

539.184.3

ОТРИЦАТЕЛЬНЫЙ ИОН В СИЛЬНОМ СВЕТОВОМ ПОЛЕ

П. А. Головинский, И. Ю. Киян

(Институт общей физики АН СССР)

СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение	97
2. Теория возмущений в приближении независимых частиц	100
2.1. Основные соотношения теории возмущений. 2.2. Многофотонные матричные элементы в одноэлектронном приближении. 2.3. Динамическая поляризуемость отрицательных ионов. 2.4. Многофотонный отрыв электронов от отрицательных ионов. Расчеты по теории возмущений 2.5. Резюме.	
3. Описание нелинейного разрушения отрицательных ионов в одноэлектронном приближении, выходящее за рамки теории возмущений	111
3.1. Квазиэнергетический подход в модели δ -потенциала. 3.2. Квазиклассическое приближение. 3.3. Ион, «одетый полем». Определение квазиэнергий методом комплексного вращения координат. 3.4. Численное моделирование нелинейного фотоотрыва электронов от отрицательных ионов. 3.5. Резюме.	
4. Корреляционное взаимодействие в нелинейных процессах	121
4.1. Теория возмущений по внешнему полю и корреляционному взаимодействию. 4.2. Приближение случайных фаз в применении к многофотонным процессам. 4.3. Поляризационное приближение. 4.4. Резюме.	
5. Заключение	135
Примечания к тексту	138
Список литературы	138

1. Введение. К настоящему времени, благодаря интенсивному развитию лазеров, появилась возможность практического исследования в широком диапазоне частот излучения нелинейного взаимодействия атомных систем с электромагнитным излучением. Результатами такого взаимодействия может быть, в частности, нелинейное рассеяние света и многофотонная ионизация.

Имеются обширные теоретические и экспериментальные исследования нелинейного взаимодействия атомов с сильным световым полем [1–3]. Настоящий обзор посвящен нелинейным процессам в отрицательных ионах, которые исследованы значительно менее подробно.

Следует отметить, что энергия сродства атома к электрону всегда меньше его первого потенциала ионизации. Следовательно, для излучения лазера с определенной частотой процесс нелинейного фотораспада отрицательного иона всегда имеет меньший порядок нелинейности, чем процесс ионизации атома. В табл. I приведены степени нелинейности фотораспада различных отрицательных ионов для частот излучения различных лазеров. Указанные в табл. I энергии сродства взяты из работы [4].

Остановимся сравнительно кратко на особенностях строения отрицательных ионов. Принципиальное отличие отрицательных ионов от атомов заключается в строении внешней электронной оболочки, которая может содержать s-, p- или d-слабосвязанный электрон. При переходе к внутренним оболочкам отличия отрицательного иона от атома стираются. Поэтому всюду, где это не будет нарушать целостности изложе-

ния, мы будем иметь в виду как отрицательные ионы, так и атомы. Всюду используется атомная система единиц, в которой $m = e = \hbar = 1$.

Сам факт связи присоединенного электрона в отрицательном ионе обусловлен главным образом межэлектронным корреляционным взаимодействием [5]. Такого рода взаимодействие, определяющее ту часть межэлектронного взаимодействия, которая не учитывается в стационарном приближении Хартри — Фока, является очень существенным при описании строения отрицательных ионов. Здесь уместно подчеркнуть,

Таблица I. Степени нелинейности фотораспада k различных отрицательных ионов для частот излучения различных лазеров (S — энергия сродства к электрону [4])

Отрицательный ион	S , эВ	k		
		Рубиновый лазер	Неодимовый лазер	CO ₂ -лазер
Cs ⁻	0,47	1	1	4
Rb ⁻	0,49	1	1	5
K ⁻	0,50	1	1	5
Na ⁻	0,54	1	1	5
Li ⁻	0,61	1	1	6
C ⁻	1,26	1	2	11
Si ⁻	1,39	1	2	12
O ⁻	1,46	1	2	13
S ⁻	2,08	2	2	18
I ⁻	3,06	2	3	26
Br ⁻	3,36	2	3	28
F ⁻	3,45	2	3	29
Cl ⁻	3,61	3	4	31

что все атомы, для которых энергия сродства к электрону положительная, имеют неполностью заполненную внешнюю подоболочку (так, связанных состояний у отрицательных ионов благородных газов не существует). Следовательно, присоединяемый электрон всегда попадает на открытую подоболочку атома. Мы не будем рассматривать, каким образом перераспределяется электронная плотность внешней подоболочки атома в процессе образования отрицательного иона. Но всегда справедливо то обстоятельство, что корреляционное взаимодействие в отрицательных ионах определяется не только взаимодействием электронов из разных подоболочек, но и взаимодействием электронов одной и той же подоболочки. Последнее является очень существенным, поскольку перекрытие электронных облаков электронов одной и той же подоболочки проявляется наиболее сильно.

Корреляционное взаимодействие, которое определяет характер притяжения электрона к атому, является короткодействующим, и его потенциал имеет асимптотический вид при $r \rightarrow \infty$ [6]

$$U(r) \sim -\frac{\alpha}{r^4}. \quad (1)$$

Короткодействующий характер взаимодействия приводит к тому, что практически все, кроме, возможно, нескольких первых возбужденных состояний, принадлежат непрерывному спектру, который в ряде случаев лишь слабо искажается за счет взаимодействия электрона с атомом. Короткодействующий характер взаимодействия позволяет применять широко известный в атомной физике метод потенциала нулевого радиуса действия (модельный δ -потенциал) для описания в одноэлектронном приближении строения отрицательных ионов с внешним s -электроном [7, 8]. Волновая функция связанного s -состояния в δ -потенциале

представляется в виде

$$\psi(r) = \frac{B}{r} e^{-\kappa r}, \quad (2)$$

где $E_0 = -\kappa^2/2$ — энергия связи, B — нормировочный коэффициент. При этом учет взаимодействия с δ -потенциалом эквивалентен вводу граничного условия

$$\left. \frac{d \ln(r\psi(r))}{dr} \right|_{r=0} = -\kappa. \quad (3)$$

Модель короткодействующего потенциала является, как мы далее покажем, весьма удобной для исследования общего характера взаимодействия отрицательных ионов с электромагнитным полем, и позволяет описать процесс взаимодействия в аналитическом виде. Однако для более полного описания процесса взаимодействия, необходимо в полной мере учитывать особенности строения того или иного отрицательного иона. Более того, как будет показано в разделе 4, при описании процесса взаимодействия атомной системы с электромагнитным полем существенным может быть также динамическое корреляционное взаимодействие, которое никак не может быть описано в рамках одночастичной модельной задачи.

Как следует из выше приведенного материала, основная трудность при расчетах энергий связи и при построении волновых функций электронов в отрицательных ионах состоит в точном учете корреляционного взаимодействия. В данном случае оно является более существенным, чем при расчетах различных процессов в атомах. Так, в рамках стационарного одноконfigurационного приближения Хартри — Фока, основанного на приближении независимых частиц, которое способно описывать основные параметры строения атомов, нельзя получить даже правильный знак энергии сродства атома к электрону [5]. Одним из более удачных одноэлектронных приближений к учету межэлектронного корреляционного взаимодействия является метод функционала локальной электронной плотности. Сущность этого метода заключается в том, что энергия системы из N электронов, помещенных во внешнее поле $v(\mathbf{r})$, является однозначным функционалом от электронной плотности $\rho(\mathbf{r})$ [9]:

$$E_v[\rho(\mathbf{r})] = T_s[\rho(\mathbf{r})] + \int v(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} + \frac{1}{2} \int \frac{\rho(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}' + E_{xc}[\rho(\mathbf{r})], \quad (4)$$

где первый член представляет кинетическую энергию невзаимодействующего электронного газа в основном состоянии, а последний член учитывает обменно-корреляционное взаимодействие. Для систем с медленно изменяющейся плотностью можно ввести приближение локальной плотности:

$$E_{xc}[\rho] = \int \epsilon_{xc}(\rho(\mathbf{r})) \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (5)$$

где $\epsilon_{xc}(\rho)$ — локальная обменно-корреляционная энергия на одну частицу в однородном электронном газе, имеющем плотность $\rho(\mathbf{r})$.

Метод функционала локальной электронной плотности является удобным в практическом применении ввиду локальности $\epsilon_{xc}(\rho)$ и, соответственно, потенциала электронов. Результаты применения теории функционала локальной электронной плотности к описанию строения различных отрицательных ионов с учетом поправки на самодействие представлены в работах [10, 11].

Более последовательный учет корреляций на основе многоэлектронного подхода, включающий угловые корреляции, обеспечивает метод наложения конфигураций [5], а также расчеты, основанные на использовании гиперсферического базиса волновых функций [12]. Однако расчеты многофотонных процессов в отрицательных ионах в рамках этих методов являются весьма трудными в техническом плане, в настоящее время практически не проводятся и требуют дальнейшей разработки.

Итак, мы коротко охарактеризовали основные методы описания строения отрицательных ионов. Каждый из этих методов является или может являться основой для развития того или иного метода описания процессов взаимодействия отрицательного иона с внешним электромагнитным полем. К рассмотрению методов описания таких процессов мы и переходим.

Среди основных задач, поставленных при написании данного обзора, можно выделить следующие: определить область применимости нестационарной теории возмущений для расчета нелинейных характеристик взаимодействия отрицательных ионов с электромагнитным полем; выяснить роль выбора одноэлектронного потенциала взаимодействия внешнего электрона с остовом при описании взаимодействия отрицательных ионов с полем в одноэлектронном приближении; указать другие одноэлектронные методы, способные описывать нелинейные процессы в отрицательных ионах в случае сильного поля, а также и в других таких ситуациях, где метод теории возмущений не применим; выяснить роль динамического корреляционного взаимодействия в многофотонных процессах в отрицательных ионах.

Обзор имеет следующую структуру. Раздел 2 посвящен исследованию многофотонных процессов и расчету характеристик отрицательных ионов методами теории возмущений. Обсуждается применимость теории возмущений к многофотонным процессам в отрицательных ионах и расчет многофотонных матричных элементов при помощи функций Грина. Приводятся результаты расчетов динамической поляризуемости и сечений многофотонного отрыва электронов от отрицательных ионов. Описаны результаты расчетов сечений многофотонного отрыва в сравнении с экспериментом. В разделе 3 рассматриваются сильные поля, в которых теория возмущений оказывается непригодной. Анализируется точное решение для δ -потенциала, квазиклассическое приближение, метод комплексного вращения координат, а также прямое компьютерное моделирование отрыва электрона из одномерного короткодействующего потенциала. В разделе 4 рассматривается влияние корреляционных эффектов на многофотонные процессы в отрицательных ионах. Формулируется теория возмущений по внешнему полю и корреляционному взаимодействию и приводятся результаты расчетов с учетом корреляций по теории возмущений. Излагается обобщение приближения случайных фаз на многофотонный случай. Для сильных полей, в которых может нарушаться теория возмущений по внешнему полю, вводится поляризационный потенциал в рамках квазиэнергетического подхода. Поляризационные эффекты в сильном поле анализируются в различных диапазонах частот и напряженностей поля. В заключении подводятся итог результатам исследований многофотонных процессов в отрицательных ионах и анализируются перспективы.

2. Теория возмущений в приближении независимых частиц.

2.1. Основные соотношения теории возмущений. Особенностью атомных систем по сравнению с другими многоэлектрон-

ными системами является то обстоятельство, что в этом случае электроны находятся во внешнем центральном кулоновском поле ядра. Связанная с этим центральная симметрия является точной для одноэлектронных систем и лишь приближенной для многоэлектронных систем. Это позволяет ввести для многоэлектронных систем приближение центрального поля, в котором движутся электроны. Группирующиеся в разные оболочки электроны находятся в разных по величине среднего значения полях. При этом поле световой волны можно считать слабым, если оно меньше характерного внутреннего поля, соответствующего данной оболочке. Ясно, что поле, являющееся сильным для внешних электронов, может быть одновременно слабым для внутренних.

Мы рассматриваем воздействие лазерного поля на такие многоэлектронные системы, как отрицательные ионы. В основном нас будут интересовать процессы взаимодействия излучения с электронами внешней оболочки иона. Характерная напряженность внутреннего поля, притягивающего внешний электрон к атому, определяется соотношением $\mathcal{E}_0 = (2|E_0|)^{3/2}$, где E_0 — энергия связи электрона в ионе. Если в качестве E_0 взять конкретное значение энергии (см. табл. I), то для напряженности $\mathcal{E}_0$ получим величину порядка 10^7 – 10^8 В/см, что существенно, в среднем на два порядка величины, меньше характерной напряженности внутриатомного поля. Следует также отметить, что такие напряженности легко достижимы при использовании излучения современных стандартных серийных лазерных установок.

В данном разделе мы остановимся на описании взаимодействия отрицательных ионов с внешним полем методом нестационарной теории возмущений в приближении центрального поля. Это приближение основано на построении одночастичного центрально-симметричного потенциала, в котором собственные значения энергии и соответствующие им волновые функции воспроизводят энергии связи и распределения электронных плотностей различных электронных оболочек. Однако применимость одноэлектронного приближения для описания строения отрицательных ионов еще не означает, что оно является удовлетворительным при теоретическом описании многофотонных процессов. Чтобы применение одноэлектронного приближения было корректным, необходима, по крайней мере, малость возмущения внешним полем всех остальных электронов, кроме ионизируемого. Но, как было указано в разделе I, на внешней подоболочке отрицательного иона всегда находится больше одного электрона. Таким образом, действию внешнего поля в равной степени подвержены как ионизируемый электрон, так и остальные электроны внешней подоболочки. Это приводит к возникновению динамического корреляционного взаимодействия. В данном разделе мы рассмотрим упрощенную задачу и пока не будем учитывать корреляционные эффекты, а рассмотрим их в разделе 4.

Критерием применимости теории возмущений для нахождения вероятности связанно-свободных переходов является выполнение неравенства [1]

$$d\vec{\mathcal{E}} \ll (E_n - E_0 \pm n\omega), \quad \omega, \quad (6)$$

где $\vec{\mathcal{E}}$ — напряженность лазерного поля, d — дипольный момент электрона, E_n — энергия возбужденного состояния рассматриваемого электрона, ω — частота лазерного излучения, n — число поглощенных фотонов, которое пробегает значение от единицы до величины, на единицу меньшей числа фотонов, необходимых для процесса ионизации. Поскольку для отрицательных ионов возбужденные связанные состояния либо отсутствуют, либо близки к границе непрерывного спектра, то для них $E_n \geq 0$. Поэтому для отрицательных ионов при отсутствии резонансов остается

из (6) по сути лишь одно неравенство

$$d\vec{\mathcal{E}} \ll \omega. \quad (7)$$

Это условие означает малость взаимодействия по сравнению с энергией кванта электромагнитного излучения. Отметим, что при описании параметров связанно-связанных переходов, как, например, динамическая поляризуемость, для применимости теории возмущений достаточно выполнения лишь первого, менее сильного из неравенств (6).

Условие (7) можно переписать через энергию связи электрона E_0 , воспользовавшись оценкой для величины дипольного момента электрона $d \sim 1/\kappa$. Тогда (7) эквивалентно соотношению

$$\gamma = \frac{\kappa\omega}{\mathcal{E}} \gg 1, \quad (8)$$

где γ — известный параметр адиабатичности [13]. Условие $\gamma \gg 1$ означает многофотонный (а не туннельный) характер нелинейного взаимодействия. Условие применимости теории возмущений (8) непосредственно приводит к условию малости напряженности электромагнитного поля по отношению к некоторой критической напряженности $\mathcal{E}_{кр} = \kappa\omega$. Для однофотонного процесса взаимодействия $\mathcal{E}_{кр}$ соответствует напряженности характерного внутрионного поля $\mathcal{E}_0$. С увеличением степени нелинейности значение $\mathcal{E}_{кр}$ уменьшается. Таким образом, для применимости теории возмущений всегда необходимо условие $\mathcal{E} \ll \mathcal{E}_0$.

В туннельном предельном случае

$$\gamma \ll 1 \quad (9)$$

взаимодействие с внешним полем намного превосходит энергию кванта излучения. Отсюда ясно, что характер процесса должен быть качественно иным — он становится квазиклассическим. Этот случай включает в себя при $\gamma \ll 1$ возможность туннельного отрыва электрона. С другой стороны, условие (9) может реализоваться и при $\mathcal{E} \gg \mathcal{E}_0$.

К настоящему моменту теоретическое описание взаимодействия атомов и отрицательных ионов со сверхатомным полем развито довольно слабо, и мы не будем в данном обзоре подробно затрагивать этот случай. При умеренных напряженностях внешнего поля в случае, когда параметр $\gamma \ll 1$ и теория возмущений не применима, описание процесса нелинейного распада отрицательного иона будет дано в следующем разделе.

Следует также иметь в виду, что для справедливости теории возмущений необходимо, чтобы штарковский сдвиг энергии основного состояния и порога непрерывного спектра был мал по сравнению с частотой ω . Это также накладывает ограничение на напряженность внешнего поля. Так, ограничение на величину штарковского сдвига основного состояния требует выполнения условия $\alpha\mathcal{E}^2/4 \ll \omega$, где α — динамическая поляризуемость отрицательного иона. Воспользовавшись оценкой $\alpha \sim \kappa^{-3}$, получим условие в виде $\mathcal{E} \ll (\omega\kappa^3)^{1/2}$. С учетом реальных энергий связи электронов в отрицательных ионах, которые всегда меньше атомных, нетрудно убедиться, что для любой степени нелинейности взаимодействия отрицательного иона с излучением этот критерий является менее жестким, чем условие (8).

Штарковский сдвиг границы непрерывного спектра равен $\mathcal{E}^2/4\omega^2$. Требование его малости по сравнению с ω приводит к условию

$$\eta = \frac{\mathcal{E}^2}{\omega^3} \ll 1. \quad (10)$$

При больших степенях нелинейности это условие накладывает более жесткое ограничение на величину напряженности внешнего поля, и

только при малых степенях нелинейности критерий (8) полностью определяет границы применимости теории возмущений.

Сразу укажем еще на одно обстоятельство, связанное с процессом надпорогового поглощения фотонов оторванным электроном. В достаточно сильных полях такой процесс является существенным, и теория возмущений становится неприменимой для описания фотораспада отрицательного иона по этой причине. Надпороговое поглощение более подробно будет рассмотрено в следующей главе. Забегая вперед, отметим лишь то, что ограничение на напряженность внешнего поля, связанное с возможностью пренебречь надпороговым поглощением и использовать теорию возмущений для описания процесса нелинейного фотораспада отрицательных ионов, совпадает с ограничением (10), связанным с малостью штарковского сдвига границы непрерывного спектра по сравнению с ω .

Последним фактором, определяющим применимость теории возмущений, является возможность насыщения процесса фотораспада при достаточно большой длительности импульса излучения τ , т. е. должно выполняться условие $W\tau \ll 1$, где W — вероятность фотораспада в единицу времени.

Итак, при выполнении условия (10) теория возмущений в одно-электронном приближении применима, кроме атома водорода, в той или иной степени к описанию нелинейных процессов в атомах щелочных элементов и отрицательных ионах. Взаимодействие с внешним полем имеет вид

$$V(t) = V^{(+)}e^{-i\omega t} + V^{(-)}e^{i\omega t}, \quad (11)$$

$$V^{(+)} = V^{(-)*},$$

где оператор $V^{(+)}$ соответствует поглощению, $V^{(-)}$ — излучению фотонов. Операторы $V^{(\pm)}$ могут быть выбраны в различных калибровках — в форме импульса и в форме длины. В книге [14] показано, что при использовании полного базиса собственных волновых функций стационарного гамильтониана результаты вычисления многофотонных матричных элементов теории возмущений не зависят от калибровки. Далее мы всюду, где это не оговорено специально, будем пользоваться для $V^{(\pm)}$ дипольным приближением, в котором

$$V^{(+)} = -\frac{d\vec{\mathcal{E}}}{2}. \quad (12)$$

Дипольное приближение при описании многофотонных процессов оправдано во всем оптическом диапазоне частот [1], где $c/\omega \gg r_a$, т. е. длина волны больше размеров системы r_a . В рамках теории возмущений вероятность n -фотонного отрыва в единицу времени рассчитывается на основании золотого правила Ферми

$$W^{(n)} = \frac{\pi}{2^{2n-1}} |z_{ii}^{(n)}|^2 \mathcal{E}^{2n} \rho_f, \quad (13)$$

где $z_{ii}^{(n)}$ — n -фотонный матричный элемент, ρ_f — плотность конечных состояний. Таким образом, зависимость вероятности многофотонного отрыва электрона от потока фотонов $F = \mathcal{E}^2/8\pi\alpha\omega$ (α — постоянная тонкой структуры) имеет степенной вид

$$W^{(n)} = \sigma^{(n)} F^n. \quad (14)$$

Коэффициент пропорциональности $\sigma^{(n)}$ играет роль сечения многофотонного распада и часто используется в качестве его характеристики.

2.2. Многофотонные матричные элементы в одно-электронном приближении. Волновые функции начального и конечного состояний $|i\rangle$ и $|f\rangle$ в одноэлектронном приближении являются собственными функциями стационарного гамильтониана

$$H_0 = -\frac{1}{2}\nabla^2 + U(r), \quad (15)$$

где $U(r)$ — центральный потенциал взаимодействия электрона с остовом.

Матричный элемент $z_{fi}^{(n)}$ может быть вычислен с помощью одноэлектронной функции Грина [1]:

$$z_{fi}^{(n)} = \langle f | z G_{E_i+(n-1)\omega} z \times \dots \times G_{E_i+\omega} z | i \rangle. \quad (16)$$

Функция Грина удовлетворяет стационарному уравнению Шрёдингера с неоднородностью в виде δ -функции:

$$(H_0 - E) G_E(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (17)$$

Нетрудно написать матричные элементы и для нелинейных восприимчивостей. Так, например, динамическая поляризуемость изолированного уровня определяется соотношением [15]

$$\alpha(\omega) = \langle i | z (G_{E_i+\omega} + G_{E_i-\omega}) z | i \rangle. \quad (18)$$

Вообще многофотонные матричные элементы в одноэлектронном приближении после отделения угловых частей выражаются через радиальные функции Грина $g_l(E, r, r')$ при энергии E и орбитальном моменте l . Радиальные функции Грина являются решениями уравнения Шрёдингера

$$\left(\frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - 2U(r) + 2E \right) g_l(E, r, r') = -\delta(r - r'). \quad (19)$$

Асимптотика функции Грина выбирается так, чтобы при $E > 0$ получались распадающиеся состояния, т. е. функция Грина имеет асимптотику расходящейся волны.

Для кулоновского потенциала и кулоноподобных модельных потенциалов построение функции Грина выполняется аналитически — она выражается через функции Уиттекера [2].

Для слабосвязанного электрона в отрицательном ионе функция Грина может быть построена в следующем виде [7]:

$$g_l(E, r, r') = \chi_{kl}^{(+)}(r_>) \chi_{kl}(r_<), \quad k = (2|E|)^{1/2}, \quad (20)$$

где $\chi_{kl}(r)$ — регулярное, а $\chi_{kl}^{(+)}(r)$ — нерегулярное решение радиального уравнения Шрёдингера, $r_>(r_<)$ — большая (меньшая) из величин r, r' . Решения $\chi_{kl}^{(+)}$ и χ_{kl} нормированы условием для вронскиана

$$\chi_{kl}^{(+)\prime}(r) \chi_{kl}(r) - \chi_{kl}^{(+)}(r) \chi_{kl}'(r) = 1. \quad (21)$$

Решения могут быть найдены численно. Широко распространенным методом, используемым для этого, является двухточечный метод Нумерова пятого порядка точности [16]. Для нахождения регулярного решения используется поведение в нуле:

$$\chi_{kl} \sim r^{l+1}, \quad (22)$$

для нерегулярного — квазиклассическая асимптотика (23)

$$\text{Re } \chi_{kl}^{(+)}(r) \sim \frac{1}{(p(r))^{1/2}} \cos \left(\int_{r_1}^r p(r) dr + \varphi \right), \quad E > 0,$$

$$\operatorname{Im} \chi_{kl}^{(+)}(r) = \chi_{kl}(r) \sim \frac{1}{(p(r))^{1/2}} \sin \left(\int_{r_1}^r p(r) dr + \varphi \right), \quad E > 0, \quad (23)$$

где

$$p(r) = \left[2 \left\{ E - U(r) - \frac{[l + (1/2)]^2}{2r^2} \right\} \right]^{1/2},$$

и

$$\chi_{kl}^{(+)}(r) \sim e^{-kr}, \quad E < 0. \quad (24)$$

Регулярное в нуле решение однородного уравнения $\chi(r)$ ($E > 0$) позволяет также определить фазурассеяния δ_l .

Методы теории возмущения по взаимодействию с полем лазерного излучения были с успехом применены ранее к описанию нелинейных процессов в щелочных атомах с отчетливо выделенным одним оптическим электроном. Здесь широкое развитие получили такие методы построения функций Грина и расчеты матричных элементов, как метод модельного потенциала и метод квантового дефекта. Подробно эти методы, а также полученные результаты освещены в работах [2, 17].

2.3. Динамическая поляризуемость отрицательных ионов. Рассмотрим динамическую поляризуемость простейшего отрицательного иона H^- с энергией связи электрона $E_0 = -0,75$ эВ.

В качестве волновой функции слабосвязанного электрона можно взять функцию вида

$$\begin{aligned} \psi_0 &= \frac{B}{r} \left(\frac{\kappa}{2\pi} \right)^{1/2} (e^{-\kappa r} - e^{-\beta r}), \\ B &= \frac{[\beta(\beta + \kappa)]^{1/2}}{\beta - \kappa}, \\ \beta &= 0,742, \quad \kappa = 0,234, \end{aligned} \quad (25)$$

являющуюся аппроксимацией результата, полученного вариационным методом для иона H^- [18]. Для выяснения роли потенциала взаимодействия электрона с атомом сравним результаты расчетов при различном выборе потенциалов [19]:

$$\begin{aligned} U_1(r) &= 0, \\ U_2(r) &= -\frac{\alpha'}{2(r + r_p)^4}, \\ U_3(r) &= -\left(1 + \frac{1}{r}\right) e^{-2r} - \frac{\alpha'}{2r^4} \left\{ 1 - \left[1 + 2r + \frac{(2r)^2}{2} + \frac{(2r)^3}{6} + \frac{(2r)^4}{36} \right] e^{-2r} \right\}. \end{aligned} \quad (26)$$

Потенциал U_1 соответствует полному пренебрежению взаимодействием электрона с атомом в состояниях непрерывного спектра H^- . Потенциал U_2 соответствует феноменологическому учету дальнегодействующего поляризационного взаимодействия электрона с атомом: $\alpha' = 9/2$ — статическая поляризуемость атома водорода, $r_p = 0,74$ — радиусобрезания. Потенциал U_3 получен аналитической аппроксимацией потенциала взаимодействия электрона с атомом водорода, найденного во втором порядке теории возмущений.

Результаты численных расчетов поляризуемости $\alpha(\omega)$ представлены на рис. 1 и 2. Кривые 1–3 соответствуют потенциалам U_1, U_2, U_3 . На рис. 1 представлены также результаты работы [20] (кривая 4) с коридором ошибок (штриховые линии), в которой поляризуемость H^- при $\omega < |E_0|$ рассчитана с помощью вариационного метода для поправки к энергии во втором порядке теории возмущений.

Результаты расчетов показывают, что динамическая поляризуемость отрицательного иона атома водорода слабо чувствительна к конкретному выбору потенциала взаимодействия электрона с атомом, обладает удовлетворительной точностью при полном пренебрежении этим

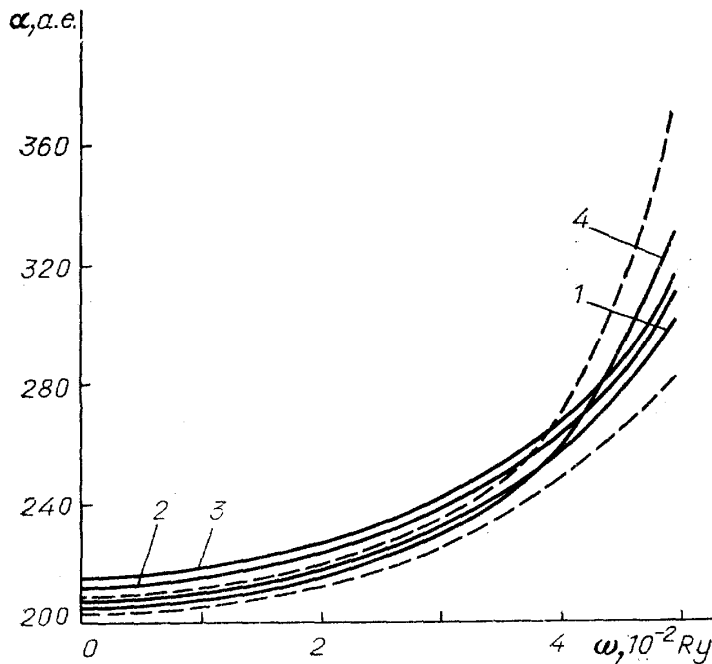


Рис. 1. Поляризуемость H^- для частот поля ω меньше потенциала фотоотрыва [21]

потенциалом и определяется в основном волновой функцией отрицательного иона H^- .

Итак, в случае иона H^- для расчета динамической поляризуемости можно использовать одноэлектронную функцию Грина, построенную в приближении плоских волн. Для отрицательных ионов, имеющих во

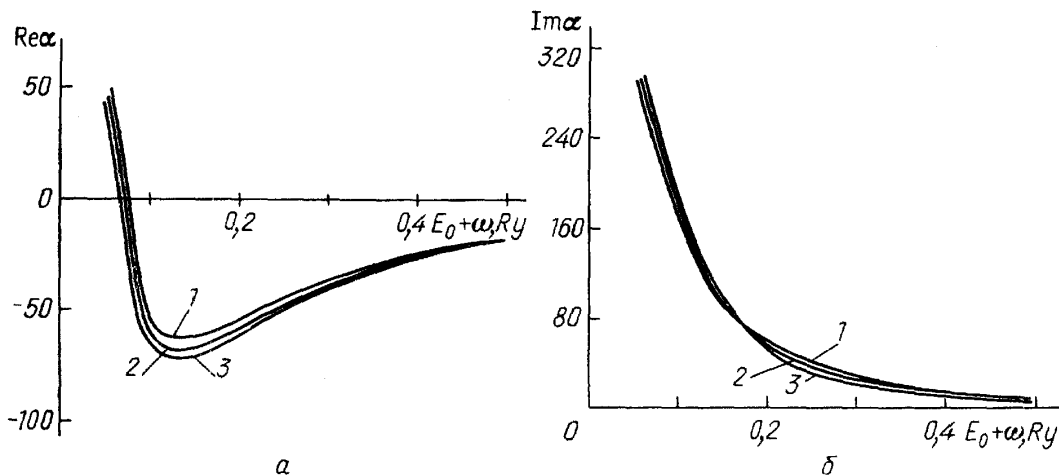


Рис. 2. Действительная часть (а) и мнимая часть (б) поляризуемости H^- для частот поля ω больше потенциала фотоотрыва [21]

внешней электронной оболочке р-электроны ($l=1$), потенциал уже следует учитывать. Эти электроны в соответствии с дипольными правилами отбора могут виртуально переходить в d-, а также в s-состояния. Последние сильно искажаются на расстояниях порядка атомных размеров, дающих основной вклад в матричный элемент. Отрицательные ионы с незаполненными оболочками имеют отличный от нуля полный момент и, соответственно, мультиплетную структуру основного состояния. Нерезонансное возмущение атомного мультиплета эллиптически поляризованным лазерным полем можно описать эффективным гамильтонианом H , учитывающим мультиплетное расщепление и «главную» часть взаи-

модействия с полем уровней мультиплета с различными моментами и проекциями M [2]. В первом порядке теории возмущений по спин-орбитальному взаимодействию и во втором — по взаимодействию с полем волны эффективный гамильтониан имеет вид

$$\tilde{H} = \Delta E_J |NJM\rangle \langle NJM| - \frac{I}{4} \sum_{\mu, \nu, J', M'} e_{\mu}^* e_{\nu} |NJM\rangle \chi_{JJ'M'}^{\mu\nu} \langle NJ'M'|, \quad (27)$$

где ΔE_J — мультиплетное расщепление в отсутствие поля, $\chi^{\mu\nu}$ — тензор рассеяния света, e_{μ} — сферические компоненты вектора поляризации, I — интенсивность света.

Диагонализация симметричной матрицы эффективного гамильтониана $\tilde{H}$ позволяет построить квазистационарные состояния системы как линейную суперпозицию состояний в отсутствие поля с весами, равными компонентам собственных векторов матрицы

$$\Phi^{(r)} = \sum_{J, M} f_{JM}^{(r)} |NJM\rangle. \quad (28)$$

Собственные значения дают изменение энергии уровней $\Delta E^{(r)}$, где r — квантовые числа, характеризующие новую систему состояний. При $\omega > |E_{NJ}|$ матрица $\tilde{H}_{JJ'M'}$ неэрмитова и функции $\Phi^{(r)}$ неортогональны, поскольку состояния с различными J и M имеют общие каналы фотораспада. Действительная часть $\Delta E^{(r)}$ определяет сдвиг уровня, мнимая — его ширину. В силу симметричности матрицы $\tilde{H}$ система векторов $f^{(r)}$ образует полный ортогональный набор

$$f^{(r)} f^{(r')} = \delta_{rr'}. \quad (29)$$

Поэтому произвольное решение уравнения Шрёдингера можно разложить по новой системе функций $\Phi^{(r)}$, а эффективный гамильтониан может быть переписан в виде

$$\tilde{H} = \sum_r |\Phi^{(r)}\rangle \Delta E^{(r)} \langle \Phi^{(r)}|. \quad (30)$$

В случае, когда спин-орбитальное взаимодействие намного больше или намного меньше полевого расщепления уровней мультиплета, эти два взаимодействия можно рассматривать по отдельности, выделив только действие поля. При этом сдвиг уровня пропорционален интенсивности излучения:

$$\Delta E^{(r)} = - \frac{\alpha^{(r)}}{4} I, \quad (31)$$

где динамические поляризуемости $\alpha^{(r)}$ являются собственными значениями матрицы

$$\hat{Q} = \sum_{\mu, \nu} e_{\mu}^* e_{\nu} \chi_{JJ'M'}^{\mu\nu}.$$

На рис. 3 приведены результаты расчетов динамической поляризуемости α иона $O^-(^2P)$ на частоте рубинового лазера $\omega = 14\,400 \text{ см}^{-1}$ [21] для полностью эллиптически поляризованного света с единичным вектором поляризации $\mathbf{e} = \mathbf{e}_+ \cos \theta - \mathbf{e}_- \sin \theta$. Параметр θ связан со степенью поляризации соотношением $I = \sin 2\theta$. Симметрия задачи приводит к тому, что при $\theta = 0; \pi/2$ определенное значение имеет проекция момента на направление распространения электромагнитной волны. При $\theta = \pi/4$ определена проекция момента на направление поляризации поля, а в согласии с теоремой Крамерса уровни двукратно вырождены по знаку проекции. Коэффициенты в разложении волновой функции по невозмущенным состояниям отрицательного иона совпадают с матричными эле-

ментами матрицы конечных вращений $D^J(0, \pi/2, 0)$, определяющей изменение волновой функции при вращении, совмещающем ось z системы координат с направлением поляризации поля. Отмеченные свойства позволяют определить квантовые числа проекции момента на соответствующие направления. Эти квантовые числа указаны на рис. 3.

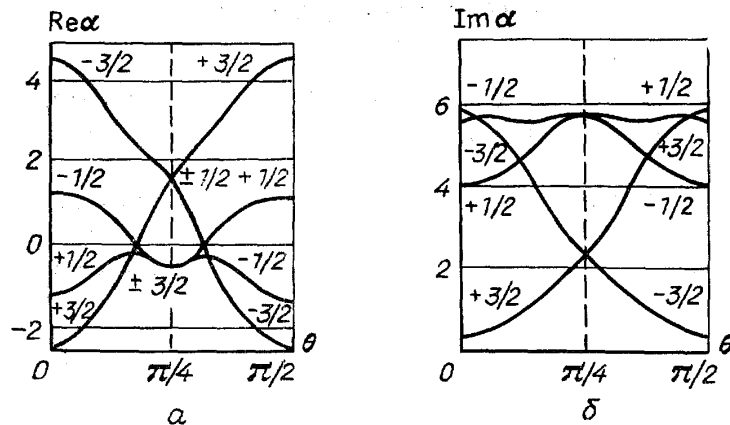


Рис. 3. Действительные (а) и мнимые (б) части поляризуемости $O^- (^2P_{3/2})$ на частоте рубинового лазера [21]

Итак, в данном параграфе мы затронули одну из основных характеристик взаимодействия атомной системы с внешним полем — динамическую поляризуемость. Следует отметить, что более сильно поляризации подвержены отрицательные ионы с малой энергией связи внешнего электрона — ион H^- и отрицательные ионы щелочных атомов. Так, в статическом пределе $\alpha(0)$ для этих ионов по порядку величины составляет 10^3 а.е. Большая поляризуемость отрицательных ионов с малой энергией связи объясняется довольно просто. Чем меньше энергия связи электрона, тем он более удален от ядра атома; среднее расстояние распределения электронной плотности $\langle r \rangle \sim |E_0|^{-1/2}$. С другой стороны, поляризуемость $\alpha \sim r^3$, так что поляризация проявляется сильнее, когда расстояние между ядром и электроном больше. В области частот излучения, где поляризуемость достигает максимального значения, для отрицательных ионов щелочных атомов и H^- она составляет по порядку величины 10^3 а.е.

Поляризация атомной системы во внешнем поле означает изменение начального состояния электронов под действием электромагнитной волны. Так, энергия исходного состояния изменяется на величину $\Delta E = -\alpha \mathcal{E}^2/4$. При достаточно сильной напряженности поля $\mathcal{E}$, ΔE может составлять заметную величину. Таким образом, в случае сильных полей может возникнуть необходимость учета изменения исходного состояния при вычислении различных нелинейных характеристик в сильном электромагнитном поле.

Интересная возможность связана с перспективой изучения сдвигов уровней и их ширин по наблюдению резонансов в рассеянии электронов на атомах в присутствии поля [22, 23].

Резонансное рассеяние электрона на атоме в присутствии поля состоит в радиационном прилипании электрона к атому с последующим развалом отрицательного иона. Для резонанса с излучением m и поглощением n фотонов дифференциальное сечение резонансного рассеяния равно

$$\frac{d\sigma^{(n-m)}}{d\Omega_{p'}} = \frac{1}{4\pi^2} \left| \sum_r \frac{A_{ip',r}^{(n)} A_{r,ip}^{(m)}}{E_{NJ} + \Delta E^{(r)} + n\omega - (1/2)p^2} \right|^2, \quad (32)$$

где $A_{r,ip}^{(m)}$ и $A_{ip',r}^{(n)}$ — соответствующие амплитуды m -фотонного прилипания и n -фотонного отрыва электронов.

Из результатов расчетов динамических поляризуемостей [21] видно, что сдвиги и ширины резонансов соизмеримы по величине. В силу

этого при малом мультиплетном расщеплении они будут сильно перекрываться. При $n=0$ процесс становится одноступенчатым и описывает многофотонное прилипание электрона к атому [23]. Сечение его можно найти из принципа детального равновесия по сечениям многофотонного отрыва электронов.

Динамическая поляризуемость сказывается также на тормозном излучении при рассеянии электронов на отрицательных ионах [24]. Суть этого эффекта заключается в том, что внешнее поле наводит в отрицательном ионе переменный дипольный момент, с которым взаимодействует рассеивающийся электрон. Поэтому, кроме обычного статического тормозного излучения, возникает дополнительно соизмеримое с ним по величине поляризационное тормозное излучение [24].

2.4. Многофотонный отрыв электронов от отрицательных ионов. Расчеты по теории возмущений. Как уже отмечалось, присоединенный электрон отрицательного иона в непрерывном спектре относительно слабо взаимодействует с атомом. Поэтому, по крайней мере для отрицательных ионов атома водорода и, возможно, для отрицательных ионов атомов щелочных металлов, для функции Грина оправдано приближение плоских волн [21]. В работе [25] оно было использовано для получения сечения двухфотонного отрыва. Если выбрать взаимодействие электрона с лазерным полем в форме скорости

$$V^{(+)} = -\frac{1}{2} \frac{\hat{\mathbf{p}} \vec{\mathcal{E}}(t)}{\omega}, \quad (33)$$

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\nabla,$$

то оказывается возможным провести вычисление n -фотонного матричного элемента до конца. В самом деле, из-за ортогональности плоских волн в матричных элементах свободно-свободных переходов возникают δ -функции. Это позволяет вычислить суммы по промежуточным состояниям. Для начальных s -состояний после интегрирования по углам вылета получаем вероятность n -фотонного отрыва в единицу времени

$$W = \frac{8\pi^2 |\langle \mathbf{k}_f | 0 \rangle|^2 (\mathbf{k}_f \mathcal{E}/\omega)^{2n}}{[(E_0 + (n-1)\omega - E_f) \times \dots \times (E_0 + \omega - E_f)]^2 (2n+1)}, \quad (34)$$

где $\langle \mathbf{k}_f | 0 \rangle$ — волновая функция слабосвязанного электрона в импульсном представлении, $\mathbf{k}_f$ — импульс в конечном состоянии. Для H^- при выборе волновой функции в виде (25) получим в пространстве импульсов

$$\langle \mathbf{k}_f | 0 \rangle = B \frac{\kappa^{1/2}}{\pi} \left(\frac{1}{\beta^2 + k_f^2} - \frac{1}{\kappa^2 + k_f^2} \right). \quad (35)$$

Для отрицательных ионов с p -электронами приближение плоских волн становится хуже. Об этом свидетельствует, в частности, сравнение результатов расчетов сечения двухфотонного отрыва электрона от отрицательного иона I^- . На рис. 4 представлены расчеты сечения в приближении нулевого потенциала (штриховая линия) и с учетом взаимодействия электрона с атомом [26] (сплошная линия) в зависимости от энергии оторванного фотоэлектрона E_k . Там же нанесен результат измерения сечения двухфотонного отрыва электрона излучением рубинового лазера $\sigma^{(2)} = (3,5 \pm 1,5) \cdot 10^{-49} \text{ см}^2 \text{ с}$ [27]. Как видим, теория удовлетворительно согласуется с экспериментом только при учете взаимодействия электрона с атомом.

Приближение центрального поля использовалось также в работе [28] при расчете сечения двухфотонного распада ионов Cl^- и F^- , а также Na^- . Расчетные данные для Cl^- и F^- приведены на рис. 5. В качестве

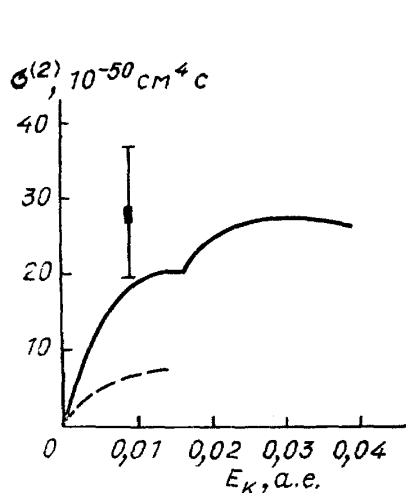


Рис. 4. Зависимость сечения двухфотонного распада иона I^- от кинетической энергии оторванного электрона E_k . Штриховая линия — расчет в приближении плоских волн [25], сплошная линия — расчет с учетом рассеяния плоских волн [26]. Экспериментальная точка взята из работы [27]

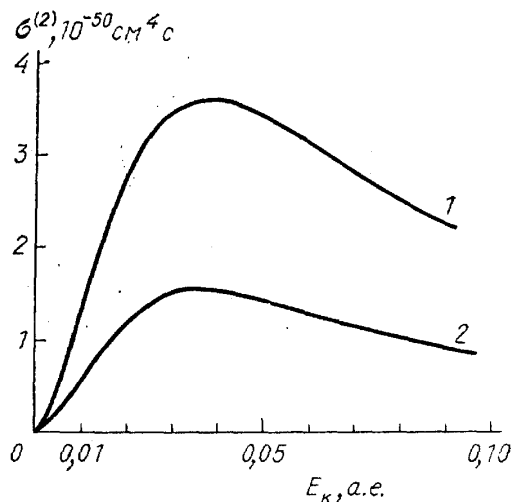


Рис. 5. Зависимость сечения двухфотонного распада ионов Cl^- (кривая 1) и F^- (кривая 2) от кинетической энергии оторванного электрона E_k , полученная в рамках приближения центрального поля (36) [28]

центрального потенциала взята аналитическая аппроксимация самосогласованного потенциала Хартри-Фока в локальном приближении [29]:

$$U(r) = -\frac{1}{r} \left\{ Z - N_a \left[1 - \frac{1}{H(e^{r/d} - 1) + 1} \right] \right\}, \quad (36)$$

где Z — заряд ядра, N_a — число электронов остова, параметры H и d подобраны таким образом, чтобы энергия связанного уровня в потенциале (36) совпадала с точным значением сродства атома к электрону, а асимптотическое поведение волновой функции связанного состояния на больших расстояниях соответствовало более точным расчетам методом Хартри — Фока. Расчеты с потенциалом, имеющим вид суммы атомного потенциала типа (36) и поляризационного потенциала [29], дают результаты весьма близкие к представленным на рис. 5 (они нами не приводятся). Эта близость связана с численной близостью обеих аппроксимаций потенциала.

В работе [28] установлено, что учет потенциала взаимодействия электрона с атомом может привести к изменению величины сечения многофотонного распада в 2–3 раза. Кроме того, происходит сдвиг максимума дисперсионной кривой сечения отрыва в сторону меньших частот. Это объясняется тем, что притягивающий потенциал «поджимает» волновые функции непрерывного спектра к ядру атома.

В данном разделе мы не учитывали возмущение исходного состояния под действием поля, о чем шла речь в конце раздела 2.3. Как было показано в разделе 2.1, это допустимо при условии $\gamma \gg 1$.

2.5. Резюме. Итак, область применимости теории возмущений к описанию нелинейных процессов в отрицательных ионах определяется условием $\gamma \gg 1$, что непосредственно приводит к условию малости напряженности электромагнитного поля $\mathcal{E} \ll \mathcal{E}_0$. Численное значение $\mathcal{E}_0$

для отрицательных ионов по порядку величины лежит в диапазоне от 10^7 В/см (отрицательные ионы щелочных атомов) до 10^8 В/см (отрицательные ионы галогенов).

Под действием внешнего поля исходное состояние электрона изменяется, что выражается в поляризации отрицательного иона. Кроме того, сдвигается граница непрерывного спектра. При большой напряженности поля такие изменения могут оказаться существенными, и их следует учитывать в расчетах нелинейных характеристик отрицательных ионов. Исходное состояние может рассматриваться неизменным лишь для не слишком сильных полей. Таким образом, возникает еще одно ограничение на напряженность внешнего поля. Для процессов с малой фотонностью оно численно соответствует условию $\mathcal{E} \ll \mathcal{E}_0$. При более высокой степени фотонности процесса ограничение на напряженность поля становится более жестким. Следует также отметить, что описание процессов с большой степенью нелинейности методом теории возмущений с учетом взаимодействия вылетающего электрона с атомом технически довольно сложно. Практически, для отрицательных ионов проводились расчеты только двухфотонных процессов.

При расчете матричных элементов правильный учет взаимодействия оторванного электрона с атомом в общем случае оказывается существенным, и наиболее сильно проявляется, когда в составной матричный элемент входят s-состояния непрерывного спектра. Это связано с тем, что s-волны наиболее сильно рассеиваются на центральном потенциале.

Далее в разделе 4 будет показано, что учет влияния возмущения атомных электронов внешним полем на процесс нелинейного разрушения отрицательных ионов также является существенным.

Теперь мы перейдем к рассмотрению методов, которые позволяют описывать процесс взаимодействия отрицательных ионов с внешним полем в случае, когда теория возмущений не применима.

3. Описание нелинейного разрушения отрицательных ионов в одноэлектронном приближении, выходящее за рамки теории возмущений.

3.1. Квазиэнергетический подход в модели δ -потенциала. Как было показано выше, теория возмущений применима при выполнении условия $\hbar\omega/\mathcal{E} \gg 1$. Но при более сильной напряженности поля или при более многоквантовом процессе это условие может не выполняться. Рассмотрим теперь другие методы, позволяющие описывать процесс взаимодействия и в случае $\gamma \ll 1$. Так, в ряде работ [13, 30—33] задача о фотораспаде отрицательного иона сводилась к задаче о фотоионизации электрона из короткодействующего потенциала. Основное достоинство такого подхода состоит в возможности получения конечного результата аналитически. При этом учитывается возможность отрыва электрона сразу по всем открытым каналам (с поглощением различного числа квантов, необходимого для перехода связанного электрона в непрерывный спектр). Справедливость такого подхода основана на короткодействующем характере притягивающего потенциала, который испытывает внешний электрон в отрицательном ионе.

В одноэлектронном приближении короткодействующий потенциал можно заменить на трехмерный модельный δ -потенциал [30]:

$$U(r) = -\frac{2\pi}{\kappa} \delta(r) \frac{\partial}{\partial r} r. \quad (37)$$

В потенциале (37) существует единственное связанное состояние, волновая функция которого при $r \rightarrow 0$ имеет вид

$$\psi(r, t) \approx \left(\frac{1}{r} - \kappa \right) e^{-iE_0 t}. \quad (38)$$

Под воздействием внешнего поля состояние электрона можно считать квазистационарным, поскольку при любых параметрах поля существует отличная от нуля вероятность перехода электрона в непрерывный спектр.

Таким образом, под действием переменного поля $V(\mathbf{r}, t)$ с периодом T связанный уровень E_0 переходит в квазиэнергетическое состояние с комплексной квазиэнергией E . Волновая функция такого состояния представима в виде

$$\psi_E(\mathbf{r}, t) = u_E(\mathbf{r}, t) e^{-iEt}. \quad (39)$$

Функция $u_E(\mathbf{r}, t)$ периодична во времени с периодом T и удовлетворяет уравнению Шрёдингера:

$$-\left(i \frac{\partial}{\partial t} - H_0(\mathbf{r}) - V(\mathbf{r}, t)\right) u_E(\mathbf{r}, t) = E u_E(\mathbf{r}, t), \quad (40)$$

где $H_0(\mathbf{r})$ — гамильтониан невозмущенной системы. Величина E определена с точностью до слагаемого $n\omega$. Это обстоятельство отражает тот факт, что электрон в переменном поле имеет целый спектр равноотстоящих энергий, а не одну определенную энергию. Значение квазиэнергии выбирают так, что она переходит в энергию при $V(\mathbf{r}, t) \rightarrow 0$. Действительная часть комплексной квазиэнергии E определяет положение уровня при воздействии переменного поля, а ее мнимая часть — вероятность фотоионизации.

Квазиэнергетический подход был использован в работах [30, 31] при рассмотрении ионизации частицы из короткодействующего потенциала под действием циркулярно поляризованной электромагнитной волны:

$$\mathcal{E}_x = \mathcal{E} \cos \omega \left(t - \frac{z}{c}\right), \quad \mathcal{E}_y = -\mathcal{E} \sin \omega \left(t - \frac{z}{c}\right), \quad \mathcal{E}_z = 0,$$

где $\mathcal{E}$ — напряженность электрического поля. В данном случае можно аналитически построить функцию Грина для частицы в поле волны с учетом граничных условий при $r \rightarrow \infty$ [30]. Эта функция представляет бесконечную сумму уходящих волн с частотами, кратными ω , что и отражает наличие гармоник у квазиэнергетического состояния частицы. Следует также отметить, что при $E_0 + n\omega > 0$ мы действительно имеем уходящие волны, тогда как для $E_0 + n\omega < 0$ мы имеем экспоненциально затухающую волну.

Таким образом, в работе [30] решение уравнения (40) с учетом выражения (37) для короткодействующего потенциала сведено к решению интегрального уравнения

$$u_E(\mathbf{r}, \tau) = -\frac{2\pi}{\kappa} \int d\mathbf{r}' \int_0^{2\pi} d\tau' G_{E'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau') \delta(\mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial r'} (r' u_E(\mathbf{r}', \tau')), \quad (41)$$

где $G_{E'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}', \tau, \tau')$ — функция Грина, $E' = E - \mathcal{E}^2/(2\omega^2)$, $\tau = \omega t$. Наличие под интегралом δ -функции, а также представление функции Грина в виде алгебраического ряда дают возможность решить уравнение (41) аналитически. В результате получается следующее трансцендентное уравнение для определения величины квазиэнергии:

$$F(\varepsilon) = 1 + \frac{1}{2} i \sum_{n=-\infty}^{\infty} (\varepsilon + n\omega)^{1/2} \int_0^{2\pi} \sin \theta J_n^2(\rho (\varepsilon + n\omega)^{1/2} \sin \theta) d\theta = 0, \quad (42)$$

где $J_n(x)$ — функция Бесселя, $\varepsilon = E'/|E_0|$, $\omega = \omega/|E_0|$, $\rho = 2^{1/2} v/\omega^2$, $v = \varepsilon/|E_0|^{3/2}$. Решение уравнения (42) можно представить в виде

$$E_r = E_0 + \Delta - \frac{1}{2} i\Gamma, \quad (43)$$

где Δ — сдвиг уровня, Γ — его ширина. Из выражения (42) видно, что все открытые каналы ($\epsilon + n\omega > 0$) дают вклад в сдвиг и ширину уровня, тогда как закрытые каналы ($\epsilon + n\omega < 0$) дают вклад только в сдвиг уровня.

Необходимо отметить, что квазиэнергетический подход применим при условии $|\Delta|, |\Gamma| \ll |E_0|$. Это условие является менее жестким, чем критерий (8).

Уравнение (42), неявно определяющее E_r , можно решить только численно. На рис. 6 представлены результаты такого расчета [31] для ширины Γ , определяющей полную вероятность ионизации связанного состояния в единицу времени, при двух значениях частоты ω . При слабых полях величина Γ имеет степенную зависимость от напряженности поля, что соответствует теории возмущений. В сильных полях по мере увеличения напряженности поля вероятность плавно уменьшается по сравнению с предсказаниями теории возмущений и существенно от них отличается уже при $\gamma = 1$. Исходя из асимптотики волновой функции $u_E(r, t)$ при $r \rightarrow \infty$, можно найти также вероятность перехода электрона в непрерывный спектр с поглощением определенного числа фотонов n (при условии $E_0 + n\omega > 0$) [30]:

$$W^{(n)} = C (\epsilon_r + n\omega)^{1/2} \int_0^\pi \sin \theta J_n^2(\rho (\epsilon_r + n\omega)^{1/2} \sin \theta) d\theta. \quad (44)$$

Множитель C определяется из условия, что сумма всех вероятностей $W^{(n)}$ должна быть равна полной вероятности ионизации Γ .

Как видно из (44), кроме канала, характеризующегося поглощением минимально необходимого для ионизации числа фотонов n_0 , возможны также каналы с $n > n_0$ (надпороговое поглощение). Для линейно поляризованного излучения определяющим является канал с $n = n_0$. Для эллиптической поляризации это утверждение неверно, так как искривление подбарьерной траектории приводит к отличной от нуля составляющей импульса электрона на выходе из-под барьера, перпендикулярной направлению отрыва. Наличие дополнительной составляющей импульса приводит к увеличению наиболее вероятного числа поглощаемых фотонов.

Таким образом, решение модельной задачи об ионизации электрона из δ -потенциала позволяет в общих чертах описать процесс фотораспада отрицательных ионов в одночастичном приближении для широкого диапазона частот и напряженностей внешнего поля. Другим подходом к описанию процесса фотораспада, учитывающим реальный вид одночастичного потенциала взаимодействия слабосвязанного электрона с остовом, является временное квазиклассическое приближение.

3.2. Квазиклассическое приближение. Различные варианты квазиклассического описания ионизации электрона для короткодействующего потенциала представлены в работах [13, 32, 33]. Сущность квазиклассического приближения заключается в том, что при включении внешнего поля исходное состояние электрона ψ_0 считается неизменяющимся во времени.

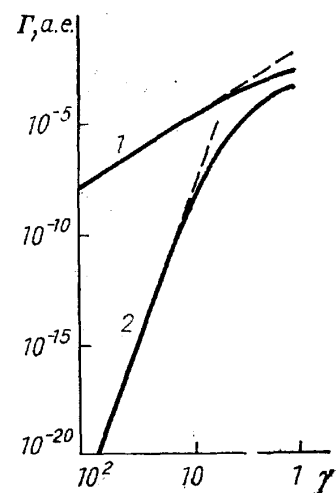


Рис. 6. Зависимость ширины уровня Γ от адиабатического параметра γ при двух значениях частоты внешнего поля [31]. 1 — $\omega = 0,6$, 2 — $\omega = 0,27$. Принято, что значение энергии уровня $E_0 = -1$

Так, если записать амплитуду вероятности ионизации в виде

$$A_i = -i \int_0^t \langle \psi_p^{(0)} | U(r) | \psi \rangle dt', \quad (45)$$

где $\psi(r, t)$ — точная волновая функция слабосвязанного электрона во внешнем поле, $\psi_p^{(0)}$ — волновая функция свободного электрона в электромагнитном поле, то квазиклассическое приближение соответствует замене ψ на ψ_0 [32]. Применимость квазиклассического приближения основана на том, что в короткодействующем потенциале волновая функция электрона локализована вблизи начала координат, где потенциал внешнего поля мал. Таким образом, вне радиуса действия атомных сил взаимодействие с внешним полем можно учесть точно, а в пределах области короткодействия им можно пренебречь. Область применимости квазиклассического приближения определяется условиями $\omega \ll |E_0|$, $\mathcal{E} \ll \mathcal{E}_0$, где $\mathcal{E}_0$ — напряженность внутреннего поля.

Выражения для вероятности фотораспада системы, полученные в работах [13, 32, 33] на основе квазиклассического приближения, с точностью до предэкспоненциального множителя имеют одинаковый вид:

$$W = A(\omega, \mathcal{E}) \exp\left(-\frac{2}{3} \frac{\mathcal{E}_0}{\mathcal{E}} g(\gamma)\right), \quad (46)$$

где

$$g(\gamma) = \frac{3}{2\gamma} \left[\left(1 + \frac{1}{2\gamma^2}\right) \text{Arch } \gamma - \frac{(1 + \gamma^2)^{1/2}}{2\gamma} \right], \quad \gamma = \frac{\hbar\omega}{\mathcal{E}}.$$

Предэкспоненциальный множитель $A(\omega, \mathcal{E})$ выражения (46) представляет собой сумму членов, каждый из которых соответствует каналу распада системы с поглощением определенного числа фотонов $n \geq n_0$. Поскольку формула (46) получена в квазиклассическом приближении, то предэкспоненциальный множитель $A(\omega, \mathcal{E})$ не может быть определен с достаточной точностью.

Характерным параметром, позволяющим выявить основные закономерности процесса фотоионизации, является адиабатический параметр γ . Физически он определяет отношение времени туннелирования частицы через потенциальный барьер к периоду поля. В соответствии с величиной γ существуют два предельных случая распада системы в переменном поле. При $\gamma \ll 1$ вероятность распада

$$W \sim \exp\left(-\frac{2}{3} \frac{\mathcal{E}_0}{\mathcal{E}}\right),$$

т. е. воздействие переменного поля такое же, как и постоянного поля той же напряженности, и распад носит туннельный характер. При $\gamma \gg 1$ вероятность W имеет степенную зависимость от напряженности внешнего поля $\mathcal{E}$. В этом случае распад носит многоквантовый характер и состоит в одновременном поглощении электроном n фотонов поля.

К настоящему времени остается открытым вопрос о точности решения задачи об ионизации электрона из короткодействующего потенциала в квазиклассическом приближении. Так, в работах [34, 35] показано, что учет временной эволюции волновой функции $\psi(\mathbf{r}, t)$ состояния электрона во внешнем поле может приводить к радикальному изменению результата для вероятности фотораспада. Недостатком данной теории также является отсутствие инвариантности к калибровке взаимодействия с внешним полем. Тем не менее, квазиклассическое приближение оказалось способным дать качественное описание ряда экспериментальных результатов по надпороговой ионизации атомов [36, 37], и к настоящему времени является одним из немногих аналитических методов, по-

звоящих получать конкретные результаты решения задачи взаимодействия с сильным полем.

В случае отрицательных ионов конкретные результаты на основе квазиклассического приближения получены в работе [38] при расчете вероятности двухфотонного распада отрицательных ионов щелочных атомов. При этом короткодействующий потенциал выбирался в виде

$$U(\mathbf{r}) = -\frac{\alpha_a}{2(r+r_p)^4}, \quad (47)$$

который учитывает поляризационный характер притяжения электрона к атому на больших расстояниях. В выражении (47) α_a — статическая поляризуемость атома, r_p — радиус обрезания, величина которого сравнима с размерами атома.

На рис. 7 частотная зависимость вероятности двухфотонного распада, полученная в работе [38] (кривая 1), сравнивается с численным расчетом работы [21] (кривая 2). Видно хорошее согласие приведенных результатов как в области порога двухфотонного распада, так и в области максимального значения вероятности. Таким образом, квазиклассическое решение задачи об отрыве электрона из короткодействующего потенциала способно в общих чертах описать процесс нелинейного распада отрицательных ионов.

3.3. Ион, «одетый полем». Определение квазиэнергий методом комплексного вращения координат. Изложенное выше квазиклассическое приближение справедливо при $\omega \ll |E_0|$, т. е. когда процесс фотораспада существенно многофотонный. При малых степенях нелинейности эффективным является метод, основанный на рассмотрении системы «ион, одетый полем». Этот метод может быть справедливым и при настолько сильных полях, что теория возмущений не применима. Данный подход применялся в работе [39] для описания нелинейного распада отрицательных ионов галогенов.

Гамильтониан системы «ион + поле» имеет вид

$$H = H_I + H_F + H_{IF}, \quad (48)$$

где член

$$H_I = \sum_i \left(-\frac{1}{2} \Delta_i - \frac{Z}{r_i} \right) + \sum_{i,j} \frac{1}{r_{ij}} \quad (49)$$

описывает поведение свободного от поля иона; $H_F = \omega \hat{a}^+ \hat{a}$ — гамильтониан поля. Последний член выражения (48) определяет взаимодействие иона с полем:

$$H_{IF} = \sum_i \mathbf{r}_i \mathbf{e} (\hat{a} + \hat{a}^+), \quad (50)$$

где $\mathbf{e}$ — вектор линейной поляризации поля; $\hat{a}^+$, $\hat{a}$ — операторы рождения и уничтожения фотона с частотой ω .

Состояние всей системы раскладывается по базису состояний поля $|N\rangle$ с различным числом фотонов N и по базису состояний иона. В работе [39] основное состояние отрицательного иона рассчитывается методом Хартри — Фока [40]. Его возбужденные состояния описываются в приближении замороженного остова. Это приближение заключается в том, что рассматриваются возбужденные состояния только одного внешнего электрона, в то время как состояние остова остается неизменным. Гамильтониан H_0 , описывающий поведение оптического электрона, строится путем интегрирования гамильтониана (49) по состояниям Z электронов остова.

Для вычисления характеристик взаимодействия иона с электромагнитным излучением в работе [39] используется метод комплексного вращения координат, который ранее с успехом применялся, например, в задаче об ионизации атома водорода [41]. Идея метода заключается в преобразовании координат $r' = kre^{i\varphi}$ в гамильтониане, оставляющем неизменными его собственные значения, соответствующие квазистационарным состояниям. При таком преобразовании радиальные волновые функции электронов образуют пространство квадратично интегрируемых функций, и их можно разложить по базису слетеровского типа:

$$\psi_{lnk} = (kre^{i\varphi})^{l+n} \exp\left(-\frac{1}{2}kre^{i\varphi}\right), \quad (51)$$

где l — орбитальный момент, $n \geq 1$ — целое число, $0 \leq \varphi \leq \pi/2$. Гамильтонова матрица, построенная на базисе состояний системы «ион, одетый полем», т. е. учитывающем изменение волновых функций атома во внешнем поле, является неэрмитовой (поскольку $\varphi \neq 0$), а ее собственные значения комплексны. Мнимая часть собственного значения определяет вероятность распада системы, а его действительная часть — энергию системы с учетом полевого сдвига, т. е. эффекта Штарка. Результаты, полученные данным методом, будут соответствовать расчету по теории возмущений порядка q , если ограничиться состояниями поля $|M\rangle$ с числом фотонов $N - q \leq M \leq N$, где N — исходное число фотонов.

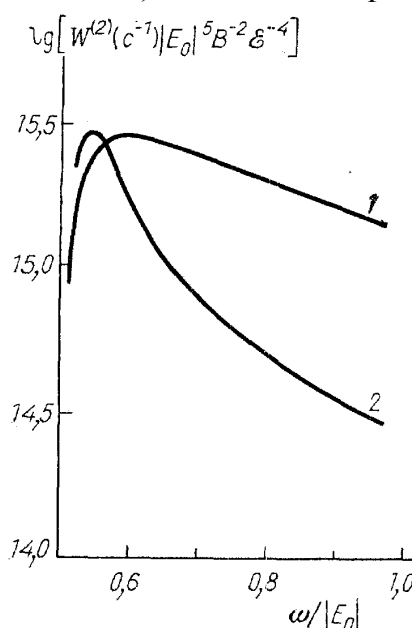


Рис. 7. Частотная зависимость вероятности $W^{(2)}$ двухфотонного распада отрицательного иона щелочного атома, умноженной на комбинацию величин $|E_0|^5 B^{-2} E^{-4}$. 1 — [38], 2 — [21]. B — численный коэффициент в асимптотическом разложении волновой функции слабосвязанного электрона [32]. Вероятность $W^{(2)}$ выражена в c^{-1} , другие величины приведены в атомной системе единиц

ны при пренебрежении взаимодействием оторванного электрона с атомом. Результаты отличаются друг от друга не более чем в два раза. Считая такую точность приемлемой, в работе [39] были получены сечения фотораспада отрицательных ионов F^- , Cl^- , Br^- , I^- со степенью нелинейности $n = 2-5$ в приближении плоских волн для состояний непрерывного спектра. На рис. 9 представлены результаты расчета зависимости сечений пятифотонного распада указанных ионов от энергии оторванного электрона.

Необходимо отметить, что в расчете ограничивается число переизлучаемых фотонов, т. е. возможность, например, виртуального излучения

Данный метод очень похож на вышеизложенный квазиэнергетический подход за тем исключением, что теперь внешнее поле описывается на языке вторичного квантования. При этом точно известна энергия состояния всей системы «ион + поле», в то время как энергия электрона определена с точностью до слагаемого $n\omega$. Детальное рассмотрение изложенного подхода содержится в работе [41].

В работе [39] на основе рассмотрения системы «ион, одетый полем» рассчитаны сечения многофотонного распада отрицательных ионов галогенов со степенью нелинейности от $n=2$ до $n=5$. На рис. 8 приведены результаты расчета зависимости сечения двухфотонного распада ионов F^- , Cl^- от кинетической энергии оторванного фотоэлектрона. Крестики соответствуют приближению замороженного остова при описании состояния иона. Сплошные кривые получены при пренебрежении взаимодействием оторванного электрона с атомом.

Результаты отличаются друг от друга не более чем в два раза. Считая такую точность приемлемой, в работе [39] были получены сечения фотораспада отрицательных ионов F^- , Cl^- , Br^- , I^- со степенью нелинейности $n = 2-5$ в приближении плоских волн для состояний непрерывного спектра. На рис. 9 представлены результаты расчета зависимости сечений пятифотонного распада указанных ионов от энергии оторванного электрона.

s фотонов и поглощения $n \pm s$ фотонов в процессе с минимальным числом поглощаемых фотонов, равным n , и поэтому имеется неявное ограничение по величине светового потока. Также следует учитывать, что изложенная выше процедура расчета верна до тех пор, пока действие Внешнего поля слабо меняет исходное связанное состояние.

3.4. Численное моделирование нелинейного фототрыва электронов от отрицательных ионов. Как мы уже отмечали ранее, наиболее сильным ограничением при применении теории возмущений по внешнему полю к нелинейным процессам в отрицательных ионах является требование малости сдвига границы непрерывного спектра по сравнению с величиной энергии фотона, т. е. выполнение условия $\eta = \mathcal{E}^2/\omega^3 \ll 1$.

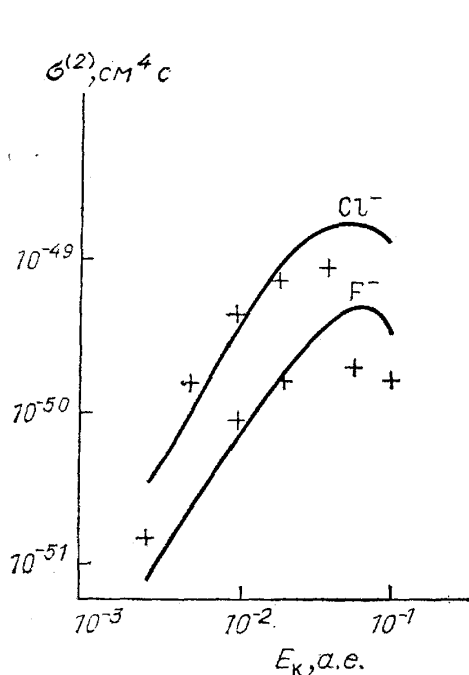


Рис. 8. Сечение двухфотонного распада ионов F^- и Cl^- в зависимости от кинетической энергии оторванного электрона E_k [39]. Расчеты проведены методом комплексного вращения координат как с учетом (значки), так и без учета (сплошные линии) взаимодействия оторванного электрона с остовом

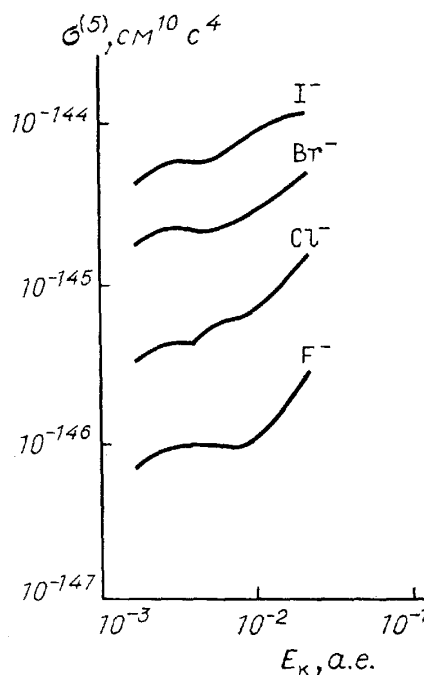


Рис. 9. Зависимость сечения пятифотонного распада отрицательных ионов галогенов от кинетической энергии оторванного электрона E_k [39]. Расчеты проведены методом комплексного вращения координат без учета взаимодействия оторванного электрона с остовом

При нарушении этого условия при описании нелинейного фотораспада отрицательного иона существенными становятся переходы между состояниями непрерывного спектра. Для анализа их роли необходимо рассмотреть матричный элемент перехода между состояниями континуума. Для многофотонного распада отрицательного иона с однофотонным надпороговым поглощением результат на основе теории возмущений в модели трехмерного δ -потенциала получен в работе [42]. Установлено, что отношение амплитуд переходов в непрерывный спектр с учетом и без учета поглощения дополнительного фотона по порядку величины совпадает с параметром η . Квазиклассические оценки матричных элементов свободно-свободных переходов вблизи порога в случае произвольного короткодействующего потенциала дают тот же результат [43]. Также отметим, что критерий применимости теории возмущений $\eta \ll 1$ ранее найден на основе решения в линейно поляризованном поле для модели

δ -потенциала в работе [44] путем анализа математической структуры соответствующих решений без апелляции к наглядным физическим механизмам. Выявленный физический смысл параметра η позволяет заключить, что с его ростом теория возмущений будет нарушаться, причем такое нарушение будет сопровождаться рядом новых явлений. К их числу можно отнести надпороговое поглощение фотонов электронами при отрыве, увеличение фотонности процесса за счет закрытия каналов многофотонного отрыва при штарковском сдвиге границы непрерывного спектра и возможную частичную стабилизацию по этой же причине отрицательного иона с увеличением интенсивности внешнего электромагнитного поля.

Для процесса однофотонного распада последний из перечисленных эффектов детально исследован в работах [45, 46]. В этих работах наряду с учетом: временного изменения амплитуды вероятности перехода электрона в непрерывный спектр, связанного с вариацией величины амплитуды напряженности электрического поля с течением времени, учитывается динамический эффект Штарка. Было установлено, в частности, отклонение закона распада от линейного $W \sim \tau$, который остается справедливым при малом штарк-эффекте и большом превышении частоты излучения над порогом. В отрицательных ионах с одним связанным уровнем с энергией E_0 при частоте $\omega \approx |E_0|$ и поляризуемости $\alpha(\omega) > 0$ для больших поляризуемостей $\alpha \gg 1/\tau$, Δ_0 ($\Delta_0 = \omega + E_0$) и больших или малых по сравнению с шириной лазерного импульса $1/\tau$ расстройек частоты от порога ($|\Delta_0| \leq 1/\tau$) возникает насыщение вероятности распада: вероятность перестает зависеть от интенсивности поля. Этот результат интерпретируется как частичная стабилизация отрицательного иона в электромагнитном поле. Физическая причина стабилизации заключается в том, что с ростом интенсивности поля за счет штарк-эффекта уровень сдвигается вниз так, что частота становится меньше пороговой. При этом резко уменьшается вероятность распада и изменяется зависимость его скорости от времени. При больших частотах, когда $\Delta_0 \gg \alpha$, распад носит обычный линейный характер. Вся роль штарк-эффекта при этом сводится к деформации дисперсионной кривой $\sigma(\omega)$. Именно это и наблюдалось экспериментально в работе [47].

В случае многофотонного распада аналитическое описание указанных выше эффектов в настоящее время отсутствует. В последнее время широкое распространение приобрело численное моделирование нелинейного фотораспада на основе прямого компьютерного решения одномерного нестационарного уравнения Шрёдингера. При этом в работах [48—50] использовались различные конкретные выражения для короткодействующего потенциала. Кроме того, в работе [50] рассматриваемый потенциал допускал существование нескольких связанных состояний, и, таким образом, учитывалась возможность проявления резонансов в рассматриваемых процессах. Конкретные численные методы решения одномерного уравнения Шрёдингера могут быть различными: построение оператора эволюции на малых промежутках времени с использованием операторных экспонент [50], разложение по плосковолновому базису [48], использование прямых сеточных методов, как при расчетах динамики атомов [51]. Проведенные исследования выявили следующие основные закономерности процесса нелинейного фотораспада отрицательных ионов.

1. С ростом интенсивности внешнего электромагнитного поля наблюдается немонотонность в росте вероятности развала отрицательного иона [49, 50]. Участки роста вероятности сменяются участками ее спада, причем положение участков спада определяется выполнением условия закрытия канала отрыва электрона с данным числом поглощаемых фотонов за счет штарковского сдвига границы непрерывного спектра.

Соответствующая зависимость, взятая из работы [49], приведена на рис. 10.

Кроме того, наблюдается немонотонность и в частотной зависимости [49], представленной на рис. 11 для постоянной напряженности внешнего поля. Спады в частотной зависимости объясняются уменьшением вероятности фотораспада при минимально возможном числе поглощаемых фотонов с ростом частоты. В то же время с увеличением частоты

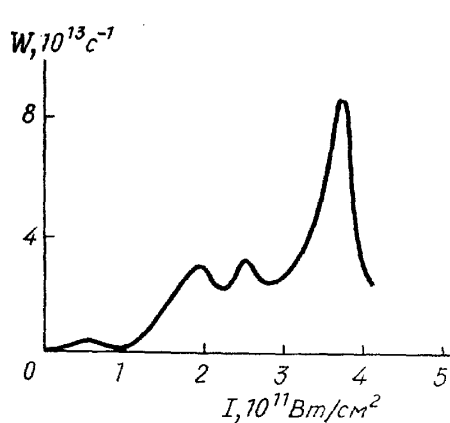


Рис. 10. Зависимость вероятности фотоотрыва электрона из одномерного короткодействующего потенциала от интенсивности электромагнитного излучения [49]

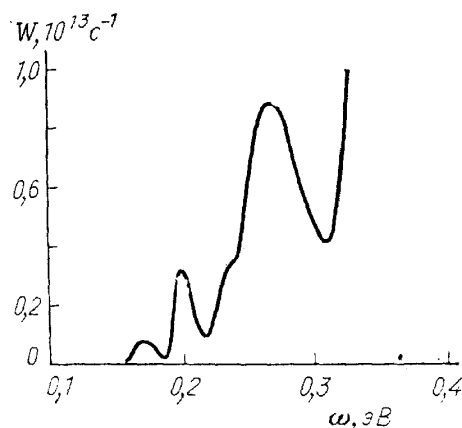


Рис. 11. Зависимость вероятности фотоотрыва электрона из одномерного короткодействующего потенциала от частоты внешнего поля [49]

происходит открытие каналов фотораспада с поглощением меньшего числа фотонов, связанное как непосредственно с увеличением частоты, так и с уменьшением штарковского сдвига континуума. Это отражается в соответствующем росте вероятности при дальнейшем увеличении частоты. Поскольку степень нелинейности процесса фотораспада с ростом частоты уменьшается, то последующие максимумы в частотной зависимости имеют большую величину. Отметим, что впервые эффекты немонотонного роста вероятности нелинейного фотоотрыва электронов от отрицательных ионов были получены теоретически Островским и Тельновым в рамках адиабатического приближения ⁽¹⁾.

Недавний эксперимент [52] по разрушению пучка релятивистских ионов H^- излучением CO_2 -лазера подтвердил реальность описанных выше эффектов. В нем наблюдалась указанная немонотонность зависимости вероятности фотораспада H^- от частоты излучения. Экспериментально наблюдаемые провалы и сдвиг по частоте всей дисперсионной зависимости могут быть объяснены только с учетом штарковского сдвига континуума, который в данном эксперименте превышает величину энергии связи электрона в ионе.

2. При численном моделировании в спектре оторванных электронов наблюдается структура, состоящая из отдельных четко выраженных пиков [50], отстоящих друг от друга по энергетической шкале на величину ω , как показано на рис. 12. Также наблюдается сдвиг спектра надпороговых электронов и закрытие низших пиков спектра за счет штарковского сдвига границы непрерывного спектра.

Казалось, можно было бы ожидать, что модели типа приближения Келдыша позволяют описать явления надпорогового поглощения. В этом случае после поглощения минимально необходимого для отрыва числа фотонов электрон становится свободным, и относительную интенсивность линий в энергетическом спектре электронов можно определить

соотношением [53]

$$W_s = \left| \sum_{k=-\infty}^{\infty} J_k\left(\frac{\eta}{8}\right) J_{s+2k} (2s\eta)^{1/2} \right|^2, \quad (52)$$

где J_k — функция Бесселя, s — номер открытого надпорогового пика, отсчитываемого от порога с учетом штарковского сдвига. В действительности численные расчеты, по крайней мере для кулоноподобных далекодействующих потенциалов, дают существенно отличные от формулы (52) результаты [53]. Здесь, по-видимому, причина заключается в необходимости более полного учета потенциала, в том числе и в конечном

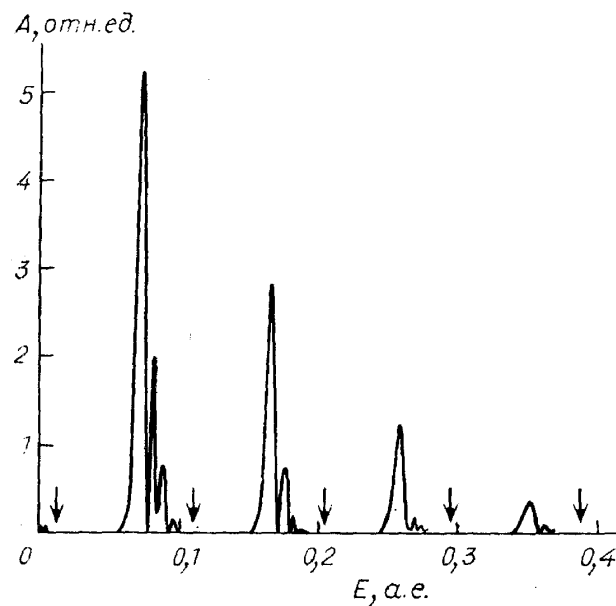


Рис. 12. Энергетический спектр электронов при надпороговом отрыве из одномерного короткодействующего потенциала [50]. Стрелки указывают положение пиков без учета штарковского сдвига границы непрерывного спектра

состоянии, что полностью игнорируется приближением (52). В то же время замена в конечном состоянии плоской волны e^{ipx} на точную волновую функцию в континууме [54] позволяет улучшить согласие с численными расчетами. Вопрос о существенности учета взаимодействия с атомом в конечном состоянии при надпороговом отрыве электронов от отрицательных ионов пока открыт. Отметим только, что в численных экспериментах с одномерным кулоноподобным потенциалом, так же как и в соответствии с формулой (52), наблюдался скейлинг среднего числа поглощаемых над порогом фотонов по параметру η . Это, по всей видимости, означает, что основные закономерности процесса надпорогового поглощения наиболее существенно зависят от параметров поля и значительно слабее от параметров потенциала.

3.5. Резюме. Таким образом, описанные в данном разделе методы расчета позволяют получить вероятность нелинейного фотораспада отрицательного иона при достаточно сильных полях, где теория возмущений неприменима. Сравнение показывает, что отклонение точного решения от результатов теории возмущений может быть весьма велико уже при $\gamma \approx 1$.

Метод квазиклассического приближения, а также точное решение модельной задачи об отрыве электрона из δ -потенциала, являются очень полезными для слабых полей. Они позволяют найти вероятность фото-

распада при большой степени нелинейности ($n \gg 1$), когда применение теории возмущений технически затруднено, и установить общий характер ее зависимостей от таких параметров как $\mathcal{E}$ и ω .

Следует еще раз подчеркнуть, что к настоящему времени остается открытым вопрос о точности квазиклассического приближения, в то время как недостатком точно разрешимой б-потенциальной модели является ее приближенность. Метод комплексного вращения координат позволяет, в принципе, учесть реальную многоэлектронную структуру отрицательного иона, но ограничен величиной внешнего поля и соответствует квазистационарной постановке задачи.

Прямое численное моделирование одномерного уравнения Шрёдингера позволяет продвинуться в область сильных полей, где велики штарковские сдвиги и эффективно идет надпороговое поглощение фотонов. При этом выявлены такие новые эффекты, как, например, закрытие каналов фотораспада и сдвиг пиков в электронном спектре за счет штарк-эффекта. Дальнейшее развитие компьютерного моделирования с учетом трехмерности задачи и межэлектронного взаимодействия могло бы дать наиболее полную картину нелинейного фотораспада.

До сих пор мы рассматривали методы, в которых не учитывается роль межэлектронного корреляционного взаимодействия в нелинейных процессах. Этим эффектам посвящен следующий раздел.

4. Корреляционное взаимодействие в нелинейных процессах.

4.1. Теория возмущений по внешнему полю и корреляционному взаимодействию. Мы уже указывали на то, что корреляционное взаимодействие является существенным при описании строения отрицательных ионов и что оно может существенным образом проявиться и при описании процесса взаимодействия отрицательных ионов с электромагнитным полем. Определенное представление о динамике, порождаемой корреляционным взаимодействием, можно составить на основании аналогии с классической электродинамикой сплошных сред [55, 56].

Согласно классической модели электроны в атоме совершают гармонические колебания относительно ядра, т. е. атом можно рассматривать как совокупность гармонических осцилляторов. Поскольку сложная атомная система содержит много атомных оболочек с разными резонансными частотами, то в разных диапазонах частот доминирует вклад в диэлектрическую проницаемость то одних, то других оболочек. Причем в разных областях частот возможно как усиление, так и ослабление внешнего поля.

Теоретическое описание многофотонного отрыва возможно с помощью теоретико-полевой теории многих частиц.

Если напряженность лазерного поля невелика, то можно воспользоваться теорией возмущений по внешнему полю [57]. Атомная система с зарядом Z описывается гамильтонианом (49). Задача может быть упрощена, если аппроксимировать $\sum (1/r_{ij})$ суммой вида $\sum V_i$, где V_i — одночастичный потенциал, учитывающий взаимодействие i -го электрона с остальными $N-1$ электронами. Тогда гамильтониан принимает вид

$$H_1 = H_0 + H_c, \quad (53)$$

где

$$H_0 = \sum_{i=1}^N \left(-\frac{\nabla_i^2}{2} - \frac{Z}{r_i} + V_i \right), \quad (54)$$

$$H_c = \sum_{\substack{i,j=1 \\ i < j}}^N \frac{1}{r_{ij}} - \sum_{i=1}^N V_i. \quad (55)$$

Кроме того, если атомная система помещена в электромагнитное поле лазерного излучения, то возникает взаимодействие, равное в дипольном приближении

$$V(t) = \vec{\mathcal{E}} \cos \omega t \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i, \quad (56)$$

где $\mathbf{r}_i$ — дипольный момент i -го электрона.

Если учитывать и взаимодействие с полем, и корреляционное взаимодействие по теории возмущений, то члены ряда теории возмущений могут быть получены на основе выражения для $\hat{S}$ -матрицы в виде T -экспоненты [58]:

$$\hat{S} = T \exp \left(-i \int_{-\infty}^{\infty} \hat{H}_{\text{int}} d\tau \right), \quad (57)$$

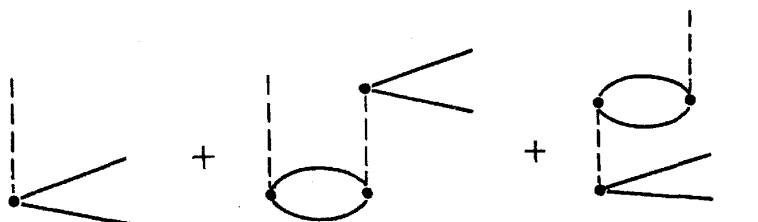
где

$$\hat{H}_{\text{int}} = \hat{H}_c + \hat{V}(t). \quad (58)$$

Операторы H_c и V здесь рассматриваются в представлении вторичного квантования [59].

$\hat{S}$ -матрица может быть разложена в ряд, а T -произведение раскрывается с помощью теоремы Вика [58]. Это позволяет сформулировать правила диаграммной техники. Поскольку рассматриваются возбуждения многоэлектронной системы, то вакуум можно переопределить, взяв за него невозбужденное состояние отрицательного иона. Такое переопределение имеет смысл при слабом возбуждении ферми-системы [60]. При этом образование вакансий в отрицательном ионе будет соответствовать появлению дырки. Направление распространения дырки противоположно направлению распространения электрона. Ось времени направим горизонтально слева направо. Сплошная линия между двумя узлами ($\cdot - \cdot$) соответствует функции Грина электрона. Свободные концы указывают на его конечное или начальное состояние. Штриховая линия ($- - - -$) обозначает поглощение или излучение фотона. Узел обозначает взаимодействие. Межэлектронное взаимодействие обозначается штриховой линией, соединяющей два узла ($\cdot - - - \cdot$), и располагается вертикально.

В рамках описанной процедуры можно, например, рассчитать сечения однофотонного распада отрицательных ионов атомов щелочных элементов и атома водорода. В первом порядке теории возмущений по корреляционному взаимодействию при этом учитываются диаграммы Фейнмана вида



$$+ \quad + \quad + \quad (59)$$

При выборе волновой функции слабосвязанного электрона в отрицательном ионе в виде (25) сечение фотоотрыва описывается соотноше-

нием [61]

$$\sigma(\omega) = \frac{4\pi}{3c} B^2 \frac{\gamma p^3}{\omega^2} \left[1 - \frac{(\gamma^2 + p^2)}{(\beta^2 + p^2)} - \frac{\alpha(\omega)(\gamma^2 + p^2)}{4p^3} (f(p, \gamma) - f(p, \beta)) \right]^2, \quad (60)$$

$$f(p, \gamma) = (\gamma^2 + p^2) \operatorname{arctg} \frac{p}{\gamma} - \gamma,$$

где $\alpha(\omega)$ — динамическая поляризуемость атома, p — импульс вылетевшего электрона при поглощении фотона с частотой ω . При этом корреляционное взаимодействие учитывается в формуле (60) членом, содержащим динамическую поляризуемость. При выводе формулы (60) предполагалось, что центрально-симметричной частью взаимодействия электро-

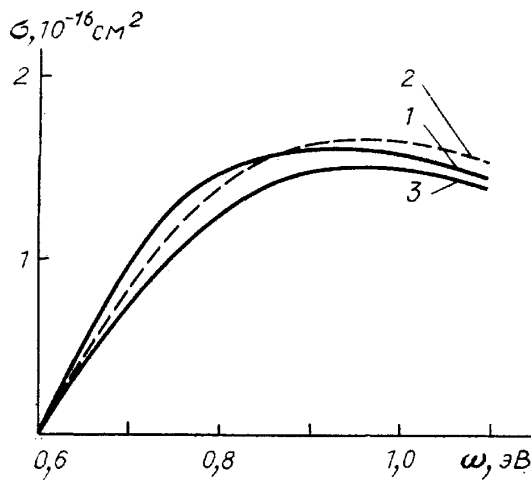


Рис. 13. Зависимость сечения фотораспада Li^- от частоты излучения [61]

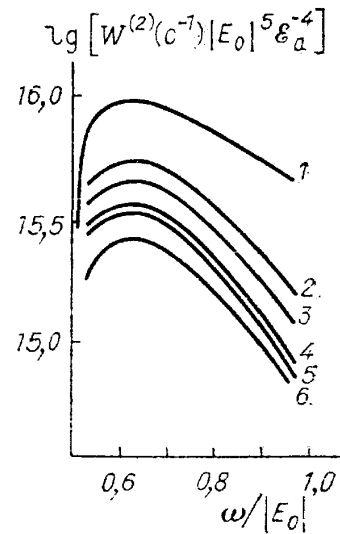


Рис. 14. Частотная зависимость вероятности двухфотонного распада отрицательных ионов щелочных атомов циркулярно-поляризованным светом [21]. Кривая 1 — результат расчета без учета корреляционных эффектов. Кривые 2—6 — расчет для ионов Li^- , Na^- , K^- , Rb^- , Cs^- с учетом виртуального возбуждения атомов

на с атомом в непрерывном спектре можно пренебречь, и поэтому волновые функции являются плоскими волнами. Результаты расчетов [61] для иона Li^- ($\gamma=0,21$, $\beta=0,46$) представлены на рис. 13 кривой 1. Они хорошо согласуются с экспериментальными данными работы [62] (кривая 2) и теоретическим расчетом методом сильной связи каналов (кривая 3) [63].

Аналогичным образом можно учесть корреляционное взаимодействие в случае двухфотонных процессов распада отрицательных ионов.

Для учета виртуального возбуждения остова (атома) в первом порядке теории возмущений по корреляционному взаимодействию и во втором порядке по взаимодействию с полем следует рассмотреть диаграммы вида

$$(61)$$

а также обменные диаграммы, получающиеся перестановкой порядка учета взаимодействий во времени.

Результаты расчета [21] вероятности двухфотонного отрыва электронов в единицу времени от отрицательных ионов щелочных элементов $\text{Li}^- - \text{Cs}^-$ циркулярно поляризованным светом представлены на рис. 14. Напряженность электрического поля световой волны положена формально равной атомной напряженности поля

$$\mathcal{E}_a = 5,14 \cdot 10^9 \text{ В/см.}$$

Для реальных напряженностей $\mathcal{E}$ приведенную вероятность следует умножить на $(\mathcal{E}/\mathcal{E}_a)^4$. При расчетах для слабосвязанного электрона взята волновая функция в модели δ -потенциала [7], а волновые функции непрерывного спектра, как и в однофотонном случае, предполагались плоскими. Из сравнения кривых видно, что корреляционные эффекты для циркулярной поляризации внешнего поля приводят к уменьшению вероятности разрушения иона. О физической сущности данного результата будет сказано в следующих разделах. Отметим, что использование δ -потенциальной модели для двухфотонного отрыва s -электронов от отрицательных ионов полем линейной поляризации должно, по видимому, приводить к большим погрешностям, поскольку при поглощении двух фотонов электрон может перейти в s -состояние непрерывного спектра.

В этом случае матричные элементы корреляционного взаимодействия будут сильно завышены, поскольку при этом сингулярность волновой функции связанного s -состояния сказывается наиболее сильным образом.

Несмотря на продемонстрированную нами плодотворность метода теории возмущений, его прямое использование при описании процессов более высоких порядков наталкивается как на технические, так и на принципиальные трудности.

Техническая проблема заключается в том, что с ростом степени многоквантовости процесса, а также при попытке более полного учета корреляционного взаимодействия, число диаграмм Фейнмана стремительно возрастает. При этом остается неясным, какая часть корреляционного взаимодействия учтена. А это уже затруднение принципиального характера.

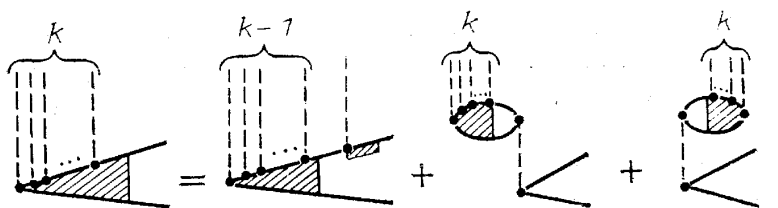
4.2. Приближение случайных фаз в применении к многофотонным процессам. Полное разрешение отмеченных в разделе 4.1 проблем в настоящее время отсутствует. Существует, однако, способ полного суммирования определенного класса диаграмм, позволяющий учесть влияние виртуального возбуждения атома на фотопроцессы, включая многоквантовые. Таким методом является приближение случайных фаз, а при учете обмена — приближение случайных фаз с обменом. Достаточно полное рассмотрение этих методов в применении к описанию фотоионизации атомов можно найти в монографии [64].

В теории конечных ферми-систем известно, что учет остаточного взаимодействия электронов приводит к перенормировке однофотонной вершины [64]. Наиболее наглядно это может быть выражено на графическом языке [60].

Приближение случайных фаз было с большим успехом применено к расчету сложных атомных систем [65], включая отрицательные ионы [66, 67].

Диаграммная техника позволяет простым и ясным способом обобщить приближение случайных фаз на многофотонные процессы и получить интегральное уравнение для перенормировки k -фотонной вершины.

Графическое уравнение имеет вид



Соответственно можно записать интегральное уравнение для перенормировки k -фотонной вершины

$$D_{ii}^{(k)}(\omega) = D_{ii}^{(k)} - \sum_n \frac{2\omega_{ni} W_{ifni} D_{ni}^{(k)}(\omega)}{\omega_{ni}^2 - (k\omega)^2}, \quad (62)$$

где

$$W_{ifni} = \langle if | |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1} | ni \rangle,$$

$D_{ni}^{(k)}(\omega)$ — матричный элемент k -фотонного процесса с учетом перенормировки; $D_{ii}^{(k)}$ — матричный элемент, при расчете которого перенормирован $(k-1)$ -фотонный матричный элемент, т. е.

$$D_{ii}^{(k)} = \sum_n \frac{D_{in}^{(1)} D_{ni}^{(k-1)}(\omega)}{\omega_{ni} - (k-1)\omega}. \quad (63)$$

На основании такого приближения случайных фаз для многофотонных процессов были рассчитаны сечения двухфотонной ионизации атомов He и Xe [68, 69]. Фактически перенормировке подвергалась только однофотонная вершина $D^{(1)}$.

На рис. 15 представлены результаты расчета сечения двухфотонной ионизации атома ксенона [69]. Сплошной кривой показаны расчеты в приближении случайных фаз на основе гамильтониана Хартри — Фока. Пунктирной линией обозначены результаты расчетов сечений в приближении случайных фаз на основе гамильтониана в приближении функционала локальной электронной плотности. Как видим, расчет на основе функционала локальной электронной плотности дает усредненную картину изменения сечения с частотой и неудовлетворительно описывает только окрестности резонансов. Таким образом, можно ожидать, что приближение случайных фаз на основе функционала локальной электронной плотности может дать хорошие результаты при расчетах сечения многофотонного отрыва электронов от отрицательных ионов во всем диапазоне частот до первого потенциала возбуждения соответствующего атома. При больших частотах на ход дисперсионной кривой с неизбежностью

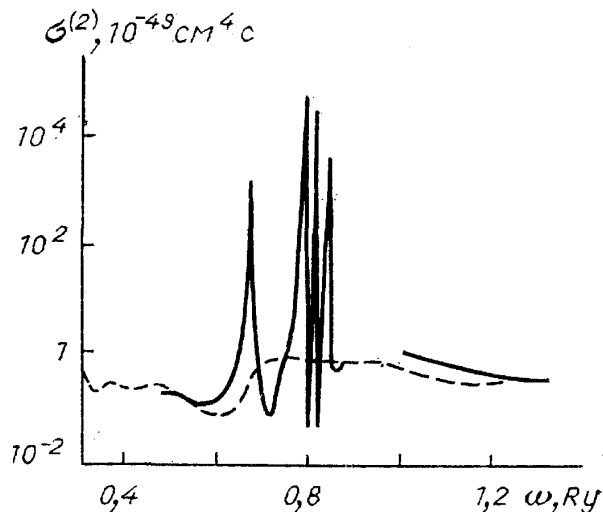


Рис. 15. Частотная зависимость сечения двухфотонной ионизации атома Xe [69]. Расчет проведен в приближении случайных фаз: сплошная линия — на основе гамильтониана Хартри — Фока, штриховая линия — на основе гамильтониана в приближении функционала локальной электронной плотности

большое влияние окажут густо расположенные резонансы с автоионизационными состояниями отрицательного иона.

К сожалению, несмотря на отмеченную перспективность приближения функционала локальной электронной плотности для расчета многофотонных сечений распада отрицательных ионов, практические расчеты таким образом не проводились.

Приближение случайных фаз на основе гамильтониана Хартри — Фока применялось в работе [70] при расчете сечения двухфотонного распада $\sigma^{(2)}(\omega)$ иона I^- и в работе [71] при расчете $\sigma^{(2)}(\omega)$ иона Cl^- . Результаты расчетов для I^- приведены на рис. 16, где кривая 1 соответствует приближению случайных фаз, а кривая 2 — расчету на основе

приближения Хартри — Фока без учета корреляций [70]. Там же нанесены результаты

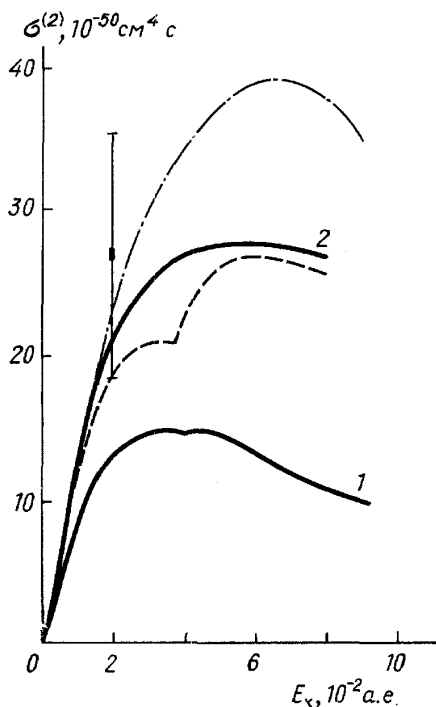


Рис. 16. Зависимость сечения двухфотонного распада иона I^- от кинетической энергии оторванного электрона E_k . Кривая 1 — расчет в приближении случайных фаз [70]; остальные расчеты выполнены без учета корреляционных эффектов (кривая 2 — [70], штриховая — [26], штрихпунктирная — [39])

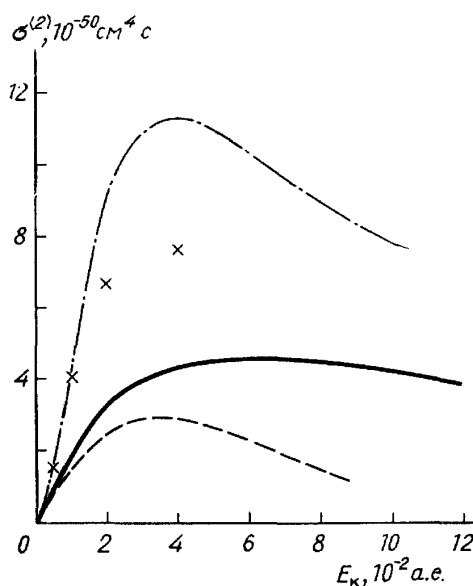


Рис. 17. Зависимость сечения двухфотонного распада иона Cl^- от кинетической энергии оторванного электрона. Сплошная линия — расчет в приближении случайных фаз [71], штриховая — расчет с учетом корреляционных эффектов в поляризационном приближении [28]; остальные расчеты выполнены без учета корреляций (штрих-пунктир — [26], значки — [39])

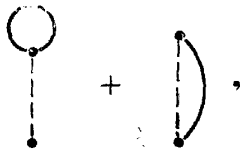
работы [26] (штриховая линия) и работы [39] (штрих-пунктирная линия), в которых корреляционные эффекты также не учитывались. Приведенные результаты демонстрируют проявление эффекта экранировки внешнего поля электронами атома, так как полученные с учетом корреляций значения сечения в широком диапазоне частот излучения оказываются существенно меньше сечений, полученных в результате расчетов, проведенных без учета корреляционного взаимодействия. В то же время рассчитанное с учетом корреляций сечение несколько меньше и экспериментального результата [27], полученного при частоте рубинового лазера с большой экспериментальной ошибкой (см. рис. 16). Таким образом, для более корректного сравнения теории с экспериментом необходимо повышение точности как экспериментальных данных, так и теоретических расчетов.

Аналогичная ситуация наблюдается и в случае двухфотонного распада Cl^- [71], где также проявляется эффект экранировки внешнего поля и происходит уменьшение сечения двухфотонного отрыва за счет корреляционных эффектов. Результаты расчетов $\sigma^{(2)}(\omega)$ иона Cl^- , выполненных в приближении случайных фаз на основе гамильтониана Хартри — Фока [71], представлены на рис. 17 сплошной линией. Здесь же приведены результаты работ [26] (штрихпунктирная линия) и [39] (значки), в которых корреляционное взаимодействие не учитывалось.

В работе [72] получено экспериментальное значение сечения двухфотонного распада иона Cl^- , измеренное с точностью 30% при кинетической энергии фотоэлектрона $E_k = 0,005$ а.е., и равное $1,3 \cdot 10^{-50}$ см⁴с. Расчеты работы [71] дают значение $\sigma^{(2)} \approx 1,1 \cdot 10^{-50}$ см⁴с, что довольно хорошо согласуется с экспериментальным результатом. К сожалению, в настоящее время экспериментальное исследование нелинейного взаимодействия отрицательных ионов с электромагнитным полем развито довольно слабо, и нет возможности в полной мере сравнить теоретические результаты с экспериментальными данными. Штриховая линия на рис. 17 соответствует расчету [28], где взаимодействие учитывалось в поляризационном приближении. Детальное обоснование такого приближения дано в следующем разделе.

4.3. Поляризационное приближение. В сильных световых полях при расчетах многофотонных процессов в сложных атомных системах кроме перенормировки взаимодействия с полем за счет остаточного межэлектронного взаимодействия H_c необходимо также учитывать возможность переизлучения фотонов, и, вообще говоря, рассматривать электронные состояния, «одетые» полем. Частично это может быть учтено введением в числитель уравнения (62) матричного элемента от дополнительного слагаемого Σ_m , учитывающего штарк-эффект во внешнем поле [68].

Более наглядным, на наш взгляд, является квазиэнергетический подход. В то же время он не связывает исследователя при изучении многофотонных процессов с теорией возмущений по внешнему полю. Используя квазиэнергетический базис, учет корреляционного взаимодействия можно провести так же, как и в отсутствие сильного поля, на основе теории возмущений по этому взаимодействию. Суммируя тот же класс диаграмм



что и в приближении Хартри-Фока, мы получим эффективный потенциал. Его вид определяется действием на произвольную одночастичную волновую функцию ψ следующим образом:

$$V_{\text{eff}} \psi(\mathbf{r}, t) = [V_0(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}, t)] \psi(\mathbf{r}, t) + \int \frac{\delta \rho(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \psi(\mathbf{r}, t) - \sum_{\mu \leq \mu_F} \psi_{\mu}(\mathbf{r}, t) \int \frac{\psi_{\mu}^*(\mathbf{r}', t) \psi(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}', \quad (64)$$

где $\delta \rho$ — изменение электронной плотности, вызываемое действием внешнего переменного поля. Оно равно

$$\delta \rho = \sum_{\mu \leq \mu_F} (|\psi_{\mu}|^2 - |\psi_{\mu}^0|^2), \quad (65)$$

где Ψ_μ^0 и Ψ_μ есть соответственно невозмущенные состояния и квазиэнергетические состояния в поле лазерного излучения. Суммирование в формулах (64) и (65) производится по всем заполненным состояниям, μ_F — состояние, соответствующее границе Ферми. Первый член в выражении (64) описывает взаимодействие электрона с остовом $V_0(\mathbf{r})$ и внешним полем $V(\mathbf{r}, t)$ без учета корреляционных эффектов. Второй член добавляет поляризационное взаимодействие электрона с колебаниями электронной плотности $\delta\rho$, третий член учитывает обменные эффекты и является нелокальным. Соотношение (64) можно получить и иным способом. Для этого достаточно представить волновую функцию всей системы в виде антисимметризованного произведения одночастичных квазиэнергетических состояний. В этом случае уравнение Шрёдингера с гамильтонианом (49) распадается на систему N зацепляющихся уравнений для одночастичных квазиэнергетических состояний с потенциалом V_{eff} в виде (64).

Аналогичным образом можно построить эффективный потенциал на основе метода функционала локальной электронной плотности [9]. В этом подходе последний член выражения (64) заменяется на вариацию локальной аппроксимации обменно-корреляционного потенциала

$$\delta V_{\text{xc}} = V_{\text{xc}}[\rho_0 + \delta\rho] - V_{\text{xc}}[\rho_0], \quad (66)$$

где ρ_0 учитывает обменно-корреляционное взаимодействие в виде, являющимся справедливым для однородного электронного газа. Однако использование выражения (66) требует большой осторожности. Дело в том, что конкретный вид функции берется таким, как для однородного электронного газа в стационарном состоянии. В случае атомной системы нарушается не только условие слабой неоднородности, поскольку произведение характерного импульса на размер атома $pa \sim 1$, но и условие стационарности. Видимо, наименьшим злом является учет только первого члена разложения V_{xc} в ряд по $\delta\rho$. В этом случае относительный вклад гармоник сохраняется на том же уровне, что и в приближении Хартри — Фока. В противном случае результаты расчетов ухудшаются, примером чего могут служить результаты расчетов поляризуемостей в работе [73].

Различные способы построения эффективного потенциала позволяют развивать удобные численные алгоритмы расчета многофотонных переходов. Следует отметить, что локальные потенциалы обладают большими преимуществами при численном решении задач. Этим, в частности, объясняется широкое распространение в последнее время метода функционала локальной электронной плотности [9].

Одновременное решение системы N уравнений для частиц в эффективном потенциале (64) позволяет определить не только самосогласованный потенциал V_{eff} , но и изменение электронной плотности

$$\delta\rho(\mathbf{r}, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\omega t} \delta\rho(\mathbf{r}, n\omega) \quad (67)$$

и соответственно определить нелинейный отклик системы. Вектор поляризации при этом определяется соотношением

$$\mathbf{P}(t) = \int \mathbf{r} \delta\rho(\mathbf{r}, t) d\mathbf{r} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \mathbf{P}_n e^{in\omega t}, \quad (68)$$

где

$$\mathbf{P}_n = \int \mathbf{r} \delta\rho(\mathbf{r}, n\omega) d\mathbf{r} \quad (69)$$

— вектор поляризации на частоте $n\omega$. Если поле мало по сравнению с

атомным и для расчетов можно пользоваться теорией возмущений, то

$$\mathbf{P}_n = \hat{\chi}^{(n)} \vec{\mathcal{E}}^n, \quad (70)$$

где $\hat{\chi}$ — нелинейная восприимчивость системы, которая может быть таким образом рассчитана.

В статическом пределе $\omega \rightarrow 0$ такой подход был применен [73] для расчета поляризуемостей и гиперполяризуемостей атомных систем с замкнутыми электронными оболочками, как, например, F^- и Cl^- . В табл. II приведены результаты расчета поляризуемостей α в приближении Хартри — Фока с учетом (ХФ(С)) и без учета (ХФ) корреляционного взаимодействия, а также в приближении функционала локальной

Т а б л и ц а II. Дипольная поляризуемость α (10^{-24} см³) отрицательных ионов F^- и Cl^- [73] (в ед. 10^{-24} см³)

	F^-	Cl^-
ХФ	1,58	4,66
ХФ (С)	2,48	5,49
SIC	1,80	5,47

электронной плотности с поправкой на исключение самодействия электрона (SIC). Видно, что учет корреляционного взаимодействия в рамках метода функционала локальной электронной плотности приводит к заметному изменению величины α . Однако, следует отметить, что полученные в работе [73] величины статических поляризуемостей сильно завышены по сравнению с экспериментальными значениями [4] из-за отмечавшейся выше переоценки обменно-корреляционных эффектов.

Введенное нами поляризационное приближение на основе эффективного потенциала позволяет описать динамику электронов в сложной атомной системе под воздействием сильного светового поля в широком диапазоне изменения параметров, характеризующих поле.

4.3.1. Влияние внутренних электронов на многофотонный отрыв внешних электронов в отсутствие резонансов. В случае пространственного разделения оболочек, при учете их взаимовлияния обменным членом в выражении (64) для эффективного потенциала можно пренебречь. Если, кроме того, в кулоновском взаимодействии $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1}$ ограничиться дипольным членом: $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1} \sim r^{-1} + (\mathbf{r}\mathbf{r}'/r^3)$, то зависящую от времени часть эффективного потенциала (64) $\tilde{V}_{\text{eff}}$ можно представить в виде

$$\tilde{V}_{\text{eff}}(\mathbf{r}, t) = V(\mathbf{r}, t) + V_{\text{pol}}(\mathbf{r}, t), \quad (71)$$

где $V_{\text{pol}}(\mathbf{r}, t) = \mathbf{r}\mathbf{P}(t)/r^3$, $\mathbf{P}(t)$ — вектор поляризации остова.

Потенциал $\tilde{V}_{\text{eff}}(\mathbf{r}, t)$ описывает эффективное взаимодействие электрона с внешним полем. В работе [28] такое взаимодействие учитывалось в рамках теории возмущений при расчете поляризуемостей и сечений двухфотонного распада отрицательных ионов галогенов и щелочных атомов. При этом второй член выражения (71), соответствующий взаимодействию электрона с наведенным внешним полем дипольным моментом атома, аппроксимировался аналитически:

$$V_{\text{pol}}(\mathbf{r}, t) = \frac{\alpha_a \vec{\mathcal{E}} \mathbf{r}}{r^3} [1 - e^{-(r/r_0)^3}] \cos \omega t, \quad (72)$$

где α_a — поляризуемость атома, r_0 — радиус внешней атомной оболочки, а множитель в скобках введен для того, чтобы в численных расчетах устранить расходимость при $r \rightarrow 0$. В аналогичном виде поляризационный потенциал V_{pol} феноменологически вводился в работе [74] для учета поляризационных эффектов в нелинейных процессах в атомах.

Результаты вычислений [28] сечения двухфотонного распада иона Cl^- с учетом поляризационного потенциала (72) представлены на рис. 17 штриховой линией. При этом установлено, что учет корреляционного взаимодействия в поляризационном приближении приводит к уменьшению в 1,5—2 раза двухфотонных сечений разрушения отрицательных ионов. Данный результат находится в полном соответствии с результатами выше упомянутых работы [21, 70, 71].

Физически эффект подавления нелинейных характеристик атомной системы за счет корреляционного взаимодействия можно объяснить следующим образом. Под действием внешнего поля электронная плотность остова перераспределяется. Наведенное при этом электрическое поле частично компенсирует действие внешнего поля в пределах атома. В результате суммарное воздействие, которое испытывает фотоэлектрон, становится слабее.

Выясним, следуя [75], роль поляризационных эффектов при многофотонном отрыве на примере отрицательных ионов с валентным s-электроном. В таких отрицательных ионах, как мы уже отмечали, слабосвязанный электрон находится на расстояниях, значительно превышающих размеры атома. Действительно, если E_a — энергия связи электрона в атоме, E_0 — потенциал отрыва электрона от отрицательного иона, то отношение этих расстояний можно оценить как $(E_a/E_0)^{1/2} \gg 1$. Таким образом, гармоники поляризационного потенциала, соответствующие дипольным моментам, наведенным в атоме внешним полем, имеют асимптотический вид

$$V_{\text{pol}}^{(k)} = \frac{\vec{\mathcal{E}} \mathbf{r}}{2r^3} \mathcal{E}^{k-1} \chi^{(k)} (e^{-ik\omega t} + e^{ik\omega t}), \quad (73)$$

где $\chi^{(k)}$ — нелинейная восприимчивость нейтрального атома на соответствующей гармонике. Члены с четными k отсутствуют, так как вследствие правил отбора по четности соответствующие восприимчивости обращаются в нуль. Отрицательно-частотная часть формулы (73) соответствует поглощению атомом квантов с частотой $k\omega$ ($k=1, 3, 5, \dots$). Положительно-частотная часть описывает излучение таких квантов. Поскольку мы ограничили задачу исследованием фотоотрыва, то в низшем порядке теории возмущений можно не принимать во внимание положительно-частотные возмущения, пренебрегая таким образом процессами переизлучения фотонов. Поскольку исходный атом имеет основное s-состояние, то $\chi^{(k)}$ — скалярные величины.

Дальнейшее решение задачи основывается на процедуре, предложенной в [32]. Интегральное уравнение, описывающее распад квазистационарного состояния, имеет вид

$$\psi(\mathbf{r}, t) = -i \int_{-\infty}^t dt' \int d\mathbf{r}' G(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t') (U(\mathbf{r}') + V_{\text{pol}}(\mathbf{r}', t')) \psi(\mathbf{r}', t'), \quad (74)$$

где $G(\mathbf{r}, t, \mathbf{r}', t')$ — функция Грина электрона, движущегося в поле $\mathcal{E}(t) = \mathcal{E}_0 \cos \omega t$ [32], $U(\mathbf{r})$ — потенциал взаимодействия электрона с атомом.

Поскольку V и V_{pol} спадают при $r \rightarrow \infty$ быстрее, чем $1/r$, то в интегральном уравнении (74) можно заменить в правой части волновую функцию $\psi(\mathbf{r}', t')$ на невозмущенную волновую функцию слабосвязанно-

го электрона:

$$\psi(\mathbf{r}', t') = \varphi_0(\mathbf{r}') e^{-iE_0 t'}. \quad (75)$$

Вероятность W отрыва электрона в единицу времени линейно поляризованным вдоль оси z полем можно определить через усредненный по времени полный поток электронов вдоль направления поляризации внешнего поля [32].

Оценим вклад в сечение многофотонного отрыва нелинейных восприимчивостей высших порядков. В условиях, когда характерный параметр задачи $\gamma = \kappa\omega/\mathcal{E} \gg 1$, амплитуда вероятности поглощения одного фотона пропорциональна $1/2 \gamma$. Тогда из вида взаимодействия (73) можно оценить отношение слагаемых в выражении для полной амплитуды отрыва с участием k и $k+2$ гармоник поляризационного взаимодействия. Оценивая отношение восприимчивостей, получим

$$\xi^{(k)} \gtrsim \frac{(\bar{E} - E_a)^2}{4 (d_z^2)_{00} \omega_0^3}, \quad (76)$$

где $(d_z^2)_{00}$ — средний квадрат дипольного момента атома, $\bar{E}$ — характерная энергия возбуждения атома. Численные оценки для щелочных атомов дают значения $\xi \gtrsim 10$. Таким образом, вкладом в вероятность фотоотрыва нелинейных восприимчивостей высоких порядков ($k > 1$) можно пренебречь.

Если ограничиться учетом поляризуемости на частоте ω , и вычислить с учетом $\omega/|E_0| \ll 1$ интеграл в (74) методом перевала, то для вероятности n -фотонного отрыва получим

$$W_n = \tilde{W}_n \left(1 - \omega^2 \frac{2^{3/2} \chi^{(1)}}{B |E_0|^{1/4}} \Phi(\chi) \right)^2, \quad (77)$$

где $\Phi(\chi)$ — фурье-образ произведения поляризационного взаимодействия на волновую функцию слабосвязанного состояния $\varphi_0(r)$, B — коэффициент в асимптотическом выражении

$$\varphi_0(r) \sim \frac{B}{r} \left(\frac{|E_0|}{2\pi^2} \right)^{1/4} e^{-\kappa r}, \quad r \rightarrow \infty, \quad (78)$$

$\tilde{W}_n$ — вероятность фотоотрыва без учета поляризационных эффектов [32].

Наличие двух слагаемых в круглых скобках в формуле (77) отражает интерференцию прямой многофотонной ионизации и ионизации, идущей через возбуждение атома. Множитель, учитывающий поляризационные эффекты, является универсальным, в том смысле, что он не зависит от степени многофотонности процесса и интенсивности поля. Выражение имеет минимум (обращается в нуль) при $\omega > |E_0|$, поэтому поляризационные эффекты наиболее существенно проявляются при однофотонном отрыве, а с ростом числа требуемых для отрыва фотонов они уменьшаются, так как уменьшается частота поля.

Увеличение поляризационных эффектов с ростом частоты имеет ясный физический смысл. С ростом величины энергии, поглощенной атомом, увеличиваются его эффективные размеры и перекрытие волновых функций слабосвязанного и атомного электронов. Соответственно возрастает и корреляционное взаимодействие между ними.

На рис. 18 и 19 представлены результаты расчетов вероятности двух- и пятифотонного отрыва электронов от отрицательных ионов атомов щелочных металлов при напряженности лазерного поля $\mathcal{E} = 10^6$ В/см. Значения поляризуемостей и параметров волновых функций слабосвязанных электронов взяты из [4].

Учет поляризации атома внешним полем приводит к изменению дисперсионной зависимости вероятности многофотонного отрыва электронов. В частности, происходит подавление абсолютной величины вероятности, что и ожидалось нами на основании проведенного выше анализа физической картины явления.

4.3.2. Влияние поляризационных эффектов на многофотонный отрыв электронов при наличии резонанса. При приближении к резонансу вес соответствующей ему квазиэнергетической гармоники на частоте $k\omega$ резко увеличивается. Соответственно, должны резко увеличиваться и поляризационные эффекты. В многофотонных процессах в отрицательных ионах резонансная поляризация может проявиться при возбуждении и отрыве внутренних электронов. Для атомов резонансный механизм был предложен и качественно рассмотрен на основе теории возмущений в работе [76].

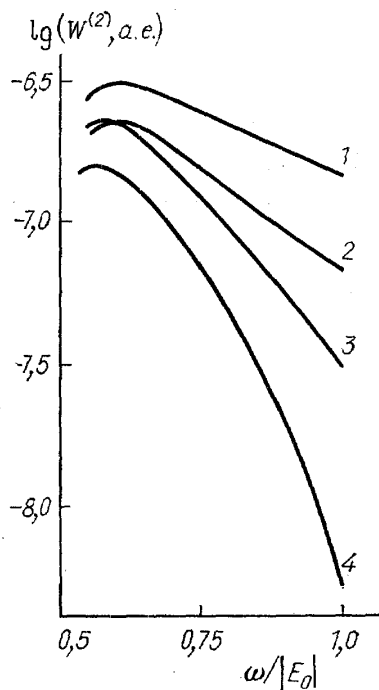


Рис. 18. Частотная зависимость вероятности двухфотонного распада отрицательных ионов щелочных атомов с учетом поляризационных эффектов (2 — Na^- , 3 — K^- , 4 — Rb^-), а также без учета таких эффектов (1 — Na^-) [75]

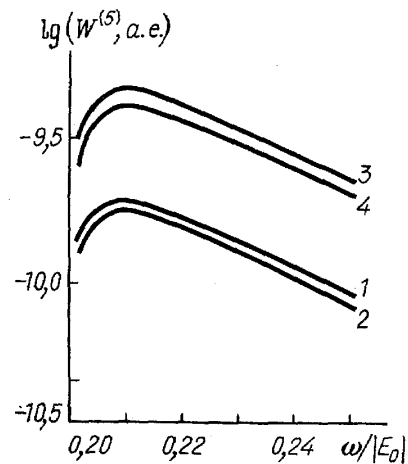


Рис. 19. Частотная зависимость вероятности пятифотонного распада отрицательных ионов щелочных атомов [75]. Обозначения те же, что и на рис. 18

Пусть для определенности осуществлен однофотонный резонанс между состояниями $|n\rangle$ и $|m\rangle$ электрона внешней оболочки. Если отвлечься от обменных эффектов, рассматривая достаточно разделенные в пространстве оболочки, то резонансный поляризационный потенциал будет иметь вид

$$V_{\text{pol}}(\mathbf{r}, t) = \int \frac{\delta\rho(\mathbf{r}', t)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}', \quad (79)$$

где $\delta\rho(\mathbf{r}, t)$ определяется временной эволюцией резонансной двухуровневой системы. Аналогично тому, как это делается при расчете среднего дипольного момента [1], в резонансном приближении получим, что

$$V_{\text{pol}}(\mathbf{r}, t) = ae^{i\omega t} \langle n | |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{-1} | m \rangle + \text{к. с.}, \quad (80)$$

где

$$a = - \frac{2 [\omega_{mn} - \omega - (i\gamma_m/2)] \mathbf{r}_{mn} \vec{\mathcal{E}}}{4 (\omega_{mn} - \omega)^2 + 2 |\mathbf{r}_{mn} \vec{\mathcal{E}}|^2 + \gamma_m^2}, \quad (81)$$

ω_{mn} — частота резонансного перехода, γ_m — ширина резонирующего уровня, $\mathbf{r}_{mn}$ — дипольный матричный элемент.

При рассмотрении взаимодействия пространственно разделенных оболочек можно ограничиться дипольным членом разложения и с помощью соотношений классической механики, справедливых для матричных элементов, будем иметь [77]

$$r_{12}^{-1} \approx \frac{\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2}{r_2^3} = \frac{\omega_{mn}^2}{Z^*} (\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2). \quad (82)$$

Индекс 2 относится к электрону резонирующих состояний из внешней оболочки, Z^* — эффективный заряд остова. Подставляя (82) и (81) в (80), получим

$$V_{\text{pol}} = -2 \frac{(\mathbf{r}_{mn}) (\vec{\mathcal{E}} \mathbf{r}_{mn}) \omega_{mn}^2 [\omega_{mn} - \omega - (i\gamma_m/2)] e^{i\omega t}}{Z^* [4 (\omega_{mn} - \omega)^2 + 2 (\mathbf{r}_{mn} \vec{\mathcal{E}})^2 + \gamma_m^2]} + \text{к. с.} \quad (83)$$

В условиях точного резонанса $\omega_{mn} - \omega = 0$, полагая $r_{mn} \sim 1$ и $Z^* \sim 1$, произведем оценку поляризационного потенциала:

$$V_{\text{pol}} \sim \frac{i\gamma_m \mathbf{r} \vec{\mathcal{E}} e^{i\omega t}}{2\mathcal{E}^2 + \gamma_m^2} + \text{к. с.} \quad (84)$$

При малых напряженностях поля все определяется шириной резонирующего уровня, и

$$V_{\text{pol}}(\mathbf{r}, t) \sim \frac{i\mathbf{r} \vec{\mathcal{E}}}{\gamma_m} e^{i\omega t} + \text{к. с.} \quad (85)$$

Отметим, что если естественная ширина уровня $\gamma_m \sim 10^{-7}$ а. е., то в реальных ситуациях, однако, она бывает многократно увеличена доплеровским ионизационным уширением и шириной линии лазерного излучения. Но поскольку в реальных ситуациях часто $\gamma_m \ll 1$, то всегда имеется увеличение эффективной напряженности поля, действующей на электрон, по отношению к напряженности внешнего поля.

Отметим, что при поглощении резонансного фотона и передаче энергии другому нерезонансному электрону условие резонансности нарушается и в дальнейшем поглощении фотонов не проявляется, поскольку при этом внешний электрон находится уже в поле возбужденного остова. Рассмотренный эффект имеет место и для многофотонного резонанса. Все формулы при этом сохраняют свой вид с заменой однофотонного матричного элемента $(1/2)\vec{\mathcal{E}}\mathbf{r}_{mn}$ на многофотонный.

4.3.3. *Отрыв внутренних электронов сверхатомным полем.* Рассмотрим случай, когда внешнее поле велико по сравнению с полем, в котором движется слабосвязанный электрон. Будем считать, что слабосвязанный электрон при включении поля становится свободным и движется во внешнем электрическом поле $\vec{\mathcal{E}} = \vec{\mathcal{E}}_0 \sin \omega t$ по классической траектории. Внутренние электроны по-прежнему будем описывать квантовомеханически. Более последовательный квантовый подход предложен в работе [78].

В пренебрежении атомным потенциалом и начальным импульсом p слабосвязанный электрон под действием поля начинает осциллировать.

по закону

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \vec{\mathcal{E}}_0 \frac{\sin \omega t}{\omega^2}. \quad (86)$$

Пренебрежение начальными импульсами оправдано, если $\mathcal{E}_0/\omega \gg p \sim 1/a$.

Учитывая пространственное разделение внутренних и внешних электронов, мы пренебрегаем обменными эффектами. Тогда поляризационное взаимодействие внешнего электрона с внутренними определяется выражением

$$V_{\text{pol}}(\mathbf{R}, t) = \int \frac{\rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r}}{|\mathbf{R} - \mathbf{r} + [\vec{\mathcal{E}}_0 (\sin \omega t)/\omega^2]|}, \quad (87)$$

где проведено усреднение по начальной плотности $\rho(\mathbf{r})$ распределения слабосвязанного электрона.

Определим вероятность ионизации внутренних электронов W под действием V_{pol} , для чего найдем коэффициенты при временных гармониках. Переходя к импульсному представлению для V_{pol} и ρ , получим матричный элемент для процесса n -фотонного отрыва из состояния $|0\rangle$ с энергией E_0 в состояние $|\mathbf{p}\rangle$ с импульсом $\mathbf{p}$ в виде

$$M_{\mathbf{p}0}^{(n)} = 4\pi \int \frac{\rho(\mathbf{q})}{q^2} J_n \left(-\frac{\mathbf{q}\vec{\mathcal{E}}_0}{\omega^2} \right) \langle \mathbf{p} | e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}} | 0 \rangle d\mathbf{q}. \quad (88)$$

Матричные элементы (88) обращаются в нуль при четных n в силу правил отбора по четности, аналогично тому, как это было в поляризационном потенциале (71). Матричный элемент $(4\pi/q^2) \langle \mathbf{p} | e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}} | 0 \rangle$ совпадает с амплитудой ионизации атома электронным ударом в первом борновском приближении.

Поскольку характерные импульсы электронов внутренней оболочки значительно больше импульсов электронов внешней оболочки, то можно разложить экспоненту в ряд с дипольной точностью $e^{-i\mathbf{q}\mathbf{R}} \approx 1 - i\mathbf{q}\mathbf{R}$.

Проведя интегрирование по направлениям векторной переменной $\mathbf{q}$, получим

$$M_{\mathbf{p}0}^{(n)} = -i8\pi^2 \langle \mathbf{p} | R_z | 0 \rangle P_n \left(\frac{\mathcal{E}_0}{\omega^2} \right), \quad (89)$$

где

$$P_n \left(\frac{\mathcal{E}_0}{\omega^2} \right) = \int_0^\infty \int_{-1}^1 \rho(q) J_n \left(-\frac{\mathcal{E}_0 q u}{\omega^2} \right) q u dq du.$$

Вероятность W отрыва электрона в единицу времени равна

$$W = 32\pi^3 \frac{c}{\omega'} P_n^2 \left(\frac{\mathcal{E}_0}{\omega^2} \right) \sigma(\omega'), \quad (90)$$

где c — скорость света, $\sigma(\omega')$ — сечение однофотонного отрыва электрона из внутренней оболочки фотоном с частотой $\omega' = n\omega$. Оценки показывают [79], что при $\mathcal{E}_0 \gamma / \omega^2 \ll n$ и $n \gg 1$ доминирует прямой процесс многофотонного отрыва. Однако для отрицательных ионов с внешними р- и d-электронами ситуация может в корне измениться из-за сильной связи электронов различных оболочек.

4.4. Резюме. Проведенное в данном разделе рассмотрение динамического корреляционного взаимодействия показало, что его роль весьма существенна в фотопроцессах в отрицательных ионах, так же как и в атомах. Учет корреляции может привести к изменению величин не-

линейных характеристик отрицательного иона в несколько раз, а также и к изменению их дисперсионных зависимостей.

Роль корреляционных эффектов в области малых частот и в атомах, и в ионах сводится к уменьшению величин нелинейных характеристик. Это объясняется экранировочным эффектом, которому подвержены электроны остова. Под действием внешнего поля электронная плотность атомной системы перераспределяется таким образом, что наведенное при этом электрическое поле частично компенсирует действие внешнего поля в пределах атомной системы.

В рамках поляризационного приближения установлено, что наиболее сильно корреляционные эффекты проявляются в процессах с малой степенью нелинейности, а с уменьшением частоты их роль падает. Этот факт имеет простую физическую интерпретацию. Чем больше частота излучения, тем в более высокоэнергетические состояния возбуждается атом. С ростом величины энергии, поглощенной атомом, увеличиваются его размеры. Соответственно увеличивается и перекрытие волновых функций присоединенного электрона и электронов атома, что и приводит к росту корреляционного взаимодействия. Интересно было бы получить этот результат, основываясь на более детальных численных расчетах. Такие расчеты могут быть проведены, например, на базе квазиэнергетического подхода, основные положения которого приведены в начале раздела 4.3. Более детально данный подход изложен в работе [28], хотя конкретные расчеты пока не проводились.

Также представляется интересным более детальное исследование процесса резонансного поглощения энергии поля одним электроном и передачи ее другому электрону. В данном разделе показано, что эффективная напряженность поля может резонансно возрасти. Следовательно, такой процесс может быть весьма существенным, как в ионах, так и в атомах.

Мы рассмотрели влияние корреляционных эффектов на многофотонный одноэлектронный отрыв электронов и убедились в важности их учета. Не меньшим может быть и их влияние на многоэлектронные многофотонные процессы. Это очевидно хотя бы из того, что без корреляционного взаимодействия было бы невозможно возбуждение автоионизационных состояний. Однако данная проблема далеко выходит за рамки поставленной нами задачи обсуждения многофотонных свойств отрицательных ионов.

5. Заключение. Сначала кратко резюмируем основные выводы, сделанные выше. В достаточно слабых полях ($\mathcal{E} \ll 10^7 - 10^8$ В/см) и при не очень большой степени нелинейности для описания многофотонных процессов в отрицательных ионах можно использовать теорию возмущений. Существенным моментом при этом является правильный учет взаимодействия оторванного электрона с остовом при построении состояний непрерывного спектра. Учет такого взаимодействия может изменить величину сечения фотораспада в несколько раз.

Качественное представление о влиянии сильного поля на отрицательный ион можно составить на основе точного решения модельной задачи об отрыве электрона из δ -потенциала. Установлено, что отклонение результатов теории возмущений от точного решения может быть весьма велико уже при $\gamma \approx 1$. Более последовательным подходом к описанию взаимодействия отрицательного иона с сильным полем, учитывающим реальную структуру отрицательного иона, является метод комплексного вращения координат.

При большой степени нелинейности процесса взаимодействия фотораспад отрицательного иона можно качественно описать на основе точного решения задачи для модели δ -потенциала, а также получить более

точные количественные результаты методом комплексного вращения координат. Для описания основных особенностей нелинейного фотораспада часто применяется также квазиклассическое приближение, вопрос о точности которого к настоящему времени остается открытым. Эффективным методом исследования нелинейного фотоотрыва электронов от отрицательных ионов является прямое компьютерное моделирование на основе численного решения одномерного уравнения Шрёдингера. Оно позволяет снять ограничения по напряженности поля и учесть реальную временную форму импульса излучения. В то же время неясно, насколько могут измениться результаты при учете трехмерности потенциала взаимодействия электрона с атомом.

Компьютерное моделирование одномерного уравнения Шрёдингера демонстрирует эффективность надпорогового поглощения фотонов при фотораспаде отрицательных ионов в сильных световых полях. Одновременно с этим проявляется штарковский сдвиг континуума, приводящий к закрытию части каналов надпорогового распада и сдвигу энергетического спектра надпороговых электронов. Имеется первое экспериментальное подтверждение указанных эффектов [52].

Принципиальное значение в теории нелинейных процессов в отрицательных ионах имеет учет корреляционных эффектов. Учет их вне рамок теории возмущений возможен на основе приближения случайных фаз или приближения поляризационного потенциала и приводит к уменьшению вероятности разрушения отрицательного иона полем. Физически это объясняется экранировкой внешнего поля электронами атома, возмущенными внешним полем. В поляризационном приближении установлено, что роль корреляционных эффектов возрастает с увеличением частоты излучения, т. е. с уменьшением степени нелинейности процесса взаимодействия. Представляется интересным получить этот результат на основе более детальных численных расчетов.

Подводя итог, необходимо также отметить, что поскольку отсутствует критерий малости для межэлектронного взаимодействия, критерий применимости (точности) того или иного метода может быть, строго говоря, сформулирован только в одноэлектронном приближении, и то не всегда. Из изложенных выше методов такие критерии применимости имеют только два метода — теория возмущений по внешнему полю и метод комплексной квазиэнергии. Все остальные методы, как одноэлектронные, так и многоэлектронные: квазиклассическое приближение, метод комплексного вращения координат, приближение случайных фаз и поляризационное приближение не имеют внутренних критериев применимости. Об их точности можно судить на основе сопоставления результатов расчетов между собой и с экспериментальными данными. Отдельно можно выделить численное моделирование на основе прямого решения уравнения Шрёдингера. Для него точность самого решения определяется только выбором численного метода и масштабом дискретизации.

Вне нашего рассмотрения остался метод многоканального квантового дефекта и прямые расчеты на основе нестационарного метода Хартри — Фока [80]. Эти методы пока еще не применялись к отрицательным ионам, хотя успешно использовались в атомных задачах. Вне нашего обзора остались также возможности подхода с использованием гиперсферического базиса [12] при описании многофотонных процессов. Последнее, в первую очередь, относится к отрицательным ионам водорода и щелочных атомов, имеющих два валентных s -электрона. Изучение возможностей этих многообещающих методов при описании нелинейных процессов в отрицательных ионах требует дополнительных самостоятельных исследований.

Рассматривая непрерывный спектр отрицательного иона, мы ограничились приближением центрального поля для описания взаимодейст-

вия электрона с атомом, образующим ион. В то же время, у отрицательных ионов существует сложная структура автоионизационных состояний [81], которые могут различным образом проявляться в нелинейных процессах. В частности, они могут приводить к появлению резонансных частотных зависимостей в нелинейных восприимчивостях и сечениях многофотонного отрыва электронов от отрицательных ионов. Здесь интересна возможность проявления колебательно-вращательной структуры автоионизационных состояний отрицательных ионов с двумя валентными электронами [82].

В обзоре мы полностью обошли вопросы формы лазерного импульса и ее влияния на протекание нелинейных процессов в отрицательных ионах. За время действия импульса лазерного излучения штарковский сдвиг изменяется от нуля до некоторого максимального значения. Это означает, что отмечавшееся нами закрытие каналов за счет штарк-эффекта является динамическим процессом и зависит от формы, длины и амплитуды импульса. Влияние формы импульса на однофотонный распад отрицательного иона теоретически изучено в работах [45, 46]. Представляет интерес дальнейшее как экспериментальное, так и теоретическое исследование нелинейного фотораспада отрицательных ионов с учетом формы импульса. Особенно интересными могут оказаться процессы, стимулированные короткими фемтосекундными лазерными импульсами.

На первый взгляд могло бы показаться, что нет ничего общего между процессами нелинейной ионизации атома и многофотонным распадом отрицательного иона. Так, в одном случае ионизуемый электрон испытывает кулоновское притяжение к остову, в другом случае притягивающий потенциал носит короткодействующий характер. Однако при переходе к многоэлектронному рассмотрению это различие стирается. Методы, которые мы рассматривали в данном обзоре, успешно применялись также и к описанию взаимодействия атомов с электромагнитным полем. При этом оказывается, что фотопроцессы в атомах и отрицательных ионах имеют много общего. В частности, наблюдается та же картина подавления нелинейных характеристик атомов за счет динамического корреляционного взаимодействия. Физическая интерпретация этого эффекта аналогична — электроны остова (положительного иона) экранируют внешнее поле.

Трудно сказать, что легче поддается теоретическому описанию — фотопроцессы в атомах или в отрицательных ионах. С первого взгляда кажется, что отрицательные ионы описывать легче, поскольку они либо совсем не имеют, либо имеют небольшое счетное количество связанных возбужденных уровней. Следовательно, проблема описания резонансов в одноэлектронном приближении для отрицательных ионов стоит гораздо менее остро. К тому же, нет бесконечной суммы связанных промежуточных состояний, которые необходимо учитывать при расчете характеристик взаимодействия атомов с внешним полем. Но, как было показано в разделе 4, очень важно при описании фотопроцессов правильно учитывать динамику межэлектронного взаимодействия. Здесь еще раз следует подчеркнуть, что отрицательные ионы имеют такую же сложную многоэлектронную структуру, как и атомы. Так, например, у отрицательных ионов существует целый спектр автоионизационных состояний, которые необходимо учитывать при описании взаимодействия с полем. Правильный учет межэлектронного взаимодействия является довольно сложной задачей, и на данный момент является актуальным как для атомов, так и для отрицательных ионов.

Экспериментально нелинейные процессы в отрицательных ионах исследованы гораздо хуже, чем теоретически, и, как уже отмечалось, нет возможности в полной мере сравнить предсказания теории с экспериментом. На данный момент существуют лишь данные по абсолютным

сечениям двух- и трехфотонного распада иона I^- [27, 83] и двухфотонного распада Cl^- [72], измеренные при определенной частоте излучения (частота рубинового лазера или неодимового лазера, а также его второй гармоники)⁽²⁾. С точки зрения развития экспериментальных исследований нелинейных процессов в отрицательных ионах представляет интерес измерение сечений многофотонного отрыва излучением лазера с перестраиваемой частотой. Такое экспериментальное исследование может дать не только зависимость $\sigma^{(n)}(\omega)$, но и экспериментально выявить влияние на многофотонные процессы автоионизационных резонансов и резонансов формы. Открытым как в теоретическом, так и в экспериментальном отношении является вопрос о многофотонной многоэлектронной ионизации, в том числе с образованием атомов и положительных ионов в возбужденных состояниях из отрицательных ионов, а также о сравнении ее эффективности с таким процессом для атомов. Имеющиеся данные по однофотонному двухэлектронному отрыву [84] позволяют предположить, что такой процесс может наблюдаться и в многофотонном случае, как это имеет место для атомов щелочноземельных элементов [43].

Авторы выражают глубокую благодарность Н. Б. Делоне, М. В. Федорову и В. П. Крайнову за полезные обсуждения и большое внимание при работе над статьей.

ПРИМЕЧАНИЯ К ТЕКСТУ

¹ Метод использует при подстановке в интегральное уравнение Переломова—Попова—Терентьева [32] уточненную в адиабатическом приближении волновую функцию связанного состояния. Результаты конкретных расчетов весьма близки к представленным на рис. 10, 11. Адиабатическое приближение с использованием метода квазиэнергий позволяет получить аналитическое трехмерное решение задачи об отрыве электрона сильным полем из короткодействующего потенциала. Подробности этого красивого метода можно найти в оригинальной работе [85].

² В совсем недавнем эксперименте [86] с использованием излучения неодимового лазера с длиной волны $\lambda=1064$ нм и его гармоник удалось измерить сечения одно-, двух- и трехфотонного отрыва электронов от отрицательных ионов F^- . Получены значения $\sigma^{(1)}=2,8(5) \cdot 10^{-18}$ см², $\sigma^{(2)}=2,0(7) \cdot 10^{-50}$ см⁴ с, $\sigma^{(3)}=7,9^{+6,6}_{-3,6} \cdot 10^{-83}$ см⁶ с².

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Делоне Н. Б., Крайнов В. П. Атом в сильном световом поле.— М.: Энергоатомиздат, 1984; перевод на англ.: Berlin; Heidelberg; New York; Tokyo: Springer-Verlag, 1985.
2. Рапопорт Л. П., Зон Б. А., Манаков Н. Л. Теория многофотонных процессов в атомах.— М.: Атомиздат, 1978.
3. Коварский В. А., Перельман Н. Ф., Авербух И. Ш. Многоквантовые процессы.— М.: Энергоатомиздат, 1985.
4. Радциг А. А., Смирнов Б. М. Параметры атомов и атомных ионов. Справочник.— М.: Энергоатомиздат, 1986.
5. Месси Г. Отрицательные ионы.— М.: Мир, 1979.
6. Смирнов Б. М. Отрицательные ионы.— М.: Атомиздат, 1978.
7. Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов А. М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике.— М.: Наука, 1971.
8. Демков Ю. Н., Островский В. Н. Метод потенциалов нулевого радиуса в атомной физике.— Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1975.
9. Теория неоднородного электронного газа/Под ред. С. Лундквиста, Н. Марча.— М.: Мир, 1987.
10. Perdew J. P.//Quantum Chemistry and Solid State Physics: Proceedings of Symposium.— Copenhagen, 1984.— P. 173.
- [11] Власов С. В., Фарберович О. В., Зон Б. А., Ремета Е. Ю., Герман М. М., Нижинова Г. П., Ростовцев В. С.//Изв.АН СССР. Сер. физ. 1986. Т. 50. С. 1336.
12. Fano U.//Rep. Prog. Phys. 1983. V. 46. P. 97.
13. Келдыш Л. В.//ЖЭТФ. 1964. Т. 47. С. 1945.
14. Пантел Р., Путхоф Г. Основы квантовой электроники.— М.: Мир, 1972.
15. Берестецкий В. Б., Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Квантовая электродинамика.— М.: Наука, 1980.

16. Хемминг Р. В. Численные методы.— М.: Наука, 1968.
17. Manakov N., Ovsiannikov V., Rapoport L.//Phys. Rep., 1986. V. 141. P. 320.
18. Смирнов Б. М. Атомные столкновения и элементарные процессы в плазме.— М.: Атомиздат, 1968.
19. Головинский П. А., Зон Б. Л.//Опт. и спектр. 1978. Т. 45. С. 854.
20. Glover R. M., Weinhold F. J.//J. Chem. Phys. 1976. V. 65. P. 4919.
- [21] Головинский П. А., Зон Б. Л.//Изв. АН СССР, Сер. физ. 1981. Т. 45. С. 2305.
22. Зон Б. А.//ЖТФ. 1976. Т. 46. С. 875.
23. Mittleman M. H.//J. Phys. Ser. B. 1979. V. 12. P. 1781.
24. Головинский П. А., Зон Б. А.//ЖТФ. 1980. Т. 50. С. 1847.
Амусья М. Я., Буймистров В. М., Зон Б. А., Цытович В. Н. и др. Поляризационное тормозное излучение частиц и атомов.— М.: Наука, 1987.
25. Geltman S.//Phys. Lett. 1963. V. 4. P. 168.
26. Robinson E. J., Geltman S.//Phys. Rev. 1967. V. 153. P. 4.
27. Hall I. L., Robinson E. J., Branscomb L. M.//Phys. Rev. Lett. 1965. V. 14. P. 1013.
28. Головинский П. А., Киян И. Ю., Ростовцев В. С. Препринт ИОФАН СССР № 100.— Москва, 1988.
29. Ganas P. S., Talman I. D., Green A. E. S.//Phys. Rev. Ser. A. 1980. V. 22. P. 336.
30. Berson I.//J. Phys. Ser. B, 1975. V. 8. P. 3078.
- [31] Манаков Н. Л., Рапопорт Л. П.//ЖЭТФ. 1975. Т. 69. С. 842.
32. Переломов А. М., Попов В. С., Терентьев М. В.//ЖЭТФ. 1966. Т. 50. С. 1393.
33. Нукишов А. И., Рутус В. И.//Ibidem. С. 255.
Ostrovsky V. N., Telnov D. A.//J. Phys. Ser. B. 1987. V. 20. P. 2397, 2421.
34. Antunes Neto H. S., Davidovich L.//Phys. Rev. Lett. 1984. V. 53. P. 2238.
35. Milonni P. W.//Phys. Rev. Ser. A. 1988. V. 38. P. 2682.
36. Reiss H. R.//J. Phys. Ser. B. 1987. V. 20. P. L79.
37. —«—//JOSA. Ser. B. 1987. V. 4. P. 726.
38. Delone N. B., Golovinsky P. A., Kiyan I. Yu., Krainov V. P., Tugushev V. I.//J. Phys. Ser. B. 1986. V. 19. P. 2457.
39. Crance M.//J. Phys. Ser. B. 1987. V. 20. Pp. L411, 6553.
40. Clementi E., Roetti C.//Atomic Data and Nuclear Data Tables. 1974. V. 14. P. 177.
- [41] Преображенский М. А., Рапопорт Л. П.//ЖЭТФ. 1980. Т. 78. С. 929.
42. Киян И. Ю., Крайнов В. П.//ЖЭТФ. 1989. Т. 96. С. 1606.
43. Делоне Н. Б., Федоров М. В.//УФН. 1989. Т. 158. С. 215.
44. Манаков Н. Л., Файнштейн А. Г.//ЖЭТФ. 1980. Т. 79. С. 751.
45. Казаков А. Е., Федоров М. В.//ЖЭТФ. 1982. Т. 83. С. 2035.
46. Fedorov M. V., Kazakov A. E.//J. Phys. Ser. B. 1983. V. 16. P. 3653.
47. Trainham R., Fletcher G. D., Mansour N. B., Larson D. J.//Phys. Rev. Lett. 1987. V. 59. P. 2291.
48. La Gattuta K. J.//Phys. Rev. Ser. A. 1989. V. 40. P. 683.
49. Greenwood W. G., Eberly J. H.//Conference on Super-intense Laser-atom Physics: Abstracts.— Rochester, 1989.— P. 104.
50. Bardsley J. N., Szöke A., Comella M. J.//J. Phys. Ser. B. 1988. V. 21. P. 3899.
- [51] Kulander K.//Phys. Rev. Ser. A. 1988. V. 38. P. 778.
52. Tang C. Y., Harris P. G., Mohagheghi A. H., Bryant H. C. et al.//Ibidem. 1989. V. 39. P. 6068.
53. Javanainen J., Eberly J., Su Q.//Ibidem. 1988. V. 38. P. 3430.
Javanainen J., Eberly J.//Ibidem. 1989. V. 39. P. 458.
54. Basile S., Trombetta F., Ferrante G., Burlou R.//Ibidem. 1988. V. 37. P. 1050.
55. Zangwill A., Levine Z. Я.//At. J. Phys. 1985. V. 53. P. 1177.
56. Ахизер А. И., Ахизер И. А. Электромагнетизм и электромагнитные волны.— М.: Высшая школа, 1985.
57. Altun Z., Carter S. L., Kelly H. P.//Phys. Rev. Ser. A. 1983. V. 27. P. 1943.
58. Ахизер А. И., Берестецкий В. Б. Квантовая электродинамика.— М.: Наука, 1981.— С. 139.
59. Хьюз Н. В. Основы метода вторичного квантования.— М.: Энергоатомиздат, 1984.
60. Мигдал А. Б. Теория конечных ферми-систем и свойства атомных ядер.— М.: Наука, 1983.— С. 430.
- [61] Головинский П. А., Зон Б. А.//Опт. и спектр. 1981. Т. 50. С. 1034.
Головинский П. А.//Ibidem. 1983. Т. 55. С. 1078.
62. Kaiser H. J., Heinicke E., Rackwitz R., Feldmann J.//Zs. Phys. 1974. Bd 270. S. 259.
63. Moores D. L., Norcross D. W.//Phys. Rev. Ser. A. 1974. V. 10. P. 1646.
64. Амусья М. Я. Атомный фотоэффект.— М.: Наука, 1987.
65. Wendin G.//Phys. Rev. Lett. 1984. V. 53. P. 724.
66. Radojević V., Kelly H. P., Johnson W. R.//Phys. Rev. Ser. A. 1987. V. 35. P. 2117.
67. Амусья М. Я., Грибакин Г. Ф., Иванов В. К., Чернышева Л. В.//Изв. АН СССР. Сер. физ. 1986. Т. 50. С. 1274.
68. L'Huillier A., Jonsson L., Wendin G.//Phys. Rev. Ser. A. 1986. V. 33. P. 3938.
69. Wendin G., Jonsson L., L'Huillier A.//JOSA. Ser. B. 1987. V. 4. P. 833.
70. L'Huillier A., Wendin G.//J. Phys. Ser. B. 1988. V. 21. P. L247.
- [71] Jiang T. F., Starace A. F.//Phys. Rev. Ser. A. 1988. V. 38. P. 2347.

- 72. *Trainham R., Fletcher G. D., Larson D. J.*//J. Phys. Ser. B. 1987. V. 20. P. L777.
- 73. *Senatore G., Subbaswamy K. R.*//Phys. Rev. Ser. A. 1986. V. 34. P. 3619.
- 74. *Laplanche G., Jaonen M., Rachman A.*//J. Phys. Ser. B. 1983. V. 16. P. 415.
- 75. Головинский П. А., Қиян И. Ю.//Опт. и спектр. 1985. Т. 59. С. 988.
- 76. *Szöke A., Rhodes C. K.*//Phys. Rev. Lett. 1986. V. 56. P. 720.
- 77. Собельман И. И. Введение в теорию атомных спектров.— М.: Наука, 1977.
- 78. *Қучиев М. Ю.*//Письма ЖЭТФ. 1987. Т. 45. С. 319.
- 79. Головинский П. А., Бердышев А. В.//Письма ЖТФ. 1987. Т. 13. С. 208.
- 80. *Kulander K.*//Phys. Rev. Ser. A. 1987. V. 35. P. 445.
- [81] *Baba C. V. K., Betigeri M. G., Datar V. M., Kupur M. B., Sharma R. P., Singh P.*//Pramana.— J. Phys. 1982. V. 18. P. 295.
- 82. *Herrick D. R., Kellman M. E., Poliak R. D.*//Phys. Rev. Ser. A. 1980. V. 22. P. 1517.
- 83. *Blondel C., Champean R. J., Grubellier A., Delsart C., Duong H. T., Marinescu D.*//Europhys. Lett. 1978. V. 4. P. 1267.
- 84. *Donahue I. B., Gram P. A. M., Hynes M. V., Hamm R. W. et al.*//Phys. Rev. Lett. 1982. V. 48. P. 1538.
- 85. Островский В. Н., Тельнов Д. А.//Изв. АН СССР. Сер. физ. 1986. Т. 50. С. 1423.
- 86. *Olsson T., Trainham R., Larson D. J.*//Phys. Rev. Ser. A. 1989. V. 40. P. 676.