

ВЛИЯНИЕ КВАНТОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В НЕПРЕРЫВНОМ СПЕКТРЕ НА ПРОЦЕССЫ ИОНИЗАЦИИ АТОМОВ В СИЛЬНЫХ ПОЛЯХ

*А. Д. Кондорский, Л. П. Пресняков**

*Физический институт им. П. Н. Лебедева Российской академии наук
117924, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 27 августа 1998 г.

Метод сильной связи применен для анализа ионизации водородоподобного атома интенсивным монохроматическим лазерным полем. Ортогональный и нормированный базис, по которому разлагается решение нестационарного уравнения Шредингера, содержит невозмущенные волновые функции дискретного спектра и обобщенные кулоновские волновые функции непрерывного спектра. При решении связанных уравнений используется тот факт, что связанно-свободные и свободно-свободные переходы эффективны в различных областях комплексных значений времени. Построены и исследованы упрощенные уравнения. Приведены результаты расчетов для ионизации атома водорода из основного состояния и энергетического распределения электронов в сильных и сверхсильных линейно поляризованных полях. Показано, что в этом случае основное состояние распадается полностью, причем в динамике процесса решающую роль играют свободно-свободные переходы. Установлено, что суммарная вероятность заселения высших ридберговских состояний, примыкающих к континууму, не превышает 0.05. Обсуждается область применимости подхода. Дано сопоставление с результатами других авторов, полученными численными методами.

1. ВВЕДЕНИЕ

При анализе ионизации атомов интенсивным электромагнитным полем или ионным ударом влияние нестационарного внешнего потенциала (сравнимого с внутриатомным и превышающего его) необходимо учитывать уже в нулевом порядке теории, т. е. в волновых функциях непрерывного спектра в конечном канале реакции. Эффективность такого подхода следует как из основополагающей работы Келдыша [1], так и из дальнейшего развития теории ионизации атомов в сильном лазерном поле [2–8]. Детальный анализ большого количества работ, проведенный в обзоре [8], показывает, при каких физических условиях теоретическое описание можно построить с помощью различных формулировок теории возмущений в сочетании с классическими и полуклассическими моделями. Таким образом, учитывается, в частности, кулоновский потенциал атомного остова [9], не отраженный в базисных волновых функциях [1]. В полях, сравнимых или превышающих атомные, применение теории возмущений необоснованно, а прямое сопоставление любых расчетов с экспериментальными данными затруднительно из-за специфики эксперимента [8].

В физике ион-атомных столкновений сравнение теории с экспериментом осуществляется с количественной точностью, пригодной для детальной проверки теоретических результатов и методов. Развитые при этом внутренние критерии теории могут

*E-mail: presn@sci.lebedev.ru

быть использованы и в задаче об ионизации атомов в сильных электромагнитных полях. Прежде всего следует отметить, что весьма перспективным оказалось обобщение теории Келдыша [1] на случай ионизации атомов многозарядными ионами [10] с выходом за рамки теории возмущений. Результатом явилось количественное описание совокупности экспериментальных данных по ионизации атомов [10] и нейтрализации отрицательных ионов [11] многозарядными ионами. Другим важным элементом является замена обобщенных плоских волн [1] на кулоновские волновые функции непрерывного спектра с учетом кулоновского потенциала атомного остова и дополнительного импульса, приобретаемого электроном во внешнем нестационарном поле [12–15]. Эти эффекты существенны в процессах одноэлектронной [14] и двухэлектронной ионизации [14, 15]. Анализ методов, развитых в физике атомных столкновений, показывает, что важнейшим критерием применимости теории является построение ее таким образом, чтобы условие унитарности S -матрицы выполнялось автоматически на всех этапах вычислений.

Данная работа посвящена исследованию влияния квантовых переходов в континууме на процессы ионизации атомов сильным электромагнитным полем. Свободно-свободные переходы в отдельности изучались многими авторами в слабых монохроматических полях на основе теории возмущений (см., например, [16–18]). Влияние таких переходов на ионизацию в той или иной степени учитывается в результатах численных методов решения нестационарного уравнения Шредингера для отрицательного иона [19] и атома водорода [20, 21], а также в численных расчетах на основе R -матричной теории многофотонных процессов [22]. Последовательная теория должна включать в себя анализ прямых и обратных процессов. В этой связи представляет интерес обзор [23], в котором радиационно-стимулированная рекомбинация рассматривается как процесс, обратный многофотонной ионизации. Методы теории возмущений, преимущественно обсуждаемые в [23], с учетом их специфики, тем не менее, дают довольно полное описание физической картины взаимно связанных процессов.

Далее мы используем метод сильной связи каналов, основанный на разложении решения нестационарного уравнения Шредингера по ортонормированным функциям дискретного и непрерывного спектров атома. В разд. 2 обсуждается принятый базис и приводятся полученные на его основе уравнения сильной связи. В разд. 3 показано, что связанно-свободные и свободно-свободные переходы эффективны на различных интервалах временной оси (t -оси). На этой основе строится физическая модель, приводящая к упрощенным уравнениям сильной связи. Методы решения упрощенных уравнений обсуждаются в разд. 4. Результаты расчетов для ионизации атома водорода из основного состояния в сильных и сверхсильных линейно поляризованных полях приведены в разд. 5. Обсуждается заселенность высших ридберговских состояний, причем кулоновское сгущение дискретного спектра рассматривается как аналитическое продолжение континуума. Показано, что вынужденные переходы внутри непрерывного спектра приводят к полному распаду основного состояния, а вероятность заселения ридберговских состояний не превышает 5%.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Будем решать задачу об ионизации водородоподобного атома в классическом монохроматическом электромагнитном поле с помощью метода сильной связи, т. е. раз-

ложения решения нестационарного уравнения Шредингера по полному набору ортогональных и нормированных базисных функций дискретного и непрерывного спектров. Обобщенные кулоновские волны [14] ортогональны невозмущенным функциям дискретного спектра и имеют вид

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}, t) = Q^{(-)}(\nu, \mathbf{p}(t), \mathbf{r}) \exp \left\{ -\frac{i}{2} \int_0^t p^2(\tau) d\tau \right\}. \quad (1)$$

Здесь $Q^{(-)}$ — кулоновская функция, содержащая в асимптотике сходящуюся волну и соответствующая движению электрона в поле ядра с зарядом Z и обобщенным импульсом

$$\mathbf{p}(t) = \mathbf{k} - \mathbf{A}(t), \quad \nu = Z/p(t), \quad (2)$$

где $\mathbf{A}(t)$ — вектор-потенциал и \mathbf{k} — «невозмущенный» импульс. Легко убедиться, что при $Z = 0$ функции (1) совпадают с обобщенными плоскими волнами Гордона—Волкова—Келдыша [1], а при $\mathbf{A}(t) = 0$ переходят в обычные кулоновские волновые функции непрерывного спектра. Используемый нами базис содержит невозмущенные волновые функции в дискретном спектре и обобщенные кулоновские волны (1) в непрерывном.

Нестационарное уравнение Шредингера в калибровке скорости,

$$i \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left[-\frac{1}{2} \Delta - \frac{Z}{r} + i\mathbf{A}(t) \nabla \right] \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (3)$$

должно решаться со стандартным начальным условием

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \varphi_0(\mathbf{r}) \exp(-iE_0 t), \quad (4)$$

где $\varphi_0(\mathbf{r})$ — невозмущенная волновая функция начального состояния с энергией связи E_0 . Представив решение уравнения (3) в виде

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{s=0}^{\infty} a_s(t) \varphi_s(\mathbf{r}) \exp(-iE_s t) + \int a_{\mathbf{k}}(t) Q^{(-)}(\nu, \mathbf{p}(t), \mathbf{r}) d\mathbf{k}, \quad (5)$$

где s — набор квантовых чисел дискретных состояний, получим эрмитову систему дифференциальных уравнений для амплитуд a_s и $a_{\mathbf{k}}$, удовлетворяющих условию нормировки (унитарность S -матрицы):

$$\sum_{s=0}^{\infty} |a_s(t)|^2 + \int |a_{\mathbf{k}}(t)|^2 d\mathbf{k} = 1. \quad (6)$$

Отметим, что исходное уравнение (3) может быть записано также и в калибровке длины, и формулы (4)–(6) сохранят свой вид. Переход от одного представления к другому осуществляется посредством преобразования, содержащего только фазовый множитель. При точном решении задачи оба способа записи приводят к одинаковым результатам. Использование приближений предполагает выбор одной из калибровок. Для анализа свободно-свободных переходов, играющих важную роль в настоящей работе, оптимальным является выбор калибровки (3).

Прежде чем обсуждать способы решения системы уравнений для амплитуд, укажем основные приближения, принятые в данной работе. Во-первых, в правой части выражения (5) в сумме по дискретным состояниям мы сохраним только основное состояние ($s = 0$) и кулоновское сгущение (высшие ридберговские состояния), непосредственно примыкающие к непрерывному спектру, т.е. сумму от $s = s_m \gg 1$ до $s \rightarrow \infty$. Во-вторых, мы пренебрегаем переходами из основного состояния в эти высоковозбужденные связанные состояния и будем рассматривать их связь только с непрерывным спектром. Первое приближение приводит к пренебрежению квантовыми переходами через промежуточные уровни и часто используется в различных подходах [3–8]. Второе соответствует случаю преимущественного заселения высших ридберговских состояний через непрерывный спектр [24, 25]. Будем рассматривать эти состояния как аналитическое продолжение непрерывного спектра и в формулах данного раздела не будем отдельно выписывать сумму по кулоновскому сгущению, обозначая ее вместе с интегралом по непрерывному спектру одним символом интеграла.

Эрмитова система уравнений для амплитуд, следующая из подстановки функции (5) в уравнение (3), приобретает вид

$$\begin{aligned} i\dot{a}_0(t) &= A(t) \int a_k(t) U_{0,k}(t) dk, \\ i\dot{a}_k(t) &= A(t) \left\{ U_{0,k}^*(t) a_0(t) + \int U_{k,k'}(t) a_{k'}(t) dk' \right\}. \end{aligned} \quad (7)$$

Матричные элементы равны

$$U_{0,k}(t) = \exp \left\{ -\frac{i}{2} \int_0^t (p^2(\tau) + 2|E_0|) d\tau \right\} \int \varphi_0(\mathbf{r}) \nabla Q^{(-)}(\nu, \mathbf{p}(t), \mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (8)$$

$$U_{k,k'}(t) = \exp \left\{ -\frac{i}{2} \int_0^t (p'^2(\tau) - p^2(\tau)) d\tau \right\} \int Q^{(-)*}(\nu, \mathbf{p}(t), \mathbf{r}) \nabla Q^{(-)}(\nu', \mathbf{p}'(t), \mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (9)$$

$$U_{k,k'}(t) = U_{k',k}^*(t). \quad (10)$$

Содержащиеся в них интегралы связанно-свободных (8) и свободно-свободных (9) дипольных переходов выражаются в аналитическом виде [26]. Начальное условие (4) гласит

$$a_0(t_i) = 1, \quad a_k(t_i) = 0. \quad (11)$$

Далее ограничимся случаем линейно поляризованного монохроматического поля с постоянным значением напряженности поля F :

$$A(t) = -\frac{F}{\omega} \sin \omega t. \quad (12)$$

3. ФИЗИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И УПРОЩЕННЫЕ УРАВНЕНИЯ

Анализ свойств решений системы (7) проведем в представлении обобщенного импульса $\mathbf{p}(t)$ (2). Правила отбора для связанно-свободных переходов (8) такие же, как в

теории [1]: основное состояние водородоподобного атома со значениями орбитального момента $l = 0$ и его проекции $m = 0$ взаимодействует со всеми состояниями непрерывного спектра с $l = 1$ и $m = 0$. Последнее правило является точным следствием линейной поляризации поля (12). Переходы в состояния континуума с $l \neq 1$ осуществляются только за счет взаимодействий внутри самого непрерывного спектра. Переход в состояния непрерывного спектра с $l = 1$ из основного состояния происходит при комплексных значениях времени t_0^j , определяемых из условия обращения в нуль производной фазы в формуле (8):

$$p^2(t_0^j) + 2|E_0| = 0, \quad j = 0, 1, 2, \dots, N, \quad (13)$$

причем значение t_0^j зависит от значений «невозмущенного» импульса \mathbf{k} [1, 7, 10]. В терминологии квантовой теории неадиабатических переходов это соответствует выходу термина (уровня энергии) основного состояния в непрерывный спектр. В ближайшей окрестности точек $t_0^j(\mathbf{k})$ эффективно заселяются состояния непрерывного спектра с $l = 1$. Между точками t_0^j и t_0^{j+1} , разделенными на вещественной t -оси полупериодом колебаний монохроматического поля (12), вероятности связанно-свободных переходов малы по сравнению с вероятностью переходов внутри континуума. Изложенные соображения приводят к модели, близкой к той, которая широко распространена в физике атомных столкновений [27].

Разобьем вещественную t -ось на интервалы $\text{Re } t_0^j - \Delta t < t < \text{Re } t_0^j + \Delta t$, соответствующие максимальной эффективности связанно-свободных переходов, и интервалы между этими областями, $\text{Re } t_0^j + \Delta t < t < \text{Re } t_0^{j+1} - \Delta t$, соответствующие эффективным переходам внутри континуума (свободно-свободным переходам). В областях связанно-свободных переходов будем решать систему уравнений

$$\begin{aligned} i\dot{a}_{\mathbf{k}} &= \mathbf{A}(t)U_{0,\mathbf{k}}^*(t)a_0, \\ i\dot{a}_0 &= \mathbf{A}(t) \int U_{0,\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}} d\mathbf{k}. \end{aligned} \quad (14)$$

В областях свободно-свободных переходов система уравнений имеет вид

$$i\dot{a}_{\mathbf{k}} = \mathbf{A}(t) \int U_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} a_{\mathbf{k}'} d\mathbf{k}'. \quad (15)$$

Отличие от метода «сшивания» S -матрицы [27] состоит в том, что наличие уравнения (15) приводит к изменению не только фаз, но и абсолютных значений амплитуд на интервалах между областями связанно-свободных переходов.

Назовем системы (14) и (15) упрощенными уравнениями. Допущенные приближения не нарушают условие унитарности S -матрицы:

$$|a_0(t)|^2 + \int |a_{\mathbf{k}}(t)|^2 d\mathbf{k} = 1. \quad (16)$$

Начальные значения для величин a_0 и $a_{\mathbf{k}}$ на каждом интервале естественным образом следуют из их конечных значений на предыдущем.

4. РЕШЕНИЕ УПРОЩЕННЫХ УРАВНЕНИЙ

Решение упрощенных уравнений делится на две части. Прежде всего это решение задачи (14), необходимое для описания поведения системы в области неадиабатического

перехода. Целесообразно выполнить приближенное интегрирование по непрерывному спектру уже в системе уравнений (14), сведя ее к двум обыкновенным дифференциальным уравнениям.

Сделаем замену

$$a_k(t) = c_k(t)b(t), \quad \int |a_k(t)|^2 dk = |b(t)|^2, \quad \int |c_k(t)|^2 dk = 1. \quad (17)$$

Установим вид коэффициентов искомой системы, решение которой оптимально приближает величину a_0 к значению, следующему из (14). Если обозначить

$$c_k(t) = s_k(t) \exp \left\{ i \int_0^t \alpha_k(\tau) d\tau + 2i \int_0^t \beta(\tau) d\tau \right\}, \quad (18)$$

то искомая система может быть записана в виде

$$\begin{aligned} i\dot{a}_0 &= -\beta a_0 + Wb, \\ i\dot{b} &= \beta b + W^* a_0, \end{aligned} \quad (19)$$

где

$$W(t) = \left(\int U_{k,0}(t) c_k^* dk \right) \exp \left\{ i \int_0^t d\tau \left[\int \alpha_k(\tau) s_k^2(\tau) dk \right] \right\}, \quad (20)$$

коэффициент β вычисляется как решение квадратного уравнения

$$\int |U_{0,k}(t)|^2 dk = |W|^2 + \left(\frac{d}{dt} \arg W^* \right) \beta + \beta^2, \quad (21)$$

$$\beta = -\frac{\Delta}{2} + \sqrt{\frac{\Delta^2}{4} + \int |U_{0,k}|^2 dk - |W|^2}, \quad (22)$$

$$\int_0^t \Delta(\tau) d\tau = \arg W^*. \quad (23)$$

В результате анализа было показано, что в качестве выражения для c_k следует использовать нормированный вклад особой точки матричного элемента в интеграл от этого матричного элемента по времени. Это дает для $s_k(t)$ и $\alpha_k(t)$ следующие выражения:

$$s_k(t) = \sqrt{\frac{F}{2\sqrt{(2|E_0|)^3}}} \exp \left\{ -\frac{k_{\perp}^2 \sqrt{2|E_0|}}{2F} \right\} \delta(\mathbf{k}_{\parallel}), \quad (24)$$

$$\alpha_k(t) = \left(\frac{k^2}{2} - E_0 + \frac{F^2}{8\omega^2|E_0|} \right) t. \quad (25)$$

Коэффициент β следует из (22).

Отметим, что интеграл

$$\int |U_{0,k}(t)|^2 dk = \int |U_{0,p}(t)|^2 dp \tag{26}$$

пропорционален сумме сил осцилляторов по всему непрерывному спектру. В случае, когда коэффициент $|W|^2$ в (22) оказывается близок или равен величине (26), $\beta = 0$ и система (19) совпадает с введенной феноменологически [28].

Анализ показывает, что даже в простейшем случае линейной поляризации поля (12) поведение решений как исходной (14), так и приближенной (19) систем в окрестности особых точек приводит к невозможности использования известных методов эталонных уравнений и других аналитических моделей. В дальнейшем система (19) исследуется численно.

Вторым этапом решения является анализ системы уравнений для взаимодействий внутри непрерывного спектра (15). Система уравнений сильной связи при разложении по собственным числам момента количества движения l (в p -представлении) имеет вид

$$i\dot{a}_{l,k} = \sum_{l'} \int U_{l,k,l',k'} a_{l',k'} dk'. \tag{27}$$

Так как волновые функции в нашем базисе зависят от $p = k - A$, то удобно перейти от переменных k к переменным p . Поскольку в предположениях рассматриваемой модели $|p^2 - p'^2| \ll p^2$, матричные элементы свободно-свободных переходов (так называемые интегралы Зоммерфельда—Нордсика) могут быть приближенно выражены через функции Ганкеля [29]. При этом мы непосредственно использовали метод Зоммерфельда, основанный на интегральном представлении гипергеометрических функций Гаусса. Известно [26], что при больших значениях орбитального момента метод Зоммерфельда [29] приводит к результатам, совпадающим с квазиклассическими. Однако в нашей работе важную роль играют малые и средние значения l , для которых применение квазиклассики не оправдано.

Сделаем замену переменных

$$a_{l,p} = \exp \left\{ -ik \int_0^t A(\tau) d\tau \right\} \tilde{a}_{l,p}. \tag{28}$$

Если теперь перейти в независимой переменной к энергии $E = p^2/2$ и воспользоваться свойством $p \approx A$, то систему уравнений сильной связи можно переписать в следующем виде:

$$i\dot{a}_{l,E} = \sum_{l'} \int_{-E_n}^{\infty} W_{l,l'}(E-E', t) a_{l',E'} dE', \quad W_{l,l'}(E-E', t) = W_{l,l'}^*(E'-E, t), \tag{29}$$

$$W_{l,l\pm 1}(E-E', t) = \frac{32\pi^2 \omega^2 |E_0|}{F^2 \sin^2 \omega t} \sqrt{\left(l+1 \pm \frac{1}{2}\right) (2l+1)(2l+1 \pm 2)} \exp [i(E-E')t] \times \\ \times \left(\frac{\partial}{\partial x_{\pm}} H_{iv}^{(1)}(x_{\pm}) - i \operatorname{sign}(E-E') H_{iv}^{(1)}(x_{\pm}) \right), \tag{30}$$

$$\nu = \frac{|E - E'| \omega^3 \sqrt{2|E_0|}}{F^3 \sin^3 \omega t}, \quad x_{\pm} = i \frac{|E - E'| \omega^2}{F^2 \sin^2 \omega t} \sqrt{(l \pm 1/2)(l + 1 \pm 1/2)}. \quad (31)$$

Как уже отмечалось ранее, мы рассматриваем высоковозбужденные состояния атома как продолжение непрерывного спектра в область отрицательных энергий. Ввиду быстрой сходимости интеграла (29) на нижнем пределе значение E_n можно устремить к минус бесконечности. Быстрая сходимость интеграла связана с заселением кулоновского сгущения (высших ридберговских состояний) из непрерывного спектра и с резким убыванием заселенности этих состояний при уменьшении главного квантового числа.

Написанные в таком виде уравнения имеют решение в квадратурах. Обозначим столбец $(a_{0,E}, a_{1,E}, \dots)^T = \bar{a}_E$ и матрицу $W_{l,l'}(E - E', t) = \hat{W}(E - E', t)$. Тогда по правилам умножения матриц

$$i\dot{\bar{a}}_E = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{W}(E - E', t) \bar{a}_{E'} dE'. \quad (32)$$

Введем производящую функцию в виде столбца:

$$\bar{G}(\varphi, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \bar{a}_E(t) e^{-i\varphi E} dE. \quad (33)$$

Для нее справедливо уравнение

$$i\dot{\bar{G}} = \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\varphi x} \hat{W}(x, t) dx \right) \bar{G}, \quad (34)$$

которое имеет решение в виде матричной экспоненты:

$$\bar{G}(\varphi, t) = \exp \left(-i \int_0^t d\tau \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\varphi x} \hat{W}(x, \tau) dx \right) \bar{G}(\varphi, 0). \quad (35)$$

Столбец-решение получается из производящей функции путем обратного преобразования Фурье

$$\bar{a}_E(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \bar{G}(\varphi, t) e^{i\varphi E} d\varphi. \quad (36)$$

При прохождении области неadiaбатичности в окрестности точки $t_j = \pi j$ в непрерывном спектре происходят следующие изменения:

$$a_{l,E}(t_j + 0) = a_{l,E}(t_j - 0) + \delta_{l,1} \delta b_j \sigma_j(E), \quad (37)$$

где $\delta b_j = b(t_j + 0) - b(t_j - 0)$. Здесь $b(t)$ — соответствующий коэффициент системы (19), а $\sigma_j(E)$ — нормированное распределение, с которым происходит переход в основное

состояние и обратно. Начальные условия для системы (19) в каждой точке $t_j = \pi j$ имеют вид

$$a(t_j - 0) = a(t_{j-1} + 0)e^{i\eta_j}, \tag{38}$$

$$b(t_j - 0) = \int_0^\infty b_{1,E}(t_j - 0)\sigma_j^*(E)dE, \tag{39}$$

где η_j — набег адиабатической фазы коэффициента a на участке t_{j-1}, t_j , а

$$\sigma_j(E) = \sqrt{\frac{F}{2\sqrt{(2|E_0|)^3}}} \exp \left\{ -\frac{E\sqrt{2|E_0|}}{F} + i\frac{\pi}{\omega} \left(E - E_0 + \frac{F^2}{8\omega^2|E_0|} \right) \right\}. \tag{40}$$

Результаты численных расчетов по данной схеме будут приведены ниже. Результаты могут быть представлены и в другом виде. Рассмотрим столбцы $\bar{a}_j = (a(t_j - 0), b(t_j - 0))^T$. Тогда столбцы, соответствующие разным j , связаны между собой формулой

$$\bar{a}_j = \hat{N}_j \hat{S} \bar{a}_{j-1}, \tag{41}$$

где \hat{S} — матрица неадиабатического перехода, \hat{N}_j — матрица, описывающая изменение $\bar{a}(t)$ на промежутке (t_{j-1}, t_j) . Если предположить, что \hat{N}_j слабо зависит от j (что подтверждается расчетом), то записав матрицы в виде

$$\hat{S} = \left\| \begin{array}{cc} \sqrt{1 - \Pi^2} e^{iz} & i\Pi \\ i\Pi & \sqrt{1 - \Pi^2} e^{-iz} \end{array} \right\|, \quad \hat{N} = e^{ix} \left\| \begin{array}{cc} 1 & 0 \\ 0 & e^{-\mu + ix} \end{array} \right\|, \tag{42}$$

где Π, z, μ, x, χ — действительные величины, можно получить единое приближенное выражение для a_j :

$$a_j = \frac{\exp [(-\mu + ix)j/2]}{2g} \left(\sqrt{1 - \Pi^2} \right)^j \cos^{j-1} \varphi \times \\ \times \{ (1 + g)^j (i \sin \varphi + g \cos \varphi) - (1 - g)^j (i \sin \varphi - g \cos \varphi) \}, \\ g = \sqrt{1 - \frac{1}{(1 - \Pi^2) \cos^2 \varphi}}, \quad \varphi = z - \frac{x + i\mu}{2}. \tag{43}$$

Наличие в этой формуле величины μ и тот факт, что величина φ комплексна, отражают влияние свободно-свободных переходов в состояния с большими энергиями и с $l \neq 1$.

5. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

В данном разделе будут представлены некоторые результаты численного исследования решения упрощенных уравнений, описанного выше. Прежде всего отметим, что решение упрощенной эрмитовой системы без учета взаимодействия внутри континуума (19) не описывает полной ионизации атома при любых значениях параметров (времени, напряженности поля, его частоты). Свободно-свободные переходы, описываемые

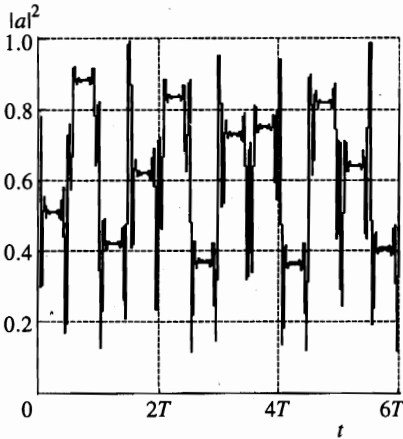


Рис. 1

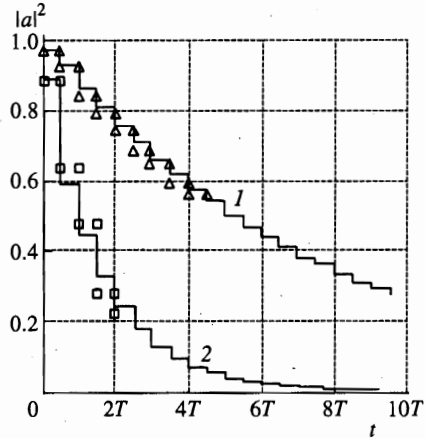


Рис. 2

Рис. 1. Численное решение системы (19) для случая $F/\omega \gg 1$ ($F = 0.3$ а.е., $\omega = 0.1$ а.е.). Представлена зависимость вероятности обнаружения электрона в основном состоянии от времени (T — период внешнего поля)

Рис. 2. Зависимость населенности основного состояния от времени (T — период внешнего поля) для $\omega = 0.1$ а.е.: 1 — $F = 0.2$ а.е.; 2 — $F = 0.4$ а.е. Точки — наш расчет по формулам (17)–(40), сплошные линии — приближение (43) с усредненной по нескольким начальным точкам матрицей \tilde{N}

уравнениями (27), приводят к заселению состояний с $l \neq 1$ и, соответственно, к оттоку вероятности из состояний, взаимодействующих непосредственно с основным состоянием. Именно в результате квантовых переходов внутри непрерывного спектра возможна полная ионизация атома.

На рис. 1 представлена зависимость населенности основного состояния атома водорода от времени, рассчитанная без учета свободно-свободных переходов при $F/\omega \gg 1$. Как видно из рисунка, взаимодействие между уровнями происходит в малой окрестности точек $t_j = \pi j$, $j = 0, 1, 2, \dots, N$, что подтверждает применимость рассматриваемого приближения в этом случае. Таким образом, в данном случае основное состояние не распадается. При учете взаимодействий внутри непрерывного спектра картина меняется. На рис. 2 представлены зависимости населенности основного состояния того же атома от времени при учете переходов внутри непрерывного спектра.

Из сравнения рисунков видно, что именно свободно-свободные переходы приводят к полному распаду основного состояния. Характерный график распределения по l представлен на рис. 3. Кроме того, вероятность возврата электрона в основное состояние может уменьшиться, из-за того что его энергия слишком велика. Этот эффект можно характеризовать отношением заселенности верхнего уровня двухуровневой системы к полной вероятности того, что электрон находится в состояниях непрерывного спектра с $l = 1$. Величина этого параметра оказалась слабо зависящей от поля и примерно равной 75%.

На рис. 4 представлена полученная нами (сплошная кривая) зависимость вероятности ионизации основного состояния атома водорода за 25 фс от интенсивности внешнего поля при $\omega = 2$ эВ и приведен результат (квадраты) прямого численного расчета [21].

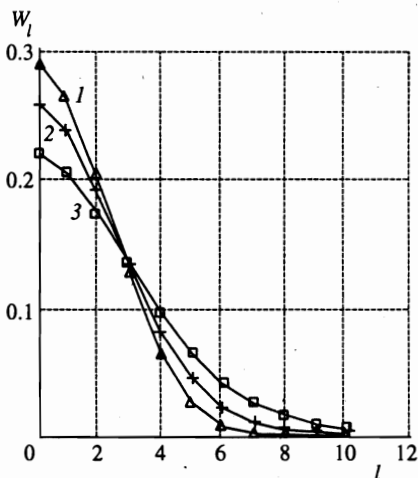


Рис. 3

Рис. 3. Распределения по l в непрерывном спектре в различные моменты времени: 1 — $t = T/2$; 2 — $t = T$; 3 — $t = 3T/2$. Случай $\omega = 0.1$ а.е., $F = 0.2$ а.е.

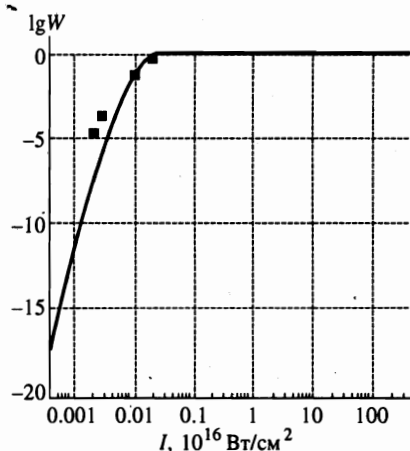


Рис. 4

Рис. 4. Зависимость вероятности ионизации за время 25 фс от интенсивности внешнего поля при $\omega = 2$ эВ. Квадраты — расчет [21], сплошная линия — расчет данной работы

Данный подход позволяет найти зависимость населенности состояний атома от времени при полях, сравнимых и превышающих атомное. Результаты соответствуют значениям параметров, относящимся как к туннельной, так и к надбарьерной ионизации. Расхождение результатов при малых интенсивностях ($F/\omega \ll 1$) вызвано использованием при выводе упрощенных уравнений (14), (15) разделения промежутков времени на интервалы эффективности связанно-свободных и свободно-свободных переходов. Анализ показывает, что данное разделение применимо при значениях параметра $F/\omega \geq 1$. Хотя система (19) применима и при $F/\omega \ll 1$, исследование слабых полей не является целью настоящей работы.

Расчет для больших напряженностей внешнего поля показывает, что при интенсивности $I > 3 \cdot 10^{14}$ Вт/см² ($F > 0.1$ а.е.) практически полная ионизация наступает уже после второго периода внешнего поля. На рис. 5 представлена зависимость полной населенности непрерывного спектра после первого полупериода внешнего поля от напряженности внешнего поля. Как видно, населенность колеблется около постоянной величины. Зная свойства решения уравнений для свободно-свободных переходов (матрицы \hat{N}) и воспользовавшись формулой (43), можно оценить вероятность ионизации за единицу времени для напряженностей внешних полей, многократно превышающих атомные. Последняя также колеблется около постоянного значения с ростом напряженности поля.

Кроме того, были найдены распределения электронов по энергии в непрерывном спектре и в кулоновском сгущении в различные моменты времени. На рис. 6 приведено характерное распределение для случая атома водорода, представляющее собой набор эквидистантно расположенных пиков, расстояние между которыми равно ω . Такой ха-

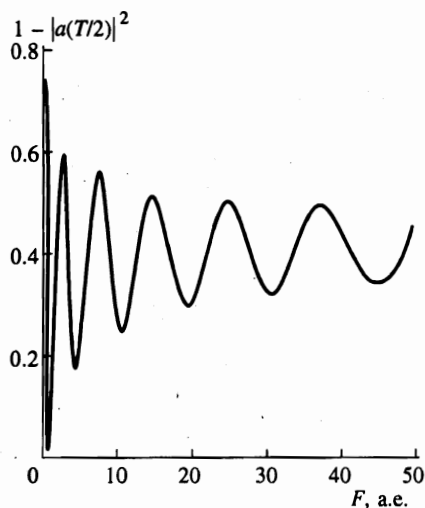


Рис. 5

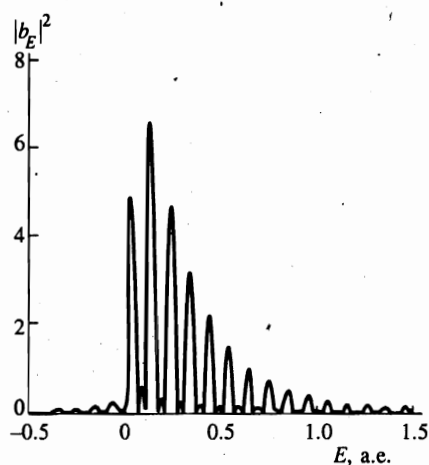


Рис. 6

Рис. 5. Зависимость полной населенности непрерывного спектра после первого полупериода внешнего поля в зависимости от напряженности внешнего поля ($\omega = 0.1$ а.е.)

Рис. 6. Распределение по энергии в непрерывном спектре ($t = 3T/2$, $F = 0.5$ а.е., $\omega = 0.1$ а.е.)

рактически является результатом учета большого числа вкладов точек t_0^j (см. разд. 3), каждый из которых имеет фазовую добавку (40). Описанная выше картина согласуется с результатами других авторов [21].

Из рис. 6 видно, что заселенность высших ридберговских состояний резко убывает с удалением от границы континуума, т.е. с уменьшением главного квантового числа. Этот результат подтверждает реалистичность предположений, использованных при решении упрощенных уравнений (29), (32).

Отношения суммарной заселенности ридберговских уровней атома водорода к заселенности всего непрерывного спектра приведена на рис. 7 в зависимости от напряженности электрического поля.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Существенным элементом проведенного выше анализа является использование базиса обобщенных кулоновских функций непрерывного спектра для решения нестационарного уравнения Шредингера методом сильной связи. Близкие по своему физическому смыслу к (1) волновые функции были предложены и в [12, 13], однако они не ортогональны функциям дискретного спектра, что затрудняет их использование в методе сильной связи. Действительно, набор неортогональных базисных функций приводит к усложнению получающихся уравнений сильной связи из-за появления матрицы неортогональности в левой части уравнений.

В рамках этого метода легко видеть, что квантовые переходы между состояниями

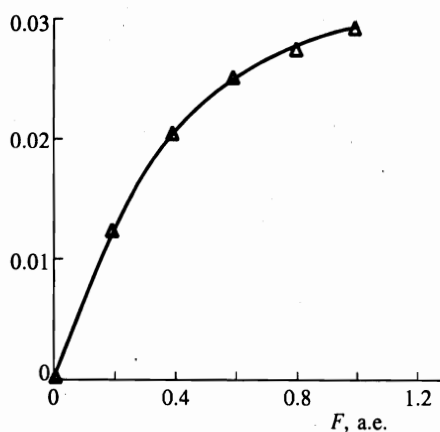


Рис. 7. Средние отношения суммарной заселенности ридберговских состояний к полной заселенности непрерывного спектра в зависимости от напряженности внешнего поля ($\omega = 0.1$ а.е.)

континуума играют решающую роль при ионизации атомов в сильном поле. Основной вклад в этот процесс дают переходы из состояний непрерывного спектра со значениями орбитального момента $l = 1$ в другие состояния континуума. Пренебрежение такими переходами привело бы к колебаниям населенности основного состояния атома в зависимости от физических параметров даже в случае сверхсильных полей. Строго говоря, атом ионизируется не полностью, поскольку оказываются заселенными уровни кулоновского сгущения (высшие ридберговские состояния), непосредственно примыкающие к непрерывному спектру. Однако суммарная вероятность их заселения не превышает 5%.

Авторы признательны Н. Б. Делоне, С. П. Гореславскому, Д. Ф. Зарецкому, В. П. Крайнову и М. В. Федорову за полезные обсуждения. Основные результаты данной работы детально обсуждались с Д. Б. Усковым, которому авторы глубоко благодарны за ряд ценных замечаний. Авторы благодарны рецензенту за конструктивный анализ и ценные замечания. Работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант № 96-16090) и INTAS (проект 94-4698).

Литература

1. Л. В. Келдыш, ЖЭТФ **47**, 1945 (1964).
2. А. М. Переломов, В. С. Попов, М. В. Терентьев, ЖЭТФ **50**, 1393 (1966).
3. F. H. M. Faisal, J. Phys. B **26**, L89 (1973).
4. H. R. Reiss, Phys. Rev. A **22**, 1786 (1980); **42**, 1476 (1990).
5. Ю. А. Бычков, А. М. Дыхне, ЖЭТФ **58**, 1734 (1970).
6. Д. Ф. Зарецкий, В. П. Крайнов, ЖЭТФ **66**, 537 (1974); **67**, 1301 (1975).
7. Н. Б. Делоне, В. П. Крайнов, *Атом в сильном световом поле*, Атомиздат, Москва (1978).
8. Н. Б. Делоне, В. П. Крайнов, УФН **168**, 531 (1998).
9. V. P. Krainov, J. Opt. Soc. Amer. B **14**, 425 (1997).
10. Л. П. Пресняков, Д. Б. Усков, ЖЭТФ **86**, 862 (1984).
11. F. Melchert, M. Benner, S. Krudener, S. Shulze, S. Huber, E. Salzborn, D. B. Uskov, and L. P. Presnyakov, Phys. Rev. Lett. **74**, 888 (1995).

12. J. S. Kaminski, *Physica Scripta A* **42**, 417 (1990).
13. M. H. Mittleman, *Phys. Rev. A* **50**, 3249 (1994).
14. L. P. Presnyakov, H. Tawara, I. Yu. Tolstikhina, and D. B. Uskov, *J. Phys. B* **28**, 785 (1995).
15. Л. П. Пресняков, Д. Б. Усков, *Письма в ЖЭТФ* **66**, 23 (1997).
16. Б. А. Зон, *ЖЭТФ* **73**, 65 (1977).
17. M. H. Mittleman, *Phys. Rev. A* **14**, 1338 (1976); **16**, 1549 (1977); **21**, 79 (1980).
18. F. W. Byron, P. Francken, and C. J. Joachain, *J. Phys. B* **20**, 5487 (1987).
19. L. A. Collins and A. L. Merts, *Phys. Rev. A* **45**, 6615 (1992).
20. J. Zhang and P. Lambropoulos, *J. Nonlinear Opt. Phys. Mater.* **4**, 633 (1995).
21. E. Cormier and P. Lambropoulos, *J. Phys. B* **30**, 77 (1997).
22. C. J. Joachain, M. Dorr, and N. J. Kylstra, *Comments At. Mol. Phys.* **33**, № 5, 247 (1997).
23. F. Ehlotzki, A. Jaron, and J. Z. Kaminski, *Phys. Rep.* **297**, 63 (1998).
24. M. V. Fedorov and A. M. Movsesyan, *J. Opt. Soc. Amer. B* **6**, 150, 928 (1989).
25. А. М. Мовсесян, М. В. Федоров, *ЖЭТФ* **95**, 47 (1989).
26. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1989).
27. Е. Е. Никитин, С. Я. Уманский, *Неадиабатические переходы при медленных атомных столкновениях*, Атомиздат, Москва (1979).
28. R. K. Janev and L. P. Presnyakov, *J. Phys. B* **13**, 4233 (1980).
29. А. Зоммерфельд, *Строение атомов и спектры*, Гостехиздат, Москва (1956).