

01;02;07

## Взаимодействие аттосекундного импульса с отрицательными атомарными и молекулярными ионами

© М.К. Есеев, В.И. Матвеев, В.М. Юлкова

Северный (Арктический) федеральный университет им. М.В. Ломоносова,  
163002 Архангельск, Россия  
e-mail: eseev.marat@pomorsu.ru

(Поступило в Редакцию 27 сентября 2011 г. В окончательной редакции 12 марта 2012 г.)

Представлены расчеты вероятностей перерассеяния ультракоротких импульсов электромагнитного поля аттосекундных длительностей на одно- и двухцентровых отрицательных ионах в  $s$ -состоянии в приближении потенциалов нулевого радиуса, исследована зависимость спектров перерассеяния от числа осцилляций поля в импульсе.

Процессы взаимодействия с аттосекундными (длительность ультракороткого импульса  $\tau = 10^{-18}$  s) и даже зептосекундными ( $\tau = 10^{-21}$  s) импульсами могут иметь широкое применение при определении электронной динамики в атомных и молекулярных системах [1,2]. Отрицательные атомарные и молекулярные ионы (анионы) представляют собой атомы или молекулы, захватившие добавочный электрон. Процессы с участием отрицательных ионов (ОИ) имеют большое значение в донорно-акцепторных взаимодействиях, окислительно-восстановительных реакциях [3,4]. ОИ используются в 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 последнее время исследуются процессы рассеяния импульсов электромагнитного поля атомными системами в широком спектральном диапазоне [5]

В наших расчетах учитывается, что продолжительность УКИ мала по сравнению со временем внутриатомного движения, что позволяет использовать приближение внезапных возмущений. Характерное время движения слабосвязанного электрона в анионе существенно превышает таковое для атомов. Это позволяет рассчитывать в приближении внезапных возмущений процессы взаимодействия ОИ с УКИ при уже достигнутых продолжительностях импульсов. Таким образом, для применимости нашего рассмотрения необходимо, чтобы  $\tau$  была меньше  $\tau_a$  — характерных электронных периодов мишени, очевидно,  $\tau_a \approx 1/I$ , где  $I$  — энергия электронного сродства соответствующего аниона. Согласно [3,4] характерные  $I \leq 0.1$  eV, таким образом, необходимо выполнение неравенства  $\tau \ll 10$  eV ( $\tau \approx 2.4 \cdot 10^{-16}$  s). В рамках данного приближения в работе рассмотрено перерассеяние ультракороткого импульса на атомарных и молекулярных анионах. Поведение ОИ в интенсивном лазерном поле исследовалось в [6]. Отрицательный ион, внешний электрон которого находится в  $s$ -состоянии, является простейшей системой, которая может моделироваться частицей в поле ямы нулевого радиуса. Два

потенциала нулевого радиуса (ПНР), находящиеся на расстоянии  $R$  друг от друга являются моделью отрицательного молекулярного иона [7].

В настоящей работе произведены расчеты спектров переизлучения ультракоротких импульсов электромагнитного поля на одном и двух центрах, описываемых ПНР. Расчеты существенным образом используют подход, предложенный в работе [8] (см. также [9–11]), в которой на основе приближения внезапных возмущений проведено рассмотрение процессов переизлучения ультракоротких импульсов электромагнитного поля атомами. Ранее авторами также был рассмотрен спектр переизлучения положительного молекулярного иона водорода  $H_2^+$  [12]. Развита методика не использует дипольного приближения по полю излучения и позволяет произвести точный учет импульсов фотонов и пространственной неоднородности поля падающего ультракороткого импульса.

В результате взаимодействия ультракороткого импульса электромагнитного поля гауссовой формы с анионом, происходит переизлучение фотона с волновым вектором  $\mathbf{k}$ . Вероятность того, что испускается фотон заданной частоты  $\omega$  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, определяется [8]

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

где

$$\frac{\partial \tilde{V}(\omega)}{\partial \mathbf{r}} = \exp\left(i \frac{\omega}{\omega_0} \mathbf{k}_0 \mathbf{r}\right) f_0(\omega) \left( \mathbf{E}_0 + i \frac{\omega}{\omega_0} (\mathbf{E}_0 \mathbf{r}) \mathbf{k}_0 \right)$$

это фурье-образ силы, которая действует со стороны электромагнитного поля импульса

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{E}_0 \exp\left\{-\alpha^2 \left(t - \frac{\mathbf{k}_0 \mathbf{r}}{\omega_0}\right)^2\right\} \cos(\omega_0 t - \mathbf{k}_0 \mathbf{r})$$

на электрон мишени,  $\mathbf{r}$  — координаты электрона мишени,  $\mathbf{n}$  — единичный вектор, задающий направление

Энергия сродства некоторых отрицательных ионов

Ион	Энергия сродства $I$ , eV [13]
Rb <sup>-</sup>	0.49
Li <sup>-</sup>	0.61
Cu <sup>-</sup>	1.23
Au <sup>-</sup>	2.31
Cl <sub>2</sub> <sup>-</sup>	2.4
I <sub>2</sub> <sup>-</sup>	2.5
Br <sub>2</sub> <sup>-</sup>	2.6
F <sub>2</sub> <sup>-</sup>	3.0

вылета переизлученных фотонов,  $\omega_0$  — несущая частота,  $\mathbf{k}_0$  — волновой вектор в падающем импульсе,

$$f_0(\omega) = \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha} \left( \exp\left\{-\frac{(\omega-\omega_0)^2}{4\alpha^2}\right\} + \exp\left\{-\frac{(\omega+\omega_0)^2}{4\alpha^2}\right\} \right).$$

Здесь  $\alpha = 1/\tau = \omega_0/(2\pi N)$ ,  $N$  — число осцилляций в импульсе. В приближении ПНР волновая функция атомарного аниона определяется

$$\varphi_0 = \sqrt{\frac{q}{2\pi}} \frac{\exp\{-qr\}}{r}, \tag{2}$$

где  $q = \sqrt{2I}$ ,  $I$  — энергия электронного сродства соответствующего аниона. Энергия сродства — это энергия связи электрона и захватившего его атома [13]. Данные по используемым нами атомарным анионам приведены в таблице.

Подставляя ВФ (2) в выражение (1) и проинтегрировав его по всем углам вылета фотона, получим полный спектр переизлучения

$$\frac{dW}{d\omega} = \frac{2E_0^2}{3\pi c^3 \omega} |f_0(\omega)|^2 \left\{ 1 + \frac{1}{6} \left( \frac{\omega}{qc} \right)^2 \right\}. \tag{3}$$

На рис. 1 представлены расчеты спектров переизлучения (3) для некоторых атомарных отрицательных ионов. Для падающего импульса спектр можно получить через фурье-образ напряженности поля в падающем импульсе. Вектор Пойнтинга для этого импульса запишется как

$$S(\omega) = \frac{cE^2(\omega)}{4\pi} = \frac{cE_0^2}{8\pi^2} |f_0(\omega)|^2.$$

Учтя, что падающий импульс является плоской волной, нормируем полученный спектр и сопоставим с переизлучением по форме (рис. 1). Очевидно, что форма спектра при переизлучении мало меняется, что подтверждает то, что полученное излучение является перерассеянием падающего ультракороткого импульса. Интересно также представить зависимость вероятности переизлучения для различных частот в рассеянном импульсе от количества осцилляций в падающем импульсе (рис. 2). Видно, что с ростом  $N$  спектр переизлучения эффективно сужается. Вероятность переизлучения несущей частоты  $\omega_0$

при этом увеличивается, а излучение на других частотах с ростом числа осцилляций сначала возрастает, а затем уменьшается.

Рассмотрим теперь взаимодействие поля УКИ с молекулярными анионами, которые являются уже двухцентровыми мишенями. Для описания такого взаимодействия в формуле (1) в качестве  $\varphi_0$  мы используем волновую функцию двухцентральной системы в приближении ПНР [14]

$$\Psi_{u,g}(\mathbf{r}) = C_{u,g} \left[ \frac{\exp\{-q|\mathbf{r} + \frac{\mathbf{R}}{2}|\}}{|\mathbf{r} + \frac{\mathbf{R}}{2}|} \mp \frac{\exp\{-q|\mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}}{2}|\}}{|\mathbf{r} - \frac{\mathbf{R}}{2}|} \right]. \tag{4}$$

Здесь радиус-вектор  $\mathbf{r}$  определяет положение слабосвязанного электрона относительно центра масс системы,

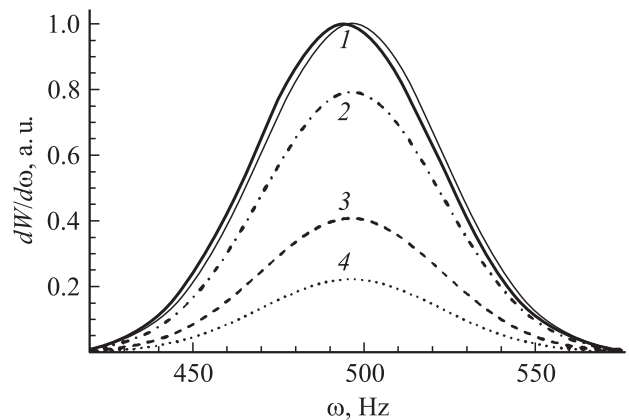


Рис. 1. Спектры переизлучения ОИ металлов. 1 — для Rb<sup>-</sup>, 2 — для Li<sup>-</sup>, 3 — для Cu<sup>-</sup>, 4 — для Au<sup>-</sup>. Все вышеуказанные спектры нормированы на максимальное значение для Rb<sup>-</sup>. При расчете продолжительность импульса была взята в 1 ас, амплитуда напряженности поля в УКИ равнялась 3 эВ, количество осцилляций  $N$  равно 3. Для сравнения приведен спектр падающего импульса изображенный жирной сплошной линией, нормированный на свое максимальное значение.

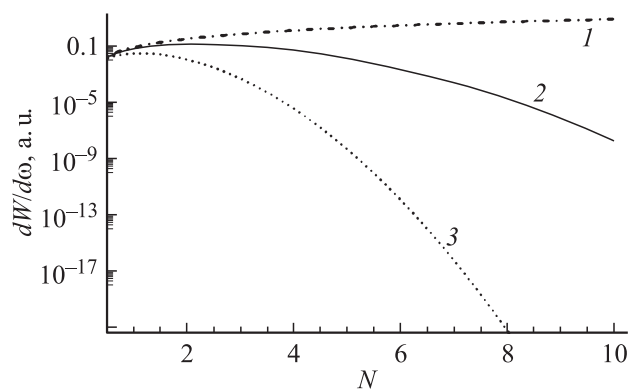
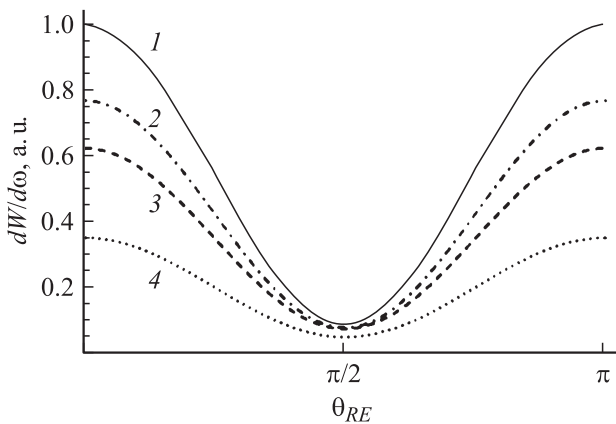


Рис. 2. Зависимость спектра переизлучения ОИ Li<sup>-</sup> от количества осцилляций в падающем аттосекундном импульсе. 1 — вероятность переизлучения на частоте  $\omega = \omega_0$ , 2 —  $\omega = 0.9\omega_0$ , 3 —  $\omega = 0.8\omega_0$ . При расчете продолжительность импульса была взята в 1 аттосекунду, амплитуда напряженности поля в УКИ равнялась 3 эВ.



**Рис. 3.** Спектр переизлучения молекулярных ионов (состояние  $\Sigma_u$ ) в зависимости от  $\theta_{RE}$  — угла выстроенности межядерной оси относительно направления падающего ультракороткого импульса электромагнитного поля  $\mathbf{E}_0$ . 1 — для  $I_2^-$ , 2 — для  $Cl_2^-$ , 3 — для  $Br_2^-$ , 4 — для  $F_2^-$ . При расчете продолжительность импульса была взята в 1 аттосекунду, амплитуда напряженности поля в УКИ равнялась 3 эВ, количество осцилляций  $N$  равно 3.

вектор  $\mathbf{R}$  — положение одного центра двухатомного аниона относительно другого. Нормировочная константа  $C_{u,g}$  и знаки  $\mp$  соответствуют антисимметричному или симметричному состоянию молекулярного иона. Подставляя ВФ (4) в выражение (1) и проинтегрировав его по всем углам вылета фотона, получим спектр переизлучения молекулярного аниона при фиксированном направлении ориентации оси иона

$$\frac{dW_{u,g}}{d\omega} = \frac{2}{3\pi c^3 \omega} \frac{|f_0(\omega)|^2 E_0^2}{(1 \mp \exp\{-qR\})} \left\{ 1 \mp \exp\{-qR\} + \left(\frac{\omega}{c}\right)^2 \left(\frac{1}{6q^2} + \frac{R^2}{4} \cos^2 \theta_{RE}\right) \mp (I_1 \sin^2 \theta_{RE} + I_2 \cos^2 \theta_{RE}) \right\}, \quad (5)$$

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

$$I_1 = \exp\{-qR\} \frac{(1+qR)}{6q^2},$$

$$I_2 = \exp\{-qR\} \frac{(2+qR(2+qR))}{12q^2}.$$

Видно, что спектр (5) зависит от  $R$  — расстояния между центрами двухатомного аниона и ориентации межядерной оси относительно напряженности поля  $\mathbf{E}_0$ , описываемой углом  $\theta_{RE}$  между векторами  $\mathbf{E}_0$  и  $\mathbf{R}$ . Зависимость спектра переизлучения от углов выстроенностей приведена на рис. 3.

Анализ этих результатов показывает следующее. Зависимость спектров переизлучения от энергии связи может помочь в уточнении энергии электронного сродства

для ОИ. Спектры также зависят от симметрии состояний молекулярного ОИ. Спектры переизлучения существенным образом зависят от выстроенностей межядерной оси молекулярных анионов и от типа ОИ. Максимально переизлучение в случае параллельности напряженности внешнего электрического поля и межядерной оси. Это может помочь контролировать степень выстроенности и облегчить управление ОИ в различных технических приложениях. Стоит также отметить сильную зависимость ширины спектра переизлучения от числа осцилляций в падающем аттосекундном импульсе.

Работа выполнена при финансовой поддержке в рамках ФЦП „Научные и научно-педагогические кадры инновационной России“ по ГК № 14.А18.21.1302

## Список литературы

- [1] Krausz F., Ivanov M. // Rev. Mod. Phys. 2009. Vol. 81. P. 163–234.
- [2] Sansone G., Kelkensberg F., Pérez-Torres J.F. et al. // Nature. 2010. Vol. 465. P. 763–766.
- [3] Мессу Г. Отрицательные ионы. М.: Мир, 1979. 754 с.
- [4] Смирнов Б.М. Отрицательные ионы. М.: Атомиздат, 1978. 176 с.
- [5] Астапенко В.А. // ЖЭТФ. 2011. Т. 139. Вып. 2. С. 228–234.
- [6] Frolov M.V., Manakov N.L., Pronin E.A. // Phys. Rev. Lett. 2003. Vol. 91. P. 053 003–1–053 003–4.
- [7] Демков Ю.Н., Островский В.Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике. Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1975. 240 с.
- [8] Матвеев В.И. // ЖЭТФ. 2003. Т. 124. № 5 (11). С. 1023–1029.
- [9] Есеев М.К., Матвеев В.И. // ЖТФ. 2008. Т. 78. Вып. 8. С. 28–33.
- [10] Есеев М.К., Матвеев В.И. // Опт. и спектр. 2008. Т. 104. № 6. С. 885–894.
- [11] Есеев М.К., Матвеев В.И., Абикулова Н.В. // Опт. и спектр. 2009. Т. 106. № 2. С. 231–236.
- [12] Есеев М.К., Матвеев В.И. // Письма в ЖТФ. 2009. Т. 35. Вып. 23. С. 47–54.
- [13] Физическая энциклопедия. Том 3 / Под ред. А.М. Прохорова. М.: Изд-во „Большая Российская энциклопедия“, 1992. С. 672.
- [14] Baltakov A.S., Dolmatov V.K., Manson S.T. et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2004. Vol. 37. P. 3837–3846.