

Таблица 2

Полная энергия E и энергия связи DE^* для состояний ($J=1, v=0$)

Мезомолекула	γ_0	$E, \text{ а. е.}$	$DE, \text{ эВ}$		
			[γ]	МАП	[γ]
$pp\mu$	0.944	-96.624548	100.5	107.97	108.09
$dd\mu$	0.973	-106.106915	224.2	226.12	226.85
$tt\mu$	0.981	-110.209435	287.7	288.63	289.24

Примечание. * DE отсчитывается от значений обычных адиабатических потенциалов (с учетом борновского члена) при $R = \infty$: $W(\infty) + A(\infty)$.

широкому (~ 40) базису из двухцентровых функций — адиабатическое представление.

Мы показали, что применение к гомоядерным мезомолекулам модифицированного адиабатического приближения с независимым от координат медленной подсистемы коэффициентом адиабатичности дает существенное по сравнению с ОАП улучшение результатов. Поэтому можно попытаться использовать МАП для расчета, аналогичного [8], разлагая искомую волновую функцию по базису модифицированных двухцентровых функций (14)

Литература

- [1] Т. К. Ребанае. Опт. и спектр., 31, 350, 1971.
- [2] Г. Лонге-Хиггинс. Усп. физ. наук, 83, 137, 1964.
- [3] Т. К. Ребанае, Е. П. Смирнов. Опт. и спектр., 34, 1037, 1973.
- [4] Т. К. Ребанае, Е. П. Смирнов. Вестн. ЛГУ, № 10, 33, 1974.
- [5] И. В. Комаров, Л. И. Пономарев, С. Ю. Славянов. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. «Наука», М., 1976.
- [6] D. M. Bishop, R. W. Wetmore. Mol. Phys., 26, 145, 1973.
- [7] Л. И. Пономарев, И. В. Пузынин, Т. П. Пузынина. Вычисление уровней энергии мезомолекул с помощью непрерывного аналога метода Ньютона. ОИЯИ, Р4-6256, 1972.
- [8] С. И. Виницкий, В. С. Мележик, Л. И. Пономарев, И. В. Пузынин, Т. П. Пузынина, Л. Н. Сомов, Т. Ф. Трускова. ЖЭТФ, 79, 698, 1980.
- [9] G. Hunter, V. F. Gray, H. O. Pritchard. J. Chem. Phys., 45, 3806, 1966.
- [10] G. Hunter, H. O. Pritchard. J. Chem. Phys., 46, 2146, 1967.
- [11] G. Hunter, H. O. Pritchard. J. Chem. Phys., 46, 2153, 1967.

Поступило в Редакцию 1 июля 1981 г.

УДК 539.184.3 : 546.17

СТОХАСТИЧЕСКАЯ ИОНИЗАЦИЯ ВОЗБУЖДЕННОГО АТОМА ВОДОРОДА В ПОЛЕ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЫ

Д. Л. Шепелянский

В настоящее время интенсивно исследуются процессы многофотонной ионизации атомов [1, 2]. Вместе с тем при ионизации высоковозбужденных атомов ($n \approx 50$), например водорода, линейно поляризованным монохроматическим излучением с частотой $\omega \approx \Omega = n^{-3}$ [3, 4] основным механизмом ионизации оказывается квазиклассическая диффузия, возникающая за счет стохастизации движения электрона при напряженности электрического поля $\epsilon \geq \epsilon_0 = 1/27n^4$ [5]. Численное моделирование классических уравнений [6] дает хорошее согласие

¹ Здесь и далее используются атомные единицы. n — главное квантовое число.

с экспериментом [3, 4]. В этой работе получены условия, при которых возможна стохастическая ионизация из низковозбужденных состояний с $n \geq 2$.

Стохастическая ионизация атома происходит за характерное время $\tau \sim \varepsilon^{-2} n^{-5}$ ($\omega \approx \Omega$) [7]. При этом квазиклассическое приближение для стохастических систем применимо в случае, если в течение времени τ квантовые поправки к квазиклассической сумме по траекториям остаются малыми, что в рассматриваемой системе имеет место при $\delta \sim \gamma_0/h (h\tau)^{1/2} \ll 1$ [8], где $\gamma_0 = \frac{1}{2} \left| \frac{d\Omega}{dn} \right| = \frac{3}{2} n^{-4}$, классическая КС-энтропия [9] $h \sim \Omega$. Вблизи границы стохастичности при $\varepsilon \approx \varepsilon_0$ получаем оценку $\delta \sim 40/n$, из которой следует, что при $n \geq 40$ влияние квантовых поправок оказывается малым.

Численные исследования [10, 11] одномерных квантовых моделей (стохастических в классическом пределе) с периодическим возмущением показали, что при $\delta \gg 1$ происходит квантовое ограничение диффузии. Вместе с тем в случае квазипериодического возмущения или двумерной системы с периодическим возмущением диффузионное возбуждение квантовой модели происходит, как и в классическом случае, практически неограниченно, причем скорость диффузии близка к классической даже при $\delta \gg 1$ [12]. При этом оказывается достаточным лишь немного превысить квантовую границу устойчивости для возбуждения [13], после чего происходит неограниченное возбуждение системы.

Так как движение электрона в атоме существенно многомерно (при $\varepsilon \geq \varepsilon_0$ частота изменения углов Эйлера ψ и Φ оказывается $\sim \Omega$), то исходя из вышесказанного, можно сделать вывод, что стохастическая ионизация атома возможна при $\varepsilon \geq \max(\varepsilon_0, \varepsilon_{cr})$. Значение квантовой границы устойчивости для поля ε_{cr} определяется из условия, что число уровней, захваченных в нелинейный резонанс $\Delta n \approx (\varepsilon_{cr} n^6)^{1/2} \approx 1$ (оценка для Δn приведена в [8]). Так как вероятность стохастической ионизации $W \sim \Omega (\varepsilon^2 n^4)^2$ пропорциональна только второй степени слабого электрического поля ε , то она должна существенно превышать вероятность многофотонной ионизации [1, 2] (при $\varepsilon = \varepsilon_0$ параметр адиабатичности $\gamma = \omega/\varepsilon n \approx 27 \gg 1$).

При $n \geq 5$ пороговое значение для ε определяется классической границей стохастичности ε_0 [5], а при $n \leq 5$ — квантовой границей устойчивости $\varepsilon_{cr} \approx n^{-6}$. Таким образом, для основного состояния механизм стохастической ионизации не является определяющим, так как в этом случае требуются поля $\varepsilon \sim 1$, в которых атом в любом случае перестает существовать за время $\tau \sim 1$. Для $n=2$ граничное значение $\varepsilon_{cr} \approx 10^8$ В/см, при этом ионизация происходит за время $\tau \sim 100 \sim 3 \cdot 10^{-15}$ с при $\omega \approx 1.18$ эВ (отметим, что вероятность стохастической ионизации слабо зависит от частоты при изменении ω в интервале $0.5 \leq \omega/\Omega \leq 1.5$ [14]). Для $n=4$ имеем $\varepsilon_{cr} \approx 10^6$ В/см, $\tau \sim 5 \cdot 10^{-13}$ для $\omega \approx 0.2$ эВ и $\varepsilon_{cr} \approx 3 \cdot 10^5$ В/см, $\tau \sim 2 \cdot 10^{-12}$ для $n=5$ и $\omega \approx 0.1$ эВ.

Последние два случая находятся, по-видимому, в пределах современных экспериментальных возможностей и представляют интерес для экспериментального исследования стохастической ионизации атома водорода.

Такой же механизм ионизации может иметь место и для щелочных атомов. При этом оценка критического поля дает значение $\varepsilon_{cr} \sim n^{-2} (n - \Delta_l)^{-4}$ (Δ_l — квантовый дефект), которое можно использовать для оценки величины поля, требуемого для стохастической ионизации щелочного атома из основного состояния. Так для $n=6$, $n^* = n - \Delta_l = 1.5$ получаем $\varepsilon_{cr} \sim 3 \cdot 10^7$ В/см. Так как зависимость ε_{cr} от n^* является очень резкой, то пороговое значение поля для возбужденного состояния ($n^* = 2.5$) оказывается существенно меньше $\varepsilon_{cr} \sim 3 \times 10^6$ В/см. Это позволяет качественно понять, почему диффузионное возбуждение атома в экспериментах [15] ($\varepsilon \approx 5 \cdot 10^6$ В/см) происходит не прямо из основного состояния, а только из возбужденного [7].

В заключение отметим, что условие диффузионного возбуждения атома определяется классической границей стохастичности, а также квантовой границей устойчивости, и не связано с шириной спектра электромагнитного излучения $\Delta \omega$ [7] (при условии, что $\Delta \omega \ll \Omega = n^{-3}$). Действительно, из классического рассмотрения, применимого для высоковозбужденных уровней, следует что в отсутствие перекрытия нелинейных резонансов и $\Delta \omega \ll \Omega$ скорость диффузионного возбуждения оказывается экспоненциально малой по параметру

адиабатичности $\Delta\omega/\Omega$. При выполнении условий стохастической ионизации вероятность $W \gg \Delta\omega \sim n^{-5}$ ($\varepsilon \gg n^{-5}$), и поэтому излучение с такой шириной спектра на времени τ можно считать монохроматическим. Из этого следует, что отсутствие двухзарядных ионов в экспериментах [15] с $\omega=14\,420\text{ см}^{-1}$, $\Delta\omega=0.1\text{ см}^{-1}$ будет иметь место и при $\Delta\omega=14\text{ см}^{-1}$.

Автор выражает искреннюю благодарность Б. В. Чирикову за внимание к работе и ценные замечания.

Литература

- [1] Н. Б. Делоне, В. П. Крайнов. Атом в сильном световом поле. Атомиздат, 1978.
- [2] Л. П. Рапопорт, Б. А. Зон, Н. Л. Манаков. Теория многофотонных процессов в атомах. Атомиздат, 1978.
- [3] J. E. Bayfield, P. M. Koch. Phys. Rev. Lett., 33, 258, 1974.
- [4] J. E. Bayfield, L. D. Gardner, P. M. Koch. Phys. Rev. Lett., 39, 76, 1977.
- [5] Б. И. Меерсон, Е. А. Окс, П. В. Сасоров. Письма ЖЭТФ, 29, 79, 1979.
- [6] J. G. Leopold, I. C. Percival. Phys. Rev. Lett., 41, 944, 1978.
- [7] Н. Б. Делоне, Б. А. Зон, В. П. Крайнов. ЖЭТФ, 75, 445, 1978; 30, 260, 1979.
- [8] Д. Л. Шепелянский. ДАН СССР, 256, 586, 1981.
- [9] B. V. Chirikov. Phys. Rev., 52, 265, 1979.
- [10] G. Casati, B. V. Chirikov, J. Ford, F. M. Izraelev. Stochastic Behaviour in Classical and Quantum Hamiltonian Systems. v. 93, Lecture Notes in Physics, Springer, B., 1979.
- [11] Ф. М. Израилев, Б. В. Чириков, Д. Л. Шепелянский. Препринт ИЯФ СО АН СССР, 80—210, Новосибирск, 1980.
- [12] Д. Л. Шепелянский. Препринт ИЯФ СО АН СССР, 81—55, Новосибирск, 1981.
- [13] Э. В. Шурык. ЖЭТФ, 71, 2039, 1976.
- [14] D. A. Jones, J. G. Leopold, I. C. Percival. J. Phys. B, 13, 31, 1980.
- [15] И. С. Алексашин, Н. Б. Делоне, И. П. Запесочный, В. В. Суран. ЖЭТФ, 76, 887, 1979; И. И. Бондарь, И. П. Запесочный, Н. Б. Делоне, В. В. Суран. Письма ЖТФ, 7, 243, 1981.

Поступило в Редакцию 7 декабря 1981 г.

УДК 537.228.4

ТЕМПЕРАТУРНО ЗАВИСЯЩИЙ ЭЛЕКТРООПТИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ КЕРРА В МОЛЕКУЛАХ ТИПА СФЕРИЧЕСКОГО ВОЛЧКА

И. Я. Огурцов, В. Л. Островский и И. Б. Берсукер

Электрооптический эффект Керра в молекулярных системах обязан анизотропии гиперполяризуемости (механизм Фойгта), ориентирующему действию постоянного электрического поля на анизотропную молекулу (механизм Ланжевена) и межмолекулярному взаимодействию [1].

В разреженном газе, состоящем из молекул типа сферических волчков, эффективным считается только первый из указанных механизмов [2]. Это утверждение верно только в отсутствие электронного вырождения. В настоящей работе показано, что в случае молекул с симметрией T_d или O_h , электронное состояние которых вырождено, имеется существенный вклад в константу электрооптического эффекта Керра, зависящий от температуры, аналогичный вкладу, обязанному механизму Ланжевена для анизотропных молекул.

В пренебрежении квантованием вращения молекул мольная константа электрооптического эффекта Керра ${}_m K$ связана с компонентами тензора поляризуе-