

静电场诱发禁戒的跃迁*

杨宁选 杨坤 范婷

(石河子大学理学院物理系 新疆 石河子 832000)

(收稿日期:2015-12-17)

摘要:在文献[1]工作的基础上,讨论了氢原子静电场诱发的禁戒跃迁 $2s \rightarrow 1s$ 的跃迁几率,发现在静电场的作用下,由于态的叠加,实现了在一般近似下不可能实现的禁戒跃迁,且在这种情况下,禁戒跃迁 $2s \rightarrow 1s$ 的跃迁几率与 $2p \rightarrow 1s$ 的跃迁几率成正比.

关键词:氢原子 Stark 效应 禁戒跃迁 跃迁几率

1 引言

电场、磁场及电场与磁场相互交叉等外场环境广泛地存在于受磁约束的等离子体中以及中子星表面.对于在外场中运动的原子、分子作光谱观察会发现,它们的谱线不仅反映了微观粒子的结构,而且带来了外场作用的信息.因此在物理学发展中,微观粒子与电场或磁场的相互作用问题一直是理论物理学家和实验物理学家关注的研究对象^[1~9].

氢原子是物理特性被研究得最透彻的原子,由于结构简单,也是研究其他复杂原子的基础.在无外场时,氢原子的价电子在库仑力作用下受球对称库仑势束缚而运动,仅当价电子获得大于零的能量后方能脱离库仑势阱的束缚而逃逸成为自由电子.处于电场中的氢原子的价电子因受外加电场力的作用,感受到的势沿电场方向变得不对称.沿电场正方向的束缚势得到加强,而沿负方向则被减弱而出现极大值,即使能量小于零的价电子也可沿这个方向逃逸而成为自由电子.因此,无外场时,氢原子的能级只与主量子数 n 有关,对应于第 n 个能级 E_n 有 n^2 个波函数,电子第 n 个能级是 n^2 度简并.当氢原子处在外电场中时,能级发生移动或分裂,简并度将降

低,导致氢原子发射的光谱线要发生分裂,即产生 Stark 效应^[1, 5, 8].

处于混合态的原子,它的电荷分布随时间振荡,可以看成是它的负电荷重心与原子核的距离的振荡,犹如一个带电振子,因此可以用电振子的能量发射来讨论原子的辐射和跃迁过程^[10~13].原子的辐射中最主要的模式是电偶极辐射,电偶极辐射跃迁几率与振子的振荡频率 ν^3 成正比、与电偶极矩振幅的平方 $|\mathbf{P}_{if}|^2$ 成正比.要使电子在不同能级间跃迁,即电偶极矩振幅不为零,能级的初、末态的量子数满足选择定则,满足选择规则的跃迁也称为容许跃迁,把不满足电偶极跃迁选择规则的跃迁称为禁戒跃迁.状态间量子数不符合选择定则时,电偶极跃迁几率为零,但这两个状态间并不是完全不能跃迁,它们仍可以发射或吸收磁极矩振荡、电四极矩振荡等引起跃迁而产生相应的辐射,只是和电偶极跃迁相比,磁偶极、电四极、磁四极等跃迁几率要小得多,是电偶极跃迁几率的 10^{-3} 或更小.

本文在文献[1]工作的基础上,进一步分析了氢原子能级分裂和波函数的变化特点,讨论并计算了静电场诱发的氢原子 $2s, 2p$ 态与基态间的禁戒跃迁几率.

* 石河子大学优秀青年科技人才培育计划项目,项目编号:2013ZRKXYQ09

通讯作者:杨坤(1982-),女,硕士,从事物理教育教学研究.

2 理论方法

关于氢原子的 Stark 效应可以采用简并微扰理论和有效哈密顿方法进行计算,详细的计算过程在文献[1]文章中进行了阐述.对于含时微扰论、光的吸收和受激发射理论可详细参阅文献[12,13].

3 计算结果

3.1 外电场中氢原子波函数

对于氢原子,在不计电子自旋时,由于电子受到球对称的库仑场的作用,第 n 个能级有 n^2 重简并.处于第一激发态($n=2$)的氢原子是 4 重简并的,即对应与能级有 4 个量子态,分别处于 2s 和 2p 态.处于 2s 态的电子, $n=2, l=0, m=0$,波函数为: ψ_{200} .而处于 2p 态的电子,由于 $n=2, l=1, m=0, \pm 1$,波函数有 3 个,分别为 $\psi_{210}, \psi_{211}, \psi_{21-1}$.

氢原子在外电场中,它的哈密顿算符包括两部分: $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'$, \hat{H}_0 是未加外电场时氢原子体系的哈密顿算符, \hat{H}' 是电子在外电场中的势能. $\hat{H}' = e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r} = e\epsilon z = e\epsilon r \cos \theta$, 在这里把外电场看作微扰. \hat{H}_0 的本征函数 $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ 表示为径向函数 $R_{nl}(r)$ 与球谐函数 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 的乘积.对于氢原子,其径向函数 $R_{nl}(r)$ 与球谐函数 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 可参阅文献[10].由简并态的微扰论可知,求解一级能量修正值,须解久期方程,先求矩阵元 H'_{li}

$$H'_{li} = \int \varphi_i^* \hat{H}' \varphi_l d\tau \quad (1)$$

计算矩阵元 H'_{li} , 可利用

$$\begin{aligned} \cos \theta Y_{lm} &= \sqrt{\frac{(l+1)^2 - m^2}{(2l+1)(2l+3)}} Y_{l+1,m} + \\ &\sqrt{\frac{l^2 - m^2}{(2l-1)(2l+1)}} Y_{l-1,m} \end{aligned} \quad (2)$$

同时,利用球谐函数 $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ 的归一化性质,只有当两个态的角量子数差 $\Delta l = \pm 1$, 磁量子数相同 ($\Delta m = 0$) 时,矩阵元 H'_{li} 才不为零. 于是等于零的矩阵元只有 H'_{12} 和 H'_{21} , 将 φ_1 与 φ_2 代入式(1)可得

$$H'_{12} = H'_{21} = \int \varphi_1^* \hat{H}' \varphi_2 d\tau =$$

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \\ &\left(2 - \frac{r}{a_0}\right) \exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) e\epsilon r \cos \theta \cdot \\ &\frac{1}{4\sqrt{2\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{r}{a_0}\right) \cdot \\ &\exp\left(-\frac{r}{2a_0}\right) \cos \theta r^2 \sin \theta dr d\theta d\varphi \end{aligned}$$

先对 φ 角积分, 再对 θ 角积分, 最后对 r 积分, 得

$$H'_{12} = H'_{21} = -3e\epsilon a_0$$

$$\begin{vmatrix} -E_2^{(1)} & -3e\epsilon a_0 & 0 & 0 \\ -3e\epsilon a_0 & -E_2^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -E_2^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -E_2^{(1)} \end{vmatrix} = 0 \quad (3)$$

$$\sum_{i=1}^k (H'_{li} - E_n^{(1)} \delta_{li}) c_i = 0 \quad (l=1, 2, \dots, n^2) \quad (4)$$

由此可见, 在外电场作用下, 原来是四度简并的能级, 在一级修正中将分裂为 3 个能级, 简并部分地被消除.

3.2 禁戒跃迁

原子在光波作用下, 由 Φ_k 态跃迁到 Φ_m 态的几率为

$$\omega_{mk} = \frac{4\pi^2 e^2}{3h^2} |r_{mk}|^2 I(\omega_{mk}) \quad (5)$$

跃迁几率与入射光中角频率为 ω_{mk} 的光强 $I(\omega_{mk})$ 成比例, 还与 $|r_{mk}|^2$ 成正比, 因而当矩阵元 $|r_{mk}| = 0$ 时, 在一般近似下, 这种跃迁就不能实现. 我们把这种不能实现的跃迁就称作禁戒跃迁. 在无外场的情况下, 氢原子的 2s 态就不能向 1s 态跃迁. 但是, 当将氢原子置于外场中时, 处于第一激发态的氢原子 2s 态的波函数 ψ_{200} 与 2p 态的波函数 $\psi_{210}, \psi_{211}, \psi_{21-1}$ 线性叠加. 本来是四度简并的能级, 在一级修正中将分裂为 3 个能级, 对应的归一化的零级近似波函数分别为

$$\psi_1^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{200} - \psi_{210})$$

$$\psi_2^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{200} + \psi_{210})$$

$$\left. \begin{array}{l} \psi_3^{(0)} \\ \psi_4^{(0)} \end{array} \right\} = c_3 \psi_{211} + c_4 \psi_{21-1}$$

c_3 和 c_4 为不同时等于零的常数.

在这种情况下,禁戒跃迁 $2s \rightarrow 1s$ 的跃迁几率与 $2p \rightarrow 1s$ 的跃迁几率成正比. 则 $2s \rightarrow 1s$ 受激发射系数为

$$B_{2s \rightarrow 1s} = \frac{4\pi^2 e^2}{3h^2} |\langle 1s | r | 2s \rangle|^2 = \frac{4\pi^2 e^2}{3h^2} c^2 |\langle 1s | r | 2p \rangle|^2$$

其中

$$|\langle 1s | r | 2p \rangle| = \int \psi_{1s} r \psi_{2p} d\tau \quad (6)$$

氢原子 $1s$ 态的波函数为

$$\psi_{100} = R_{10}(r)Y_{00}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{a_0}} \quad (7)$$

$2p$ 态的波函数为

$$\psi_{210} = R_{21}(r)Y_{10}(\theta, \varphi) = \frac{1}{4\sqrt{2\pi}} r \left(\frac{1}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{r}{2a_0}} \cos \theta \quad (8)$$

利用式(2),容易证明,对于 $m=0, \pm 1$, 矩阵元 $|\langle 1s | r | 21m \rangle|$ 的值相同,即从 $2p$ 能级的 3 个态到 $1s$ 态的跃迁几率相同. 所以我们任选一个态(例如 $m=0$)来计算即可. 利用式(6)、(7)、(8),以及 $x = r \sin \theta \cos \varphi, y = r \sin \theta \sin \varphi, z = r \cos \theta$ 容易求出

$$\langle 1s | x | 2p \rangle = \langle 1s | y | 2p \rangle = 0$$

$$\langle 1s | z | 2p \rangle = \int \psi_{100}^* z \psi_{210} d\tau = \frac{1}{8\pi} \left(\frac{1}{a_0}\right)^4 \int_0^\infty \int_0^\pi \int_0^{2\pi} r^4 e^{-\frac{3r}{2a_0}} \cos^2 \theta \sin \theta dr d\theta d\varphi = \frac{2^7 \sqrt{2}}{3^5} a_0$$

则

$$|\langle 1s | r | 2p \rangle|^2 = |\langle 1s | z | 2p \rangle|^2 = \frac{2^{15}}{3^{10}} a_0^2$$

所以由(5)式得 $2s \rightarrow 1s$ 的受激发射系数为

$$B_{2s \rightarrow 1s} = \frac{4\pi^2 e^2}{3h} c^2 |\langle 1s | r | 2p \rangle|^2 = \frac{2^{17} \pi^2 e^2}{3^{11} h^2} a_0^2 c^2$$

可以看出,对于孤立氢原子,由于跃迁选择定则的限制,其 $2s$ 态就不能向 $1s$ 态跃迁,但当氢原子处于外场中时,第一激发态 $2s$ 态的波函数与 $2p$ 态的波函数线性叠加,使得禁戒跃迁 $2s \rightarrow 1s$ 的跃迁几率与

$2p \rightarrow 1s$ 的跃迁几率成正比,实现了在一般近似下不可能实现的禁戒跃迁.

在外电场作用下,来自第一激发态 $2s$ 态与 $2p$ 态将会发生混合. 当 $2p \rightarrow 1s$ 跃迁时,该非对角混合效应会为 $2s \rightarrow 1s$ 的跃迁打开额外的跃迁通道,这个现象就是静电场诱导跃迁,该诱导跃迁通道能够大大缩短 $2s$ 亚稳态能级寿命.

此外,处于电场中的氢原子的价电子因受外加电场力的作用,感受到的势沿电场方向变得不对称. 沿电场正方向的束缚势得到加强,而沿负方向则被减弱而出现鞍点(极大值),即使能量小于零的价电子也可沿这个方向逃逸而成为自由电子.

4 小结

本文在文献[1]工作的基础上,简单介绍了含时微扰论方法和跃迁几率的计算,利用微扰论求解了氢原子在外电场中的波函数,分析了去简并的过程,发现 Stark 分裂后的能级与原简并能级的间隔正比于电场强度;并在此基础上讨论了氢原子静电场诱发的禁戒跃迁 $2s \rightarrow 1s$ 的跃迁几率,在这种情况下,禁戒跃迁 $2s \rightarrow 1s$ 的跃迁几率与 $2p \rightarrow 1s$ 的跃迁几率成正比. 即在静电场的作用下,由于态的叠加,实现了在一般近似下不可能实现的禁戒跃迁.

参考文献

- 1 杨宁选,韩久宁. 氢原子 Stark 效应对称性分析. 河西学院学报,2010,26(5):35~39
- 2 黄时中,张昌萃. 用有效哈密顿法计算氢原子的 Stark 效应. 大学物理,1995,2(14):12~15
- 3 卢书城. 幂坐标矩阵元通式中的求和重数. 大学物理,1996,15(14):28~31
- 4 李钰. 一维氢原子的斯塔克效应. 大学物理,2000,19(3):11~13
- 5 胡群,黄时中. 氢原子 $n=3$ 能级的斯塔克效应. 安徽师范大学学报,2002,25(2):130~133
- 6 郑立贤. 氢原子 Stark 效应中微扰矩阵元的普遍公式. 大学物理,2003,22(1):40~42
- 7 苏燕飞,张昌萃,席伟. 氢原子斯塔克效应的能级分裂规律. 大学物理,2003,23(2):8~10

- | | |
|---|--|
| 8 张昌莘, 席伟, 苏燕飞. 氢原子一级 Stark 效应能级的解析式. 大学物理, 2004, 23(12): 21 ~ 24 | 11 郑乐民, 徐庚武. 原子结构与原子光谱. 北京: 北京大学出版社, 1988. 244 ~ 260 |
| 9 张昌莘. 在均匀电场中氢原子光谱的分裂规律. 安徽师范大学学报, 2005, 12(4): 407 ~ 410 | 12 苏汝铿. 量子力学(第二版) 北京: 高等教育出版社, 2002. 195 ~ 210 |
| 10 曾谨言. 量子力学(卷一) 北京: 科学出版社, 2000. 510 ~ 530 | 13 钱伯初. 量子力学. 北京: 高等教育出版社, 2006. 273 ~ 285 |

Forbidden Transition Induced by the Electrostatic Field

Yang Ningxuan Yang Kun Fan Ting

(Department of Physics, College of Science, Shihezi University, Shihezi, Xinjiang 832003)

Abstract: Base on the 《Theoretical study on symmetry of the Stark effect of Hydrogen atom》work, We discusses the hydrogen atomic electrostatic field induced forbidden transition $2s \rightarrow 1s$ transition probability. Due to the superposition of States, the forbidden transitions are realization, which cannot be achieved in the general approximation, in under the action of electrostatic field. In this case, the forbidden transition $2s \rightarrow 1s$ the transition probability and $2p \rightarrow 1s$ the transition probability is proportional to.

Key words: Stark effect; forbidden transition; transition probability

(上接第 11 页)

悟物穷理,就是要鼓励学生勤于思考,善于思考,学会用自己的语言来表达所学的概念、定义和公式的含义.对于定理的证明和公式的推导,最好是让学生自己演算,在推演中让学生体会和理解它们成立的条件、关键的步骤及推演的技巧.悟物穷理,就是要让学生建立自己的物理图像,在解决问题的过程中,学会自己思考物理过程是否正确合理?是否可以从其他途径或视角去判断自己的思路方法正确与否?反对应试式的题海练习,而是让学生在适度的练习中,进一步深刻理解物理概念和物理规律.在教学过程中,教师要重视教学方法的优化,注重引领学生的学习方法,启迪学生的思维,帮助学生改善科学思维方法,提升学生的科学素质.教师在定理、公式的推导中,要详略得当,注重思路的启发与引导,该让学生自己推导演算的问题就要留给学生自己去

做,这样对学生自学能力的提高是大有帮助的.学生学到的知识在今后总是会有所遗忘,甚至是大多数会被遗忘.但是这个书不会白念,与没有学过的人比,在遇到问题时,就能够判断它是属于哪方面的问题,该问题可以请教哪方面的专家,要查哪方面的资料.这种能力就是读书所积累下来的东西,就是一个人的基本科学素养.

参考文献

- 1 詹佑邦.普通物理.南京:南京大学出版社,2001
- 2 雷水明.普通物理学.西安:陕西师范大学出版社,1991
- 3 赵凯华.物理教育与科学素质培养.大学物理,1995,(08):2~6
- 4 苏昭生,杨懋沧.无限长载流螺线管磁场的初等计算.大学物理,1984(08):30~31