

УДК 539.194;535.375;544.174.6;535.374:621.375.8;544.354-128.2

ПЕРЕРАССЕЯНИЕ УЛЬТРАКОРОТКОГО ИМПУЛЬСА НА АТОМАРНЫХ И МОЛЕКУЛЯРНЫХ АНИОНАХ В МОДЕЛИ ПОТЕНЦИАЛОВ НУЛЕВОГО РАДИУСА

© 2011 г. М. К. Есеев*, В. И. Матвеев*, В. М. Юлкова**

*Поморский государственный университет имени М.В. Ломоносова, 163002 Архангельск, Россия

**Северный (Арктический) федеральный университет, 163002 Архангельск, Россия

E-mail: eseev.marat@pomorsu.ru

Поступила в редакцию 23.03.2011 г.

Расчитаны спектры переизлучения ультракоротких импульсов электромагнитного поля на одно- и двухцентровых отрицательных ионах в приближении потенциалов нулевого радиуса. Показано, что сечения и спектры переизлучения ультракоротких импульсов существенно зависят от энергии сродства слабосвязанного электрона и ориентации межъядерной оси двухцентровых мишеней относительно направления налетающего ультракороткого импульса.

ВВЕДЕНИЕ

Отрицательные атомарные и молекулярные ионы (анионы) выступают в роли ловушек, связывающих электроны. Заряженность этих комплексов позволяет достаточно легко ими управлять, а слабая связь с избыточным электроном дает возможность быстрого его высвобождения. Процессы с участием отрицательных ионов (ОИ) имеют важное значение в донорно-акцепторных взаимодействиях, окислительно-восстановительных реакциях [1, 2]. Отрицательные ионы используются при создании электронного и ионного транспорта, процессах перезарядки при управлении потоками частиц при транспортировке пучка в ускорителях и накопителях, при генерации пучков нейтральных частиц большой энергии для нагревания термоядерной плазмы. В работе представлено описание взаимодействия ультракоротких импульсов (УКИ) электромагнитного поля аттосекундной длительности с некоторыми атомарными и молекулярными анионами. Процесс рассеяния импульсов электромагнитного поля в широком спектральном диапазоне в последнее время вызывает значительный интерес. В работе [3] получено описание рассеяния ультракороткого электромагнитного импульса на атомных частицах с учетом возбуждения мишени и недипольности электромагнитного взаимодействия по теории возмущений. Значительный прогресс в генерации УКИ позволил вплотную приблизиться в лазерной физике к аттосекундным длительностям. Процессы взаимодействия с аттосекундными импульсами могут иметь широкое применение при определении электронной динамики в атомных и молекулярных системах [4, 5]. Для создания УКИ в лазерной физике с успехом используется генерация оптических гармоник высокого

порядка [4], а также вынужденное комбинационное рассеяние на колебательных и вращательных модах молекул [6]. Важно отметить, что необходимые длительности и интенсивности уже достижимы на сегодняшний день за счет релятивистского сжатия полей пучков многозарядных ионов. Малая по сравнению с временем внутриатомного движения продолжительность УКИ позволяет использовать приближение внезапных возмущений. В рамках данного приближения в настоящей работе рассмотрено перерассеяние УКИ на атомарных и молекулярных анионах. С учетом слабой связи электрона в анионе характерное время его движения существенно превышает таковое для атомов. Это позволяет рассчитывать в приближении внезапных возмущений процессы взаимодействия ОИ с УКИ при уже достигнутых продолжительностях импульсов. Поведение ОИ в интенсивном лазерном поле исследовалось в [7, 8]. Часто даже простейшие приближения с потенциалами нулевого радиуса (ПНР) сохраняют основные особенности физических систем. В атомной физике простейшей системой, которая может моделироваться частицей в поле ямы нулевого радиуса, является отрицательный ион с внешним слабосвязанным электроном, находящимся в s -состоянии. Два ПНР, находящихся на расстоянии R друг от друга являются моделью отрицательного молекулярного иона [9].

В настоящей работе произведены расчеты сечений и спектров переизлучения УКИ электромагнитного поля на одном и двух центрах, описываемых ПНР. Расчеты существенным образом используют подход, предложенный в работе [10] (см. также [11–13]), в которой на основе приближения внезапных возмущений проведено общее рассмотрение процессов переизлучения ультра-

коротких импульсов электромагнитного поля атомами. Развитая методика не использует дипольного приближения и позволяет произвести точный учет импульсов фотонов и пространственной неоднородности поля падающего УКИ.

СЕЧЕНИЯ ПЕРЕРАССЕЯНИЯ
ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ
С АТОМАРНЫМИ АНИОНАМИ

Пусть УКИ (длительностью τ) электромагнитного поля гауссовой формы взаимодействует с мишенью. Напряженность электрического поля импульса задается выражением

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \exp[-\alpha^2(t - \mathbf{k}_0\mathbf{r}/\omega_0)^2] \cos(\omega_0 t - \mathbf{k}_0\mathbf{r}),$$

где $\alpha = 1/\tau$ – параметр затухания в гауссовом импульсе, ω_0 – частота налетающего УКИ, \mathbf{k}_0 – его волновой вектор, \mathbf{E}_0 – амплитуда напряженности поля в ультракоротком электромагнитном импульсе (здесь и ниже использована атомная система единиц). В результате действия сверхсильного электромагнитного поля импульса электронная система переизлучает фотоны с волновым вектором \mathbf{k} . Вероятность испускания фотона заданной частоты ω в единицу телесного угла $\Omega_{\mathbf{k}}$ с одновременным переходом одноэлектронной системы из основного состояния $|\varphi_0\rangle$ во все возможные конечные состояния в приближении внезапных возмущений [10] равна

$$\frac{d^2W}{d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega} = \frac{1}{(2\pi)^2 c^3 \omega} \langle \varphi_0 | \left[\frac{\partial \tilde{V}(\omega)}{\partial \mathbf{r}} \times \mathbf{n} \right] \left[\frac{\partial \tilde{V}^*(\omega)}{\partial \mathbf{r}} \times \mathbf{n} \right] | \varphi_0 \rangle, \quad (1)$$

где

$$\begin{aligned} \frac{\partial \tilde{V}(\omega)}{\partial \mathbf{r}} &= \\ &= \exp(i\omega \mathbf{k}_0 \mathbf{r} / \omega_0) f_0(\omega) (\mathbf{E}_0 + i\omega(\mathbf{E}_0 \mathbf{r}) \mathbf{k}_0 / \omega_0) \end{aligned}$$

есть фурье-образ силы, действующей со стороны электромагнитного поля импульса на электрон мишени, \mathbf{r} – координаты электрона мишени, \mathbf{n} – единичный вектор, задающий направление вылета переизлученных фотонов,

$$\begin{aligned} f_0(\omega) &= (\sqrt{\pi}/2\alpha) \times \\ &\times \{ \exp[-(\omega - \omega_0)^2 / 4\alpha^2] + \exp[-(\omega + \omega_0)^2 / 4\alpha^2] \}. \end{aligned}$$

Волновая функция аниона в приближении ПНР определяется как

$$\varphi_0 = \sqrt{q/2\pi} e^{-qr} / r, \quad (2)$$

где $q = \sqrt{2I}$, I – энергия электронного сродства соответствующего аниона. Используя (2) и умножая выражение (1) на энергию переизлученных фотонов (в атомных единицах равную ω), полу-

чим энергетический спектр переизлучения атомарного аниона в единицу телесного угла:

$$\begin{aligned} \frac{d^2\varepsilon}{d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega} &= \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2 c^3} |f_0(\omega)|^2 \left[[\mathbf{E}_0 \times \mathbf{n}]^2 + \frac{1}{6} \left(\frac{\omega E_0}{q\omega_0} [\mathbf{k}_0 \times \mathbf{n}] \right)^2 \right], \quad (3) \end{aligned}$$

где $d\Omega_{\mathbf{k}}$ – элементарный телесный угол в направлении, задаваемом \mathbf{k} . Проинтегрировав (3) по частоте ω , найдем количество энергии переизлученной системой за все время взаимодействия в единичный телесный угол атомарным анионом:

$$\begin{aligned} \frac{d\varepsilon}{d\Omega_{\mathbf{k}}} &= (1/8\sqrt{2\pi}c^3\alpha) \times \\ &\times \left\{ f_1(\omega_0) [\mathbf{E}_0 \times \mathbf{n}]^2 + (1/6)(E_0 [\mathbf{k}_0 \times \mathbf{n}] / q)^2 \times \right. \\ &\times \left. \left[1 + (\alpha/\omega_0)^2 f_1(\omega_0) \right] \right\}, \quad (4) \end{aligned}$$

где $f_1(\omega_0) = 1 + \exp(-\omega_0^2/2\alpha^2)$.

Для получения сечений переизлучения импульса согласно [10], очевидно, необходимо величину (4) разделить на поток энергии I , выраженный через интеграл по времени от абсолютной величины вектора Пойнтинга падающего на систему УКИ:

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} S(t) dt = \frac{c}{4\pi} E_0^2 \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{2}\alpha} f_1(\omega_0).$$

В результате эффективное сечение перерассеяния равно

$$\begin{aligned} d\sigma &= (1/E_0^2 c^4) \left\{ [\mathbf{E}_0 \times \mathbf{n}]^2 + (1/6) [(E_0/q) [\mathbf{k}_0 \times \mathbf{n}]]^2 \times \right. \\ &\times \left. \left[1/f_1(\omega_0) + (\alpha/\omega_0)^2 \right] \right\} d\Omega_{\mathbf{k}}. \quad (5) \end{aligned}$$

Значения отношения сечений перерассеяния на некоторых атомарных анионах к томсоновскому сечению рассеяния

Атомарный ион	Энергия сродства I , эВ [2]	σ/σ_{cl} (6)
H ⁻	0.75416	40.58
Li ⁻	0.609	49.6639
Na ⁻	0.5479	54.9727
K ⁻	0.501	60.37
Rb ⁻	0.4859	61.5816
Cs ⁻	0.4716	64.1596
Cu ⁻	1.228	25.1342
Ag ⁻	1.302	23.8346
Au ⁻	2.3086	13.8507

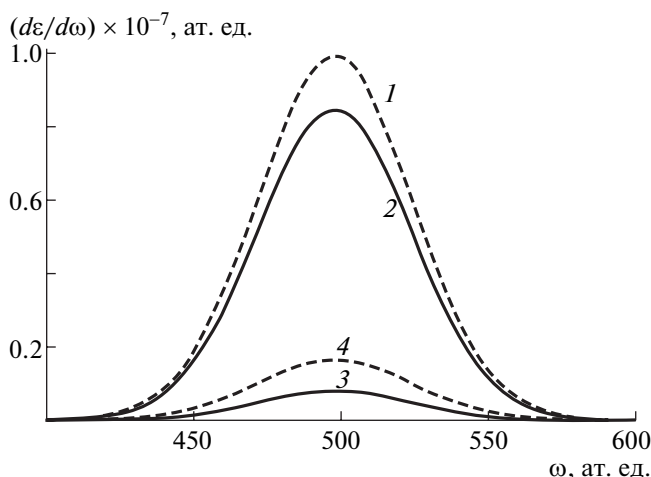


Рис. 1. Спектры переизлучения ОН иода \bar{I}_2 при различных состояниях и выстроенностях молекулярного ОИ: при ориентации межъядерной оси перпендикулярно (1, 2), (3, 4) и параллельно относительно волнового вектора \mathbf{k}_0 падающего электромагнитного поля для антисимметричного (сплошная линия) и симметричного (штриховая линия) состояний ОИ. При расчете продолжительность импульса принималась равной 10^{-18} с, амплитуда напряженности поля в УКИ равнялась 3 ат. ед.

Проинтегрировав (5) по всем углам вылета фотона, получим σ — полное сечение перерасеяния УКИ электромагнитного поля на отрицательных атомарных ионах, для которых применима волновая функция (2):

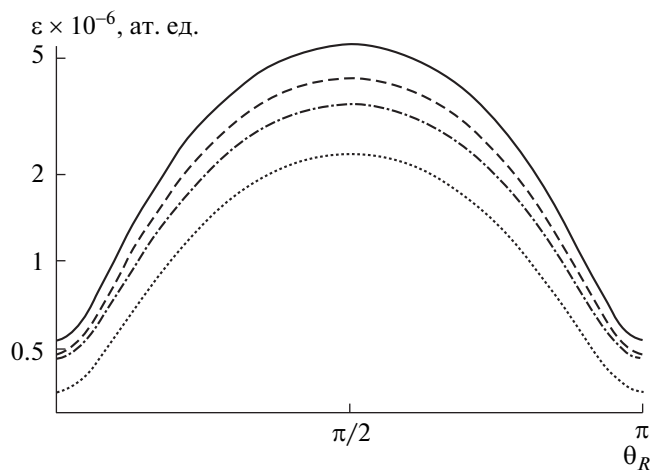


Рис. 2. Энергия переизлучения молекулярных ионов (антисимметричное состояние) в зависимости от θ_R — угла ориентации межъядерной оси относительно волнового вектора \mathbf{k}_0 падающего УКИ электромагнитного поля. Сплошная линия — для \bar{I}_2 , штриховая линия — для Br_2^- , штрихпунктирная линия — для Cl_2^- , пунктирная линия — для \bar{F}_2 . При расчете продолжительность импульса принималась равной в 10^{-18} с, амплитуда напряженности поля в УКИ равнялась 3 ат. ед.

$$\sigma/\sigma_{cl} = 1 + (1/6)(k_0/q)^2 \left[1/f_1(\omega_0) + (\alpha/\omega_0)^2 \right], \quad (6)$$

где $\sigma_{cl} = 8\pi/(3c^4)$ — томсоновское сечение рассеяния плоской монохроматической волны [14, формула (78.5)]. Таким образом, наше сечение существенно зависит от частоты и продолжительности налетающего УКИ. Численные значения отношения сечения перерасеяния к томсоновскому сечению рассеяния для нескольких атомарных анионов, полученные по формуле (6), приведены в таблице.

ОРИЕНТАЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ В СПЕКТРАХ ПЕРЕИЗЛУЧЕНИЯ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ С МОЛЕКУЛЯРНЫМИ АНИОНАМИ

Рассмотрим теперь процессы перерасеяния поля УКИ двухцентровыми мишенями — молекулярными анионами. Для описания взаимодействия УКИ с молекулярными анионами в формуле (1) в качестве φ_0 используем волновую функцию двухцентральной системы в приближении ПНР [15]:

$$\Psi_{u,g}(\mathbf{r}) = C_{u,g} \left(\frac{e^{-q|\mathbf{r}+\mathbf{R}/2|}}{|\mathbf{r}+\mathbf{R}/2|} \mp \frac{e^{-q|\mathbf{r}-\mathbf{R}/2|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{R}/2|} \right). \quad (7)$$

Здесь радиус-вектор \mathbf{r} определяет положение слабосвязанного электрона относительно центра масс системы, вектор \mathbf{R} — положение одного центра двухатомного аниона относительно другого. Нормировочная константа $C_{u,g}$ и знаки (\mp) соответствуют антисимметричному или симметричному состояниям молекулярного иона. В результате запишем, используя (1) и (7), энергетический спектр переизлучения молекулярного аниона в единицу телесного угла при фиксированном направлении ориентации оси иона:

$$\frac{d^2\varepsilon_{u,g}}{d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega} = \frac{|f_0(\omega)|^2}{(2\pi)^2 c^3} \frac{1}{(1 \mp e^{-qR})} \times \left\{ [\mathbf{E}_0 \times \mathbf{n}]^2 (1 \mp e^{-qR}) + \left(\frac{\omega E_0}{\omega_0} [\mathbf{k}_0 \times \mathbf{n}] \right)^2 \right. \\ \left. \times \left[\frac{1}{6q^2} + \frac{R^2}{4} \cos^2 \theta_{RE} \mp (I_1 \sin^2 \theta_{RE} + I_2 \cos^2 \theta_{RE}) \right] \right\}, \quad (8)$$

где $I_{1,2}$ — интегралы перекрытия, вычисленные в эллиптических координатах и равны соответственно

$$I_1 = e^{-qR} (1 + qR)/6q^2,$$

$$I_2 = e^{-qR} [2 + qR(2 + qR)]/12q^2.$$

Отметим, что спектр (8) зависит от R — расстояния между центрами двухатомного аниона и ориентации межъядерной оси относительно напря-

женности поля \mathbf{E}_0 , описываемой углом θ_{RE} между векторами \mathbf{E}_0 и \mathbf{R} . После интегрирования (8) по всем углам вылета фотона получим полный энергетический спектр излучения при фиксированном направлении ориентации оси иона:

$$\frac{d\varepsilon_{u,g}}{d\omega} = \frac{2}{3\pi c^3} \frac{|f_0(\omega)|^2 E_0^2}{(1 \mp e^{-qR})} \times \left\{ 1 \mp e^{-qR} + \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \left[\frac{1}{6q^2} + \frac{R^2}{4} \cos^2 \theta_{RE} \mp \left(I_1 \sin^2 \theta_{RE} + I_2 \cos^2 \theta_{RE} \right) \right] \right\}. \quad (9)$$

Спектр существенно зависит от ориентации межъядерной оси \mathbf{R} . На рис. 1 приводим значения спектра (9) для двух ориентаций \mathbf{R} на примере антисимметричных и симметричных состояний молекулярного ОИ иода I_2^- . Интегрируя (9) по всем частотам, получаем энергию переизлучения в зависимости от ориентации \mathbf{R} . Результат имеет громоздкий вид, поэтому иллюстрируем его графически на рис. 2. Параметры молекулярных ОИ взяты из работ [1, 16].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

На основании изложенных результатов можно сделать следующие выводы и заключения. Полученные сечения перерассеяния УКИ электромагнитного поля на ОИ зависят от параметров импульса и значительно превышают сечения классического рассеяния свободным электроном плоской монохроматической волны. Сечения перерассеяния УКИ возрастают при уменьшении энергии электронного сродства в анионе. Это связано с тем, что слабосвязанный электрон испытывает большие ускорения в поле УКИ. Зависимость спектров переизлучения от энергии связи может помочь в уточнении энергии электронного сродства для ОИ. Спектры также зависят от симметрии состояний молекулярного ОИ. Спектры и энергии переизлучения существенным образом зависят от выстроенностей межъядерной оси молекулярных анионов и от типа ОИ. Переизлучение максимально в случае параллельности напряженности внешнего электрического поля и

межъядерной оси. Это может помочь контролировать степень выстроенности и облегчить управление ОИ в различных технических приложениях. Отметим, что для применимости нашего рассмотрения необходимо, чтобы длительность УКИ τ была существенно меньше τ_a — характерных электронных периодов мишени. Очевидно, $\tau_a \sim 1/I$, где I — энергия электронного сродства соответствующего аниона. Согласно [1, 16], характерные $I \leq 0.1$ ат. ед., поэтому необходимо выполнение неравенства $\tau \ll 10$ ат. ед. ($\tau \ll 2.4 \times 10^{-16}$ с).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Мессу Г. Отрицательные ионы. М.: Мир, 1979. 754 с.
2. Смирнов Б. М. Отрицательные ионы. М.: Атомиздат, 1978. 176 с.
3. Астапенко В.А. // ЖЭТФ. 2011. Т. 139. № 2. С. 228.
4. Krausz F., Ivanov M. // Rev. Mod. Phys. 2009. V. 81. P. 163.
5. Sansone G., Kelkensberg F., Pérez-Torres J. F. et al. // Nature. 2010. V. 465. P. 766.
6. Желтиков А.М. // УФН. 2011. Т. 181. № 1. С. 33.
7. Делоне Н.Б., Киян Ю.И., Крайнов В.П. и др. Многофотонный распад отрицательных ионов с электроном в s-состоянии. Препринт ФИАН № 12, 1984. 20 с.
8. Frolov M.V., Manakov N. L., Pronin E.A. // Phys. Rev. Lett. 2003. V. 91. P. 053003-1.
9. Демков Ю.Н., Островский В.Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л.: Изд-во ЛГУ, 1975. 240 с.
10. Матвеев В.И. // ЖЭТФ. 2003. Т. 124. № 5 (11). С. 1023.
11. Есеев М. К., Матвеев В. И. // ЖТФ. 2008. Т. 78. № 8. С. 28.
12. Есеев М.К., Матвеев В.И. // Опт. и спектр. 2008. Т. 104. №6. С. 885.
13. Есеев М.К., Матвеев В.И., Абикулова Н.В. // Опт. и спектр. 2009. Т. 106. № 2. С. 231.
14. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля. М.: Наука, 1988. 512 с.
15. Baltenkov A.S., Dolmatov V.K., Manson S.T. et al. // J. Phys. B. 2004. V. 37. P. 3837.
16. Радциг А.А., Смирнов Б.М. Параметры атомов и атомных ионов. Энергоатомиздат, 1986. 343 с.