УДК 539.184.3

ВЛИЯНИЕ ПОЛЯРИЗАЦИИ АТОМОВ НА ДВУХФОТОННОЕ РАЗРУШЕНИЕ ИХ ОТРИЦАТЕЛЬНЫХ ИОНОВ

П. А. Головинский и *Б. А. Зон*

Получены формулы для расчета двухфотонного отрыва электронов от отрицательных ионов с учетом поляризации атомов. Рассчитаны вероятности отрыва для отрицательных ионов щелочных элементов светом линейной и циркулярной поляризации.

Рассмотрение двухфотонного отрыва электрона от отрицательного иона производилось ранее в предположении, что связанный с атомом электрон, поглощая два фотона, переходит в непрерывный спектр, а виртуальное возбуждение атома не учитывалось [1, 2]. В то же время известно, что для щелочных атомов поляризация остова сильно влияет на вероятность их ионизации [3], а также на однофотонное разрушение их отрицательных ионов [4]. Это позволяет предположить, что подобный эффект может быть существенным и для двухфотонного отрыва электронов от отрицательных ионов щелочных элементов. Рассмотрению этого вопроса посвящена настоящая работа.

Пусть $U(\mathrm{r})$ — центрально-симметричный потенциал взаимодействия электрона с атомом. Тогда часть кулоновского взаимодействия, не сводящуюся к U, можно характеризовать оператором (используется атомная система единиц)

$$V = \sum_{j=1}^{z} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|} - \frac{z}{r} - U(r),$$

где z — число электронов в атоме. Положительно-частотная часть взаимодействия отрицательного иона с электромагнитным полем напряженностью $\mathcal{E}$ и частотой ω в дипольном приближении имеет вид

$$V_\gamma = V_{e\gamma} e^{i\omega t} + V_{A\gamma} e^{i\omega t},$$

$$V_{e\gamma} = -\frac{1}{2}\mathbf{r}\mathcal{E}, \quad V_{A\gamma} = -\frac{1}{2}\mathbf{d}\mathcal{E},$$

где $\mathbf{r}$ — дипольный момент слабосвязанного электрона, $\mathbf{d}$ — дипольный момент атома. Для учета виртуального возбуждения атома в первом порядке теории возмущений по оператору V и во втором по V_γ, кроме рассматривавшейся в [1, 2] диаграммы *а* (рис. 1), следует также рассмотреть диаграммы *б*, *в*, а также обменные диаграммы.

Функцию Грина электрона с энергией ε в поле атома обозначим $G_e(\varepsilon)$, функцию Грина атома с энергией E — $G_A(E)$. Тогда функция Грина всей системы при выключенном поле есть [5]

$$G(E) = -\frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} G_A(E - \varepsilon)\, G_e(\varepsilon)\, d\varepsilon.$$

Амплитуды перехода M_1, M_2, M_3, соответствующие указанным диаграммам, имеют вид

$$M_1 = \langle \mathbf{p} \,|\, V_{e\gamma} G_e(\varepsilon + \omega) V_{e\gamma} \,|0\rangle, \tag{1а}$$

$$\begin{aligned} M_2 = {} & \langle \mathbf{p}i \,|\, [V_{e\gamma} G_e(\varepsilon + \omega) V + VG(E_t + 2\omega) V_{e\gamma}] \, G_A(E_i + \omega) V_{A\gamma} \,|\, i0\rangle + \\ & + \langle \mathbf{p}i \,|\, [V_{A\gamma} G_A(E_i - \omega) V + VG(E_t + 2\omega) V_{A\gamma}] \, G_e(\varepsilon + \omega) V_{e\gamma} \,|\, i0\rangle + \\ & + \langle \mathbf{p}i \,|\, [V_{e\gamma} G_e(\varepsilon + \omega) V_{A\gamma} + V_{A\gamma} G_A(E_i - \omega) V_{e\gamma}] \, G(E_t) V \,|\, i0\rangle, \end{aligned} \tag{1б}$$

$$\begin{aligned} M_3 = {} & \langle \mathbf{p}i \,|\, [VG_A(E_i + 2\omega) V_{A\gamma} G_A(E_i + \omega) V_{A\gamma} + V_{A\gamma} G_A(E_i - \omega) V_{A\gamma} G_A(E_i - 2\omega) V + \\ & + V_{A\gamma} G_A(E_i - \omega) VG_A(E_i + \omega) V_{A\gamma}] \,|\, i0\rangle, \end{aligned} \tag{1в}$$

где E_i, ε — энергии основного состояния атома i и слабосвязанного электрона o, $E_t = E_i + \varepsilon$, $\mathbf{p}$ — импульс освободившегося электрона. Полная амплитуда отрыва электрона двумя фотонами

$$M_\mathbf{p} = M_1 + M_2 + M_3.$$

Взаимодействие электрона с нейтральным атомом мало. Мы будем полагать для возбужденных состояний электрона $U \equiv 0$ и функцию Грина электрона

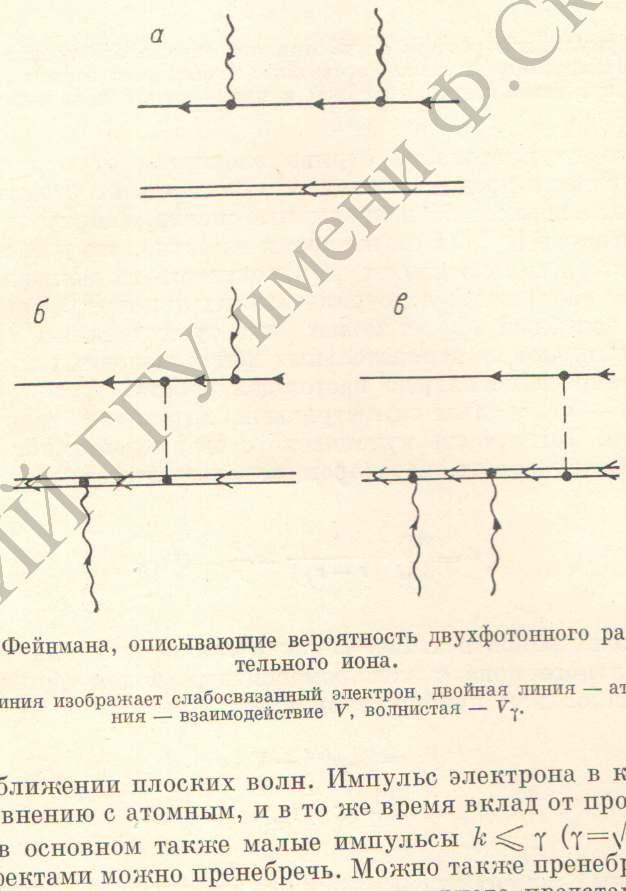


Рис. 1. Графики Фейнмана, описывающие вероятность двухфотонного разрушения отрицательного иона.

Тонкая сплошная линия изображает слабосвязанный электрон, двойная линия — атом, прерывистая линия — взаимодействие V, волнистая — V_γ.

выберем в приближении плоских волн. Импульс электрона в конечном состоянии мал по сравнению с атомным, и в то же время вклад от промежуточных состояний дают в основном также малые импульсы $k \leqslant \gamma$ $(\gamma = \sqrt{2|\varepsilon|})$. Поэтому обменными эффектами можно пренебречь. Можно также пренебречь величинами $\sim \omega$, k^2 в энергетических знаменателях регулярного представления функции Грина системы [5] по сравнению с разностью уровней энергии нейтрального атома, поскольку ω, $k^2 \ll E_n - E_i$, где E_n — энергия возбужденного атома.

Пользуясь Фурье-преобразованием волновой функции слабосвязанного электрона

$$|0\rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{i\mathbf{kr}} b_\mathbf{k} d\mathbf{k},$$

а также тем, что

$$\int e^{i\mathbf{qr}} \frac{d\mathbf{r}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_j|} = \frac{4\pi}{q^2} e^{i\mathbf{qr}_j},$$

нетрудно, учитывая сказанное, получить

$$M_1 = i\frac{\mathcal{E}_l \mathcal{E}_j}{4}\frac{\partial}{\partial p_l}\left(\frac{\langle \mathbf{p} | r_j | 0\rangle}{\varepsilon + \omega - p^2/2}\right), \tag{2а}$$

$$M_2 = \frac{\mathcal{E}_l \mathcal{E}_j}{8\pi^2}\sum_{nk}\Big[i\frac{\partial}{\partial p_l}\left(\frac{F_{in}(\mathbf{q})\langle n | d_j | i\rangle + \langle i | d_j | n\rangle F_{ni}(\mathbf{q})}{E_i - E_n}\right)\frac{b_{\mathbf{k}}}{q^2(\varepsilon + \omega - p^2/2)} +$$

$$+\left(\frac{F_{in}(\mathbf{q})\langle n | d_j | i\rangle + \langle i | d_j | n\rangle F_{ni}(\mathbf{q})}{E_i - E_n}\right)\frac{\langle \mathbf{k} | r_l | 0\rangle}{q^2(\varepsilon + \omega - k^2/2)} +$$

$$+ i\frac{\partial}{\partial p_l}\frac{\langle i | d_j | n\rangle F_{ni}(\mathbf{q})\, b_{\mathbf{k}}}{(E_i - E_n)\, q^2} + \frac{F_{in}(\mathbf{q})\langle n | d_j | i\rangle\langle \mathbf{k} | r_l | 0\rangle}{(E_i - E_n)^2 q^2}\Big], \tag{2б}$$

$$M_3 = \frac{\mathcal{E}_l \mathcal{E}_j}{8\pi^2}\sum_{nmk}\frac{1}{q^2}\Big[\frac{F_{im}(\mathbf{q})\langle m | d_l | n\rangle\langle n | d_j | i\rangle}{(E_i - E_m)(E_i - E_n)} +$$

$$+\frac{\langle i | d_l | m\rangle\langle m | d_j | n\rangle F_{ni}(\mathbf{q}) + \langle i | d_l | m\rangle F_{mn}(\mathbf{q})\langle n | d_j | i\rangle}{(E_i - E_m)(E_i - E_n)}\Big], \tag{2в}$$

где $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{p}$, $F_{st}(\mathbf{q}) = \langle s | \sum_{j=1}^{z} \exp(i\mathbf{q}\mathbf{r}_j) | t\rangle$, по повторяющимся векторным индексам проводится суммирование.

Матричные элементы F_{st} определяют в первом борновском приближении амплитуду безрадиационного перехода между состояниями s и t при столкновении электрона с атомом [6]. Поскольку для импульса слабосвязанного электрона в начальном и конечном состояниях справедливо $p_e \leqslant \gamma$, то $qa \ll 1$, где a — размеры атома. Пользуясь этим, можно ограничиться при вычислении F_{st} в (2б, в) низшими членами разложения в ряд экспоненты, дающими ненулевой результат из-за правил отбора. Таким образом, для M_2 можно ограничиться дипольным приближением, а для M_3 квадрупольным. Простая оценка по асимптотике волновых функций показывает, что $M_3/M_2 \sim (\varepsilon/E_i)^{3/2} \ll 1$, и членом M_3 можно пренебречь.

Поскольку мы рассматриваем атомы с основными s-состояниями, то

$$\sum_n \frac{\langle i | d_l | n\rangle\langle n | d_j | i\rangle}{E_n - E_i} = \frac{\alpha}{2}\delta_{lj},$$

$$\sum_n \frac{\langle i | d_l | n\rangle\langle n | d_j | i\rangle}{(E_n - E_i)^2} = S(-3)\,\delta_{lj},$$

где α — поляризуемость атома, $S(-3)$ — сумма сил осциллятора (—3) порядка [7]. Тогда полную амплитуду перехода можно представить в виде

$$M_{\mathbf{p}} = \mathcal{E}_l \mathcal{E}_j\Big\{\frac{i}{4}\frac{\partial}{\partial p_l}\left(\frac{\langle \mathbf{p} | r_j | 0\rangle}{\varepsilon + \omega - p^2/2}\right) + \frac{\alpha}{8\pi^2}\left[\frac{\partial}{\partial p_l}\frac{J_j(\mathbf{p})}{\varepsilon + \omega - p^2/2} - iJ_{lj}^{(2)}(\mathbf{p})\right] -$$

$$-\frac{S(-3)}{8\pi^2}\left[\frac{\partial}{\partial p_l}J_j(\mathbf{p}) - iJ_{lj}^{(1)}(\mathbf{p})\right]\Big\}. \tag{3}$$

В этой формуле введены обозначения

$$J_j(\mathbf{p}) = \int \frac{(k_j - p_j)\, b_{\mathbf{k}}}{q^2}\, d\mathbf{k}, \tag{4а}$$

$$J_{lj}^{(1)}(\mathbf{p}) = \int \frac{(k_l - p_l)\langle \mathbf{k} | r_j | 0\rangle}{q^2}\, d\mathbf{k}, \tag{4б}$$

$$J_{lj}^{(2)}(\mathbf{p}) = \int \frac{(k_l - p_l)\langle \mathbf{k} | r_j | 0\rangle}{q^2(\varepsilon + \omega - k^2/2)}\, d\mathbf{k}. \tag{4в}$$

Выберем волновую функцию слабосвязанного электрона в модели δ-потенциала [5] $|0\rangle = \sqrt{\gamma/2\pi}\, e^{-\gamma r}/r$. Тогда $b_{\mathbf{k}} = \sqrt{\gamma}/\pi(\gamma^2 + k^2)$,

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{r} | 0\rangle = i\frac{\partial b_{\mathbf{k}}}{\partial \mathbf{k}} = -\frac{2i\sqrt{\gamma}\,\mathbf{k}}{(\gamma^2 + k^2)^2}.$$

Интеграл J_j (4а) вычислялся ранее в работе [4]

$$J_j(\mathbf{p}) = -\frac{\pi\sqrt{\gamma}\, p_j}{p^2}\left[\frac{\gamma^2+p^2}{p}\operatorname{arctg}\frac{p}{\gamma}-\gamma\right].$$

С учетом этого имеем

$$M_{\mathbf{p}} = \frac{\sqrt{\gamma}}{2\pi}\,\mathcal{E}_l\left\{\frac{\partial}{\partial p_l}\left[(\mathcal{E}\mathbf{p})\, J(p)\right]\right\} - i\,\frac{\mathcal{E}_l\mathcal{E}_j}{8\pi^2}\left[\alpha J_{lj}^{(2)}(\mathbf{p}) - S(-3)\, J_{lj}^{(1)}(\mathbf{p})\right], \qquad (5)$$

где

$$J(p) = \frac{1}{(\gamma^2+p^2)^2(\varepsilon+\omega-p^2/2)} - \frac{1}{4p^2}\left[\frac{\gamma^2+p^2}{p}\operatorname{arctg}\frac{p}{\gamma}-\gamma\right]\left[\frac{\alpha}{\varepsilon+\omega-p^2/2}-S(-3)\right].$$

Остановимся на вычислении величин $\mathcal{E}_l\mathcal{E}_j J_{lj}^{(\mu)}$ ($\mu = 1, 2$) (см. (4б, в)). Поскольку $\mathcal{E}_{l(j)}$ в случае произвольной поляризации являются, вообще говоря, комплексными, то необходимо уметь вычислять величины $A_l B_j J_{lj}^{(\mu)}(\mathbf{p})$, где $\mathbf{A}$, $\mathbf{B}$ — произвольные вещественные векторы. Заметим, что обе величины с верхними индексами 1 и 2 имеют одинаковую угловую зависимость. Интегрируя по углам, получаем

$$A_l B_j J_{lj}^{(\mu)}(\mathbf{p}) = \frac{i\sqrt{\gamma}\, AB}{p}\left[\beta Q_\mu(\beta) - \delta Q_\mu(\delta)\right], \qquad (6)$$

$$Q_1(t) = \int_0^\infty P(t, k)\, dk, \quad Q_2(t) = \int_0^\infty \frac{P(t, k)\, dk}{\varepsilon+\omega-k^2/2},$$

$$P(t, k) = \left\{\frac{k^2+p^2+2(t-\delta)(k^2-p^2)/(\beta-\delta)}{2p}\left[2+\frac{k^2+p^2}{2kp}\ln\left(\frac{p-k}{p+k}\right)^2\right] - k\ln\left(\frac{p-k}{p+k}\right)^2\right\}\frac{k^2}{(\gamma^2+k^2)^2},$$

$$\beta = \cos(\widehat{\mathbf{A}\mathbf{p}})\cos(\widehat{\mathbf{B}\mathbf{p}}), \quad \delta = \cos(\widehat{\mathbf{A}\mathbf{B}}).$$

Полная вероятность разрушения получается интегрированием по углам дифференциальной вероятности

$$dW = 2\pi p\, |M_{\mathbf{p}}|^2\, d\Omega_{\mathbf{p}},$$

где $d\Omega_{\mathbf{p}}$ — элементарный телесный угол, в который вылетает электрон.

В случае линейной поляризации интегрирование по углам дает

$$W_L = 2I^2 p\gamma\left(A^2 + \frac{2}{3}AB + \frac{B^2}{5}\right), \qquad (7)$$

$$A = J(p) - \frac{1}{4\pi p}\left[\alpha Q_2(\delta) - S(-3)\, Q_1(\delta)\right],$$

$$B = p\,\frac{\partial J(p)}{\partial p} + \frac{1}{4\pi p}\left[\alpha Q_2(\beta) - S(-3)\, Q_1(\beta)\right].$$

$I = \mathcal{E}\mathcal{E}^*$ — интенсивность поля.

Для циркулярной поляризации

$$W_C = 2I^2 p\gamma\left(A^2 + \frac{8}{15}B^2\right), \qquad (8)$$

$$A = J(p), \quad B = p\,\frac{\partial J(p)}{\partial p} + \frac{1}{8\pi p}\left[\alpha Q_2(\beta) - S(-3)\, Q_1(\beta)\right].$$

Поляризуемость α и сумму сил осциллятора $S(-3)$, входящие в выражения (5, 7, 8) для расчета вероятности двухфотонного отрыва, следуя [8], можно представить в виде

$$\alpha = -\frac{4}{3}\int_0^\infty \chi_i(r)\, f(r)\, r\, dr, \quad S(-3) = \frac{4}{3}\int_0^\infty f^2(r)\, r\, dr,$$

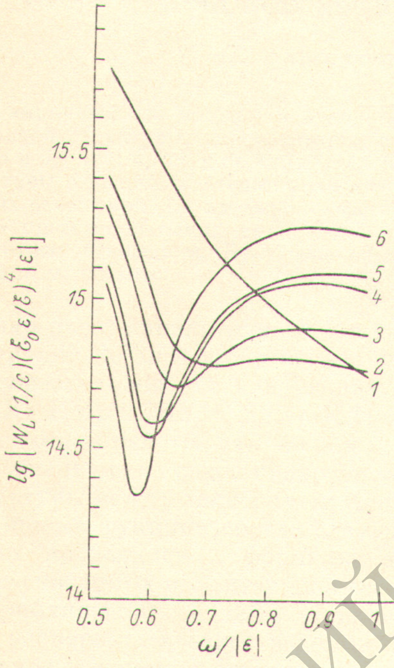
где $\chi_i(r)$ — радиальная волновая функция валентного электрона атома, f находится из уравнения

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - 2U_A(r) + 2E_i\right) f = r\chi_i, \quad l = 1. \tag{9}$$

В нем $U_A(r)$ — потенциал атомного оптического электрона. Краевые условия для уравнения (9) имеют вид

$$f(0) = 0, \quad [\ln f(r)]_{r=\infty} = -\sqrt{2|E_i|}.$$

Величины α и $S(-3)$ рассчитывались нами в приближении потенциала Грина—Селина—Захора [9] и, как и при расчете методом модельного потен-



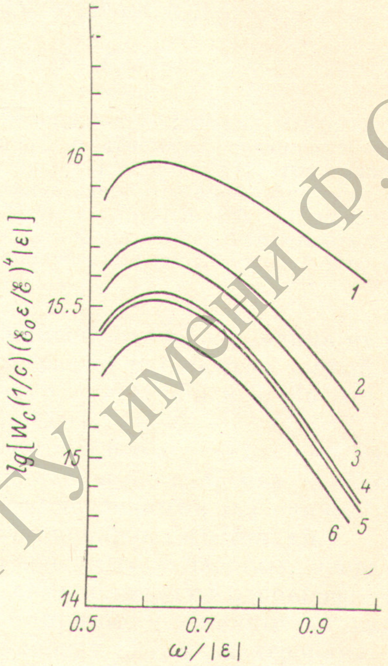


Рис. 2. Вероятность двухфотонного отрыва электрона от отрицательного иона линейно поляризованным светом.

1 — модель δ-потенциала без учета поляризационных эффектов. *2—6* — расчет для ионов Li^-, Na^-, K^-, Rb^-, Cs^- с учетом поляризационных эффектов.

Рис. 3. Вероятность двухфотонного отрыва электрона от отрицательного иона циркулярно поляризованным светом.

Обозначения соответствуют рис. 2.

циала [7], совпадают с экспериментальными в пределах ошибки эксперимента $\sim 2\%$. Значения $Q_\mu(t)$ также удобно находить численным интегрированием. Результаты расчета вероятности двухфотонного отрыва электрона от отрицательных ионов Li — Cs^- линейно поляризованным светом для атомной напряженности поля $\mathcal{E}_0$, представлены на рис. 2, а циркулярно поляризованным светом на рис. 3. Кривые *1* соответствуют результатам расчета без учета поляризационных эффектов. Кривые *2—6* — расчет с учетом виртуального возбуждения для различных атомов. Из сравнения этих кривых видно, что поляризационные эффекты приводят к резкому изменению величины вероятности отрыва электрона, а для линейной поляризации поля и ее зависимости от частоты. Это является следствием интерференции амплитуды прямого двухфотонного отрыва и амплитуды отрыва, идущего через возбуждение атома. Поляризация поля также меняет зависимость вероятности от частоты.

Литература

[1] S. Geltman. Phys. Lett., *4*, 168, 1963.
[2] E. J. Robinson, S. Geltman. Phys. Rev., *153*, 4, 1967.
[3] И. Л. Бейгман, Л. А. Вайнштейн, В. П. Шевелько. Опт. и спектр., *28*, 425, 1970.
[4] П. А. Головинский, Б. А. Зон. Опт. и спектр., *45*, 854, 1978.
[5] А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. «Наука», М., 1971.
[6] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика, т. III. «Наука», М., 1974.
[7] Л. П. Рапопорт, Б. А. Зон, Н. Л. Манаков. Теория многофотонных процессов в атомах. Атомиздат, М., 1978.
[8] A. Dalgarno, J. T. Lewis. Proc. Roy. Soc., *A233*, 70, 1955.
[9] A. E. S. Green, D. L. Sellin, S. Zahor. Phys. Rev., *184*, 1, 1969.

Поступило в Редакцию 6 ноября 1980 г.