

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ ИОНИЗАЦИИ ДВУХЭЛЕКТРОННОЙ КВАНТОВОЙ СИСТЕМЫ В ЛАЗЕРНОМ ИМПУЛЬСЕ ФЕМТОСЕКУНДНОЙ ДЛИТЕЛЬНОСТИ

Е. А. Волкова, А. М. Попов, О. В. Тихонова*

*Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д. В. Скобельцина
Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова
119899, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 14 апреля 1998 г.

Методом прямого численного интегрирования нестационарного уравнения Шредингера исследуется процесс ионизации простейшей двухэлектронной модельной системы — одномерного отрицательного иона водорода. Получены вероятности одноэлектронной и двухэлектронной ионизации в зависимости от частоты и интенсивности излучения. Показано, что двухэлектронная ионизация происходит в результате как прямого, так и последовательного механизмов процесса. Исследуется явление стабилизации двухэлектронной системы относительно процесса ионизации. Проведено сравнение полученных данных с расчетами, выполненными в рамках одномерной одночастичной модели H^- . Проанализирован спектр фотоэлектронов в области параметров, соответствующих режиму одноэлектронной ионизации.

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование динамики атомарных систем в лазерных полях высокой интенсивности представляет в настоящее время большой интерес [1]. Однако при теоретическом описании взаимодействия электромагнитного излучения с атомами, как правило, ограничиваются одноэлектронным приближением. В рамках такого приближения квантовая система представляется в виде единственного электрона, движущегося в некотором эффективном статическом потенциале, учитывающем кулоновское взаимодействие с ядром, а также частичную экранировку ядра остальными электронами. Очевидно, одноэлектронное приближение может успешно использоваться для описания водородоподобных систем, характеризующихся наличием единственного слабосвязанного валентного электрона, движущегося в поле атомного остова. Однако даже в этом случае сильное внешнее поле может существенно исказить электростатический потенциал, создаваемый атомным остовом, в котором движется внешний электрон и, тем самым, оказывать на него дополнительное влияние. Что касается отрицательных ионов, они всегда характеризуются наличием нескольких (не менее двух) электронов на внешней оболочке, что ставит под сомнение возможность описания процесса их ионизации в одноэлектронном приближении. Казалось бы, единственным исключением является отрицательный ион водорода H^- , который представляет собой систему с вытолкнутым электроном, вращающимся вокруг остова — атома водорода. Сказанное выше позво-

*E-mail: popov@mics.msu.su

ляет утверждать, что построение корректных с физической точки зрения моделей фотоионизации многоэлектронных атомных систем представляет собой актуальную задачу.

В настоящее время метод прямого численного интегрирования нестационарного уравнения Шредингера для квантовой системы в поле электромагнитной волны позволяет исследовать ионизацию одномерных двухэлектронных систем без каких-либо упрощающих предположений. Так, например, в [2, 3] был исследован процесс ионизации модельного одномерного атома He, а в [4–6] — отрицательного иона водорода.

В этих работах получены зависимости вероятности ионизации системы от интенсивности излучения, проанализированы спектры фотоэлектронов. Однако без ответа остались, на наш взгляд, ключевые вопросы, которые возникают при описании динамики двухэлектронных систем в поле электромагнитной волны. В частности, необходимо выяснить, при каких условиях возможно описание динамики системы в приближении одноэлектронного атома, как скажется наличие второго электрона на режиме стабилизации, предсказываемом в рамках одноэлектронной модели. И, наконец, в случае двухэлектронной ионизации какой из механизмов — прямой или последовательный — более адекватно описывает физическую сущность процесса?

В данной работе получено точное численное решение двухчастичного уравнения Шредингера для одномерного отрицательного иона водорода в поле электромагнитной волны. С помощью полученной волновой функции рассчитаны вероятности одно- и двухэлектронной ионизации в зависимости от интенсивности и частоты излучения. Показано, что двухэлектронная ионизация есть результат конкуренции прямого и последовательного процессов. В области одноэлектронной ионизации получены энергетические спектры фотоэлектронов. Определена область существования режима стабилизации. Исследована возможность описания динамики H^- в рамках одноэлектронной модели.

2. ДВУХЧАСТИЧНАЯ ОДНОМЕРНАЯ МОДЕЛЬ ОТРИЦАТЕЛЬНОГО ИОНА ВОДОРОДА

В рамках одномерной модели предполагалось, что взаимодействие электронов с ядром и друг с другом описывается сглаженным кулоновским потенциалом [7].

Поэтому гамильтониан системы записывается в виде

$$H = \sum_{i=1}^2 (T_i + V(x_i)) + V_{12}(x_1, x_2). \quad (1)$$

Здесь T_i — кинетическая энергия i -го электрона, $V(x_i) = -e^2/\sqrt{\alpha^2 + x_i^2}$ — энергия его взаимодействия с ядром, $V_{12} = e^2/\sqrt{\alpha^2 + (x_1 - x_2)^2}$ — энергия взаимодействия электронов друг с другом, α — параметр сглаживания.

Известно [7], что сглаженный кулоновский потенциал качественно правильно описывает структуру энергетического спектра атома водорода, в частности, наличие бесконечно большого числа ридберговских состояний, сгущающихся к границе континуума. Что касается основного состояния, то его энергия очень чувствительна к выбору значения α . Поэтому можно ожидать, что в двухэлектронной системе энергия связанных состояний и их количество будут сильно зависеть от выбора значения параметра сглаживания.

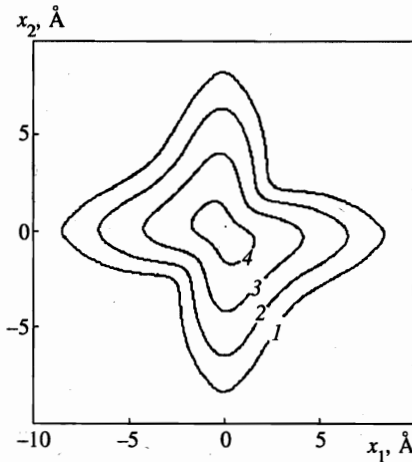


Рис. 1. Распределение плотности вероятности $\rho(x_1, x_2)$ для основного состояния одномерного отрицательного иона водорода. Линии равной плотности вероятности соответствуют значениям 10^{-4} (1), 10^{-3} (2), 0.01 (3), 0.1 (4)

Стационарные состояния, соответствующие гамильтониану (1), были получены нами путем решения двухчастичного стационарного уравнения Шредингера

$$H\varphi(x_1, x_2) = E\varphi(x_1, x_2) \tag{2}$$

на прямоугольной сетке. При этом использовалась симметрия гамильтониана относительно пространственной инверсии,

$$H(x_1, x_2) = H(-x_1, -x_2),$$

и замены электронов местами,

$$H(x_1, x_2) = H(x_2, x_1).$$

Метод решения изложен в Приложении.

Волновая функция основного состояния H^- для значения $\alpha = 0.92 \text{ \AA}$ представлена на рис. 1. Энергия этого состояния равна $E_0 = -12.56 \text{ эВ}$. Если учесть энергию связи электрона в атоме водорода при том же значении α , $E_1 = -11.45 \text{ эВ}$, то получим, что энергия отрыва электрона от H^- (потенциал ионизации) составляет $I \sim 1.1 \text{ эВ}$, что достаточно близко к экспериментальному значению $I \approx 0.75 \text{ эВ}$. Отметим, что при выбранном значении параметра найденное связанное состояние оказалось единственным.

В работах [4, 5] было выбрано $\alpha = a_0$ (боровский радиус). В этом случае оказалось, что $I \approx 1.7 \text{ эВ}$, а вопрос о количестве связанных состояний остался неясным: авторы [5] допускают появление второго состояния в дискретном спектре вблизи границы континуума. Наши расчеты при значении $\alpha = a_0$ показывают, что такое состояние, по-видимому, существует, однако для определения его энергии надо повышать точность расчетов.

Отметим, что единственное связанное состояние в модельном (как и реальном трехмерном) отрицательном ионе водорода характеризуется симметричной относительно замены электронов местами волновой функцией. Это означает, что полный спин S в этом состоянии равен нулю. Поскольку в электрическом дипольном приближении действует

запрет интеркомбинаций, в процессе лазерного воздействия состояние двухэлектронной системы все время будет оставаться синглетным.

Данные, представленные на рис. 1, свидетельствуют об относительной «вытолкнутости» одного из электронов в системе: более вероятны такие состояния, когда один из электронов находится вблизи притягивающего центра, а другой на значительно большем расстоянии от него. Наблюдаемое выталкивание одного из электронов, конечно, существенно отличается от классических представлений о вытолкнутом электроне, движущемся по орбите большого радиуса, чем внутренний электрон. Такой классической картине с точки зрения нашей одномерной квантовомеханической модели соответствовало бы распределение электронной плотности $\rho(x_1, x_2)$ с локальными максимумами в областях, расположенных вблизи точек $x_1 \approx 0, x_2 = \pm x_m$ и $x_2 \approx 0, x_1 = \pm x_m$ (x_m — удаление от центра вытолкнутого электрона). Реальное распределение двухэлектронной плотности имеет «крестообразный» характер, причем ее максимум достигается в начале координат $x_1 = x_2 = 0$. Однако, если двухэлектронную функцию $\Psi(x_1, x_2)$ аппроксимировать функцией, построенной в виде симметризованного произведения двух одноэлектронных орбиталей $u(x)$ и $v(x)$,

$$\Psi(x_1, x_2) \sim (u(x_1)v(x_2) + u(x_2)v(x_1)),$$

то, для того чтобы получилась двухэлектронная плотность, изображенная на рис. 1, эти орбитали должны характеризоваться разными величинами дисперсий координаты, т. е. разными размерами областей пространственной локализации электронов. В этом смысле мы будем в дальнейшем говорить о внешнем и внутреннем электронах. В качестве примера такой структуры волновой функции можно указать волновую функцию Чандрасекара [8]

$$\Psi(r_1, r_2) \propto \exp(-r_1/a_1 - r_2/a_2) + \exp(-r_2/a_1 - r_1/a_2)$$

($a_1 \approx 0.97a_0, a_2 \approx 3.53a_0, a_0$ — боровский радиус), приближенно описывающую основное состояние трехмерного отрицательного иона водорода.

Полученная волновая функция основного состояния отрицательного иона водорода свидетельствует о сильных межэлектронных корреляциях в системе. В частности, как видно из рис. 1, более вероятны такие состояния, когда электроны находятся по разные стороны от притягивающего центра. Межэлектронные корреляции приводят к отсутствию симметрии волновой функции $\Psi(x_1, x_2)$ при инверсии относительно одной из осей координат $x_1 \rightarrow -x_1$ или $x_2 \rightarrow -x_2$. Такая особенность функции $\Psi(x_1, x_2)$ не может быть описана в терминах одноэлектронных орбиталей.

Количественно степень скоррелированности движения электронов можно охарактеризовать коэффициентом корреляции K , введенным в [9]. В [10] значение коэффициента K было вычислено для основного состояния одномерных систем H^- и He , рассматриваемых в рамках точной двухчастичной модели. Оказалось, что более сильные корреляции имеют место для системы H^- . Это связано с тем, что, в отличие от атома гелия, энергию межэлектронного взаимодействия уже нельзя считать малой по сравнению с энергией взаимодействия каждого из электронов с ядром.

В отличие от основного состояния, все возбужденные состояния H^- принадлежат непрерывному спектру. Среди них можно выделить состояния одноэлектронного континуума, когда один из электронов находится в дискретном спектре, а другой — в непрерывном, и двухэлектронного континуума, соответствующие инфинитному движению обоих электронов.

Состояния одноэлектронного континуума представляют собой систему «атом водорода + свободный электрон». Если для таких состояний не учитывать взаимодействия электронов друг с другом и, кроме того, аппроксимировать волновую функцию свободного электрона плоской волной де-Бройля с волновым вектором k и энергией $E = \hbar^2 k^2 / 2m$, то в случае $S = 0$ с учетом принципа тождественности состояния одноэлектронного континуума будут описываться пространственной волновой функцией вида

$$\varphi_{nk}(x_1, x_2) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \Phi_n(x_1) \frac{\exp(ikx_2)}{\sqrt{2\pi}} + \Phi_n(x_2) \frac{\exp(ikx_1)}{\sqrt{2\pi}} \right\}, \tag{5}$$

где $\Phi_n(x)$ — волновая функция, описывающая атом водорода в n -ом стационарном состоянии, удовлетворяющая одноэлектронному стационарному уравнению Шредингера для электрона в сглаженном кулоновском потенциале (энергии E_n девяти нижних состояний в атоме водорода приведены в таблице). Такое приближение допустимо, по-видимому, по крайней мере, для не очень малых k , а также вследствие того, что потенциал, создаваемый в пространстве нейтральным атомом водорода, является короткодействующим.

Таблица

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9
$E_n, \text{эВ}$	-11.45	-6.05	-3.85	-2.52	-1.74	-1.26	-0.96	-0.60	-0.41

3. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С ПОЛЕМ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ ВОЛНЫ

Динамика системы во внешнем лазерном поле описывается уравнением

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x_1, x_2, t)}{\partial t} = [H - e(x_1 + x_2)\varepsilon(t) \cos(\omega t)] \Psi(x_1, x_2, t), \tag{6}$$

где ω — частота электрического поля волны, $\varepsilon(t)$ — огибающая импульса. В расчетах огибающая $\varepsilon(t)$ выбиралась в виде

$$\varepsilon(t) = \begin{cases} \varepsilon_0 \sin^2 \frac{\pi t}{2t_f}, & t \leq t_f, \\ \varepsilon_0, & t_f \leq t \leq t_f + t_p, \\ \varepsilon_0 \sin^2 \frac{\pi [t - (2t_f + t_p)]}{2t_f}, & t_f + t_p \leq t \leq 2t_f + t_p, \end{cases} \tag{7}$$

где t_f и t_p — длительности фронтов и плато лазерного импульса. Мы полагали $t_f = 2T$, $t_p = 5T$, где $T = 2\pi/\omega$ — оптический период. Значения частоты соответствовали квантам $\hbar\omega = 2$ и 5 эВ.

При численном решении уравнение (6) переписывалось в координатах

$$\xi = (x_1 + x_2)/\sqrt{2}, \quad \eta = (x_1 - x_2)/\sqrt{2}.$$

Поскольку поле электромагнитной волны нарушает симметрию гамильтониана относительно пространственной инверсии, область интегрирования (6) выбиралась в виде

$$\xi \in (-\xi_{max}, \xi_{max}), \quad \eta \in (0, \eta_{max}), \quad \xi_{max} = 100 \text{ \AA}; \quad \eta_{max} = 150 \text{ \AA}.$$

Число узлов пространственной сетки составляло 810×540 , шаг интегрирования по времени — сотую долю периода, соответствующего $\hbar\omega = 5 \text{ эВ}$. Метод интегрирования нестационарного уравнения Шредингера аналогичен [11].

Полученная в результате расчетов функция $\Psi(x_1, x_2, t)$ использовалась для вычисления вероятностей заселения различных состояний и вычисления энергетического спектра фотоэлектронов.

Так, вероятность обнаружить систему в неионизованном (исходном) состоянии рассчитывалась по формуле

$$W_0(t) = |C_0(t)|^2 = \left| \int \Psi(x_1, x_2, t) \varphi_0(x_1, x_2) dx_1 dx_2 \right|^2, \quad (8)$$

где $\varphi_0(x_1, x_2)$ определяется из решения (2).

Вычисление вероятности одноэлектронной ионизации проводилось с использованием функции

$$\tilde{\Psi}(x_1, x_2, t) = \Psi(x_1, x_2, t) - C_0(t) \varphi_0(x_1, x_2) \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} E_0 t \right\}, \quad (9)$$

где E_0 — энергия стационарного состояния $\varphi_0(x_1, x_2)$.

Как видно, функция $\tilde{\Psi}$ представляет собой суперпозицию состояний одно- и двухэлектронного континуумов и не включает в себя единственное связанное состояние двухэлектронной системы. Это обстоятельство уменьшает погрешности вычисления вероятности одноэлектронной ионизации, связанные с полнотой базиса плоских волн, используемых нами для описания состояний одноэлектронного континуума.

Коэффициенты разложения функции (9) по функциям одноэлектронного континуума (5) определялись как

$$\begin{aligned} C_{nk} &= \int \tilde{\Psi}(x_1, x_2, t) \varphi_{nk}^*(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = \\ &= \sqrt{2} \int \tilde{\Psi}(x_1, x_2, t) \Phi_n(x_1) \frac{\exp\{-ikx_2\}}{\sqrt{2\pi}} \exp \left\{ \frac{i}{\hbar} (E_n + E)t \right\} dx_1 dx_2 \end{aligned} \quad (10)$$

(здесь E_n и E — энергии возбужденного n -го связанного одноэлектронного состояния водорода и свободного электрона, $E = \hbar^2 k^2 / 2m$), а вероятность одноэлектронной ионизации с попаданием связанного электрона в состояние n

$$W_n = \int |C_{nk}|^2 dk = 2 \int |\alpha_n(x)|^2 dx, \quad (11)$$

где

$$\alpha_n(x, t) = \int \tilde{\Psi}(x_1, x, t) \Phi_n(x_1) dx_1. \quad (12)$$

Полная вероятность одноэлектронной ионизации определялась суммированием величин W_n :

$$W^{(1)} = \sum_{n=1}^{n_{max}} W_n. \tag{13}$$

В наших расчетах полагалось $n_{max} = 18$. Это значение выбиралось из условия, что в исследуемом диапазоне интенсивностей излучения заселенности состояний с $n \geq n_{max}$ были пренебрежимо малы.

Вероятность двухэлектронной ионизации определялась как

$$W^{(2)} = 1 - W_0 - \sum_{n=1}^{n_{max}} W_n. \tag{14}$$

В случае, если вероятность двухэлектронной ионизации мала, коэффициенты разложения C_{nk} позволяют определить спектр фотоэлектронов в пространстве волновых векторов:

$$w(k) = \sum_n |C_{nk}|^2 = 2 \sum_n \left| \alpha_n(x) \frac{\exp\{-ikx\}}{\sqrt{2\pi}} dx \right|^2, \tag{15}$$

причем величины $|C_{nk}|^2$ определяют спектры фотоэлектронов при условии, что при фотоионизации H^- атом водорода оказался в стационарном состоянии с номером n . В свободном пространстве импульсное разложение тождественно энергетическому. Поэтому выражение (15) фактически определяет энергетический спектр фотоэлектронов $w(k = \sqrt{2mE}/\hbar)$. При этом выражение (15) нормировано согласно условию

$$\int w(k = \sqrt{2mE}/\hbar) (dE/dk)^{-1} dE = 1.$$

Что касается двухэлектронной ионизации, то без знания функций двухэлектронного континуума вычисление энергетического спектра невозможно. По нашему мнению, двойное импульсное разложение, проведенное с этой целью в [5], некорректно, поскольку базис плоских волн является полным и включает в себя связанные состояния электрона, что не позволяет различить состояния одно- и двухэлектронного континуума. Более того, следует также иметь в виду, что для дальнедействующего потенциала, которым является одномерный сглаженный кулоновский потенциал, импульсное разложение не является тождественным энергетическому и не позволяет поэтому рассчитать энергетический спектр.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ

4.1. Пространственно-временная картина процесса

На рис. 2 приведены типичные пространственные распределения плотности вероятности $\rho = |\Psi(x_1, x_2)|^2$, полученные в момент окончания лазерного импульса для значений интенсивности $P = 10^{13}$ Вт/см² и $8 \cdot 10^{14}$ Вт/см². Рисунок 2а соответствует одноэлектронной ионизации, когда один из электронов (принцип тождественности не позволяет

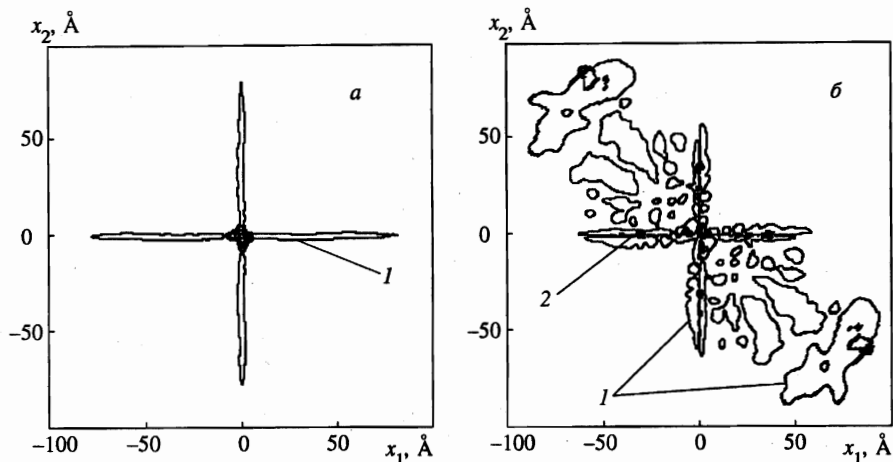


Рис. 2. Распределение плотности вероятности $\rho(x_1, x_2)$ к концу лазерного импульса для $\hbar\omega = 5$ эВ и $P = 10^{13}$ (а), $8 \cdot 10^{14}$ (б) Вт/см². Линии уровня соответствуют рис. 1

сказать, какой именно) находится в связанном состоянии, а другой удален от ядра. Такая ситуация приводит к образованию характерного «креста» на распределении $\rho(x_1, x_2)$. Рисунок 2б соответствует интенсивности, при которой происходят и одноэлектронная, и двухэлектронная ионизации. При этом двухэлектронной ионизации соответствует электронная плотность $\rho(x_1, x_2)$, локализованная в области $\{x_1 > 0, x_2 < 0 \cup x_1 < 0, x_2 > 0\}$, т. е. при двухэлектронной ионизации в результате кулоновского расталкивания электроны преимущественно разлетаются в противоположные стороны. Отметим, что такое коррелированное движение электронов, полученное в точных расчетах, не содержится в приближениях самосогласованного поля Хартри или Хартри—Фока.

Полученные для различных моментов времени пространственные распределения $\rho(x_1, x_2)$ позволяют выделить два механизма двухэлектронной ионизации: прямой процесс — переход из начального состояния в состояния двухэлектронного континуума — и последовательный процесс. Последовательная двухэлектронная ионизация заключается в том, что происходит переход из состояний одноэлектронного континуума в состояния двухэлектронного континуума при условии, что наблюдается насыщение одноэлектронной ионизации из-за практически полного «истощения» основного состояния. Действительно, при значениях $\hbar\omega = 5$ эВ и $P = 8 \cdot 10^{14}$ Вт/см² динамика населенности основного состояния в течение импульса свидетельствует о практически полном опустошении этого состояния уже к началу «полки» лазерного импульса (см. рис. 3). Поскольку при $\hbar\omega = 5$ эВ для перехода в двухэлектронный континуум необходимо поглощение не менее трех квантов поля, а переход в одноэлектронный континуум возможен уже как однофотонный процесс, вероятность прямой двухфотонной ионизации невелика, и последовательный процесс оказывается доминирующим. В этом случае можно ожидать, что увеличение длительности «полки» лазерного импульса приведет к уменьшению к концу импульса вероятности одноэлектронной и увеличению вероятности двухэлектронной ионизации из-за последовательного механизма ионизации. Данные, представленные на рис. 4, полностью подтверждают существенную роль последовательного механизма — с увеличением длительности «полки» (при неизменном

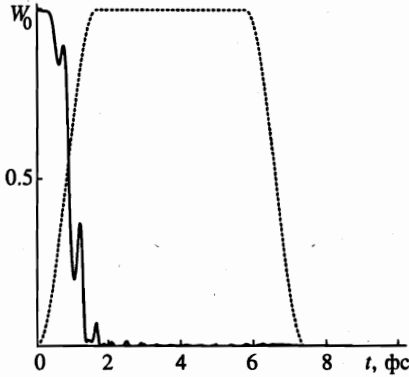


Рис. 3

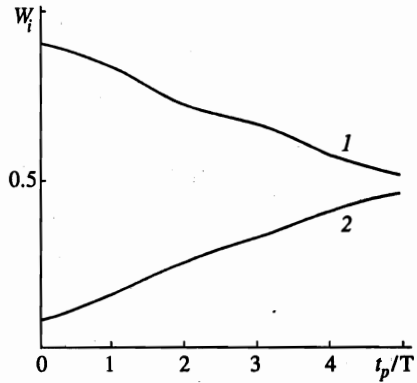


Рис. 4

Рис. 3. Временная динамика населенности основного состояния H^- в процессе лазерного воздействия для $\hbar\omega = 5$ эВ, $P = 8 \cdot 10^{14}$ Вт/см². Штриховая кривая — огибающая лазерного импульса

Рис. 4. Зависимости вероятностей одноэлектронной (1) и двухэлектронной (2) ионизации по окончании лазерного импульса от длительности «полки» лазерного импульса для $\hbar\omega = 5$ эВ, $P = 8 \cdot 10^{14}$ Вт/см²

значении $t_f = 2T$) происходит монотонное возрастание вероятности двухэлектронной ионизации от 7.6 до 47% в основном за счет уменьшения доли одноэлектронной ионизации. Такая картина процесса качественно согласуется с данными, полученным в [4]: для значений $\hbar\omega = 27.2$ эВ и $P \sim 10^{16}$ Вт/см² временной анализ спектров фотоионизации также свидетельствует в пользу последовательного механизма двухэлектронной ионизации.

Хотя скорость прямой двухэлектронной ионизации в данных условиях мала, вероятность этого процесса к концу импульса отлична от нуля. С точки зрения временной эволюции двухэлектронной плотности $\rho(x_1, x_2)$ в случае реализации прямого механизма процесса, при котором оба электрона, и внешний и внутренний, практически одновременно переходят в континуум и разлетаются в противоположные стороны, электронная плотность должна быть локализована в области, примерно равноудаленной от обеих осей координат $x_1 = 0, x_2 = 0$. При последовательном процессе ионизации на распределении $\rho(x_1, x_2)$ должно происходить формирование «креста», соответствующего режиму одноэлектронной ионизации системы, постепенно размываемого по мере удаления из системы внутреннего электрона. Данные, представленные на рис. 5 для $P = 8 \cdot 10^{14}$ Вт/см² и соответствующие распределению $\rho(x_1, x_2)$ в различные моменты времени $t = 2T, 5T, 7T$, свидетельствуют об одновременной реализации обоих механизмов, а следовательно, о конкуренции прямого и последовательного процессов ионизации.

Представляет интерес также исследование возможности реализации механизма двухэлектронной ионизации [12], основанного на модели перерассеяния [13]. В соответствии с этой моделью внешний слабосвязанный электрон покидает атом, а затем через половину оптического цикла возвращается обратно и с некоторой вероятностью

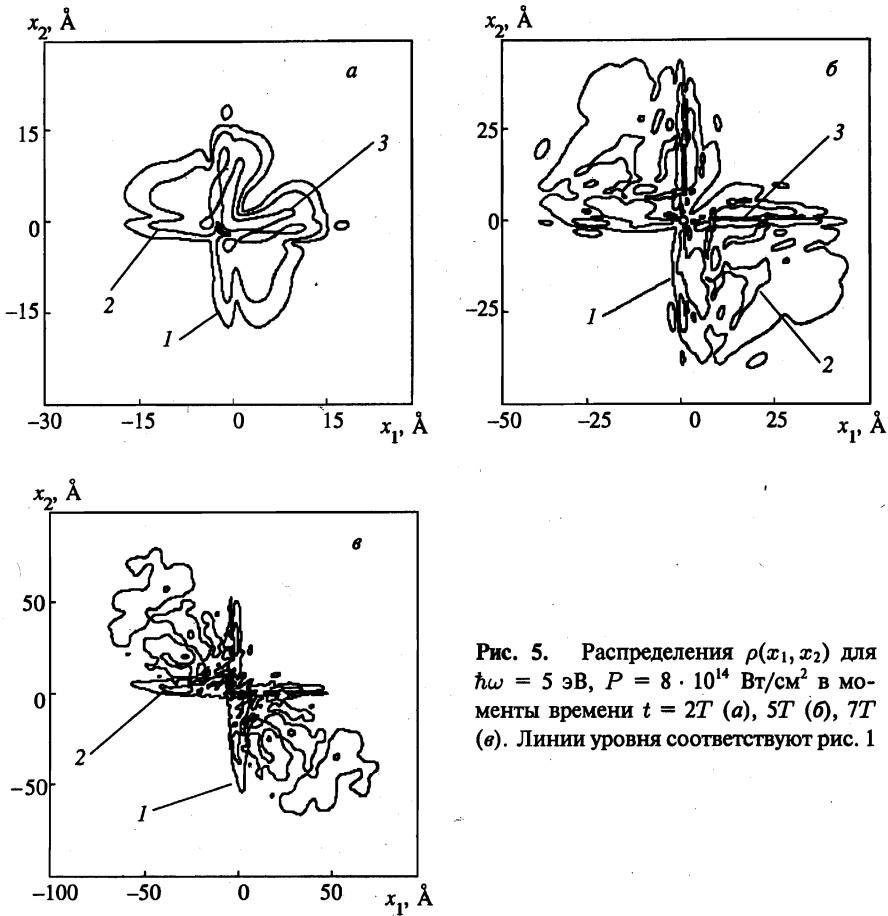


Рис. 5. Распределения $\rho(x_1, x_2)$ для $\hbar\omega = 5$ эВ, $P = 8 \cdot 10^{14}$ Вт/см² в моменты времени $t = 2T$ (а), $5T$ (б), $7T$ (в). Линии уровня соответствуют рис. 1

выбивает внутренний электрон. Данные, представленные на рис. 5, свидетельствуют о делокализации электронной плотности по области, многократно превышающей атомный размер, уже в начале лазерного воздействия. Это относится как к состояниям одноэлектронного, так и двухэлектронного континуумов. В такой ситуации говорить о периодически повторяющемся рассеянии одного из электронов на атомном остове вряд ли оправдано. Отметим в связи с этим, что расчеты динамики ионизации одномерного атома He [14], выполненные в приближении Хартри—Фока и выявившие вклад эффекта перерассеяния в процессе двухэлектронной ионизации, требуют дополнительного осмысления.

4.2. Вероятности одно- и двухэлектронной ионизации и эффект стабилизации

Перейдем к изучению зависимостей вероятности одно- и двухэлектронной ионизации от интенсивности излучения. Для значения $\hbar\omega = 5$ эВ эти данные в диапазоне интенсивностей $P = 10^{12}$ – $2 \cdot 10^{15}$ Вт/см² представлены на рис. 6. На этом же графике приведена вероятность неионизации — вероятность остаться к концу лазерного воздей-

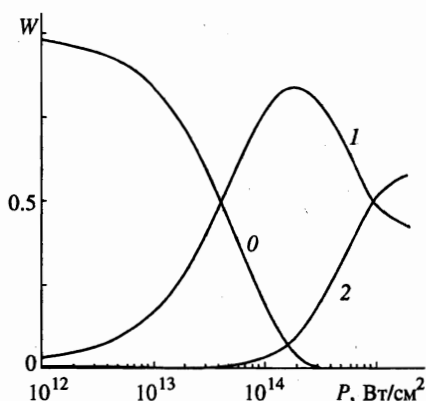


Рис. 6

Рис. 6. Вероятность остаться в основном состоянии (0), а также вероятности одноэлектронной (1) и двухэлектронной (2) ионизации по окончании импульса в зависимости от интенсивности излучения для $\hbar\omega = 5 \text{ эВ}$

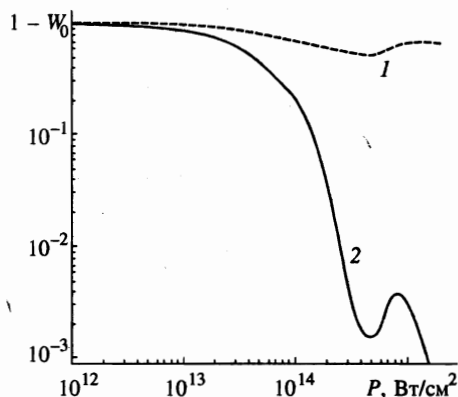


Рис. 7

Рис. 7. Вероятности остаться в неионизованном состоянии по окончании лазерного импульса для одноэлектронной (1) и двухэлектронной (2) моделей H^- в зависимости от интенсивности для $\hbar\omega = 5 \text{ эВ}$

ствия в единственном связанном состоянии. Как видно, двойная ионизация начинается в области интенсивностей $\sim 10^{14} \text{ Вт/см}^2$, а максимум одноэлектронной ионизации приходится на $2 \cdot 10^{14} \text{ Вт/см}^2$. Это значение интенсивности оказывается меньше порога стабилизации, полученного в одноэлектронных одномерной [15] и трехмерной [11] моделях H^- и составившего $4\text{--}5 \cdot 10^{14} \text{ Вт/см}^2$. Это означает, что при изучении явления стабилизации в H^- необходимо исследовать воздействие лазерного поля на внутренний электрон. Сравнение вероятностей неионизации для одномерных одно- и двухэлектронных моделей (см. рис. 7) показывает, что в наших условиях воздействие поля на внутренний электрон оказывается существенным уже в области $\geq 10^{13} \text{ Вт/см}^2$ и приводит к значительному увеличению вероятности отрыва внешнего слабосвязанного электрона. При этом в области $4\text{--}8 \cdot 10^{14} \text{ Вт/см}^2$ также наблюдается возрастание вероятности неионизации (стабилизация), однако при $P \geq 10^{15} \text{ Вт/см}^2$ снова наблюдается быстрое уменьшение величины $1 - W_0$. В одноэлектронном приближении [15] было показано, что в рассматриваемых условиях причиной возникновения стабилизации является формирование потенциала Крамерса—Хеннебергера и заселение в нем стационарных состояний, устойчивых по отношению к ионизации. Наши расчеты, проведенные по двухчастичной модели, позволяют утверждать, что воздействие поля на внутренний электрон значительно искажает потенциал Крамерса—Хеннебергера и разрушает стабилизацию.

Отметим также тенденцию к насыщению вероятности двухэлектронной ионизации в области $P \geq 10^{15} \text{ Вт/см}^2$ (см. рис. 6). По-видимому, это насыщение также есть результат стабилизации, но уже в одноэлектронной системе — атоме водорода.

В рассматриваемом случае ($\hbar\omega = 5 \text{ эВ}$) для вырывания внутреннего электрона необходимы три кванта поля, а для его возбуждения — два. Невысокий порядок многофотонности как раз и проявляется в эффективном воздействии поля сразу на два элек-

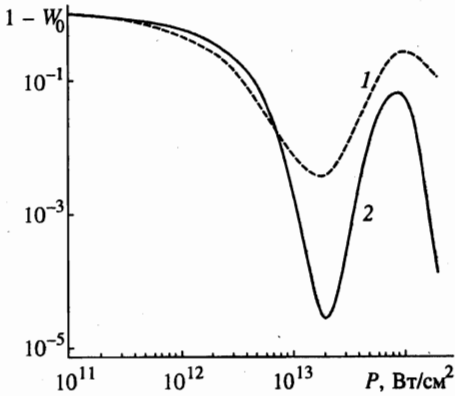


Рис. 8

Рис. 8. То же, что на рис. 7, но для $\hbar\omega = 2$ эВ

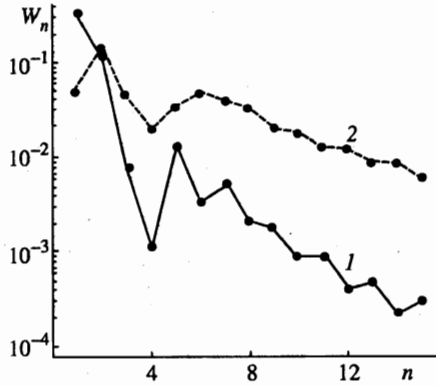


Рис. 9

Рис. 9. Заселенности различных состояний $\Phi_n(x)$ одномерного атома водорода, образовавшегося при одноэлектронной фотоионизации H^- для различных значений интенсивности $I - 4 \cdot 10^{13}$ Вт/см², 2 — 10^{15}

трона системы и неудовлетворительном ее описании в рамках одноэлектронной модели. Поэтому можно ожидать, что уменьшение энергии кванта $\hbar\omega$ и одновременное увеличение порядка многофотонности процессов для внутреннего электрона (при условии, что для внешнего они останутся однофотонными) приведет к лучшему согласию расчетов, проведенных по одно- и двухэлектронным моделям. Расчеты вероятности неионизации при значении $\hbar\omega = 2$ эВ подтверждают эту гипотезу (рис. 8). Вплоть до $P \sim 10^{14}$ Вт/см² кривые $(1 - W_0)$ качественно повторяют друг друга, причем в двухэлектронной модели стабилизация проявляется даже более четко — вероятность неионизации возрастает более чем на три порядка величины в диапазоне интенсивностей $2 \cdot 10^{13} - 8 \cdot 10^{13}$ Вт/см². Возрастание интенсивности выше 10^{14} Вт/см² приводит к двухэлектронной ионизации и разрушению режима стабилизации системы.

4.3. Анализ спектра фотоэлектронов и заселенности различных связанных состояний в режиме одноэлектронной ионизации

На рис. 9 приведены рассчитанные с помощью (11), (12) заселенности состояний атома водорода с различным квантовым числом n , полученные в процессе одноэлектронной ионизации отрицательного иона водорода при $\hbar\omega = 5$ эВ и различных значениях интенсивности. Из рисунка видно, максимальная вероятность достигается для значений $n = 1, 2$, что соответствует фотоотрыву внешнего электрона. В то же время для всех значений интенсивности имеется максимум также для $n = 5, 6$. По-видимому, этот максимум возникает в результате вырывания полем внутреннего электрона при поглощении системой трех квантов поля. При этом, как видно из рис. 9, при большой интенсивности излучения вероятности обоих каналов ионизации близки по величине. Качественно эти рассуждения подтверждаются тем, что энергии пятого и шестого стационарных состояний одномерного атома водорода достаточно близки к энергии связи внешнего электрона в H^- . Возможность фотоотрыва в H^- как внешнего, так и вну-

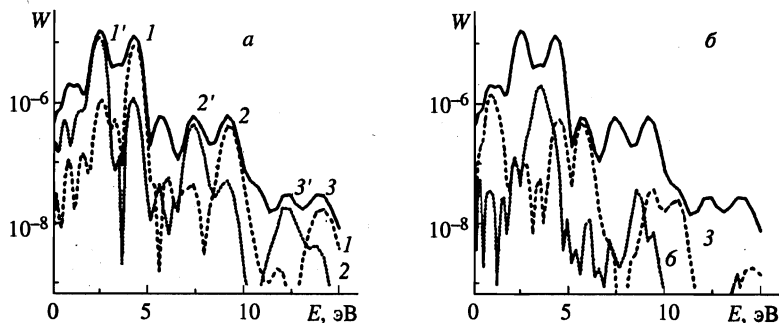


Рис. 10. Энергетический спектр фотоэлектронов, образовавшихся при одноэлектронной фотоионизации H^- для $P = 2 \cdot 10^{14}$ Вт/см². Номера кривых соответствуют состояниям электрона в образовавшемся атоме водорода. Сплошная кривая — суммарный спектр

треннего электронов рассматривалась также в [4] при анализе энергетических фотоэлектронов, однако связи между положением пика в спектре и заселенностью различных атомных состояний получено не было. Поэтому нами были рассчитаны не только полный, но и парциальные энергетические спектры фотоэлектронов, соответствующие нахождению связанного электрона в n -ом стационарном состоянии. Такие спектры для интенсивности $P = 2 \cdot 10^{14}$ Вт/см² приведены на рис. 10. Как видно из рисунка, сложная структура спектра фотоэлектронов связана с тем, что в результате лазерного воздействия оставшийся связанным электрон может находиться в различных состояниях. Так, серия пиков 1, 2, 3, ... есть результат ионизации H^- с образованием атома водорода в основном состоянии; пики 1', 2', 3', ... возникают в результате ионизации и одновременного возбуждения образовавшегося атома водорода в состояние $n = 2$. При этом атомная система поглощает один дополнительный фотон. Такое же количество фотонов поглощается и при ионизации с возбуждением атома водорода в состояние $n = 3$. Для $n = 6$ происходит поглощение еще одного дополнительного фотона, что приводит к увеличению энергии фотоэлектрона по сравнению со случаем $n = 3$ (рис. 10б). При этом случай $n = 6$, по-видимому, удобно интерпретировать, как удаление из H^- внутреннего электрона. Отметим, что положение энергетических пиков в данном случае не описывается точно выражением

$$E = l\hbar\omega + (E_0 - E_n) \tag{16}$$

(l — число поглощенных квантов, E_0, E_n — энергии основного состояния H^- и n -го возбужденного состояний атома водорода) вследствие наличия эффекта Штарка для нижних состояний атома водорода и пондеромоторного сдвига границы континуума.

При небольших интенсивностях ($P \sim 10^{13}$ Вт/см²) сдвиг уровней, вызванный эффектом Штарка, мал и положение пиков согласуется с расчетами по формуле (16). При этом происходит фотоотрыв внешнего электрона, а внутренний остается преимущественно в основном состоянии. В результате энергетический спектр фотоэлектронов приобретает структуру, характерную для процесса ионизации одноэлектронных систем (рис. 11), а вероятности возбуждения всех состояний с $n > 2$ пренебрежимо малы.

В заключение данного раздела отметим, что представляет несомненный интерес исследование спектров электронов, образовавшихся при двухэлектронной ионизации.

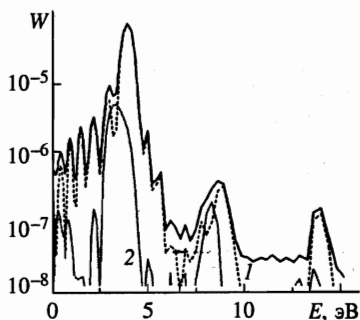


Рис. 11. То же, что на рис. 10, но для $P = 10^{13}$ Вт/см²

Такие расчеты не были проведены в связи с необходимостью выделения части волновой функции, соответствующей двухэлектронному континууму, что представляет собой отдельную сложную задачу. Отметим только, что общий вид волновой функции к концу лазерного воздействия (см. рис. 2б) свидетельствует о том, что средняя величина кинетической энергии фотоэлектронов, образовавшихся при двухэлектронной ионизации, оказывается больше, чем при одноэлектронной.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе проведены точные двухчастичные расчеты динамики ионизации одномерного отрицательного иона водорода в поле электромагнитной волны. Полученные данные свидетельствуют о сильных межэлектронных корреляциях в системе, которые проявляются в структуре волновой функции основного состояния, характеризующейся вытолкнутостью одного из электронов, а также в скоррелированной динамике двухэлектронной ионизации, заключающейся в разнонаправленном вылете фотоэлектронов.

На основании полученных данных по динамике двухэлектронной ионизации сделан вывод о нереализуемости в рассмотренных условиях модели перерасеяния, заключающейся в фотоотрыве одного электрона и выбивании им второго электрона при рассеянии на родительском атоме.

Показано, что воздействие сильного поля на внутренний электрон нарушает справедливость одноэлектронного приближения. Сравнение проведенных двухчастичных расчетов и расчетов, выполненных в одноэлектронном приближении, позволило выявить значения параметров лазерного излучения (интенсивность и частота), при которых наблюдается хорошее соответствие обоих сравниваемых подходов: наблюдаются режим стабилизации и совпадение пороговых значений интенсивности для этого режима в обоих случаях.

Объяснены особенности структуры спектра фотоэлектронов в области одноэлектронной ионизации, обусловленные суперпозицией вкладов различных каналов процесса: фотоотрыва одного из электронов и возбуждения остаточного атома.

Аналогичные исследования, по нашему мнению, интересно провести для модельного нейтрального атома, характеризующегося большим числом состояний в дискретном спектре, как синглетных, так и триплетных, а также автоионизационными состояниями. Представляет интерес также изучение возможности использования приближенных

методов Хартри и Хартри—Фока для описания особенностей динамики ионизации атомных систем в сильных световых полях.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты № 96-02-19286 и 96-15-96447).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Запишем стационарное уравнение Шредингера (2) в виде

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} - \frac{e^2}{\sqrt{\alpha^2 + x_1^2}} - \frac{e^2}{\sqrt{\alpha^2 + x_2^2}} + \frac{e^2}{\sqrt{\alpha^2 + (x_1 - x_2)^2}} \right) \varphi(x_1, x_2) = E\varphi(x_1, x_2). \quad (\text{П.1})$$

Учитывая симметрию гамильтониана относительно пространственной инверсии и замены электронов местами, введем новые переменные:

$$\xi = \frac{x_1 + x_2}{\sqrt{2}}, \quad \eta = \frac{x_1 - x_2}{\sqrt{2}}, \quad (\text{П.2})$$

которым соответствует система координат, повернутая на 45° относительно x_1, x_2 . В координатах ξ, η задача (П.1) запишется в следующем виде:

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} - \frac{e^2}{\sqrt{\alpha^2 + 2(\xi + \eta)^2}} - \frac{e^2}{\sqrt{\alpha^2 + 2(\xi - \eta)^2}} + \frac{e^2}{\sqrt{\alpha^2 + 2\eta^2}} \right) \varphi(\xi, \eta) = E\varphi(\xi, \eta). \quad (\text{П.3})$$

Функция $\varphi(\xi, \eta)$ симметрична или антисимметрична относительно осей координат и ее можно определять в первом квадранте

$$0 \leq \xi, \quad \eta \leq \infty. \quad (\text{П.4})$$

При этом для получения всей совокупности стационарных состояний задачи (П.1) необходимо рассмотреть задачу (П.3) в области (П.4) для четырех случаев различных граничных условий на осях координат:

1. $\frac{\partial \varphi}{\partial \xi} \Big|_{\xi=0, 0 \leq \eta \leq \infty} = 0, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0, 0 \leq \xi \leq \infty} = 0,$
2. $\frac{\partial \varphi}{\partial \xi} \Big|_{\xi=0, 0 \leq \eta \leq \infty} = 0, \quad \varphi_{\eta=0, 0 \leq \xi \leq \infty} = 0,$
3. $\varphi_{\xi=0, 0 \leq \eta \leq \infty} = 0, \quad \frac{\partial \varphi}{\partial \eta} \Big|_{\eta=0, 0 \leq \xi \leq \infty} = 0,$
3. $\varphi_{\xi=0, 0 \leq \eta \leq \infty} = 0, \quad \varphi_{\eta=0, 0 \leq \xi \leq \infty} = 0.$

(П.5)

Для получения дискретного аналога задачи (П.3)–(П.5) использовался метод конечного элемента с кубической аппроксимацией функции на элементе [11]. Рассматривалась двумерная область $0 \leq \xi, \eta \leq 30 \text{ \AA}$. На удаленной границе ставилось условие равенства нулю производной (для интересующих нас состояний дискретного спектра собственные функции обращаются в нуль на удаленной границе и конкретное задание

граничного условия не имеет значения). Использование лагранжевых прямоугольных элементов на двумерной области позволяет записать следующую конечно-элементную форму задачи [16]:

$$L\varphi = EM\varphi, \quad (\text{П.6})$$

где $\varphi = \{\varphi_1, \dots, \varphi_n\}$ — вектор узловых значений собственных функций, $N = KL$ — число узлов двумерной области, в случае лагранжевых элементов равное произведению числа узлов по каждой из координат;

$$L = M_\xi \otimes D_\eta + D_\xi \otimes M_\eta + P$$

— матрица гамильтониана двухчастичной системы,

$$M = M_\xi \otimes M_\eta$$

— весовая матрица, образованная прямым матричным произведением весовых матриц одночастичных систем. Одночастичная (или одномерная, соответствующая одной из координат) весовая матрица определяется суммой элементных матриц:

$$M_{\xi,\eta}^k = \sum_{k=1}^{K_e, L_e} m_{\xi,\eta}^k,$$

где K_e, L_e — число элементов по каждой из координат, для кубических элементов $K = 3K_e + 1, L = 3L_e + 1$.

Аналогично определяются одночастичные матрицы производных $D_{\xi,\eta}$.

Элементные матрицы определяются функциями формы на элементе [17]:

$$m_\xi^k = \int_{\xi_k}^{\xi_{k+1}} N^T N d\xi,$$

$$d_\xi^k = \int_{\xi_k}^{\xi_{k+1}} \frac{dN^T}{d\xi} \frac{dN}{d\xi} d\xi,$$

где $N = \{N_1, N_2, N_3, N_4\}$ — вектор функций формы для кубического элемента.

Матрица P определяется потенциалом взаимодействия частиц и вычислялась по следующей приближенной формуле:

$$P = \sum_{l=1}^{L_e} \sum_{k=1}^{K_e} m_\xi^k \otimes m^l \eta V_{k,l},$$

$$V_{k,l} = -\frac{e^2}{\sqrt{\alpha^2 + 2(\tilde{\xi}_k + \tilde{\eta}_l)^2}} - \frac{e^2}{\sqrt{\alpha^2 + 2(\tilde{\xi}_k - \tilde{\eta}_l)^2}} + \frac{e^2}{\sqrt{\alpha^2 + 2\tilde{\eta}_l^2}}$$

— значение потенциала взаимодействия на элементе с индексами k, l ; $\tilde{\xi}_k, \tilde{\eta}_l$ — средние значения координат на элементе.

Таким образом, задача нахождения стационарных состояний сведена к задаче на собственные значения (П.6). Граничные условия 2–4 из (П.5) учитываются следующим образом: нулевые значения функции на границе являются заданными. Недиagonальные элементы в матрице L , соответствующие строкам с индексами узлов, имеющих нулевые заданные значения, полагаются равными нулю, а диагональный элемент — единице. Нулевые значения производных являются естественными граничными условиями и не требуют изменения матрицы.

Для решения задачи на собственные значения использовался метод итераций в подпространстве [18]. Основной целью метода итераций в подпространстве является нахождение p наименьших собственных значений и собственных векторов исходной задачи. Эти собственные векторы образуют p -мерное ортогональное подпространство. Эффективность метода обусловлена тем, что итерируется все подпространство в целом, а не отдельно каждый собственный вектор.

Для применения этого метода требуется положительная определенность матрицы L . Чтобы выполнить это условие, необходимо ввести сдвиг матрицы. Введем новую матрицу

$$\tilde{L} = L + sM,$$

выбирая s таким образом, чтобы обеспечить положительную определенность матрицы \tilde{L} . Тогда новая задача на собственные значения запишется в виде

$$\tilde{L}\tilde{\varphi} = \tilde{E}M\tilde{\varphi}. \tag{П.7}$$

Легко показать, что решения задач (П.6) и (П.7) связаны соотношениями

$$\tilde{\varphi} = \varphi, \quad \tilde{E} = E + s.$$

Вычитая из модифицированных значений сдвиг s , получим собственные значения исходного матричного уравнения. В рассматриваемой задаче сдвиг выбирался равным $e^2/\sqrt{a^2}$.

Задача на собственные значения (П.6) имеет решением N собственных значений и собственных векторов. Однако нас интересуют лишь несколько нижних собственных значений, которые соответствуют дискретному спектру рассматриваемого гамильтониана. Эти собственные значения в приведенной выше постановке задачи (П.6) $E = \tilde{E} - s$ должны быть отрицательными. Положительные собственные значения соответствуют свободному движению электронов и их дискретная структура и конечное число определяется конечностью рассматриваемой области и дискретностью представления задачи.

В связи со сказанным выше представляется очень эффективным использование предложенного алгоритма, который позволяет определить не все, а лишь необходимое число собственных значений. При этом рассматриваемый алгоритм позволяет работать с ленточной матрицей L и дает возможность использовать внешнюю память.

Литература

1. N. B. Delone and V. P. Krainov, *Multiphoton Processes in Atoms*, Springer-Verlag (1994).

2. M. S. Pindzola, D. C. Griffin, and C. Bottcher, *Phys. Rev. Lett.* **66**, 2305 (1991). M. S. Pindzola, P. Gavras, and T. W. Gorczyca, *Phys. Rev. A* **51**, 3999 (1995).
3. D. G. Lappas, A. Sanpera, J. B. Watson et al., *J. Phys. B* **29**, L619 (1996).
4. R. Grobe and J. H. Eberly, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 2905 (1992).
5. R. Grobe and J. H. Eberly, *Phys. Rev. A* **48**, 4664 (1993).
6. A. I. Artemiev, R. Grobe, and J. H. Eberly, *Proc. SILAP-IV*, Kluwer Academic Publishers, ed. by H. G. Muller and M. V. Fedorov (1996), p. 285.
7. J. Javanainen, J. H. Eberly, and Q. Su, *Phys. Rev. A* **38**, 3430 (1988).
8. Г. Бете, Э. Солпитер, *Квантовая механика атома с одним и двумя электронами*, Мир, Москва (1960); Б. М. Смирнов, *Отрицательные ионы*, Атомиздат, Москва (1978).
9. K. Rzazewski, *Proc. SILAP-IV*, Kluwer Academic Publishers, ed. by H. G. Muller and M. V. Fedorov (1996), p. 213.
10. S. L. Haan, R. Grobe, and J. H. Eberly, *Phys. Rev. A* **50**, 378 (1994).
11. Е. А. Волкова, А. М. Попов, О. В. Тихонова, *ЖЭТФ* **108**, 436 (1995).
12. K. C. Kulander, J. Cooper, and K. J. Schafer, *Phys. Rev. A* **51**, 561 (1995).
13. P. B. Corcum, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1994 (1993).
14. J. B. Watson, A. Sanpera, D. G. Lappas et al., *VII Int. Conf. on Multiphoton Processes (ICOMP), Book of Abstracts*, Garmisch-Partenkirchen, Germany (1996).
15. A. M. Popov, O. V. Tikhonova, and E. A. Volkova, *Laser Phys.* **5**, 1029, 1184 (1995).
16. К. Флетчер, *Численные методы на основе метода Галеркина*, Мир, Москва (1988).
17. Л. Сегерлинд, *Применение метода конечных элементов*, Мир, Москва (1979).
18. H. Rutishauser, *Computational aspects of F. L. Baner's Simultaneous Iteration Method*, *Numerische Mathematik* **13**, 4 (1969).