

ДИНАМИЧЕСКИЕ ГИПЕРПОЛЯРИЗУЕМОСТИ ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ ВОДОРОДА

Н. Л. Манаков*, С. И. Мармо, Е. А. Пронин

Воронежский государственный университет
394006, Воронеж, Россия

Поступила в редакцию 4 августа 2003 г.

На основании обобщенного штурмовского разложения радиальной части кулоновской функции Грина предложен метод расчета и приведены численные результаты для динамической гиперполяризуемости γ и квадратичных по интенсивности поправок $E^{(4)}$ к квазиэнергии основного и возбужденных состояний водорода с главными квантовыми числами $n \leq 5$ в монохроматическом световом поле. В предлагаемом подходе задача сводится к суммированию хорошо сходящихся двойных рядов гипергеометрического типа, что позволяет получать надежные численные результаты как для состояний с большими n , так и в широком диапазоне частот поля ω , включая область надпороговых частот $\hbar\omega \gg |E_n|$ ($|E_n|$ — потенциал ионизации рассматриваемого состояния $|nlm\rangle$). Обсуждаются частотная зависимость γ и $E^{(4)}$, различия для случаев линейной и циркулярной поляризации поля и соотношение между вещественными и мнимыми частями, определяющими поправки к положению и ширине уровней. На примере $n = 5$ показана существенная роль перемешивания состояний $|nlm\rangle$ с различными l лазерным полем в области резонансов на промежуточных связанных состояниях. Исследованы линейные по интенсивности поправки к сечению фотоионизации возбужденных состояний и получены оценки пороговой интенсивности, соответствующей началу стабилизации атомных уровней, для ряда состояний с $n = 3$ и $n = 5$.

PACS: 32.80.Rm, 32.10.Dk, 32.80.-t

1. ВВЕДЕНИЕ

Анализ взаимодействия атомной системы с интенсивным лазерным излучением существенно упрощается при периодической, в частности, гармонической, зависимости внешнего поля от времени. Спектральные характеристики атома, дипольно взаимодействующего с монохроматической световой волной

$$\mathbf{F}(t) = F \operatorname{Re}\{\mathbf{e} e^{-i\omega t}\} \quad (1)$$

(F и ω — амплитуда и частота волны, \mathbf{e} — единичный вектор поляризации: $\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}^* = 1$), определяются спектром комплексных квазиэнергий $E_n = \operatorname{Re} E_n - (i/2)\Gamma_n$, соответствующих невозмущенному спектру атома $E_n^{(0)}$ и определяющих смещение ($\operatorname{Re} E_n - E_n^{(0)}$) и ионизационное уширение (Γ_n) уровней $E_n^{(0)}$ полем световой волны [1]. Если амплитуда поля (1) невелика по сравнению с характерным внутриатомным полем F_n ($F_n = F_{at}/n^3$,

$F_{at} = 5.142 \cdot 10^9$ В/см), то квазиэнергию можно найти по теории возмущений, вычисляя поправки к невозмущенному атомному уровню $E^{(0)}$. Для состояний, не обладающих собственным дипольным моментом, поправки содержат лишь члены с четными степенями F :

$$E = E^{(0)} + E^{(2)} + E^{(4)} + \dots, \quad E^{(k)} \sim F^k. \quad (2)$$

Возбужденные состояния атома водорода могут иметь дипольный момент, однако в области частот $\hbar\omega \gg F| \langle nlm | \mathbf{e} \cdot \mathbf{r} | n'l'm' \rangle |$, рассмотрением которых мы здесь ограничимся, его влияние на спектр квазиэнергий не сказывается [1], так что разложение E и в этом случае имеет вид (2).

Возмущение спектра принято анализировать на языке динамических поляризуемости (ДП) α и гиперполяризуемости (ДГП) γ , которые определяют поправки второго,

$$E^{(2)} = -\frac{1}{4}\alpha F^2, \quad (3)$$

и четвертого,

*E-mail: manakov@thp.vsu.ru

$$E^{(4)} = -\frac{1}{8}\gamma F^4, \quad (4)$$

порядков по F к невозмущенному уровню в (2).

Введенные соотношениями (3) и (4) параметры α и γ определяют также члены первого и третьего порядка по F в разложении наведенного внешним полем дипольного момента атома $\mathbf{P}(t)$ на частоте ω :

$$\begin{aligned} P_j(t) &= \text{Re}\{P_j^{(\omega)} e^{-i\omega t} + P_j^{(3\omega)} e^{-3i\omega t} + \dots\}, \\ P_j^{(\omega)} &= \alpha_{jk} e_k F + \gamma_{jklm} e_k^* e_l e_m F^3, \\ \alpha &= \alpha_{jk} e_j^* e_k, \quad \gamma = \gamma_{jklm} e_j^* e_k^* e_l e_m, \end{aligned} \quad (5)$$

и, следовательно, определяют сечение рэлеевского рассеяния света атомом и линейные по интенсивности волны поправки к нему, а для газовой среды — показатель преломления и поправки к нему порядка F^2 . Следует иметь в виду, что обычно тензоры α_{jk} и γ_{jklm} определяются через среднее значение оператора дипольного момента на волновых функциях, рассчитанных по теории возмущений вплоть до членов порядка F^3 . Однако при частотах, превышающих порог однофотонной ионизации ($\hbar\omega > |E_n^{(0)}|$), такое определение γ теряет смысл (компоненты тензора γ_{jklm} обращаются в бесконечность), в то время как (4) по-прежнему дает смещение атомного уровня [2]. Формально расходимость обусловлена тем, что в матричные элементы четвертого порядка, определяющие γ_{jklm} , входят функции Грина атомного электрона $G^{(+)}(E_n^{(0)} + \hbar\omega)$ и $G^{(-)}(E_n^{(0)} + \hbar\omega)$ с асимптотикой расходящихся и сходящихся волн с одинаковой энергией, что и приводит к расходимости соответствующих матричных элементов при $E_n^{(0)} + \hbar\omega > 0$ [2]. В то же время γ в (4) содержит только функции Грина с асимптотикой расходящихся волн ($G^{(+)}(\mathcal{E})$) и поэтому остается конечной при $E_n^{(0)} + \hbar\omega > 0^1$. Как обсуждается в работе [4], указанные выше расходимости связаны с тем, что в сильном лазерном поле (когда уже существенны эффекты порядка F^4) необходимо учитывать квазистационарный характер атомных уровней и использовать для расчета среднего значения оператора дипольного момента соответствующим образом нормированные («дуальные») волновые функции квазистационарного состояния. Определенный таким образом «дуальный» дипольный момент остается конечным при $E_n^{(0)} + \hbar\omega > 0$, совпадает с обычным определением при $E_n^{(0)} + \hbar\omega < 0$ и приводит к тому же определению ДГП γ , что и формула (4).

¹⁾ В формулу для α входит лишь одна функция Грина, поэтому определения ДП через тензор α_{jk} и согласно (3) дают один и тот же результат, см. [3], § 59.

Поляризуемости водородоподобных состояний, определяющие главную по F поправку к энергии и ширине (при $\hbar\omega > |E_n^{(0)}|$) уровней, исследовались в десятках работ, начиная с середины 60-х годов, и к настоящему времени изучены достаточно детально (см., например, [1, 5–7] и ссылки в [7]). В частности, в недавней работе [7] получены замкнутые аналитические выражения для ДП произвольных состояний $|nlm\rangle$, позволяющие достаточно просто проводить численные расчеты и исследовать асимптотическое поведение ДП, в том числе в ридберговской области спектра. ДГП и квадратичная по интенсивности поправка к энергии в (2) изучены значительно менее подробно, поскольку в этом случае расчеты не могут быть выполнены в аналитическом виде даже для основного состояния²⁾, а результаты, полученные путем численных расчетов, весьма ограничены. Большинство из них относится к основному состоянию и подпороговым значениям частот [1, 5]. Хотя для случая кулоновского потенциала существуют методы прямого численного расчета членов $E^{(k)}$ разложения (2) даже для значений k , значительно превышающих 4 (см., например, [10, 11]), их использование для высоковозбужденных состояний и/или надпороговых частот представляет значительные вычислительные трудности. Дисперсионная зависимость γ при подпороговых и надпороговых частотах $\hbar\omega \sim |E_n|$ для основного и первых возбужденных состояний водорода исследована в работе [2], где показано, что типичная величина γ в разных частотных интервалах может различаться на много порядков.

В настоящей работе на основе полученного в [12] (см. также [7]) специального представления для радиальной кулоновской функции Грина предложен метод, с помощью которого удастся рассчитать ДГП возбужденных состояний водорода с главным квантовым числом $n \sim 10$, в том числе и для надпороговых частот, в десятки раз превышающих порог ионизации $|E_n|$ рассматриваемого состояния. Атомные параметры, описывающие многофотонные процессы в надпороговой области частот, представляют интерес в связи с использованием в последних экспериментах излучения высших (ультрафиолетовых) гармоник лазеров оптического диапазона, развитием методов нелинейной лазерной спектроскопии высоковозбужденных атомных уровней (для которых уже частоты оптических лазеров соответствуют да-

²⁾ За исключением области малых частот, где γ может быть разложена в сходящийся ряд по ω^2 с рациональными коэффициентами [8, 9].

лекой надпороговой области), а также реальной возможностью использования жесткого УФ излучения лазеров на свободных электронах в атомных экспериментах. Надпороговые многофотонные переходы через виртуальные состояния континуума представляют особый интерес при анализе явления стабилизации (замедления) распада атома в высокочастотном поле с ростом интенсивности поля, обнаруженного экспериментально в 1993 г. [13]. Как показывают эксперименты по стабилизации водородоподобных 5*g*-состояний неона [14, 15], начало стабилизации соответствует пороговой области интенсивностей $I_{thr} \sim 10^{13}-10^{14}$ Вт/см², меньших внутриатомной ($\sim 3.5 \cdot 10^{16}$ Вт/см²), так что I_{thr} можно оценить, анализируя мнимую часть последовательных членов разложения (2) (см. разд. 3.2).

В разд. 2 приведены необходимые общие формулы для расчета ДГП возбужденных состояний и изложен метод расчета составных радиальных матричных элементов, вычисление которых представляет основную сложность при анализе амплитуд многофотонных переходов в области надпороговых частот. В разд. 3.1 приводятся результаты численных расчетов ДГП, а также сдвига и ширины возбужденных кулоновских состояний, а в разд. 3.2 рассмотрены линейные по интенсивности волны поправки к вероятности фотоэффекта и приведены оценки критических полей, соответствующих началу стабилизации атомных уровней. В Приложении описаны детали алгоритма расчета составных матричных элементов для надпороговых частот, применимого к анализу произвольных переходов четвертого порядка с точным учетом виртуальных состояний континуума.

2. ОБЩИЕ ФОРМУЛЫ ДЛЯ ДИНАМИЧЕСКОЙ ГИПЕРПОЛЯРИЗУЕМОСТИ И ТЕХНИКА РАСЧЕТОВ

2.1. Изолированные уровни

Хотя невозмущенные уровни энергии электрона в центральном поле вырождены по проекции орбитального момента m , при линейной и циркулярной поляризациях поля $\mathbf{F}(t)$, рассмотрением которых мы ограничимся в настоящей статье, m остается сохраняющимся квантовым числом и для квазиэнергетических состояний при специальном выборе оси квантования: для случая линейной поляризации вдоль направления вектора поляризации, а для циркулярно поляризованной волны — вдоль направле-

ния ее распространения. В кулоновском поле уровни энергии вырождены также по орбитальному квантовому числу l , причем недиагональные элементы матрицы квазиэнергии $Q_{l,l'=\pm 2}(F)$ отличны от нуля уже в первом исчезающем ($\sim F^2$) порядке теории возмущений, так что подуровни оболочки n с различными l и фиксированным m перемешиваются полем даже при линейной или циркулярной поляризации волны [1]. Изолированными можно считать лишь состояния $|nlm\rangle$ с $|m| = l = n - 1$, $|m| = n - 2$, $l = n - 1, n - 2$ и $|m| = n - 3, l = n - 2$. Сюда относятся, в частности, 1*s*- и 2*s*-состояния, а также 2*p*- и 3*p*-состояния с любыми значениями m . Для этих состояний выражения для ДП и ДГП могут быть получены по стандартным формулам теории возмущений для квазиэнергетических состояний [16] без учета вырождения. Выбирая оператор V взаимодействия электрона с волной в «форме скорости», т. е. в записи через оператор импульса $\mathbf{p} = -i\nabla$ (здесь и далее, где не оговорено особо, используются атомные единицы),

$$V(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{c}\mathbf{A}(t) \cdot \mathbf{p} + \frac{1}{2c^2}\mathbf{A}^2(t),$$

$$\mathbf{A}(t) = \frac{c}{\omega}F \operatorname{Im}\{\mathbf{e} e^{-i\omega t}\},$$
(6)

ДГП можно записать в виде следующей комбинации матричных элементов четвертого порядка теории возмущений:

$$\begin{aligned} \gamma_{nlm} = & -\frac{F^4}{2\omega^4}e_p^*e_q^*e_r e_s \left[(T_{rp}^{(1)}(l, l; -\omega) + T_{pr}^{(1)}(l, l; \omega)) \times \right. \\ & \times (T_{sq}^{(2)}(l, l; -\omega) + T_{qs}^{(2)}(l, l; \omega)) - \\ & - T_{pqrs}(l, l; \omega, 2\omega, \omega) - T_{rspq}(l, l; -\omega, -2\omega, -\omega) - \\ & - T_{prqs}^R(l, l; \omega, 0, \omega) - \\ & - T_{rpsq}^R(l, l; -\omega, 0, -\omega) - T_{prsq}^R(l, l; \omega, 0, -\omega) - \\ & \left. - T_{rpqs}^R(l, l; -\omega, 0, \omega) \right], \end{aligned}$$
(7)

где

$$\begin{aligned} T_{pq}^{(N)}(l, l'; \omega) &= \langle n'l'm | \nabla_p [G_{E_n^{(0)}+\omega}^N] \nabla_q | nlm \rangle, \\ T_{pqrs}(l, l'; \omega_1, \omega_2, \omega_3) &= \langle n'l'm | \nabla_p G_{E_n^{(0)}+\omega_1} \times \\ & \times \nabla_q G_{E_n^{(0)}+\omega_2} \nabla_r G_{E_n^{(0)}+\omega_3} \nabla_s | nlm \rangle, \\ T_{pqrs}^R(l, l'; \omega_1, 0, \omega_3) &= \langle n'l'm | \nabla_p G_{E_n^{(0)}+\omega_1} \times \\ & \times \nabla_q G_{E_n^{(0)}} \nabla_r G_{E_n^{(0)}+\omega_3} \nabla_s | nlm \rangle, \end{aligned}$$
(8)

G_E — кулоновская функция Грина, $G_{E_n^{(0)}}^R$ — редуцированная кулоновская функция Грина (в спектральном разложении которой опущены все состояния, соответствующие невозмущенному значению энергии

$E_n^{(0)}$). Укажем также, что ДП в наших обозначениях имеет вид

$$\alpha_{nlm} = \frac{1}{\omega^2} \left\{ -1 + e_p^* e_r \left[T_{rp}^{(1)}(l, l; -\omega) + T_{pr}^{(1)}(l, l; \omega) \right] \right\}, \quad (9)$$

а $E^{(2)} = -(1/4)\alpha_{nlm}F^2$ в соответствии с (3).

Из выражения (7) видно, что член с \mathbf{A}^2 в операторе (6) не дает вклада в ДГП изолированного уровня и выражение для γ_{nlm} при использовании оператора взаимодействия в «форме длины»,

$$V = \mathbf{F}(t) \cdot \mathbf{r}, \quad (10)$$

можно получить из (7), (8) простой заменой $\nabla/\omega \rightarrow \mathbf{r}$. Выбор оператора взаимодействия в виде (6) позволяет выделить множитель ω^{-4} в выражении для γ_{nlm} (см. (7)), что уменьшает взаимную компенсацию матричных элементов при больших частотах и, как следствие, потерю точности при вычислениях. Поэтому «форма скорости» оператора V оказывается более удобной при расчетах ДГП в области надпороговых частот $\omega > |E_n|$. Кроме того, оператор (6) приводит к более компактным выражениям для матричных элементов при расчетах с обобщенным штурмовским разложением кулоновской функции Грина [7] (см. (33)), которое используется в настоящей работе. В то же время, оператор взаимодействия в «форме длины» позволяет уменьшить компенсацию матричных элементов в области малых частот и приводит к более компактным выражениям для γ_{nlm} при использовании, например, стандартного штурмовского разложения кулоновской функции Грина (31).

2.2. Вырожденные уровни

Как уже отмечалось, ввиду кулоновского вырождения уровней по орбитальному моменту l даже в случае линейно или циркулярно поляризованной волны для расчета возмущения спектра возбужденных состояний, исключая состояния, оговоренные в предыдущем разделе, необходимо использовать теорию возмущений при наличии вырождения. В этом случае процедура расчета квазиэнергии E состоит в следующем [16]. Пусть имеется N состояний, относящихся к одному невозмущенному уровню энергии $E_n^{(0)}$. Правильная функция нулевого приближения представляется в виде линейной комбинации N невозмущенных функций $|\Phi_i^{(0)}\rangle$. Коэффициенты a_i этой комбинации и квазиэнергия E удовлетворяют системе уравнений

$$\sum_{j=1}^N a_j (Q_{ij} - \Delta E \delta_{ij}) = 0, \quad (11)$$

где $\Delta E = E - E_n^{(0)}$. Элементы матрицы $Q_{ij} = Q_{ij}(F)$ могут быть разложены в ряд по F :

$$Q_{ij} = Q_{ij}^{(2)} + Q_{ij}^{(4)} + \dots, \quad Q_{ij}^{(k)} \sim F^k. \quad (12)$$

В первом неисчезающем порядке по F имеем

$$\sum_{j=1}^N a_j^{(0)} (Q_{ij}^{(2)} - E^{(2)} \delta_{ij}) = 0, \quad (13)$$

где матричные элементы $Q_{ij}^{(2)}$ в записи через оператор ∇ имеют вид

$$Q_{ij}^{(2)} = -\frac{F^2}{4\omega^2} \delta_{ij} + \frac{F^2}{4\omega^2} \left(\langle njm | (\mathbf{e}^* \cdot \nabla) G_{E_n^{(0)} + \omega} (\mathbf{e} \cdot \nabla) | nim \rangle + \langle njm | (\mathbf{e} \cdot \nabla) G_{E_n^{(0)} - \omega} (\mathbf{e}^* \cdot \nabla) | nim \rangle \right) \quad (14)$$

и обладают свойством симметрии, $Q_{ij}^{(2)} = Q_{ji}^{(2)}$, (которое становится очевидным после интегрирования матричных элементов в (14) по угловым переменным, см. [6, 7]). В результате решения уравнения (13) получим набор поправок второго порядка $E_\alpha^{(2)}$ к энергии $E_n^{(0)}$ и соответствующих коэффициентов $a_{i,\alpha}^{(0)}$, определяющих правильную волновую функцию нулевого приближения $|\Phi_\alpha\rangle$. При надпороговых частотах ($\omega > |E_n^{(0)}|$) функция Грина $G_{E_n^{(0)} + \omega}$ в (14) имеет мнимую часть, так что $E_\alpha^{(2)}$ и $a_{i,\alpha}^{(0)}$ комплексны и $|\Phi_\alpha\rangle$ описывает квазистационарное квазиэнергетическое состояние, распадающееся вследствие однофотонной ионизации смешанных полей вырожденных состояний. Будем полагать, что коэффициенты $a_{i,\alpha}^{(0)}$ удовлетворяют соотношению

$$\sum_{i=1}^N (a_{i,\alpha}^{(0)})^2 = 1, \quad (15)$$

что соответствует условию нормировки волновых функций квазистационарных квазиэнергетических состояний [4, 17]. Условие (15) соответствует тому, что волновая функция $\langle \Phi_\alpha |$ в первом неисчезающем порядке теории возмущений имеет вид

$$\langle \Phi_\alpha | = \sum_{i=1}^N a_{i,\alpha}^{(0)} \langle \Phi_i^{(0)} |, \quad (16)$$

хотя коэффициенты $a_{i,\alpha}^{(0)}$ могут быть комплексными (при частотах выше порога однофотонной ионизации), т. е. бра-функция получается не как простое

комплексное сопряжение кет-функции $|\Phi_\alpha\rangle$, что связано с неэрмитовостью симметричной матрицы $Q_{ij}^{(2)}$.

Для нахождения поправки четвертого порядка $E_\alpha^{(4)}$ к квазиэнергии $E_n^{(0)} + E_\alpha^{(2)}$ распространим на квазистационарные квазиэнергетические состояния метод, предложенный в работе [18] для стационарной теории возмущений при наличии близких уровней. Запишем уравнение (11) с точностью до членов четвертого порядка по F :

$$\sum_{j=1}^N \left[a_{j,\alpha}^{(2)} (Q_{ij}^{(2)} - E_\alpha^{(2)} \delta_{ij}) + a_{j,\alpha}^{(0)} (Q_{ij}^{(4)} - E_\alpha^{(4)} \delta_{ij}) \right] = 0. \quad (17)$$

Умножая (17) на $a_{i,\alpha}^{(0)}$ и суммируя по i с учетом симметрии $Q_{ij}^{(2)}$, а также принимая во внимание уравнение (13), видим, что первое слагаемое в (17) обращается в нуль, а второе слагаемое с учетом нормировочного условия (15) дает выражение для поправки $E_\alpha^{(4)}$:

$$E_\alpha^{(4)} = \sum_{i,j=1}^N a_{i,\alpha}^{(0)} a_{j,\alpha}^{(0)} Q_{ij}^{(4)}. \quad (18)$$

Явное выражение для матричных элементов $Q_{ij}^{(4)}$ в записи через оператор ∇ имеет вид

$$\begin{aligned} Q_{ij}^{(4)} = & \frac{F^2}{4\omega^2} e_p e_r^* \left(T_{pr}^{(2)}(i, j; -\omega) + T_{rq}^{(2)}(i, j; \omega) \right) \times \\ & \times \left(E_\alpha^{(2)} + \frac{F^2}{4\omega^2} \right) - \frac{F^4}{16\omega^4} e_p e_q e_r^* e_s^* \times \\ & \times \left(T_{pqrs}(i, j; -\omega, -2\omega, -\omega) + T_{rspq}(i, j; \omega, 2\omega, \omega) + \right. \\ & + T_{rpsq}^R(i, j; \omega, 0, \omega) + T_{prqs}^R(i, j; -\omega, 0, -\omega) + \\ & \left. + T_{rpqs}^R(i, j; \omega, 0, -\omega) + T_{prsq}^R(i, j; -\omega, 0, \omega) \right), \quad (19) \end{aligned}$$

где сохранены обозначения (8), а индексы и аргументы i, j соответствуют значениям орбитального момента вырожденных состояний. Отметим, что при расчете поправки $E_\alpha^{(4)}$ для вырожденных состояний член с \mathbf{A}^2 в (6) дает ненулевой вклад, поскольку теперь уже выражение для $E_\alpha^{(2)}$ в (19) не имеет простого аналитического вида, следующего из формулы (9) (первое слагаемое в которой убирает зависимость от \mathbf{A}^2 в выражении для γ в случае изолированного уровня).

2.3. Отделение угловых переменных

Выражения (7), (19) можно упростить, выполняя интегрирование по угловым переменным в матрич-

ных элементах и суммирование по компонентам вектора поляризации \mathbf{e} для случаев линейной ($\mathbf{e} = \mathbf{e}_z$) и циркулярной ($\mathbf{e} = (\mathbf{e}_x + i\xi\mathbf{e}_y)/\sqrt{2}$, $\xi = \pm 1$) поляризации светового поля. Записывая функцию Грина в виде мультипольного разложения

$$G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{lm} g_l(E; r, r') Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{r}}'), \quad (20)$$

где g_l — радиальная часть функции Грина, $Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}})$ — сферические функции, а $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}/r$, и проводя стандартные вычисления с использованием техники неприводимых тензорных операторов [19], для матричных элементов четвертого порядка общего вида получаем

$$\begin{aligned} e_{1p}^{(4)} e_{1q}^{(3)} e_{1r}^{(2)} e_{1s}^{(1)} T_{pqrs}(l, l'; \mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2, \mathcal{E}_3) = & \langle nl'm | (\mathbf{e}_4 \cdot \nabla) G_{\mathcal{E}_3} (\mathbf{e}_3 \cdot \nabla) \times \\ & \times G_{\mathcal{E}_2} (\mathbf{e}_2 \cdot \nabla) G_{\mathcal{E}_1} (\mathbf{e}_1 \cdot \nabla) | nlm \rangle = \\ = \sum_p C_{l'm p 0}^{lm} \sum_{p_1 p_2} \{ \{ \mathbf{e}_3 \otimes \mathbf{e}_4 \}_{p_1} \otimes \{ \mathbf{e}_2 \otimes \mathbf{e}_1 \}_{p_2} \}_{p 0} \times & \\ \times \left(\frac{\Pi_{p_1 p_2 p}}{\Pi_l} \right)^{1/2} \sum_{l_1 l_2 l_3} \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & p_1 \\ l' & l_2 & l_3 \end{matrix} \right\} \times & \\ \times \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & p_2 \\ l & l_2 & l_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} p_1 & p_2 & p \\ l & l' & l_2 \end{matrix} \right\} \times & \\ \times \langle nl' || \nabla g_{l_3}(\mathcal{E}_3) \nabla g_{l_2}(\mathcal{E}_2) \nabla g_{l_1}(\mathcal{E}_1) \nabla || nl \rangle, \quad (21) & \end{aligned}$$

где $\mathbf{e}_i = \mathbf{e}$ или \mathbf{e}^* для случаев поглощения или испускания фотона, соответственно, $\Pi_{l_i} = \sqrt{2l_i + 1}$ и использованы стандартные обозначения [19] для коэффициентов Клебша–Гордона и $6j$ -символов. Переходя от приведенных матричных элементов к радиальным в соответствии с известной формулой [19],

$$\begin{aligned} \langle nl' || \nabla || nl \rangle = \sqrt{l+1} \langle nl' | \frac{d}{dr} - \frac{l}{r} | nl \rangle \delta_{l', l+1} - & \\ - \sqrt{l} \langle nl' | \frac{d}{dr} + \frac{l+1}{r} | nl \rangle \delta_{l', l-1}, \quad (22) & \end{aligned}$$

выражение (21) можно переписать через комбинацию радиальных матричных элементов четвертого порядка

$$\begin{aligned} R_{l'l'}^{l_1 l_2 l_3}(\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2, \mathcal{E}_3) = \langle nl' | \hat{D}(l', l_3) g_{l_3}(\mathcal{E}_3) \hat{D}(l_3, l_2) \times & \\ \times g_{l_2}(\mathcal{E}_2) \hat{D}(l_2, l_1) g_{l_1}(\mathcal{E}_1) \hat{D}(l_1, l) | nl \rangle, \quad (23) & \end{aligned}$$

где

$$\hat{D}(l_1, l_2) = \frac{d}{dr} + \frac{\text{sign}(l_2 - l_1) \max(l_1, l_2) + 1}{r}. \quad (24)$$

Из (22) следует, что при фиксированном l величина l' в (21) может принимать значения $l, l \pm 2$ и $l \pm 4$, т. е.

смешиваются лишь l -подуровни оболочки n с одинаковой четностью. Аналогичным образом первое слагаемое в (19) сводится к линейной комбинации произведений радиальных матричных элементов второго и третьего порядков:

$$R_{l'l}^{L(N)}(\mathcal{E}) = \langle nl' | \hat{D}(l', L) [g_L(\mathcal{E})]^N \hat{D}(L, l) | nl \rangle, \quad (25)$$

$$N = 1, 2.$$

В итоге для изолированных уровней в поправке порядка F^4 отделяется зависимость от магнитного квантового числа и величина $E^{(4)}$ в линейном (L) и циркулярном (c) поле выражается через зависящие от частоты и типа поляризации параметры $\gamma_p^{L,c}(\omega)$ [5, 20]:

$$E^{(4)} = -\frac{F^4}{8} \sum_{p=0}^4 C_{lmp0}^{lm} \left[\frac{(2l+2)_p}{(2l+1-p)_p} \right]^{1/2} \gamma_p^{L,c}(\omega), \quad (26)$$

где $(a)_p$ — символ Похгаммера. Последнее выражение можно переписать в элементарном виде. В линейном поле отличны от нуля только три параметра γ_p^L с четными p :

$$E_{nlm}^{(4)L} = -\frac{F^4}{8} \left[\gamma_0^L + \gamma_2^L \frac{3m^2 - l(l+1)}{l(2l-1)} + \gamma_4^L \frac{35m^4 + (25-2l-2l^2)m^2 + 3l(l^2-1)(l+2)}{2l(l-1)(2l-1)(2l-3)} \right]. \quad (27)$$

В циркулярном поле поправка четвертого порядка к квазиэнергии определяется пятью инвариантными параметрами, при этом в формуле (27) $\gamma_p^L(\omega)$ заменяются на $\gamma_p^c(\omega)$ и добавляются члены с нечетными степенями m :

$$\xi \gamma_1^c \frac{m}{l} + \xi \gamma_3^c \frac{m[5m^2 + 1 - 3l(l+1)]}{l(l-1)(2l-1)}. \quad (28)$$

Весьма громоздкие выражения для неприводимых компонент $\gamma_p^{L,c}(\omega)$ через радиальные матричные элементы для случая произвольного l не представляют интереса и здесь не приводятся (результаты для s -, p - и d -состояний см., например, в [20]). Укажем лишь, что ввиду различия в дипольных правилах отбора параметры $\gamma_p^L(\omega)$ и $\gamma_p^c(\omega)$ содержат различные комбинации радиальных матричных элементов, так что их частотные зависимости существенно различаются. В частности, в случае s -состояний $\gamma_p^L(\omega)$ имеет двухфотонные резонансные особенности на промежуточных $n's$ -состояниях, а при циркулярной поляризации поля такие резонансы отсутствуют.

Параметры $\gamma_p^{L,c}$ в (26) аналогичны неприводи-

мым компонентам ДП состояния $|nlm\rangle$, определяющим квадратичную по F поправку к квазиэнергии,

$$E^{(2)} = -\frac{F^2}{4} \sum_{p=0}^2 C_{lmp0}^{lm} \left[\frac{(2l+2)_p}{(2l+1-p)_p} \right]^{1/2} \alpha_p^{L,c}(\omega), \quad (29)$$

с той разницей, что $E^{(2)}$ в линейном и циркулярном полях определяется одними и теми же параметрами $\alpha_0^L = \alpha_0^c$ и $\alpha_2^L = -2\alpha_2^c$, в то время как компоненты тензора ДГП γ_p^L и γ_p^c с $p = 0, 2, 4$ линейно независимы.

Для вырожденных уровней невозможно параметризовать поправки $E^{(2)}$ и $E^{(4)}$ в явном виде аналогично (29), (26), хотя и в этом случае зависимость от магнитного квантового числа в матричных элементах $Q_{ij}^{(2)}$ и $Q_{ij}^{(4)}$ отделяется через коэффициенты Клебша–Гордона. После этого расчет поправок сводится к вычислению радиальных матричных элементов, стандартной процедуре диагонализации матрицы $Q_{l'l}^{(2)}$ во втором порядке по F (см. (13)) и определению $E^{(4)}$ согласно формуле (18).

2.4. Расчет составных радиальных матричных элементов для виртуальных переходов в континуум

Основную проблему при расчете ДГП для надпороговых значений частоты представляет вычисление радиальных матричных элементов четвертого порядка (23). Главным условием успешного проведения вычислений составных матричных элементов является наличие подходящего представления для радиальной части кулоновской функции Грина. Использование спектрального разложения

$$g_l(E; r, r') = \sum_{n=l+1}^{\infty} \frac{R_{nl}(r)R_{nl}(r')}{E_n - E} + \int_0^{\infty} d\varepsilon \frac{R_{\varepsilon l}(r)R_{\varepsilon l}(r')}{\varepsilon - E - i0} \quad (30)$$

полезно для общего анализа радиальных матричных элементов (исследования резонансной структуры, высокочастотной асимптотики, разделения реальной и мнимой частей амплитуд переходов), однако совершенно неэффективно для численных расчетов из-за необходимости вычислять интеграл по непрерывному спектру, медленной сходимости суммы по дискретному спектру и компенсации вкладов от них в матричные элементы. Наиболее удобно для вычисления (23) использовать разложение куло-

новской функции Грина по штурмовским функциям $S_{kl}(2r/\nu)$ [21]:

$$g_l(E; r, r') = \nu \sum_{k=0}^{\infty} \frac{k! S_{kl}(2r/\nu) S_{kl}(2r'/\nu)}{(k+2l+1)!(k+l+1-\eta)}, \quad (31)$$

где

$$S_{kl} \left(\frac{2r}{\nu} \right) = \frac{2}{\nu} \left(\frac{2r}{\nu} \right)^l \exp \left(-\frac{r}{\nu} \right) L_k^{2l+1} \left(\frac{2r}{\nu} \right), \quad (32)$$

L_n^α — обобщенный полином Лагерра, $\nu = (-2E - i0)^{-1/2}$, $\eta = Z\nu$, Z — заряд ядра. С помощью (31) матричные элементы (23), (25) представляются в виде рядов гипергеометрических полиномов, которые, однако, сходятся лишь при отрицательных энергетических параметрах функций Грина, $\mathcal{E}_i < 0$. При надпороговых значениях частот, когда хотя бы некоторые энергии функций Грина становятся положительными, сходимость штурмовских рядов для матричных элементов нарушается, так что их вычисление в этом случае представляет более сложную задачу. Для ее решения в работе [22] было предложено обобщенное штурмовское разложение кулоновской функции Грина, содержащее свободный параметр α , подходящим выбором которого удается обеспечить сходимость рядов для матричных элементов в том числе и при положительных энергиях кулоновской функции Грина, $\mathcal{E}_i > 0$. С использованием указанного представления кулоновской функции Грина были рассчитаны нелинейные восприимчивости водородного атома при частотах, превышающих порог ионизации, в частности, ДГП $1s$ -, $2s$ -, $2p$ -состояний [2], хотя эффективность такого метода быстро уменьшается с ростом частоты и главного квантового числа n исходного атомного состояния.

Удобный вариант разложения кулоновской функции Грина по штурмовским функциям со свободными параметрами получен в работах [7, 12], где $g_l(E)$ была представлена в виде двойного ряда по функциям $S_{kl}(2r/\alpha)$, $S_{k'l}(2r'/\alpha')$:

$$g_l(E; r, r') = \sum_{k, k'=0}^{\infty} g_{kk'}^l(\nu; \alpha, \alpha') S_{kl} \left(\frac{2r}{\alpha} \right) S_{k'l} \left(\frac{2r'}{\alpha'} \right). \quad (33)$$

Коэффициенты $g_{kk'}^l$ разложения (33) выражаются через гипергеометрические функции Гаусса ${}_2F_1$ и Ашеля F_1 :

$$g_{kk'}^l(\nu; \alpha, \alpha') = f(\alpha, \alpha') \times \left[\frac{{}_2F_1(-k, l+1-\eta; 2l+2; z)}{l+1-\eta} \times F_1(l+1-\eta; -k', k'+2l+2; l+2-\eta; y, y') + \sum_{p=1}^k C_k^p (-z)^p \times \frac{{}_2F_1(-k+p, l+1-\eta+p; 2l+2+p; z)}{(2l+2)_p} \Phi_p^{lk'} \right]. \quad (34)$$

Здесь

$$z = -\frac{4\alpha\nu}{(\alpha-\nu)^2},$$

$$\Phi_p^{lk'} = -\frac{(l+2+\eta-p)_{p-1} (1-y)^{k'}}{(1-y')^{k'+2l+2}} \times F_1 \left(-p+1; -k', k'+2l+2; l+2+\eta-p; \frac{1}{1-y}, \frac{1}{1-y'} \right),$$

$$y = \frac{\alpha-\nu}{\alpha+\nu} \frac{\alpha'+\nu}{\alpha'-\nu}, \quad y' = \frac{\alpha-\nu}{\alpha+\nu} \frac{\alpha'-\nu}{\alpha'+\nu},$$

C_k^p — биномиальный коэффициент. Множитель f имеет вид

$$f(\alpha, \alpha') = \nu \frac{(4\nu\sqrt{\alpha\alpha'})^{2l+2}}{\Gamma(2l+2)} \frac{(\alpha-\nu)^k}{(\alpha+\nu)^{k+2l+2}} \times \frac{(\alpha'-\nu)^{k'}}{(\alpha'+\nu)^{k'+2l+2}}.$$

При одинаковых параметрах $\alpha = \alpha'$ коэффициенты $g_{kk'}^l$ упрощаются:

$$g_{kk'}^l(\nu; \alpha, \alpha) = \frac{\nu}{\Gamma(2l+2)} \left(\frac{\alpha-\nu}{\alpha+\nu} \right)^{k_{<}} \times {}_2F_1(-k_{<}, l+1-\eta; 2l+2; z) \left(\frac{\alpha^2-\nu^2}{4\alpha\nu} \right)^{k_{>}} \times \frac{k_{>}! {}_2F_1(k_{>}+1, k_{>}+2l+2; k_{>}+l+2-\eta; z^{-1})}{(l+1-\eta)_{k_{>}+1}} \quad (35)$$

(где $k_{<} = \min\{k, k'\}$, $k_{>} = \max\{k, k'\}$) и (33) совпадает с результатом работы [23]. При $\alpha = \alpha' = \nu$ разложение (33) переходит в (31).

Важным обстоятельством, обеспечивающим значительную гибкость в использовании разложения (33) в практических приложениях, является факторизованная зависимость членов ряда от r , r' и энергетического параметра ν . Вся зависимость от энергии содержится в ядре $g_{kk'}^l(\nu; \alpha, \alpha')$, которое не зависит от радиальных переменных. Рациональный выбор параметров α и α' (в общем

случае комплексных) в соответствии со спецификой конкретной задачи позволяет в ряде случаев кардинально упростить процедуру расчета матричных элементов. Представление (33) оказалось полезным в аналитических расчетах и позволило получить универсальные замкнутые выражения для матричных элементов двухфотонных связанно-связанных и связанно-свободных переходов из произвольного $|nl\rangle$ -состояния в виде линейной комбинации в общем случае четырех величин g_{kk}^l , [7]. Как показано в Приложении, использование (33) оказывается весьма эффективным и для численных расчетов амплитуд многофотонных переходов более высоких порядков.

3. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

3.1. Дисперсионная зависимость динамической гиперполяризуемости и сдвиг уровней в сильном световом поле

С использованием алгоритма, изложенного в Приложении, были выполнены систематические расчеты ДГП состояний с $n = 1-5$, а также отдельные тестовые расчеты для более высоких уровней. Для $1s$ -, $2s$ - и $2p$ -состояний имеется полное согласие с известными результатами в области частот ниже порога двухфотонной ионизации [2, 24], а в надпороговой области полученные результаты существенно расширяют данные, приведенные в работе [2]. Контроль точности вычислений проводился также путем параллельного расчета γ с оператором взаимодействия в представлениях **A-r** (6) и **F-r** (10), при этом результаты полностью совпали.

Как следует из общих формул разд. 2, ДГП γ (или квадратичная по интенсивности поправка $E^{(4)}$ к квазиэнергии) весьма сложным образом зависит как от квантовых чисел рассматриваемого атомного состояния, так и от частоты и поляризации световой волны. Среди общих свойств ДГП отметим полюсные и пороговые особенности в дисперсионной зависимости: однофотонные (третьего порядка) и двухфотонные (первого порядка) резонансы, а также типичные для потенциалов с кулоновской асимптотикой пороговые аномалии [25] при открытии каналов одно- и двухфотонной ионизации.

ДГП невырожденных $|nlm\rangle$ -состояний, $\gamma = \gamma_{nlm}^{L,c}$, в линейном (L) и циркулярном (c) поле мы записываем через неприводимые части (которые пропорциональны величинам $\gamma_p^{L,c}$ в (26)). Для сферически-симметричных s -состояний ДГП определяется

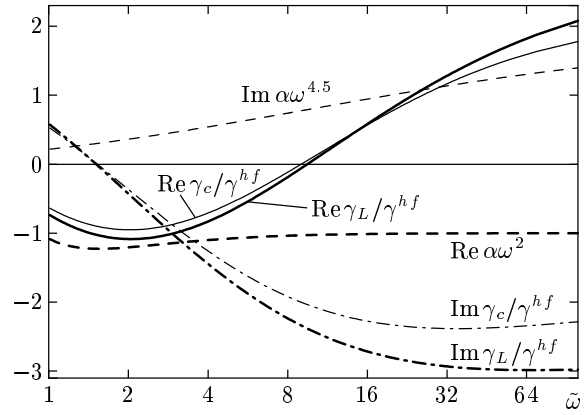


Рис. 1. Вещественная и мнимая части ДГП $1s$ -состояния водорода выше порога однофотонной ионизации в линейно (толстые линии) и циркулярно (тонкие линии) поляризованных полях. Сплошная линия — вещественная часть, штрих-пунктирная — мнимая часть ДГП. При построении графика выделен высокочастотный асимптотический множитель $\gamma^{hf} = A\omega^{-7.5}$, см. формулу (37). Для сравнения приведены вещественная часть ДП (толстая штриховая линия) и мнимая часть ДП (тонкая штриховая линия). Частота поля измеряется в единицах потенциала ионизации: $\tilde{\omega} = \omega/|E_n|$, $n = 1$

единственным параметром — скалярной ДГП, — который, в отличие от ДП, оказывается разным для линейного и циркулярного полей:

$$\gamma_{n00}^L = \gamma_L, \quad \gamma_{n00}^c = \gamma_c.$$

В случае p -состояний γ_{nlm} после отделения зависимости от магнитного квантового числа определяется скалярной ($\gamma_{L,c}^{(s)}$), векторной ($\gamma_c^{(v)}$) и тензорной ($\gamma_{L,c}^{(t)}$) ДГП, аналогичными соответствующим неприводимым компонентам поляризуемости состояния $|nlm\rangle$ [2]:

$$\begin{aligned} \gamma_{n1m}^L &= \gamma_L^{(s)} + \gamma_L^{(t)}(3m^2 - 2), \\ \gamma_{n1m}^c &= \gamma_c^{(s)} - \gamma_c^{(v)}\xi m + \gamma_c^{(t)}(3m^2 - 2), \end{aligned} \tag{36}$$

где $\xi = \pm 1$ — степень циркулярной поляризации световой волны.

На рис. 1 представлены ДГП $1s$ -состояния для линейно и циркулярно поляризованного полей при частотах выше порога однофотонной ионизации вплоть до значений $\omega = 100|E_{1s}| = 50$ ат. ед. (При больших частотах возникает вопрос о применимости дипольного приближения, поскольку порядок величины недипольных поправок определяется параметром $(\alpha\omega)^2$, $\alpha = 1/137$). Приведенные данные демон-

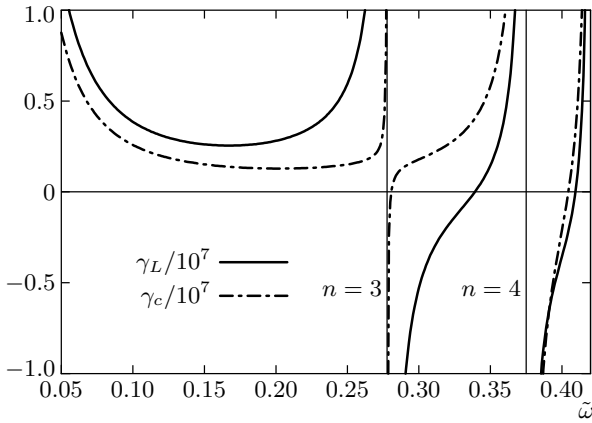


Рис. 2. ДГП $2s$ -состояния водорода в подпороговой области частот в линейно (сплошная линия) и циркулярно (штрих-пунктирная) поляризованном поле. Тонкие вертикальные линии указывают положение двухфотонных резонансов на состояниях с $n = 3$ ($3s, 3d$ для линейно и $3d$ для циркулярно поляризованных полей) и $n = 4$ ($4s, 4d$ для линейно и $4d$ для циркулярно поляризованных полей). $\tilde{\omega} = \omega/|E_n|$, $n = 2$

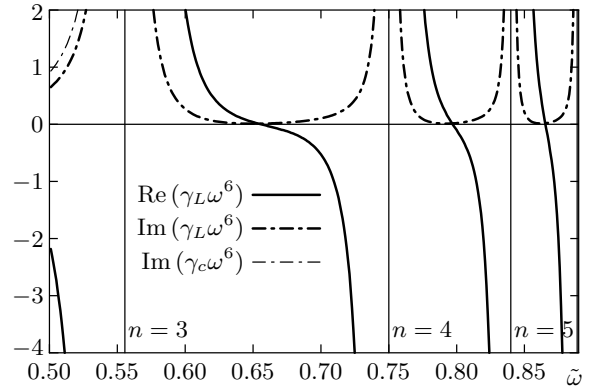


Рис. 3. Вещественная и мнимая части ДГП $2s$ -состояния водорода в области частот между порогами двух- и однофотонной ионизаций для случая линейно поляризованного поля. Сплошная линия — вещественная часть, штрих-пунктирная — мнимая часть ДГП. Тонкие вертикальные линии указывают положение однофотонных резонансов на состояниях $3p, 4p, 5p$. В этой области частот ДГП для циркулярно и линейно поляризованных полей практически совпадают, некоторое различие имеется лишь у мнимых частей $\text{Im } \gamma_{L,c}$ между порогом однофотонной ионизации и первым резонансом, где $\text{Im } \gamma_c$ изображена тонкой штрих-пунктирной линией

стрируют расчетные возможности метода и особенности выхода ДГП на асимптотику в высокочастотной области. При построении графиков выделена асимптотика ДГП [2]:

$$\gamma_{L,c} = a_{L,c} A \frac{1-i}{\omega^{7.5}}, \quad a_L = 3, \quad (37)$$

$$a_c = 2, \quad A = 0.26.$$

Общий вид (37) был установлен с использованием метода, изложенного в работе [26], а постоянная A определена численно в области $\omega \sim 200|E_{1s}|$. Как видно на рис. 1, выход на асимптотику чрезвычайно затянут по сравнению со случаем ДП $\alpha_{1s}(\omega)$, особенно для вещественной части, которая меняет знак при $\omega \approx 8|E_{1s}|$, где $\text{Re } \alpha_{1s}(\omega)$ уже весьма близка к своему асимптотическому значению $-1/\omega^2$. Это, очевидно, затрудняет аппроксимацию ДГП простыми аналитическими формулами даже в области надпороговых частот. Для сравнения укажем, что аналитически полученное асимптотическое отношение $a_L/a_c = 1.5$, в то время как численное отношение реальных и мнимых частей ДГП для линейной и циркулярной поляризации при частотах $\omega = 100|E_{1s}|, 150|E_{1s}|, 250|E_{1s}|$ — $\text{Re } \gamma_L / \text{Re } \gamma_c = 1.17, 1.19, 1.22$ и $\text{Im } \gamma_L / \text{Im } \gamma_c = 1.30, 1.33, 1.36$.

Рисунки 2–4 показывают частотную зависимость γ для $2s$ -состояния в подпороговой и надпороговой областях. Отметим, что вещественная часть ДГП

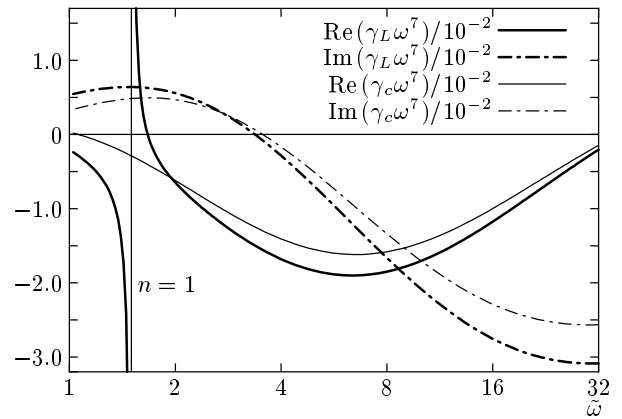


Рис. 4. Вещественная и мнимая части ДГП $2s$ -состояния атома водорода за порогом однофотонной ионизации в случае линейно (толстые линии) и циркулярно (тонкие линии) поляризованных полей. Сплошная линия — вещественная часть, штрих-пунктирная — мнимая часть ДГП, $\tilde{\omega} = \omega/|E_n|$, $n = 2$. Тонкая вертикальная линия — двухфотонный резонанс «вниз» на $1s$ -состоянии, который отсутствует при циркулярной поляризации волны

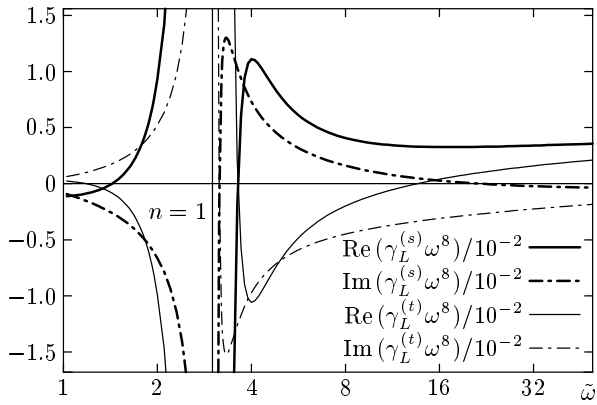


Рис. 5. Вещественная и мнимая части скалярной и тензорной ДГП $2p$ -состояния водорода для частот выше порога однофотонной ионизации в случае линейно поляризованного поля. Сплошная линия — вещественная часть, штрих-пунктирная — мнимая часть ДГП, $\tilde{\omega} = \omega/|E_n|$, $n = 2$. Тонкая вертикальная линия — однофотонный резонанс «вниз» на $1s$ -состоянии

возбужденных состояний имеет резонансы «вниз» в надпороговой области частот (соответствующие одно- или двухфотонным резонансным переходам электрона на нижележащие уровни, разрешенным дипольными правилами отбора). Рисунок 4 иллюстрирует зависимость резонансной структуры от поляризации волны: некоторые резонансы, присутствующие в линейно поляризованном поле, отсутствуют в циркулярном. В данном случае в линейном поле при $\omega = 1.5|E_n|$ имеется двухфотонный резонанс «вниз» на $1s$ -состоянии, а в циркулярном поле этот резонанс запрещен правилами отбора по магнитному квантовому числу m (поскольку в этом случае $\Delta m = \pm 2$ и двухфотонный переход $2s-1s$ невозможен). Очевидно, что $\text{Im} \gamma$ никаких резонансов вниз не имеет.

На рис. 5, 6 показаны неприводимые компоненты $\gamma^{s,v,t}$ для ДГП $2p$ -состояния в надпороговой области частот. Очевидно, в этом случае возможен только однофотонный резонанс на нижележащем $1s$ -состоянии при $\omega = 3|E_n|$. Отметим, что при сравнении рис. 5, 6 с рис. 4 можно увидеть, что γ_{2p} при больших частотах убывает несколько быстрее, чем γ_{2s} .

Для иллюстрации поведения гиперполяризуемостей высоковозбужденных состояний на рис. 7–11 представлен ряд результатов для состояний с $n = 5$. Рисунки 7, 8 показывают дисперсионную зависимость вещественной и мнимой частей поправки чет-

вертого порядка $E^{(4)}$ (определяемой ДГП γ_{nm}) для состояний $|n = 5, m = 0\rangle$. Напомним, что эти состояния являются вырожденными по орбитальному квантовому числу (причем перемешиваются состояния одинаковой четности), поэтому положение уровней в световом поле должно рассчитываться путем диагонализации матрицы квазиэнергии уже во втором порядке по амплитуде поля. Расчеты показывают, что вырождение особенно существенно при малых частотах, $\omega \lesssim |E_n|$, а также вблизи резонансов. При частотах, существенно превышающих порог ионизации, влияние вырождения практически не сказывается в связи с более быстрым убыванием недиагональных (по l, l') элементов матрицы квазиэнергии при $\omega \rightarrow \infty$ [26]. Кроме того, как видно на рисунках, состояние с $l = 4$ практически не смешивается с состояниями с $l = 0, l = 2$ при любых частотах. Из графиков видно, что у двух из трех четных состояний, полученных в результате смешения, отсутствует однофотонный резонанс «вниз» на $3p$ - и $2p$ -состояниях, в то время как без учета вырождения резонанс отсутствует только у одного из трех состояний с $l = 4$. Этот факт «исчезновения» резонанса становится очевидным после записи в резонансном приближении матрицы квазиэнергии во втором порядке теории возмущений и при последующем вычислении $E^{(4)}$. В этом случае слагаемые, содержащие резонансные сингулярности, взаимно компенсируются для двух из трех уровней.

Область вблизи резонансов требует отдельного рассмотрения, поскольку по мере приближения ω к частоте резонансного перехода нарушается условие применимости теории возмущений. Особая ситуация возникает, когда уровни исходной оболочки n перемешиваются по орбитальному моменту l : как видно на рис. 7, в мнимой части $E^{(4)}$ возникает «лишний», не обусловленный физическими причинами двухфотонный резонанс «вниз» на $2p$ -состоянии. Это связано с особенностями нормировки квазистационарных квазиэнергетических состояний (15), при которой дуальная бра-функция получается по формуле (16). В этом случае резонанс, имеющий место только в вещественных матричных элементах четвертого порядка, из-за комплексности коэффициентов смеси $a_{i,\alpha}^{(0)}$ возникает и в мнимой части $E^{(4)}$, которая в рассматриваемой ситуации не может иметь резонансных особенностей. Для корректного рассмотрения области частот вблизи данного резонанса необходимо учесть, что в квазиэнергетическом формализме квазирезонансные уровни, для которых $E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)} \approx k\omega$, также считаются близкими уровнями. В нашем случае двухфотонного ре-

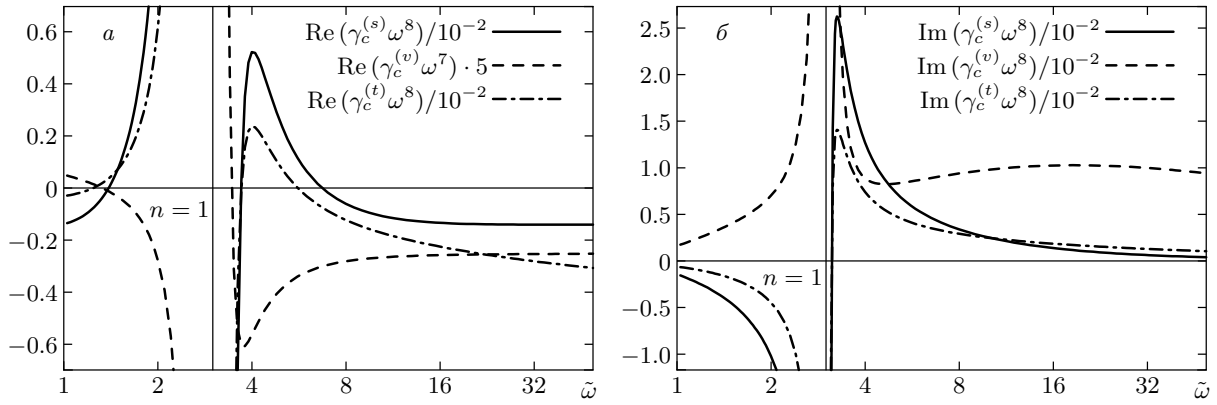


Рис. 6. Вещественная (а) и мнимая (б) части скалярной, векторной и тензорной гиперполяризуемостей $2p$ -состояния водорода в надпороговой области в случае циркулярно поляризованного поля, $\tilde{\omega} = \omega/|E_n|$, $n = 2$. Тонкая вертикальная линия — однофотонный резонанс «вниз» на $1s$ -состоянии

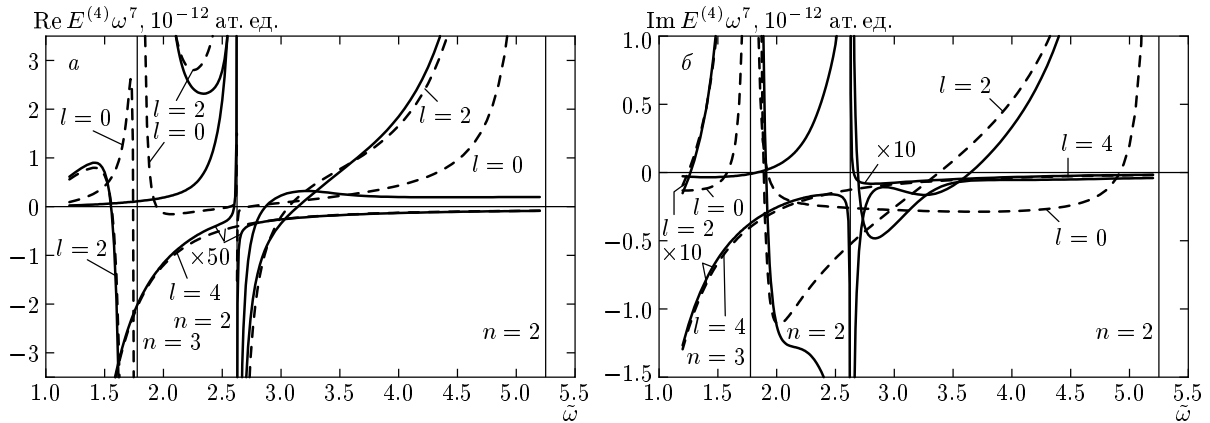


Рис. 7. Вещественная (а) и мнимая (б) части поправки четвертого порядка $E^{(4)}$ для четных состояний с $n = 5$, $m = 0$ в надпороговой области в случае линейно поляризованного поля, $F = 0.01$ ат. ед., $\tilde{\omega} = \omega/|E_n|$. Сплошные линии — с учетом вырождения по l , пунктирные — без учета вырождения

зона на $2p$ -состоянии имеем $E_5^{(0)} - E_2^{(0)} \approx 2\omega$, т.е. $n = 5$, $n' = 2$, $k = 2$. Таким образом, правильная волновая функция нулевого приближения с определенным значением проекции m должна содержать линейную комбинацию как вырожденных по l квазиэнергетических состояний $|nlm\rangle$ исходной оболочки n , так и (квазирезонансных) состояний $|n'l'm\rangle \exp(ik\omega t)$. При этом в спектральном разложении функции Грина $G_{E_n^{(0)} - k\omega}$ должны быть опущены состояния $|n'l'm\rangle$, которые уже включены в волновую функцию нулевого приближения. Результаты расчетов с примешиванием квазирезонансных состояний в правильную волновую функцию нулевого приближения приведены на рис. 9, где показана дисперсионная зависимость $E^{(4)}$ для уров-

ней $|n = 5, m = 0\rangle$ вблизи двухфотонного резонанса «вниз» на $2p$ -состоянии для нечетных состояний. Из рисунков видно, что в области резонанса поправка $E^{(4)}$ становится гладкой функцией частоты, а по мере удаления от резонанса влияние примешиваемых уровней из оболочки с другим главным квантовым числом n' (в нашем случае $n' = 2$) становится незначительным.

На рис. 10 показана зависимость сдвига уровней от амплитуды поля F с учетом членов порядков F^2 и F^4 для состояний с $n = 5$, $m = 0$. Расчеты (как с учетом, так и без учета вырождения по l) были проведены для поля с линейной поляризацией и частотами $\omega = 1.5|E_n|$ и $\omega = 4|E_n|$. Значения F ограничивались условием применимости теории возмуще-

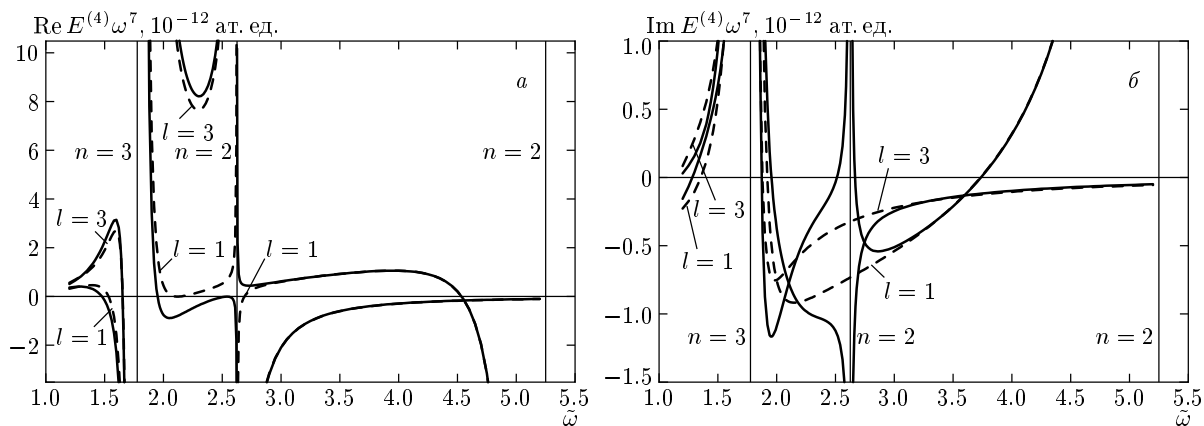


Рис. 8. Вещественная (а) и мнимая (б) части поправки четвертого порядка $E^{(4)}$ для нечетных состояний с $n = 5$, $m = 0$ в надпороговой области в случае линейно поляризованного поля, $F = 0.01$ ат. ед., $\tilde{\omega} = \omega/|E_n|$. Сплошные линии — с учетом вырождения по l , пунктирные — без учета вырождения

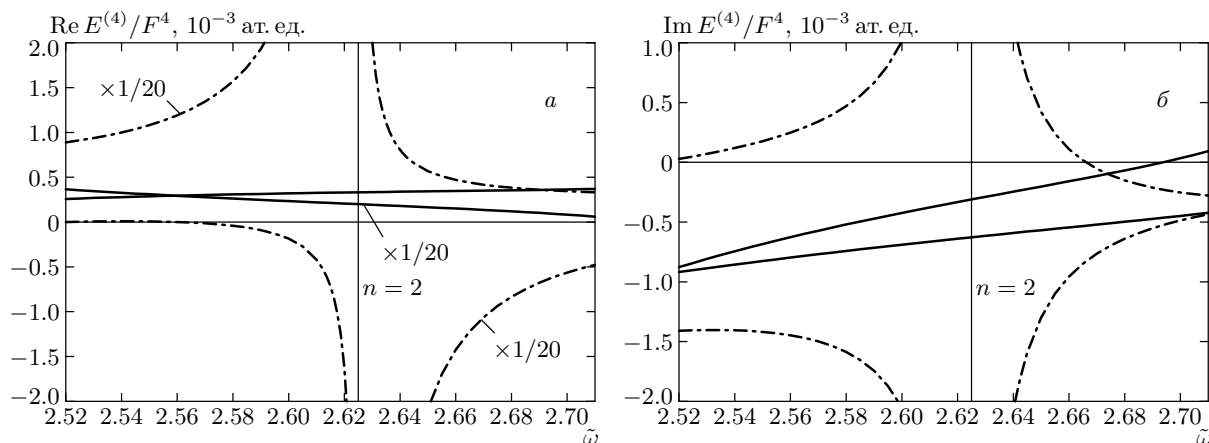


Рис. 9. Вещественная (а) и мнимая (б) части поправки четвертого порядка $E^{(4)}/F^4$ для нечетных состояний с $n = 5$, $m = 0$ в надпороговой области частот линейно поляризованного поля с учетом (сплошные линии) и без учета (штрих-пунктирные) примешивания резонансного состояния $|2s\rangle$, $\tilde{\omega} = \omega/|E_n|$

ний, т. е. расчет проводился до тех значений интенсивности поля, при которых вклад членов порядка F^4 оставался в несколько раз меньше вклада членов порядка F^2 . Для сравнения на рис. 11 представлена дисперсионная зависимость ДГП изолированного состояния $|n = 5, l = 4, m = 4\rangle$ в линейно поляризованном поле.

В целом численные расчеты для возбужденных состояний показывают, что поведение γ с ростом n существенно зависит от области частот: при малых ω ДГП быстро возрастает с ростом n , подобно статическому случаю, так что вклад $E^{(4)}$ в ΔE становится более существенным. Наиболее существенной роль поправок четвертого порядка оказывается

вблизи тех значений ω , при которых поляризуемость α обращается в нуль, и вблизи двухфотонных резонансов, которые имеются у $E^{(4)}$ и отсутствуют у $E^{(2)}$. За порогом однофотонной ионизации и вне области резонансов «вниз» величина γ с ростом n монотонно и быстро убывает и роль поправок порядка F^4 к штарковскому сдвигу и расщеплению уровней незначительна. Однако при $\omega > |E_n|$ наибольший интерес представляют мнимые части α и γ .

3.2. Поправки к вероятности фотоэффекта в сильном световом поле

При надпороговых частотах у поправки ΔE к квазиэнергии появляется мнимая часть, определяю-

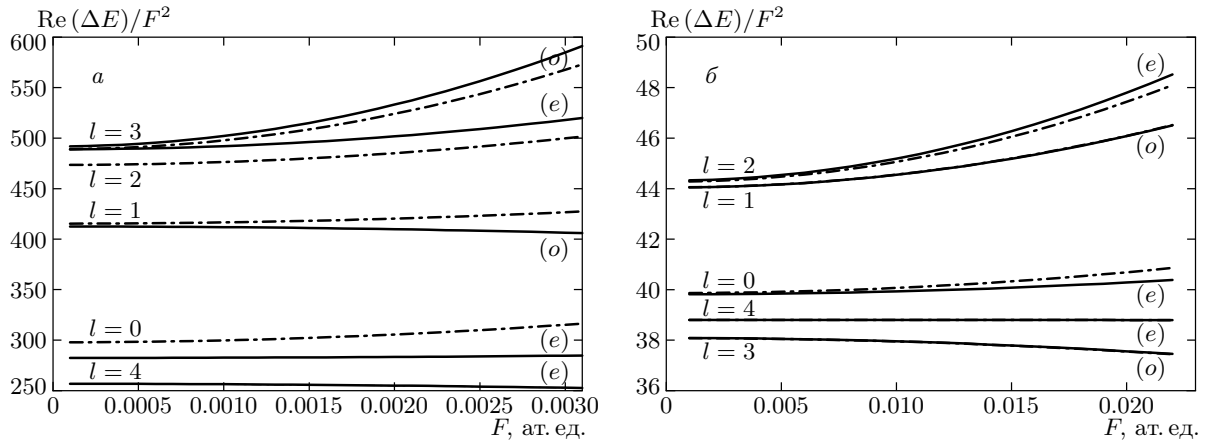


Рис. 10. Зависимость сдвига уровней с $n = 5, m = 0$ от амплитуды F линейно поляризованного поля с учетом (сплошные линии) и без учета (штрих-пунктирные) вырождения по l . Частота поля $\omega = 1.5|E_n|$ (а), $4|E_n|$ (б). Символами (e) и (o) отмечены четные и нечетные уровни

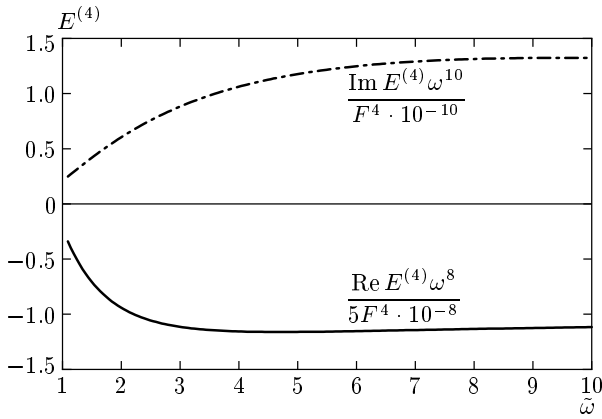


Рис. 11. Дисперсионная зависимость поправки четвертого порядка $E^{(4)}$ для состояния $|n = 5, l = 4, m = 4\rangle$ в линейно поляризованном поле, $\tilde{\omega} = \omega/|E_n|$

щая ионизационное уширение Γ изолированного или вырожденного уровня

$$\Gamma = -2 \operatorname{Im} \Delta E.$$

В частотном интервале $|E_n|/2 < \omega < |E_n|$ поляризуемость вещественна и мнимая часть поправки $\Delta E = E^{(2)} + E^{(4)}$ определяется мнимой частью ДГП. Непосредственный расчет $\operatorname{Im} \gamma$ основан на использовании известного соотношения (символ $V.p.$ обозначает главное значение интеграла)

$$\frac{1}{x - i0} = V.p. \left(\frac{1}{x} \right) + i\pi\delta(x) \quad (38)$$

для преобразования интегрального слагаемого в спектральном разложении функции Грина (30) с положительной энергией $E_n + 2\omega$. В случае изолированных состояний, вычисляя $\operatorname{Im} R_{l_1 l_2 l_3}^{l_1 l_2 l_3}(E_n + \omega, E_n + 2\omega, E_n + \omega)$ с помощью (38), легко получить явное выражение $\operatorname{Im} \gamma$ в виде комбинации произведений двухфотонных радиальных матричных элементов переходов в непрерывный спектр

$$\begin{aligned} & |A_{l_1 l_2}^{(2)}|^2, \quad 2 \operatorname{Re}(A_{l_1+1, l}^{(2)*} A_{l-1, l}^{(2)}), \\ & A_{l_1 l_2}^{(2)} = \langle E_n + 2\omega, l_2 | \hat{D}(l_2, l_1) \times \\ & \times g_{l_1}(E_n + \omega) \hat{D}(l_1, l) |nl\rangle, \\ & l_1 = l \pm 1, \quad l_2 = l_1 \pm 1. \end{aligned} \quad (39)$$

В результате, как это следует и из общих соображений, мнимая часть $E^{(4)}$ выражается через вероятность двухфотонной ионизации $W^{(2)}$:

$$W^{(2)} = -2 \operatorname{Im} E^{(4)} = \frac{1}{4} \operatorname{Im} \gamma F^4. \quad (40)$$

При $\omega > |E_n|$ открывается канал однофотонной ионизации, вероятность $W^{(1)}$ которой в низшем порядке теории возмущений определяется мнимой частью ДП:

$$W^{(1)} = -2 \operatorname{Im} E^{(2)} = \frac{1}{2} \operatorname{Im} \alpha F^2. \quad (41)$$

В этой области частот $\operatorname{Im} \gamma$ обусловлена наличием мнимой части не только у функции Грина

$g_L(E_n + 2\omega)$, но и у $g_L(E_n + \omega)$. Соответственно, в $\text{Im } E^{(4)}$ появляются дополнительные члены от матричных элементов $R_{l_1 l_2 l_3}^{l_1}(\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2, \mathcal{E}_3)$ с энергией $\mathcal{E}_1 = E_n + \omega$ или/и $\mathcal{E}_3 = E_n + \omega$:

$$\begin{aligned} \text{а) } & 2 \text{Re}(A_{l_1}^{(1)*} A_{l_1 l_2 l_3}^{(3)}(\omega, 2\omega)), \\ \text{б) } & 2 \text{Re}(A_{l_1}^{(1)*} A_{l_1 l_2 l_3}^{(3)}(\omega, 0)), \\ \text{в) } & 2 \text{Re}(A_{l_1}^{(1)*} A_{l_1 l_2 l_3}^{(3)}(-\omega, 0)), \end{aligned} \quad (42)$$

где

$$A_{l_1}^{(1)} = \langle E_n + \omega, l_1 | \hat{D}(l_1, l) | nl \rangle,$$

$$\begin{aligned} A_{l_1 l_2 l_3}^{(3)}(\omega_1, \omega_2) &= \langle E_n + \omega, l_1 | \hat{D}(l_1, l_2) g_{l_2}(E_n + \omega_2) \times \\ &\times \hat{D}(l_2, l_3) g_{l_3}(E_n + \omega_1) \hat{D}(l_3, l) | nl \rangle, \end{aligned}$$

$$l_1 = l \pm 1, \quad l_2 = l_1 \pm 1, \quad l_3 = l_2 \pm 1 = l \pm 1,$$

которые описывают интерференцию амплитуд обычного фотоэффекта и трехфотонного процесса с переизлучением фотонов (по схеме $E_n + 2\omega - \omega = E_n + \omega$). Таким образом, $\text{Im } E^{(4)}$ в указанной области частот представляет собой сумму двух частей:

$$-2 \text{Im } E^{(4)} = W^{(2)} + W^{(1-3)}. \quad (43)$$

Помимо (42), слагаемое $W^{(1-3)}$ включает также члены, происходящие от мнимой части произведений $R^{(1)} R^{(2)}$ (так называемые «недиаграммные» слагаемые). Вероятность однофотонной ионизации (в результате которой появляются фотоэлектроны с энергией $E_n + \omega$), вычисленная с учетом членов порядка F^4 , определяется суммой

$$W_i = W^{(1)} + W^{(1-3)}. \quad (44)$$

Непосредственный расчет поправки $W^{(1-3)}$ методами нестационарной теории возмущений представляет значительные трудности, в частности, из-за необходимости вычисления матричных элементов трехфотонных переходов в континуум $A_{l_1 l_2 l_3}^{(3)}(\omega, 2\omega)$ и $A_{l_1 l_2 l_3}^{(3)}(\omega, 0)$. В этих матричных элементах энергия первой функции Грина совпадает с энергией электрона в конечном состоянии, что приводит к их расходимости. Как указано в работах [16, 27], такие расходимости не могут быть устранены регуляризацией интегралов и компенсируются лишь в окончательном выражении для $W^{(1-3)}$. Корректные вычисления по указанной схеме (которые позволили бы най-

ти поправки не только к полной вероятности фотоэффекта, но и к угловому распределению фотоэлектронов) до настоящего времени не проведены, однако в нашем подходе $W^{(1-3)}$ можно найти из (43), вычитая из мнимой части ДГП вероятность двухфотонной ионизации $W^{(2)}$ (расчет которой не представляет трудностей; см., например, [28]). Заметим, что в отличие от вероятности $W^{(2)}$, которая положительна по самому своему смыслу, поправка $W^{(1-3)}$, обусловленная переизлучением фотонов, а вместе с ней и вся величина $\text{Im } E^{(4)}$ в зависимости от ω могут быть как положительными, так и отрицательными. Как показывают численные расчеты (см. рис. 1, 4, 12, 13 и таблицу), обе возможности действительно реализуются.

Интерес к поправочному члену $W^{(1-3)}$, определяющему отклонение от линейной зависимости вероятности фотоэффекта $W^{(1)}$ от интенсивности с ростом F , обусловлен активно исследуемым в последние годы эффектом стабилизации атома в сильном поле (см. обзоры [29]). Эффект стабилизации состоит в замедлении роста (или даже убывании) вероятности ионизации с ростом напряженности поля F . При отрицательной (для данной частоты) величине $W^{(1-3)}$ такое замедление, очевидно, будет наблюдаться при переходе от малой напряженности поля к умеренной, что можно рассматривать как начало стабилизации. Поэтому интервал интенсивностей, соответствующих началу стабилизации, можно оценить, рассчитав поправки высших порядков теории возмущений по F к обычному сечению фотоэффекта (естественно, такие оценки справедливы лишь для полей $F < F_r$, где F_r определяет радиус сходимости теории возмущений для комплексной квазиэнергии). В работах [14, 15] эффект стабилизации в линейно поляризованном лазерном поле наблюдался экспериментально для циркулярного (с максимальными возможными при данном n значениями m и l) состояния $|n = 5, l = 4, m = 4\rangle$ атома Ne, которое близко к водородоподобному ввиду малости квантовых дефектов для состояний с $l = 4$. Как отмечено в разд. 2.1, состояния с $m = l = n - 1$ являются изолированными, поэтому вероятность ионизации для них может быть рассчитана по стандартным формулам теории возмущений без учета вырождения. Учитывая, что для таких состояний в линейно поляризованном поле запрещены переходы в состояния с орбитальным моментом, меньшим l , приходим к следующим выражениям:

$$W^{(1)} = \frac{\pi F^2}{2\omega^2} \frac{1}{2l+3} |A_{l+1}^{(1)}|^2, \quad (45)$$

Вероятности однофотонной ($W^{(1)}$) и двухфотонной ($W^{(2)}$) ионизации и линейная по интенсивности поправка к $W^{(1)}$ ($W^{(1-3)}$) для ряда состояний с главными квантовыми числами $n = 3, 5$. I_{thr} — интенсивность, соответствующая порогу стабилизации

n	m	l	ω , эВ	$W^{(1)}/F^2$, ат. ед.	$W^{(2)}/F^4$, ат. ед.	$W^{(1-3)}/F^4$, ат. ед.	I_{thr} , Вт/см ²
3	0	1	5	1.4254	65.410	-100.10	$2.570 \cdot 10^{14}$
3	1	1	5	0.9130	27.058	-60.811	$2.710 \cdot 10^{14}$
3	1	2	5	0.2624	3.3032	14.305	—
3	2	2	5	0.1577	1.6677	-11.966	$2.379 \cdot 10^{14}$
5	2	3	2	1.0034	205.10	220.13	—
5	3	3	2	0.5740	95.591	-605.95	$1.710 \cdot 10^{13}$
5	3	4	2	0.1019	8.0334	-32.508	$5.659 \cdot 10^{13}$
5	4	4	2	0.0568	3.7133	-47.731	$2.148 \cdot 10^{13}$

$$\begin{aligned}
 W^{(1-3)} &= \frac{F^4}{4\omega^4} \frac{\pi}{(2l+3)^2} \times \\
 &\times \left\{ \text{Re} \left[A_{l+1}^{(1)*} A_{l+1,l,l+1}^{(3)}(\omega, 0) + A_{l+1}^{(1)*} A_{l+1,l,l+1}^{(3)}(-\omega, 0) + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + A_{l+1}^{(1)*} A_{l+1,l,l+1}^{(3)}(\omega, 2\omega) + \frac{4(l+1)}{2l+5} \times \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. \times (A_{l+1}^{(1)*} A_{l+1,l+2,l+1}^{(3)}(\omega, 0) + \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + A_{l+1}^{(1)*} A_{l+1,l+2,l+1}^{(3)}(-\omega, 0) + A_{l+1}^{(1)*} A_{l+1,l+2,l+1}^{(3)}(\omega, 2\omega) \right] - \right. \\
 &\quad \left. - \frac{1}{2\pi} \text{Im} \left[(R_{ll}^{l+1(1)}(-\omega) + R_{ll}^{l+1(1)}(\omega)) \times \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. \times (R_{ll}^{l+1(2)}(-\omega) + R_{ll}^{l+1(2)}(\omega)) \right) \right]. \quad (46)
 \end{aligned}$$

Обратим внимание, что формулы (45), (46) справедливы не только для состояний с $m = l = n - 1$, но и для состояний с $m = l = n - 2$.

В работе [30] эксперимент [15] обсуждается в терминах «continuum-interference stabilization», что в рамках теории возмущений можно рассматривать как учет «диаграммных» слагаемых вида а) из (42) в поправке $W^{(1-3)}$ к вероятности фотоэффекта. Матричный элемент $A_{l_1 l_2 l_3}^{(3)}(\omega, 2\omega)$ при этом оценивался с помощью «полусного» приближения [31], при котором в обеих функциях Грина в амплитуде $A_{l_1 l_2 l_3}^{(3)}(\omega, 2\omega)$ учитывается только мнимая часть, соответствующая члену с δ -функцией в правой части (38). В полусном приближении амплитуда факторизуется на однофотонные множители, что значительно упрощает ее вычисление (в частности, при таком подходе не возникают упоминавшиеся выше

расходимости). Дополнительное упрощение, использованное в работе [30], состоит в учете только одного матричного элемента вида а) в (42) с $l_1 = l + 1$, $l_2 = l + 2$ из двух, разрешенных правилами отбора при линейной поляризации. Его обоснованием служит правило Бете, согласно которому именно этот матричный элемент дает наибольший вклад в полную амплитуду. В результате для вероятности W_i получается следующее оценочное выражение

$$\begin{aligned}
 W_i &= W^{(1)} \left[1 - \left(\frac{\pi F}{\omega} \right)^2 \frac{2(l+1)}{(2l+5)(2l+3)} \times \right. \\
 &\quad \left. \times |\langle E_{n+2\omega, l+1} | D(l+1, l+2) | E_{n+\omega, l+2} \rangle|^2 \right]. \quad (47)
 \end{aligned}$$

Эта оценка привлекает своей простотой, однако установить ее корректность можно лишь сравнением с точным расчетом. Существенным отличием оценки (47) от точного выражения, даваемого суммой (45) и (46), является ее знакоопределенность: согласно (47), поправка $W^{(1-3)}$ всегда отрицательна, т. е. уменьшает вероятность ионизации, в то время как из общей формулы (46) этого не следует.

Формула (44) справедлива лишь для значений F , при которых поправочное слагаемое является малым, однако для оценок можно экстраполировать ее на область значений F , при которых первый и второй член в (44) имеют одинаковый порядок величины. Поскольку $W^{(1)} \sim F^2$, а $W^{(1-3)} \sim F^4$, то (44) как функция интенсивности волны представляет собой параболу, которая при $W^{(1-3)} < 0$ имеет конечный максимум. Значение F^2 , при котором W_i

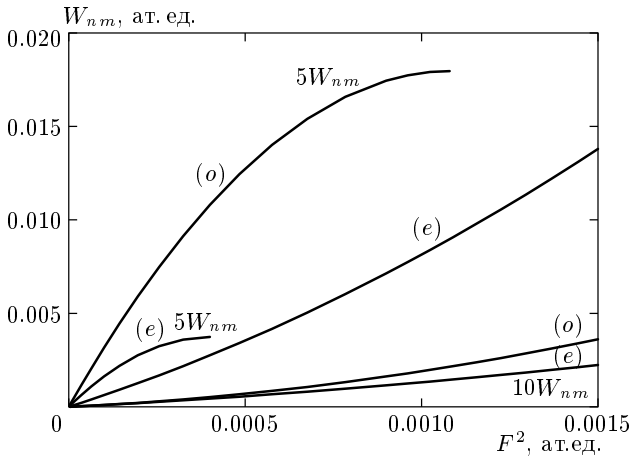


Рис. 12. Зависимость от F^2 полной вероятности ионизации $W_{nm} = -2 \operatorname{Im} \{E^{(2)} + E^{(4)}\} = W^{(1)} + W^{(1-3)} + W^{(2)}$ смешанных по орбитальному моменту l состояний $|n = 5, m = 0\rangle$ в линейно поляризованном поле с частотой $\omega = 4|E_{n=5}| = 2.168$ эВ. Символами (e) и (o) указаны четные и нечетные состояния

достигает максимума, рассматривается в работе [30] как порог стабилизации I_{thr} :

$$I_{thr} = \frac{W^{(1-3)}}{2W^{(1)}}.$$

В отличие от рассмотрения в [30], при расчете I_{thr} мы не учитываем формы лазерного импульса, поэтому численно наше значение I_{thr} в $\sqrt{2}$ меньше, чем в [30, формула (8)]. Результаты точных численных расчетов представлены на рис. 12, 13 и в таблице. На рис. 12 показана зависимость вероятности ионизации W_{nm} от F^2 при частоте $\omega = 4|E_{n=5}| = 2.168$ эВ для каждого из пяти возможных состояний с $n = 5, m = 0$. Как видно, два из пяти $|n = 5, m = 0\rangle$ -состояний демонстрируют тенденцию к стабилизации, поскольку для них полная вероятность ионизации с ростом F растет медленнее, чем F^2 . На рис. 13 показаны частотные зависимости вероятностей фотоионизации $W^{(1)}$, двухфотонной ионизации $W^{(2)}$ и поправки $W^{(1-3)}$, связанной с переизлучением фотонов, а также полной поправки (43) в линейно поляризованной волне. Из рисунков видно, что в припороговой области $W^{(2)}$ и $W^{(1-3)}$ имеют одинаковый порядок величины, а с ростом ω вклад $W^{(1-3)}$ в $\operatorname{Im} E^{(4)}$ начинает доминировать. Обратим внимание на различное поведение $W^{(1-3)}$ в случае основного $1s$ -состояния и возбужденных циркулярных состояний с $m = l = n - 1$ и $m = l = n - 2$, в частности, $|n = 5, l = 4, m = 4\rangle$: если

в последнем случае величина $W^{(1-3)}$ всюду отрицательна, что указывает на тенденцию к стабилизации при любой надпороговой частоте, то для основного состояния $W^{(1-3)} > 0$ в припороговой области частот.

В таблице приведены значения $F^{-2}W^{(1)}$, $F^{-4}W^{(1-3)}$ и I_{thr} для частот $\omega = 0.0735 = 2$ эВ и $\omega = 0.1838 = 5$ эВ для некоторых изолированных состояний. Сравнивая $I_{thr} = 2.1 \cdot 10^{13}$ ВТ/см² для состояния $|n = 5, l = 4, m = 4\rangle$ при частоте $\omega = 3.675|E_5| = 2$ эВ из таблицы и значение $I_{thr} = 2.8 \cdot 10^{14}$ ВТ/см², соответствующее полученному в работе [30], видим, что результаты различаются на порядок. Аналогичная ситуация имеет место для состояния $|n = 3, l = 2, m = 2\rangle$ при частоте $\omega = 3.308|E_3| = 5$ эВ: $I_{thr} = 2.4 \cdot 10^{14}$ ВТ/см² по нашему расчету и $I_{thr} = 1.4 \cdot 10^{15}$ ВТ/см² согласно [30]. В случае $1s$ -состояния, для которого оценка (47) тоже могла бы быть применимой, при частотах вблизи порога ионизации, она, как отмечено выше, даже качественно неверно передает зависимость вероятности однофотонной ионизации W_{1s} от напряженности поля.

Таким образом, при численном анализе амплитуд многофотонных процессов, описываемых матричными элементами высших порядков теории возмущений, соответствующими виртуальным многофотонным переходам в континуум (т.е. содержащими две или более функций Грина с положительными энергиями \mathcal{E}_i), следует весьма осторожно подходить к различного рода оценкам, основанным на учете конечного числа промежуточных состояний дискретного спектра или узкой области состояний континуума, поскольку численные значения указанных амплитуд весьма существенно зависят как от интерференции (взаимной компенсации) парциальных радиальных матричных элементов, так и от квантовых чисел исходного и конечного состояний и от энергий \mathcal{E}_i промежуточных состояний. Использование обобщенного штурмовского разложения кулоновской функции Грина позволяет избежать интегрирования по виртуальным состояниям в континууме при расчете амплитуд многофотонных переходов в области надпороговых частот и свести задачу к расчету хорошо сходящихся рядов гипергеометрического типа. Таким образом, изложенная техника эквивалентна аналитическому продолжению штурмовских рядов для составных радиальных матричных элементов на область положительных энергий функций Грина, где стандартные штурмовские ряды расходятся. Представленные результаты

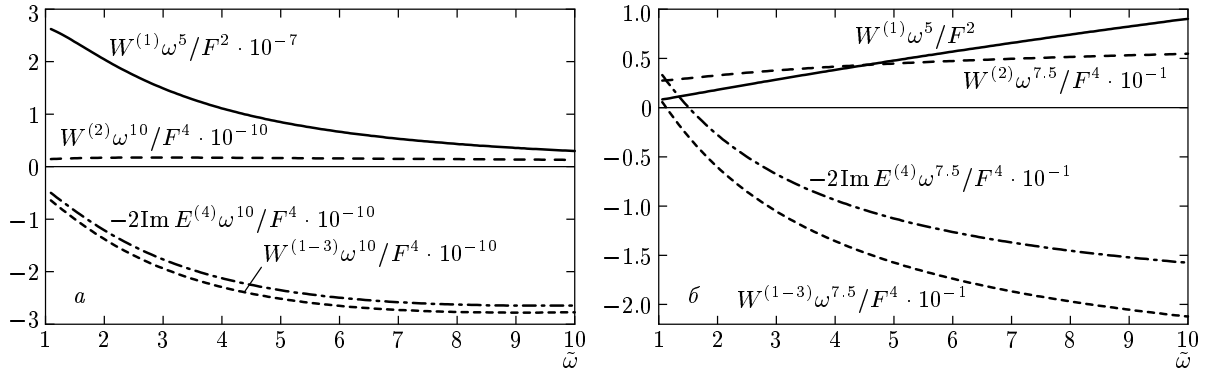


Рис. 13. Вероятности однофотонной ($W^{(1)}$) и двухфотонной ($W^{(2)}$) ионизаций, поправка к вероятности однофотонной ионизации ($W^{(1-3)}$) и мнимая часть поправки четвертого порядка ($-2 \text{Im } E^{(4)} = W^{(2)} + W^{(1-3)}$) для состояния $|n = 5, l = 4, m = 4\rangle$ (а), для 1s-состояния (б). Все величины даны в ат. ед., $\tilde{\omega} = \omega/|E_n|$

показывают, что предлагаемый метод позволяет проводить корректные вычисления радиальных матричных элементов высших порядков в широком диапазоне частот, вплоть до частот, в десятки и сотни раз превышающих потенциал ионизации $|E_n|$, а также для высоковозбужденных состояний.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке CRDF и Минобразования РФ (грант VZ-010-0), а также Конкурсного центра Минобразования РФ (грант Е00-3.2-515).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Изложим схему расчета матричных элементов четвертого порядка (23) с использованием обобщенного штурмовского разложения кулоновской функции Грина (33). Непосредственная подстановка (33) в (23) приводит к шестикратному ряду с шестью свободными параметрами $\alpha_{1-3}, \alpha'_{1-3}$:

$$R_{l'l'}^{l_1 l_2 l_3}(\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2, \mathcal{E}_3) = \langle nl' | \hat{D}(l, l_3) \times \\ \times g_{l_3}(\mathcal{E}_3, \alpha_3, \alpha'_3) \hat{D}(l_3, l_2) g_{l_2}(\mathcal{E}_2, \alpha_2, \alpha'_2) \times \\ \times \hat{D}(l_2, l_1) g_{l_1}(\mathcal{E}_1, \alpha_1, \alpha'_1) \hat{D}(l_1, l) | nl \rangle. \quad (\text{П.1})$$

При следующих значениях свободных параметров:

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha'_2 = \alpha'_3, \quad \alpha_3 = \alpha'_1 = n/Z, \quad (\text{П.2})$$

четыре ряда из шести обрываются вследствие возникающей ортогональности полиномов Лагерра [32]:

$$\int_0^\infty e^{-\rho} \rho^\beta L_n^\beta(\rho) L_m^\beta(\rho) d\rho = \frac{\Gamma(\beta + n + 1)}{n!} \delta_{mn}. \quad (\text{П.3})$$

Действительно, запишем результат действия операторов \hat{D} на радиальные функции R_{nl} в специальном виде:

$$\hat{D}(l+1, l) R_{nl}(r) = \frac{2Z^{5/2}}{n^3 [(d)_{2l+1}]^{1/2}} \times \\ \times \rho^l e^{-\rho/2} (L_{d-3}^{2l+3}(\rho) - L_{d-1}^{2l+3}(\rho)), \\ \hat{D}(l+1, l+2) R_{nl+2}(r) = \frac{2Z^{5/2}}{n^3 [(d-3)_{2l+5}]^{1/2}} \times \quad (\text{П.4}) \\ \times \rho^l e^{-\rho/2} ((s+1)(s+2)L_{d-3}^{2l+3}(\rho) - \\ - (d-1)(d-2)L_{d-1}^{2l+3}(\rho)),$$

где

$$d = n - l, \quad s = n + l, \quad \rho = 2Zr/n.$$

Поскольку штурмовская функция S_{kl} имеет такую же зависимость от координаты r , как и $R_{nl}(r)$, то $\hat{D}(l', l) S_{kl}(2Zr/n)$ можно записать аналогично (П.4). После этого все интегралы в (П.1) сводятся к (П.3). В результате матричный элемент $R_{l'l'}^{l_1 l_2 l_3}$ выражается через линейную комбинацию 16 двукратных рядов вида

$$\sum_{k, k'=0}^\infty g_{kk'}^{l_2}(\nu_2; \alpha, \alpha) A_{k'}(n, \nu_1, \nu_2, \alpha) B_k(n, \nu_2, \nu_3, \alpha) \equiv \\ \equiv \sum_{k, k'=0}^\infty a_{kk'}. \quad (\text{П.5})$$

Укажем, что к комбинации рядов такого же вида может быть сведен и матричный элемент четвертого порядка при использовании \mathbf{F} - \mathbf{r} -представления (10) для оператора V . В этом случае необходимые преобразования удастся провести с использованием рекуррентного соотношения для полиномов Лагерра (см. [32]):

$$L_n^{\alpha-1}(x) = L_n^\alpha(x) - L_{n-1}^\alpha(x),$$

однако соответствующее выражение для $R_{l_1 l_2 l_3}$ получается значительно более громоздким и содержит в общем случае уже 125 двукратных рядов вида (П.5).

Подходящим выбором оставшегося свободного параметра $\alpha_1 \equiv \alpha$ удается обеспечить сходимость рядов $\sum a_{kk'}$ в (П.5) при положительных энергиях функций Грина и ускорить их сходимость при отрицательных энергиях. Для иллюстрации приведем здесь асимптотики общего члена ряда (П.5) (которые можно найти, используя результаты статьи [22]) на краях и на диагонали матрицы $a_{kk'}$:

1) при фиксированном k и $k' \rightarrow \infty$:

$$a_{kk'} \sim \left(\frac{\alpha - \nu_2}{\alpha + \nu_2} \right)^{k'} \times \left[C_1 (k')^n \left(\frac{\alpha - n}{\alpha + n} \right)^{k'} + C_2 (k')^{\nu_1} \left(\frac{\alpha - \nu_1}{\alpha + \nu_1} \right)^{k'} \right], \quad (\text{П.6})$$

2) при фиксированном k' и $k \rightarrow \infty$:

$$a_{kk'} \sim \left(\frac{\alpha - \nu_2}{\alpha + \nu_2} \right)^k \times \left[C_3 k^n \left(\frac{\alpha - n}{\alpha + n} \right)^k + C_4 k^{\nu_3} \left(\frac{\alpha - \nu_3}{\alpha + \nu_3} \right)^k \right], \quad (\text{П.7})$$

3) при $k' = k \rightarrow \infty$:

$$a_{kk'} \sim \left[C_1 k^n \left(\frac{\alpha - n}{\alpha + n} \right)^k + C_2 k^{\nu_1} \left(\frac{\alpha - \nu_1}{\alpha + \nu_1} \right)^k \right] \times \left[C_3 k^n \left(\frac{\alpha - n}{\alpha + n} \right)^k + C_4 k^{\nu_3} \left(\frac{\alpha - \nu_3}{\alpha + \nu_3} \right)^k \right] \times \left[C_5 k^{2\nu_2} \left(\frac{\alpha - \nu_2}{\alpha + \nu_2} \right)^{2k} + C_6 \right]. \quad (\text{П.8})$$

Здесь C_i — константы, не зависящие от k, k' . Из (П.6)–(П.8) следует, что, выбирая параметр α комплексным с $\text{Re } \alpha > 0$ и $\text{Im } \alpha > 0$, мы обеспечиваем сходимость ряда как в подпороговом ($\nu_i > 0$), так и в надпороговом ($\text{Im } \nu_i > 0$) случае, поскольку все основания степеней с показателями k, k' оказываются меньшими единицы по модулю. В то же время использование в (П.1) стандартного штурмовского разложения $g_{l_2}(\alpha' = \alpha = \nu_2)$ приводит к расходящемуся ряду.

Относительно численного расчета ядра $g_{kk'}^l$ разложения кулоновской функции Грина (33) обратим внимание, что функция Аппеля в первом слагаемом (34) имеет целый отрицательный параметр $-k'$

и эквивалентна линейной комбинации $k'+1$ не сводящихся к полиномам гипергеометрических функций ${}_2F_1$, а функция Аппеля в выражении для $\Phi_p^{lk'}$ есть конечный полином по обоим аргументам. Следовательно, $g_{kk'}^l$ содержит две существенно различающиеся группы членов: полные (неполиномиальные) гипергеометрические функции ${}_2F_1$ и произведение гипергеометрических полиномов одной переменной (${}_2F_1$) и двух переменных (F_1). Однако для практических расчетов использование такого представления $g_{kk'}^l$ часто затруднительно из-за значительной компенсации членов в линейных комбинациях для функции F_1 ; в большинстве случаев оказывается более удобным вычислять функцию Аппеля через ее представление в виде однократного интеграла [33].

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. П. Рапорт, Б. А. Зон, Н. Л. Манаков, *Теория многофотонных процессов в атомах*, Атомиздат, Москва (1978).
2. Н. Л. Манаков, С. И. Мармо, А. Г. Файнштейн, *ЖЭТФ* **91**, 51 (1986).
3. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1989).
4. N. L. Manakov, M. V. Frolov, A. F. Starace, and I. I. Fabrikant, *J. Phys. B* **33**, R141 (2000).
5. N. L. Manakov, V. D. Ovsiannikov, and L. P. Rapoport, *Phys. Rep.* **141**, 319 (1986).
6. A. A. Krylovetsky, N. L. Manakov, and S. I. Marmo, *Laser Phys.* **7**, 817 (1997).
7. А. А. Крыловецкий, Н. Л. Манаков, С. И. Мармо, *ЖЭТФ* **119**, 45 (2001).
8. Н. Л. Манаков, М. А. Преображенский, Л. П. Рапорт, *Опт. и спектр.* **35**, 24 (1973).
9. M. Pont, R. M. Potvliege, R. Shakeshaft, and Z.-J. Tang, *Phys. Rev. A* **45**, 8235 (1992).
10. L. Pan, K. T. Teilor, and C. W. Clark, *Phys. Rev. Lett.* **61**, 2673 (1988).
11. R. Shakeshaft, R. M. Potvliege, M. Dörr, and W. E. Cooke, *Phys. Rev. A* **42**, 1656 (1990).
12. N. L. Manakov, A. Maquet, S. I. Marmo, and C. Szymanowski, *Phys. Lett. A* **237**, 234 (1998).

13. P. R. Jones, D. Schumacher, and P. Bucksbaum, *Phys. Rev. A* **47**, R49 (1993); M. P. de Boer, J. H. Hoogenraad, R. B. Vrijen, L. D. Noordam, and H. G. Muller, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 3263 (1993).
14. M. P. de Boer, J. H. Hoogenraad, R. B. Vrijen, R. C. Constantinescu, L. D. Noordam, and H. G. Muller, *Phys. Rev. A* **50**, 4085 (1994).
15. N. J. van Drutten, R. C. Constantinescu, J. M. Schins, H. Nieuwenhuize, and H. G. Muller, *Phys. Rev. A* **55**, 622 (1997).
16. Н. Л. Манаков, М. А. Преображенский, Л. П. Рапорт, А. Г. Файнштейн, *ЖЭТФ* **75**, 1243 (1978).
17. N. Moiseyev, *Phys. Rep.* **302**, 211 (1998).
18. V. D. Ovsiannikov and S. V. Goosev, *Phys. Scripta* **57**, 506 (1998).
19. Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский, *Квантовая теория углового момента*, Наука, Ленинград (1975).
20. V. A. Davydkin and V. D. Ovsiannikov, *J. Phys. B* **19**, 2071 (1986).
21. L. H. Hostler, *J. Math. Phys.* **11**, 2966 (1970).
22. Н. Л. Манаков, С. И. Мармо, А. Г. Файнштейн, *ТМФ* **59**, 49 (1984).
23. E. J. Heller, *Phys. Rev. A* **12**, 1222 (1975).
24. D. P. Shelton, *Phys. Rev. A* **36**, 3032 (1987).
25. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*, Наука, Москва (1971).
26. Н. Л. Манаков, В. А. Свиридов, А. Г. Файнштейн, *ЖЭТФ* **95**, 790 (1989).
27. M. Edwards and R. Shakeshaft, *Z. Phys. D* **8**, 51 (1988).
28. А. А. Крыловецкий, Н. Л. Манаков, С. И. Мармо, А. Ф. Старас, *ЖЭТФ* **122**, 1168 (2002).
29. M. Gavril, *J. Phys. B* **35**, R147 (2002); A. M. Popov, O. V. Tikhonova, and E. A. Volkova, *J. Phys. B* **36**, R125 (2003).
30. O. V. Tikhonova, A. M. Popov, and M. V. Fedorov, *Phys. Rev. A* **65**, 053404 (2002).
31. Z. Deng and J. H. Eberly, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1810 (1984); *J. Opt. Soc. Amer. B* **2**, 486 (1985).
32. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. 2, Наука, Москва (1974).
33. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. 1, Наука, Москва (1973).