02

Электронные переходы и излучение атома при взаимодействии с ультракоротким импульсом электромагнитного поля

© В.И. Матвеев

Поморский государственный университет им. М.В. Ломоносова,
163006 Архангельск, Россия
e-mail: matveev.victor@pomorsu.ru

(Поступило в Редакцию 20 мая 2002 г.)

На основе приближения внезапных возмущений рассмотрены электронные переходы и излучение атома при его взаимодействии с ультракоротким импульсом электромагнитного поля, получены вероятности возбуждения и ионизации, а также спектры и сечения переизлучения атомом такого импульса. Делается вывод о когерентном характере процесса переизлучения ультракоротких импульсов электромагнитного поля многоэлектронными атомами.

Введение

Недавно появилось сообщение [1] о возможности генерации импульсов электромагнитного поля длительностью $\tau \sim 10^{-21}-10^{-22}$ s, что может открыть новые перспективы для исследования взаимодействия ультракоротких импульсов электромагнитного поля с веществом. В частности, становятся актуальными исследования процессов, сопровождающих взаимодействие атомов с ультракороткими импульсами сильного электромагнитного поля. Следует отметить, что непретурбативный учет взаимодействия атомов с импульсами сильного электромагнитного поля длительностью, превышающей характерные атомные периоды времени, затруднен и требует применения численных методов. В качестве примера приведем работу [2], в которой рассматривается возбуждение и ионизация атомов гелия короткими импульсами сильного электромагнитного поля длительностью $\sim 3.8-15.2$ фемтосекунд (см. также работы [3–6] и приведенные в них ссылки). В рассматриваемых же нами случаях характерное атомное время $\tau_a \sim 10^{-17}$ s оказывается значительно больше длительности ультракоротких импульсов. Поэтому общей основой для решения может служить приближение внезапных возмущений [7], не ограничивающее возмущение по величине и требующее для своей применимости лишь выполнение неравенства $\tau/\tau_a \ll 1$. Известно много примеров, когда происходит возбуждение или ионизация атома под действием внезапного возмущения. Прежде всего это возбуждение или ионизация атомов при ядерных реакциях [8,9], например при β-распаде ядра, когда вылет быстрого β-электрона воспринимается атомными электронами как внезапное изменение заряда ядра, или при ударе нейтрона о ядро, когда происходит внезапная передача импульса ядру, и т. п. Приближение внезапных возмущений применяется при рассмотрении многоэлектронных переходов в сложных атомах, когда переходы, происходящие во внутренних оболочках, воспринимаются сравнительно медленными электронами внешних оболочек как мгновенные (см., например, [10]). Как результат действия внезапного возмущения рассматриваются неупругие процессы при столкновениях быстрых многозарядных ионов с атомами [11–13] и при столкновениях заряженных частиц с высоковозбужденными атомами [14]. Во многих практически важных случаях возмущение не является достаточно малым для применения теории возмущений, однако часто [13,15,16,17] встречаются ситуации, когда время действия возмущения значительно меньше характерных атомных периодов времени, что позволяет решать задачу, не ограничивая величину возмущения, и выполнить расчеты аналитически.

В настоящей работе на основе приближения внезапных возмущений рассмотрены возбуждение и ионизация атома при его взаимодействии с ультракоротким импульсом электромагнитного поля, получены вероятности возбуждения и ионизации, а также спектры и сечения переизлучения атомом такого импульса.

Возбуждение и ионизация атома

Взаимодействие атомных электронов с импульсом электромагнитного поля гауссовой формы

$$\mathbf{E}(t) = \mathbf{E}_0 \exp(-\alpha^2 t^2) \cos(\omega_0 t) \tag{1}$$

запишем в виде

$$V(t) \equiv V(\mathbf{r}_a, t) = \mathbf{E}(t) \sum_{a=1}^{a=N} \mathbf{r}_a, \tag{2}$$

где $\mathbf{r}_a$ — координаты атомных электронов ($a = 1, \ldots, N$); N — число атомных электронов; $V(t)$ отличается от нуля только в течение времени $\tau \sim \alpha^{-1}$, много меньшего характерных периодов невозмущенного атома, описываемого гамильтонианом H_0.

Тогда при решении точного уравнения Шредингера (здесь и везде ниже используются атомные единицы)

$$i\,\frac{\partial\psi}{\partial t} = \big(H_0 + V(t)\big)\psi \tag{3}$$

в течение времени τ эволюцией ψ-функции под действием невозмущенного гамильтониана H_0 можно пренебречь. Поэтому амплитуда перехода атома из начального состояния φ_0 в какое-либо конечное состояние φ_n в результате действия внезапного возмущения $V(t)$ будет иметь вид [7]

$$a_{0n} = \langle\varphi_n|\exp\left(-i\int\limits_{-\infty}^{+\infty} V(t)\,dt\right)|\varphi_0\rangle, \tag{4}$$

где φ_0 и φ_n принадлежат полной ортонормированной системе собственных функций невозмущенного гамильтониана H_0, т. е. $H_{0\varphi_n} = \epsilon_n\varphi_n$.

Приведенные формулы, очевидно, позволяют рассчитать вероятности $w_{0n} = |a_{0n}|^2$ возбуждения или ионизации атома. Причем выбор возмущения в виде (2) позволяет выразить w_{0n} через хорошо известные [9,18] неупругие атомные формфакторы

$$w_{0,n} = |\langle\varphi_n|\exp\Big(-i\mathbf{q}\sum_a \mathbf{r}_a\Big)|\varphi_0\rangle|^2, \tag{5}$$

где

$$\mathbf{q} = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dt\mathbf{E}(t) = \frac{\sqrt{\pi}}{\alpha}\,\mathbf{E}_0\exp\left(-\frac{\omega_0^2}{4\alpha^2}\right). \tag{6}$$

Поэтому, например, для атома водорода вероятность переходов из $1s$-состояния во все состояния с главным квантовым числом n имеет вид

$$w_{0,n} = 2^8 q^2 n^7\left[\frac{n^2-1}{3} + (qn)^2\right]\frac{\big[(n-1)^2+(qn)^2\big]^{n-3}}{\big[(n+1)^2+(qn)^2\big]^{n+3}}. \tag{7}$$

При ионизации из $1s$-состояния

$$w_{0,k} = \frac{2^5}{\pi k} \times \frac{\Big[\big(\mathbf{q}\,\frac{\mathbf{k}}{k}\big)^2 + (q^2-\mathbf{qk})^2\Big]\exp\big\{-\frac{2}{k}\operatorname{arctg}\frac{2k}{q^2+1-k^2}\big\}}{\big[(\mathbf{q}-\mathbf{k})^2+1\big]^4\big[(q^2+1-k^2)^2+(2k)^2\big]}, \tag{8}$$

где $\mathbf{k}$ — импульс электрона в континууме атома водорода.

Для переходов в водородоподобном атоме с зарядом ядра Z_a следует заменить $\mathbf{r}\to\mathbf{r}Z_a$, $\mathbf{q}\to\mathbf{q}/Z_a$; $\mathbf{k}\to\mathbf{k}/Z_a$. На рис. 1 приведены результаты расчетов вероятностей возбуждения нескольких первых уровней атома водорода, а также приведена вероятность полной ионизации. Рис. 1, как и приведенный ниже рис. 2, служат также иллюстрацией унитарности ($\Sigma_n w_{0,n} = 1$, где Σ_n означает суммирование по всем возможным конечным состояниям атома) подхода.

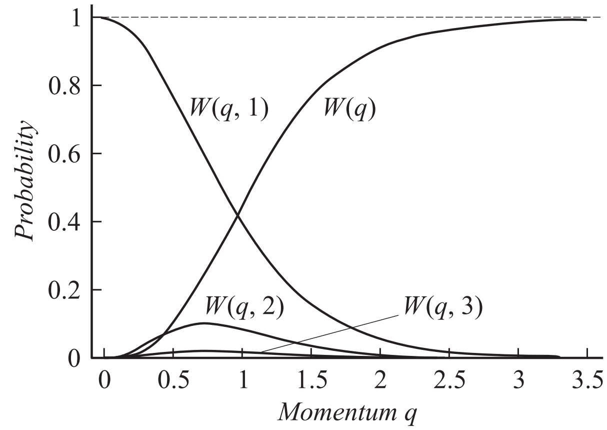

Рис. 1. Результаты расчетов. $W(q,1)$ — вероятность остаться в основном состоянии; $W(q,2)$ — вероятность возбуждения состояний с главным квантовым числом $n=2$; $W(q,3)$ — вероятность возбуждения состояний с главным квантовым числом $n=3$; $W(q)$ — вероятность полной ионизации атома водорода.

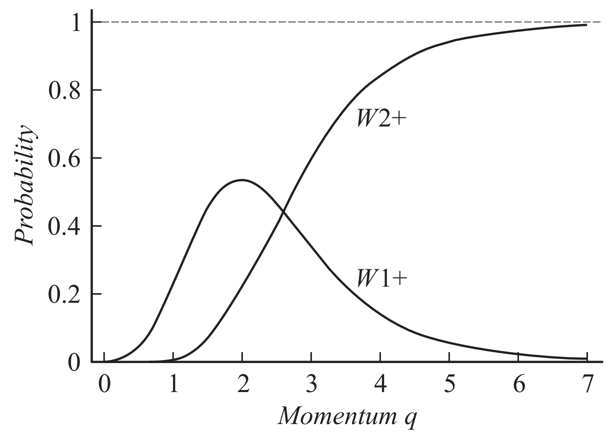

Рис. 2. Вероятности однократной ($W1+$) и двойной ионизации ($W2+$) атома гелия.

В качестве примера переходов в сложных атомах рассмотрим переходы в атоме гелия. Следуя [19,20], обозначим произвольные двухэлектронные состояния $|n_1, n_2\rangle$ гелиеподобного атома двумя наборами квантовых чисел n_1 и n_2. Тогда, согласно (5), вероятность перехода из основного состояния $|0,0\rangle$ в состояние $|n_1, n_2\rangle$ имеет вид

$$w_{0,0;\,n_1,n_2} = |\langle n_1, n_2|\exp\{-iq(r_1+r_2)\}\,|0,0\rangle|^2. \tag{9}$$

Таким образом, многоэлектронный переход является результатом прямого действия (мы придерживаемся терминологии [21,22]) сильного внешнего поля. В качестве примера рассмотрим однократную и двойную ионизацию атома гелия. Полную вероятность двойной ионизации получаем, суммируя (9) по всем n_1 и n_2, принадлежащим двухэлектронному континууму, состояния которого будем обозначать $|\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2\rangle$, где $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2$ — импульсы электронов в континууме,

$$w^{2+} = \int d^3\mathbf{k}_1 d^3\mathbf{k}_2 |\langle \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2| \exp\{-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)\} |0, 0\rangle|^2. \tag{10}$$

К состоянию однократной ионизации приводят переходы в атоме гелия, когда один из электронов попадает в континуум, а второй — в какое-либо состояние дискретного спектра (либо в любое из состояний полного набора дискретного и непрерывного спектра, но в таком случае необходимо отнять вклад, соответствующий нахождению двух электронов в состояниях двухэлектронного континуума, т. е. в состояниях двойной ионизации). Поэтому вероятность однократной ионизации равна

$$w^{1+} = \int d^3\mathbf{k}_1 \sum_{n_2} |\langle \mathbf{k}_1, n_2| \times \exp\{-i\mathbf{q}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2)\} |0, 0\rangle|^2 - w^{2+}, \tag{11}$$

где Σ_{n_2} означает суммирование по всем возможным значениям n_2 дискретного и непрерывного спектра.

На рис. 2 приведены вероятности однократной и двойной ионизации атома гелия. Во всех случаях при проведении расчетов мы, как и в [19,20], двухэлектронные состояния гелиеподобного атома описывали в виде симметризованных произведений водородоподобных одноэлектронных волновых функций, причем чтобы избежать процедуры ортогонализации (обычно неоднозначно определенной, так как, строго говоря, следует ортогонализовать все состояния непрерывного и дискретного спектров), выбирались одноэлектронные водородоподобные волновые функции в поле ядра с одним и тем же эффективным зарядом ядра, равным $Z_1 = 1.37$ для одноэлектронных переходов и $Z_2 = 1.97$ для двухэлектронных переходов.

Переизлучение ультракороткого импульса атомом

Для расчета же сечений переизлучения внезапно действующего импульса сильного электромагнитного поля необходимо проделать следующее. В приближении внезапных возмущений эволюция начального состояния имеет вид

$$\Psi_0(t) = \exp\left(-i \int_{-\infty}^{t} V(t')dt'\right)\varphi_0, \tag{12}$$

где $\Psi_0(t)$ удовлетворяет уравнению

$$i\,\frac{\partial\Psi_0(t)}{\partial t} = V(t)\Psi_0(t), \tag{13}$$

причем $\Psi_0(t) \to \varphi_0$ при $t \to -\infty$.

Введем полную и ортонормированную систему функций

$$\Phi_n(t) = \exp\left(i \int_{t}^{+\infty} V(t')dt'\right)\varphi_n, \tag{14}$$

удовлетворяющих уравнению (13), причем $\Phi_n(t) \to \varphi_n$ при $t \to +\infty$. Очевидно, что амплитуду (4) можно переписать в виде

$$a_{0n} = \langle\Phi_n(t)|\Psi_0(t)\rangle. \tag{15}$$

Поэтому амплитуду излучения фотона будем вычислять в первом порядке теории возмущений как поправки к состояниям (12) и (14) по взаимодействию атомных электронов с электромагнитным полем [23][1]

$$U = -\sum_{a,k,\sigma}\left(\frac{2\pi}{\omega}\right)^{\frac{1}{2}}\mathbf{u}_{\mathbf{k}\sigma}\left(a^{+}_{k\sigma}e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_a} + a_{k\sigma}e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_a}\right)\hat{\mathbf{p}}_a, \tag{16}$$

где $a^{+}_{\mathbf{k}\sigma}$ и $a_{\mathbf{k}\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения фотона с частотой ω, импульсом $\mathbf{k}$ и поляризацией σ ($\sigma = 1, 2$); $\mathbf{u}_{k\sigma}$ — единичные векторы поляризации; $\mathbf{r}_a$ — координаты атомных электронов ($a = 1, \ldots, N$); $\hat{\mathbf{p}}_a$ — операторы импульса атомных электронов.

Тогда в дипольном приближении амплитуда испускания фотона с одновременным переходом атома из состояния φ_0 в состояние φ_n имеет вид

$$b_{0n}(\omega) = i\left(\frac{2\pi}{\omega}\right)^{\frac{1}{2}}\mathbf{u}_{k\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t}\langle\Phi_n(t)|\sum_a \hat{\mathbf{p}}_a|\Psi_0(t)\rangle. \tag{17}$$

Отсюда после интегрирования по частям по времени и опускания членов, исчезающих при выключении (при $t \to \pm\infty$) взаимодействия с электромагнитным полем, получаем

$$b_{0n}(\omega) = -\left(\frac{2\pi}{\omega}\right)^{\frac{1}{2}}\mathbf{u}_{k\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty} dt\,\frac{e^{i\omega t}}{i\omega} \times \langle\varphi_n|\sum_a \frac{\partial V(t)}{\partial \mathbf{r}_a}\exp\left(-i\int_{-\infty}^{+\infty} V(t')\,dt'\right)|\varphi_0\rangle. \tag{18}$$

После суммирования $|b_{0n}(\omega)|^2$ по поляризациям и интегрирования по углам вылета фотона, а также суммирования по всем конечным состояниям атома φ_n находим полный спектр излучения

$$\frac{dW}{d\omega} = \frac{2}{3\pi}\,\frac{1}{c^3\omega}\,\langle\varphi_0|\sum_a \frac{\partial\hat{V}^*(\omega)}{\partial\mathbf{r}_a}\sum_{a'}\frac{\partial\hat{V}(\omega)}{\partial\mathbf{r}_{a'}}\,|\varphi_0\rangle, \tag{19}$$

где $c = 137$ at.u. — скорость света,

$$\hat{V}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} V(t)e^{i\omega t}dt. \tag{20}$$

[1] Внезапное же возмущение $V(t)$ учтено в функциях $\Phi_n(t)$ и $\Psi_0(t)$ без ограничений на величину $V(t)$.

Таким образом, нами получен полный спектр излучения атома в течение времени действия внезапного возмущения $V(t)$. Полный спектр излучения (19) в случае, когда $V(t)$ выражается формулой (2), имеет вид

$$\frac{dW}{d\omega} = \frac{2}{3\pi}\frac{1}{c^3\omega}\left|\hat{\mathbf{E}}(\omega)\right|^2 N^2, \tag{21}$$

где N — число атомных электронов; $\hat{\mathbf{E}}(\omega)$ — фурье-образ функции $\mathbf{E}(t)$, определяемый согласно (20),

$$\hat{\mathbf{E}}(\omega) = \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha} \times \mathbf{E}_0\left\{\exp\left[-\frac{(\omega-\omega_0)^2}{4\alpha^2}\right] + \exp\left[-\frac{(\omega+\omega_0)^2}{4\alpha^2}\right]\right\}. \tag{22}$$

Поскольку $\mathbf{E}(t) \neq 0$ лишь в течение времени τ, а спектр (21) пропорционален $|\hat{\mathbf{E}}(\omega)|^2$, постольку атомом преимущественно испускаются фотоны, принадлежащие непрерывному спектру с характерными частотами $|\omega - \omega_0| \leq 1/\tau$. Формула (18) позволяет получить также спектр фотонов с одновременным переходом атома из состояния φ_0 в какое-либо состояние φ_n под действием возмущения (2)

$$\frac{dW_{0n}}{d\omega} = \frac{2}{3\pi}\frac{1}{c^3\omega}\left|\hat{\mathbf{E}}(\omega)\right|^2 N^2 \times \left|\langle\varphi_n|\exp\Bigl(-i\mathbf{q}\sum_a \mathbf{r}_a\Bigr)|\varphi_0\rangle\right|^2. \tag{23}$$

Причем полный спектр (21) $dW/d\omega = \Sigma_n\, dW_{0n}/d\omega$, где Σ_n означает суммирование по полному набору атомных состояний. В результате относительный вклад (в полный спектр (21)) переходов с возбуждением атома в произвольное состояние φ_n примет вид

$$\frac{dW_{0n}/d\omega}{dW/d\omega} = \left|\langle\varphi_n|\exp\Bigl(-i\mathbf{q}\sum_a \mathbf{r}_a\Bigr)|\varphi_0\rangle\right|^2. \tag{24}$$

Как следует из (5), правая часть (24) равна $w_{0,n}$, поэтому рис. 1 и 2 представляют соответствующие относительные вклады в полные спектры переизлучения импульса переходов с одновременными возбуждением или ионизацией атомов водорода и гелия.

Для получения сечений переизлучения импульса, очевидно, согласно [24], необходимо спектры (19), (21), (23) умножить на ω и разделить на поток энергии I, выражаемый через интеграл по времени от абсолютной величины вектора Пойнтинга $S(t) = c(4\pi)^{-1}\mathbf{E}^2$,

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} dt\, S(t) = \frac{c}{4\pi}\mathbf{E}_0^2\frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{2}\alpha}\left\{\exp\left[-\frac{\omega_0^2}{2\alpha^2}\right] + 1\right\}. \tag{25}$$

Необходимо отметить важную особенность излучения при внезапном воздействии, а именно интенсивность излучения для многоэлектронных атомов, согласно (21), (23), пропорциональна квадрату числа атомных электронов, что соответствует когерентному процессу переизлучения ультракороткого импульса.

Автор благодарит Министерство образования Российской Федерации (грант № Е00-3.1-390) и Российский фонд фундаментальных исследований (грант № 01-02-17047) за финансовую поддержку работы.

Список литературы

[1] *Kaplan A.E., Shkolnikov P.L.* // Phys. Rev. Lett. 2002. Vol. 88. P. 074801.
[2] *Scrinzi A., Piraux B.* // Phys. Rev. A. 1997. Vol. 56. P. R13.
[3] *Kondorskiy A.D., Presnyakov L.P.* // J. Phys. B. 2001. Vol. 34. P. L663.
[4] *West J.B.* // J. Phys. B. 2001. Vol. 34. P. R45.
[5] *Bauer J., Plucinski J., Piraux B.* et al. // J. Phys. B. 2001. Vol. 34. P. 2245.
[6] *Lagmago Kamta G., Grosges T., Piraux B.* et al. // J. Phys. B. 2001. Vol. 34. P. 857.
[7] *Дыхне А.М., Юдин Г.Л.* // УФН. 1978. Т. 125. С. 377.
[8] *Мигдал А.Б.* Качественные методы в квантовой теории. М.: Наука, 1975. 336 с.
[9] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М.: Наука, 1989. 667 с.
[10] *Матвеев В.И., Парилис Э.С.* // УФН. 1982. Т. 138. С. 583–633.
[11] *Eichler J.* // Phys. Rev. A. 1977. Vol. 15. P. 1856.
[12] *Юдин Г.Л.* // ЖЭТФ. 1981. Т. 80. С. 1026.
[13] *Матвеев В.И.* // ЭЧАЯ. 1995. Т. 26. С. 780–820.
[14] *Персиваль И.С.* Атомы в астрофизике / Под ред. Ф.Г. Берка, В.Б. Эйспера, Д.Г. Хаммера, И.С. Персиваля. М.: Мир, 1988. С. 87–113.
[15] *Baltz A.J.* // Phys. Rev. Lett. 1997. Vol. 78. P. 1231.
[16] *Baltz A.J.* // Phys. Rev. A. 2001. Vol. 64. P. 022718.
[17] *Матвеев В.И.* // ЖЭТФ. 2002. Т. 121. С. 260.
[18] *Holt A.R.* // J. Phys. B. 1969. Vol. 2. P. 1209.
[19] *Матвеев В.И., Рахимов Х.Ю.* // ЖЭТФ. 1998. Т. 114. С. 1646.
[20] *Matveev V.I., Rakhimov Kh.Yu., Matrasulov D.U.* // J. Phys. B. 1999. Vol. 32. P. 3849.
[21] *McGuire J.H.* // Advances in Atomic, Molecular and Optical Physics. 1992. Vol. 29. P. 217.
[22] *McGuire J.H., Mueller A., Shuch B.* et al. // Phys. Rev. A. 1987. Vol. 35. P. 2479.
[23] *Берестецкий В.Б., Лифшиц Е.М., Питаевский Л.П.* Квантовая электродинамика. М.: Наука, 1989. 723 с.
[24] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Теория поля. М.: Наука, 1973. 504 с.