

УДК 539.184.01

## РАСЧЕТ ВЕРОЯТНОСТИ ИОНИЗАЦИИ АТОМА ВОДОРОДА КОРОТКИМ СВЕТОВЫМ ИМПУЛЬСОМ НА БАЗИСЕ КВАДРАТИЧНО ИНТЕГРИРУЕМЫХ ФУНКЦИЙ

В. Е. Семенов

Проводится численное интегрирование временного уравнения Шредингера для атома водорода в поле электромагнитных волн разных частот при амплитудах напряженности внешнего поля, равных 0.1 и  $0.1/\sqrt{2}$  а. е. Вычисляются вероятности ионизации и штарковские сдвиги.

Построение сечений фотоионизации на  $L^2$ -базисе привлекает доступностью расчетов квантовомеханической системы на базисе квадратично-интегрируемых функций. При построении сечения фотоионизации на  $L^2$ -базисе возникают известные трудности, связанные с тем, что в модельном спектре, полученном при расчете на этом базисе, энергии возбуждений  $E_i$  выше порога ионизации и соответствующие силы осцилляторов не имеют физического смысла. Вероятность ионизации в единицу времени

$$w = \frac{d}{dt} \sum_{\substack{i \\ E_i > 0}} |a_i(t)|^2, \quad (1)$$

где  $a_i(t)$  коэффициенты разложения волновой функции системы во внешнем электромагнитном поле по собственным функциям системы, в случае монохроматического поля с частотой  $\omega$  и амплитудой напряженности поля  $F \rightarrow 0$  имеет вид

$$w(\omega) = \sum_{\substack{i \\ E_i > 0}} 2\pi F^2 |\langle \psi_i | \mathbf{r} | \psi_0 \rangle|^2 \delta(E_i - E_0 - \omega). \quad (2)$$

При увеличении числа базисных квадратично интегрируемых функций плотность сингулярностей в (2) возрастает, но  $w(\omega)$  остается качественно отличной от своего правильного предельного вида — гладкой функции. Однако если определять вероятность ионизации достаточно коротким импульсом, включенным в момент  $t=0$ , а вероятность ионизации вычислять по формуле

$$w(t) = \frac{1}{t} \sum_{\substack{i \\ E_i > 0}} |a_i(t)|^2, \quad (3)$$

то даже на небольшом  $L^2$ -базисе можно получить хорошие результаты. Продemonстрируем этот факт на примере ионизации атома водорода слабым электромагнитным полем. Взаимодействие атома водорода с электро-

магнитным полем, включенным в момент времени  $t=0$ , в дипольном приближении описывается уравнением

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (H_0 + \theta(t) F r \cos Q \cos \omega t) \Psi, \quad (4)$$

где  $\theta = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ 1 & t \geq 0 \end{cases}$ ,  $H_0$  — гамильтониан атома водорода. Расчеты проводились на базисе собственных функций оператора  $H_0$ , построенных из ортонормированных с весом  $1/r$  полиномов Лагерра [1]

$$\Psi_{nl}^{(0)}(r, Q) = \sum_{k=1}^{N_l} b_{nk}^l [C_{kl} r^{l+1} e^{-\lambda r/2} L_k(\lambda r)] p_l(\cos Q), \quad (5)$$

где  $C_{kl}$  — нормировочный множитель;  $\lambda=1.5$  (параметр  $\lambda=1.5$  является оптимальным при расчете атома водорода во внешнем поле [2, 3]). Волновая функция атома во внешнем поле представлялась в виде

$$\Psi(r, Q, t) = \sum_{l=0}^{L_m} \sum_{n=1}^{N_l} a_{nl}(t) \Psi_{nl}^{(0)}(r, Q) e^{iE_n^{(0)}t}. \quad (6)$$

Коэффициенты  $a_{nl}(t)$  вычислялись в первом порядке теории возмущений. Зависимости  $w_1(t)$ , рассчитанные по формуле (3), приведены на рис. 1.

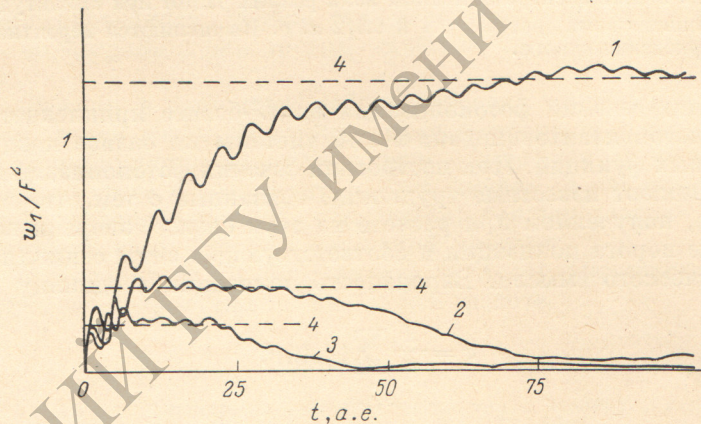


Рис. 1.

$N_l=14$ ,  $L_m=1$ .  $\omega$ , а. е.: 1 — 0.6, 2 — 0.8, 3 — 1, 4 — точное значение.

Из рис. 1 видно, что кривые  $w_1(t)$  имеют волнистое плато, хорошо передающее точное значение вероятности ионизации. На рис. 2 приведены радиальные распределения электронной плотности

$$\rho(r, t) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} r^2 |\Psi(r, Q, t)|^2 \sin Q dQ \quad (7)$$

в разные моменты времени  $t$  при частоте падающего излучения  $\omega = 0.8$  а. е. Из рис. 2 видно, что левый край «плато» соответствует свободному распространению фотоэлектрона, а правый край «плато» соответствует моменту  $t_m$  подхода к атому фотоэлектрона, отраженного от «границы»  $r=R_0$  и образованию внутри сферы радиуса  $R_0$  стоячей волны, которую перекрывают первые  $N_l$  функций  $R_0 \sim N_l/\lambda$ . Первые  $N_l$  полиномов Лагерра с большой точностью ортонормированны на отрезке  $(0.2 \cdot N_l/\lambda)$ . Нетрудно показать, что в первом порядке теории возмущений при  $N_l \rightarrow \infty$  и  $t \rightarrow \infty$  формула (3) приводит к хорошо известному «золотому правилу» Ферми, если число функций  $N_l$  таково, что  $(E_{n+1} - E_n) t \rightarrow 0$ , где  $E_0 - E_n \approx \omega$ .

Проведем расчет вероятности ионизации атома водорода электромагнитным полем, не пользуясь теорией возмущений. Подставив разложение (6) в уравнение (4), получим систему дифференциальных уравнений

$$i \frac{\partial A}{\partial t} = V(t) A, \quad (8)$$

где  $A$  — вектор, компонентами которого являются коэффициенты разложения волновой функции (6),  $V(t)$  — матрица оператора взаимодействия электрона с полем в представлении взаимодействия.

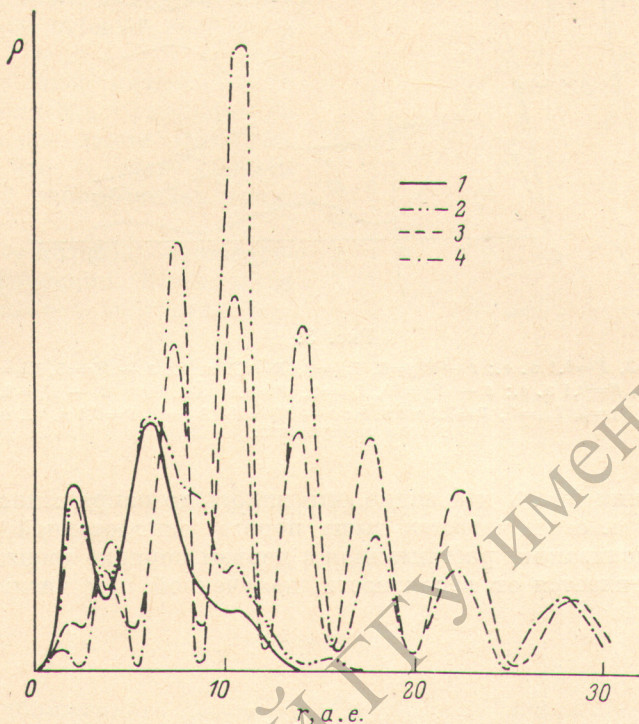


Рис. 2.

$t$ , а. е.: 1 — 12, 2 — 14, 3 — 33, 4 — 43.

Система дифференциальных уравнений (8) решалась численно методом Рунге—Кутты при начальных условиях  $a_{10}=1$ ,  $a_{nl}=0$  ( $n, l \neq 1, 0$ ). Рис. 3 иллюстрирует сходимость при амплитудах напряженности падающего поля 0.1 и  $0.1/\sqrt{2}$  а. е. и  $\omega=0$ . Чем больше скорость фотоэлектрона и чем больше длительность импульса, тем большую область должен «перекрывать» набор базисных функций. Поэтому сходимость в области частот ниже порога ионизации и ухудшается при увеличении амплитуды напряженности внешнего поля и длительности импульса. Сходимость по  $N_l$  в области частот выше порога однофотонной ионизации продемонстрированная на рис. 4, является фактически такой же, как и сходимость в первом порядке теории возмущений. Она ухудшается с ростом частоты и длительности импульса.

Для того чтобы по зависимости  $w(t)$  получить информацию о вероятности ионизации в квазистационарном приближении, надо выделить явления, связанные с резким включением поля, и перейти к относительной вероятности ионизации  $\bar{w}(t) = w(t) / |a_{10}|^2$ .

При частотах ниже порога однофотонной ионизации и малых напряженностях внешнего поля переходные процессы в течение длительного времени после включения вносят основной вклад в вероятность ионизации

ции. Это связано с наличием в спектре короткого импульса частот, превышающих порог однофотонной ионизации, вероятность которой убывает с уменьшением напряженности внешнего поля существенно медленнее, чем вероятность многофотонного перехода или тунелирования.

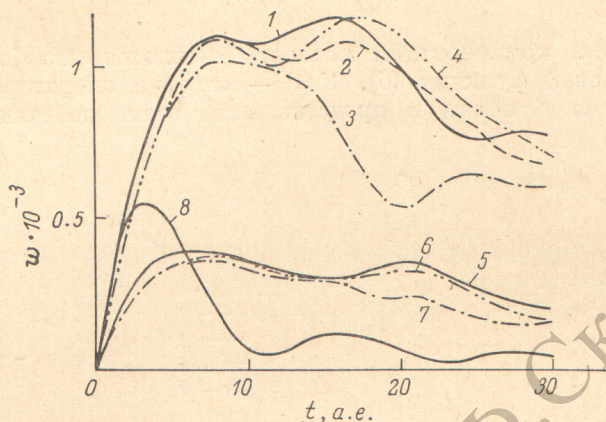


Рис. 3.

1 —  $N_l=10$ ,  $L_m=3$ ,  $F=0.1$  а. е.; 2 —  $N_l=8$ ,  $L_m=3$ ,  $F=0.1$  а. е.; 3 —  $N_l=5$ ,  $L_m=3$ ,  $F=0.1$  а. е.; 4 —  $N_l=8$ ,  $L_m=4$ ,  $F=0.1$  а. е.; 5 —  $N_l=10$ ,  $L_m=3$ ,  $F=0.1/\sqrt{2}$  а. е.; 6 —  $N_l=8$ ,  $L_m=4$ ,  $F=0.1/\sqrt{2}$  а. е.; 7 —  $N_l=5$ ,  $L_m=3$ ,  $F=0.1/\sqrt{2}$  а. е.; 8 —  $N_l=10$ ,  $L_m=1$ ,  $F=0.1$  а. е., первый порядок теории возмущений.

Из сравнения рис. 1 и 4 видно, что вплоть до напряженностей внешнего поля 0.1 а. е. на частотах выше порога однофотонной ионизации вероятность ионизации, рассчитанная в первом порядке теории возмущений, мало отличается от вероятности, полученной при численном инте-

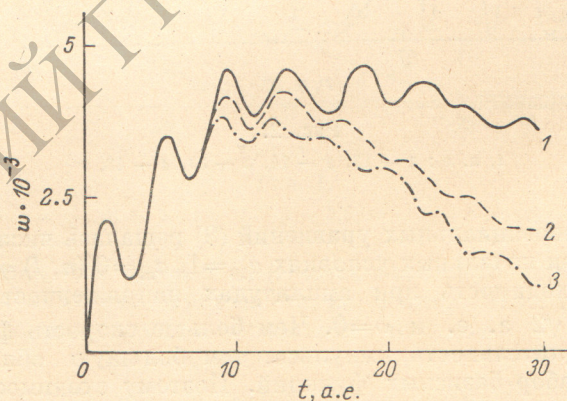


Рис. 4.

1 —  $N_l=10$ ,  $L_m=3$ ,  $F=0.1$  а. е.; 2 —  $N_l=8$ ,  $L_m=4$ ,  $F=0.1$  а. е.; 3 —  $N_l=5$ ,  $L_m=3$ ,  $F=0.1$  а. е.

грировании временного уравнения Шредингера. Поэтому при частотах ниже порога целесообразно из вероятности  $w(t)$  вычитать вероятность прямой однофотонной ионизации  $w_1(t)$ , обусловленной наличием в спектре импульса частот, превышающих порог ионизации. Это позволит выделить квазистационарное значение вероятности ионизации при меньшей длительности импульса. Для иллюстрации на рис. 3 (кривая 8) приведена вероятность ионизации резко включенным электростатическим полем, вычисленная в первом порядке теории возмущений. На рис. 5 приведены

оценочные значения вероятности ионизации как функции частоты при амплитудах напряженности внешнего поля 0.1 и  $0.1/\sqrt{2}$  а. е.

Хорошее совпадение ширины уровня  $1s$  при  $\omega=0$  с результатами расчета методом комплексных координат (приведенными в работе [3]), а также малые отличия от результатов, полученных в первом порядке теории возмущений при  $\omega > 0.5$  а. е., позволяет надеяться, что приведенные на рис. 5 кривые достаточно надежны при  $\omega > 0.2$  а. е. Результаты расчета в области частот  $0 < \omega < 0.2$  а. е. не имеют смысла, так как время наблюдения в этом случае меньше периода колебания поля. Для  $\omega > 0.45$  а. е. при уменьшении вдвое интенсивности внешнего поля вдвое уменьшается вероятность ионизации. Это говорит о том, что в этой области идет прямая однофотонная ионизация.

Численное интегрирование временного уравнения Шредингера позволяет оценить не только ши-

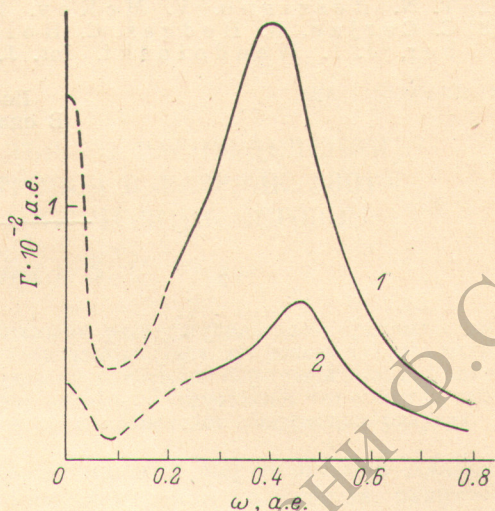


Рис. 5.

$F$ , а. е.: 1 — 0.1, 2 —  $0.1/\sqrt{2}$ .

рину уровня (рис. 5), но и штарковский сдвиг. Действительно, представив коэффициент в виде

$$a_{10}(t) = |a_{10}(t)| e^{i\varphi(t)}, \quad (9)$$

получаем

$$\Delta E \approx \dot{\varphi}(t)/t. \quad (10)$$

Знак приближенного равенства в выражении (10) обусловлен как переходными процессами, вызванными резким включением поля, так и

тем фактом, что  $1s$ -функция слегка подмешивается во все возбужденные квазистационарные состояния. На рис. 6 приведены оценочные значения величины штарковского сдвига  $1s$ -уровня при амплитуде напряженности внешнего поля 0.1 и  $0.1/\sqrt{2}$  а. е. Довольно плавный ход кривых на рис. 5, 6 может быть обусловлен и тем, что уровни являются «размы-

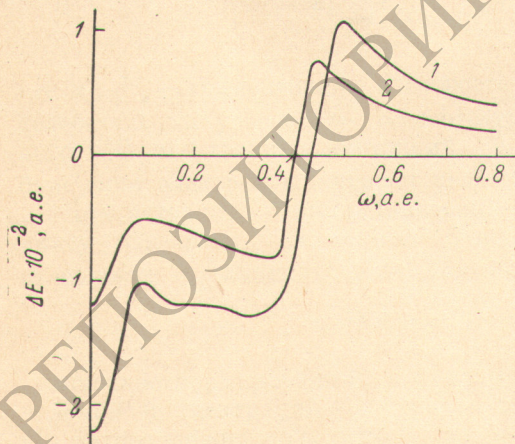


Рис. 6.

$F$ , а. е.: 1 — 0.1, 2 —  $0.1/\sqrt{2}$ .

тыми», и тем, что «измерение» ширины и сдвига уровня проводится с помощью короткого импульса, имеющего спектр шириною  $\Delta\omega \sim 1/t_m$ , где  $t_m$  — длительность импульса. При дальнейшем увеличении длительности импульса надо увеличивать и длины разложений (6). Это ведет к резкому увеличению затрат машинного времени.

Предложенный метод позволяет производить исследование процессов, происходящих в атоме при резком включении поля, и оценивать значения ширин и сдвигов уровней в интенсивных монохроматических полях.

#### Литература

- [1] В. А. Фок. Начала квантовой механики. «Наука», М., 1976.
- [2] T. N. Reszigno, V. McKoy. Phys. Rev. *A12*, 522, 1975.
- [3] C. Cerjan, R. Hedges, C. Holt, W. P. Reinhardt, K. Scheiber, J. J. Wendoloski. Int. J. Quant. Chem., *14*, 393, 1978.

Поступило в Редакцию 27 декабря 1979 г.  
В окончательной редакции 4 февраля 1981 г.

---

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ имени Ф. Скорини