Письма в ЖЭТФ, том 72, вып.5, стр.350 - 354

САМОСОГЛАСОВАННЫЕ УРАВНЕНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМА С ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМИ ПОЛЯМИ ПРОИЗВОЛЬНОЙ ИНТЕНСИВНОСТИ

А.В.Андреев

Международный лазерный центр и физический факультет МГУ им. М.В.Ломоносова 119899 Москва, Россия

Поступила в редакцию 20 июня 2000 г.

После переработки 28 июля 2000 г.

Предложена система уравнений взаимодействия атома с электромагнитными полями произвольной интенсивности. Специфика предложенных уравнений состоит в том, что в отсутствие поля распределение электронной плотности атома определяется уравнением Шредингера, а при наличии поля – уравнением, близким к классическому уравнению для электрона, находящегося в поле силы Лоренца.

PACS: 42.50.Md, 42.65.Ky

1. Исследования взаимодействия атомов и молекул со сверхсильными лазерными полями, проведенные в последнее время [1 – 5], показали, что общепринятые подходы, основанные на использовании теории возмущений и адекватно описывающие процессы взаимодействия атома с полями умеренной интенсивности, теряют свою применимость, когда напряженность поля внешней волны становится сравнима с напряженностью внутриатомного поля. Теряют свою общность также и подходы, основанные на использовании модели двух- или любого конечноуровневого атома. Основная причина этого состоит в том, что отношение величины гамильтониана взаимодействия и гамильтониана свободного атома H_0 перестает быть малым параметром [6]. Альтернативным к квантовомеханическому является классический подход, основанный на использовании уравнений для точечного электрона, находящегося в поле внешней волны и внутриатомного поля. Интуитивно ясно, что этот подход, по-видимому, применим, когда атомный электрон ионизован или находится в высоковозбужденном состоянии. Однако ясно, что в рамках данного подхода не следует рассчитывать на количественные совпадения при расчете скоростей ионизации атома или его отклика в полях умеренной интенсивности.

В настоящей статье предпринята попытка совместить простоту классического и точность квантовомеханического подходов при описании процессов взаимодействия атома с внешними полями. Получена замкнутая самосогласованная система уравнений для плотностей заряда и тока атомного перехода. Показано, что в предельных случаях уравнения совпадают с уравнением Шредингера или уравнением для классического электрона, находящегося в поле действия силы Лоренца.

2. Анализ взаимодействия нерелятивистского атома с внешними электромагнитными полями может быть проведен на основе совместного решения уравнений для векторного $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ и скалярного $\varphi(\mathbf{r},t)$ потенциалов поля и уравнения Шредингера для волновой функции атома $\psi(\mathbf{r},t)$:

$$\Delta\mathbf{A} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\mathbf{A}}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c^2}\mathbf{J}(\mathbf{r},t) + \frac{1}{c}\nabla\frac{\partial\varphi}{\partial t}, \tag{1а}$$

$$\Delta\varphi(\mathbf{r},t) = -4\pi(\rho(\mathbf{r},t) + \rho_z(\mathbf{r},t)), \tag{1б}$$

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi, \tag{1в}$$

где $\rho(\mathbf{r},t) = e\cdot\psi^{+}(\mathbf{r},t)\psi(\mathbf{r},t)$ – плотность заряда атомных электронов, $\rho_z(\mathbf{r},t)$ – плотность заряда ядра. В (1) мы использовали кулоновскую калибровку поля

$$\mathrm{div}\mathbf{A} = 0 \tag{2}$$

и ввели плотность обобщенного тока перехода $\mathbf{J}(\mathbf{r},t)$, связанную с квантовомеханической плотностью электронного тока

$$\mathbf{j}(\mathbf{r},t) = \frac{i\hbar e}{2m}(\nabla\psi^{+}(\mathbf{r},t)\cdot\psi(\mathbf{r},t) - \psi^{+}(\mathbf{r},t)\cdot\nabla\psi(\mathbf{r},t)) \tag{3}$$

следующим соотношением:

$$\mathbf{J}(\mathbf{r},t) = \mathbf{j}(\mathbf{r},t) - \frac{e}{mc}\mathbf{A}(\mathbf{r},t)\cdot\rho(\mathbf{r},t). \tag{4}$$

Гамильтониан атома во внешнем поле имеет хорошо известный вид:

$$H = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + e\varphi. \tag{5}$$

Традиционный подход к анализу взаимодействия атома с полем состоит в нахождении собственных функций невозмущенного атома, связанных с решением уравнения Шредингера для свободного атома $H_0 = H(\mathbf{A} = 0)$ и последующим расчетом амплитуд вероятностей заселения различных атомных уровней под влиянием внешнего поля. Однако если напряженность внешнего поля становится сравнима с напряженностью внутриатомного поля, то волновая функция искажается настолько сильно, что разложение по невозмущенным волновым функциям включает огромное число слагаемых, стремящееся с ростом поля к бесконечности. Это делает исключительно неудобным применение указанной классической процедуры для анализа взаимодействия атома со сверхсильными лазерными полями.

Как видно из уравнений (1а), (1б), для расчета отклика атома нам необходимо знать лишь плотность обобщенного тока $\mathbf{J}(\mathbf{r},t)$ и плотность заряда $\rho(\mathbf{r},t)$. Эти величины могут быть определены из решения уравнения Шредингера (1в). Однако решение уравнения Шредингера для произвольного атома, находящегося во внешнем поле, встречает известные трудности. Поэтому более рациональным является, по-видимому, подход, основанный на анализе замкнутой системы уравнений, включающей лишь указанные атомные переменные и потенциалы поля. Такой подход позволил бы развить различные итерационные процедуры расчета отклика атома на воздействие поля произвольной интенсивности.

3. Используя уравнение Шредингера (1в) с гамильтонианом (5), несложно получить следующие уравнения для плотности заряда и плотности обобщенного тока:

$$\partial\rho/\partial t + \mathrm{div}\mathbf{J} = 0, \tag{6а}$$

$$\frac{\partial J_\alpha}{\partial t} = \frac{e}{m}\left(\left(-\frac{1}{c}\frac{\partial A_\alpha}{\partial t} - \nabla_\alpha\varphi\right)\cdot\rho + \frac{1}{c}[\mathbf{J}\times\mathrm{rot}\mathbf{A}]_\alpha\right) +$$
$$+\frac{e}{mc}\nabla_\beta\left(A_\alpha J_\beta + A_\beta J_\alpha + \frac{e}{mc}A_\alpha A_\beta\rho\right) +$$

$$+\frac{\hbar^2}{4m^2}\nabla_\alpha(\Delta\rho) - \frac{e\hbar^2}{2m^2}\nabla_\beta(\nabla_\alpha\psi^+\nabla_\beta\psi + \nabla_\beta\psi^+\nabla_\alpha\psi). \tag{6б}$$

Мы видим, что уравнение (6а) является уравнением непрерывности, а первое слагаемое в правой части уравнения (6б) имеет простую классическую аналогию, поскольку совпадает по виду с классической силой Лоренца. Необычными являются последние три слагаемых этого уравнения. Ясно также, что система уравнений (6) не является замкнутой, поскольку уравнение (6б) включает новую переменную $q_{\alpha\beta} = \nabla_\alpha\psi^+\nabla_\beta\psi + \nabla_\beta\psi^+\nabla_\alpha\psi$, определяющуюся произведением производных волновой функции.

Покажем, как ее можно выразить через известные нам переменные. Для этого используем следующие равенства:

$$\nabla_\alpha(\psi^+\psi)\cdot\nabla_\beta(\psi^+\psi) = \nabla_\alpha\psi^+\nabla_\beta\psi^+\psi\psi + \psi^+\psi^+\nabla_\alpha\psi\nabla_\beta\psi + \psi^+\psi(\nabla_\alpha\psi^+\nabla_\beta\psi + \nabla_\beta\psi^+\nabla_\alpha\psi),$$

$$(\nabla_\alpha\psi^+\psi - \psi^+\nabla_\alpha\psi)\cdot(\nabla_\beta\psi^+\psi - \psi^+\nabla_\beta\psi) =$$
$$= \nabla_\alpha\psi^+\nabla_\beta\psi^+\psi\psi + \psi^+\psi^+\nabla_\alpha\psi\nabla_\beta\psi - \psi^+\psi(\nabla_\alpha\psi^+\nabla_\beta\psi + \nabla_\beta\psi^+\nabla_\alpha\psi).$$

Таким образом, получаем

$$eq_{\alpha\beta} = \frac{\nabla_\alpha\rho\nabla_\beta\rho}{2\rho} + \frac{2m^2}{\hbar^2}\frac{j_\alpha j_\beta}{\rho}. \tag{7}$$

Подставляя (7) в (6б), окончательно получаем

$$\frac{\partial J_\alpha}{\partial t} = \frac{e}{m}\left(\mathbf{E}\rho + \frac{1}{c}[\mathbf{J}\times\mathbf{H}]_\alpha\right) -$$
$$-\frac{\rho}{m}\nabla_\alpha\left(e\varphi - \frac{\hbar^2}{4m}\left(\nabla\left(\frac{\nabla\rho}{\rho}\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{\nabla\rho}{\rho}\right)^2\right)\right) - \nabla_\beta\left(\frac{J_\alpha J_\beta}{\rho}\right), \tag{8}$$

где $\mathbf{E} = -(1/c)(\partial\mathbf{A}/\partial t)$ – напряженность поперечной части электрического поля, $\mathbf{H} = \mathrm{rot}\mathbf{A}$.

Таким образом, уравнения (1а), (1б), (6а) и (8) составляют замкнутую систему уравнений для переменных $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$, $\varphi(\mathbf{r},t)$, $\mathbf{J}(\mathbf{r},t)$ и $\rho(\mathbf{r},t)$.

4. Отметим, что последние два слагаемых в правой части (6б) в рамках аппарата вторичного квантования уравнения Шредингера связаны с коммутатором $[\mathbf{j}, H_0]$ оператора плотности тока $\mathbf{j}$ и внутриатомного гамильтониана H_0, а второе слагаемое – с неточечностью электрона. Для того чтобы легче было провести сравнение с классическим уравнением для точечного электрона, удобно ввести локальную скорость электронного тока

$$\mathbf{V}(\mathbf{r},t) = \mathbf{J}(\mathbf{r},t)/\rho(\mathbf{r},t). \tag{9}$$

Подставляя (9) в (8), получим

$$\frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial\rho}{\partial t} + \mathbf{v}\nabla\rho\right) = -\mathrm{div}\mathbf{V}, \tag{10а}$$

$$\frac{\partial\mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{V}\nabla)\mathbf{V} = \frac{e}{m}\left(\mathbf{E} + \frac{1}{c}[\mathbf{V}\times\mathbf{H}]\right) - \frac{1}{m}\nabla\left[e\varphi - \frac{\hbar^2}{4m}\left(\nabla\left(\frac{\nabla\rho}{\rho}\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{\nabla\rho}{\rho}\right)^2\right)\right]. \tag{10б}$$

Система уравнений (10) имеет вид системы уравнений гидродинамики плазмы и отличается от них лишь наличием в правой части уравнения (10б) слагаемых, зависящих от плотности заряда.

5. Для того чтобы выяснить смысл добавочных слагаемых в правой части (10б), получим решение уравнений (10) в стационарном случае, когда

$$\partial\rho/\partial t = 0, \quad \mathbf{V} = 0. \tag{11}$$

Соотношения (11) выполняются в случае, когда

$$e\varphi - \frac{\hbar^2}{4m}\left(\nabla\left(\frac{\nabla\rho}{\rho}\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{\nabla\rho}{\rho}\right)^2\right) = C, \tag{12}$$

где C – константа. Введем следующие обозначения: $\rho = e \cdot n$ и $n = f^2$, тогда уравнение (12) можно переписать в следующем виде:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + e\varphi(\mathbf{r})\right) f(\mathbf{r}) = Ef(\mathbf{r}), \tag{13}$$

где для полной аналогии с уравнением Шредингера мы обозначили константу C буквой E.

Таким образом, мы видим, что в стационарном случае распределение плотности заряда атома определяется уравнением Шредингера для реальной волновой функции $f(\mathbf{r})$. Последнее не удивительно, поскольку, представляя волновую функцию в виде $\psi(\mathbf{r},t) = f(\mathbf{r},t)\exp[i\Phi(\mathbf{r},t)]$, мы получаем $\rho = ef^2$ и $\boldsymbol{\nu} = \mathbf{j}/\rho = (\hbar/m)\nabla\Phi$.

6. Итак, мы видели, что стационарное распределение заряда в атоме определяется уравнением Шредингера. Пусть теперь начальное состояние атома отличается от стационарного и внешнее поле отсутствует. Определим динамику изменения плотности заряда и тока атома. Введем субстациональную производную $d/dt = \partial/\partial t + (\mathbf{V}\nabla)$; тогда уравнения (10) можно переписать в виде

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{1}{\rho}\frac{d\rho}{dt}\right) - \frac{1}{m}\Delta\left[e\varphi - \frac{\hbar^2}{4m}\left(\nabla\left(\frac{\nabla\rho}{\rho}\right) + \frac{1}{2}\left(\frac{\nabla\rho}{\rho}\right)^2\right)\right] = 0. \tag{14}$$

Плотность заряда и плотность обобщенного тока можно представить, в общем случае, в следующем виде:

$$\rho(\mathbf{r},t) = \rho_0(\mathbf{r}) - \mathrm{div}\mathbf{P}(\mathbf{r},t), \quad \mathbf{J}(\mathbf{r},t) = \frac{\partial\mathbf{P}}{\partial t} + \mathrm{rot}\mathbf{M}(\mathbf{r},t),$$

где $\mathbf{P}$ и $\mathbf{M}$ есть соответственно векторы поляризации и намагниченности. Плотность $\rho_0(\mathbf{r})$ обусловлена электронами внутренних оболочек, сильно связанных с ядром, а часть $\rho(\mathbf{r},t) - \rho_0(\mathbf{r})$ обусловлена электронами внешних оболочек атома. В соответствии с этим электронную плотность можно представить в виде

$$n(\mathbf{r},t) = n_0(\mathbf{r}) + n_1(\mathbf{r},t) = n_0(\mathbf{r})\exp(\eta(\mathbf{r},t)). \tag{15}$$

Подставляя (15) в (14) и учитывая, что

$$\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\Delta\sqrt{n_0}}{\sqrt{n_0}} = -E + e\varphi_0(\mathbf{r}),$$

получим

$$\frac{d^2\eta}{dt^2}+\frac{4\pi e^2 n_0}{m}(\exp(\eta)-1)+\frac{\hbar^2}{4m^2}\Delta\left(\frac{\nabla n_0}{n_0}\nabla\eta+\Delta\eta+\frac{(\nabla\eta)^2}{2}\right)=0. \qquad (16)$$

Таким образом, в случае $\eta(\mathbf{r},t)=\eta(t)$ и $|\eta|\ll 1$ получаем следующее уравнение:

$$\frac{d^2\eta}{dt^2}+\frac{4\pi e^2 n_0}{m}\eta=0. \qquad (17)$$

Следовательно, при малых возмущениях электронная плотность осциллирует на плазменной частоте

$$\omega_p=\sqrt{\frac{4\pi e^2 n_0(r_0)}{m}},$$

где r_0 – радиус внутренних электронных оболочек атома. В общем случае, когда η не мало и зависит от координаты, слагаемые в уравнении (16), зависящие от градиента η, играют роль, аналогичную слагаемым для вязкости в уравнениях гидродинамики.

7. Таким образом, мы видим, что предложенные нами уравнения (8) и (10) совмещают классическое и квантовое описание движения атомных электронов в самосогласованном поле внутриатомного потенциала и поле внешней волны. Проведенные расчеты показывают, что стационарное распределение электронной плотности в атоме определяется решением уравнения Шредингера, а небольшие возмущения электронной плотности осциллируют на плазменной частоте, зависящей от значения плотности на данном ее эквипотенциале. Рост электронной плотности по мере приближения к центру атома приводит к тому, что движение внутренних электронов экранировано от воздействия длинноволнового (например, оптического) излучения, но может быть возмущено воздействием рентгеновского излучения. Качественное отличие предложенных уравнений от упомянутых базовых уравнений классической и квантовой механики состоит в том, что предложенные уравнения являются нелинейными. Нелинейность является следствием исключения вторых производных из билинейных комбинаций волновых функций (член $q_{\alpha\beta}$ в уравнении (6б)). В принципе, систему уравнений (6), вводя члены с более высокими производными, можно было бы продолжить до бесконечности, оставляя ее линейной относительно атомных переменных ρ, j_α, $q_{\alpha\beta}$,... Следовательно, основной причиной нелинейности является, по-видимому, учет эффектов нелокальности отклика атома.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант # 99-02-16093) и программы “Университеты России”.

---

1. N.B.Delone and V.P.Krainov, *Multiphoton process in atoms*, Springer-Verlag, Berlin, (1994).
2. M.V.Fedorov, *Atomic and free electrons in a strong light field*, World Scientific, Singapore, River Edge, NJ, 1997.
3. В.Т.Платоненко, В.В.Стрелков, Квант. электр. **25**, 586 (1998).
4. А.В.Ким, М.Ю.Рябикин, А.М.Сергеев, УФН **169**, 58 (1999).
5. М.В.Федоров, УФН **169**, 66 (1999).
6. А.В.Андреев, ЖЭТФ **116**, 793 (1999).