$ ;  $\pi - \theta_0 \leq \theta \leq \pi$ ) либо вне его (при  $\theta_0 \leq \theta \leq \pi - \theta_0$ ). Для записи условия квантования необходимо ввести обобщенный импульс, канонически сопряженный координате  $\theta$ . Таковым является, очевидно, компонента орбитального момента  $l_\perp(\theta)$ , перпендикулярная плоскости векторов  $\mathbf{B}$  и  $\mathbf{A}$ . Выражая  $l_\perp$  через интегралы движения  $t$ ,  $E$  ( $n = -\sqrt{2E}$ ),  $\Lambda$ , найдем<sup>47</sup>

$$l_\perp(\theta) = [n^2 - U_{\text{эфф}}(\theta)]^{1/2}, \quad U_{\text{эфф}}(\theta) = \frac{n^2 \Lambda}{1 - 5 \sin^2 \theta} - \frac{m^2}{\sin^2 \theta}. \quad (3.40)$$

Эффективный «угловой» потенциал  $U_{\text{эфф}}(\theta)$  изображен на рис. 10 для случаев  $\Lambda < 0$  (а) и  $\Lambda > 0$  (б). Видно, что наличие дополнительного интеграла движения приводит к резко разделенным областям классического движения, определяемых корнями эффективного потенциала  $\theta_1, \dots, \theta_6$ . При  $\Lambda < 0$  условия квантования Бора — Зоммерфельда записываются для движения в верхней и нижней частях двойного конуса отдельно так:

$$I_1(\Lambda) = \int_{\theta_1}^{\theta_2} l_\perp(\theta) d\theta = \pi \left( k + \frac{1}{2} \right), \quad (3.41)$$

$$I_2(\Lambda) = \int_{\theta_5}^{\theta_6} l_\perp(\theta) d\theta = \pi \left( k + \frac{1}{2} \right) \quad (k = 0, 1, 2, \dots). \quad (3.42)$$

Поскольку потенциалы в этом случае одинаковы, получающиеся состояния оказываются двукратно вырожденными. Из этих состояний, локализованных в верхней и нижней частях конуса, можно построить волновые функции, симметричные и антисимметричные относительно плоскости  $x, y$ .

При  $\Lambda > 0$  состояния невырождены и условие квантования имеет вид

$$I_3(\Lambda) = \int_{\theta_3}^{\theta_4} l_\perp(\theta) d\theta = \pi \left( k + \frac{1}{2} \right). \quad (3.43)$$

Интегралы (3.41) — (3.43) не вычисляются в аналитическом виде в общем случае. Максимальное значение  $I_i(\Lambda)$  достигается при  $\Lambda = 0$  и определяет

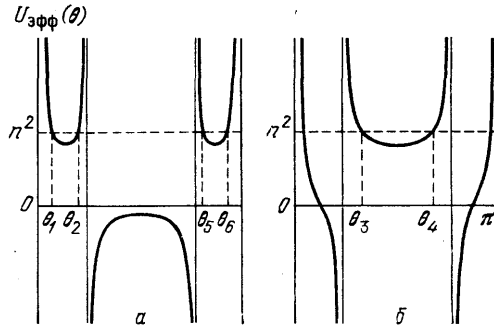


Рис. 10. Эффективный угловой потенциал  $U_{\text{эфф}}(\theta)$  для различных значений интеграла движения  $\Lambda < 0$  (а),  $\Lambda > 0$  (б)<sup>47</sup>

полное число состояний

$$N = \frac{1}{\pi} [I_1(0) + I_2(0) + I_3(0)] = n - m, \quad (3.44)$$

совпадающее с точным квантовым значением числа состояний с данными  $n$  и  $m$ .

В первом (по  $\omega^2$ ) порядке теории возмущений энергия выражается через среднее по периоду значение  $\rho^2 = x^2 + y^2$ . Вычисляя его с помощью уравнений для невозмущенной траектории, найдем<sup>47</sup>

$$E = E_0 + \frac{\omega^2}{2} \bar{\rho}^2 = -\frac{1}{2n^2} + \frac{\omega^2 n^2}{4} (n^2 + m^2 + n^2 \Lambda_k). \quad (3.45)$$

Наибольший интерес представляют крайние зеемановские компоненты, первыми испытывающие пересечения. Эти подуровни отвечают нижним уровням в эффективных потенциалах на рис. 10, и для их определения можно воспользоваться параболической аппроксимацией потенциала вблизи его минимума. Это дает

$$E = -\frac{1}{2n^2} + \omega^2 n^2 \sqrt{5} \left(k + \frac{1}{2}\right) \{[5(2k+1)^2 + n^2]^{1/2} - \sqrt{5}(2k+1)\} \quad (k=0, 1, 2, \dots). \quad (3.46)$$

При переходе к квантовой механике интеграл движения  $\Lambda$  заменяется оператором  $\hat{\Lambda}$ , который коммутирует с гамильтонианом в подпространстве волновых функций с данным  $n$ . В этом можно убедиться, выражая оператор  $\hat{\rho}^2$ , входящий в гамильтониан, через  $\Lambda$ . Такая связь позволяет построить также волновые функции, диагонализующие гамильтониан (3.36) в подпространстве состояний с данным  $n$ . Это построение оказывается возможным благодаря разделению переменных в эллипсо-цилиндрических координатах для водородного атома в том случае, когда в качестве независимых переменных используются операторы  $l_z$  и квадратичные комбинации вектора Рунге — Ленца. Мы не будем останавливаться на явном виде этих функций, отсылая читателя к<sup>47, 48</sup> и цитируемым там работам.

Найденная в<sup>47</sup> приближенная симметрия атома водорода, связанная с наличием дополнительного интеграла движения  $\Lambda$ , позволяет дать объяснение закономерностям, наблюдавшимся в численных расчетах (см. рис. 8, 9). Действительно, как видно из рис. 10, для состояний с различным знаком  $\Lambda$  расщепление в точках квазипересечения уровней определяется проницаемостью классического барьера и при  $n \gg 1$  должно быть экспоненциально мало. Расчеты расщепления  $\Delta E_n$ , проведенные по указанной схеме, приводят к результату<sup>47 \*</sup>:

$$\Delta E_n \approx \exp \left\{ -n \ln \left[ \frac{1}{2} (\sqrt{5} + 2)(\sqrt{5} + 1) \right] \right\} \approx \exp(-1,92n). \quad (3.47)$$

Результат (3.47) действительно дает экспоненциальный спад расщепления с ростом  $n$ , близкий к расчетным данным на рис. 9, 10.

Интересный подход к расчету квадратичного эффекта Зеемана был развит Брауном<sup>51</sup>, а также Казанцевым и др.<sup>52</sup>. Он основан на следующем свойстве матричных элементов оператора возмущения  $V = x^2 + y^2$  в параболических координатах (ось  $Oz \parallel B$ ):

$$\begin{aligned} V_{n_1 n_2} &\equiv \frac{n^2}{2} w_{n_1} = \frac{n^2}{2} [3n^2 - m^2 + 1 - 12(a - n_1)^2], \\ V_{n_1 n_1 - 1} &\equiv \frac{n^2}{2} p_{n_1} = \frac{n^2}{2} [n_1(n_1 + |m|)(2a - n_1 + 1)(2a - n_1 + |m| + 1)]^{1/2}, \\ V_{n_1 n_1'} &= 0 \quad \text{при} \quad |n_1 - n_1'| \geq 2, \quad 2a \equiv n_1 + n_2 = n - |m| - 1. \end{aligned} \quad (3.48)$$

\*) В расчетах необходимо учесть изменение параметра  $\Lambda$ , равного  $-1$  в области  $0 \leq \theta \leq \pi/4$  и  $+4$  — в области  $\pi/2 \leq \theta \leq \pi$ .

Записывая волновую функцию с данным  $n$  в виде разложения по параболическим функциям  $\Psi_{n_1 n_2 m}$  с коэффициентами  $C_{n_1}$  и используя свойство (3.48), найдем рекуррентные соотношения для коэффициентов  $C_{n_1}$

$$p_{n_1} C_{n_1-1} + (w_{n_1} - \mathcal{E}) C_{n_1} + p_{n_1+1} C_{n_1+1} = 0, \quad (3.49)$$

где собственные значения  $\mathcal{E}$  связаны с энергией атома  $E$  соотношением

$$E = -\frac{1}{2n^2} + m\omega_L + \frac{1}{4} \omega_L^2 n^2 \mathcal{E} + O(\omega_L^4). \quad (3.50)$$

Получим, следуя<sup>51</sup>, квазиклассическое решение (3.49) при больших квантовых числах  $n_1 \gg 1$ . Для этого представим  $C_k$  в виде произведения:

$$C_k = \prod_{s=k_0}^k \mu_s = \exp \left( i \sum_{s=k_0}^k \Pi_s \right) \approx \exp \left( i \int_{k_0}^k \Pi_s ds \right), \quad (3.51)$$

где функции  $\Pi_s$  играют роль классического импульса в пространстве параболических квантовых чисел.

Подставляя (3.51) в (3.49) и пользуясь условием  $n_1 \gg 1$ , приводим рекуррентные соотношения к квадратному уравнению вида

$$p_{n_1} + (w_{n_1} - \mathcal{E}) \mu_{n_1} + p_{n_1+1} \mu_{n_1}^2 = 0, \quad (3.52)$$

дискриминант  $D_{n_1}$  которого имеет приближенный вид

$$D_{n_1} \approx (U_{n_1}^+ - \mathcal{E})(U_{n_1}^- - \mathcal{E}). \quad (3.53)$$

Функции  $U_{n_1}^\pm$  играют роль, аналогичную потенциальной энергии в уравнении Шрёдингера, и с учетом (3.48) равны

$$U_{n_1}^\pm = 3n^2 - m^2 + 1 - 12(a - n_1)^2 \pm 8 \left\{ \left[ \left( a + \frac{1}{2} \right)^2 - (a - n_1)^2 \right] \times \right. \\ \left. \times \left[ \left( a + |m| + \frac{1}{2} \right)^2 - (a - n_1)^2 \right] \right\}^{1/2}. \quad (3.54)$$

Если энергия  $\mathcal{E}$  лежит в интервале  $U_{n_1}^- < \mathcal{E} < U_{n_1}^+$ , то  $D_{n_1} < 0$ , и классические импульсы  $\Pi_s$  в (3.51) принимают вид

$$\Pi_k \approx \arccos \frac{\mathcal{E} - w_k}{2p_k + (1/2)} \equiv \arccos B_k. \quad (3.55)$$

Найденные выражения для «импульсов»  $\Pi_k$  позволяют воспользоваться для нахождения энергии  $\mathcal{E}$  правилами квантования Бора — Зоммерфельда:

$$\int_{k_i}^{k_i'} \left( s + \frac{1}{2} \right) \frac{dB_s}{ds} \frac{ds}{(1 - B_s^2)^{1/2}} = \pi \left( N + \frac{1}{2} \right), \quad (3.56)$$

где  $N = 0, 1, 2, \dots$  — целое число.

Характер спектра зависит от вида потенциальных кривых  $U_{n_1}^\pm$ , определяемых значением проекции момента  $m$ . Так, при  $m = 0$  эти кривые имеют вид

$$U_{n_1}^+ \approx 5n^2 - 20(n_1 - a)^2, \quad U_{n_1}^- \approx n^2 - 4(n_1 - a)^2, \quad (3.57)$$

т.е. представляют собой две перевернутые параболы с центром в точке  $n_1 = a$ . Классическое движение происходит в области, ограниченной верхней ( $U^+$ ) и нижней ( $U^-$ ) параболой. При значениях энергии  $\mathcal{E}$ , меньших максимума нижней параболы ( $U_{n_1}^- < \mathcal{E} < \max U_{n_1}^- = n^2$ ), движение происходит в двух симметричных потенциальных ямах, разделенных максимумом  $U_{n_1}^-$ . В силу этой симметрии зеемановские подуровни оказываются в этом случае двукратно вырожденными. Разность энергий этих уровней  $\mathcal{E}_g - \mathcal{E}_u$  определяется проницаемостью барьера и определяется, как и в обычном координатном пространстве, фазовым интегралом между точками поворота в под-

барьерной области. Дублетное расщепление уровней исчезает при достаточно большом значении  $|m| > n/\sqrt{5}$ , отвечающем области движения без максимумов.

Расчеты<sup>51</sup> энергии  $\mathcal{E}_N$  и расщепления  $\mathcal{E}_g - \mathcal{E}_u$  для случая  $m = 0$  приводят к следующим результатам: для энергии нижних (дублетных) уровней из (3.56) получается ( $N = 0, 1, 2, \dots$ )

$$\mathcal{E}_N = 1 + 4n\sqrt{5} \left( N + \frac{1}{2} \right) - 12 \left( N + \frac{1}{2} \right)^2 + \dots \quad (3.58)$$

Соответствующее расщепление равно

$$\mathcal{E}_g - \mathcal{E}_u \approx (-1)^n \left( \frac{3 - \sqrt{5}}{2} \right)^2 (20n^2)^{N+1} \frac{2}{\pi} \left( \frac{e}{2N+1} \right)^{2N+1} \times \\ \times \exp \left[ -\frac{3}{\sqrt{5}} \frac{2N+1}{n} - \frac{9}{4\sqrt{5}} \frac{(2N+1)^2}{n} \right]. \quad (3.59)$$

Формулы (3.58), (3.59) справедливы, строго говоря, при  $N \ll n$ , однако, как показывает сравнение с численными расчетами<sup>51</sup>, они обладают высокой точностью даже при  $N \sim n$ .

### 3.4. Силы осцилляторов переходов

Расчет сил осцилляторов в слабом магнитном поле был проведен Кларком и Тейлором<sup>46</sup> методами теории возмущений. Эволюция сил осцилляторов  $f_{nn'}$  зеемановских компонент при увеличении напряженности магнитного поля  $B$  такова, что при перекрытии зеемановской структуры различных уровней не происходит существенного изменения в величинах  $f_{nn'}$ : компоненты свободно «проникают» друг через друга. Это обстоятельство является, как отмечалось в разделе 3.3, одним из свидетельств наличия дополнительной симметрии для атома в магнитном поле.

Силы осцилляторов в сверхсильном магнитном поле обладают резкой анизотропией, обусловленной выделенным направлением  $B \parallel Oz$  (связанным с направлением вращения электрона). Расчет сил осцилляторов при  $B \gg B_0 \sim 10^5$  Тл основан на общей адиабатической теории в разделах 3.1, 3.2 и был проведен Хасегавой и Ховардом<sup>7</sup>. Рассмотрим, следуя<sup>7</sup>, силы осцилляторов для поглощения и излучения циркулярно поляризованного в плоскости  $XY$ :

$$f_{ij}^{\pm} = \frac{2m}{\hbar^2} (E_j - E_i) |\langle \Psi_j, r_{\pm} \Psi_i \rangle|^2, \quad r_{\pm} = x \pm iy, \quad (3.60)$$

где  $\Psi_i, \Psi_j$  — волновые функции вида (3.18),  $E_i$  — энергии уровней.

Удобно ввести обобщенные импульсы  $\pi_{\pm}$  и координаты  $X, Y$  центра циклотронной орбиты электрона:

$$\pi_{\alpha} = \left( \mathbf{p} + \frac{e}{2c} [\mathbf{B}\mathbf{r}] \right)_{\alpha}, \quad \pi_{\pm} = \frac{1}{2} (\pi_x \pm i\pi_y), \quad (3.61)$$

$$X = x - \frac{\lambda^2}{\hbar} \pi_y, \quad Y = y + \frac{\lambda^2}{\hbar} \pi_x, \quad (3.62)$$

где  $\lambda = c\hbar/eB$  — радиус циклотронной орбиты.

Переменные  $\pi_{\alpha}, X, Y$  подчиняются коммутационным соотношениям

$$[\pi_x, \pi_y] = \frac{\hbar}{i\lambda^2}, \quad [X, Y] = i\lambda^2, \quad [\pi_{\alpha}, X] = [\pi_{\alpha}, Y] = 0. \quad (3.63)$$

Волновая функция основного состояния  $\Psi_0$  (обычно используемая при вариационных расчетах) имеет структуру

$$\Psi_0 \propto \exp \left( -\frac{x^2 + y^2}{4a_{\perp}^2} - \frac{z^2}{4a_{\parallel}^2} \right), \quad (3.64)$$

где  $a_{\perp}$  — поперечный размер орбиты, стремящейся к величине  $\lambda$  при  $B \rightarrow \infty$ ,  $a_{\parallel}$  — продольный размер порядка боровского радиуса  $a_0$ .

Используя операторы  $\pi_{\alpha}$  и полноту системы функций  $\Psi_i$ , легко получить правило сумм для сил осцилляторов:

$$\sum_j f_{ij}^{\pm} = \frac{1}{i\hbar} \langle \Psi_i, (r_{\mp} \pi_{\pm} - \pi_{\mp} r_{\pm}) \Psi_i \rangle. \quad (3.65)$$

Для основного состояния ( $i = 0$ ), используя функцию (3.64), найдем

$$\sum_j f_{0 \rightarrow j}^{\pm} = \frac{1}{2} \pm \frac{a_{\perp}^2}{2\lambda^2}. \quad (3.66)$$

Видно, что при  $B \rightarrow \infty$  сумма сил осцилляторов для левоциркулярной поляризации (ЛЦП) стремится к единице, а для правоциркулярной (ПЦП) — к нулю.

Взятие матричных элементов по волновым функциям  $\Phi_{NM}$  электрона в магнитном поле производится на основе стандартных свойств операторов  $\pi_{\pm}$ ,  $X$ ,  $Y$ , через которые выражается координата:

$$\pi_{\pm} \Phi_{NM} = \frac{\hbar}{\lambda \sqrt{2}} \left( \frac{N+1}{N} \right)^{1/2} e^{\pm i\theta} \Phi_{N \pm 1, M \pm 1}, \quad R_{\pm} \Phi_{NM} \propto \Phi_{N, M \pm 1}. \quad (3.67)$$

Остающиеся множители при  $f_{ij}$  определяются интегралами перекрытия волновых функций  $F_{NMn}$  одномерного квазикулоновского движения по оси  $z$ . Так, для переходов из основного состояния 0 ( $N = M = n = 0$ ) в первые возбужденные состояния  $N = 1$ ,  $M = 1$ ,  $n$  получается<sup>7</sup>

$$f_{0 \rightarrow 11n}^{+} = \langle F_{11n}, F_{000} \rangle^2 - \frac{m\lambda^2}{\hbar^2} (\epsilon_{11n} - \epsilon_{000}) \langle F_{11n}, F_{000} \rangle \quad (\text{ЛЦП}), \quad (3.68)$$

$$f_{0 \rightarrow 0, -1, n}^{-} = \frac{m\lambda^2}{\hbar^2} (\epsilon_{11n} - \epsilon_{000}) \langle F_{11n}, F_{000} \rangle \quad (\text{ПЦП}), \quad (3.69)$$

где  $\epsilon_{NMn}$  — энергии продольного движения,  $\langle F_{11n}, F_{000} \rangle$  — интегралы перекрытия «продольных» волновых функций.

Расчеты функций  $F_{NMn}$  (и связанных с ними интегралов перекрытия) основаны на общей схеме сшивки решений в области больших и малых значений координаты  $z$ . При больших  $z$  функции  $F_{NMn}(z)$  совпадают, согласно данным раздела 3.1, с функциями в одномерной кулоновской яме. При малых  $z$  их можно найти методом возмущений, причем при интегрировании кулоновского потенциала здесь возникает характерная для задачи логарифмическая особенность. Сшивая оба решения, найдем уровни энергии

$$\epsilon = -\frac{\hbar^2}{2m^2} \frac{1}{a^2 n^2} \quad (3.70)$$

и соответствующий им вид волновых функций.

Энергия основного состояния ( $n \rightarrow 0$ ) логарифмически убывает с ростом  $B$ :

$$\frac{1}{n} \approx \ln \frac{a^2}{4\lambda^2} + \alpha_{NM} + \dots, \quad (3.71)$$

причем это убывание универсально для любого уровня Ландау, зависимость от которого входит лишь через постоянные  $\alpha_{NM}$ .

Волновые функции на основном уровне  $n = 0$  сосредоточены вблизи начала координат, поэтому их интегралы перекрытия велики:

$$\langle F_{i, n=0}, F_{i, n=0} \rangle \approx 1 - \frac{4}{\ln(a^2/4\lambda^2)} + \dots \quad (3.72)$$

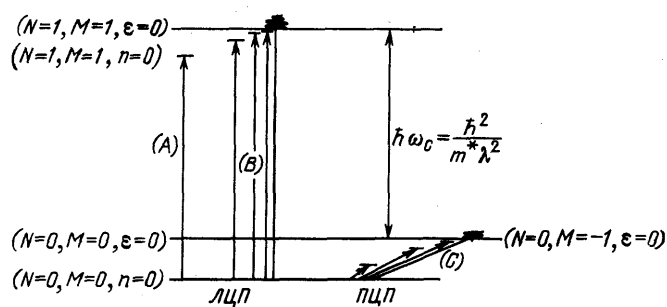


Рис. 11. Схема различных переходов для атома в сверхсильном магнитном поле<sup>7</sup>.

Указаны квантовые числа  $N$ ,  $M$ ,  $n$  состояний — право- и левосторонние переходы (ПЦП и ЛЦП)

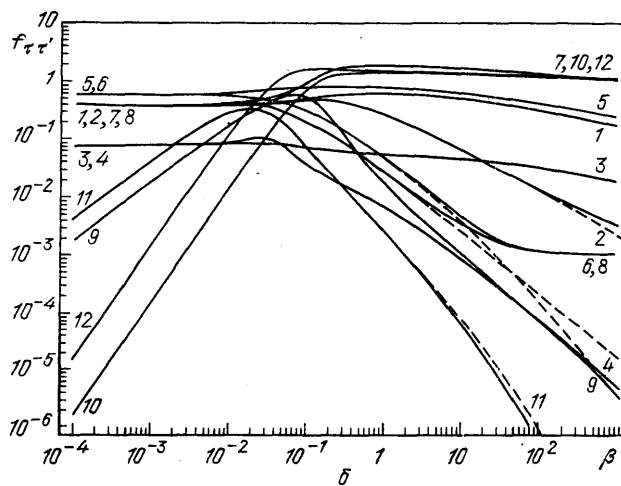
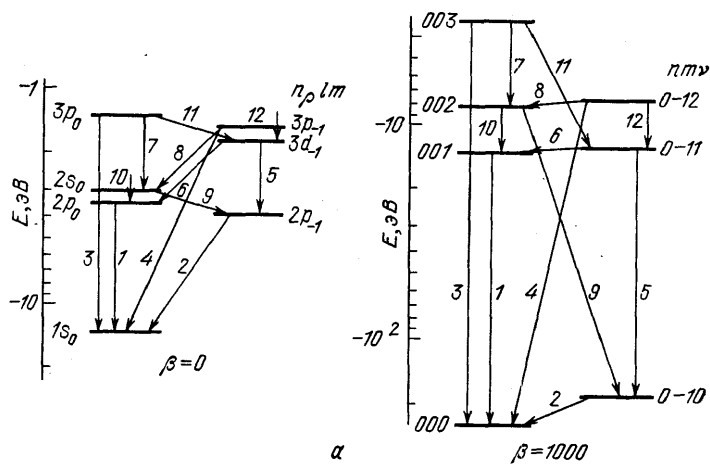


Рис. 12. Изменение сил осцилляторов  $f_{\tau\tau'}$  переходов между низшими состояниями атома водорода с увеличением магнитного поля (параметра  $\beta = B/B_0$ )<sup>53</sup>. Штриховые линии отвечают приближению бесконечной массы протона. Схема переходов при  $\beta = 0$  и  $\beta = 10^3$  указаны на рис. а

Подстановка (3.72) в (3.68) дает для силы осциллятора основного перехода

$$f_{0 \rightarrow 110}^+ = 1 - \frac{4}{\ln(a^2/4\lambda^2)} + \dots, \quad (3.73)$$

что находится в соответствии с правилом сумм (3.66).

Силы осцилляторов для переходов в  $n > 1$  находятся аналогичным образом. Для больших  $n \gg 1$  величины  $f_{0 \rightarrow 11n}$  оказываются пропорциональными нормировочному фактору  $n^{-3}$ . Удобно поэтому использовать силы осцилляторов на единичный интервал энергий  $dn/dE$ . Волновые функции с  $n > 0$  имеют логарифмически малые интегралы перекрытия с функцией  $F_{000}$ , сосредоточенной в области  $z \sim \ln^{-1}(a^2/4\lambda^2)$ .

Поэтому малы и соответствующие силы осцилляторов

$$\frac{dn}{d\varepsilon} f_{0 \rightarrow 11n}^+ = 4I^{-3/2} \left( \ln \frac{a^2}{2\lambda^2} - \text{const} \right)^{-1}, \quad (3.74)$$

где

$$I = -\varepsilon_0 = \frac{\hbar^2}{2ma^2} \left( \ln \frac{a^2}{2\lambda^2} - 0,577 \right). \quad (3.75)$$

Силы осцилляторов для ПЦП-переходов имеют дополнительный малый степенной множитель.

Общая схема переходов показана на рис. 11<sup>7</sup>. Наиболее интенсивны переходы типа А, далее — логарифмически подавленные переходы типа В, и, наконец, переходы типа С, подавленные степенным образом.

Детальные расчеты сил осцилляторов для атома водорода в магнитном поле, включая переходную область  $B \sim B_0$ , были выполнены Форстером и др.<sup>53</sup> На рис. 12<sup>53</sup> приведено поведение сил осцилляторов  $f_{\tau\tau'}$  для различных переходов между низшими состояниями водорода. Видно, что переходы, разрешенные в отсутствие магнитного поля (типа 1—8) слабо меняют величины  $f_{\tau\tau'}$ , тогда как для других переходов (9—12) силы осцилляторов меняются на несколько порядков величины.

### 3.5. Классические траектории атомного электрона в магнитном поле

При увеличении напряженности магнитного поля  $B$  энергетический спектр атома меняется от чисто кулоновского (ридберговского) к осцилляторному спектру Ландау с примыкающим к нему одномерным квазикулоновским спектром. Последовательно проследить такой переход в рамках квантовой теории оказывается, как это видно из разделов 3.1—3.3, достаточно сложно. Можно, однако, проследить такой переход в рамках классической механики, справедливой для достаточно высоко возбужденных атомных состояний. Здесь траектория атомного электрона должна эволюционировать по мере увеличения  $B$  от кеплеровского эллипса к ларморовским кружкам. В разделе 2.5 мы видели, что классическая картина движения электрона в электрическом поле  $F$ , близком к критическому  $F_c$ , давала хорошие результаты для вероятностной ионизации. Можно поэтому надеяться, что и в случае магнитного поля классическое описание послужит хорошей основой будущей квантовой теории.

Картина классического движения была подробно исследована Делосом, Кнудсоном и Нойдом<sup>54</sup> путем численного решения классических уравнений движения электрона в кулоновском и магнитном полях. Ниже мы следуем этой работе.

Уравнения классических траекторий в цилиндрических координатах  $\hat{\rho}$  и  $\hat{z}$  (ось  $Oz \parallel B$ ) получаются с помощью гамильтониана  $H$ , содержащего кулоновский потенциал  $-e^2(\hat{\rho}^2 + \hat{z}^2)^{-1/2}$ , центробежный потенциал  $L_z^2/2m\hat{\rho}^2$  и «диамагнитный» член  $e^2 B^2 \hat{\rho}^2/8mc^2$ .

Оказывается, что гамильтоновы уравнения движения для канонически сопряженных координат  $\hat{\rho}$ ,  $\hat{z}$  и импульсов  $\hat{p}_\rho$ ,  $\hat{p}_z$  могут быть приведены к безразмерной форме, содержащей только один параметр

$$L = L_z \left( \frac{e^2 B^2}{mc^2} \right)^{1/6} m^{-1/2} e^{-4/3}, \quad (3.76)$$

являющийся комбинацией параметров кулоновского ( $e^2$ ) и магнитного ( $\sim B^2$ ) взаимодействий.

Такая форма уравнений получается после замены переменных \*)

$$\rho = \frac{\hat{\rho}}{\alpha}, \quad z = \frac{\hat{z}}{\alpha}, \quad p_\rho = \frac{\hat{p}_\rho}{\beta}, \quad p_z = \frac{\hat{p}_z}{\beta}, \quad t = \frac{\hat{t}}{\gamma}, \quad (3.77)$$

где

$$\alpha = \left( \frac{mc^2}{B^2} \right)^{1/3}, \quad \beta = m^{1/2} e^{2/3} \left( \frac{e^2 B^2}{mc^2} \right)^{1/6}, \quad \gamma = \frac{mc}{eB}. \quad (3.78)$$

В новых переменных гамильтониан  $\hat{H}$  содержит единственный параметр — эффективную  $z$ -компоненту углового момента  $L$ .

Соответствующие уравнения движения имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{d\rho}{dt} &= p_\rho, \quad \frac{dz}{dt} = p_z, \\ \frac{dp_\rho}{dt} &= -\frac{\rho}{(\rho^2 + z^2)^{3/2}} - \frac{\rho}{4} + \frac{L^2}{\rho^3}, \\ \frac{dp_z}{dt} &= -\frac{z}{(\rho^2 + z^2)^{3/2}}. \end{aligned} \quad (3.79)$$

Траектории электрона в переменных  $\rho$ ,  $z$ ,  $p_\rho$ ,  $p_z$  являются все еще сложными. Можно, однако, получить достаточно полное представление о них, рассматривая их сечение плоскостью  $z = 0$  (сечение Пуанкаре<sup>55</sup>). Действительно, из (3.79) видно, что  $d^2z/dt^2$  и  $z$  имеют всегда противоположные знаки. Поэтому система обязательно пересечет плоскость  $z = 0$  за все время движения  $-\infty < t < +\infty$ . Численные расчеты траекторий в<sup>54</sup> проводились по следующей схеме: полагалось  $z = 0$ , для данных значений  $H$  и  $L$  выбиралось двадцать случайных значений переменных  $\rho$  и  $p_\rho$ ;  $p_z$  находилось из гамильтониана, после чего решались уравнения движения (3.79).

Рассмотрим вначале общую картину движения. Электрон движется в эффективном потенциале

$$V(\rho, z) = -(\rho^2 + z^2)^{-1/2} + \frac{L^2}{2\rho^2} + \frac{\rho^2}{8}, \quad (3.80)$$

обладающем двумя характерными значениями — минимумом при  $z_0 = 0$  в точке  $\rho_0$ :

$$\frac{\rho_0^4}{4} + \rho_0 - L^2 = 0, \quad V(\rho_0) = E_{\min}(L), \quad (3.81)$$

и энергией  $E_s$  отрыва электрона от ядра при  $z \rightarrow \infty$ :

$$\rho_s = (2L)^{1/2}, \quad V(\rho_s, \infty) = \frac{L}{2} = E_s(L). \quad (3.82)$$

Для описания движения электрона с энергией  $E$  удобно ввести безразмерную энергию

$$f = (E - E_{\min}(L)) (E_s - E_{\min}(L))^{-1}, \quad (3.83)$$

равную нулю при  $E = E_{\min}$  и единице при  $E = E_s$ .

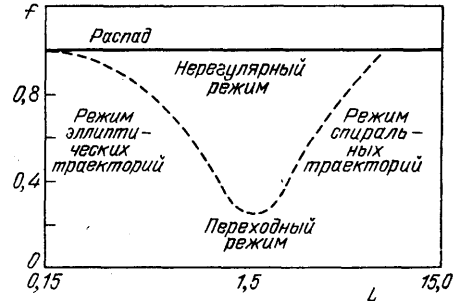
\*) Для упрощения последующей записи мы изменили по сравнению с<sup>54</sup> обозначения размерных ( $\hat{\rho}$ ,  $\hat{p}...$ ) и безразмерных ( $\rho$ ,  $p$ ) переменных.



На рис. 13 показана схема областей движения электрона на плоскости  $f, L$ . Эллиптический режим при малых  $L$  (малые поля  $B$ ) переходит

Рис. 13. Схема областей движения электрона на плоскости безразмерных энергий  $f = [E - E_{\min}(L)] [E_s(L) - E_{\min}(L)]^{-1}$  и момента  $L$ <sup>54</sup>.

Отмечены области проявления различных типов движения



в спиральный режим движения при больших  $L$  (больше  $B$ ). Вид фазовых траекторий в плоскости  $z = 0$  для ряда значений  $f$  и  $L$  показан на рис. 14.

Охарактеризуем, следуя<sup>54</sup>, движения электрона в каждой из областей на плоскости  $f, L$ .

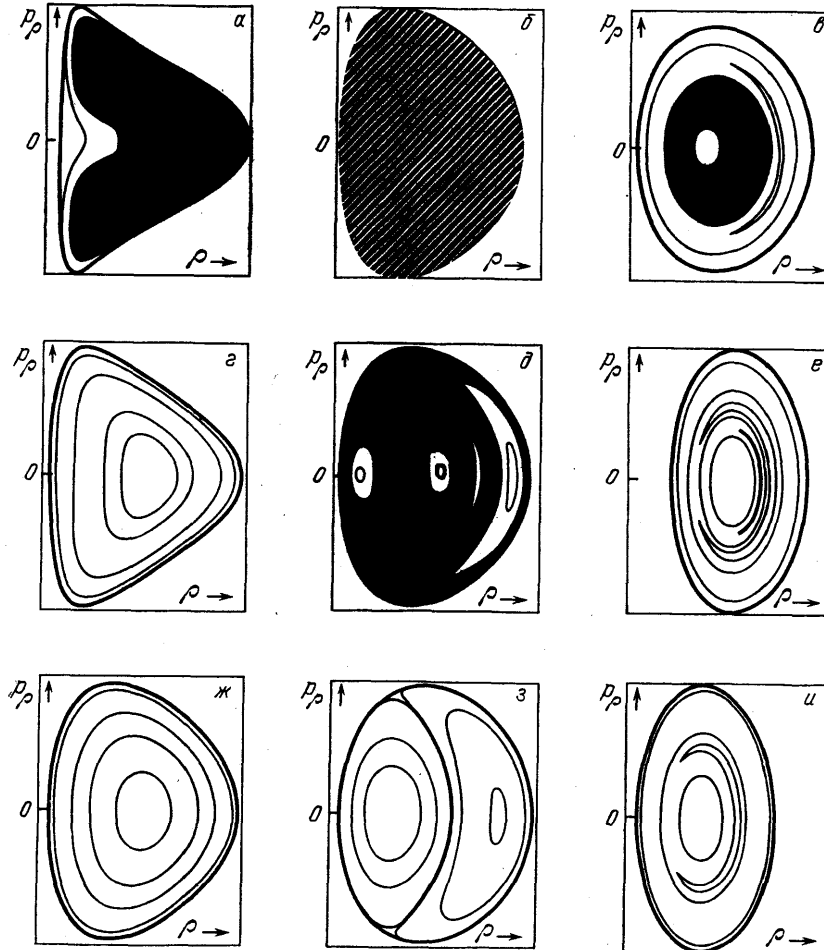


Рис. 14. Вид фазовых траекторий  $(p_\rho, \rho)$  электрона в плоскости  $z = 0$  для ряда значений  $f$  и  $L$ <sup>54</sup>.

Столбцам слева направо отвечают соответственно значения  $L = 0,50; 1,51$  и  $5,03$ , строкам снизу вверх — значения  $f = 0,1, 0,4$  и  $0,8$ . Темные области отвечают стохастическим траекториям

а) Область эллиптических траекторий отвечает обычному движению по кеплеровским эллипсам. Среди этих траекторий следует выделить эллипсы,

вытянутые вдоль положительной или отрицательной оси (так называемые «либраторы»). Движение по «либраторам» реализуется при условии <sup>54</sup>  $E \gg -1/10L^2$ , т. е. в узкой области ( $f - L$ ) на рис. 13. Эти траектории играют, по-видимому, важную роль при переходе к неустойчивому режиму движения (см. ниже). Основная часть траекторий (так называемые «ротаторы») отвечают движению по эллипсам, близким к плоскости  $x, y$ .

б) *Область спиральных траекторий* реализуется в сильном магнитном поле и отвечает, как и в квантовой теории раздела 3.2, резкому разделению периодов движений вдоль (ось  $Oz$ ) и поперек магнитного поля. Здесь, как и в разделе 3.2, можно прибегнуть к «адиабатическому» разделению движений в уравнении Гамильтона — Якоби, сохраняя параметрическую зависимость от  $z$  потенциала  $V(\rho, z)$ .

Вид энергетического спектра, получаемый с помощью квазиклассических условий квантования, соответствует приведенному ранее на рис. 7.

в) *Нерегулярный режим* движения реализуется при сравнимой величине взаимодействия электрона с кулоновским и магнитным полем и проявляется в том, что траектория сплошным образом заполняет фазовое  $(p_\rho, \rho)$ -пространство (см. рис. 14,  $e - u$ ). Механизм возникновения стохастического движения в данном случае до конца не ясен, хотя он, очевидно, связан с резонансами двух имеющихся периодических движений: по кеплеровскому эллипсу и ларморовской окружности.

г) *Переходной режим* реализуется также при сравнимых взаимодействиях, но при меньших энергиях  $f$  и отвечает устойчивому движению. При  $L \sim 1,5$ , однако, это движение резко отлично как от эллипсов, так и от окружностей. Для малых энергий  $f$  движение происходит вблизи минимума эффективного потенциала и может быть исследовано с помощью квадратичного разложения этого потенциала ( $U(\rho) \propto (\rho - \rho_0)^2$ ). В результате потенциал становится осцилляторным как по переменной  $\rho$ , так и по  $z$ ; при этом траектории оказываются вблизи траекторий двумерного осциллятора.

В заключение изложенных классических расчетов приведем оценки области проявления переходных эффектов для атома водорода в магнитном поле. Выразая параметр  $L$  через исходные параметры  $B$  (в Тл) и  $L_z$  (в единицах  $\hbar$ ), найдем:  $L_z B^{1/3} = 61,7L$ . При поле  $B \sim 10$  Тл и переходном значении  $L \sim 1,5$  найдем  $L_z \sim 40\hbar$ . Эти значения  $L_z$ , однако, могут уменьшиться до нескольких единиц для водородоподобных экситонов в среде с диэлектрической постоянной  $\sim 10$  и эффективной массой электрона  $0,1 m_e$ .

### 3.6. Стохастизация движения электрона в кулоновском и магнитном полях

Рассмотрим, следуя Робнику <sup>49</sup>, более детально картину возникновения неустойчивого движения электрона в кулоновском и магнитном полях. Такое движение обусловлено, как отмечалось выше, резонансным взаимодействием мод, отвечающих движению в этих полях, причем область его проявления сужается при увеличении того или иного взаимодействия. Таким образом, существует определенная область параметров (проекция орбитального момента  $L$ , энергии  $E$  и поля  $B/B_0$ ), в которой траектория электрона равномерно (хаотически) покрывает область разрешенного движения в фазовом пространстве (см. рис. 14).

Переход к хаотическому движению исследовался в <sup>49</sup>, как и в <sup>54</sup>, численно в рамках классической механики. На рис. 15 показано поведение точек пересечения траекторий электрона плоскостью  $z = 0$  (сечение Пуанкаре; см. <sup>55</sup>) при различных значениях энергии  $E$  для параметров  $L = 1$  и  $\gamma = B/B_0 = 1$ . Движению по траектории отвечает отображение точек на

фазовой плоскости  $(p_\rho, \rho)$ , получаемое периодическим пересечением траектории с плоскостью  $z = 0$ . Интерес представляют неподвижные точки и инвариантные кривые, не меняющиеся при последовательных отображениях. Минимальное и максимальное значения энергии на рис. 15 соответственно равны:  $E_{\min} = -0,394...$  и  $E_{\max} = 0,5$ . Видно, что при малой энергии (случай рис. 15, а) фазовое пространство состоит из инвариантных кривых, отвечающих периодическому движению электрона по траекториям. Наличие таких кривых свидетельствует о существовании дополнительного (третьего)

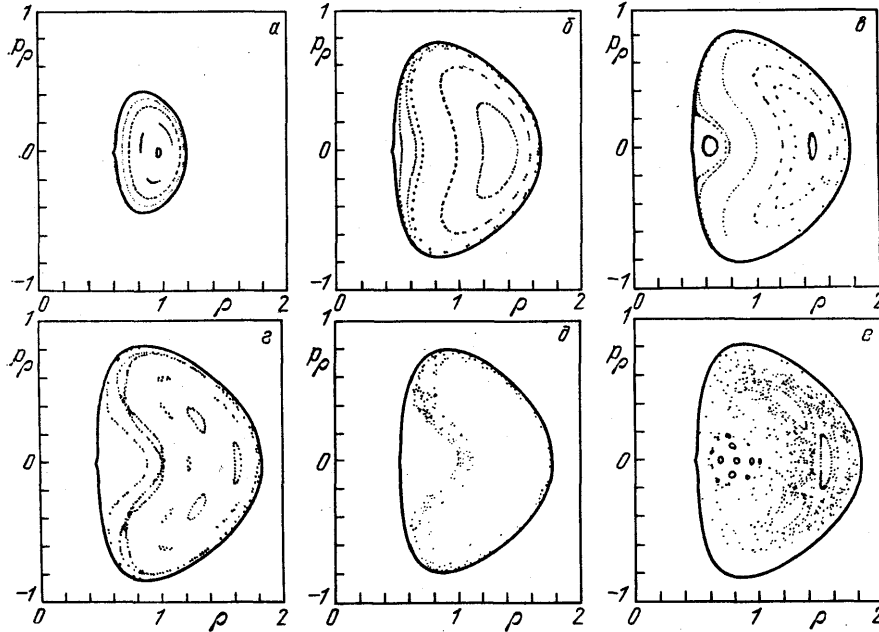


Рис. 15. Поведение фазовых траекторий электрона для значений параметров  $L = 1$  и  $\gamma = B/B_0 = 1$  при различной энергии  $E$ .  
 $E$  (а.е.) =  $-0,3$  (а),  $-0,1$  (б),  $-0,05$  (в),  $-0,04$  (г),  $-0,04$  (д) и  $0$  (е)

интеграла движения  $I_3(p, q)$ , задающего инвариантную поверхность  $I_3(p, q) = \text{const}$ , точки пересечения которой с плоскостью  $(\rho, p_\rho, z = 0)$  и образуют инвариантные кривые. В центре этих кривых находится неподвижная точка отображения, отвечающая строго периодическому движению.

С увеличением энергии  $E$  (рис. 15, в) возникает бифуркация, приводящая к появлению второй неподвижной точки, окруженной семейством замкнутых кривых. При энергии  $E = -0,04$  (рис. 15, г) структура траекторий резко меняется: появляются кривые с многократным пересечением, причем в углах таких пересечений происходит накопление точек (с мерой, не равной нулю), так что указанные кривые уже не являются обычными линиями и при дальнейшем увеличении  $E$  (рис. 15, д) размываются в некоторый равномерно заполненный слой. Дальнейшее увеличение  $E$  приводит к более или менее равномерному расширению этого слоя (перемежающегося с областями регулярного движения) и в дальнейшем — к равномерному заполнению всей области разрешенного движения в фазовом пространстве. Значение  $E = E_c = -0,04$ , при котором резко изменяется характер траекторий, называется критическим. Таким образом, при  $E < E_c$  движение происходит, в основном, по инвариантным кривым, отвечающим различным значениям «сохраняющегося инварианта  $I_3(p, q)$ . При  $E > E_c$  этот инвариант разрушается, и движение точек внутри разрешенной области некоррелировано — хаотично. Детальный механизм стохастизации (типа перекрытия резонансов<sup>55</sup>) окончательно не выяснен, как не найден и явный вид интеграла  $I_3(p, q)$ . Поэтому остается открытым также и вопрос о соответствии этого

интеграла движения с приближенным классическим интегралом  $\Lambda$ , найденным в <sup>47, 48</sup> (см. раздел 3.3).

Тем не менее, численные расчеты<sup>49</sup> позволяют определить область неустойчивого режима. Для этого заметим, что гамильтониан  $H$  и соответственно параметры  $E_{\min}$ ,  $E_s$  после обезразмеривания всех переменных с помощью  $L$  зависят лишь от комбинации  $\gamma L^3$ , что позволяет из расчетов для  $L = 1$  извлечь результаты для любых  $L$ . В <sup>49</sup> отношение  $f$  (3.83) рассчитано вблизи критических полей  $E = E_c$ . Минимальное значение  $f_{\min}$  оказывается равным 0,22 при значениях параметра  $\gamma L^3 \approx 2,7$ . Выше кривой  $f(E_c, \gamma L^3)$  реализуется, как отмечалось, нерегулярный стохастический режим движения электрона, ниже — регулярное квазипериодическое движение (см. рис. 13). В соответствии с параметром подобия  $\gamma L^3$  значения магнитных полей, при которых наступает стохастичность, быстро ( $\propto L^{-3}$ ) убывают с ростом  $L$ . При уменьшении либо увеличении параметра  $\gamma L^3$  начинает преобладать либо кулоновское, либо магнитное взаимодействие. При этом область стохастического режима сужается. Связь описанной классической картины движения электрона с квантовыми численными расчетами остается в настоящее время во многом неясной. Это относится как к области регулярного классического движения, так и (в еще большей мере) к области стохастического движения. Во всяком случае, здесь мы имеем дело с принципиально важным и практически реализующимся случаем квантования движения с неразделяющимися переменными.

### 3.7. Численные расчеты спектров атома в магнитном поле

Многочисленные численные расчеты<sup>41—43, 45, 47, 53, 56—58</sup> спектров атома водорода в сильном магнитном поле проведены либо методом теории возмущений, либо на основе асимптотических разложений по величине поля  $B$ .

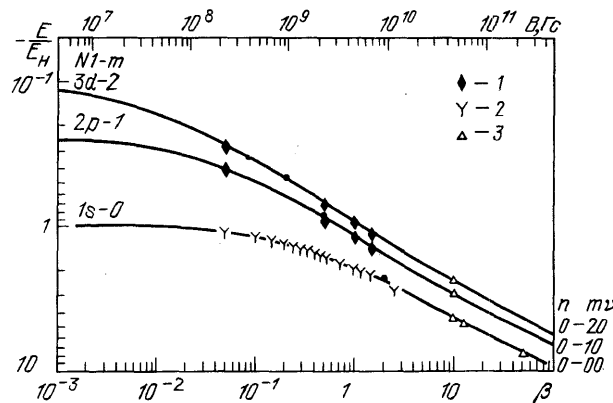


Рис. 16. Сравнение поведения атомных термов, полученных прямым сопряжением результатов при  $\beta \ll 1$  и  $\beta \gg 1$  с результатами более точных численных расчетов<sup>60</sup>. 1 — по <sup>41</sup>, 2 — по <sup>43</sup>, 3 — по <sup>42</sup>. Точками отмечены места сопряжения термов

Выше в разделе 3.1 уже приводились некоторые результаты расчетов и указывались основанные на них интерполяционные формулы для низших возбужденных уровней.

В целом в настоящее время достаточно удобные универсальные данные для произвольных атомных уровней при любых значениях полей  $B$  отсутствуют, хотя результаты расчетов, проведенные для ряда состояний в различных областях изменения  $B$ , хорошо согласуются друг с другом \*).

\*) Мы не касаемся области очень сильных полей  $B/B_0 > 10^3$ , где становятся существенными вопросы разделения переменных центра инерции и относительного движения<sup>59</sup>.

Здесь уместно отметить, следуя<sup>60</sup>, простое обстоятельство, связанное с поведением атомных термов в области перехода от сверхсильных полей  $B$  к слабым. Оно сводится к тому, что прямое сопряжение расчетов при слабых полях в сферическом базисе с диамагнитным возмущением с расчетами при сильных магнитных полях дает результаты, очень близкие к более точным численным расчетам.

На рис. 16 показано сравнение результатов, полученных прямым сопряжением результатов, отвечающих двум предельным случаям малых и больших  $B$  с результатами более точных расчетов<sup>41–43</sup>. Видно хорошее совпадение кривых во всем диапазоне изменения  $B$ . Это обстоятельство указывает на то, что перестройка атомного базиса состояний от кеплеровских орбит к циклотронному вращению происходит в узком диапазоне изменения  $B$ . На это же указывают результаты классического расчета траекторий электрона (см. раздел 3.5), показывающие возможность одновременного сосуществования орбит кеплеровского и циклотронного типов. Наглядные представления о трансформации волновых функций состояний дают детальные численные расчеты Резнера и др.<sup>61</sup>.

### 3.8. Одновременное воздействие полей $F$ и $B$ на атом

#### 3.8.1. Эффекты первого порядка

Воздействие на атом одновременно электрических и магнитных полей часто встречается в приложениях. В частности, такое воздействие характерно для атома в замагниченной плазме, где поле  $F$  создается окружающими заряженными частицами<sup>62, 63</sup>.

Скрещенные  $F$  —  $B$ -поля возникают также при движении атомов поперек магнитного поля вследствие появления в системе координат атома электрического (лоренцовского) поля  $\mathbf{F}_\perp = [\mathbf{v}\mathbf{B}]/c$ . Этот эффект приводит к зависимости энергетических уровней атома от его скорости, что представляет существенный интерес как для атома в плазме, так и для экситонов в твердом теле. Зависимость энергетических уровней экситона в сильном магнитном поле от его импульса поперек магнитного поля впервые исследована в<sup>64</sup>.

Часто возникновение эффективного магнитного поля связано с переходом во вращающуюся систему координат. Такой переход удобен в целом ряде физических задач, таких как магнитный резонанс<sup>65</sup>, атом во вращающемся электрическом поле<sup>66, 67</sup> или поле циркулярно поляризованного света<sup>68</sup>, атом в поле движущегося заряда<sup>69, 70</sup> и др. В этой связи следует различать задачи, содержащие собственно взаимодействие с магнитным полем, и эффективное взаимодействие, обусловленное вращением системы координат. В первом случае всегда присутствует диамагнитное возмущение, а во втором — только квадратичные поправки к эффекту Зеемана. Это различие, однако, несущественно в первом порядке теории возмущений.

Задача о поведении атома в  $F$ ,  $B$ -полях рассматривалась еще в рамках классической механики (см.<sup>71</sup>).

Рассмотрим усредненные по периодам характеристики движения электрона в полях  $F$  и  $B$ . Для этого воспользуемся дополнительным интегралом движения в кулоновском поле — вектором Рунге — Ленца, связанным со средним по периоду значением координаты  $\langle \mathbf{r} \rangle$  соотношением

$$\mathbf{A} = -\frac{2}{3} \frac{e^2}{a} \langle \mathbf{r} \rangle \quad \left( a = \frac{e^2}{2|E|} \right). \quad (3.84)$$

Для усредненных по периоду значений орбитального момента атома  $\mathbf{M}$  и вектора  $\mathbf{A}$  в постоянном электрическом поле  $F$  получаются уравнения<sup>72</sup>

$$\dot{\mathbf{M}} = \frac{3}{2} \frac{a}{e^2} [\mathbf{F}\mathbf{A}], \quad \dot{\mathbf{A}} = \frac{3}{2m} [\mathbf{F}\mathbf{M}]. \quad (3.85)$$

В однородном магнитном поле классическая частица вращается с угловой скоростью  $\Omega_B = -eB/2mc$ , что соответствует уравнениям

$$\dot{\mathbf{M}} = [\Omega \mathbf{M}], \quad \dot{\mathbf{A}} = [\Omega \mathbf{A}]. \quad (3.86)$$

Если частица испытывает одновременное воздействие  $\mathbf{F}$ -и  $\mathbf{B}$ -полей, то соответствующие уравнения движения для  $\mathbf{M}$  и  $\mathbf{A}$  получаются сложением (3.85) и (3.86). Вводя новые векторы момента

$$\mathbf{J}_{1,2} = \frac{1}{2} \left[ \mathbf{M} \pm \left( \frac{m}{a} \right)^{1/2} \mathbf{A} \right] \quad (3.87)$$

и частоты

$$\omega_{1,2} = \Omega \pm \frac{3}{2} \mathbf{F} \left( \frac{a}{m} \right)^{1/2}, \quad (3.88)$$

перепишем уравнения движения в виде <sup>71, 72</sup>

$$\dot{\mathbf{J}}_1 = [\omega_1 \mathbf{J}_1], \quad \dot{\mathbf{J}}_2 = [\omega_2 \mathbf{J}_2]. \quad (3.89)$$

Из (3.89) видно, что введенные новые моменты  $\mathbf{J}_1$  и  $\mathbf{J}_2$  прецессируют с частотами  $\omega_1$  и  $\omega_2$  независимо друг от друга. Поправка  $V_1$  к энергии частицы в  $\mathbf{F}$ -,  $\mathbf{B}$ -полях в переменных  $\mathbf{J}$  и  $\omega$  равна

$$V_1 = \mathbf{J}_1 \omega_1 + \mathbf{J}_2 \omega_2. \quad (3.90)$$

Таким образом, изменение энергии определяется проекцией векторов  $\mathbf{J}_{1,2}$  на направления  $\omega_{1,2}$ .

Запись (3.90) открывает простую возможность квантового обобщения результатов. Они связаны с независимым квантованием проекций моментов  $\mathbf{J}_1$  и  $\mathbf{J}_2$ , обозначаемых квантовыми числами  $n'$  и  $n''$ :

$$V_1 = n' \hbar |\omega_1| + n'' \hbar |\omega_2|. \quad (3.91)$$

Числа  $n$  и  $n''$  принимают, в соответствии с определением  $\mathbf{J}_1$  и  $\mathbf{J}_2$ , полуцелые значения:  $-(n-1)/2 \leq n', n'' \leq (n-1)/2$ .

Последовательное квантовомеханическое обобщение классических результатов было дано Демковым и др. <sup>73</sup>. «Правильные» волновые функции  $\Psi_{nn'n''}$ , отвечающие диагонализированному гамильтониану (3.90), могут быть получены из параболических волновых функций  $\Psi_{ni_i i_z}$ , отвечающих определенным проекциям  $i_1, i_2$  векторов  $\mathbf{J}_1, \mathbf{J}_2$  на направление электрического поля путем вращений на углы  $\beta_1, \beta_2$ , составляемые векторами  $\omega_{1,2}$  с направлением  $\mathbf{F}$  <sup>73</sup>:

$$\Psi_{nn'n''} = \sum_{i_1, i_2} D_{n' i_1}^{(n-1)/2}(0, \beta_1, 0) D_{n'' i_2}^{(n-1)/2}(0, \beta_2, 0) \Psi_{ni_i i_z}; \quad (3.92)$$

здесь  $D_{k,l}^{(j)}(0, \beta, 0)$  — матрицы вращения Вигнера <sup>73</sup>, описывающие повороты на углы  $\beta_{1,2}$ , задаваемые соотношениями (для  $\mathbf{F} \perp \mathbf{B}$ )

$$\tan \beta_2 = \Omega \left( \frac{3}{2\hbar} n e a_0 F \right)^{-1}, \quad \beta_1 + \beta_2 = \pi. \quad (3.93)$$

При  $B = 0$  углы  $\beta_1 = \pi, \beta_2 = 0$  и функции  $\Psi_{nn'n''}$  совпадают с обычными параболическими функциями  $\Psi_{ni_i i_z}$ , отвечающими эффекту Штарка. При  $F = 0$  углы  $\beta_{1,2} = \pi/2$  и функции  $\Psi_{nn'n''}$  переходят в параболические функции, ориентированные вдоль магнитного поля  $\mathbf{B}$ . Их связь со сферическими функциями обсуждалась в разделе 3.1.1.

Особый интерес представляет случай взаимно-перпендикулярных полей  $\mathbf{F}$  и  $\mathbf{B}$ , когда изменение энергии равно

$$V_1 = \hbar (n' + n'') |\omega_{1,2}| = \hbar (n' + n'') \left[ \left( \frac{3}{2} n \frac{a_0}{\hbar e} \right)^2 F^2 + \Omega_B^2 \right]^{1/2}. \quad (3.94)$$

Здесь возникает дополнительное вырождение уровней, связанное с тем, что энергия  $V_1$  зависит лишь от суммы квантовых чисел  $n' + n''$ , а не от каждого из чисел  $n', n''$  в отдельности.

## 3.8.2. Поправки второго порядка

Расчеты второго порядка теории возмущений для атома водорода в  $\mathbf{F} - \mathbf{B}$ -полях оказываются гораздо более сложными. Они были рассмотрены Соловьевым<sup>74</sup>. Здесь необходимо учесть как поправки второго порядка от возмущения  $V_1$  (3.90), так и первый порядок диамагнитного возмущения  $V_2 = [\mathbf{Br}]^2/8c^2$ . При этом магнитное взаимодействие, входящее в  $V_1$ , не дает вклада, так как возникающие недиагональные по  $n$  матричные элементы от него обращаются в нуль. В результате, эффективный оператор  $\hat{\Lambda}$ , учитывающий возмущения второго порядка, равен<sup>74</sup>

$$\hat{\Lambda} = \hat{V}_2 - F^2 z G_n z \equiv \hat{V}_2 + \hat{W} F^2, \quad (3.95)$$

где  $G_n$  — кулоновская функция Грина, включающая суммирование по всем промежуточным состояниям атома.

Оператор  $\hat{V}_2$ , связанный с диамагнитным взаимодействием, уже был выше (см.<sup>47</sup> и раздел 3.3) выражен через оператор момента  $L$  и вектор Рунге — Ленца  $A$ :

$$\hat{V}_2 = \frac{n^2 B^2}{16c^2} (n^2 + 3 + L_B^2 + 4A^2 - 5A_B^2), \quad (3.96)$$

где  $L_B$ ,  $A_B$  — проекции этих операторов на направление магнитного поля.

Аналогичное выражение в пространстве состояний с данным  $n$  удается получить и для  $W$  (ось  $Oz$  параллельна полю  $\mathbf{F}$ ):

$$\hat{W} = \frac{n^4}{16} (5n^2 + 31 + 24L^2 - 24L_z^2 + 9A^2). \quad (3.97)$$

Выражая далее операторы  $L$  и  $A$  через новые операторы момента  $J_1$  и  $J$  и пользуясь волновыми функциями  $\Psi_{nn'n''}$  (3.92), отвечающими определенным проекциям этих операторов, найдем поправку второго порядка к энергии<sup>74</sup>:

$$\begin{aligned} E^{(2)} = & -\frac{n^4 F^2}{16} [17n^2 + 19 - 12(n'^2 + n'n'' \cos \gamma + n''^2)] + \\ & + \frac{n^2 B^2}{48c^2} [7n^2 + 5 + 4n'n'' \sin \gamma_1 \sin \gamma_2 + (n^2 - 1)(\cos^2 \gamma_1 + \cos^2 \gamma_2) - \\ & - 12(n'^2 \cos^2 \gamma_1 - n'n'' \cos \gamma_1 \cos \gamma_2 + n''^2 \cos^2 \gamma_2)], \quad (3.98) \end{aligned}$$

где  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  — углы между вектором  $\mathbf{B}$  и векторами  $\boldsymbol{\omega}_1$ ,  $\boldsymbol{\omega}_2$ , а  $\gamma = \gamma_1 + \gamma_2$ .

Результат справедлив только при том условии, что вырождение уровней полностью снято в первом порядке теории возмущений. Это условие нарушается для взаимно перпендикулярных полей  $F$  и  $B$ , когда частоты  $\boldsymbol{\omega}_1$  и  $\boldsymbol{\omega}_2$  равны между собой:  $\boldsymbol{\omega}_1 = \boldsymbol{\omega}_2 = \boldsymbol{\omega}$  и поправка первого порядка зависит только от суммы квантовых чисел  $n' + n''$ . Таким образом, формула (3.98) дает правильный результат, если разность величин  $\boldsymbol{\omega}_1$  и  $\boldsymbol{\omega}_2$  превосходит поправки  $E^{(2)}$ . Случай  $\mathbf{F} \perp \mathbf{B}$  во втором порядке теории возмущений не удается рассмотреть в аналитическом виде. Общая схема расчета в этом случае сводится к численной диагонализации билинейных комбинаций моментов  $J_1$  и  $J_2$  в подпространстве квантовых чисел  $n'$ ,  $n''$  и приведена в<sup>74</sup>.

Поведение основного состояния атома водорода при одновременном воздействии электрического и магнитного полей рассматривались Турбинером<sup>75</sup> методами теории возмущений. Разложение для энергии удобно представить в виде

$$E = E_{sz} + E^{(0,1)}, \quad (3.99)$$

где  $E_{sz}$  — сумма энергий полей  $F$  и  $B$  по отдельности:

$$E_{sz} = -1 - \frac{9}{2} F^2 + \frac{B^2}{2} - \frac{3555}{32} F^4 - \frac{53}{96} B^4 + \dots, \quad (3.100)$$

а  $E^{\parallel, \perp}$  содержит ранее не известные перекрестные члены для взаимно параллельных ( $E^{\parallel}$ ) и перпендикулярных ( $E^{\perp}$ ) направлений полей  $F$  и  $B$

$$E^{\parallel} = \frac{159}{16} F^2 B^2 - \frac{1\,742\,009}{26\,880} F^2 B^4 + \dots, \quad (3.101)$$

$$E^{\perp} = \frac{93}{4} F^2 B^2 - \frac{22\,770\,991}{107\,520} F^2 B^4 + \dots \quad (3.102)$$

Результат (3.99) — (3.102) позволяет понять качественные особенности поведения атома в полях  $F$  и  $B$ . Действительно, полагая величину электрического поля  $F$  постоянной, найдем магнитную восприимчивость атома<sup>75</sup>:

$$\begin{aligned} \chi^{\parallel} &= -1 - \frac{159}{8} F^2 + \frac{53}{24} B^2 + \frac{1\,742\,009}{6\,720} F^2 B^2 + \dots, \\ \chi^{\perp} &= -1 - \frac{731}{24} F^2 + \frac{53}{24} B^2 + \frac{15\,308\,863}{30\,240} F^2 B^2 + \dots \end{aligned} \quad (3.103)$$

Видно, что член с электрическим полем ( $\propto F^2$ ) имеет знак, противоположный обычному «диамагнитному» члену ( $\propto B^2$ ). Таким образом, наличие электрического поля увеличивает магнитную восприимчивость атома. Отметим, что этот эффект оказывается более сильным для случая  $\mathbf{F} \perp \mathbf{B}$ .

С другой стороны, фиксируя значение  $B$ , можно найти его влияние на поляризуемость атома в поле  $F$ <sup>75</sup>:

$$\begin{aligned} \alpha^{\parallel} &= 9 + \frac{3\,555}{8} F^2 - \frac{159}{8} B^2 + \frac{1\,742\,009}{13\,440} B^4 + \dots, \\ \alpha^{\perp} &= 9 + \frac{3\,555}{8} F^2 - \frac{731}{24} B^2 + \frac{15\,308\,863}{60\,480} B^4 + \dots \end{aligned} \quad (3.104)$$

Видно, что магнитное поле эффективно уменьшает поляризуемость атома.

### 3.8.3. Атом в электрическом и сильном магнитном полях

Случай сильного магнитного ( $B \gg B_0$ ) и слабого электрического ( $F \ll B$ ) полей рассматривался в<sup>64</sup>, применительно к упоминавшейся проблеме энергетических уровней экситона, движущегося поперек магнитного поля.

Детальное описание структуры таких спектров выходит за рамки настоящего обзора. Ниже мы остановимся лишь на интересной особенности спектра водородного атома в скрещенных полях  $F$  и  $B$ , исследованной Бурковой и др.<sup>76</sup>

Особенности движения свободного заряда в полях  $F$  и  $B$  связаны, как известно, с его дрейфом со скоростью

$$\mathbf{v}_d = c \frac{[\mathbf{F}\mathbf{B}]}{B^2}, \quad (3.105)$$

причем эта скорость одинакова как для иона (с массой  $m_i$ ), так и для электрона (с массой  $m_e$ ).

Наличие дрейфа электрона приводит к возможности появления его новых связанных состояний в атоме, локализованных на некотором расстоянии  $y_0$ , равном дрейфовому смещению за эффективный период циклотронных колебаний<sup>76</sup>:

$$y_0 = v_d \left[ \frac{eB}{(m_i + m_e)c} \right]^{-1} = \frac{Mc^2 F}{eB^2} \quad (M \equiv m_i + m_e). \quad (3.106)$$

Для нахождения спектра атомного электрона в этом случае удобно преобразовать волновую функцию в систему координат, связанную с дрейфовым движением<sup>64</sup>:

$$\Psi = \Phi \exp \frac{i\gamma M c [\mathbf{B}\mathbf{F}] \mathbf{r}}{2\hbar B^2}, \quad (3.107)$$

где  $\gamma = (m_i - m_e)/M$ .



Направляя ось  $z$  вдоль  $\mathbf{B}$ , а ось  $y$  — вдоль  $\mathbf{F}$  и сдвигая начало координат вдоль оси  $y$  на величину  $y_0$ , преобразуем уравнение Шрёдингера к виду <sup>76</sup>

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2\mu} \Delta_\rho - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{ie\hbar\gamma}{2mc} [\rho \nabla_\rho] \mathbf{B} + \frac{e^2}{8\mu c^2} B^2 \rho^2 - \right. \\ \left. - e [x^2 + (y + y_0)^2 + z^2]^{-1/2} - Mc^2 F^2 (2B^2)^{-1} \right\} \Phi = E\Phi, \quad (3.108)$$

где  $\mu = m_e m_1 / M$  — приведенная масса.

Рассмотрим эффективную потенциальную энергию  $U$  вдоль оси  $y$ :

$$U = \frac{e^2 B^2}{8\mu c^2} y^2 - \frac{e^2}{|y + y_0|} - \frac{Mc^2 F^2}{2B^2}. \quad (3.109)$$

Видно, что потенциал  $U$  может иметь две ямы: одну кулоновскую при  $y \approx y_0$ , а вторую — при  $y = 0$ . Такая структура потенциала реализуется при достаточно большом значении параметра

$$\left( \frac{M}{\mu} \right)^{1/2} \frac{\hbar c}{e^2} \frac{F}{B} \left( \frac{B}{B_0} \right)^2 > 1, \quad (3.110)$$

когда дно ямы при  $y = 0$  оказывается больше кулоновской энергии связи  $me^4/\hbar^2$ .

Для расчета энергетического спектра при условии (3.110) можно, как и выше в разделе 3.1, разделить переменные продольного (по  $z$ ) и поперечного движений и свести уравнение Шрёдингера (3.108) к одномерному уравнению с эффективным потенциалом  $u(x, y, z)$ , получаемым после усреднения исходного потенциала по поперечным координатам  $\rho$ :

$$u = -e^2 \int \frac{\Phi(\rho) d\rho}{[x^2 + (y + y_0)^2 + z^2]^{1/2}}, \quad (3.111)$$

где  $\Phi(\rho)$  — волновая функция поперечного движения с характерным масштабом  $a_B$  (см. разделы 3.1, 3.2).

Ориентируясь на связанные состояния вблизи  $y = 0$  и учитывая условие  $y_0 \gg a_B$ , можно положить в (3.111)  $x = y = 0$ , что дает

$$u = -\frac{e^2}{(z^2 + y_0^2)^{1/2}} \approx -\frac{e^2}{y_0} + \frac{e^2}{y_0^3} z^2. \quad (3.112)$$

В результате уравнение Шрёдингера для движения по оси  $z$  принимает вид

$$\frac{d^2 f}{dz^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2} [E - E_0 - u(z)] f = 0, \quad (3.113)$$

где

$$E_0 = \frac{e\hbar B}{2\mu c} - \frac{Mc^2 F^2}{2B^2} \quad (3.114)$$

— энергия, отвечающая границе сплошного спектра.

Для низших энергетических уровней в яме эффективные значения  $z_{эфф}$  малы по сравнению с  $y_0$ , так что можно воспользоваться разложением (3.112), что приводит, очевидно, к осцилляторному потенциалу. Определяемый отсюда энергетический спектр имеет вид <sup>76</sup>

$$\frac{E_n - E_0}{2Ry} = -\lambda^{-1} + \lambda^{-3/2} \left( n + \frac{1}{2} \right), \quad \lambda = \frac{M}{\mu} \frac{\hbar c}{e^2} \frac{F}{B} \frac{B}{B_0}. \quad (3.115)$$

Численно для атома водорода при  $B \sim B_0$  в значениях  $F$ , совместимых с (3.110), энергия связи оказывается порядка 0,55 эВ при расстоянии между уровнями ~0,1 эВ.

## 4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В обзоре указывается на бурный рост интереса к эффектам Штарка и Зеемана в последние годы. Это обусловлено, с одной стороны, развитием многочисленных практических приложений, а с другой — проблемами принципиального характера, связанными с динамикой систем с неразделяющимися переменными.

В прикладных исследованиях, посвященных эффектам Штарка и Зеемана, как правило, оказывается необходимым знать не один параметр, а весь комплекс характеристик атома в полях  $F$  и  $B$ : расщепление уровней, интенсивности линий, вероятности радиационных и автоионизационных распадов и др. Диапазон изменения напряженностей полей  $F$  и  $B$ , а также квантовых чисел  $n$  атомов весьма широк. Очень часто значения  $F$  и  $B$  обусловлены параметрами окружающей среды, например температурой  $T$  и плотностью  $N$  плазмы, также меняющимися в очень широких пределах. Поэтому весьма важно иметь аналитические результаты для параметров атома в полях  $F$  и  $B$ , причем в достаточно обзримом виде, допускающем использование для практических приложений.

Многие из рассмотренных вопросов не получили к настоящему времени окончательного решения. Это относится прежде всего к атому в магнитном поле, где отсутствие разделения переменных резко усложняет ситуацию. Исследования поведения электрона в этом случае методами классической механики и обнаружение стохастических областей движения оставляют открытыми вопросы о характере квантового движения и его соответствии классическому движению. Можно надеяться, что данная обзорная статья будет способствовать привлечению внимания к этим проблемам.

Институт атомной энергии им. И. В. Курчатова,  
Москва

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Бете Г., Солпите р Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. — М.: Физматгиз, 1960.
2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. — М.: Наука, 1974.
3. Собельман И. И. Введение в теорию атомных спектров. — М.: Наука, 1977.
4. Смирнов Б. М. // УФН, 1980. Т. 131. С. 577.
5. Летохов В. С., Мишин В. И., Пурецкий А. А. Химия плазмы/Под ред. Б. М. Смирнова. — М.: Атомиздат, 1977. — Вып. 4. С. 224.
6. Elliot R. J., Loudon R. // J. Phys. Chem. Sol. 1960. V. 15. P. 196.
7. Nasegava H., Howard R. E. // Ibidem. 1961. V. 21. P. 179.
8. Кадомцев Б. Б. // ЖЭТФ, 1970, т. 58. С. 1765.
9. Кадомцев Б. Б., Кудрявцев В. С. // ЖЭТФ, 1972. Т. 62. С. 144.
10. Garstang R. H. // Rep. Prog. Phys. 1977. V. 40. P. 105.
11. Грим Г. Уширение спектральных линий в плазме. — М.: Мир, 1978.
12. Лисица В. С. // УФН, 1977. Т. 122. С. 449.
13. Gordon M. A. // Astrophys. J. 1974. V. 192. P. 337.
14. Гуляев С. А. // Астрон. ж. 1976. Т. 53. С. 1010.
15. Seaton M. J. // Rep. Prog. Phys. 1983. V. 46. P. 167.
16. Делоне Н. Б., Крайнов В. П. Атом в сильном световом поле. — М.: Энергоатомиздат, 1984.
17. Ридберговские состояния атомов и молекул/Пер. с англ. Под ред. Р. Стеббингса, Ф. Даннинга. — М.: Мир, 1985.
18. Друкарев Г. Ф. // ЖЭТФ. 1978. Т. 75. С. 473; 1982. Т. 82. С. 1388.
19. Буреева Л. А. // Астрон. ж. 1968. Т. 45. С. 1215.
20. Гореславский С. П., Делоне Н. Б., Крайнов В. П. // ЖЭТФ. 1982. Т. 82. С. 1789.
21. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теория поля. — М.: Физматгиз, 1962.
22. Коган В. И., Кукушкин А. Б. // ЖЭТФ. 1984. Т. 67. С. 1164.
23. Кукушкин А. Б., Лисица В. С. // ЖЭТФ. 1985. Т. 88. С. 1570.
24. Negrick D. R. // Phys. Rev. Ser. A. 1982. V. 26. P. 323.
25. Hicks J. R., Tarter C. B., Moody D. A. // Ibidem. 1964. V. 133. P. 424.
26. Гуляев С. А. // Астрон. ж. 1978. Т. 55. С. 1002.
27. Смирнов Б. М., Чибисов М. И. // ЖЭТФ. 1965. Т. 49. С. 841.

28. Damburg R. J., Kolosov V. V. // J. Phys. Ser. B. 1978. V. 11. P. 1921.
29. Дамбург Р. Я., Колосов В. В. Асимптотический подход к задаче Штарка для атома водорода. — Рига: Зинатне, 1977.
30. Кадомцев Б. Б., Коган В. И., Смирнов Б. М., Шафранов В. Д. // УФН. 1978. Т. 124. С. 547.
31. Banks D., Leopold J. G. // J. Phys. Ser. B. 1978. V. 11. P. 37.
32. Зарецкий Д. Ф., Крайнов В. П. // ЖЭТФ. 1974. Т. 67. С. 1301.
33. Кадомцев Б. Б., Смирнов Б. М. // ЖЭТФ. 1981. Т. 80. С. 1715.
34. Lanczos C. // Zs. Phys. 1930. Bd 62. S. 518.
35. Фрёман Н., Фрёман П. ВКБ-приближение. — М.: Мир, 1967.
36. Baily D. S., Hiskes J. R., Riviere A. C. // Nucl. Fusion. 1965. V. 5. P. 41.
37. Nguyen H., d'Elat B., Couland G. // Phys. Lett. Ser. A. 1981. V. 85. P. 327.
38. Zimmerman L. M., Littman M. G., Kash M. M., Kleppner D. // Phys. Rev. Ser. A. 1979. V. 20. P. 2251.
39. Rau A. R. P., Mueller R. O., Spruch L. // Ibidem. 1975. V. 11. P. 1865.
40. Galindo A. // Nuovo Cimento. Ser. B. 1976. V. 34. P. 155.
41. Praddaude H. C. // Phys. Rev. Ser. A. 1972. V. 6. P. 1321.
42. Simola J., Virtano J. // J. Phys. Ser. B. 1978. V. 11. P. 3309.
43. Cabib D., Fabri F., Fiorio G. // Nuovo Cimento Ser. B. 1972. V. 10. P. 185.
44. Жилич А. Г., Монозон Б. С. // ФТТ. 1966. Т. 8. С. 3559.
45. Zimmerman M. L., Kash M. M., Kleppner D. // Phys. Rev. Lett. 1980. V. 45. P. 1092.
46. Clark C. W., Taylor K. T. // J. Phys. Ser. B. 1980. V. 13. P. L737.
47. Соловьев Е. А. // ЖЭТФ. 1982. Т. 82. С. 1762.
48. Herrick D. R. // Phys. Rev. Ser. A. 1982. V. 26. P. 323.
49. Robnik M. // J. Phys. Ser. A. 1981. V. 14. P. 3195.
50. Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. — М.: Наука, 1971.
51. Браун П. А. // ЖЭТФ, 1983. Т. 84. С. 850.
52. Kazantsev A. P., Pokrovsky V. L., Bergou J. // Phys. Rev. Ser. A. 1984. V. 28. P. 3659.
53. Forster H., Strupat W., Rosner W. et al. // J. Phys. Ser. B. 1984. V. 17. P. 1301.
54. Delos J. B., Knudson S. K., Noid D. W. // Phys. Rev. Ser. A. 1984. V. 30. P. 1208.
55. Лихтенберг А., Либерман М. Регулярная и стохастическая динамика. — М.: Мир, 1984.
56. Wunner G., Ruder H., Herold H. // Phys. Lett. Ser. A. 1981. V. 85. P. 430.
57. Pavlov-Verevkin V. B., Zhilinskii B. I. // Phys. Rev. Lett. 1980. V. 75. P. 279.
58. Friedrich H. // Phys. Rev. Ser. A. 1982. V. 26. P. 1827.
59. Herold H., Ruder H., Wunner G. // J. Phys. Ser. B. 1981. V. 14. P. 751.
60. Wunner G., Ruder H., Herold H. // Phys. Lett. Ser. A. 1981. V. 85. P. 430.
61. Rosenr W., Wunner G., Herold H., Ruder H. // J. Phys. Ser. B. 1984. V. 17. P. 29.
62. Nguyen-Hoe, Drawin H. W., Herman L. // J. Quantit. Spectr. and Rad. Transfer. 1967. V. 7. P. 429.
63. Демура А. В., Лисица В. С. // ЖЭТФ, 1972. Т. 62. С. 2161.
64. Горьков Л. П., Дзялошинский И. Е. // ЖЭТФ. 1967. Т. 53. С. 717.
65. Слитер Ч. Основы теории магнитного резонанса. — М.: Мир, 1968.
66. Ishimura T. // J. Phys. Soc. Japan. 1967. V. 23. P. 422.
67. Лисица В. С. // Опт. и спектр. 1971. Т. 31. С. 468.
68. Манakov Н. Л., Рапопорт Л. П. // ЖЭТФ. 1975. Т. 69. С. 842.
69. Лисица В. С., Шолин Г. В. // ЖЭТФ. 1971. Т. 61. С. 9.
70. Демков Ю. Н., Островский В. Н., Соловьев Е. А. // ЖЭТФ. 1974. Т. 66. С. 125.
71. Борн М. Лекции по атомной механике. — М.: ОНТИ, 1934.
72. Коткин Г. Л., Сербов В. Г. Сборник задач по классической механике. — М.: Наука, 1977.
73. Демков Ю. Н., Монозон Б. С., Островский В. Н. // ЖЭТФ. 1969. Т. 57. С. 1431.
74. Соловьев Е. А. // ЖЭТФ. 1983. Т. 85. С. 109.
75. Турбинер А. В. // Ibidem. Т. 84. С. 1329.
76. Буркова Л. А., Дзялошинский И. Е., Друкарев Г. Ф., Монозон Б. С. // ЖЭТФ. 1976. Т. 71. С. 526.