Письма в ЖЭТФ, том 68, вып.3, стр.189 - 193

НОВЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА АТОМОВ В ИНТЕНСИВНОМ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ

Л.П.Рапопорт

Воронежский государственный университет[1]

394693 Воронеж, Россия

Поступила в редакцию 25 июня 1998 г.

Найдено новое представление для взаимодействия интенсивного циркулярно-поляризованного света с атомом. Во взаимодействии атома с полем выделена стационарная центральносимметричная часть, зависящая от параметра поля $a_0 = F/\omega^2$. Часть взаимодействия, зависящая от времени, представлена в виде разложения по мультиполям, учитывающим a_0. Рассмотрено применение его для расчета нелинейной динамической поляризуемости сложного атома в приближении метода случайных фаз с обменом.

PACS: 31.15.-p

В последние годы было уделено большое внимание проблемам, связанным с динамикой атомных электронов в сверхсильных лазерных полях [1]. При изучении свойств сложного атома, взаимодействующего с интенсивным электромагнитным полем, мы встречаемся с двумя проблемами. Во-первых, невозможно использовать стандартную нестационарную теорию возмущений ввиду отсутствия малого параметра возмущения [2]. Во-вторых, нельзя ограничиться одночастичным приближением для электрона в атоме – приближением Хартри – Фока (HF). Однако учитывать многочастичные взаимодействия в атоме, используя, например, приближение хаотических фаз с обменом (RPAE) в обычной форме, также нельзя, так как оно применимо лишь для слабого внешнего поля [3]. Интенсивное электромагнитное поле воздействует не только непосредственно на определенный электрон, но и на остальные электроны атома, вызывая их виртуальные возбуждения, зависящие от частоты и силы поля. Происходит нелинейная динамическая поляризуемость атомных оболочек, которая не может быть рассчитана в обычном методе RPAE, поскольку должна быть учтена как в базисных HF функциях системы "атом+поле", так и в выражении для сильного, инициирующего переходы, поля.

В данной работе получено новое выражение для взаимодействия атома с циркулярно поляризованным полем, пригодное даже для сверхсильных электромагнитных полей. Показано, как видоизменяются уравнения HF для "одетого полем" атома и уравнения метода RPAE в сильном поле.

Гамильтониан водородоподобного атома в интенсивном электромагнитном поле. Представим решение уравнения Шредингера (используется атомная система едениц $\hbar = e = m = 1$)

$$i\,\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \hat{H}(t)\Psi \tag{1}$$

[1] e-mail: kornev@tooth.vsu.ru

в форме $\Psi' = \hat{U}\Psi$, где $\hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$ – унитарный оператор. Тогда для Ψ' мы получим уравнение вида (1) с оператором

$$\hat{H}' = i\left(\frac{\partial \hat{U}}{\partial t}\right)\hat{U}^\dagger + \hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger. \tag{2}$$

Рассмотрим сначала водородоподобный атом с зарядом ядра Z, находящийся в поле, описываемом вектор-потенциалом $\mathbf{A}(t)$ (дипольное приближение):

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{1}{c}\mathbf{A}(t)\right)^2 - \frac{Z}{r}. \tag{3}$$

В циркулярно поляризованном поле

$$\mathbf{A}(t) = -A_0(\mathbf{e}_x \sin\omega t + \eta\mathbf{e}_y \cos\omega t), \tag{4}$$

где $A_0 = Fc/\omega$, c – скорость света, $\eta = \pm 1$ для лево- (право-) поляризованной волны, F – напряженность поля, ω – его частота.

Преобразуем гамильтониан (3), используя (2), с помощью двух последовательных унитарных операторов:

$$\hat{U}_{K-H} = \exp\left[\frac{i}{c}\,\hat{\mathbf{p}}\int^{t}\mathbf{A}(t')dt'\right]; \tag{5}$$

получим

$$\hat{H}_{vib} = \hat{U}_{K-H}\hat{H}\hat{U}^\dagger_{K-H} \tag{6}$$

(преобразование Крамерса–Хеннебергера [4]) и

$$\hat{U}_{rot} = \exp(-i\eta\omega t\hat{L}_z), \tag{7}$$

где $\hat{L}_z = -i\,\partial/(\partial\varphi)$ – оператор проекции углового момента в сферической системе координат. Оператор $\hat{U}_{rot}$ осуществляет переход во вращающуюся систему координат:

$$\hat{H}_{rot} = \hat{U}_{rot}\hat{H}_{vib}\hat{U}^\dagger_{rot}. \tag{8}$$

В результате действия двух преобразований имеем [5]:

$$\hat{H}_{rot}(\mathbf{r}, \mathbf{a}_0) = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{Z}{|\mathbf{r} - \mathbf{a}_0|} + \eta\omega L_z, \tag{9}$$

где $\mathbf{a}_0 = a_0\mathbf{e}_x$, $a_0 = F/\omega^2$. Оператор (9) не зависит от времени, и уравнение (1) с оператором $\hat{H}_{rot}$ (9) перейдет в стационарное уравнение Шредингера с точной квазиэнергией E. Существенно отметить, что $\hat{H}_{rot}$ (9) имеет ту же асимптотику при $r \to \infty$, что и гамильтониан (3) без поля. Параметр поля a_0 определяет динамику электрона и спектр квазиэнергии E в системе "атом+поле".

В уравнении (9) потенциал $Z|\mathbf{r} - \mathbf{a}_0|^{-1}$ является производящей функцией для полиномов Лежандра. Через сферические функции $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ и $Y_{lm}(\mathbf{a}_0/a_0)$ он может быть представлен в виде ряда

$$Z|\mathbf{r} - \mathbf{a}_0|^{-1} = \sum_{l=0}^{\infty}\sum_{m=-l}^{l}\frac{4\pi Z}{2l+1}\,\xi_l(r, a_0)\,Y_{lm}(\theta, \varphi)\,Y^*_{lm}(\mathbf{a}_0/a_0), \tag{10}$$

где $\xi_l(r,a_0) = r_<^l/r_>^{l+1}$; $r_< = \min(r,a_0)$; $r_> = \max(r,a_0)$.

Возвратимся с помощью обратного унитарного преобразования $\hat{U}_{rot}^{-1} = \hat{U}_{rot}^{\dagger}$ (2), (7) в колеблющуюся систему координат. Получим:

$$\hat{H}_{vib}(\mathbf{r},\mathbf{a}_0;t) = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \sum_{l=0}^{\infty}\frac{4\pi Z}{2l+1}\,\xi_l(r,a_0)\,Y_{l0}(\theta,\varphi)\,Y_{l0}^*(\mathbf{a}_0/a_0) -$$

$$-\sum_{l=1}^{\infty}\sum_{\substack{m=-l\\(m\neq 0)}}^{l}\frac{4\pi Z}{2l+1}\,\xi_l(r,a0)\,Y_{lm}(\theta,\varphi)\,Y_{lm}^*(\mathbf{a}_0/a_0)\,e^{-i\eta m\omega t}. \qquad (11)$$

Второй член (11) не зависит от времени, но при $l>0$ является нецентральным. Выделим из него центрально-симметричную часть, умножая его на $|Y_{l'0}|^2$ и интегрируя по телесному углу $d\Omega$. Получим

$$\hat{V}_s^{\,l}(r,a_0) = Z\sqrt{4\pi}\,(2l+1)\sum_{k=0}^{2l}\xi_k(r,a_0)\,Y_{l0}^*(\mathbf{a}_0/a_0)\times$$

$$\times(2k+1)^{-1}\begin{pmatrix} l & k & l\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}^2. \qquad (12)$$

Разность между не зависящим от времени потенциальным членом (11) и $\hat{V}_s^{\,l}$ не является центрально-симметричной, и в случае сверхинтенсивных полей может быть учтена методом сильной связи каналов (или по стационарной теории возмущений). В дальнейшем здесь мы ее учитывать не будем. Таким образом, $\hat{H}_{vib}(\mathbf{r},\mathbf{a}_0;t)$ можно представить в виде

$$\hat{H}_{vib}(\mathbf{r},\mathbf{a}_0;t) = -\frac{1}{2}\nabla^2 - \hat{V}_s^{\,l}(r,a_0) - \hat{V}_{int}(\mathbf{r},\mathbf{a}_0;t), \qquad (13)$$

где

$$\hat{V}_{int}(\mathbf{r},\mathbf{a}_0;t) = \sum_{l=1}^{\infty}\sum_{\substack{m=-l\\(m\neq 0)}}^{l}\frac{4\pi Z}{2l+1}\,\xi_l(r,a0)\,Y_{lm}(\theta,\varphi)\,Y_{lm}^*(\mathbf{a}_0/a_0)\,e^{-i\eta m\omega t}. \qquad (14)$$

Сравним $\hat{V}_s^{\,l} + \hat{V}_{int}$ (12), (14) с разложением в ряд Фурье $|\mathbf{r}-\mathbf{a}(t)|^{-1}$, обычно используемым для расчетов в сверхинтенсивных электромагнитных полях [4] в методе квазиэнергий [6]. В этом случае

$$|\mathbf{r}-\mathbf{a}(t)|^{-1} = \frac{1}{\pi}\sum_{n=-\infty}^{\infty} i^{-n}e^{in\omega t}\int_0^{\pi}\frac{\cos(n\alpha)\,d\alpha}{|\mathbf{r}-\mathbf{a}_0\cos\alpha|}, \qquad (15)$$

где $\mathbf{a}_0$ может быть использован как для линейной, так и для циркулярной поляризации света. При $n=0$ в разложении (15) выделяется стационарная часть

$$\hat{V}^{\,0} = \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi}\frac{d\alpha}{|\mathbf{r}-\mathbf{a}_0\cos\alpha|}. \qquad (16)$$

$\hat{V}^{\,0}$ не обладает центральной симметрией (может быть выражена через полный эллиптический интеграл от $\mathbf{r}$, $\mathbf{a}_0$), поэтому в (16) невозможно разделить радиальные и угловые переменные. Циркулярно поляризованное излучение не имеет никаких преимуществ перед линейной поляризацией. Вид коэффициентов Фурье (15) при $n > 0$ также очень сложен. Поэтому (15) нельзя разложить по мультиполям. Преимущества $\hat{V}_s^l + \hat{V}_{int}$ (12), (14) по сравнению с представлением (15) для циркулярно поляризованного света очевидны.

Уравнения HF для системы "атом+поле" и метода RPAE. Кулоновское взаимодействие между электронами $|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_q|^{-1}$ в сложном атоме не изменяется при унитарных преобразованиях операторами (5), (7) и поэтому N-электронный гамильтониан в поле (4) для "одетого атома" $\hat{H}^{af}$ имеет вид

$$\hat{H}^{af}_{vib} = \sum_{k=1}^{N} \left\{ -\frac{1}{2}\nabla_k^2 - V^l_{sk}(r, a_0) \right\} + \frac{1}{2} \sum_{k \neq q = 1}^{N} \frac{1}{|\mathbf{r}_k - \mathbf{r}_q|}. \tag{17}$$

Так как заменяющее кулоновское взаимодействие электронов с ядром $V^l_{sk}(r, a_0)$ (12) является центрально-симметричным, систему уравнений HF для гамильтониана (17) можно вывести, выполняя обычную вариационную процедуру. Представляя пробную функцию в виде $\Psi = \det ||\varphi_k(\mathbf{r}, a_0)||$, получим:

$$\left\{ -\frac{1}{2}\nabla^2 - \hat{V}_s^l \right\} \varphi_i(\mathbf{r}, a_0) + \sum_{k=1}^{N} \int \frac{d\mathbf{r}'}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \varphi_k^*(\mathbf{r}', a_0) \times$$
$$\times [\varphi_k(\mathbf{r}', a_0)\varphi_i(\mathbf{r}, a_0) - \varphi_i(\mathbf{r}', a_0)\varphi_k(\mathbf{r}, a_0)] = \varepsilon_i \varphi_i(\mathbf{r}, a_0). \tag{18}$$

В уравнениях (18) можно отделить угловые части и, проинтегрировав уравнения для любого параметра поля $a_0 = F/\omega^2$ (естественно, кроме статического предела $\omega \to 0$), найти $\varepsilon_i(a_0)$ и $\varphi_i(\mathbf{r}, a_0)$ для "одетого полем" атома.

Подобно методу HF, легко получить уравнения RPAE. Фактически всю теорию RPAE для слабого инициирующего внешнего электромагнитного поля, выведенную в неподвижной системе координат, можно применить для сильного поля в колеблющейся с частотой поля системе координат. Для этого нужно заменить дипольную, не зависящую от силы поля F, вершину

$$V(\mathbf{r}) = \pm \left(\frac{8\pi}{3} \right)^{1/2} r\, Y_{1,\mp 1}(\mathbf{n})$$

на l, m-тую компоненту вершины в сильном поле (14)

$$\hat{V}^{l,m}(\mathbf{r}, a_0) = \frac{4\pi Z}{2l+1} \xi_l(r, a_0)\, Y_{lm}(\theta, \varphi)\, Y^*_{lm}(\mathbf{a}_0/a_0), \tag{19}$$

где $l, m > 0$. При этом для многофотонного поглощения ($l \gg 1$, $m \approx l$) можно использовать асимптотическое представление для $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ и $Y^*_{lm}(\mathbf{a}_0/a_0)$, входящих в (19) [7]:

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) \approx \frac{e^{im\varphi}}{\pi} \frac{\cos\left[(2l+1)\frac{\theta}{2} + (2m-1)\frac{\pi}{4}\right]}{\sqrt{\sin\theta}};$$

$$Y^*_{lm}(\mathbf{a}_0/a_0) = \begin{cases} (-1)^{(l+m)/2} \left[\frac{2l+1}{4\pi}\,\Phi(l,m)\right]^{1/2}, & l+m \text{ – четно}, \\ 0, & l+m \text{ – нечетно}. \end{cases}$$

Здесь
$$\Phi(l,m)=\frac{(l-m-1)!!}{(l-m)!!}\frac{(l+m-1)!!}{(l+m)!!}.$$

Волновые функции HF без поля необходимо заменить на $\varphi_k(\mathbf{r},a_0)$ в поле и $\omega\to m\omega$. Известное интегральное уравнение для матричных элементов RPAE [3] перейдет в RPAE в сильном поле:

$$\langle k_2|\,\hat{V}(m\omega,a_0)\,|k_1\rangle=\langle k_2|\,\hat{V}^{\,l,m}\,|k_1\rangle+$$
$$+\sum_{k_3,k_4}\frac{(n_{k_3}-n_{k_4})\langle k_1|\hat{V}(m\omega,a_0)|k_3\rangle\langle k_2k_3|U|k_1k_4\rangle}{\varepsilon_{k_3}(a_0)-\varepsilon_{k_4}(a_0)+m\omega+i\delta(1-2n_{k_4})},\tag{20}$$

где
$$n_\lambda=\begin{cases}1, & \lambda\leqslant F,\\ 0, & \lambda>F,\end{cases}$$

F – уровень Ферми, $U=|\mathbf{r}_k-\mathbf{r}_q|^{-1}$. В (20) первый член справа описывает прямое воздействие внешнего поля на электрон, который переходит из $|k_1\rangle$ в $|k_2\rangle$ в "одетом атоме". Второй член является корреляционным, он описывает возбуждение внешним полем $\hat{V}^{\,l,m}$ другого электрона с образованием электронно-дырочной пары, рассчитанной на функциях HF "одетого атома". Взаимодействие U между электронами в последнем члене (20) приводит к передаче возбуждения от других атомных электронов (сумма по k_3, k_4) к рассматриваемому. Физический смысл второго члена – это поляризация атома в сильном поле a_0, $m\omega$, то есть нелинейная динамическая поляризуемость атома. Для ее расчета необходимо решить интегральное уравнение (20) для эффективной вершины. Существенным облегчением его решения является проведение в аналитической форме интегрирования по угловым переменным. В результате уравнение (20) для $\hat{V}(m\omega;a_0)$ станет одномерным. Матричные элементы будут выражены через приведенные и $3j$-, $6j$-символы.

В заключение отметим, что все известные уточнения метода RPAE в слабом поле можно использовать и для RPAE в сильном поле с указанной ранее заменой.

Работа выполнялась при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 98–02–16084).

---

1. Super-Intense Laser-Atom Physics, IV, Eds. H.G.Muller and M.V.Fedorov, Dordrecht. Kluwer Academic, 1996.
2. N.L.Manakov, V.D.Ovsiannikov, and L.P.Rapoport, Phys. Rep. **141**, 320 (1986).
3. М.Я.Амусья, *Атомный фотоэффект*, М.: Наука, 1987.
4. W.C.Henneberger, Phys. Rev. Lett. **21**, 838 (1968).
5. Л.П.Рапопорт, ЖЭТФ **105**, 534 (1994).
6. N.B.Delone and V.P.Krainov, *Multiphoton Processes in Atoms*, Springer-Verlag, Berlin, 1994.
7. Д.А.Варшалович, А.Н.Москалев, В.К.Херсонский, *Квантовая теория углового момента*, Л.: Наука, 1975.