

А.В. Игнатенко, к.ф.-м.н., **П.Г. Башкарёв**, к.ф.-м.н., **Е.В. Бакунина**, к.ф.-м.н.,
А.К. Яковлева, студ.

Одесский государственный экологический университет

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ДИНАМИКИ МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ РИДБЕРГОВСКИХ АТОМОВ В ЭЛЕКТРОМАГНИТНОМ ПОЛЕ

Новый подход к описанию динамических характеристик многоэлектронных ридберговских атомов в сильном электромагнитном поле, базирующийся на методе комплексных координат и приближении квантового дефекта, применен к изучению ионизационных характеристик атома лития в ридберговских состояниях.

Ключевые слова: метод комплексных координат, ридберговский атом, электромагнитное поле

Введение. В последние годы в связи со значительным прогрессом в экспериментальной атомной физике значительное интерес и внимание привлекает развитие адекватных математических методов моделирования динамики многоэлектронных атомов в высоко возбужденных (ридберговских) состояниях во внешнем электромагнитном поле. Стандартные методы математической физики и квантовой механики, в том числе, аппарат квантово-механической теории возмущений (ТВ) по потенциалу внешнего электрического поля, а также квазиклассическое приближение и асимптотические подходы (см. детали в [1-20]), оказываются в случае сильного поля либо теоретически не достаточно последовательными, либо неэффективными с точки зрения вычислительной математики. Детальный обзор современного состояния искомой проблематики можно найти в работах [1,5,15,16]. Случай многоэлектронных атомов существенно отличается от известной задачи об атоме водорода во внешних полях вследствие необходимости адекватного учета многоэлектронности задачи (и связанной с этим необходимости учета и межэлектронных корреляций, а в случае тяжелых атомов и релятивизма). В настоящее время эта ситуация по-прежнему крайне драматической, несмотря на появление очень важных и принципиально новых подходов [1,5,9-14]. Фундаментальные проблемы традиционных методов в задаче о динамическом эффекте Штарка (обычная ТВ, квазиклассика, асимптотические подходы) связаны с принципиальной неприменимостью указанных подходов в случае сильных внешних полей, когда нарушается классическое условие хорошей разделенности штарковских резонансов друг от друга. К настоящему времени в задаче о динамическом эффекте Штарка для атома водорода случай слабого поля исследован достаточно детально [2-5]. Более актуальным и интересным представляется исследование ионизационных характеристик многоэлектронных, ридберговских атомов именно в критической области спектра, когда имеет место постепенное размывание резонансов вплоть до их полного слияния друг с другом (в континууме). Следует упомянуть здесь о широком круге работ, связанных с изучением феномена квантового хаоса в таких системах (см. обзоры в [15,16]). В последние годы развиты новые как с точки зрения квантовой механики, так и с точки зрения вычислительной математики методы моделирования динамики многоэлектронных систем во внешнем электромагнитном поле, базирующиеся как на прямом численном решении уравнения Шредингера, так и релятивистского уравнения Дирака [1,5,10-16,20-24]. Тем не менее, на наш взгляд, проблема моделирования конкретных ридберговских атомных систем рассмотрена явно недостаточно. В данной работе на основе метода, развитого в работах [20-24], численно изучена динамика многоэлектронного ридберговского атома лития в электромагнитном поле.

Основные уравнения метода. Поскольку используемый нами подход детально рассмотрен в работах [20-24], ниже мы ограничимся изложением лишь принципиальных аспектов нашего метода. Как обычно, стартовым приближением является известный формализм квазистационарных квазиэнергетических состояний Зельдовича [6]. Тогда уравнение для квазистационарных состояний многоэлектронного атома имеет вид (здесь и далее используются атомные единицы)

$$(-1/2 \cdot \nabla^2 + V_{at}(r) + \omega L_z + F_0 z) \Psi_E(r) = E \Psi_E(r), \quad (1)$$

где F_0 – напряженность электрического поля, V_{at} – атомный потенциал, учитывающий многоэлектронность задачи. Практически во всех методиках потенциал V_{at} определяется как некий затравочный потенциал типа хартри-фоковского (дирак-фоковского) с учетом многоэлектронных эффектов. Поскольку объектом исследования является атом лития в ридберговских состояниях, согласно [20], здесь удобным оказывается использование известного приближения квантового дефекта. В этом приближении энергии уровней в спектрах атомов типа лития (в большей степени для ридберговских состояний) определяются выражением

$$E_{alk} = -\frac{1}{2n_{eff}^2} = -\frac{1}{2(n - \delta_l)^2}, \quad n \in N, \quad (2)$$

где n_{eff} – эффективное квантовое число, в общем случае отличное от целочисленного значения, δ_l – величина, называемая квантовым дефектом, сильно зависящая от орбитального квантового числа, но медленно меняющаяся с ростом главного квантового числа n . Обычно для достижения достаточно высокой точности определения величины квантового дефекта используется разложение по энергии (известная формула Ритца)

$$\delta_l = \delta_l^{(0)} + \sum_{i=1}^M \delta_l^i E^i. \quad (3)$$

Напомним, что с физической точки зрения, квантовый дефект для связанных состояний фактически характеризует влияние некулоновой части атомного потенциала V_{at} , для состояний континуума роль квантового дефекта δ_l для связанных состояний играет асимптотический фазовый сдвиг τ . Связь между фазовым сдвигом и квантовым дефектом дается известной формулой: $\tau = \delta_l \cdot \pi$, составляющей суть известной теореме Ситона. В приближении квантового дефекта в уравнении (1) естественно появляется кулоновский потенциал

$$(-1/2 \cdot \nabla^2 - r^{-1} + \omega L_z + F_0 z) \Psi_E(r) = E \Psi_E(r). \quad (4)$$

После комплексного преобразования координат уравнение (4) на собственные значения и собственные функции принимает вид

$$(-1/2 \cdot \nabla^2 e^{-2i\theta} - r^{-1} e^{-i\theta} + \omega L_z + F_0 z e^{i\theta}) \Psi_E(re^{i\theta}) = (E - E_{(alk)n}) \Psi_E(re^{i\theta}), \quad (5)$$

где E_{alk} – невозмущенное значение энергии.

Квадратичная интегрируемость функций квазистационарных состояний обеспечивается при значениях угла комплексного вращения координат φ , определяемых неравенствами

$$|\arg[-(E + k\omega)]|^{1/2} < \theta < \pi/2 - \arg\{-[E + (k-1)\omega]\}^{1/2}, \quad (6)$$

где k – пороговое число фотонов, необходимое для ионизации.

При выборе конечного базиса, на котором диагонализуется (5), комплексные собственные значения зависят от φ как от параметра. Далее можно задаться

определенной точностью вычисления и размер базиса выбирать таким образом, чтобы его вариации не изменяли точности результата. Эффективным является использование соответствующего базиса операторной теории ТВ [10]. Стандартный подход к определению базиса в задаче об атоме водорода в поле заключается в использовании системы функций задачи Штурма-Лиувилля атома водорода (обобщенной в рамках теории квантового дефекта). Фактически основная задача далее сводится к стационарной задаче на собственные значения и собственные векторы матрицы A (причем достаточно рассмотреть одну-две флюковские зоны)

$$(A - E_j B)|E_j\rangle = 0, \quad (7)$$

где матричные элементы A имеют вид

$$A_{nlm, n_1 l_1 m_1} = \delta_{l, l_1} \delta_{m, m_1} \{ \langle nlm | n_{1l_1 m_1} \rangle \cdot [(n_1 + l_1 + 1)/\nu \cdot \exp(-2i\theta) - \exp(-i\theta)] + \delta_{n, n_1} (E_n^0 - 1/2\nu^2 + \omega m) \} + F_0 \exp(-i\theta) \langle nlm | z | n_{1l_1 m_1} \rangle, \quad (8)$$

где $|nlm\rangle$ - радиальная часть волновой функций электрона.

Решение искомой задачи дает набор значений квазиэнергий E_j , скоростей распада Γ_j ($E \rightarrow E - i\Gamma/2$) и соответствующие собственные вектора $|E_j\rangle$. Характеристика, которая обычно измеряется в эксперименте, есть вероятность ионизации (усредненная по начальной фазе внешнего переменного поля) в зависимости от времени, если в начальный момент атом находился в состоянии $|n_0 l_0 m_0\rangle$. Искомая величина определяется как

$$P_{ion}(t) = 1 - \sum_{E_j} w_j \exp(-i\Gamma_j t) \quad (9)$$

с w_j определяющими перекрытие функции начального состояния атома с собственными векторами $|E_j\rangle$ системы «атом-поле». Суммирование в (7), естественно, проводится по всем состояниям в одной флюковской зоне.

Результаты и выводы. Нетрудно понять, что полная диагонализация матрицы (8) представляет собой достаточно сложную задачу с точки зрения вычислительной математики. Упрощенная процедура типа [11,22] сводится к поиску лишь одного собственного значения, переходящего при включении поля в основное состояние E_n^0 . Решение задачи отыскания максимального собственного значения и соответствующего собственного вектора осуществляется стандартными итерационными методами. Нами в качестве базиса разложения используется система штурмовских функций [22-24]:

$$\langle r, \theta, \phi | S_{n,l,m}^\alpha \rangle = D(n,l) \exp\left(\frac{-r}{\alpha}\right) \left(\frac{2r}{\alpha}\right)^l L_{n-l-1}^{(2l+1)}\left(\frac{2r}{\alpha}\right) Y_{l,m}(\theta, \phi), \quad (10)$$

$$D(n,l) = \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}}, \quad |m| \leq l < n,$$

где L – полиномы Лаггерра, Y – обычные сферические гармоники, α - параметр, определяющий масштаб осцилляций штурмовских функций (простейшая оценка имеет вид $E_n = -1/(2n^2\alpha)$). Особенности соответствующей численной схемы детально описаны в работах [20-24], поэтому далее мы перейдем непосредственно к изложению результатов для атома лития. Отметим лишь, что значения $l_{max} > 50$, $n_{max} > 100$, а для флюковской зоны соответствующее значение $n_{sif} > 40$. Наконец, для атома в ридберговских состояниях, в частности, с главным квантовым числом 30-70 справедливо соотношение $0.02 < \theta < 0.07$ [23]. В табл. 1 приведены полученные нами значения вероятности ионизации атомов Li приготовленных первоначально в

состояниях с орбитальным угловым моментом $l_0=0$, проекцией момента $m_0=0$, значениями главного квантового числа n_0 в интервале 45-67 для значений амплитуды поля: $F = 2.0 \cdot 10^{-9}$, $2.5 \cdot 10^{-9}$, $3.1 \cdot 10^{-9}$ ат. ед. (параметры поля: $t = 327 \cdot 2\pi/\omega$; частота $\omega/2\pi = 36$ ГГц), а также имеющиеся данные из работы [13] для $F = 3.1 \cdot 10^{-9}$ и $n_0=61-67$.

Таблица 1 - Вероятности ионизации атомов Li в состояниях с $l_0=0$, $m_0=0$ и $n_0=45-67$ для значений амплитуды поля $F = 2.0 \cdot 10^{-9}$, $2.5 \cdot 10^{-9}$, $3.1 \cdot 10^{-9}$ ат.ед.

	Наша теория	Наша теория	Наша теория	[13]
n_0	$F = 2.0 \cdot 10^{-9}$	$F = 2.5 \cdot 10^{-9}$	$F = 3.1 \cdot 10^{-9}$	$F = 3.1 \cdot 10^{-9}$
45	0,008	0,016	0,039	-
47	0,011	0,021	0,051	-
49	0,014	0,032	0,062	-
51	0,017	0,041	0,147	-
53	0,019	0,028	0,050	-
55	0,021	0,034	0,058	-
57	0,023	0,042	0,048	-
61	0,025	0,082	0,285	0,300
63	0,136	0,312	0,344	0,362
65	0,087	0,238	0,459	0,475
67	0,044	0,269	0,498	0,513

Как видно из табл. 1 с ростом главного квантового числа и увеличением амплитуды поля в целом наблюдается и рост вероятности ионизации. С другой стороны, полученные нами данные демонстрируют также и пороговый характер изменения P , т.е. для определенных значений n_0 и F величина вероятности меняется очень слабо (область параметров, где применима обычная ТВ), а затем резко возрастает. Кроме того, для ряда значений n_0 (например $n_0 \sim 51, 63$) имеют место локальные нарушения плавного роста P , что связано с резонансным усложнением структуры спектра Флоке. Группа почти вырожденных собственных состояний системы «атом-поле» при данной амплитуде поля включает также многофотонные резонансы между связанными состояниями, что усиливает их связь с континуумом и резко увеличивает P (и наоборот).

В заключение авторы выражает глубокую благодарность проф. Глушкову А.В. за полезные обсуждения, советы и критические замечания.

Список литературы

1. Ullrich C., Erhard S., Gross E. Superintense Laser-Atom Physics.- N-Y: AIP, 2007.-650p.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика.-М.: Наука, 1977.-700с.
3. Лисица В.С. Новое в эффектах Штарка и Зеемана для атома водорода//УФН.-1987.-Т. 153.- С.379-422.
4. Летохов В.С. Нелинейные селективные фотопроцессы в атомах и молекулах.-М.:Наука.- 1983.-408с.
5. Глушков А.В. Атом в электромагнитном поле.- Киев: КНТ, 2005.- 450с.
6. Зельдович Я.Б. Квазиэнергия квантово-механической системы в периодическом поле// ЖЭТФ.-1967.-Т.26.-С.1006-1018.
7. Baldwin G.G., Salem J.C., Goldansky V.I. Approaches to development of gamma ray lasers // Rev.Mod.Phys.-1981.-Vol.53,N4.-P.687-742.

8. Гольданский В.И., Летохов В.С. О воздействии лазерным излучением на процессы распада ядер// ЖЭТФ.-1974.-Т.67.-С.513-516.
9. Ivanov L.N., Letokhov V.S. Spectroscopy of autoionization resonances in heavy elements// Com. Mod.Phys.D.:At.Mol.Phys.-1985.-Vol.4.-P.169-184.
10. Glushkov A.V., Ivanov L.N. DC Strong-Field Stark-Effect: New consistent quantum-mechanical approach// J.Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-1993.-Vol.26.-P.L379-386.
11. Преображенский М.А., Рапопорт Л.П. Квазистационарные состояния атома водорода в поле сильной монохроматической волны//ЖЭТФ-1990.-Т.78-С.929-935.
12. Popov V.S., Mur V.D., Sergeev A.V., Weinberg V.M. Strong field Stark effect: perturbation theory and $1/n$ expansion //Phys.Lett.A.-1990.-V.149.-P.418-424.
13. Gallagher T. F., Noel M.W., Griffith M.W. Classical subharmonic resonances in microwave ionization of Li Rydberg atoms// Phys. Rev. A.-2000.-Vol.62.-P.063401.
14. Walther H., Benson O., Buchleitner A., Raithel G., Arndt M., Mantegna R. From coherent to noiseinduced microwave ionization of Rydberg atoms//Phys.Rev.A.-1995.-Vol.51.-P.4862-4876.
15. Grutter M., Zehnder O., Softley T.P., Merkt F. Spectroscopic study and multichannel quantum defect theory analysis of the Stark effect in Rydberg states of neon// J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-2008.-Vol.41.-P.115001 (8p.).
16. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Loboda A.V., Svinarenko A.A. QED approach to atoms in a laser field: Multi-photon resonances and above threshold ionization//Frontiers in Quantum Systems in Chemistry and Physics (Berlin, Springer).-2008.-Vol.18.-P.501-558.
17. Glushkov A.V., Khetselius O.Yu., Malinovskaya S.V. Optics and spectroscopy of cooperative laser-electron nuclear processes in atomic and molecular systems - New trend in quantum optics// European Physical Journal ST.-2008.-Vol.160.-P.195-204.
18. Ignatenko A.V., Prepelitsa G.P., Pereylygina T.B., Buyadzhi V.V. Optical bi-stability effect for multi-photon absorption in atomic ensembles in strong laser field// Photoelectronics.-2009.-N18.-P.71-76.
19. Dunning F.B., Mestayer J.J., Reinhold C.O., Yoshida S., Burgdorfer J. Engineering atomic Rydberg states with pulsed electric fields// J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.-2009.-Vol.42.-P.022001 (10p.).
20. Glushkov A.V., Ambrosov S.V., Ignatenko A.V., Korchevsky D.A. DC strong field Stark effect for non-hydrogenic atoms: new consistent quantum mechanical approach// Int. Journal of Quantum Chem.-2004.-Vol.99.-P.936-948.
21. Glushkov A.V., Lepikh Ya.I., Fedchuk A.P., Ignatenko A.V., Khetselius O.Yu., Ambrosov S.V. Wannier-Mott excitons and atoms in a DC electric field: photoionization, Stark effect, resonances in the ionization continuum// Sensor Electr. and Microsyst. Techn.-2008.-N4.-P.5-11.
22. Игнатенко А.В., Витавецкая Л.А., Флорко Т.А. Метод комплексных координат для многоэлектронных ридберговских атомов в электромагнитном поле// Вісник Одеського держ. екологічного ун-ту.-2010.-N9.-С.223-227.
23. Ambrosov S.V., Ignatenko A.V., Korchevsky D.A., Kozlovskaya V.P. Sensing stochasticity of atomic systems in crossed electric and magnetic fields by analysis of level statistics for continuous energy spectra// Sensor Electr. and Microsyst. Techn.-2005.-N2.-P.19-23.
24. Ignatenko A.V. Probabilities of the radiative transitions between Stark sublevels in spectrum of atom in an DC electric field: new approach// Photoelectronics.-2007.-N16.-P.71-74.

Чисельне моделювання динаміки багатоелектронних рідбергівських атомів у електромагнітному полі. Игнатенко Г.В., Башкаръев П.Г., Бакунина О.В., Яковлева О.К.

Новий підхід до опису динамічних характеристик багатоелектронних рідбергівських атомів у сильному електромагнітному полі, який базується на методі комплексних координат та наближенні квантового дефекта, застосовано до вивчення іонізаційних характеристик атома літія у рідбергівських станах.

Ключові слова: метод комплексних координат, рідбергівський атом, електромагнітне поле

Numerical modeling dynamics of multielectron Rydberg atoms in an electromagnetic field.

Ignatenko A.V., Bashkarev P.G., Bakunina E.V., Yakovleva A.K.

Ionization characteristics of the lithium atom in the Rydberg states were used for studying within a new approach to multielectron Rydberg atom in a strong electromagnetic field, which is based on the complex coordinates method and quantum defect approximation.

Keywords: complex coordinates method, Rydberg atom, electromagnetic field.