

СПЕКТРОСКОПИЯ АТОМОВ И МОЛЕКУЛ

УДК 539.184;539.186.22;537.872;539.122.2

ИССЛЕДОВАНИЕ КОРРЕЛЯЦИОННЫХ ЭФФЕКТОВ ПРИ ПЕРЕИЗЛУЧЕНИИ АТОМОМ ГЕЛИЯ УЛЬТРАКОРОТКИХ ИМПУЛЬСОВ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ

© 2008 г. М. К. Есеев, В. И. Матвеев

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

E-mail: eseev.marat@pomorsu.ru

Поступила в редакцию 10.10.2007 г.

Критерием корректности компактных аналитических волновых функций атомов является расчет энергии основного состояния. Однако такая проверка является по сути своей статической. Цель данной работы – исследование степени учета электронных корреляций в различных простых аналитических волновых функциях в динамическом процессе переизлучения атомом гелия ультракоротких импульсов электромагнитного поля. Даны непосредственные рекомендации по использованию конкретных аналитических волновых функций, которые могут быть полезны при простых вычислениях и оценках динамических процессов.

PACS: 03.65.-w, 34.10.+x, 31.25.Eb, 34.50.Fa

ВВЕДЕНИЕ

В атомной физике при исследовании проблем двухэлектронной динамики обычно выбирают атом гелия. Центральный потенциал его ядра сравнительно слабый, и на движение атомных электронов, находящихся в стационарных состояниях, заметно влияет двухэлектронное взаимодействие. Оно же оказывается существенным и при рассмотрении электронных переходов в атоме гелия при взаимодействии с внешними электромагнитными полями. В данной работе преследуется цель исследования степени учета электронных корреляций в некоторых простых аналитических волновых функциях основного состояния в динамическом процессе переизлучения атома гелия или гелиеподобного иона при взаимодействии с ультракороткими импульсами электромагнитного поля. Под ультракороткими импульсами в данной работе понимаются импульсы, длительность которых меньше характерных периодов времени для атома-мишени. Такие импульсы могут иметь различное происхождение (см., например, обзоры [1–3] и ссылки в работах [4, 5]), но могут быть и полями движущихся с релятивистской или ультрарелятивистской скоростью высокозаряженных тяжелых ионов. Например, в экспериментах [6] исследовались неупругие процессы в атоме гелия при столкновении с ионом урана U^{92+} с энергией 1 ГэВ/нуклон и моделировался сверхинтенсивный импульс ($I > 10^{19}$ Вт/см²) длительностью порядка 10^{-18} с. Напряженность электрического поля в такого рода ультракоротких импульсах сопоставима с внутриатомным полем или превосходит его.

Поэтому в настоящей работе на характеристики поля ультракороткого импульса не налагаются ограничения, связанные с применением теории возмущений, и используются непertурбативные подходы. Проведено сравнительное исследование степени учета электронных корреляций при расчетах спектральных и угловых характеристик процесса переизлучения атомом гелия ультракороткого импульса для нескольких распространенных аппроксимаций волновых функций основного состояния.

Существуют различные подходы к учету межэлектронного взаимодействия при описании внутриатомных процессов. Можно выделить следующие. Это численное решение уравнения Шредингера по методу Хартри–Фока с получением атомных орбиталей, различные аналитические аппроксимации атомных орбиталей Хартри–Фока (Слэтера–Зенера, гауссовы и др.). Отдельно необходимо упомянуть хиллераасовские волновые функции (ВФ), имеющие достаточно простой аналитический вид, включающий в качестве аргумента $u = r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$, где $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ – координаты атомных электронов. В своих первых работах Хиллераас использовал [7] трехпараметрическую функцию. Параметры находились вариационным способом. Далее число параметров и вид функций усложнились, что приводило к более точному расчету, например, энергии основного состояния гелия. На сегодняшний день она известна с точностью до 35 знаков после запятой, при этом число варьируемых параметров и термов превышает 10^4 [8]. Однако использование таких многопараметрических функций для расчетов процессов с гелиевыми ато-

мами также затруднительно, как и числовых таблиц Хартри–Фока. Поэтому в последнее время вновь обращаются к компактным аналитическим волновым функциям [8, 9]. Критерием корректности этих функций является расчет энергии основного состояния. Однако такая проверка является по сути своей статической. Кроме того, как было показано еще в работе Барлетта [10] по расчету среднеквадратичного отклонения при определении энергии основного состояния, учет электронных корреляций не является полным для хиллераасовских волновых функций. Данные функции не могут являться точными решениями уравнения Шредингера для атома гелия даже при неограниченном числе варьируемых параметров. Энергия, рассчитанная с использованием хиллераасовских волновых функций, имеет сингулярный характер в областях, где $\mathbf{r}_1 \rightarrow 0$, $\mathbf{r}_2 \rightarrow 0$ или $\mathbf{r}_{12} \rightarrow 0$. Эти области физически соответствуют двойным и тройным столкновениям электронов и ядра атома гелия. Существуют различные варианты учета этих особенностей в аналитических ВФ, примером таких работ являются [8, 11, 12]. В недавней работе [13] обсуждается поведение различных коррелированных ВФ при однократной и двойной фотоионизации атома гелия. Следует подчеркнуть, что целью настоящей работы является проверка корректности волновых функций в таких динамических процессах переизлучения, спектры которых выражаются только через волновые функции основного состояния, именно по этой причине в работе мы ограничиваемся расчетами полных спектров (т.е. просуммированных по всем парциальным). Таким образом, представляется необходимым сформулировать простой динамический критерий корректности для различных волновых функций основного состояния на основе спектра переизлучения атома гелия.

Возможность динамического учета электронных корреляций в процессах переизлучения в данной работе обусловлена следующим: как показано в работе [4], спектры и угловые распределения переизлученного многоэлектронным атомом ультракороткого импульса (после суммирования по полному набору конечных состояний атомных электронов) выражаются только через волновые функции основных состояний и тем самым неявно учитывают электронные корреляции в динамических процессах. Приведем исследуемые простые аналитические волновые функции основного состояния атома гелия. Во-первых, это волновая функция без учета электронных корреляций как симметризованное произведение водородоподобных функций

$$\begin{aligned} \Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \Psi_{0,0,0}(r_1, \theta_1, \varphi_1) \Psi_{0,0,0}(r_2, \theta_2, \varphi_2) = \\ &= Z^3 e^{-Z(r_1+r_2)} / \pi, \end{aligned} \quad (1)$$

где $Z = 2$ – заряд голого ядра атома гелия [14]. Если использовать модель экранировки, то получим [15] ВФ, построенную из водородоподобных ВФ без учета электронных корреляций с введением эффективного заряда ядра $Z_{\text{ef}} = 2 - 5/16$:

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = Z_{\text{ef}}^3 e^{-Z_{\text{ef}}(r_1+r_2)} / \pi. \quad (2)$$

Последняя ВФ не учитывает электронные корреляции, не сводящиеся к приближению среднего поля.

Для учета электронных корреляций в атоме гелия можно воспользоваться трехпараметрической хиллераасовской ВФ основного состояния [7]

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = A e^{-Zs} (1 + a_1 u + a_2 t^2), \quad (3)$$

где $s = r_1 + r_2$, $t = r_1 - r_2$,

$$u = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| = \sqrt{r_1^2 + r_2^2 - 2r_1 r_2 (\sin \theta_1 \sin \theta_2 \cos(\varphi_1 - \varphi_2) + \cos \theta_1 \cos \theta_2)},$$

индексы 1 и 2 нумеруют сферические координаты первого и второго электронов, варьируемые параметры $A = 1.32135$, $Z = 1.816$, $a_1 = 0.3$, $a_2 = 0.13$.

Также приведем шестипараметрическую хиллераасовскую волновую функцию основного состояния [16]

$$\begin{aligned} \Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \\ &= A e^{-Zs} (1 + a_1 u + a_2 t^2 + a_3 s + a_4 s^2 + a_5 u^2), \end{aligned} \quad (4)$$

где варьируемые параметры $A = 1.38189$, $Z = 1.818$, $a_1 = 0.353$, $a_2 = 0.128$, $a_3 = -0.101$, $a_4 = 0.033$, $a_5 = -0.032$.

Приведем теперь предложенные в последнее время простые аналитические волновые функции, описывающие атом гелия. Достоинства этих

функции в сравнительной простоте учета межэлектронного взаимодействия без большого числа варьируемых параметров. Мы будем рассматривать компактные волновые функции, предложенные в [8],

$$\begin{aligned} \Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= A_1 e^{-2s} [(1 + u/2) e^{-0.68u}] \times \\ &\times (1 + 0.25su + 0.15t^2 - 0.02125u^2). \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \Psi_0^f(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= A_2 e^{-2s} [(1 + u/2) e^{-1.013u}] \times \\ &\times (1 + 0.2119su + 0.1406t^2 - 0.003u^2). \end{aligned} \quad (6)$$

Здесь нормирующие множители $A_1 = 2.4142$, $A_2 = 3.5064$. Отличие последних приведенных функций в точности расчета энергии основного состо-

яния ($\epsilon_i = -2.9006; -2.9012$ ат. ед.). Кроме того, мы будем сравнивать эти ВФ с простой аналитической функцией, предложенной в [11],

$$\Psi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = Ae^{-2s} [(1 + ue^{-au}/2)] (\text{ch}(\lambda r_1) + \text{ch}(\lambda r_2) + bt^2), \quad (7)$$

где $\lambda = 0.68, a = 0.17, b = 0.06$. Нормирующий множитель $A = 0.7024$. Данные волновые функции позволяют вычислить энергию основного состояния с несколько меньшей точностью, чем многопараметрические хиллераасовские ВФ, но более корректно описывают поведение системы в особых точках $\mathbf{r}_1 \rightarrow 0, \mathbf{r}_2 \rightarrow 0$ или $\mathbf{r}_{12} \rightarrow 0$, что соответствует двойным и тройным столкновениям электронов и ядра.

ПЕРЕИЗЛУЧЕНИЕ УЛЬТРАКОРОТКОГО ИМПУЛЬСА

Пусть ультракороткий импульс электромагнитного поля гауссовой формы взаимодействует с атомом гелия, налетая на него, как это показано на рис. 1. По сути дела на атом падает плоская электромагнитная волна в виде ультракороткого импульса длительностью τ . Напряженность электрического поля импульса задается выражением [4]

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

$$\frac{d^2 W_{0n}}{d\omega d\Omega_k} = \frac{1}{(2\pi)^2 c^3 \omega} \left| \left\langle \Phi_n \left| \sum_a^N \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r}_a) \left[\frac{\partial V^*(\omega)}{\partial \mathbf{r}_a} \times \mathbf{n} \right] \exp\left(-i \int_{-\infty}^{\infty} V(t') dt'\right) \right| \Phi_0 \right\rangle \right|^2,$$

где ω – частота испущенного атомом фотона; $d\Omega_k$ – элементарный телесный угол, в который вылетает этот фотон, \mathbf{k} – его волновой вектор; Φ_0, Φ_n – ВФ основного и возбужденного состояний атома гелия, \mathbf{r}_a – координаты одного из атомных

электронов; $\left[\frac{\partial V(\omega)}{\partial \mathbf{r}_a} \times \mathbf{n} \right]$ – фурье-образ силы, действующей на электроны со стороны ультракороткого импульса. Данная формула описывает спектр излучения фотона с одновременным переходом атома из состояния Φ_0 в состояние Φ_n , т.е. парциальный спектр. Здесь

$$\left[\frac{\partial V(\omega)}{\partial \mathbf{r}_a} \times \mathbf{n} \right] = f_0(\omega) e^{-i\frac{\omega}{\omega_0} \mathbf{k}_0 \mathbf{r}_a} \left(\left[\mathbf{E}_0 \times \mathbf{n} \right] + i \frac{\omega}{\omega_0} \left[\mathbf{k}_0 \times \mathbf{n} \right] (\mathbf{E}_0 \mathbf{r}_a) \right),$$

$$f_0(\omega) = (\sqrt{\pi}/2\alpha) (e^{-(\omega - \omega_0)^2/4\alpha^2} + e^{-(\omega + \omega_0)^2/4\alpha^2})$$

где α – параметр затухания в гауссовом импульсе принимает значения $\alpha = 1/\tau$, ω_0 – частота налетающего ультракороткого импульса, \mathbf{k}_0 – его волновой вектор, \mathbf{E}_0 – амплитуда напряженности поля в ультракоротком электромагнитном импульсе.

Общей основой [17, 18] для непертурбативного рассмотрения вероятностей переизлучения ультракороткого импульса атомом является использование приближения внезапных возмущений [18], тесно связанного [17] с приближением эйконала [14]. Потенциал взаимодействия атомных электронов с импульсом электромагнитного поля гауссовой формы за счет соответствующего выбора калибровки [4] запишем в виде

$$V(t) = V(\{\mathbf{r}_a\}, t) = \sum_{a=1}^{a=N} \mathbf{E}(\mathbf{r}_a, t) \mathbf{r}_a,$$

где $\{\mathbf{r}_a\}$ – совокупность координат атомных электронов ($a = 1, \dots, N$). Для гелиеподобного атома число электронов $N = 2$.

Согласно [4], спектр испускания фотона в единицу телесного угла Ω_k с одновременным переходом атома из состояния Φ_0 в состояние Φ_n в результате действия ультракороткого импульса имеет вид (здесь и ниже мы приведем несколько необходимых нам формул из работы [4], представив их в удобной для нас форме)

– фурье-образ функции, задающей гауссову форму для налетающего импульса.

После суммирования по всем конечным состояниям атома Φ_n (полный набор) находим полный спектр излучения

$$\frac{d^2 W}{d\omega d\Omega_k} = \frac{1}{(2\pi)^2 c^3 \omega} \times \left\langle \Phi_0 \left| \sum_{a,b}^{N,N} e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}_a - \mathbf{r}_b)} \left[\frac{\partial V(\omega)}{\partial \mathbf{r}_a} \times \mathbf{n} \right] \left[\frac{\partial V^*(\omega)}{\partial \mathbf{r}_b} \times \mathbf{n} \right] \right| \Phi_0 \right\rangle, \quad (8)$$

где W – полная вероятность испускания фотона с произвольной судьбой атома, $\mathbf{r}_a, \mathbf{r}_b$ – координаты атомных электронов. Двойная сумма берется по числу N всех электронов, входящих в систему. Разделяя в выражении (8) суммирование по индексам $a = b$ и $a \neq b$, получим, что спектр испущенных фотонов можно разбить на две части

$$d^2 W/d\omega d\Omega_k = d^2 W_1/d\omega d\Omega_k + d^2 W_2/d\omega d\Omega_k, \quad (9)$$

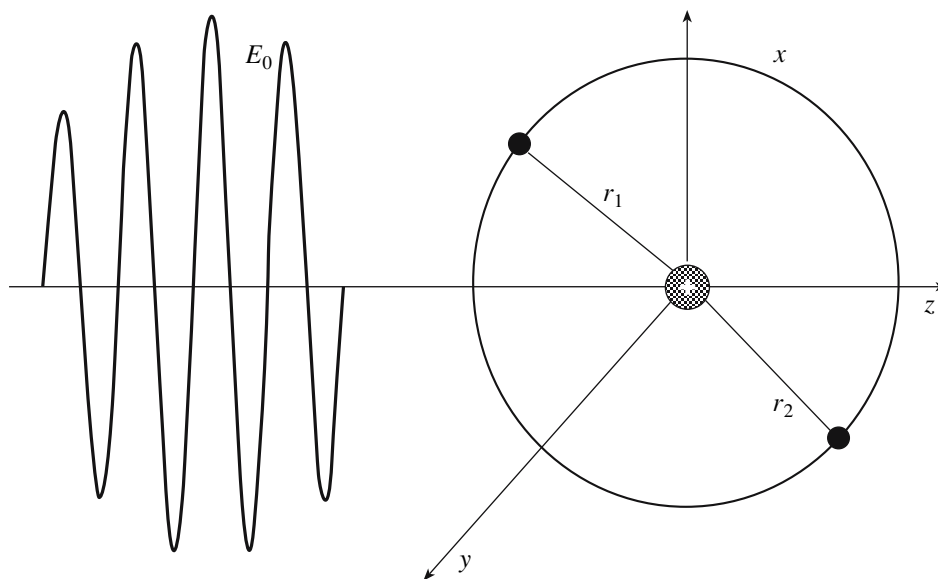


Рис. 1. Взаимодействие ультракороткого импульса электромагнитного поля гауссовой формы с атомом гелия. Плоская электромагнитная волна линейно поляризована. Вектор напряженности электрического поля расположен в плоскости XOZ .

где, согласно [4], первое слагаемое в правой части (9) пропорционально N числу атомных электронов и описывает некогерентную часть спектра, второе слагаемое пропорционально $N(N - 1)$ и описывает когерентную и некогерентную части спектра.

Если использовать водородоподобные ВФ (1), (2), то спектр получается в аналитическом виде, доступном для непосредственного анализа каждого из слагаемых в выражении (9). Выражение для первой части спектра, согласно [4], в сферических координатах имеет вид

$$d^2W_1/d\omega d\Omega_k = (1/2\pi^2 c^3 \omega) |f_0(\omega)|^2 \times \times E_0^2 (1 - \sin^2 \theta \cos^2 \varphi + (\omega^2/c^2 Z_{ef}^2) \sin^2 \theta), \quad (10)$$

где θ, φ – сферические углы вылета переизлученного атомом фотона. После усреднения по углам имеем

$$dW_1/d\omega = = (4/3\pi c^3 \omega) |f_0(\omega)|^2 E_0^2 [1 + \omega^2/(c^2 Z_{ef}^2)]. \quad (11)$$

Расчет второй части спектра может быть проведен аналитически также только с водородоподобными ВФ (2) в модели экранировки. Учет корреляций в ВФ (3)–(7) приводит к необходимости численного расчета соответствующих матричных элементов. Приведем аналитические выражения для $d^2W_2/d\omega d\Omega_k$ и $dW_2/d\omega$, полученные в [4] для водородоподобных ВФ (1), (2). Согласно [4], угло-

Таблица 1

Волновые функции	ВФ (1)	ВФ (2)	ВФ (4)	ВФ (7)	ВФ (5)	ВФ (6)
M_c, M_{ef}	0.25	0.3513	0.3955	0.4001	0.2861	0.2202
$dW_1/d\omega$, отн. ед., $\omega = \omega_0/4$	0.944	1	1.025	1.027	0.964	0.927
$E_{c1}, \omega = \omega_0/4$	-0.0562	0	0.025	0.027	-0.0361	-0.073
$dW_1/d\omega$, отн. ед., $\omega = \omega_0$	0.77	1	1.1	1.11	0.853	0.702
$E_{c1}, \omega = \omega_0$	-0.229	0	0.100	0.111	-0.147	-0.298
$dW_1/d\omega$, отн. ед., $\omega = 1\frac{3}{4}\omega_0$	0.734	1	1.117	1.129	0.829	0.656
$E_{c1}, \omega = 1\frac{3}{4}\omega_0$	-0.266	0	0.117	0.129	-0.171	-0.344

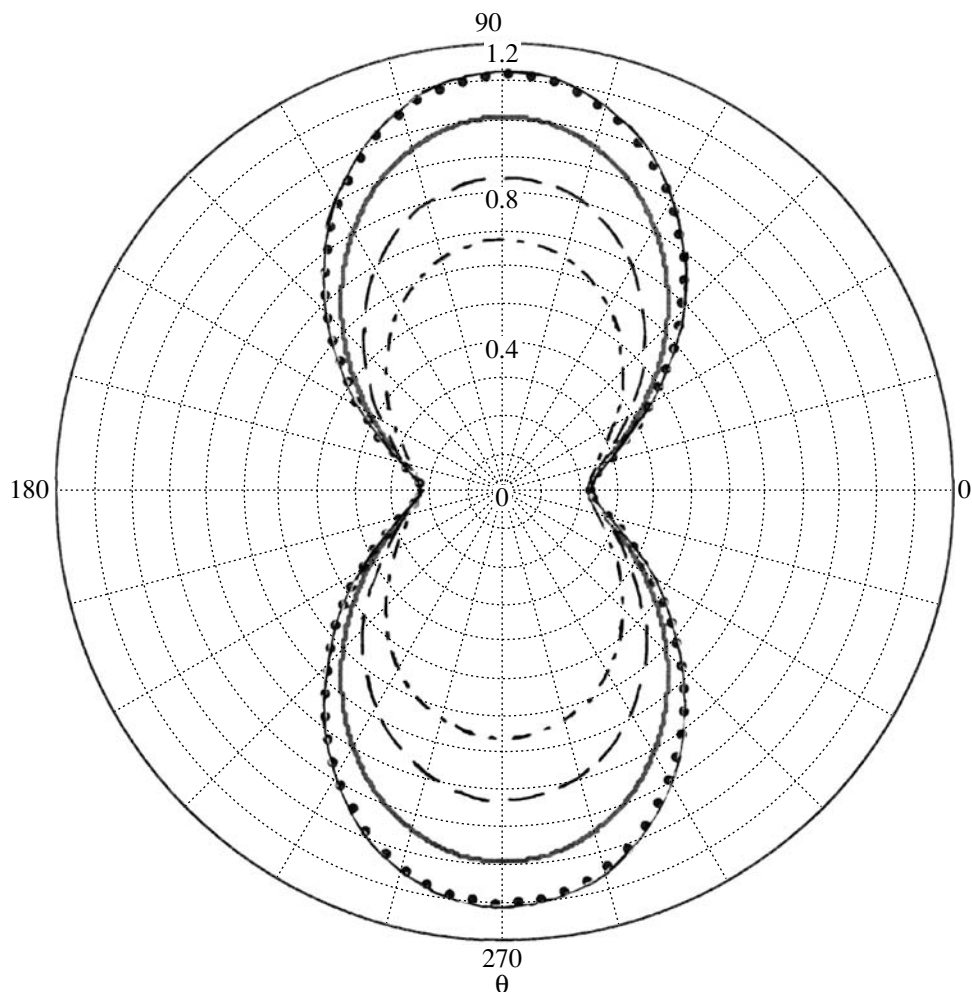


Рис. 2. Диаграмма направленности (первая часть спектра) в срезе $\varphi = \pi/4$ для частоты $\omega = \omega_0$. Жирная кривая – результат расчета с ВФ (2), тонкая сплошная – ВФ (7), точками обозначен расчет с ВФ (4), штриховая кривая – ВФ (5), штрихпунктирная кривая – ВФ (6).

вое распределение спектра $d^2W_2/d\omega d\Omega_k$ в сферических координатах имеет вид

$$\begin{aligned} \frac{d^2W_2}{d\omega d\Omega_k} &= \frac{1}{2\pi^2 c^3 \omega} |f_0(\omega)|^2 \times \\ &\times (E_0)^2 \left\{ \frac{4Z_{ef}^4}{[2Z_{ef}^2 + (\omega/c)^2(1 - \cos\theta)]^2} \right\}^2 \times \\ &\times \left\{ 1 - \sin^2\theta \cos^2\varphi - \frac{4\omega^2 \sin^2\theta \cos\theta \cos^2\varphi}{2Z_{ef}^2 c^2 + \omega^2(1 - \cos\theta)} + \right. \\ &\left. + \left[\frac{2\omega^2 \sin^2\theta \cos\varphi}{2Z_{ef}^2 c^2 + \omega^2(1 - \cos\theta)} \right]^2 \right\}. \end{aligned} \quad (12)$$

После интегрирования по углам полный спектр $dW_2/d\omega$ примет вид

$$dW_2/d\omega = |f_0(\omega)|^2 (E_0)^2 I(\beta) / (2\pi c^3 \omega), \quad (13)$$

где $\beta = \omega^2 / (2c^2 Z_{ef}^2)$, $I(\beta) = 8[5 + 2\beta(5 + 4\beta)] / [15(1 + 2\beta)^3]$.

При больших частотах имеем $I(\beta) \rightarrow 0$, при малых частотах $I(\beta) \rightarrow 8/3$.

Выписывая общее выражение для спектра (9) после интегрирования по углам вылета фотона замечаем, что его можно представить в виде [4]

$$\begin{aligned} dW/d\omega &= (2/3\pi c^3 \omega) |f_0(\omega)|^2 \times \\ &\times E_0^2 \{ N[1 + \omega^2 / (c^2 Z_{ef}^2)] + N(N - 1)3I(\beta)8 \}. \end{aligned} \quad (14)$$

Здесь множитель $N(N - 1)$ выделен по результатам суммирования слагаемых в выражении (8) с индексами $a \neq b$, обозначающими различные электроны. Вторая часть спектра пропорциональна $N(N - 1)$ и отвечает за смешанный (когерентный и некогерентный) характер излучения. Из последнего выражения можно сделать вывод о том, что в высокочастотной части спектра присутствует в основном некогерентное, а в низкочастотной – когерентное излучение.

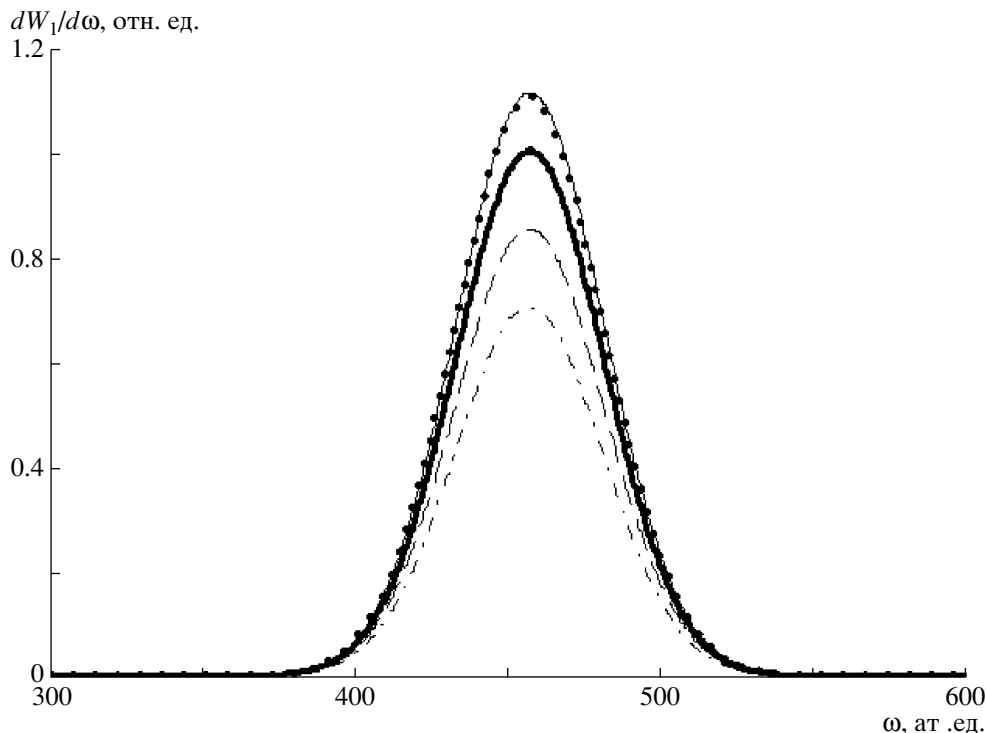


Рис. 3. Зависимость первой части спектра $dW_1/d\omega$ от частоты. Жирная кривая – результат расчета с ВФ (2), тонкая сплошная – ВФ (7), точками обозначен расчет с ВФ (4), штриховая кривая – ВФ (5), штрихпунктирная кривая – ВФ (6). Частота ультракороткого импульса $\omega_0 = 455.95$ ат. ед., напряженность электрического поля $E_0 = 2$ ат. ед.

АНАЛИЗ СПЕКТРА НЕКОГЕРЕНТНОЙ ЧАСТИ ИЗЛУЧЕНИЯ

Первая часть спектра излучения двухэлектронного атома связана с некогерентным излучением и пропорциональна $N=2$. Полученные соотношения (10) и (11) позволяют сравнительно легко найти диаграмму направленности и частотный спектр первой части излучения для водородоподобных ВФ (1), (2). Если использовать ВФ, учитывающие корреляции (3)–(7), то аналитические выражения в явном виде получить не удастся:

$$\begin{aligned} d^2W_1/d\omega d\Omega_k = \\ = (1/2\pi^2 c^3 \omega) |f_0(\omega)|^2 E_0^2 (1 - \sin^2 \theta \cos^2 \varphi + \\ + (\omega^2/c^2) \sin^2 \theta \langle \varphi_0 | r_1^2 \sin^2 \theta_1 \cos^2 \varphi_1 | \varphi_0 \rangle), \end{aligned} \quad (15)$$

где r_1, θ_1, φ_1 – сферические координаты одного из электронов в атоме гелия.

После интегрирования по углам вылета переизлученного фотона имеем

$$\begin{aligned} dW_1/d\omega = (4/3\pi c^3 \omega) |f_0(\omega)|^2 \times \\ \times E_0^2 (1 + (\omega^2/c^2) \langle \varphi_0 | r_1^2 \sin^2 \theta_1 \cos^2 \varphi_1 | \varphi_0 \rangle). \end{aligned} \quad (16)$$

Сопоставляя выражения (11) и (16), можно сделать вывод о том, что учет корреляций сказыва-

ется в первую очередь на различии между значением матричного элемента

$$\begin{aligned} M_c = \langle \varphi_0 | r_1^2 \sin^2 \theta_1 \cos^2 \varphi_1 | \varphi_0 \rangle = \\ = \langle \varphi_0 | r_2^2 \sin^2 \theta_2 \cos^2 \varphi_2 | \varphi_0 \rangle \end{aligned}$$

и $M_{ef} = 1/Z_{ef}^2$. Здесь $r_1, \theta_1, \varphi_1, r_2, \theta_2, \varphi_2$ – сферические координаты электронов в атоме гелия.

Непосредственный учет корреляций можно произвести из расчета относительного отклонения M_c от M_{ef} :

$$E_{c1} = (M_c - M_{ef})/M_{ef}. \quad (17)$$

Соответствующие матричные элементы были вычислены с использованием численного интегрирования по методу Монте-Карло. Результаты расчетов спектра и относительного отклонения (17) при длительности ультракороткого импульса $\tau = 10^{-18}$ с ($\omega_0 = 455.95$ ат. ед.) и напряженности электрического поля $E_0 = 2$ ат. ед. приведены в табл. 1.

Относительное отклонение вероятностей вылета фотонов (17) при учете корреляций в ВФ (4), (7) по отношению к расчету с ВФ (2) достигает 13%. Отрицательные значения относительного отклонения (17) свидетельствуют о занижении вероятностей излучения фотонов с использованием не-

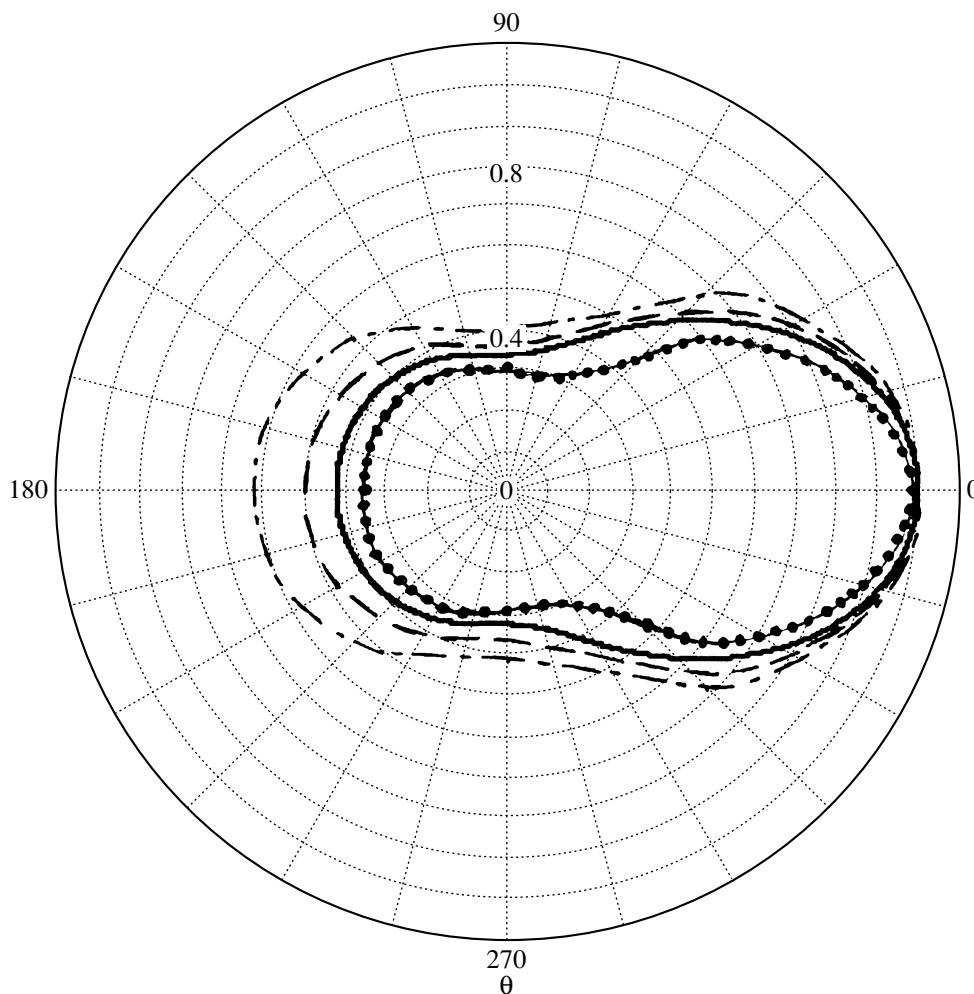


Рис. 4. Диаграмма направленности (вторая часть спектра) в срезе $\varphi = \pi/4$ для частоты $\omega = \omega_0/4$. Жирная кривая – результат расчета с ВФ (2), тонкая сплошная – ВФ (7), точками обозначен расчет с ВФ (4), штриховая кривая – ВФ (5), штрихпунктирная кривая – ВФ (6).

которых коррелированных ВФ по отношению к расчету некоррелированной ВФ (2). Анализ приведенных данных однозначно указывает на значительное увеличение доли некогерентного излучения при учете электронных корреляций в волновых функциях (4), (7). Расчет с ВФ (5), (6), напротив, уменьшает долю некогерентного излучения до 34% по отношению к расчету с ВФ (2). Наибольшее относительное увеличение вероятностей вылета фотонов по первой части спектра в результате корреляций достигается при $\omega \rightarrow \infty$, при этом $\omega_0 \rightarrow \omega$. Оно стремится к $E_{c1} = 0.1389$, где M_c взято для ВФ (7).

Угловое распределение для первой части спектра $d^2W_1/d\omega d\Omega_k$ не меняет своей формы при учете корреляций, однако при этом значительно изменяются значения вероятностей вылета фотона во всех направлениях. Следует отметить сильно меняющуюся направленность излучения с изменением частоты испущенного фотона вблизи частоты

ω_0 ультракороткого электромагнитного импульса. В высокочастотной асимптотике диаграмма направленности принимает вид, схожий с диаграммой для дипольного излучения.

Изобразим характерную диаграмму направленности $d^2W_1/d\omega d\Omega_k$ в сечении плоскостью, параллельной плоскости OXY , при использовании различных ВФ (рис. 2). На рисунке график нормирован на значение $d^2W_1/d\omega d\Omega_k(\pi/2, \pi/4)$, $\varphi = \pi/4$, $\theta = \pi/2$ для частоты $\omega = \omega_0$, рассчитанное с помощью водородоподобной ВФ (2). При построении использовались полученные выражения (10) и (15). После интегрирования по углам зависимость первой части спектра $dW_1/d\omega$ от частоты при учете корреляций (ВФ (4), (7)) расположится выше или ниже (ВФ (5), (6)), чем при использовании ВФ (2), но вид зависимости останется прежним (рис. 3).

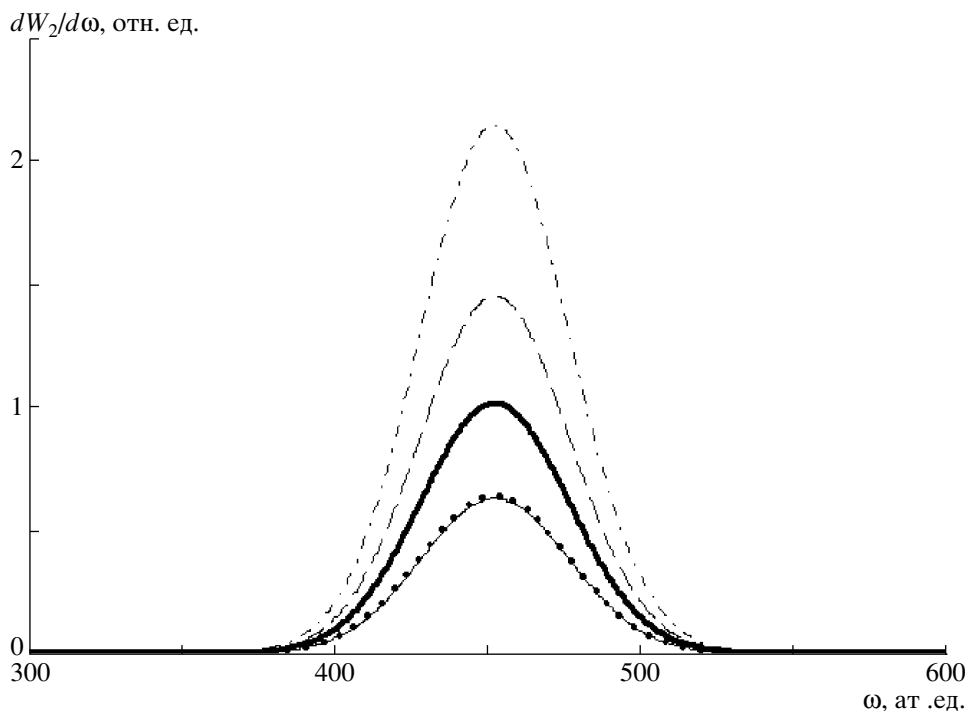


Рис. 5. Зависимость второй части спектра $dW_2/d\omega$ от частоты. Жирная кривая – результат расчета с ВФ (2), тонкая сплошная – ВФ (7), точками обозначен расчет с ВФ (4), штриховая кривая – ВФ (5), штрихпунктирная кривая – ВФ (6). Частота ультракороткого импульса $\omega_0 = 455.95$ ат. ед., напряженность электрического поля $E_0 = 2$ ат. ед.

АНАЛИЗ ВТОРОЙ ЧАСТИ СПЕКТРА ИЗЛУЧЕНИЯ

Вторая часть спектра в выражении (9) содержит в себе как когерентное, так и некогерентное излучение. Выделить эти части аналитически не представляется возможным. Однако, согласно [4], можно сделать вывод о том, что в высокочастотной части спектра присутствует в основном некогерентное излучение. В низкочастотной части спектра – когерентное излучение. Поэтому при исследовании когерентной части нам необходима низкочастотная асимптотика, некогерентной – высокочастотная асимптотика. Приведем данные расчетов по второй части спектра (9). Угловое распределение второй части спектра при использовании водородоподобной ВФ (2) можно построить по выражению (12). При использовании ВФ, учитывающих корреляции (3)–(7), аналитические выражения в явном виде получить не удается:

$$\begin{aligned}
 d^2W_2/d\omega d\Omega_k = & (1/2\pi^2 c^3 \omega) |f_0(\omega)|^2 \times \\
 & \times E_0^2 [(1 - \sin^2 \theta \cos^2 \varphi) \langle \varphi_0 | \cos \delta | \varphi_0 \rangle - \\
 & - (\omega/c) \sin \theta \cos \theta \cos \varphi \langle \varphi_0 | \sin \delta (r_1 \sin \theta_1 \cos \varphi_1 - \\
 & - r_2 \sin \theta_2 \cos \varphi_2) | \varphi_0 \rangle + \\
 & + (\omega/c)^2 \sin^2 \theta \langle \varphi_0 | \cos \delta (r_1 \sin \theta_1 \cos \varphi_1 \times \\
 & \times r_2 \sin \theta_2 \cos \varphi_2) | \varphi_0 \rangle], \quad (18)
 \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
 \delta = & \frac{\omega}{c} \{ r_1 [\sin \theta \sin \theta_1 \cos(\varphi - \varphi_1) + \\
 & + \cos \theta \cos \theta_1 - \cos \theta_1] - \\
 & - r_2 [\sin \theta \sin \theta_2 \cos(\varphi - \varphi_2) + \cos \theta \cos \theta_2 - \cos \theta_2] \}.
 \end{aligned}$$

Соответствующие матричные элементы были вычислены с использованием численного интегрирования по методу Монте-Карло. В результате диаграмма направленности примет характерный вид, изображенный на рис. 4. На рисунке график нормирован на значение $d^2W_2/d\omega d\Omega_k(\pi/2, \pi/4)$, $\varphi = \pi/4$, $\theta = 0$ для частоты $\omega = \omega_0/4$, рассчитанное с помощью водородоподобной ВФ (2).

Следует отметить, что при больших частотах диаграмма направленности вытягивается по направлению волнового вектора \mathbf{k}_0 ультракороткого импульса электромагнитного поля. Учет корреляций существенно меняет диаграмму направленностей по форме и абсолютным значениям.

Зависимость второй части полного спектра $dW_2/d\omega$ от частоты после интегрирования по телесному углу с использованием водородоподобных ВФ (2) может быть записана в аналитическом виде (13). При использовании ВФ (3)–(7) необходимо провести численное интегрирование выражения (18). Данная процедура расчета также была проделана по методу Монте-Карло с учетом

Таблица 2

Волновые функции	ВФ (2)	ВФ (7)	ВФ (4)	ВФ (5)	ВФ (6)
$dW_2/d\omega$, $\omega = \omega_0/4$, отн. ед.	1	0.877	0.879	1.039	1.147
E_{c2} , $\omega = \omega_0/4$	0	-0.123	-0.121	0.039	0.147
$dW_2/d\omega$, $\omega = \omega_0$, отн. ед.	1	0.620	0.630	1.429	2.114
E_{c2} , $\omega = \omega_0$	0	-0.380	-0.370	0.429	1.114
$dW_2/d\omega$, $\omega = 1\frac{3}{4}\omega_0$, отн. ед.	1	0.441	0.421	1.799	2.335
E_{c2} , $\omega = 1\frac{3}{4}\omega_0$	0	-0.559	-0.579	0.799	1.335

многомерности интегралов. Вид рассчитанного спектра для различных волновых функций при $\omega_0 = 455.952$ ат. ед. и напряженности электрического поля $E_0 = 2$ ат. ед. представлен на рис. 5. Из последнего графика видно, что учет корреляций в ВФ (4), (7) уменьшает вероятности вылета переизлученных фотонов второй части спектра, при использовании ВФ (5), (6) вероятность вылета увеличивается по отношению к расчету с ВФ (2).

Численные результаты для спектра представлены в табл. 2. Непосредственный учет корреляций можно произвести из расчета относительно отклонения второй части полного спектра $(dW_2/d\omega)_{ef}$, рассчитанной с ВФ (2), от $(dW_2/d\omega)_c$, рассчитанной с ВФ, учитывающими корреляции электронов,

$$E_{c2} = \left[\left(\frac{dW_2}{d\omega} \right)_c - \left(\frac{dW_2}{d\omega} \right)_{ef} \right] / \left(\frac{dW_2}{d\omega} \right)_{ef}. \quad (19)$$

Отрицательные значения относительного отклонения (19) в табл. 2 свидетельствуют о занижении вероятностей излучения фотонов с использованием некоторых коррелированных ВФ по отношению к расчету с некоррелированной ВФ (2). По представленным данным для полного спектра и относительного отклонения (19) можно сделать вывод о значительном уменьшении доли когерентного излучения и всей второй части спектра при учете электронных корреляций в волновых функциях (4), (7). Расчет с ВФ (5), (6), напротив, увеличивает долю когерентного излучения в несколько раз по отношению к расчету с ВФ (2). Вторая часть спектра увеличивается или уменьшается с учетом корреляций в зависимости от выбора ВФ. В низкоэнергетической части спектра различие меньше, чем в высокоэнергетической части спектра.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, сопоставляя результаты первой и второй частей спектра, можно сделать вывод о диаметрально противоположном поведении волновых функций (4), (7) и (5), (6), учитывающих корреляции. Несомненно, что учет электронных корреляций в волновых функциях меняет диаграмму направленности и спектр переизлученных фотонов.

В данном случае можно сделать следующий вывод. Включение корреляций должно эффективно увеличивать долю некогерентного излучения в спектре по отношению к когерентному. Причина состоит в том, что корреляции максимально "расталкивают" электроны и они, находясь в различных точках пространства, оказываются в различных полях, созданных ультракоротким импульсом. Это и приводит к несогласованному излучению этими электронами фотонов. То есть первая часть спектра в выражении (9) должна увеличиваться при учете корреляций, а вторая часть спектра – уменьшаться. Согласно (14), некогерентное излучение доминирует при высоких частотах, а когерентное при низких. Соответственно наиболее сильно учет корреляций сказывается для высокоэнергетической части спектра. Видно, что расчетные данные подтверждают эту гипотезу для волновых функций (4), (7). Расчет с волновыми функциями (5), (6) не дает таких согласованных результатов. Следовательно, можно предположить, что последние ВФ не могут корректно описывать атом гелия в динамических процессах взаимодействия с ультракороткими импульсами электромагнитного поля. Аналогичное поведение этих ВФ было отмечено авторами ранее при оценках полных вероятностей неупругих процессов в атоме гелия.

Подводя итог, можно отметить следующее.

Учет электронных корреляций заметно меняет полный спектр переизлученных фотонов при взаимодействии атома гелия с ультракоротким импульсом электромагнитного поля гауссовой формы.

Когерентная часть спектра уменьшается при включении корреляций, а некогерентная увеличивается. Расчет спектра с представленной в [11] аналитической ВФ (7) и хиллераасовскими ВФ (3), (4) дает согласованные результаты. Если принять во внимание тот факт, что ВФ (7) корректно описывает состояние двухэлектронной системы в особых точках, то несомненно целесообразность использования данной ВФ для расчета динамических процессов возбуждения, ионизации и переизлучения двухэлектронных систем.

Расчет с представленными в [8] компактными волновыми функциями (5), (6) свидетельствует о некорректном описании динамических процессов с использованием данных ВФ.

Особенно сильно влияние электронных корреляций на вероятности процессов переизлучения сказывается в области высоких частот.

Важно отметить, что расчет спектров переизлучения ультракоротких импульсов электромагнитного поля двухэлектронным атомом сводится в конечном случае к усреднению по основному состоянию атома гелия. Это позволяет исследовать непосредственно ВФ основного состояния. Результаты расчета с различными волновыми функциями однозначно свидетельствуют о несомненном влиянии учета межэлектронных корреляций на процесс переизлучения ультракороткого импульса.

Таким образом, можно говорить о том, что приближение внезапных возмущений дает возможность осуществить сравнительно простую и эффективную динамическую проверку ВФ для многоэлектронных атомов с целью выяснения возможностей учета межэлектронных взаимодействий.

Несомненно, что динамическая проверка приближенных ВФ по нахождению полных спектров переизлучения при взаимодействии атома гелия с ультракороткими импульсами электромагнитного поля позволяет уточнить их аналитическую структуру и выяснить степень учета межэлектронных корреляций.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Agostini P., DiMauro L.* // Rep. Prog. Phys. 2004. V. 67. P. 813.
2. *Reider G.A.J.* // J. Phys. D. 2004. V. 37. P. R37.
3. *Posthumus J.H.* // Rep. Prog. Phys. 2004. V. 67. P. 623.
4. *Матвеев В.И.* // ЖЭТФ. 2003. Т. 124. № 5(11). С. 1023.
5. *Матвеев В.И., Гусаревич Е.С., Пауев И.Н.* // ЖЭТФ. 2005. Т. 127. № 6. С. 1187.
6. *Moshhammer R., Schmitt W., Ullrich J. et al.* // Phys. Rev. Lett. 1997. V. 79. P. 3621.
7. *Hylleraas E.A.* // Z. für Phys. 1928. V. 48. № 7–8. P. 469.
8. *David C.W.* // Phys. Rev. A. 2006. V. 74. № 1. P. 014501; № 5. P. 059904.
9. *Ancarani L.U., Rodriguez K.V., Gasaneo G.* // J. Phys. B. 2007. V. 40. P. 2695.
10. *Bartlett J.H., Gibbons J.J., Dunn C.G.* // Phys. Rev. 1935. V. 47. № 9. P. 679.
11. *Sech C.Le.* // J. Phys. B. 1997. V. 30. P. L47.
12. *Фок В.А.* // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1954. Т. 18. С. 161.
13. *Друкарев Е.Г.* // УФН. 2007. Т. 177. № 8. С. 877.
14. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М.: Наука, 1989. 768 с.
15. *Бете Г., Солпитер Э.* Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. М.: ГИФМЛ, 1960. 565 с.
16. *Green L.C., Mulder M.M., Milner P.C.* // Phys. Rev. 1953. V. 91. № 1. P. 35.
17. *Eichler J.* // Phys. Rev. A. 1977. V. 15. P. 1856.
18. *Дыхне А.М., Юдин Г.Л.* // УФН. 1978. Т. 125. С. 377.