

И. И. Бетеров, И. И. Рябцев, Д. Б. Третьяков, В. М. Энтин

Институт физики полупроводников СО РАН им. А. В. Ржанова СО РАН
пр. Акад. Лаврентьева, 13, Новосибирск, 630090, Россия

Новосибирский государственный университет
ул. Пирогова, 2, Новосибирск, 630090, Россия
E-mail: beterov@isp.nsc.ru

ФОТОИОНИЗАЦИЯ РИДБЕРГОВСКИХ nS , nP и nD АТОМОВ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ ТЕПЛОВЫМ ИЗЛУЧЕНИЕМ*

Представлены результаты расчетов скорости фотоионизации высоковозбужденных (ридберговских) атомов лития, натрия, калия, цезия и рубидия фоновым тепловым излучением. Вычисления проведены для nS , nP и nD состояний в широком диапазоне главных квантовых чисел $n = 8-65$ для температур равновесного теплового излучения $T = 77, 300$ и 600 К. В квазиклассическом приближении получены простые аналитические формулы для оценки скорости ионизации ридберговских атомов тепловым излучением.

Ключевые слова: ридберговские атомы, тепловое излучение, фотоионизация, квазиклассическое приближение.

Введение

Ридберговскими называются атомы в высоковозбужденных состояниях с главным квантовым числом $n \gg 1$. В силу высокой чувствительности к электромагнитным полям, связанной с большими геометрическими размерами ридберговских атомов и большими значениями дипольного момента ($\sim n^2$), ридберговские атомы эффективно взаимодействуют с фоновым тепловым излучением (излучение черного тела BBR), которое вызывает переходы как между дискретными ридберговскими состояниями, так и в состояния непрерывного спектра (фотоионизацию). Исследованию индуцированных тепловым излучением переходов между дискретными ридберговскими уровнями был посвящен ряд экспериментальных и теоретических работ, в которых измерены и рассчитаны теоретически времена жизни ридберговских атомов в поле теплового излучения, а также изучено перераспределение заселенностей соседних ридберговских состояний под действием теплового излучения [1; 2]. В последнее время рост интереса к взаимодействию ридберговских атомов с тепловым излучением связан с новыми экс-

периментами по исследованию ультрахолодной плазмы.

В этих экспериментах наблюдалось спонтанное превращение облака холодных ридберговских атомов в магнитооптической ловушке в ультрахолодную плазму вследствие лавинной ионизации атомов тепловым излучением [3; 4]. В то же время процесс ионизации ридберговских атомов излучением черного тела, представляющий интерес для исследований ультрахолодной плазмы, до сих пор изучен недостаточно подробно.

В работе [5] была рассчитана и экспериментально измерена температурная зависимость скорости фотоионизации $17D$ состояния натрия тепловым излучением. Предложенная в этой работе простая аналитическая формула для оценки скорости ионизации используется до сих пор [3], хотя в ней учитывается только потенциал ионизации ридберговского состояния и игнорируется орбитальный момент L , что делает эту формулу неприменимой для оценок скорости фотоионизации неводородоподобных состояний с малыми значениями L . Более точные теоретические расчеты скорости прямой фотоионизации тепловым излучением были выполнены в работе [6] для атомов

* Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (проект № 05-02-16181), Интеграционного проекта СО РАН и Программы РАН «Квантовая макрофизика».

водорода и натрия методом модельного потенциала. Недавно теоретические расчеты скорости прямой фотоионизации тепловым излучением были проведены для гелия [7].

В наших предыдущих работах [8–10] сигнал ионизации тепловым излучением использовался в качестве опорного при измерении констант скорости ассоциативной ионизации атомов натрия. Для этого нами были измерены скорости ионизации ридберговских nS и nD ($n = 8 - 20$) состояний тепловым излучением в зависимости от главного квантового числа n . Наблюдалось хорошее согласие теории с экспериментом для nD состояний и расхождения для nS состояний с $n > 15$. Мы также провели расчеты скорости ионизации тепловым излучением ридберговских nS , nP и nD атомов натрия, рубидия [11], лития, калия, цезия [12] в широком диапазоне главных квантовых чисел $n = 8 - 65$, который представляет интерес для экспериментов по исследованию ультрахолодной плазмы.

В работе [11] нами были получены простые аналитические формулы для оценки скорости фотоионизации ридберговских атомов натрия и рубидия тепловым излучением. В настоящей работе выражение для оценки скорости фотоионизации тепловым излучением обобщается для всех атомов щелочных металлов, и анализируются условия его применимости.

Прямая фотоионизация тепловым излучением

Скорость прямой фотоионизации ридберговских состояний тепловым излучением (здесь и далее будут использоваться атомные единицы) выражается следующим образом [5]:

$$W_{\text{BBR}} = c \int_{\omega_{nL}}^{\infty} \sigma_{\omega} \rho_{\omega} d\omega. \quad (1)$$

Здесь c – скорость света, $\omega_{nL} = 1/(2n_{\text{eff}}^2)$ – пороговая частота фотоионизации атома в ридберговском nL состоянии с эффективным квантовым числом $n_{\text{eff}} = (n - \delta_L)$, δ_L – квантовый дефект ридберговского состояния (точные квантовые дефекты ридберговских состояний лития, натрия, калия, рубидия и цезия опубликованы в работах [13–17]), σ_{ω} – сечение фотоионизации ридберговского атома на частоте ω .

Объемная плотность ρ_{ω} тепловых фотонов при температуре T определяется распределением Планка:

$$\rho_{\omega} = \frac{\omega^2}{\pi^2 c^3 [e^{\omega/(kT)} - 1]},$$

где kT – средняя энергия тепловых фотонов в атомных единицах. Для изотропного неполяризованного теплового излучения сечение фотоионизации σ_{ω} выражается через радиальные матричные элементы $R(nL \rightarrow E, L \pm 1)$ дипольного момента перехода между состояниями nL дискретного спектра и состояниями непрерывного спектра с орбитальным моментом $L \pm 1$ и энергией фотоэлектрона E :

$$\sigma_{\omega} = \frac{4\pi^2 \omega}{3c(2L+1)} \sum_{L'=L \pm 1} L_{\text{max}} R^2(nL \rightarrow E, L \pm 1),$$

где c – скорость света, L_{max} – максимальное значение из L и L' , $\omega_{nL} = 1/(2n_{\text{eff}}^2)$ – пороговая частота ионизации ридберговского состояния nL и σ_{ω} – сечение фотоионизации на частоте ω .

Основная сложность в расчете W_{BBR} для ридберговских состояний щелочных металлов заключается в необходимости вычисления радиальных матричных элементов $R(nL \rightarrow E, L \pm 1)$ в зависимости от частоты перехода. Точное аналитическое выражение $R(nL \rightarrow E, L \pm 1)$ известно только для атома водорода. Систематические вычисления радиальных матричных элементов для переходов между связанными и свободными состояниями ридберговских атомов щелочных металлов были опубликованы в работе [18]. Для аккуратного вычисления радиальных матричных элементов необходимы численные расчеты. В настоящей работе мы использовали полуклассические формулы Дьячкова и Панкратова [19]. В сравнении с другими полуклассическими методами [20] данный метод имеет ряд преимуществ, связанных с использованием ортогональных нормированных волновых функций непрерывного спектра и позволяющих вычислять сечения фотоионизации с высокой точностью. Для низколежащих возбужденных S состояний натрия расчеты по формулам Дьячкова и Панкратова находятся в хоро-

шем согласии с более сложными квантово-механическими расчетами [21].

Несмотря на то, что вычисления с использованием метода Дьячкова и Панкратова существенно проще, чем, например, численное решение уравнения Шредингера в кулоновском приближении методом Нумерова [22], они требуют большого объема численных расчетов. В связи с этим особый интерес представляют приближенные аналитические выражения для W_{BRR} , описывающие зависимость скорости ионизации от n , L , и T . Такие выражения были получены нами в работе [11] на основе простых аналитических формул для сечений фотоионизации, опубликованных Гореславским, Делоне и Крайновым [20] в квазиклассическом приближении для атомов водорода:

$$\sigma_{\omega}(nL \rightarrow E, L \pm 1) = \frac{4L^4}{9cn^3\omega} \times \left[K_{2/3}^2 \left(\frac{\omega L^3}{3} \right) + K_{1/3}^2 \left(\frac{\omega L^3}{3} \right) \right], \quad (2)$$

где $K_{\nu}(x)$ – модифицированная функция Бесселя второго рода или функция Макдональда. В работе [11] мы предположили, что область ее применения может быть расширена для ридберговских атомов щелочных металлов путем замены n на $n_{eff} = (n - \delta_L)$ и введения зависящих от орбитального момента масштабных коэффициентов C_L , отличающихся для различных щелочных металлов.

Основной вклад в скорость фотоионизации в выражении (1) связан с областью частот вблизи порога ионизации ω_{nL} , поскольку радиальные матричные элементы дипольного момента перехода в непрерывный спектр быстро уменьшаются с увеличением частоты ω . Для ридберговских состояний с $n \gg 1$ и малыми значениями L аргумент функций Макдональда в уравнении (2) оценивается как $(\omega L^3/3) \ll 1$. В этом случае можно использовать асимптотические выражения для функций Макдональда, а в выражении (1) заменить ω на $1/2n_{eff}^2$. Тогда интеграл (1) может быть вычислен аналитически, что приводит к итоговому выражению для скорости фотоионизации тепловым излучением в $[c^{-1}]$ в

зависимости от температуры в градусах Кельвина [11]:

$$W_{BRR} = C_L T \left[\frac{14423}{n^{7/3}} + \frac{10770L^2}{n^{11/3}} \right] \times \ln \left(\frac{1}{1 - \exp\left(-\frac{157890}{Tn^2}\right)} \right) [c^{-1}]. \quad (3)$$

Значения коэффициента C_L для атомов щелочных металлов были получены нами эмпирически для достижения наилучшего согласия с точным численным расчетом [11;12]. Оказалось, что для различных атомов значения C_L существенно отличаются друг от друга. Так, для рубидия $C_S \approx 0,2$, а для лития $C_S \approx 0,003$. В связи с этим целесообразно получение более общей формулы для оценки скорости тепловой фотоионизации атомов щелочных металлов, в которой вместо эмпирических коэффициентов входили бы известные значения квантовых дефектов δ_L .

Аналитические формулы с учетом квантового дефекта

В работе Делоне, Гореславского и Крайнова [23] было предложено приближенное выражение для расчета радиального матричного элемента переходов в непрерывном спектре для неводородоподобных атомов:

$$R_{EL}^{EL'} \approx \frac{0,4744}{\omega^{5/3}} \cos\left(\Delta_L \pm \frac{\pi}{6}\right), \quad (4)$$

где $\Delta_L = |\pi(\delta_{L'} - \delta_L)|$ – разность квантовых дефектов, знак (+) в скобках соответствует переходам с $L' > L$ и знак (–) соответствует переходам с $L' < L$. Выражение (4) позволяет учесть связанный с квантовым дефектом фазовый сдвиг волновых функций. Для учета фазового сдвига в расчетах скорости фотоионизации тепловым излучением, используя формулу (6), мы эмпирически ввели радиальные матричные элементы с учетом квантового дефекта:

$$\begin{aligned} \tilde{R}_{nL}^{EL+1} &\sim R_{nL}^{EL+1} \cos\left(\Delta_L^+ + \frac{\pi}{6}\right), \\ \tilde{R}_{nL}^{EL-1} &\sim R_{nL}^{EL-1} \cos\left(\Delta_L^- - \frac{\pi}{6}\right), \end{aligned} \quad (5)$$

где $\Delta_L^+ = \pi(\delta_L - \delta_{L+1})$, $\Delta_L^- = \pi(\delta_{L-1} - \delta_L)$, $R_{nL}^{EL\pm 1}$ – радиальные матричные элементы для связанно-свободных переходов, вычисленные для атома водорода. В табл. 1 приведены значения разностей квантовых дефектов $\delta_L - \delta_{L-1}$ для переходов из ридберговских состояний щелочных металлов с $n \sim 20$ в непрерывный спектр, полученные на основе известных значений квантовых дефектов [13–17].

При расчете скорости фотоионизации для малых значений L членами, пропорциональными L и L^2 , можно пренебречь. С учетом (5) после перемасштабирования для получения наилучшего согласия с численными расчетами выражение (3) для скорости фотоионизации тепловым излучением может быть преобразовано к окончательному виду:

$$W_{BBR} = A_L \frac{11500T}{n^{7/3}} \left[\cos\left(\Delta_L^+ + \frac{\pi}{6}\right)^2 + \cos\left(\Delta_L^- - \frac{\pi}{6}\right)^2 \right] \times \ln\left(\frac{1}{1 - \exp\left(-\frac{157890}{Tn^2}\right)}\right) \quad [c^{-1}]. \quad (6)$$

Здесь $A_L \sim 1$ – слабозависящие от орбитального момента коэффициенты, которые близ-

ки для различных ридберговских состояний, в отличие от коэффициентов C_L , изменяющихся в сотни раз ($C_L \sim 1$ для nD состояний натрия и $C_L \sim 0,003$ для nS состояний лития). Для nS состояний в скобках в уравнении (6) необходимо оставить только один член, соответствующий переходу $L' = L + 1$. Для оценки скорости фотоионизации атомов щелочных металлов тепловым излучением с точностью до 50 % достаточно положить $A_L = 1$. Для более точных расчетов следует воспользоваться значениями A_L из табл. 2, подобранными для достижения наилучшего согласия с численными расчетами. Коэффициенты A_L близки к единице, за исключением nP состояний калия и nD состояний рубидия и цезия.

Результаты расчетов

На Рис. 1 представлены результаты численных и аналитических [уравнение (6), $A_L=1$] расчетов скорости прямой фотоионизации тепловым излучением ридберговских $30S$ атомов лития, натрия, калия, рубидия и цезия при температуре 300 К в зависимости от разности квантовых дефектов. Наблюдается хорошее согласие между приближенной аналитической формулой (6) и точным численным расчетом. Для ридберговских nP

Таблица 1

Разность квантовых дефектов ридберговских состояний щелочных металлов

| | $\delta_S - \delta_P$ | $\delta_P - \delta_D$ | $\delta_D - \delta_F$ |
|----|-----------------------|-----------------------|-----------------------|
| Li | 0,352417 | 0,0451664 | 0,00162407 |
| Na | 0,493519 | 0,840023 | 0,0148029 |
| K | 0,466733 | 1,43762 | 0,264237 |
| Rb | 0,490134 | 1,29456 | 1,34636 |
| Cs | 0,458701 | 1,12661 | 2,43295 |

Таблица 2

Масштабные коэффициенты A_L в уравнении (8)

| | A_S | A_P | A_D |
|----|-------|-------|-------|
| Li | 1 | 1 | 0,9 |
| Na | 1 | 1 | 1,1 |
| K | 0,9 | 0,45 | 1 |
| Rb | 1 | 1 | 0,6 |
| Cs | 0,85 | 1,1 | 0,35 |

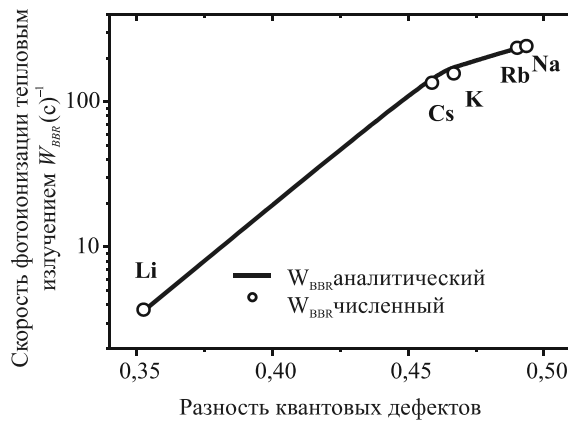


Рис. 1. Зависимость скорости фотоионизации 30S состояния Li, K, Na, Rb и Cs тепловым излучением при температуре $T = 300$ К от разности квантовых дефектов

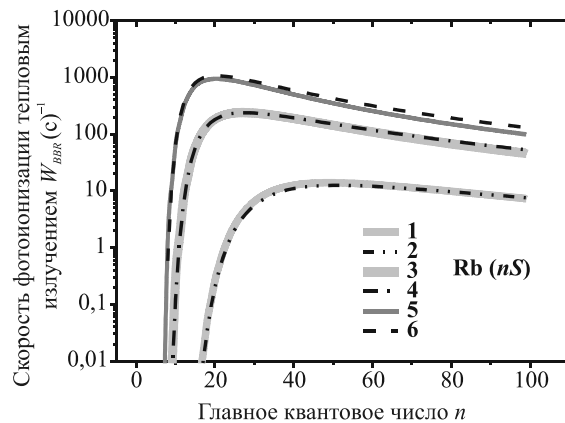


Рис. 2. Скорость фотоионизации ридберговских nS состояний рубидия тепловым излучением. Кривые 1, 3, 5 – численные расчеты при температурах $T = 77, 300, 600$ К соответственно; 2, 4, 6 – аналитический расчет по формуле (8) для температур $T = 77, 300, 600$ К соответственно

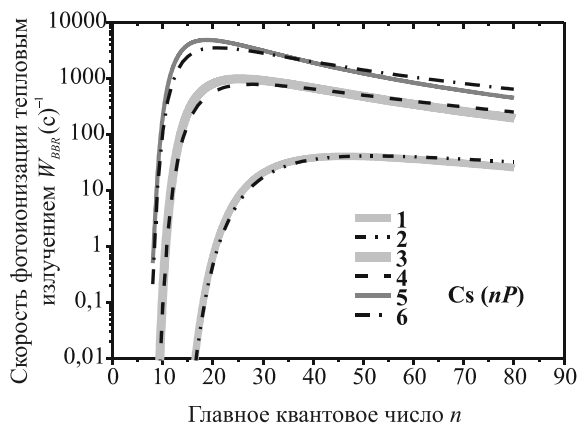


Рис. 3. Скорость фотоионизации ридберговских nP состояний цезия тепловым излучением. Кривые 1, 3, 5 – численные расчеты при температурах $T = 77, 300, 600$ К соответственно; 2, 4, 6 – аналитический расчет по формуле 8 для температур $T = 77, 300, 600$ К соответственно

и nD состояний переходы в непрерывный спектр идут одновременно по двум каналам с $L' = L \pm 1$, что не позволяет получить зависимости скорости фотоионизации от квантового дефекта столь простого вида, как для nS состояний.

На рис. 2 приведены результаты численных расчетов скорости фотоионизации ридберговских nS состояний рубидия при температурах теплового излучения $T = 77, 300$ и 600 К в широком диапазоне главных квантовых чисел $n = 8 - 65$ и сравнение с аналитической формулой (6). Наблюдается хорошее согласие между численным и аналитическим расчетом.

На рис. 3 представлены результаты расчетов скорости фотоионизации nP состояний цезия тепловым излучением. Также наблюдается хорошее согласие между численным расчетом и аналитической формулой (6), в которой A_L было положено равным 1. В области больших главных квантовых чисел $n > 50$ точность формулы (6) снижается и для nP состояний с $n \sim 100$ не превышает 50%, поскольку с увеличением орбитального момента L увеличивается вклад членов, пропорциональных L и L^2 , которыми мы пренебрегли при выводе формулы (6). Следует отметить, что сохранение этих членов приводит к существенному усложнению формулы (6), которая становится неудобной для применения.

Обсуждение результатов

Использованный в нашей работе метод Дьячкова и Панкратова [19] для численных расчетов матричных элементов дипольного момента имеет высокую надежность, что подтверждено хорошим согласием с расчетами сечений фотоионизации методом модельного потенциала [21]. Вычисленные нами скорости прямой фотоионизации ридберговских атомов натрия [11] находятся в согласии с результатами расчетов [6], также выполненными методом модельного потенциала. Выполненные нами расчеты полной скорости ионизации ридберговских nD атомов натрия получили экспериментальное подтверждение в работе [8]. Для вывода аналитической формулы (6) мы использовали асимптотическое разложение функций Макдональда, полагая $\omega L^3 \ll 1$ и замену ω на $1/2n_{eff}^2$ в медленно меняющейся части

интеграла (1), что допустимо при $\omega_{nL} > kT$, что при температуре $T = 300$ К выполняется для состояний с $n < 20$. Тем не менее сравнение с численным расчетом показало, что формула (6) позволяет получить правильные оценки скорости фотоионизации и при больших значениях главного квантового числа, вплоть до $n \sim 50$. Данная формула применима для $L \ll n$. Она позволяет с высокой точностью рассчитать скорость фотоионизации ридберговских nS атомов щелочных металлов тепловым излучением и оценивать скорость фотоионизации атомов в nP и nD состояниях.

Выводы

Результаты, полученные нами в работах [11; 12] и данной работе являются первым систематическим исследованием процесса ионизации ридберговских атомов щелочных металлов тепловым излучением. Получены простые аналитические формулы для расчета скорости фотоионизации ридберговских атомов тепловым излучением, которые могут быть полезны при анализе условий формирования ультрахолодной плазмы [3; 4].

Список литературы

1. Ридберговские состояния атомов и молекул: Пер. с англ. // Под. ред. Р. Стеббинса, Ф. Даннинга. М.: Мир, 1985. 496 с.
2. Galvez E. J., Lewis J. R., Chaudhuri B. et al. Multistep transitions between Rydberg states of Na induced by blackbody radiation // Phys. Rev. A. 1995. Vol. 51. No. 5. P. 4010–4017.
3. Robinson M. P., Tolra B. L., Noel M. W. et al. Spontaneous Evolution of Rydberg Atoms into an Ultracold plasma // Phys. Rev. Lett. 2000. Vol. 85. No. 21. P. 4466 – 4469.
4. Li W., Noel M. W., Robinson M. P. et al. Evolution dynamics of a dense frozen Rydberg gas to plasma // Phys. Rev. A. 2004. Vol. 70. P. 042713 (1–10).
5. Spencer W. P., Vaidyanathan A. G., Kleppner D. et al. Photoionization by blackbody radiation // Phys. Rev. A. 1982. Vol. 26. No. 3. P. 1490–1493.
6. Lehman G. W. Rate of ionization of H and Na Rydberg atoms by black-body radiation // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1983. Vol. 16. P. 2145 – 2156.
7. Glukhov I. L., Ovsianikov V. D. Blackbody induced ionization rate of Rydberg states in helium // Proc. SPIE. 2007. Vol. 6726. P. 67261F1 – 67261F5.
8. Ryabtsev I. I., Tretyakov D. B., Beterov I. I. et al. Collisional and thermal ionization of sodium Rydberg atoms: I. Experiment for nS and nD atoms with $n = 8 – 20$ // J. Phys. B. 2005. Vol. 38. P. 17 – 35.
9. Miculis K., Beterov I. I., Bezuglov N. N. et al. Collisional and thermal ionization of sodium Rydberg atoms: II. Theory for nS , nP and nD states with $n = 5 – 25$ // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2005. Vol. 38. P. 1811 – 1831.
10. Beterov I. I., Tretyakov D. B., Ryabtsev I. I. et al. Collisional and thermal ionization of sodium Rydberg atoms: III. Experiment and theory for nS and nD states with $n = 8 – 20$ in crossed atomic beams // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2005. Vol. 38. P. 4349 – 4361.
11. Beterov I. I., Tretyakov D. B., Ryabtsev I. I. et al. Ionization of sodium and rubidium nS , nP and nD Rydberg atoms by blackbody radiation // Phys. Rev. A. 2007. Vol. 75 P. 052720(1 – 13).
12. Бетеров И. И., Рябцев И. И., Третьяков Д. Б. и др. Ионизация ридберговских nS , nP и nD атомов лития, калия и цезия тепловым излучением // направлено в ЖЭТФ. 2007.
13. Stevens G. D., Ju. C. H., Bergeman T. et al. Precision measurements on lithium atoms in an electric field compared with R-matrix and other Stark theories // Phys. Rev. A. 1996. Vol. 53. No. 3. P. 1349 – 1366.
14. Дюбко С. Ф., Ефименко М. Н., Ефремов В. А. и др. Квантовый дефект и тонкая структура термов ридберговских атомов NaI в S-, P- и D-состояниях // Квант. электроника. 1995. Т. 22, вып. 9. С. 946 – 950.
15. Lorenzen C. J., Niemax K. Quantum defects of the $n^2P_{1/2,3/2}$ levels in ^{39}KI and ^{87}RbI // Phys. Scripta. 1983. Vol. 27. P. 300 – 305.
16. Li W., Mourachko I., Noel M. W. et al. Millimeter-wave spectroscopy of cold Rb Rydberg atoms in a magneto-optical trap: Quantum defects of the ns , np and nd series // Phys. Rev. A. 2003. Vol. 67. P. 052502 (1–7).
17. Weber K. H., Sansonetti C. J. Accurate energies of nS , nP , nD , nF and nG levels of neutral cesium // Phys. Rev. A. 1987. Vol. 35. No. 11. P. 4650–4660.
18. Hoogenraad J. H., Noordam L. D. Rydberg atoms in far-infrared radiation fields I. Dipole matrix elements of H, Li and Rb // Phys. Rev. A. 1998. Vol. 57. No. 6. P. 4533–4545.

19. *Dyachkov L. G., Pankratov P. M.* On the use of the semiclassical approximation for the calculation of oscillator strength and photoionization cross-sections // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 1994. Vol. 27. P. 461–472.

20. *Гореславский С. П., Делоне Н. Б., Крайнов В. П.* Вероятности радиационных переходов между высоковозбужденными атомными состояниями // *ЖЭТФ.* 1982. Т. 82, вып. 6. С. 1789–1796.

21. *Aymar M.* Influence of core-polarization effects on the photoionisation cross sections of the ground level and excited *ns* levels of neutral

sodium // *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 1978. Vol. 11. No. 8. P. 1413–1423.

22. *Zimmerman M. L., Littman M. G., Kash M. M. et al.* Stark structure of the Rydberg states of alkali-metal atoms // *Phys. Rev. A.* 1979 Vol. 20. No. 6. P. 2251–2275.

23. *Delone N. B., Goreslavsky S.P., Krai-
nov V. P.* Quasiclassical dipole matrix elements for atomic continuum states // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 1989. Vol. 22. P. 2941–2945.

Материал поступил в редколлегию 19.12.2007