

СПЕКТРЫ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ АТОМОВ
С УЛЬТРАКОРОТКИМИ ИМПУЛЬСАМИ
ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ

© 2009 г. М. К. Есеев, В. И. Матвеев, Н. В. Абикулова

*Поморский государственный университет им. М.В. Ломоносова, 163002 Архангельск, Россия**E-mail: eseev.marat@pomorsu.ru*

Поступила в редакцию 23.07.2008 г.

Действие ультракороткого импульса электромагнитного поля на атом приводит к встряхиванию последнего и обуславливает различные электронные переходы внутри атома. Эти процессы сопровождаются переизлучением налетающего ультракороткого импульса. Исследуется связь между спектром переизлученных фотонов ультракороткого импульса и переходом атомных электронов в конкретные состояния. Полученные парциальные спектры переизлучения могут позволить связать диаграммы направленности с вероятностью возбуждения атомов в различные состояния.

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

ВВЕДЕНИЕ

Действие ультракороткого импульса электромагнитного поля на атом приводит к встряхиванию последнего и обуславливает различные электронные переходы внутри атома. Это сопровождается переизлучением налетающего ультракороткого импульса. В данной работе исследуется связь между спектром переизлученных фотонов ультракороткого импульса и переходом атомных электронов в конкретные состояния. Под ультракороткими импульсами [1] в данной работе понимаются импульсы, длительность которых меньше характерных периодов времени для атома-мишени. Такие импульсы могут иметь различное происхождение (см., например, ссылки в работах [2, 3]), но могут быть и полями движущихся с релятивистской или ультрарелятивистской скоростью высокозаряженных тяжелых ионов. Поэтому в настоящей работе на характеристики поля не налагаются ограничения, связанные с применением теории возмущений, и используются непертурбативные подходы. Впервые полный спектр переизлучения при взаимодействии с ультракоротким импульсом атома был получен в [2]. Позже на основе расчета полного спектра в [4] были предложены способы учета межэлектронных корреляций в многоэлектронных атомах и предложены динамические критерии корректности аналитических волновых функций двухэлектронных систем при взаимодействии с ультракороткими импульсами и многозарядными ионами [5, 6]. Однако расчет парциальных спектров переизлучения до сих пор не был сделан. Вместе с тем они вызывают значительный интерес в связи с тем, что позволяют связать диаграммы направленности с вероятностью возбуждения атомов в различные состояния

дискретного спектра и вероятностью ионизации. Как показано в этой работе, диаграммы направленности переизлучения имеют характерные количественные и качественные отличия в зависимости от конечного состояния атома. Таким образом, можно, детектируя спектр переизлучения, предсказать конечные состояния атомов. Объектом исследования выберем водородоподобные атомы и ионы. Однако наши выводы можно расширить и на многоэлектронные системы.

ПАРЦИАЛЬНЫЙ СПЕКТР
ПЕРЕИЗЛУЧЕНИЯ АТОМОМ
УЛЬТРАКОРОТКИХ ИМПУЛЬСОВ
ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ

Пусть ультракороткий импульс электромагнитного поля гауссовой формы взаимодействует с атомом. Напряженность электрического поля импульса задим выражением [2]

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

где α – параметр затухания в гауссовом импульсе, так что длительность импульса $\tau \approx \alpha^{-1}$, ω_0 – круговая частота, \mathbf{k}_0 – волновой вектор, такой что $|\mathbf{k}_0| = \omega_0/c$, \mathbf{E}_0 – амплитуда напряженности поля в ультракоротком электромагнитном импульсе. Как и в [2], будем считать длительность ультракороткого импульса такой, что применимо приближение внезапных возмущений. Тогда согласно [2], спектр испускания фотона в единицу телесного угла Ω_k с одновременным переходом N -электронного атома из состояния φ_n в состояние φ_m в результате действия ультракороткого импульса имеет вид

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

где суммирование происходит по всем атомным электронам, определяемым радиусами-векторами \mathbf{r}_a , ω – частота испущенного атомом фотона, $d\Omega_k$ – элементарный телесный угол, в который вылетает этот фотон, \mathbf{k} – его волновой вектор, равный $(\omega/c)\mathbf{n}$. Входящее выражение

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

есть фурье-образ силы, действующей со стороны электромагнитного поля импульса на атомные электроны. Здесь $f_0(\omega)$ – функция, возникающая вследствие гауссовой формы налетающего импульса:

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

Запишем парциальный спектр для водородоподобных ионов и атомов. При использовании водородоподобных волновых функций диаграмму направленности можно представить, используя известные формфакторы

$$F_{nm}(q) = \langle m | e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} | n \rangle,$$

$$\frac{d^2 W_{nm}}{d\Omega_k d\omega} = \frac{1}{(2\pi)^2 c^3 \omega} |f_0(\omega)|^2 \times \quad (2)$$

$$\times \left| [\mathbf{E}_0 \times \mathbf{n}] F_{nm}(q) - \frac{\omega}{\omega_0} [\mathbf{k}_0 \times \mathbf{n}] \mathbf{E}_0 \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} F_{nm}(q) \right|^2.$$

Здесь учтено, что

$$\langle \varphi_m | e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} (\mathbf{E}_0 \mathbf{r}) | \varphi_n \rangle = -\frac{1}{i} \mathbf{E}_0 \frac{\partial}{\partial \mathbf{q}} \langle \varphi_m | e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} | \varphi_n \rangle,$$

где импульс

$$\mathbf{q} = \mathbf{k} - (\omega/\omega_0)\mathbf{k}_0 + \eta \mathbf{E}_0,$$

$$\eta = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha} \exp\left\{-\frac{\omega_0^2}{4\alpha^2}\right\}.$$

Направим ось Z по направлению \mathbf{k}_0 налетающего ультракороткого импульса. В этом случае выпишем диаграмму направленности парциального спектра переизлучения

$$\begin{aligned} \frac{d^2 W_{nm}}{d\Omega_k d\omega} &= \frac{1}{(2\pi)^2 c^3 \omega} |f_0(\omega)|^2 E_0^2 \times \\ &\times \{ F_{nm}^2(q) (1 - \sin^2 \theta \cos^2 \phi) + \\ &+ 2(\omega/c) F_{nm}'(q) F_{nm}(q) A(\theta, \phi) \sin \theta \cos \theta \cos \phi + \\ &+ [(\omega/c) F_{nm}'(q) A(\theta, \phi) \cos \theta]^2 \}. \end{aligned} \quad (3)$$

В последнем соотношении θ, ϕ – сферические углы вылета переизлученного атомом фотона, $F_{nm}'(q)$ – производная формфактора по q ,

$$\begin{aligned} A(\theta, \phi) &= \\ &= \frac{\omega \sin \theta \cos \phi + c \eta E_0}{\sqrt{2\omega^2 (1 - \cos \theta) + 2\omega c E_0 \eta \sin \theta \cos \phi + c^4 E_0^2}}. \end{aligned}$$

При этом стоит отметить, что формфактор $F_{nm}(q)$ будет также зависеть от углов вылета переизлученных фотонов.

Для получения полного парциального спектра необходимо провести интегрирование выражения (3) по углам вылета фотона. При интегрировании теперь удобно направить ось Z по направлению результирующего вектора $\mathbf{p} = \omega/\omega_0 \mathbf{k}_0 + \eta \mathbf{E}_0$. В этом случае входящий в формфактор импульс q запишется как

$$\begin{aligned} q &= (2(\omega/c)^2 + \\ &+ 2(\omega/c)(\eta^2 E_0^2 + (\omega/c)^2)^{1/2} \cos \theta + \eta^2 E_0^2)^{1/2}. \end{aligned} \quad (4)$$

Интегрирование по полярному углу ϕ позволяет получить следующий общий вид:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 W_{nm}}{d\theta d\omega} &= \frac{1}{4\pi c^3 \omega} |f_0(\omega)|^2 E_0^2 \sin \theta \times \\ &\times \left\{ F_{nm}^2(q) [2 - \sin^2 \theta \sin^2 \theta_E - 2 \cos^2 \theta \cos^2 \theta_E] + \right. \\ &+ \frac{\omega F_{nm}'(q)}{c} F_{nm}(q) [4\eta E_0 \sin 2\theta_E (1 + 3 \cos 2\theta) + \\ &+ (\omega/c) \cos \theta (7 \sin \theta_E + 3 \sin 3\theta_E) + \\ &+ (\omega/c) \cos 3\theta (\sin \theta_E + 5 \sin 3\theta_E)] + \\ &+ \left. \left(\frac{\omega F_{nm}'(q)}{c} \right)^2 [\eta^2 E_0^2 (320 - 64 \cos 2\theta) + \right. \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned}
& + \omega^2/c^2 (119 + 44 \cos 2\theta + 29 \cos 4\theta + 41 \cos 4\theta_E + \\
& + 20 \cos 2\theta \cos 4\theta_E + 3 \cos 4\theta \cos 4\theta_E) + \\
& + 96\eta E_0 \omega/c (7 \cos \theta + \cos 3\theta) \cos \theta_E + \\
& + 64(\eta^2 E_0^2 + \omega^2/c^2)(1 + 3 \cos 2\theta) \cos 2\theta_E + \\
& + 32\eta E_0 \omega/c (7 \cos \theta + \cos 3\theta) \cos 3\theta_E \Big] \Big\}.
\end{aligned}$$

В последнем выражении $\cos \theta_E = \eta E_0 / \sqrt{(\eta E_0)^2 + (\omega/c)^2}$, импульс q представлен выражением (4). Дальнейшее вычисление парциального спектра сводится к интегрированию по углу θ . В результате получаем общее выражение для спектра, которое не приводим здесь ввиду его громоздкости. Для конкретных состояний парциальный спектр $dW_{mm}/d\omega$ может быть выписан с использованием общих выражений для атомного формфактора (2) [7]. Приведем также аналитическое выражение для полного спектра $dW/d\omega = \sum_m dW_{0m}/d\omega$, полученное в [2] для водородоподобных атомов и ионов после суммирования вероятностей перехода из основного состояния во все возбужденные состояния и непрерывный спектр:

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

где Z – заряд ядра атома. Это соотношение дает вероятность вылета переизлученных фотонов при переходе атома из основного состояния в любое, т.е. этот спектр просуммирован по всем возможным конечным состояниям атома и является суммой всех возможных парциальных спектров. Используя формфакторы перехода из основного состояния атома, можно вычислить парциальные спектры $dW_{0m}/d\omega$, соответствующие вероятности переизлучения ультракороткого импульса на определенной частоте ω при возбуждении атома в m -е состояние, и сравнить их с полным спектром $dW/d\omega$, оценив вклад конкретного состояния в полный спектр переизлучения. Проинтегрировав парциальные и полный спектры (6) по частоте переизлученных фотонов, получим отношение вероятностей (нормированных на единицу) переизлучения атома при взаимодействии с ультракороткими импульсами:

$$I_m = \frac{W_{0m}}{W} = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\int_x^\infty (dW_{0m}/d\omega) d\omega}{\int_x^\infty (dW/d\omega) d\omega}. \quad (7)$$

Несмотря на то, что оба представленных интеграла в формуле (7) расходятся на нижнем пределе, эта (логарифмическая) расходимость одинакова в числителе и знаменателе и сокращается в отношении. Найдя отношение, можно непосредственно связать вероятность переизлучения с конечным состоянием атома после процесса переизлучения. Полученные результаты могут быть обобщены на случай многоэлектронных атомов. В этом случае необходимо, используя выражение (1), произвести суммирование по всем атомным электронам. При этом, как отмечалось в работе [4], в полученном спектре можно выделить когерентную и некогерентную части излучения.

РАСЧЕТ ДИАГРАММ НАПРАВЛЕННОСТЕЙ И ПАРЦИАЛЬНЫХ СПЕКТРОВ ДЛЯ ВОДОРОДОПОДОБНЫХ АТОМОВ

Приведем данные расчета диаграмм направленности при переизлучении атомом ультракороткого импульса электромагнитного поля для некоторых конечных состояний атома по выражению (3). Из объемных диаграмм направленности при частоте ультракороткого импульса $\omega_0 = 125$ ат. ед. (соответствует продолжительности импульса $\tau \approx 4 \times 10^{-18}$ с) (рис. 1) видно, что различия в форме направлений переизлучения значительны и определяются конечным состоянием атома. Для более детального анализа приведем (рис. 2) типичные срезы диаграмм направленности при угле $\phi = 0^\circ$. Все срезы диаграмм направленности нормированы на максимальные (из представленных на графиках) значения вероятностей вылета переизлученных фотонов. По представленным графикам можно заметить, что различия диаграмм направленностей позволяют непосредственно определить, какой электронный переход совершается в атоме при взаимодействии с ультракоротким импульсом. Стоит отметить, что существенные различия не только по форме спектра, но и по абсолютным значениям. При этом единицы шкалы на графиках а, б, в на рис. 2 соотносятся между собой как 1: 0.1275: 0.00118. Все это позволяет сделать вывод: по спектру переизлучения можно уверенно детектировать конечные состояния атома и предсказать спектр излучения атома при переходе в основное состояние. Показательна также сильная зависимость диаграмм направленности от частоты налетающего фотона. Для примера приведем диаграммы направленностей в срезах (рис. 3) при тех же, что и на рис. 2, переходах атома, но при частоте ω_0 вдвое меньшей. Здесь единицы шкалы на графиках а, б, в соотносятся как 1: 0.085: 0.0008125. Исходя из столь существенных различий возможно точное определение частоты налетающего ультракороткого импульса по диаграмме направленностей спектра переизлучения. Интересными также являются данные расчетов и

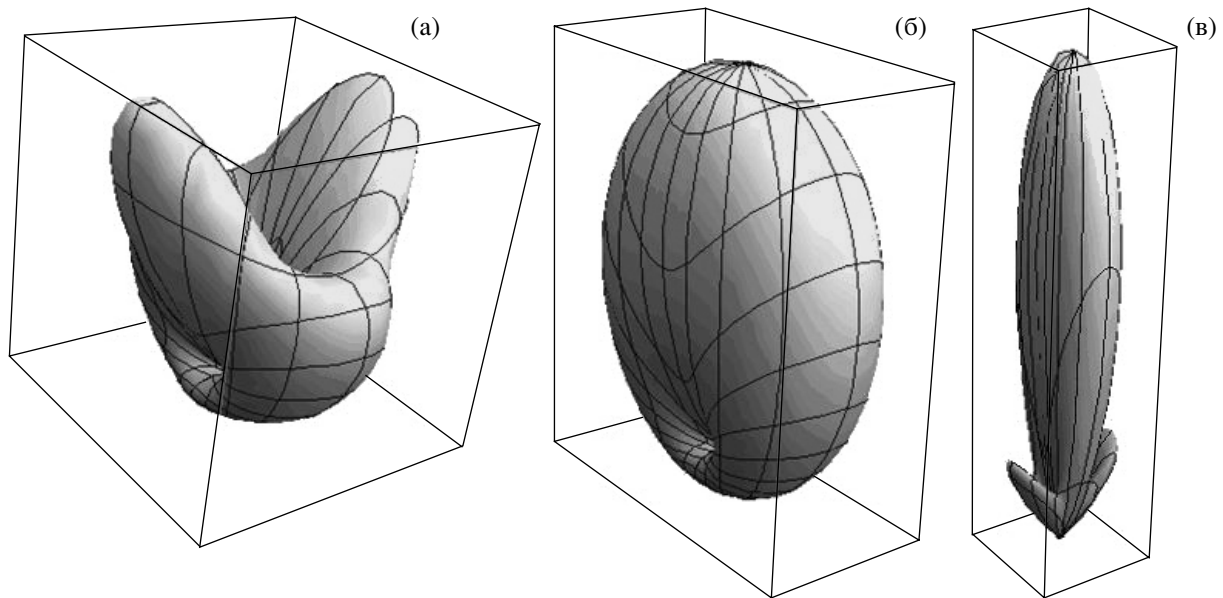


Рис. 1. 3D-диаграмма направленности переизлучения соответствует переходу атома: а – $1s-2p$, сумма по всем проекциям орбитального момента, б – упругому рассеянию атома $1s-1s$, в – $2s-2s$.

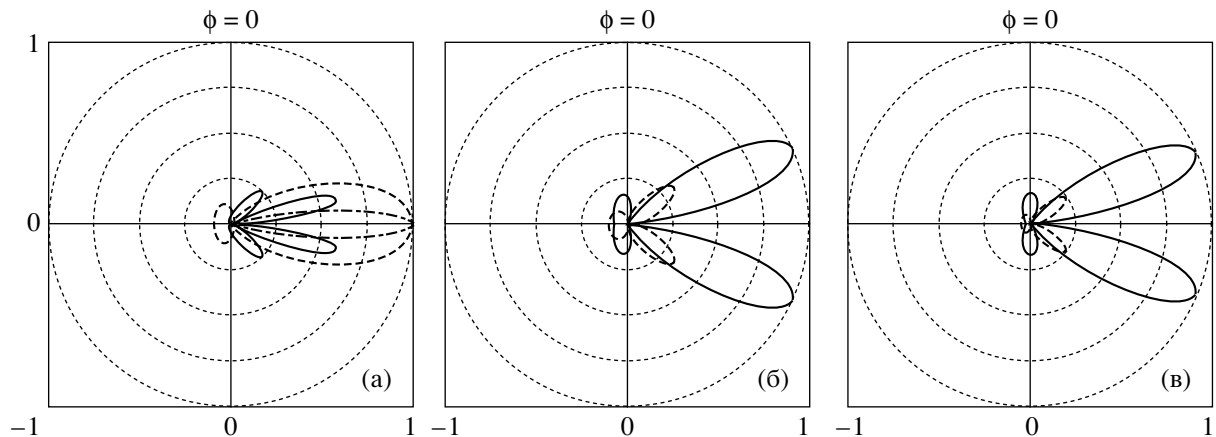


Рис. 2. Диаграмма направленности переизлучения ультракороткого импульса электромагнитного поля водородоподобного атома. а – пунктирная линия соответствует переизлучению без изменения состояния атома $1s-1s$, штрихпунктирная – $2s-2s$, сплошная – одновременному с переизлучением переходу атома $2s-2p$, просуммированное по всем проекциям орбитального момента; б – пунктирная линия соответствует одновременному с переизлучением переходу атома из основного в возбужденное состояние $2s$, сплошная – во все состояния $2p$; в – пунктирная линия соответствует одновременному с переизлучением переходу атома из основного в возбужденное состояние $3s$, сплошная – в состояния $3p$, просуммированные по всем проекциям орбитального момента. Частота $\omega_0 = 125$ ат. ед.

сравнения парциальных и полных спектров переизлучения. На рис. 4 представлены парциальные спектры переизлучения при столкновениях атома с ультракороткими импульсами. Расчет здесь выполнен путем интегрирования выражения (5) по углу θ с использованием формфактора F_{00} . Результат интегрирования может быть записан в аналитическом виде, однако выражение получается достаточно громоздкое для приведения его в данной статье. На этом же графике приведен полный спектр переизлучения (6). При вычислениях

использовалось поле E_0 , вдвое превосходящее внутриатомное. Результаты расчета представлены в относительных единицах. Очевидно, что с ростом частоты падающего ультракороткого импульса существенно возрастает вероятность переизлучения при неупругих процессах внутри атома. Механизм преобладания вероятности переизлучения при неупругих процессах над вероятностью переизлучения при упругих процессах заключается, видимо, в том, что изменяется баланс между энергией, расходуемой атомом

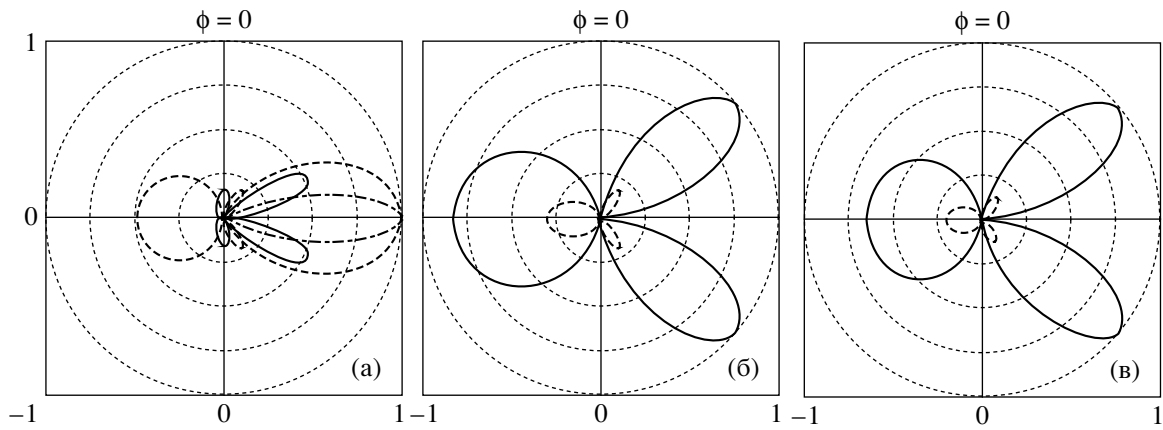


Рис. 3. Диаграмма направленности переизлучения ультракороткого импульса электромагнитного поля водородоподобного атома. а – пунктирная линия соответствует переизлучению без изменения состояния атома $1s-1s$, штрихпунктирная – $2s-2s$, сплошная – одновременному с переизлучением переходу атома $2s-2p$, просуммированное по всем проекциям орбитального момента; б – пунктирная линия соответствует одновременному с переизлучением переходу атома из основного в возбужденное состояние $2s$, сплошная – во все состояния $2p$; в – пунктирная линия соответствует одновременному с переизлучением переходу атома из основного в возбужденное состояние $3s$, сплошная – в состояния $3p$, просуммированные по всем проекциям орбитального момента. Частота $\omega_0 = 62.5$ ат. ед.

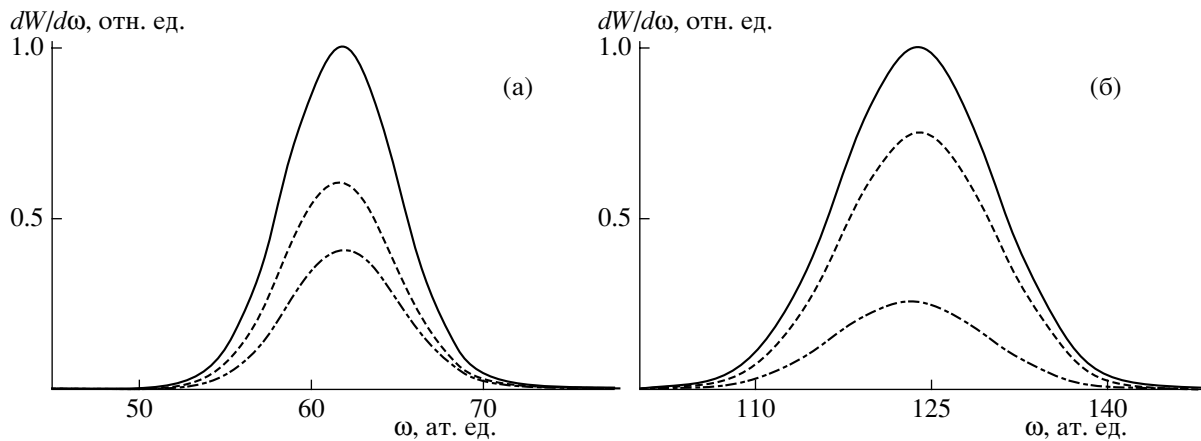


Рис. 4. Парциальные и полные спектры переизлучения водородоподобного атома. Пунктирная линия соответствует спектру переизлучения без изменения состояния атома, штрихпунктирная – спектру переизлучения с изменением состояния атома, сплошная – полному спектру переизлучения при любом конечном состоянии атома; а – $\omega_0 = 62.5$ ат. ед., б – $\omega_0 = 125$ ат. ед.

на возбуждение и переходы, и энергией ультракороткого импульса, которую атом переизлучает. Произведя интегрирование данных спектров по частоте и найдя отношение (7), сопоставим полученные результаты в таблице. Приведем отношение вероятности переизлучения при упругом рассеянии I_0 и при неупругом рассеянии $I_{inel} = 1 - I_0$ к полной вероятности переизлучения при произвольном конечном состоянии атома. Из данных таблицы можно заметить, что с ростом частоты вероятность переизлучения с одновременным возбуждением и ионизацией атома возрастает по отношению к вероятности переизлучения без изменения состояния атома.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Из анализа табличных данных и представленных графиков по диаграммам направленности и парциальным спектрам и сравнением с полными

Отношение вероятности переизлучения фотонов без изменения и с изменением состояния атома к вероятности переизлучения фотонов при любом конечном состоянии атома водорода

ω_0 , ат. ед.	I_0	I_{inel}
62.5	0.642	0.358
125	0.251	0.749

спектрами переизлучения можно сделать следующие выводы

По диаграмме направленности переизлучения можно точно определить состояние атома после взаимодействия с ультракороткими импульсами и предсказать спектр излучения атома при релаксации в основное состояние.

Зависимость парциального спектра от частоты падающего ультракороткого импульса позволяет определить по спектру характеристики падающего на атом ультракороткого импульса электромагнитного поля.

С ростом частоты падающего ультракороткого импульса существенно возрастает вероятность переизлучения при неупругих процессах внутри атома.

Все вышесказанное позволяет с уверенностью сделать вывод о том, что парциальные спектры переизлучения могут стать инструментом исследования состояний атома в сверхсильных электромагнитных полях. Ультракороткие импульсы

и процесс переизлучения, таким образом, могут быть использованы для приведения атомов среды в заданное состояние, при этом одновременно позволяют детектировать и контролировать состояние среды с высокой степенью точности.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Scrinz A., Ivanov M.Yu., Kienberger R., Ville-neuve D.M.* // J. Phys. B. 2006. V. 39. P. R1.
2. *Матвеев В.И.* // ЖЭТФ. 2003. Т. 124. № 5(11). С. 1023.
3. *Матвеев В.И., Гусаревич Е.С., Пашев И.Н.* // ЖЭТФ. 2005. Т. 127. № 6. С. 1187.
4. *Есеев М.К., Матвеев В.И.* // Опт. и спектр. 2008. Т. 104. № 6. С. 885.
5. *Есеев М.К., Матвеев В.И.* // ЖТФ. 2008. Т. 78. № 8. С. 28.
6. *Есеев М.К., Матвеев В.И.* // Вестник ПГУ. Серия "Естественные и точные науки". 2008. № 1(13). С. 77.
7. *Dewangan D.P.* // J. Phys. B. 2005. V. 38. P. S107.