ЖЭТФ, 1999, том 116, вып. 3(9), стр. 793–806

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АТОМА СО СВЕРХСИЛЬНЫМИ ЛАЗЕРНЫМИ ПОЛЯМИ

*А. В. Андреев**

Физичекий факультет и Международный лазерный центр Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова 119899, Москва, Россия

Поступила в редакцию 10 января 1999 г.

Развита теория взаимодействия атома со сверхсильными лазерными полями. Специфика предлагаемой теории состоит в том, что параметром малости задачи является взаимодействие атома с соленоидальной частью внешнего поля, в то время как взаимодействие с потенциальной частью поля учитывается точно. Проведенные исследования показали, что при взаимодействии атома со сверхсильными полями следует отказаться от расчета мультипольных моментов переходов электрона между состояниями невозмущенного атома, а рассчитывать отклик атома, включающий мультипольные моменты всех порядков и зависящий от мгновенного значения поля волны. Проведено сравнение с результатами расчетов, основанных на использовании теории возмущений по гамильтониану взаимодействия.

PACS: 42.50.Md, 42.65.Ky

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние годы наблюдается значительный интерес к исследованию взаимодействия одиночных атомов и молекул, а также плотных сред (газов высокого давления, плазмы, жидкости) с ультракороткими лазерными импульсами высокой интенсивности. Отклик среды на такое поле является существенно нелинейным. Это приводит к генерации высоких гармоник, комбинационных частот или квазиконтинуума, т. е. процесс становится существенно многоволновым [1–6]. Отличие его от квазистационарных многоволновых процессов состоит в том, что спектр отклика, т. е. количество участвующих во взаимодействии волн, меняется по мере распространения импульса. Существующие теории взаимодействия атома со сверхсильными лазерными полями (подробный обзор различных теоретических подходов можно найти в [4]) базируются, как правило, на том, что внутриатомный потенциал рассматривается теперь как малый параметр теории возмущений, поскольку гамильтониан взаимодействия с внешним полем перестает быть таковым. Проведенные численные и аналитические расчеты [4] позволяют объяснить основные качественные черты наблюдаемых явлений.

В настоящей работе развивается теория взаимодействия атома со сверхсильными лазерными полями, которая характеризуется двумя особенностями. Во-первых, малым параметром является взаимодействие атома с соленоидальной частью внешнего поля, а взаимодействие с потенциальной частью поля учитывается точно. Во-вторых, проведенные исследования показали, что при взаимодействии атома со сверхсильными по-

*E-mail: andreev@sr1.ilc.msu.su

лями следует отказаться от расчета мультипольных моментов переходов электрона между состояниями невозмущенного атома, а рассчитывать отклик атома на определенной частоте, включающий мультипольные моменты всех порядков вплоть до бесконечного и зависящий от мгновенного значения поля волны. Расчеты показывают, что в этом случае отклик атома на частоте n-ой гармоники внешнего поля пропорционален соответствующей степени поля только в слабых полях. Когда напряженность внешнего поля становится сравнима с напряженностью внутриатомного, отклик насыщается, а затем начинает уменьшаться с ростом интенсивности внешней волны. Это и объясняет множественность процесса генерации гармоник, т. е. выравнивание амплитуд гармоник различных порядков в поле отклика атома. В разд. 2 получены основные уравнения предлагаемой теории. Далее обсуждается специфика взаимодействия атома со сверхсильными полями. В разд. 4 статьи найдены релятивистские поправки к гамильтониану взаимодействия атома со сверхсильными полями. В разд. 5 получено операторное уравнение для плотности тока и анализируется влияние градиентных сил.

2. УРАВНЕНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМА СО СВЕРХСИЛЬНЫМ ЛАЗЕРНЫМ ПОЛЕМ

2.1. Общий случай

Уравнение Шредингера для атома, взаимодействующего с поперечным электромагнитным полем, в нерелятивистском случае имеет вид

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = H\psi, \tag{1}$$

где

$$H = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + U_0. \tag{2}$$

Существует два основных подхода к анализу задачи о взаимодействии атома с электромагнитным полем. В случае, когда напряженность поля внешней волны много меньше напряженности внутриатомного поля, широко используется теория возмущений. В этом случае полагают, что гамильтониан свободного атома

$$H_0 = \frac{p^2}{2m} + U_0 \tag{3}$$

много больше гамильтониана взаимодействия

$$H_{int} = -\frac{e}{2mc}(\mathbf{pA} + \mathbf{Ap}) + \frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}^2 \tag{4}$$

и решение уравнения (1) ищется в виде разложения в ряд по степеням поля.

В случае, когда напряженность внешнего поля велика, наоборот, внутриатомный потенциал U_0 в (2) рассматривается как возмущение.

Оба указанных приближения имеют определенную область применимости. Однако в указанной задаче можно найти еще один параметр малости, который не зависит от отношения напряженностей внешнего и внутриатомного полей и поэтому позволяет последовательно проследить за характером изменения отклика атома при изменении напряженности поля от случая слабых до случая сверхсильных полей. Таким параметром является отношение потенциальной и соленоидальной частей поля внешней волны. Для того чтобы выделить в векторном потенциале $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ потенциальную часть, воспользуемся векторным тождеством

$$\mathrm{grad}(\mathbf{A}\mathbf{r}) = [\mathbf{r}\,\mathrm{rot}\,\mathbf{A}] + (\mathbf{r}\nabla)\mathbf{A} + \mathbf{A}.$$

Следовательно,

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_1(\mathbf{r}, t) + \mathbf{A}_2(\mathbf{r}, t), \tag{5}$$

где

$$\mathbf{A}_1 = \mathrm{grad}(\mathbf{A}\mathbf{r}), \quad \mathbf{A}_2 = [\mathbf{H}\mathbf{r}] - (\mathbf{r}\nabla)\mathbf{A}.$$

Таким образом, волновое уравнение (1) с учетом (5) можно переписать в виде

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \exp\left[i\frac{e}{\hbar c}\chi(\mathbf{r}, t)\right] H(\mathbf{A}_2) \exp\left[-i\frac{e}{\hbar c}\chi(\mathbf{r}, t)\right]\psi, \tag{6}$$

где

$$\chi(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}(\mathbf{r}, t)\mathbf{r}.$$

Уравнение (6) имеет вид

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = V\left(H_0 + H_{int}(\mathbf{A}_2)\right)V^{-1}\psi, \tag{7}$$

где

$$V = \exp\left[i\frac{e}{\hbar c}\chi(\mathbf{r}, t)\right].$$

Отметим, что

$$VH_0V^{-1} = \frac{1}{2m}\left(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}_1\right)^2 + U_0,$$

$$VH_{int}(\mathbf{A}_2)V^{-1} = -\frac{e}{2mc}(\mathbf{p}\mathbf{A}_2 + \mathbf{A}_2\mathbf{p}) + \frac{e^2}{2mc^2}(\mathbf{A}^2 - \mathbf{A}_1^2).$$

Из (5) несложно видеть, что при $\lambda \gg a$, т. е. когда длина волны излучения λ много больше амплитуды колебаний атомных электронов в поле внешней волны a, имеет место неравенство

$$|\mathbf{A}_1| \gg |\mathbf{A}_2|,$$

поэтому мы можем искать решение уравнения (7) итерационным методом:

$$i\hbar\frac{\partial\psi_0}{\partial t} = VH_0V^{-1}\psi_0, \quad i\frac{\partial\psi_1}{\partial t} = VH_0V^{-1}\psi_1 + VH_{int}(\mathbf{A}_2)V^{-1}\psi_0, \ldots \tag{8}$$

Остановимся на нулевом приближении уравнений (8). Разложим волновую функцию $\psi_0(\mathbf{r}, t)$ по собственным функциям дискретного и непрерывного спектров внутриатомного гамильтониана H_0:

$$\psi_0(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n(t) u_n(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{k} a_\mathbf{k}(t) u_\mathbf{k}(\mathbf{r}).$$

Подставляя это разложение в (8), получим

$$\frac{da_n}{dt} = -i \sum_{m,l} \left(\exp\left[i\frac{e\mathbf{Ar}}{\hbar c} \right] \right)_{nm} \omega_m \left(\exp\left[-i\frac{e\mathbf{Ar}}{\hbar c} \right] \right)_{ml} a_l. \tag{9}$$

Будем иметь в виду, что суммирование в (9) включает и интегрирование по непрерывному спектру, которое мы опустили в целях сокращения записи.

Исследуем динамику эволюции волновой функции атомных электронов в поле интенсивного монохроматического импульса следующего вида:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0(\boldsymbol{\rho}, t) \sin(\omega t - \kappa z), \tag{10}$$

где $\boldsymbol{\rho}$ — поперечная координата пучка. Для интерпретации дальнейших формул удобнее использовать амплитуду напряженности электрического поля волны $\mathbf{E}_0$, а не векторного потенциала $\mathbf{A}_0$, поэтому напомним, что в случае, когда

$$\left| \frac{\partial A_0}{\partial t} \right| \ll \omega |A_0|,$$

можно положить

$$\mu = \frac{e\mathbf{A}_0\mathbf{r}}{\hbar c} \approx -\frac{e\mathbf{E}_0\mathbf{r}}{\hbar\omega}.$$

Таким образом, представление экспоненты в (9) в виде ряда дает нам в случае $e\mathbf{E}_0\mathbf{r} \ll \hbar\omega$ стандартный ряд теории возмущений по степеням поля. Однако, если воспользоваться производящими функциями для уравнения Бесселя

$$\begin{aligned} \sin(\mu \sin\theta) &= 2\sum_{n=0}^{\infty} J_{2n+1}(\mu) \sin\left((2n+1)\theta\right), \\ \cos(\mu \sin\theta) &= J_0(\mu) + 2\sum_{n=1}^{\infty} J_{2n}(\mu) \cos(2n\theta), \end{aligned} \tag{11}$$

то из (9) мы получим явное выражение для отклика атома на частоте n-ой гармоники, включающее все степени поля. При $e\mathbf{E}_0\mathbf{r} \ll \hbar\omega$ в разложении функции Бесселя наибольшим является первый член, пропорциональный соответствующей степени поля. Однако функция Бесселя уменьшается с ростом аргумента, т. е. амплитуды поля. Следовательно, при нарушении указанного неравенства отклик атома на частоте гармоники падающего поля является немонотонной функцией амплитуды поля. Он сначала растет, а затем начинает уменьшаться при превышении амплитудой поля характерного значения, зависящего от номера гармоники. Уже эти рассуждения показывают существенное отличие уравнений (9) от различных вариантов стандартной теории возмущений, использующих разложение по степеням поля.

2.2. Теория возмущений

Исследуем подробнее специфику взаимодействия атомов со сверхсильными лазерными полями. Как мы уже отметили выше, в рамках стандартной теории возмущений отклик атома на частоте n-ой гармоники пропорционален соответствующей степени поля, а поляризуемость среды пропорциональна $(n+1)$-ой степени дипольного момента. В рамках предлагаемого нами подхода отклик атома зависит от величины матричных элементов от функции Бесселя. Рассмотрим, как такое изменение математического аппарата отразится на описании физических явлений.

Начнем с простейшего случая. Будем считать, что до прихода импульса атом находился в основном состоянии ($a_n(t=0) = \delta_{n0}$) и за время действия импульса населенности возбужденных состояний оказались малыми по сравнению с населенностью основного.

В этом случае из уравнения (9) получаем

$$\frac{da_n}{dt} = -i(\omega_n+\Delta\omega_n)a_n - 2i\sum_m \left(\sum_{k=1}^{\infty}(J_{2k}\cos(2k\theta)+iJ_{2k+1}\sin(2k+1)\theta)\right)_{nm} \omega_m\,(J_0(\mu))_{m0} -$$
$$- 2i\sum_m (J_0(\mu))_{nm}\,\omega_m \left(\sum_{k=1}^{\infty}(J_{2k}\cos(2k\theta) - iJ_{2k+1}\sin(2k+1)\theta)\right)_{m0} -$$
$$- 4i\sum_m \left(\sum_{k=1}^{\infty}(J_{2k}\cos(2k\theta) + iJ_{2k+1}\sin(2k+1)\theta)\right)_{nm} \times$$
$$\times\,\omega_m \left(\sum_{k=1}^{\infty}(J_{2k}\cos(2k\theta) - iJ_{2k+1}\sin(2k+1)\theta)\right)_{m0}, \qquad (12)$$

где $\theta = \omega t - \kappa z$, а величина штарковского сдвига n-го уровня определяется следующим выражением

$$\Delta\omega_n = \sum_m (J_0(\mu))_{nm}\,\omega_m\,(J_0(\mu))_{mn} - \omega_n. \qquad (13)$$

Будем считать, что падающее поле линейно поляризовано вдоль оси x, поэтому в (9) и (12) $\mu = eA_0x/\hbar c$. В оптическом диапазоне длина волны излучения много больше размера атомных оболочек $\lambda \gg a_0$, поэтому при вычислении матричных элементов мы можем положить $z = 0$ и не учитывать зависимости A_0 от поперечной координаты, поскольку поперечный размер пучка даже в фокусе линзы порядка длины волны излучения. Следовательно, входящие в (12) матричные элементы имеют вид $(J_n(\alpha x))_{kl}$.

2.3. Резонансный случай

Пусть одна из гармоник поля оказывается в резонансе с атомным переходом, т. е. имеет место соотношение

$$n_0\omega \approx \omega_{k0} + \Delta\omega_{k0}.$$

В этом случае из (12) получаем

$$a_k(t) \approx \frac{1}{\omega_{k0} + \Delta\omega_{k0} - n_0\omega} \sum_l \left\{ \sum_{m=0}^{n_0} (-1)^{n_0-m} \left(J_{n_0-m}(\alpha x)\right)_{kl} \omega_l \left(J_m(\alpha x)\right)_{l0} + \right.$$

$$\left. + (-1)^{n_0} \sum_{m=1}^{\infty} \left(J_{n_0+m}(\alpha x)\right)_{kl} \omega_l \left(J_m(\alpha x)\right)_{l0} + \sum_{m=1}^{\infty} \left(J_m(\alpha x)\right)_{kl} \omega_l \left(J_{n_0+m}(\alpha x)\right)_{l0} \right\}. \quad (14)$$

С другой стороны, из разложения экспоненты в ряд, т. е. в соответствии со стандартной теорией возмущений, получаем

$$a_k^{(P)}(t) \approx \frac{1}{\omega_{k0} - n_0\omega} \sum_l \left\{ \alpha^{n_0} \sum_{m=0}^{n_0} (-1)^{n_0-m} \frac{(x^{n_0-m})_{kl}\omega_l (x^m)_{l0}}{2^{n_0}(n_0-m)!m!} + \ldots \right\}. \quad (15)$$

Из сравнения (14) и (15) мы видим, что различия между результатами двух подходов действительно связаны с различным видом матричных элементов, входящих в выражения для амплитуд населенностей уровней. Покажем, что формулы (14) и (15) приводят и к различным физическим следствиям.

3. ОСОБЕННОСТИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМА СО СВЕРХСИЛЬНЫМИ ПОЛЯМИ

3.1. Гармонический осциллятор

Естественно рассмотреть в качестве первого примера задачу о взаимодействии импульса с линейным гармоническим осциллятором. Матричные элементы перехода между уровнями гармонического осциллятора имеют хорошо известный вид:

$$(x)_{n,n-1} = \sqrt{\frac{n\hbar}{2m\omega_0}}\,. \quad (16)$$

Положим сначала, что несущая частота импульса совпадает с частотой перехода гармонического осциллятора, т. е. $\omega \approx \omega_0$. Используя выражения для волновых функций гармонического осциллятора, несложно показать, что

$$(J_1(\alpha x))_{10} = \frac{\beta}{2} \exp\left(-\frac{\beta^2}{4}\right) \left[I_0\left(\frac{\beta^2}{4}\right) - I_1\left(\frac{\beta^2}{4}\right) \right], \quad (17)$$

где $I_n(z)$ — модифицированная функция Бесселя,

$$\beta = \alpha\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} = \frac{eA_0}{\hbar c}\, a_0 = \frac{eE_0 a_0}{\hbar\omega}\,. \quad (18)$$

Подставляя (16), (17) в (14), (15), получим

$$\frac{a_1}{a_1^{(P)}} = \exp\left(-\frac{\beta^2}{4}\right) \left[I_0\left(\frac{\beta^2}{4}\right) - I_1\left(\frac{\beta^2}{4}\right) \right]. \quad (19)$$

Как видно из (19), параметр β равен отношению силы, действующей на электрон со стороны внешнего поля $F_e = eE_0$, к величине силы, обусловленной внутриатомным потенциалом

$$F_{at} = |\partial U_0/\partial x| \approx \hbar\omega_0/a_0.$$

Таким образом, в полях умеренной интенсивности ($\beta \ll 1$) отношение (19) равно единице. Однако с ростом амплитуды внешнего поля отношение (19) начинает убывать, т. е. теория возмущений дает завышенные значения для амплитуд населенностей возбужденных уровней атома, взаимодействующего с полем сверхвысокой интенсивности.

3.2. Разрешение запрещенных переходов

Пусть теперь внешнее поле резонансно переходу $0 \leftrightarrow 3$ гармонического осциллятора, т. е. $\omega \approx 3\omega_0$. Дипольный матричный элемент на этом переходе тождественно равен нулю $(x)_{30} \equiv 0$. С другой стороны, используя волновые функции гармонического осциллятора, получаем

$$(J_1(\alpha x))_{30} = \frac{\beta^3}{2\sqrt{6}} \exp\left(-\frac{\beta^2}{4}\right) \left[\left(1 + \frac{2}{\beta^2}\right) I_1\left(\frac{\beta^2}{4}\right) - I_0\left(\frac{\beta^2}{4}\right)\right].$$

Таким образом, уже из этого примера видно, что дипольно-запрещенные переходы атомов и молекул эффективно участвуют во взаимодействии с резонансными сверхсильными лазерными импульсами и населенности их верхних состояний при $\beta \approx 1$ сравнимы с населенностями уровней, связанных с основным состоянием дипольно-разрешенными переходами.

3.3. Атом водорода

Рассмотрим теперь атом водорода, как более реалистичную квантовую модель. Пусть n-ая гармоника поля резонансна переходу ($n = 1$, $l = 0$, $m = 0$) $\leftrightarrow$ ($n = 2$, $l = 1$, $m = 0$). Из соображений симметрии следует, что гармоника должна быть нечетной, т. е. $(2k+1)\omega = \omega_{21}$. Однако, чтобы не усложнять запись, мы будем использовать индекс n. Используя волновые функции атома водорода, несложно получить

$$(J_n(\alpha x))_{21} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{2}{3}\right)^4 \beta^n \frac{3\left(1 + n\sqrt{1+\beta^2}\right) + n(1+\beta^2)\left(n + \sqrt{1+\beta^2}\right)}{(1+\beta^2)^{5/2}\left(1 + \sqrt{1+\beta^2}\right)^n}. \qquad (20)$$

Для указанного перехода параметр β, имеющий тот же физический смысл, что и ранее, определяется следующим выражением:

$$\beta = \frac{eA_0}{\hbar c} \frac{2a_B}{3},$$

где a_B — боровский радиус. Выражение (20) имеет следующие асимптотики:

$$(J_n(\alpha x))_{21} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{2}{3}\right)^4 \begin{cases} (\beta/2)^n (n+1)(n+3), & \beta \ll 1, \\ n/\beta^2, & \beta \gg 1. \end{cases} \qquad (21)$$

Для сравнения приведем матричные элементы для слагаемого в разложении экспоненты, пропорционального n-ой степени поля:

$$\left(\frac{\alpha^n x^n}{2^n n!}\right)_{21} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{2}{3}\right)^4 \left(\frac{\beta}{2}\right)^n (n+1)(n+3). \qquad (22)$$

Из сравнения (21) и (22) видно, что в полях низкой интенсивности указанные матричные элементы совпадают. Однако в полях высокой интенсивности возникают качественные отличия. Так, отношение $(J_n)_{21}/(J_1)_{21}$ в полях низкой интенсивности имеет степенную зависимость от амплитуды поля ($\propto \beta^{n-1}$). В полях сверхвысокой интенсивности зависимость указанного отношения от амплитуды поля пропадает, а величина матричных элементов начинает уменьшаться с ростом интенсивности поля.

3.4. Ионизация в сверхсильном лазерном поле

Предлагаемый нами подход приводит к принципиальным отличиям в анализе процесса ионизации атома в сверхсильных полях. Это следует уже из общего рассмотрения. Матричные элементы n-фотонного перехода из связанного состояния атома в непрерывный спектр для нечетных n качественно имеют вид

$$\int \frac{e^{ikr}}{r} x^n e^{-r/a_0} \cos\theta \, dV.$$

Как видно, они резко уменьшаются с ростом энергии свободного движения электрона $E_k = \hbar^2 k^2/2m$. С другой стороны, благодаря осциллирующему характеру функций Бесселя, матричные элементы от них при $\alpha a_0 \gg 1$ не убывают с ростом E_k:

$$\int \frac{e^{ikr}}{r} J_n(\alpha r \cos\theta) e^{-r/a_0} \cos\theta \, dV \approx \int \sqrt{\frac{|\cos\theta|}{2\pi\alpha r}} \, \frac{1}{r} \times$$
$$\times \exp\left[i \left(kr - \alpha r \cos\theta - \frac{\pi(2n+1)}{4} \right) - \frac{r}{a_0} \right] dV.$$

Из приведенного выражения видно, что указанные матричные элементы имеют максимум при выполнении условий $k \approx \alpha$. Это условие и закон сохранения энергии $E_k = E_0 + n\hbar\omega$ определяют энергетический спектр ионизованных электронов. Таким образом, в поперечно-неоднородном лазерном пучке будет генерироваться последовательность гармоник, а номер максимальной из них определяется интенсивностью на оси пучка.

3.5. Генерация четных гармоник

До сих пор при вычислении матричных элементов переходов мы не учитывали координатную зависимость векторного потенциала, т.е. полагали $\mathbf{A}_0(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_0(\mathbf{r}_0, t)$, где $\mathbf{r}_0$ — координата ядра атома. В этом случае правила отбора для матричных элементов функций $J_n(\alpha x)$ и x^n совпадают вследствие одинаковости их симметрийных свойств. Однако в сфокусированных лазерных пучках, как мы покажем ниже, становится существенной координатная зависимость векторного потенциала. В общем случае матричные элементы имеют вид

$$\left(J_n \left(\frac{e(x-x_0)}{\hbar c} \left(A_0(\mathbf{r}_0) + ((\mathbf{r}-\mathbf{r}_0)\nabla) A_0\big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_0} + \ldots \right) \right) \exp(in\kappa z) \right)_{kl}. \qquad (23)$$

Уже учет первого члена в разложении амплитуды поля меняет симметрийные свойства функций Бесселя, что приведет к изменению правил отбора. В полях высокой интенсивности матричные элементы (23) будут отличаться от матричных элементов разложения в ряд по степеням поля даже при учете координатной зависимости огибающей. Наиболее ярко это проявится в соотношении между интенсивностями четных и нечетных гармоник в поле отклика атома.

4. РЕЛЯТИВИСТСКИЕ ПОПРАВКИ К ГАМИЛЬТОНИАНУ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ СО СВЕРХСИЛЬНЫМ ЛАЗЕРНЫМ ПОЛЕМ

4.1. Релятивистские поправки

В сверхсильных лазерных полях с напряженностью поля много большей внутриатомной становятся существенными релятивистские эффекты, поэтому остановимся подробнее на вычислении релятивистских поправок к гамильтониану (2).

Гамильтониан взаимодействия атома с электромагнитным полем в представлении вторичного квантования имеет вид

$$H = \int \Psi^+ \left[\boldsymbol{\alpha}(c\mathbf{p}-e\mathbf{A})\Psi+e\varphi\Psi+mc^2\beta\Psi\right] dV + \int \left[2\pi c^2\mathbf{B}^2+\frac{1}{8\pi}(\mathrm{rot}\,\mathbf{A})^2-c\mathbf{B}\,\mathrm{grad}\,\varphi\right] dV, \quad (24)$$

где $\boldsymbol{\alpha}$ и β — дираковские матрицы. В представлении вторичного квантования волновые функции $\Psi(\mathbf{r},t)$ и $\Psi^+(\mathbf{r},t)$, оператор векторного потенциала электромагнитного поля $\mathbf{A}(\mathbf{r},t)$ и канонически-сопряженный ему обобщенный импульс $\mathbf{B}(\mathbf{r},t)$ удовлетворяют следующим коммутационным соотношениям:

$$\begin{gathered}\left[\Psi(\mathbf{r},t),\Psi(\mathbf{r}',t)\right]_- = \left[\Psi^+(\mathbf{r},t),\Psi^+(\mathbf{r}',t)\right]_- = 0, \quad \left[\Psi(\mathbf{r},t),\Psi^+(\mathbf{r}',t)\right]_- = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'),\\ \left[A_\alpha(\mathbf{r},t),A_\beta(\mathbf{r}',t)\right]_- = \left[B_\alpha(\mathbf{r},t),B_\beta(\mathbf{r}',t)\right]_- = 0, \\ \left[A_\alpha(\mathbf{r},t),B_\beta(\mathbf{r}',t)\right]_- = i\hbar\delta_{\alpha\beta}\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'),\end{gathered} \quad (25)$$

которые приводят к волновому уравнению Дирака и хорошо известным уравнениям для электромагнитного поля:

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = c\boldsymbol{\alpha}\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)\Psi + e\varphi\Psi + \beta mc^2\Psi, \quad (26а)$$

$$\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} = 4\pi c^2\mathbf{B} - c\,\mathrm{grad}\,\varphi, \quad (26б)$$

$$\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t} = -\frac{1}{4\pi}\,\mathrm{rot}\,\mathrm{rot}\,\mathbf{A} - e\Psi^+\boldsymbol{\alpha}\Psi. \quad (26в)$$

Вводя обозначения

$$\mathbf{P} = \mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}, \quad U = e\varphi$$

и представляя волновую функцию в виде

$$\Psi(\mathbf{r},t) = \begin{pmatrix}\xi\\ \eta\end{pmatrix}\exp\left[-i\frac{mc^2}{\hbar}t\right],$$

несложно преобразовать уравнение (26а) к уравнениям вида

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - U\right)\xi = c\boldsymbol{\sigma}\mathbf{P}\eta, \quad \left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - U + 2mc^2\right)\eta = c\boldsymbol{\sigma}\mathbf{P}\xi. \quad (27)$$

Из второго уравнения (27) получаем

$$\eta = \left(2mc^2 - U + i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\right)^{-1} c\boldsymbol{\sigma}\mathbf{P}\xi = \frac{1}{2mc^2 - U}\sum_{n=0}^{\infty}\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,\frac{1}{2mc^2 - U}\right)^n c\boldsymbol{\sigma}\mathbf{P}\xi. \qquad (28)$$

При $U, E \ll mc^2$ в правой части (28) можно учесть лишь два первых слагаемых. В этом случае волновое уравнение для электрона, находящегося в электромагнитном поле с векторным и скалярным потенциалами $\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)$ и $\varphi(\mathbf{r}, t)$, имеет вид

$$\begin{aligned} i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = &\left(\frac{1}{2m_1}\left(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A}\right)^2 + U\right)\psi - \frac{e\hbar}{2m_1c}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{H}\psi + \frac{\hbar c^2}{(2mc^2-U)^2}\boldsymbol{\sigma}\left[\frac{e}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t} + \nabla U, \mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right]\psi + \\ &+ \frac{\hbar^2c^2}{2}\operatorname{div}\left(\frac{(e/c)(\partial\mathbf{A}/\partial t) + \nabla U}{(2mc^2-U)^2}\right)\psi + i\frac{\hbar^2 e}{2c}\boldsymbol{\sigma}\operatorname{rot}\left(\frac{c^2}{(2mc^2-U)^2}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}\right)\psi + \\ &+ \hbar\boldsymbol{\sigma}\left[\nabla\frac{1}{2m_1}, \mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}\right]\psi, \end{aligned} \qquad (29)$$

где

$$\begin{aligned} &\psi(\mathbf{r}, t) = \left(1 + \boldsymbol{\sigma}\mathbf{P}\frac{c^2}{(2mc^2-U)^2}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{P}\right)\xi(\mathbf{r}, t), \\ &\frac{1}{m_1} = \frac{1}{m}\left(1 - \left(\frac{U}{2mc^2-U}\right)^2\right), \qquad \mathbf{H} = \operatorname{rot}\mathbf{A}. \end{aligned} \qquad (30)$$

Из волнового уравнения (29) несложно получить следующее уравнение непрерывности:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \operatorname{div}\mathbf{J} = 0,$$

где оператор плотности тока имеет вид

$$\mathbf{J} = \frac{i\hbar e}{2m_1}(\nabla\psi^+\psi - \psi^+\nabla\psi) - \frac{e^2}{m_1c}\psi^+\mathbf{A}\psi - \frac{\hbar e^2c^2}{(2mc^2-U)^2}\left[\mathbf{E}, \psi^+\boldsymbol{\sigma}\psi\right]. \qquad (31)$$

К уравнению (29) может быть применена общая схема, изложенная в разд. 2. Гамильтониан взаимодействия $H_{int}(\mathbf{A}_2)$ имеет в этом случае вид

$$H_{int}(\mathbf{A}_2) = -\frac{e}{2mc}(\mathbf{p}\mathbf{A}_2 + \mathbf{A}_2\mathbf{p}) + \frac{e^2}{2mc^2}\mathbf{A}_2^2 + H_{rel}(\mathbf{A}_2) + H_{spin}(\mathbf{A}_2).$$

Он учитывает эффекты нелокальности взаимодействия, связанные с непотенциальной частью поля $\mathbf{A}_2$, эффекты изменения массы и спиновые эффекты.

4.2. О стабилизации ионизации

Гамильтониан волнового уравнения (29) отличается от традиционного гамильтониана, учитывающего квадратичные релятивистские поправки [7]. Во-первых, поправки спин-орбитального и контактного взаимодействий учитывают взаимодействие не только со статическим полем ядра, но и с поперечным электромагнитным полем. Для того чтобы пояснить возникающие отличия, следует отметить, что в целях краткости изложения мы записали гамильтониан (24) для одноэлектронного случая. В случае атома мы должны провести в правой части (24) суммирование по всем зарядам. Если атом находится в поле внешней электромагнитной волны, то векторный и скалярный потенциалы включают внутриатомное поле, внешнее поле и поле отклика атомных электронов:

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_0 + \mathbf{A}_e + \mathbf{A}', \quad \varphi = \varphi_0 + \varphi_e + \varphi'.$$

Пренебрегая движением ядра в поле внешней волны, можно считать внутриатомный потенциал статическим ($\mathbf{A}_0 = 0$, $\varphi_0 = \varphi(\mathbf{r})$). Внешнее поле можно считать поперечным ($\operatorname{div}\mathbf{A}_e = 0$, $\varphi_e = 0$). В этом случае гамильтониан контактного взаимодействия, обусловленный четвертым слагаемым в правой части (29), при $U \ll mc^2$ имеет вид

$$H_c = \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}\operatorname{div}\left(\frac{1}{c}\frac{\partial\mathbf{A}}{\partial t}+\nabla\varphi\right) = \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}\Delta\varphi_0 - \frac{e\hbar^2}{8m^2c^2}\operatorname{div}\mathbf{E} = \frac{\pi e^2\hbar^2 Z}{2m^2c^2}\delta(\mathbf{r}) - \frac{\pi e^2\hbar^2}{2m^2c^2}|\psi|^2. \quad (32)$$

Аналогично и в гамильтониане спин-орбитального взаимодействия, наряду со слагаемым, обусловленным движением электронов во внутриатомном потенциале, появляется дополнительное слагаемое, связанное с их движением в поле внешней волны.

Следует обратить, однако, внимание, что в условиях высокой степени ионизации принципиальную роль начинает играть модифицированный гамильтониан контактного взаимодействия (32). Слагаемое этого гамильтониана, пропорциональное плотности волновой функции, показывает, что уменьшение плотности волновой функции приводит к увеличению энергии атома, взаимодействующего с электромагнитным полем. Это может быть одной из причин эффекта стабилизации ионизации [6].

4.3. Поправки к массе

Второе отличие гамильтониана (29) состоит в учете (в релятивистских поправках на массу) потенциала внешнего поля $\varphi_e(\mathbf{r}, t)$. Следует отметить, что при выводе уравнения (29) мы учитывали зависимость скалярного потенциала от времени

$$U(\mathbf{r}, t) = U_0(\mathbf{r}) + e\varphi_e(\mathbf{r}, t),$$

поэтому при градиентном преобразовании волновой функции

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi'(\mathbf{r}, t)\exp\left(i\frac{e}{\hbar c}\mathbf{A}(\mathbf{r}, t)\mathbf{r}\right)$$

скалярный и векторный потенциалы в уравнении (29) преобразуются хорошо известным способом:

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}, t) = \mathbf{A}_2(\mathbf{r}, t), \quad \varphi_e'(\mathbf{r}, t) = -e\mathbf{E}\mathbf{r} \approx U_p. \quad (33)$$

Подставляя (33) в (30), мы видим, что релятивистские поправки на массу становятся существенны, когда пондеромоторный потенциал поля U_p стремится к mc^2.

5. ГРАДИЕНТНЫЕ СИЛЫ

Выше мы использовали квантовомеханический подход, связанный с расчетом волновых функций. Однако часто более удобным оказывается операторный подход, поскольку получающиеся уравнения более близки к соответствующим классическим уравнениям. Выше мы уже получили уравнение для плотности заряда. Пользуясь гамильтонианом (24) и коммутационными соотношениями (25), несложно получить уравнение для оператора плотности тока. Пренебрегая релятивистскими поправками, выражение для оператора плотности тока можно записать в виде

$$\mathbf{J} = \frac{i\hbar e}{2m}(\nabla\psi^+\psi - \psi^+\nabla\psi) - \frac{e^2}{mc}\psi^+\mathbf{A}\psi = \mathbf{j} - \frac{e^2}{mc}\psi^+\mathbf{A}\psi.$$

Уравнение для $\mathbf{J}$ имеет вид

$$\begin{aligned}\frac{\partial J_\alpha}{\partial t} - \frac{e}{mc}\mathbf{A}\nabla J_\alpha = -\frac{i}{\hbar}[j_\alpha, H_a]_- + \\ +\frac{e}{m}E_\alpha\rho + \frac{e}{mc}[\mathbf{J}\,\mathrm{rot}\,\mathbf{A}]_\alpha + \left(\frac{e}{mc}\right)^2 A_\beta\nabla_\beta(A_\alpha\rho) + \frac{e}{mc}\nabla_\beta(A_\alpha J_\beta),\end{aligned} \tag{34}$$

где $\alpha, \beta = x, y, z$, по двойному индексу в (34) проводится суммирование. Коммутатор $\mathbf{j}$ и внутриатомного гамильтониана H_a имеет вид

$$[j_\alpha, H_a]_- = -\frac{i\hbar}{m}\rho\nabla_\alpha U + \frac{i\hbar^3}{4m^2}\nabla_\alpha(\Delta\rho) - \frac{ie\hbar^3}{2m^2}\nabla_\beta(\nabla_\alpha\psi^+\nabla_\beta\psi + \nabla_\beta\psi^+\nabla_\alpha\psi). \tag{35}$$

Подстановка (35) в (34) приводит к уравнению, совпадающему по виду с классическим, за исключением градиентных слагаемых. При интегрировании по объему, большему амплитуды колебаний электрона, часть градиентных слагаемых пропадает.

Система уравнений для плотности заряда и тока имеет наиболее наглядный вид в случае кулоновской калибровки электромагнитного поля ($\mathrm{div}\,\mathbf{A} = 0$):

$$\begin{aligned}&\frac{\partial\rho}{\partial t} - \frac{e}{mc}\mathbf{A}\nabla\rho = -\mathrm{div}\,\mathbf{j}, \\ &\frac{\partial j_\alpha}{\partial t} - \frac{e}{mc}\mathbf{A}\nabla j_\alpha = -\frac{i}{\hbar}[j_\alpha, H_a]_- + \frac{e}{mc}j_\beta\nabla_\alpha(A_\beta) - \frac{1}{2}\left(\frac{e}{mc}\right)^2\rho\nabla_\alpha A^2.\end{aligned} \tag{36}$$

Левые части уравнений (36) показывают, что плотности заряда и тока имеют следующую зависимость от времени:

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0(t), t), \quad \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{j}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0(t), t),$$

где

$$\frac{d\mathbf{r}_0}{dt} = \frac{e}{mc}\mathbf{A}.$$

Таким образом, их фурье-образы

$$\rho(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{k}\rho(\mathbf{k}, t)\exp\left[i\mathbf{k}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0(t))\right]$$

снова содержат экспоненциальные множители, зависящие от векторного потенциала поля, и, следовательно, мы снова можем использовать разложение (11) по функциям Бесселя.

Первое градиентное слагаемое в правой части уравнения для плотности тока (36) обеспечивает связь различных компонент плотности тока поляризации. Следовательно, поле отклика атома, находящегося в поле интенсивной линейно поляризованной волны, в общем случае будет иметь эллиптическую поляризацию. Последнее слагаемое в этом уравнении дает градиентную силу, действующую на электрон в неоднородном поле. Она равна производной от пондеромоторного потенциала

$$U_p = \frac{e^2 A_0^2}{2mc^2} \approx \frac{e^2 E_0^2}{2m\omega^2}.$$

В перетяжке пучка, сфокусированного до дифракционного предела,

$$\left| \frac{\partial U_p}{\partial x} \right| \approx U_p/\lambda.$$

Сила, действующая на внешний электрон атома, равна $\hbar\omega/a_B$. Учитывая связь величины пондеромоторного потенциала и интенсивности поля U_p(эВ) $= 10^{-13} I$ (Вт/см^2), получаем, что условие

$$\left| \frac{\partial U_p}{\partial x} \right| \approx \hbar\omega/a_B$$

выполняется при $I = 10^{17}$ Вт/см^2 для $\hbar\omega \simeq 1$–2 эВ и $\lambda = 0.5$–1 мкм. При этой интенсивности равна внутриатомной и сила, действующая на электрон со стороны внешнего поля. Таким образом, градиентная сила будет создавать неоднородное по пучку распределение плотности ионизованных электронов.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, проведенное исследование показывает, что в полях умеренной интенсивности отклик атома на внешнее поле практически совпадает с расчетами, основанными на теории возмущений по гамильтониану взаимодействия. Однако, когда напряженность поля внешней волны совпадает с внутриатомной, отклик атома испытывает качественные изменения, что обусловлено целым рядом причин. Во-первых, величина амплитуды n-го состояния невозмущенного гамильтониана в суперпозиционном состоянии

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n a_n(t) u_n(\mathbf{r}) + \int d\mathbf{k}\, a_{\mathbf{k}}(t) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}),$$

возникающем под действием внешней волны, перестает определяться дипольным моментом перехода, связывающим ее с основным состоянием (или с другими сильнонаселенными состояниями). Населенность состояний, связанных с основным дипольно-запрещенным переходом, с ростом амплитуды внешнего поля может превышать населенность уровней, связанных с дипольно-разрешенным переходом. Во-вторых, взаимодействие атома со сверхсильными лазерными полями характеризуется нелинейностями насыщающегося типа. Степенная зависимость отклика на частоте n-ой гармоники имеет место лишь в полях напряженностью много меньшей внутриатомной. Это приводит к выравниванию амплитуд различных компонент в суперпозиционном состоянии, а следовательно, к выравниванию амплитуд гармоник в поле отклика. При выполнении условия $\alpha a_0 \gg 1$, т. е. в сверхсильных лазерных полях, величина амплитуд ионизационных состояний с энергией $E_k = E_0 + n\hbar\omega$ перестает зависеть от номера n и поле отклика зависит лишь от фазовых соотношений между ними, при этом $\varphi_n \approx \pi(2n+1)/4$. Наконец, градиентные силы, возникающие при взаимодействии атома с полем пространственно-неоднородным на масштабе длины волны излучения, становятся сравнимы с внутриатомными полями при напряженности поля внешней волны порядка внутриатомной. В результате поляризационный отклик атома в поле плоской волны и в поле пучка той же напряженности будут существенно отличаться. Учет этого обстоятельства дает дополнительные возможности управления спектром генерируемого излучения.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 99-02-16093) и программы «Университеты России».

Литература

1. Б. Лютер-Дэвис, Е. Г. Гамалий, Я. Ванг, А. В. Роде, В. Т. Тихончук, Квант. электр. **19**, 317 (1992).
2. N. B. Delone, V. P. Krainov, *Multiphoton process in atoms*, Springer-Verlag, Berlin (1994).
3. M. V. Fedorov, *Atomic and free electrons in a strong light field*, World Scientific, Singapore, River Edge, NJ (1997).
4. В. Т. Платоненко, В. В. Стрелков, Квант. электр. **25**, 586 (1998).
5. А. В. Ким, М. Ю. Рябикин, А. М. Сергеев, УФН **169**, 58 (1999).
6. М. В. Федоров, УФН **169**, 66 (1999).
7. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1980).