

Сечение ионизации и вклад континуума в оптические характеристики ридберговского атома

Е.А. Некипелов, В.Д. Овсянников

Воронежский госуниверситет, Физический факультет
394006, Воронеж, Университетская пл. 1

В настоящем докладе вклад непрерывного спектра в суммы сил осцилляторов ($q=0$) и их моментов ($q=\pm 1, \dots$)

$$S_{nl}(q) = \sum_{n'} 2\omega_{n'n}^{1+q} \left| \langle n' | z | nl \rangle \right|^2$$

представлен в виде интеграла от частотно-зависящего сечения одноэлектронной фотоионизации конкретного состояния атома.

Возможность представить частотную зависимость сечения в виде простой аналитической функции для произвольных состояний атома водорода и для ридберговских состояний многоэлектронных атомов позволяет выразить вклад континуума в оптические характеристики таких состояний в замкнутом виде.

Проанализирована зависимость вклада от кратности момента силы осциллятора и от главного квантового числа ридберговского состояния.

Получены прецизионные оценки вклада континуума в штарковский сдвиг ридберговских уровней тепловым излучением окружающей среды, аппроксимируемой абсолютно черным телом с заданной температурой. Такие оценки играют важную роль для контроля неопределенности стандартов частоты-времени на атомах в оптических решетках.

Содержание

1. Сечение ионизации ридберговского атома
2. Вклад континуума в правила сумм сил осцилляторов
3. Вклад континуума в штарковский сдвиг атомных уровней излучением черного тела.
4. Результаты численных расчетов и обсуждения.

1. Сечение фотоионизации

$$\sigma_{nl}(\omega) = \frac{4\pi^2\omega}{c} \left| \langle \varepsilon | z | nl \rangle \right|^2, \quad \varepsilon = \omega - |\mathbb{E}_{nl}|,$$

$c = 137.036$ ат. ед. — скорость света.

Зависимость от частоты для водорода и ридберговских состояний, $n \gg l$, $l = 0, 1, 2, \dots$, имеет вид:

$$\sigma_{nl}(\omega) = \sigma_{nl}^{thr} \left| \frac{\mathbb{E}_{nl}}{\omega} \right|^{\beta_{nl}},$$

где

$$\beta_{nl} = \beta_l^{(0)} + \frac{\beta_l^{(1)}}{n} + \frac{\beta_l^{(2)}}{n^2} \rightarrow \frac{7}{3}$$

А для сечения пороговой ионизации можно использовать асимптотическое представление в виде:

$$\sigma_{nl}^{thr} = s_l^{(0)} n^p (1 + s_l^{(1)} / n + s_l^{(2)} / n^2)$$

В квазиклассическом приближении $p \rightarrow 5/3$, однако при $p = 53/32$ данное уравнение более точно воспроизводит данные численных расчетов

Параметры сечения пороговой ионизации ридберговских серий атомов водорода

<i>серия</i>	$s_l^{(0)}$, Мб	$s_l^{(1)}$	$s_l^{(2)}$
nS	2.484	3.138	-8.209
nP	2.479	3.596	-7.298
nD	2.469	4.537	-7.839

2. Вклад континуума в правила сумм сил осцилляторов

$$S_{nl}(q) = S_{nl}^d(q) + S_{nl}^c(q)$$

Здесь

$$S_{nl}^d(q) = \sum_{n'} 2\omega_{n'n}^{1+q} \left| \langle n' | z | nl \rangle \right|^2$$

– суммарный вклад дискретного спектра, где $\omega_{n'n} = \mathbb{E}_{n'} - \mathbb{E}_{nl}$ – частота дискретно-дискретного перехода;

$$S_{nl}^c(q) = \int_0^{\infty} 2\omega_{\varepsilon n}^{1+q} \left| \langle \varepsilon | z | nl \rangle \right|^2 d\varepsilon$$

– вклад непрерывного спектра, где $\omega_{\varepsilon n} = \varepsilon + |\mathbb{E}_{nl}|$ – частота дискретно-непрерывного перехода.

Используя связь амплитуды дискретно-непрерывного перехода с сечением

$$\left| \langle \varepsilon | z | nl \rangle \right|^2 = \frac{c}{4\pi^2 \omega} \sigma_{nl}(\omega), \quad \varepsilon = \omega - |\mathbb{E}_{nl}|,$$

представим

$$S_{nl}^c(q) = \frac{c}{2\pi^2} \int_{|E_{nl}|}^{\infty} \omega^q \sigma_{nl}(\omega) d\omega$$

Подставив сюда асимптотическое соотношение

$$\sigma_{nl}(\omega) = \sigma_{nl}^{thr} \left| \frac{\mathbb{E}_{nl}}{\omega} \right|^{\beta_{nl}},$$

получим

$$S_{nl}^c(q) = \frac{c \sigma_{nl}^{thr}}{2\pi^2 (2n^2)^{q+1} (\beta - q - 1)}, \quad q \leq 1.$$

Можно видеть, что относительный вклад континуума $S_{nl}^c(q)/S_{nl}(q)$ для ридберговских состояний падает с ростом главного квантового числа n .

1) $q=1$:

$$S_{nl}(1) = \frac{4}{3} \langle nl | \hat{T} | nl \rangle = \frac{2}{3n^2}, \quad \hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2} - \text{оператор кинетической энергии}$$

$$S_{nl}^c(1)/S_{nl}(1) \propto n^{-1/3}.$$

2) $q=0$:

$$S_{nl}(0) \propto 1, \quad S_{nl}^c(0)/S_{nl}(0) \propto n^{-1/3}.$$

2) $q=-1$:

$$S_{nl}(-1) = \frac{2}{3} \langle nl | r^2 | nl \rangle = \frac{n^2}{3} [5n^2 + 1 - 3l(l+1)], \quad r - \text{радиальная переменная}$$

$$S_{nl}^c(-1)/S_{nl}(-1) \propto n^{-7/3}.$$

В частности для пр-состояний атомов водорода,

$$\beta_{np} = \begin{cases} 2.1633 - 0.48/n + 4.907/n^2, & n \leq 10, \\ 2.3103 - 2.88/n + 14.175/n^2, & n > 10; \end{cases}$$

$$\sigma_{np}^{thr} = \begin{cases} 2.4677n^{53/32} \left(1 + 3.3792/n - 3.7911/n^2\right), & n \leq 10, \\ 2.4771n^{53/32} \left(1 + 3.5771/n - 6.0511/n^2\right), & n > 10. \end{cases}$$

Рассчитанный с этими величинами относительный вклад (в %%) непрерывного спектра в правила сумм для сил осцилляторов ($q=0$) и моментов сил осцилляторов ($q=\pm 1$):

q	2p	3p	5p	7p	10p	20p	50p	100p	200p
-1	3.55	1.40	0.39	0.17	0.07	0.01	0	0	0
0	19.53	23.09	21.22	18.43	15.50	10.62	7.35	5.04	3.90
1	9.59	25.93	64.77	87.02	82.54	47.45	24.84	17.31	12.80

3. Сдвиг атомного уровня термоизлучением черного тела

$$\Delta \mathbb{E}_n^{BBR}(T) = -\frac{1}{4} \int_0^\infty E^2(\omega, T) \alpha_n(\omega) d\omega$$

$$E^2(\omega, T) = \frac{8\omega^3}{\pi c^3 \left[\exp\left(\frac{\omega}{k_B T}\right) - 1 \right]}$$

– из распределения Планка для интенсивности излучения АЧТ

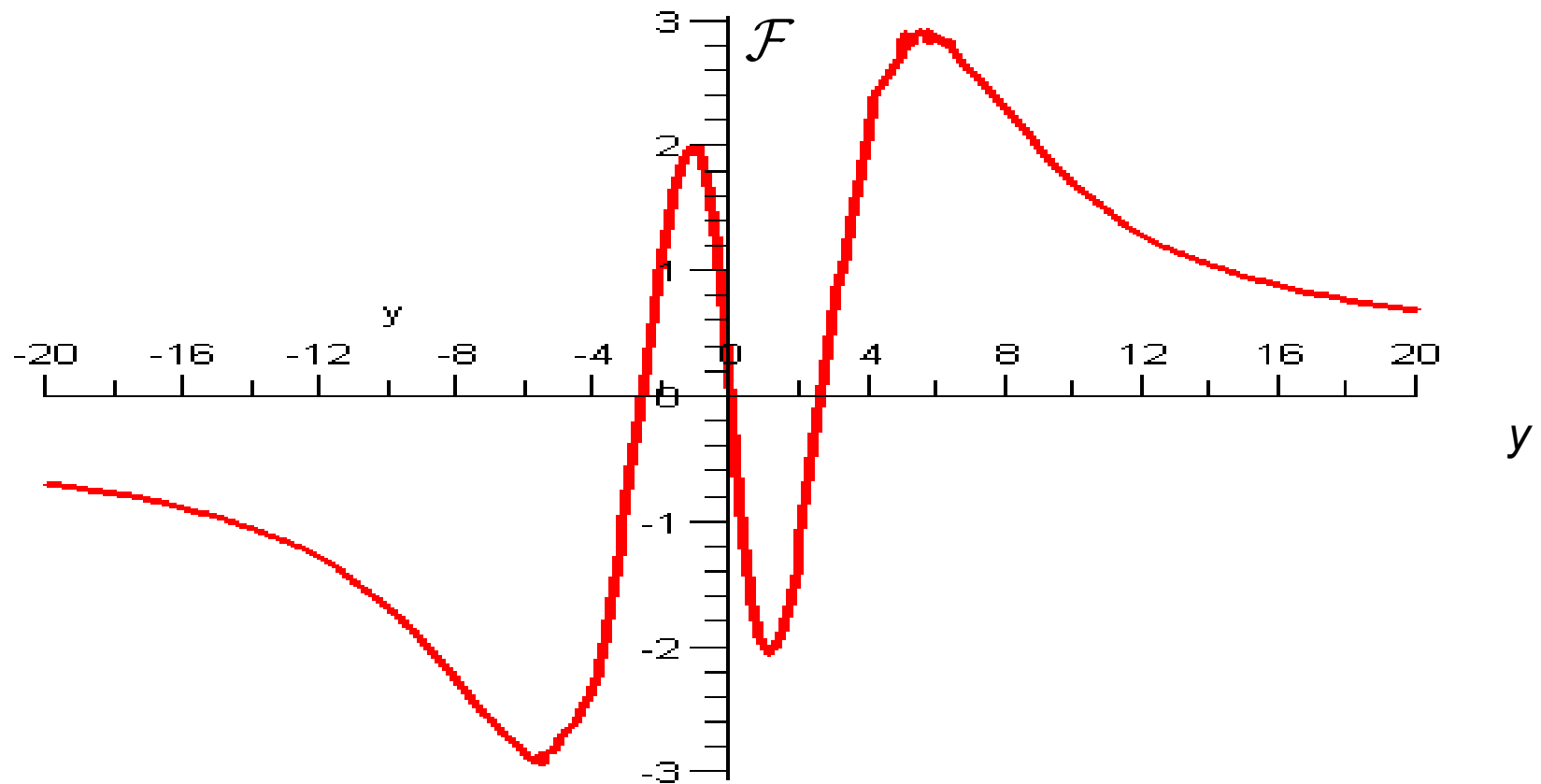
$$\alpha_n(\omega) = \sum_{n'} \frac{2\omega_{n'n} |\langle n' | z | n \rangle|^2}{\omega_{n'n}^2 - \omega^2}$$

– динамическая поляризуемость атома в состоянии $|n\rangle$.

J.W. Farley and W.H. Wing. Phys.Rev.A **33** (1981) 2397:

$$\Delta \mathbb{E}_n^{BBR}(T) = -\frac{2}{\pi c^3} (k_B T)^3 \sum_{n'} |\langle n' | z | n \rangle|^2 \mathcal{F}\left(\frac{\omega_{n'n}}{k_B T}\right)$$

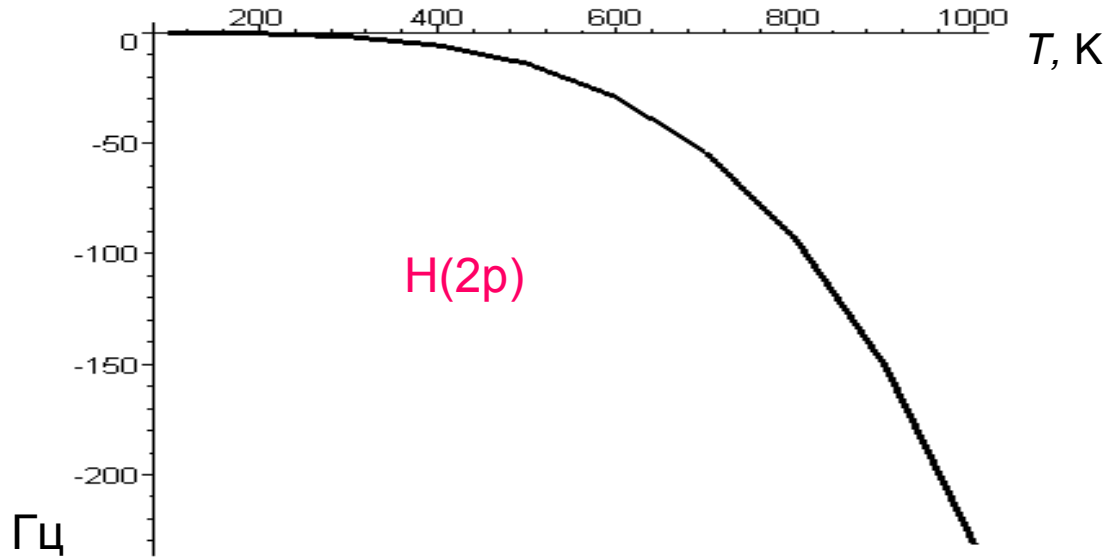
$$\mathcal{F}(y) = -2y \cdot \mathcal{PV} \left(\int_0^{\infty} \frac{x^3 dx}{(x^2 - y^2) [\exp(x) - 1]} \right)$$



$$\mathcal{F}(y) \approx -\frac{\pi^2}{3} y, \quad y \ll 1; \quad \mathcal{F}(y) \approx \frac{2\pi^4}{15y}, \quad y \gg 1$$

$$|\mathbb{E}_n| / k_B T \gg 1:$$

$$\alpha_n(\omega) \approx \alpha_n(0),$$

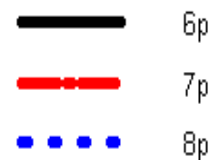
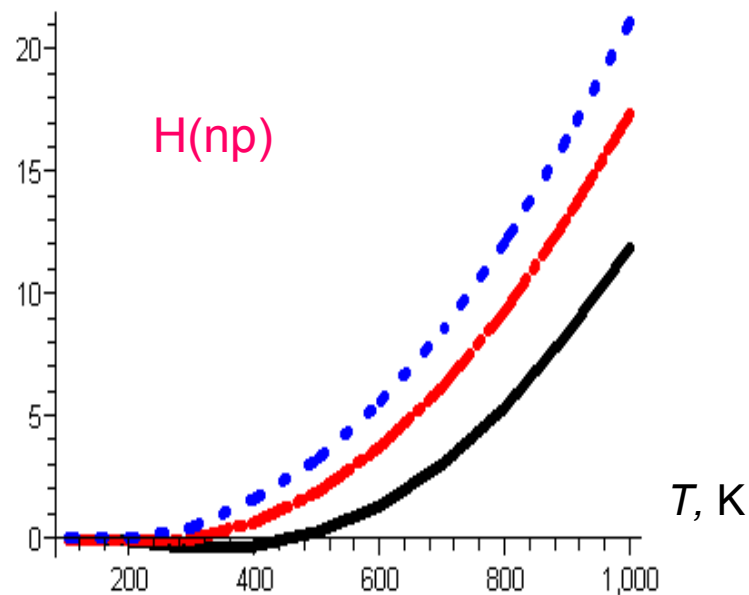
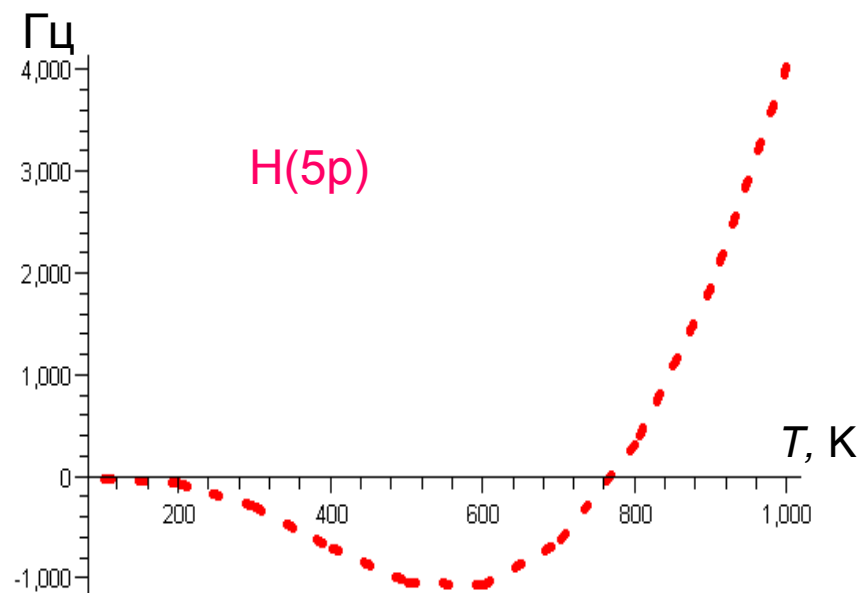


Температурная зависимость теплового сдвига 2p-уровня водорода $\Delta\mathbb{E}_{2p}^{BBR}(T)$

$$\Delta\mathbb{E}_n^{BBR}(T) \approx -\frac{2\pi^3}{15c^3}(kT)^4 \alpha_n(0) = -8.6112 \left(\frac{T}{300K} \right)^4 \alpha_n(0) \text{ мГц}$$

$\alpha_n(0)$ — статическая поляризуемость (в ат. ед.)

$k\Gamma_{\text{Ц}}$



$$\Delta E_{np}^{BBR}(T), \quad n=5,6,7,8$$

Для ридберговских состояний:

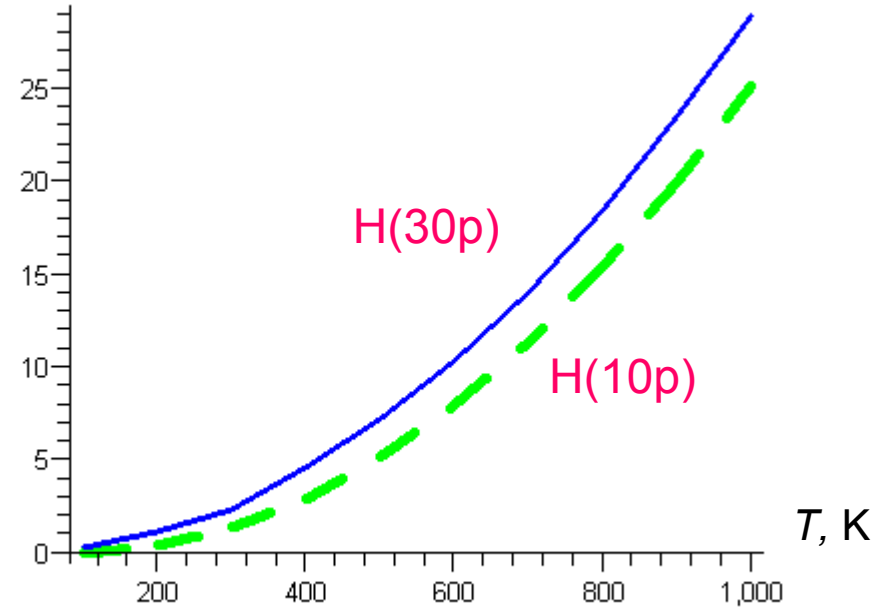
$$|\mathbb{E}_n| / k_B T \ll 1:$$

Тогда поляризуемость практически совпадает с высокочастотным пределом (поляризуемость свободного электрона):

$$\alpha_n(\omega) \approx -\frac{1}{\omega^2},$$

$$\Delta \mathbb{E}_n^{\text{BBR}}(T) \approx \frac{\pi(k_B T)^2}{3c^3} = 2416.6 \left(\frac{T}{300\text{K}} \right)^2 \text{ Гц}$$

10^3 Гц



Температурная зависимость термоиндуцированных сдвигов $\Delta \mathbb{E}_{np}^{\text{BBR}}(T)$ ридберговских 10р и 30р уровней

$$\Delta \mathbb{E}_n^{BBR}(T) = \varepsilon_n^d(T) + \varepsilon_n^c(T)$$

$$\varepsilon_n^d = -\frac{2}{\pi c^3} (k_B T)^3 \sum_{n'} |\langle n' | z | n \rangle|^2 \mathcal{F}\left(\frac{\omega_{n'n}}{k_B T}\right)$$

$$\varepsilon_n^c = -\frac{2}{\pi c^3} (k_B T)^3 \int_0^\infty |\langle \varepsilon | z | n \rangle|^2 \mathcal{F}\left(\frac{\omega_{\varepsilon n}}{k_B T}\right) d\varepsilon, \quad \omega_{\varepsilon n} = \varepsilon + |\mathbb{E}_n|$$

$$|\langle \varepsilon | z | nl \rangle|^2 = \frac{c}{4\pi^2 \omega} \sigma_{nl}(\omega), \quad \varepsilon = \omega - |\mathbb{E}_{nl}|,$$

$$\varepsilon_n^c = -\frac{(k_B T)^3}{2\pi^3 c^2} \int_{|\mathbb{E}_n|}^\infty \frac{\sigma_n(\omega)}{\omega} \mathcal{F}\left(\frac{\omega}{k_B T}\right) d\omega,$$

Используя приближенное соотношение (погрешность менее 1% для любого уровня водорода)

$$\sigma_n(\omega) \approx \sigma_n^{thr} \left| \frac{E_n}{\omega} \right|^{\beta_n},$$

получим простую оценку для вклада непрерывного спектра в термоиндуцированный штарковский сдвиг:

$$\varepsilon_n^c = - \frac{\sigma_n^{thr} (k_B T)^3}{2\pi^3 c^2} \Psi_{\beta_n} \left(\frac{|E_n|}{k_B T} \right),$$

где

$$\Psi_{\beta_n}(y) = \int_1^{\infty} \frac{\mathcal{F}(yx)}{x^{\beta_n+1}} dx$$

Поскольку основной вклад в интеграл для $\Psi_{\beta_n}(y)$ дает область $1 \leq x < 2$, где

$$\mathcal{F}(yx) \approx -\frac{\pi^2}{3} yx, \quad y \ll 1; \quad \mathcal{F}(yx) \approx \frac{2\pi^4}{15yx}, \quad y \gg 1,$$

то и для $\Psi_{\beta_n}(y)$ можно получить асимптотические оценки вида:

$$\Psi_{\beta_n}(y) \approx -\frac{\pi^2 y}{3(\beta_n - 1)} = \frac{\mathcal{F}(y)}{\beta_n - 1}, \quad \text{для } y \ll 1;$$

$$\Psi_{\beta_n}(y) \approx \frac{2\pi^4}{15y(\beta_n + 1)} = \frac{\mathcal{F}(y)}{\beta_n + 1}, \quad \text{для } y \gg 1.$$

Соответствующие асимптотики для вкладов континуума имеют вид:

$$\varepsilon_n^c \approx \frac{\sigma_n^{thr} |\mathbb{E}_n| (k_B T)^2}{6\pi c^2 (\beta_n - 1)} \quad \text{при } |\mathbb{E}_n| \ll k_B T; \quad \varepsilon_n^c \approx -\frac{\pi \sigma_n^{thr} (k_B T)^4}{15 |\mathbb{E}_n| c^2 (\beta_n + 1)} \quad \text{при } |\mathbb{E}_n| \gg k_B T$$

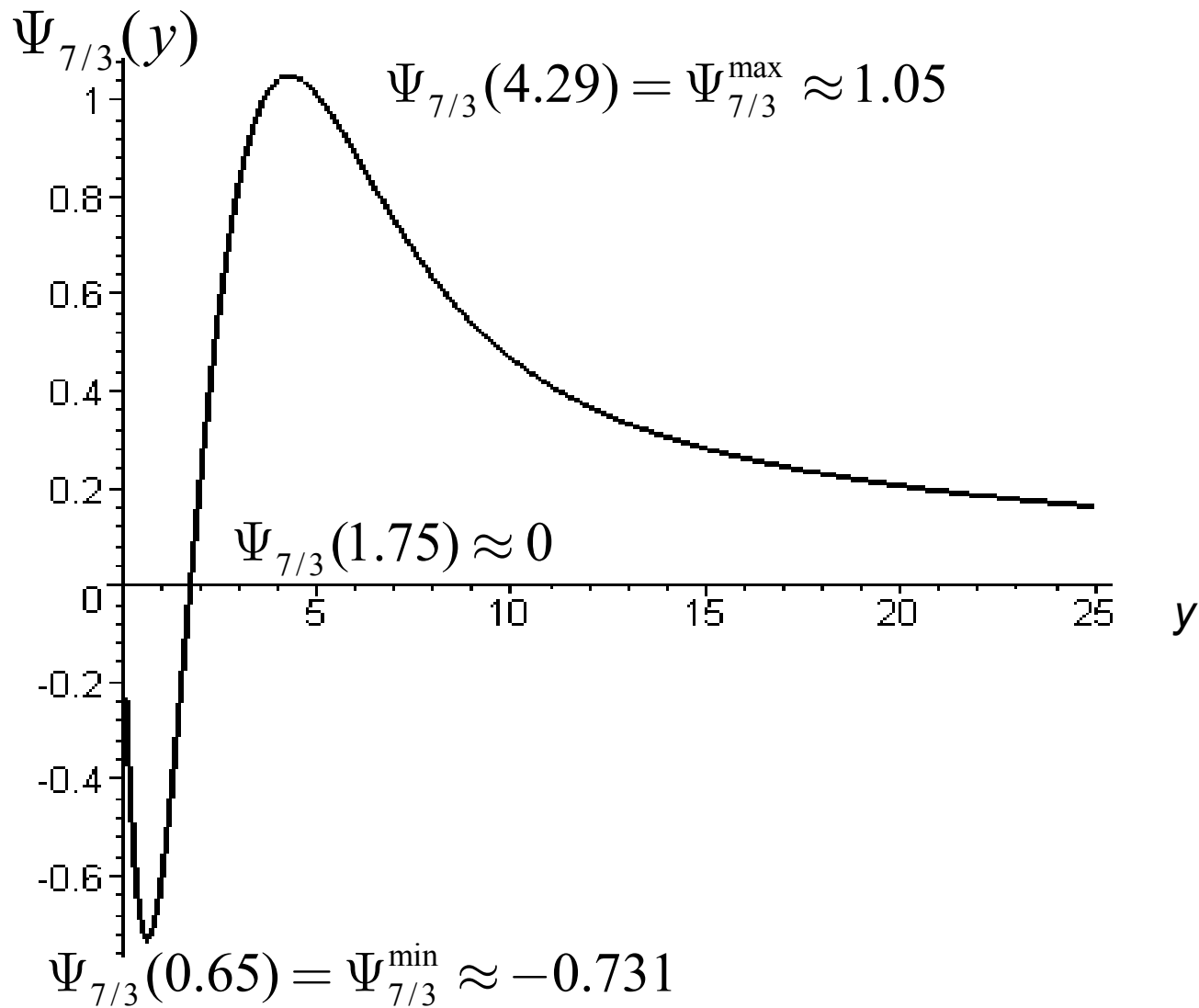
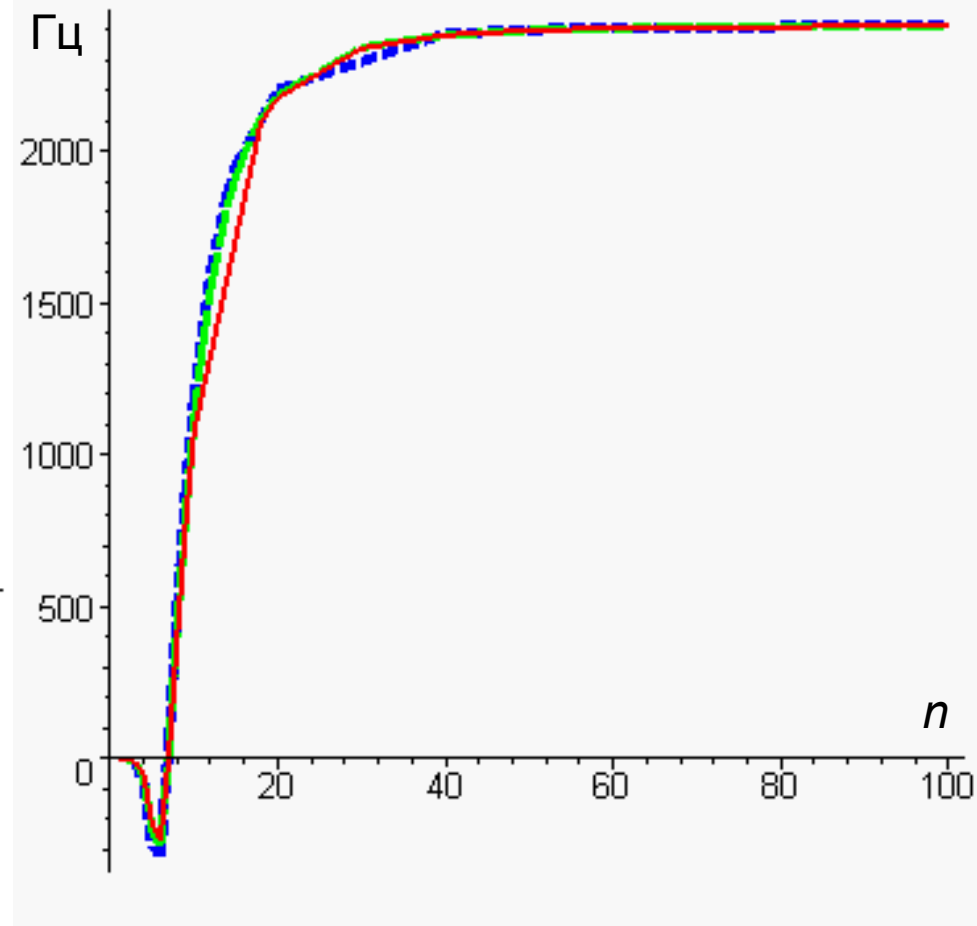
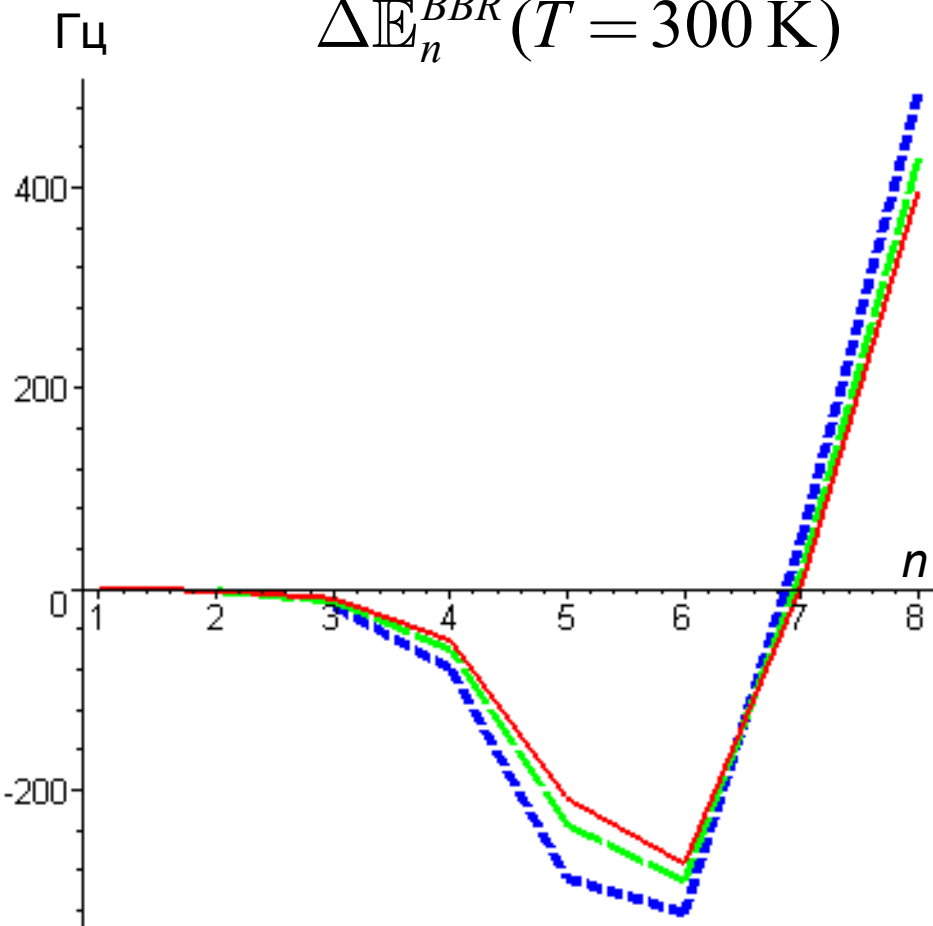
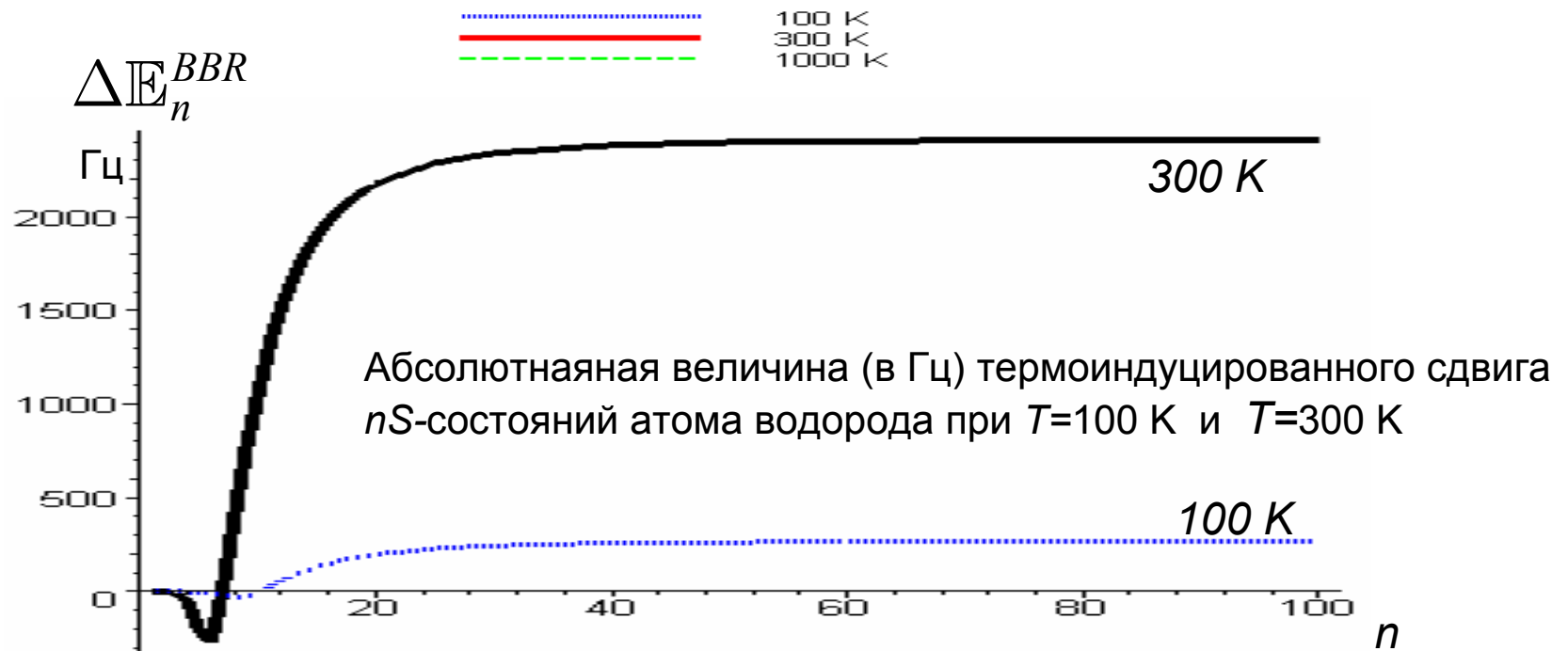
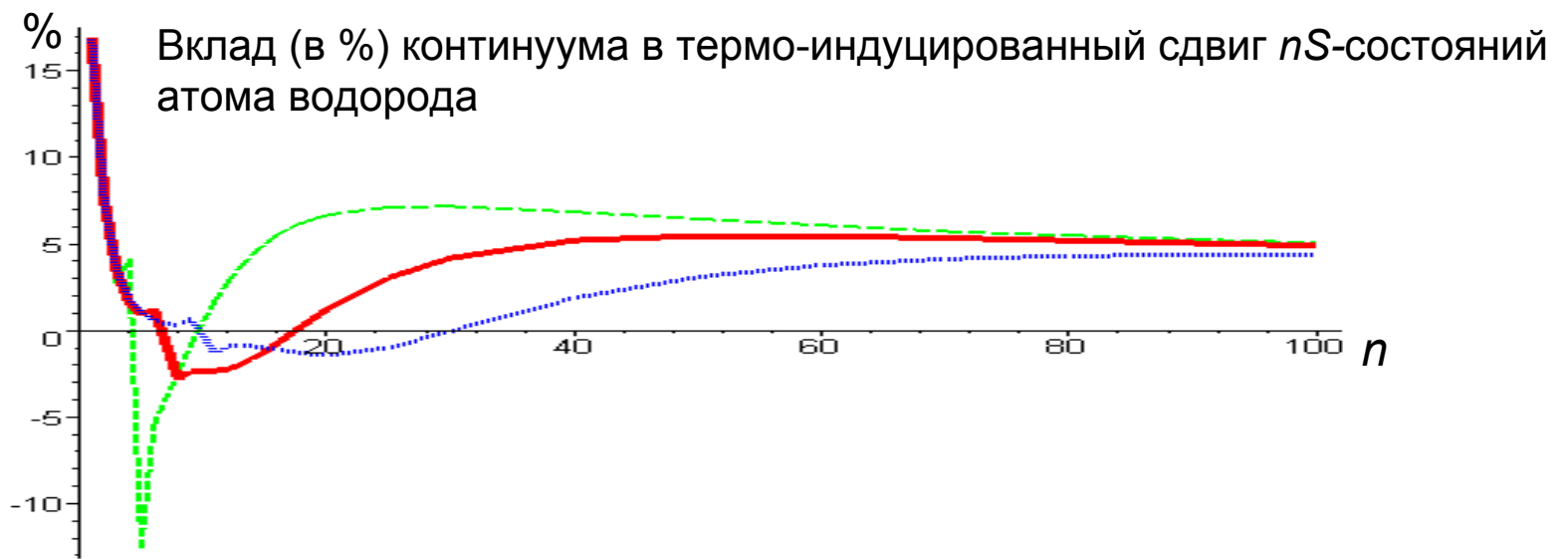


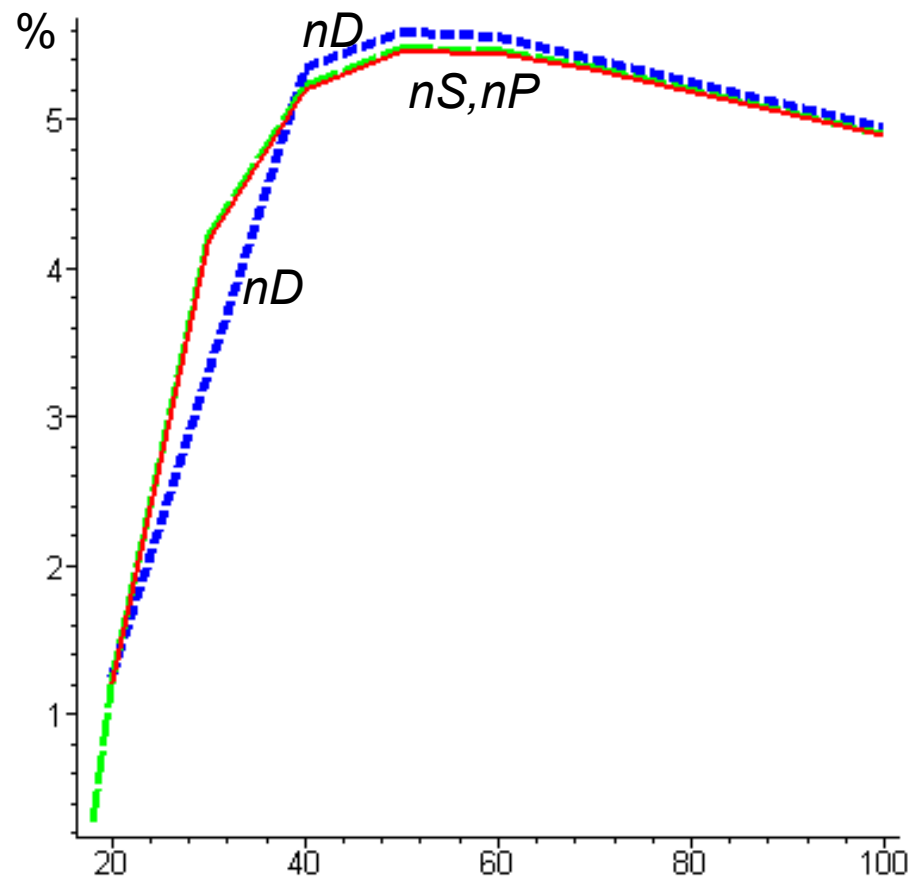
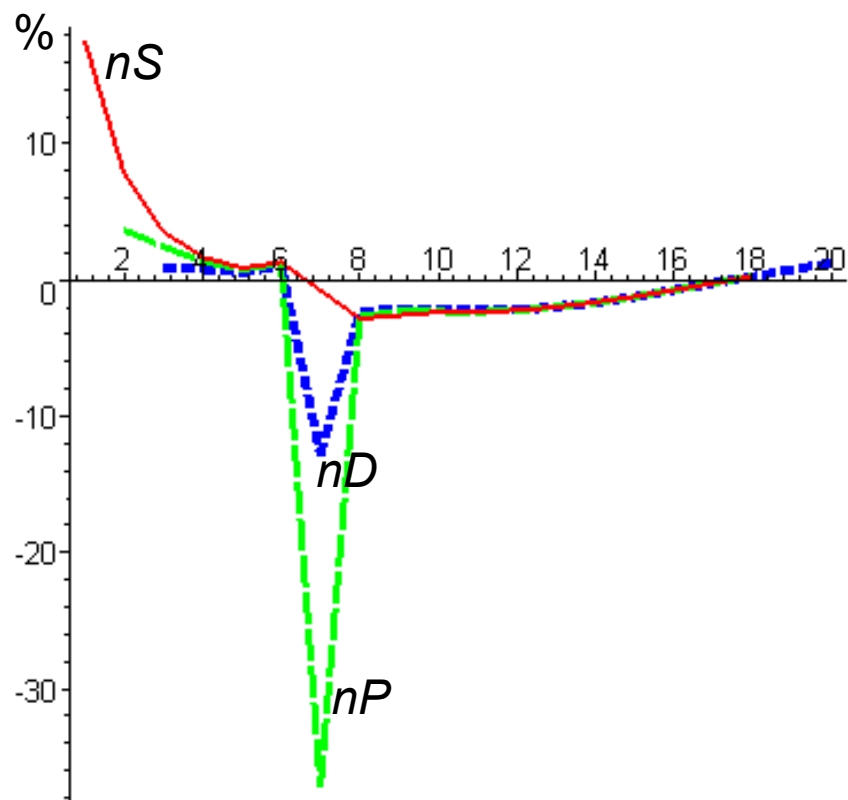
График функции $\Psi_{7/3}(y)$.

$$\Delta E_n^{BBR}(T = 300 \text{ K})$$



Штарковские сдвиги nS (красные сплошные линии), nP (зеленые прерывистые) и nD -состояний (синие штриховые) в атомах водорода при $T=300 \text{ K}$





Вклад (в %%) континуума в штарковский сдвиг nS , nP , и nD -состояний в поле теплового излучения окружающей среды при $T=300$ K.

4. Заключение

1. Оценка вклада непрерывного спектра в оптические характеристики для ридберговских состояний атомов существенно упрощается при использовании асимптотических свойств сечения ионизации.
2. Относительный вклад континуума в правила сумм сил осцилляторов $S_n(q)$ убывает с ростом главного квантового числа, а также с убыванием порядка момента $q \leq 1$.
3. Вклад континуума в штарковский сдвиг уровня в поле теплового излучения окружающей среды существенно зависит как от главного квантового числа, так и от температуры, и может быть близким к 100%.