Письма в ЖЭТФ, том 99, вып. 5, с. 299 – 306

Динамика электронных переходов и спектры переизлучения аттосекундных импульсов электромагнитного поля

В. И. Матвеев[1)], *Д. Н. Макаров*[1)]

Северный (Арктический) федеральный университет им. Ломоносова, 163002 Архангельск, Россия

Поступила в редакцию 24 декабря 2013 г.

После переработки 6 февраля 2014 г.

Рассмотрены процессы переизлучения аттосекундных импульсов электромагнитного поля системами, находящимися в нестационарных состояниях. В качестве примеров рассчитаны вероятности переизлучения аттосекундных импульсов электромагнитного поля при резонансной перезарядке протона на атоме водорода и при распаде квазистационарного состояния, а также вероятности переизлучения аттосекундных импульсов системой в резонансном внешнем поле. Развитая методика допускает распространение на более сложные мишени, в том числе на мишени, находящиеся в состоянии столкновения, и на разного рода химические реакции.

DOI: 10.7868/S0370274X1405004X

1. Введение. Достигнутый к настоящему времени прогресс в методах генерации коротких и ультракоротких электромагнитных импульсов позволил преодолеть “фемтосекундный рубеж” и получить импульсы длительностью в несколько десятков аттосекунд. Возникло новое направление – аттосекундная физика [1]. Появилась возможность наблюдения атомных явлений в реальном масштабе времени. Рост интереса к физике ультракоротких импульсов связан не только с современными тенденциями создания более мощных лазеров и методов генерации ультракоротких импульсов, но и с прогрессом в технике ускорителей тяжелых ионов, поскольку поля, создаваемые релятивистскими и ультрарелятивистскими заряженными частицами, близки по своим свойствам к полю световой волны. Например, в экспериментах [2] поле иона урана U^{92+} с энергией 1 ГэВ/нуклон интерпретировалось как сверхинтенсивный импульс ($I > 10^{19}$ Вт/см^2) длительностью $\tau \sim 10^{-18}$ с. Стали актуальными теоретические исследования процессов, происходящих в различных мишенях при их взаимодействии с ультракороткими импульсами, в том числе процессов ионизации, возбуждения и переизлучения ультракоротких импульсов. Значительное количество работ посвящено процессам ионизации и возбуждения мишеней (см., например, обзоры [1, 3–5]). Процессам же переизлучения ультракоротких импульсов посвящено сравнительно небольшое количество теоретических работ (см., например, [6] и приведенные там ссылки). В работе [7] в рамках классического описания рассмотрено рассеяние ультракороткого импульса на атоме. Сравнительно недавно в работах [6, 8] в рамках теории возмущений развито описание рассеяния ультракороткого электромагнитного импульса на многоэлектронном атоме с учетом возбуждения мишени и недипольности электромагнитного взаимодействия. Такой подход в принципе применим и для импульсов аттосекундной и меньшей длительности. Вместе с тем в случаях такой длительности возможен точный учет поля ультракороткого импульса в рамках теории внезапных возмущений. Последнее позволяет проще описать процессы перерассеяния [9, 10] отдельными атомами и распространить теорию на случаи многоатомных систем [11, 12]. Отметим, что речь идет об излучении одного фотона всеми электронами мишени за время действия внезапного возмущения. После действия внезапного возмущения возбужденные мишени могут релаксировать с излучением фотонов. Однако если внезапное возмущение вызывает изменение скоростей атомных электронов, то и во время действия возмущения атомы способны излучать (см., например, [6, 9] и приведенные там ссылки). Классическим аналогом задачи в такой постановке является известный [13] случай спектра излучения свободного электрона при внезапном изменении его скорости. Известным примером такого излучения атомных электронов при столкновениях быстрых тяжелых заряженных частиц с атомами служит поляризационное тормозное излучение [14]. В этом случае происходит переизлучение атомом импульса электромагнитного поля, действовав-

[1)]e-mail: mezon98@mail.ru; makarovd0608@yandex.ru

шего на атомные электроны со стороны пролетающей быстрой тяжелой заряженной частицы. Как правило, процессы взаимодействия ультракоротких импульсов электромагнитного поля с атомными системами рассматривают, предполагая мишени находящимися в стационарных состояниях [1, 3, 4]. Вместе с тем именно на мишенях, находящихся в нестационарных состояниях, возможны исследования динамики электронных переходов с высоким временным разрешением [5].

В настоящей работе рассмотрены процессы переизлучения при взаимодействии аттосекундных импульсов электромагнитного поля с системами, находящимися в нестационарных состояниях. В качестве примеров рассчитаны вероятности переизлучения аттосекундных импульсов электромагнитного поля при резонансной перезарядке протона на атоме водорода и при распаде квазистационарного состояния, а также вероятности переизлучения аттосекундных импульсов системой в резонансном внешнем поле. Развитые методики допускают естественное распространение на случаи более сложных мишеней, в том числе мишеней, находящихся в состоянии столкновения, и разного рода химические реакции. Мы рассматриваем импульсы аттосекундной длительности, время взаимодействия которых с мишенью значительно меньше характерных промежутков времени, за которые происходит заметное изменение волновой функции изолированной (не взаимодействующей с импульсом) мишени. В этом случае можно считать, что импульс "застает" мишень в определенный момент времени t_0. Рассматриваемые нами процессы происходят за время взаимодействия аттосекундного импульса с мишенью. Таким образом, вероятности неупругих процессов и спектры переизлучения аттосекундного импульса электромагнитного поля зависят лишь от состояния мишени в момент взаимодействия с импульсом. В принципе ясно, что для мишеней, находящихся в стационарных состояниях, вероятности неупругих процессов и спектры переизлучения аттосекундных импульсов электромагнитного поля не зависят от момента времени столкновения с аттосекундным импульсом (см. также [9]). Именно на нестационарных мишенях оказывается возможным наблюдать динамику электронных переходов. Отметим, что до настоящего времени процессы переизлучения при взаимодействии ультракоротких импульсов аттосекундной длительности с системами, находящимися в нестационарных состояниях, никем не рассматривались.

2. Общая часть. Пусть на систему, находящуюся в нестационарном состоянии $\Psi(t)$, падает импульс электромагнитного поля с длительностью τ, много меньшей характерного времени τ_ψ изменения функции $\Psi(t)$ невозмущенной системы, описываемой гамильтонианом $H_0(t)$. Обозначим через τ_c время взаимодействия импульса с системой (мишенью). Из-за конечных размеров мишени очевидно, что $\tau_c \geq \tau$. Введем некоторое время t_0, при котором импульс начинает взаимодействовать с системой. Другими словами, импульс застает систему в состоянии $\Psi(t_0)$. Обозначим взаимодействие поля электромагнитного импульса с системой через $V(t)$. Нас будут интересовать процессы, происходящие с системой в промежутке времени от t_0 до $t_0 + \tau_c$, в течение которого $V(t) \neq 0$. Вне этого промежутка $V(t)$ считается равным нулю. Будем считать, что время взаимодействия импульса с мишенью много меньше характерного времени τ_ψ изменения функции $\Psi(t)$, т.е. $\tau_c \ll \tau_\psi$. Тогда в течение времени действия возмущения можно пренебречь эволюцией под действием гамильтониана $H_0(t)$ и учитывать только эволюцию под действием внезапного возмущения. В приближении внезапных возмущений эволюция начального состояния $\Psi(t_0)$ имеет вид [9] (здесь и ниже используются атомные единицы)

$$\Psi(t) = \exp\left[-i\int\limits_{t_0}^{t} V(t')dt'\right]\Psi(t_0), \tag{1}$$

причем $\Psi(t) \to \Psi(t_0)$ при $t \to t_0$. Введем полную ортонормированную систему собственных функций "мгновенного" гамильтониана $H_0(t_0)$:

$$H_0(t_0)\Phi_n(t_0) = \varepsilon_n(t_0)\Phi_n(t_0), \tag{2}$$

где n – совокупность квантовых чисел для электронных состояний мишени. Введем систему функций

$$\Phi_n(t) = \exp\left[i\int\limits_{t}^{t_0+\tau_c} V(t')dt'\right]\Phi_n(t_0+\tau_c), \tag{3}$$

где $\Phi_n(t) \to \Phi_n(t_0+\tau_c)$ при $t \to t_0+\tau_c$. Очевидно, что амплитуду перехода из состояния $\Psi(t_0)$ в состояние $\Phi_n(t_0+\tau_c)$ в результате действия внезапного возмущения $V(t)$ можно записать в виде

$$a_{0n} = \langle\Phi_n(t_0+\tau_c)|\exp\left[i\int\limits_{t_0}^{t_0+\tau_c} V(t')dt'\right]|\Psi(t_0)\rangle = \\ = \langle\Phi_n(t) \mid \Phi_0(t)\rangle. \tag{4}$$

Рассмотрим взаимодействие мишени с импульсом электромагнитного поля гауссовой формы:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r},t) = \mathbf{E}_0 e^{-\alpha^2(t-\mathbf{n}_0\mathbf{r}/c)^2}\cos(\omega_0 t - \mathbf{k}_0\mathbf{r}), \tag{5}$$

где $\mathbf{E}(\mathbf{r},t)$ – напряженность электрического поля, $\mathbf{E}_0$ – его амплитуда, $\mathbf{k}_0 = (\omega_0/c)\mathbf{n}_0$, $\mathbf{n}_0$ – единичный вектор, направленный вдоль распространения импульса, $\mathbf{r}$ – координаты точки наблюдения, c – скорость света, длительность импульса $\tau \sim 1/\alpha$. Запишем взаимодействие электронов мишени с импульсом электромагнитного поля в виде [9]

$$V(t) \equiv V(\{\mathbf{r}_e\},t) = \sum_{e=1}^{N_e} \mathbf{E}(\mathbf{r}_e,t)\mathbf{r}_e, \tag{6}$$

где $\{\mathbf{r}_e\}$ – совокупность координат электронов ($e = 1,...,N_e$), N_e – число электронов мишени. Пусть длительность импульса и размеры мишени таковы, что время взаимодействия импульса с мишенью τ_c много меньше характерных периодов времени невозмущенной мишени, описываемой гамильтонианом $H_0(t)$. Тогда в (4) интегрирование по времени можно проводить от $-\infty$ до $+\infty$ и амплитуда перехода (4) будет иметь вид

$$a_{0n} = \langle \Phi_n(t_0+\tau_c) \mid \exp\left[-i\int_{-\infty}^{+\infty} V(t)dt\right] \mid \Psi(t_0)\rangle, \tag{7}$$

где $\Phi_n(t_0+\tau_c)$ принадлежат полной ортонормированной системе собственных функций "мгновенного" невозмущенного гамильтониана $H_0(t_0+\tau_c)$. Соответственно функции (1) и (3) будут равны

$$\Psi(t) = \exp\left[-i\int_{-\infty}^{t} V(t')dt'\right]\Psi(t_0), \tag{8}$$

$$\Phi_n(t) = \exp\left[i\int_{t}^{+\infty} V(t')dt'\right]\Phi_n(t_0+\tau_c). \tag{9}$$

Нас интересует переизлучение ультракороткого импульса в течение времени его взаимодействия с мишенью. Поэтому, следуя [9], будем вычислять амплитуду излучения фотона как поправку к состояниям (8) и (9) в первом порядке теории возмущений по взаимодействию атомных электронов с электромагнитным полем:

$$U = -\sum_{e=1}^{N_e}\sum_{\mathbf{k},\sigma}\left(\frac{2\pi}{\omega}\right)^{1/2}\mathbf{u}_{\mathbf{k}\sigma} a^+_{\mathbf{k}\sigma} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_e}\hat{\mathbf{p}}_e, \tag{10}$$

где $a^+_{\mathbf{k}\sigma}$ – операторы рождения фотона с частотой ω, импульсом $\mathbf{k}$ и поляризацией σ ($\sigma = 1,2$), $\mathbf{u}_{\mathbf{k}\sigma}$ – единичные векторы поляризации, $\hat{\mathbf{p}}_e = \partial/\partial\mathbf{r}_e$ – операторы импульса электронов мишени. (Внезапное возмущение $V(t)$ учтено в функциях $\Phi_n(t)$ и $\Psi(t)$ без ограничений на величину $V(t)$.) Тогда амплитуда испускания фотона с одновременным переходом электронов мишени из состояния $\Psi(t)$ в состояние $\Phi_n(t)$ (формулы (8) и (9) соответственно) имеет вид

$$b_{0n}(\omega) = i\left(\frac{2\pi}{\omega}\right)^{1/2}\mathbf{u}_{\mathbf{k}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \times$$
$$\times \langle\Phi_n(t)|\sum_e e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_e}\hat{\mathbf{p}}_e|\Psi(t)\rangle. \tag{11}$$

Отсюда после интегрирования по частям по времени и опускания членов, исчезающих при выключении взаимодействия с электромагнитным полем (при $t \to \pm\infty$), получаем

$$b_{0n}(\omega) = -\left(\frac{2\pi}{\omega}\right)^{1/2}\mathbf{u}_{\mathbf{k}\sigma}\int_{-\infty}^{+\infty} dt \frac{e^{i\omega t}}{i\omega}\langle\Phi_n(t_0+\tau_c) \mid \times$$
$$\times \sum_e e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}_e}\frac{\partial V(t)}{\partial \mathbf{r}_e}\exp\left[-i\int_{-\infty}^{+\infty} V(t')dt'\right] \mid \Psi(t_0)\rangle. \tag{12}$$

Подчеркнем, что речь идет об излучении фотона за время действия внезапного возмущения $V(t)$. Далее нам необходимо найти спектр излучения фотона в телесный угол $d\Omega_{\mathbf{k}}$, описанный вдоль направления импульса фотона $\mathbf{k}$. Представив элемент интегрирования по импульсу фотона в виде

$$(2\pi)^{-3}d^3\mathbf{k} = (c\cdot 2\pi)^{-3}d\Omega_{\mathbf{k}}\omega^2 d\omega$$

и выполнив суммирование $|b_{0n}(\omega)|^2$ по поляризациям фотона и полному набору конечных состояний $\Phi_n(t_0+\tau_c)$, получим соответствующий спектр испускания фотона в единицу телесного угла $d\Omega_{\mathbf{k}}$ с одновременным переходом электронов мишени из состояния $\Psi(t_0)$ во все возможные конечные состояния:

$$\frac{d^2W}{d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega} = \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{c^3\omega}\langle\Psi(t_0) \mid \sum_e\sum_m e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}_e-\mathbf{r}_m)} \times$$
$$\times\left[\frac{\partial\widetilde{V}(\omega)}{\partial\mathbf{r}_e}\mathbf{n}\right]\left[\frac{\partial\widetilde{V}^*(\omega)}{\partial\mathbf{r}_m}\mathbf{n}\right] \mid \Psi(t_0)\rangle. \tag{13}$$

Таким образом, во многом следуя выкладкам, приведенным в п. 3 статьи [9], мы получили полный спектр излучения фотона при условии, что внезапное возмущение $V(t)$ застает мишень в момент времени t_0 в состоянии $\Psi(t_0)$. В формуле (13) $\mathbf{n} = \mathbf{k}/k$ – единичный вектор направления вылета фотона, $\widetilde{V}(\omega)$ – фурье-образ функции $V(t)$, представленной формулой (6). Поэтому

$$\widetilde{V}(\omega) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} V(t) e^{i\omega t} dt = f_0(\omega) \sum_e (\mathbf{E}_0 \mathbf{r}_e) e^{i\frac{\omega}{\omega_0}\mathbf{k}_0\mathbf{r}_e}, \quad (14)$$

где

$$f_0(\omega) = \frac{\sqrt{\pi}}{2\alpha}\left\{\exp\left[-\frac{(\omega-\omega_0)^2}{4\alpha^2}\right] + \right.$$
$$\left. + \exp\left[-\frac{(\omega+\omega_0)^2}{4\alpha^2}\right]\right\}, \quad (15)$$

а векторное произведение равно

$$\left[\frac{\partial \widetilde{V}(\omega)}{\partial \mathbf{r}_e}\mathbf{n}\right] = f_0(\omega)\exp\left(i\frac{\omega}{\omega_0}\mathbf{k}_0\mathbf{r}_e\right) \times$$
$$\times \left([\mathbf{E}_0\mathbf{n}] + i\frac{\omega}{\omega_0}(\mathbf{E}_0\mathbf{r}_e)[\mathbf{k}_0\mathbf{n}]\right). \quad (16)$$

Для одноэлектронных мишеней спектр (13) упрощается и принимает вид

$$\frac{d^2W}{d\Omega_{\mathbf{k}} d\omega} = \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{c^3\omega}\langle\Psi(t_0) \mid \left|\left[\frac{\partial\widetilde{V}(\omega)}{\partial\mathbf{r}}\mathbf{n}\right]\right|^2 \mid \Psi(t_0)\rangle, (17)$$

где

$$\left|\left[\frac{\partial\widetilde{V}(\omega)}{\partial\mathbf{r}}\mathbf{n}\right]\right|^2 =$$
$$= |f_0(\omega)|^2\left([\mathbf{E}_0\mathbf{n}]^2 + \frac{\omega^2}{\omega_0^2}(\mathbf{E}_0\mathbf{r})^2[\mathbf{k}_0\mathbf{n}]^2\right), \quad (18)$$

а $\mathbf{r}$ – координаты электрона мишени.

3. Перезарядка. Приведем пример расчета спектров переизлучения аттосекундных импульсов электромагнитного поля мишенями, находящимися в состоянии столкновения. Для простоты выберем в качестве мишеней одноэлектронные системы. Рассмотрим явление резонансной перезарядки протона на атоме водорода, когда скорость столкновения мала по сравнению с характерной атомной скоростью [15, 16]. В таком случае протон и атом водорода можно рассматривать как ион молекулы водорода. При перезарядке электрон атома водорода, описываемый волновой функцией ψ_1, центрированной на ядре (ядро 1) атома водорода, переходит в состояние ψ_2, локализованное на протоне (ядро 2). Стационарными являются квазимолекулярные состояния [15, 16]

$$\psi_{g,u} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_1 \pm \psi_2] \quad (19)$$

с энергиями $\varepsilon_u(t)$ и $\varepsilon_g(t)$, зависящими от расстояния R между ядрами или от времени t. Линейная комбинация этих состояний, переходящая в ψ_1 при $t\to-\infty$ и в $a\psi_1 + b\psi_2$ при $t\to+\infty$, имеет вид [15, 16]

$$\Psi(t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{\psi_g \exp\left[-i\int\limits_{-\infty}^{t}\varepsilon_g(t)dt\right] + \right.$$
$$\left. + \psi_u \exp\left[-i\int\limits_{-\infty}^{t}\varepsilon_u(t)dt\right]\right\}. \quad (20)$$

При этом вероятность перезарядки равна

$$w = |b|^2 = \sin^2\eta, \ \eta = \frac{1}{2}\int\limits_{-\infty}^{+\infty}[\varepsilon_u(t) - \varepsilon_g(t)]dt. \quad (21)$$

Если воспользоваться асимптотическим выражением [15, 16] для термов, то при больших параметрах удара b имеем

$$\eta = \frac{2\sqrt{2\pi}}{ev}b^{3/2}e^{-b}. \quad (22)$$

Далее мы будем использовать в качестве $\psi_{g,u}$ волновые функции иона молекулы водорода в виде линейных комбинаций [17] волновых функций основного состояния атома водорода:

$$\psi_{g,u} = \frac{1}{\sqrt{2(1\pm S)}}[\phi_1 \pm \phi_2]. \quad (23)$$

Здесь

$$\phi_1 = \varphi_0(r_1), \ \phi_2 = \varphi_0(r_2), \ \varphi_0(r) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-r},$$

где r_1 – расстояние от электрона до первого ядра, r_2 – расстояние от электрона до второго ядра, S – интеграл перекрытия [17]:

$$S = \langle\phi_1|\phi_2\rangle = (1 + R + R^2/3)e^{-R}.$$

Если использовать для волновых функций (23) приведенные в [17] выражения для термов иона молекулы водорода, то при больших параметрах удара проинтегрированная по времени разница (21) между термами окажется равной

$$\eta = \frac{2\sqrt{2\pi}}{3v}b^{3/2}e^{-b}. \quad (24)$$

Сравнивая формулы (22) и (24), убеждаемся в том, что разница между ними невелика. Поэтому далее мы будем использовать волновые функции (23). Таким образом, вместо (20) мы будем использовать $\Psi(t)$ в виде

$$\Psi(t) = c_1(t)\phi_1 + c_2(t)\phi_2, \quad (25)$$

где

$$c_{1,2}(t) = \frac{1}{\sqrt{2(1+S)}} \exp\left[-i \int\limits_{-\infty}^{t} \varepsilon_g(t)dt\right] \pm$$
$$\pm \frac{1}{\sqrt{2(1-S)}} \exp\left[-i \int\limits_{-\infty}^{t} \varepsilon_u(t)dt\right]. \qquad (26)$$

Нас интересует спектр переизлучения аттосекундного импульса электромагнитного поля при реакции перезарядки. Поэтому представим формулу (17) в виде

$$\frac{d^2W}{d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega} = \frac{d^2W_{\mathrm{H}}}{d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega} + \frac{d^2\Delta W}{d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega}, \qquad (27)$$

где мы выделили спектр $d^2W_{\mathrm{H}}/(d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega)$ переизлучения аттосекундного импульса изолированным атомом водорода, равный (ср. также с [9]):

$$\frac{d^2W_{\mathrm{H}}}{d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega} = \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{c^3\omega}\langle\varphi_0(r)|\left|\left[\frac{\partial\widetilde{V}(\omega)}{\partial\mathbf{r}}\mathbf{n}\right]\right|^2|\varphi_0(r)\rangle =$$
$$= \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{c^3\omega}|f_0(\omega)|^2\left([\mathbf{E}_0\mathbf{n}]^2 + \frac{\omega^2}{\omega_0^2}\frac{E_0^2}{Z^2}[\mathbf{k}_0\mathbf{n}]^2\right), \qquad (28)$$

где $Z = 1$ – заряд ядра атома водорода. Тогда разница между спектром переизлучения атомом водорода, взаимодействующим с протоном в реакции перезарядки, и спектром переизлучения изолированным атомом водорода равна

$$\frac{d^2\Delta W}{d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega} = \frac{d^2W}{d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega} - \frac{d^2W_{\mathrm{H}}}{d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega}. \qquad (29)$$

Очевидно, что эта разница может отличаться от нуля лишь в области реакции перезарядки. Размер такой области можно оценить следующим образом. Согласно [16] сечение резонансной перезарядки $\sigma_{\mathrm{res}} = \pi b_0^2/2$, где $b_0 = 10.2$ для энергии протона 1 эВ, причем с ростом энергии сечение падает. Тогда область межъядерных расстояний, в которой происходит реакция перезарядки, заключена в следующих пределах: $0 \le R \le b_0$. Поэтому время взаимодействия аттосекундного импульса с квазимолекулой, состоящей из атома водорода и протона, $\tau_c \le b_0/c \le 10^{-1} \ll 1$ (характерного атомного времени). Таким образом, для расчета разницы (29) применим наш подход, использующий приближение внезапных возмущений. Учитывая легко проверяемые соотношения

$$|c_1(t)|^2 + |c_2(t)|^2 = \frac{1}{1-S^2}$$

и

$$c_1^*(t)c_2(t) + c_1(t)c_2^*(t) = -\frac{S}{1-S^2},$$

получим

$$\frac{d^2\Delta W}{d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega} = \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{c^3\omega}|f_0(\omega)|^2\frac{\omega^2}{\omega_0^2}[\mathbf{k}_0\mathbf{n}]^2E_0^2G(\mathbf{E}_0,\mathbf{R}). \qquad (30)$$

В (30) не зависящий от характеристик излученного фотона множитель равен

$$G(\mathbf{E}_0,\mathbf{R}) = \frac{1}{E_0^2}\frac{S}{1-S^2}\left\{S\left[E_0^2 + \frac{(\mathbf{E}_0\mathbf{R})^2}{4}\right] - J\right\}. \qquad (31)$$

Здесь

$$J = \left\langle\varphi_0\left(\mathbf{r}-\frac{\mathbf{R}}{2}\right)|(\mathbf{E}_0\mathbf{r})^2|\varphi_0\left(\mathbf{r}+\frac{\mathbf{R}}{2}\right)\right\rangle, \qquad (32)$$

где $\varphi_0(\mathbf{r}-\mathbf{R}/2)$ и $\varphi_0(\mathbf{r}+\mathbf{R}/2)$ – волновые функции основного состояния атома водорода, центрированные на первом и втором ядре соответственно, $\mathbf{R}$ – вектор, соединяющий первое и второе ядра. Интеграл (32) вычисляется в эллиптических координатах и равен [19]

$$J = E_0^2e^{-R}\left(\left\{1 + R\left[1 + R\left(\frac{6}{15} + R\right)\right]\right\}\sin^2\theta + \right.$$
$$\left. + \left\{1 + \frac{R}{60}(4+R)[15 + R(3+R)]\right\}\cos^2\theta\right), \qquad (33)$$

где θ – угол между $\mathbf{E}_0$ и $\mathbf{R}$.

Формула (30) содержит единичный вектор $\mathbf{n}$ направления вылета фотона. Для дальнейшего анализа удобнее проинтегрировать по углам вылета фотона с использованием формулы

$$\int d\Omega_{\mathbf{k}}[\mathbf{an}]^2 = \frac{8\pi}{3}a^2, \qquad (34)$$

где $\mathbf{a}$ – произвольный не зависящий от углов вылета фотона вектор. Тогда

$$\frac{d\Delta W}{d\omega} = \int d\Omega_{\mathbf{k}}\frac{d^2\Delta W}{d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega} =$$
$$= \frac{2}{(3\pi)^2}\frac{1}{c^3\omega}|f_0(\omega)|^2\frac{\omega^2}{c^2}E_0^2G(\mathbf{E}_0,\mathbf{R}). \qquad (35)$$

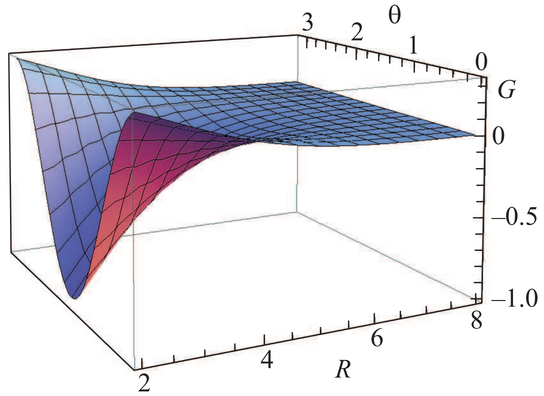
Аналогично проинтегрированный по всем углам вылета фотона спектр (28) переизлучения изолированного атома водорода имеет вид

$$\frac{dW_H}{d\omega} = \frac{2}{(3\pi)^2}\frac{1}{c^3\omega}|f_0(\omega)|^2E_0^2\left(1 + \frac{\omega^2}{Z^2c^2}\right). \qquad (36)$$

Таким образом, отношение полного спектра переизлучения квазимолекулой, образующейся при столкновении протона с атомом водорода, к полному спектру переизлучения изолированным атомом водорода равно

$$\frac{dW}{dW_{\mathrm{H}}} = 1 + \frac{d\Delta W}{dW_{\mathrm{H}}} = 1 + \frac{(\omega/c)^2}{1+(\omega/c)^2} G(\mathbf{E}_0, \mathbf{R}), \quad (37)$$

где зависимость от частоты фотона ω факторизовалась в виде простого множителя, а функция $G(\mathbf{E}_0, \mathbf{R})$ не зависит от ω. В области малых частот ($\omega^2/c^2 \ll 1$) спектр переизлучения квазимолекулой близок к спектру переизлучения изолированным атомом водорода. Лишь с ростом частоты переизлученного фотона квазимолекулярные эффекты могут заметно отражаться в спектрах переизлучения. На рисунке представлено поведение не зависящего от частоты множителя $G(\mathbf{E}_0, \mathbf{R})$ в зависимости от расстояния R между ядром атома водорода и протоном и угла θ между $\mathbf{E}_0$ и $\mathbf{R}$. Отметим, что согласно (31) и (33) функция $G(\mathbf{E}_0, \mathbf{R})$ не зависит от абсолютной величины вектора $\mathbf{E}_0$. Наш подход применим только при больших параметрах удара. Поэтому на рисунке диапазон изменения R выбран как $2 \le R \le 10$. При этом значения dW/dW_{H} из формулы (37) могут изменяться примерно на 100 % при малых R или при малых параметрах удара. Угол $\theta = \pi/2$ (при ориентации напряженности поля импульса $\mathbf{E}_0$, параллельной вектору относительной скорости столкновения $\mathbf{v}$) соответствует наибольшему сближению ядер. Это иллюстрирует появление на рисунке долины. Действительно, при прямолинейной траектории с параметром удара b квадрат межядерного расстояния равен $R^2 = b^2 + v^2t^2$, а $\cos\theta = vt/R$. Поэтому R и θ связаны соотношением $R^2 = b^2/\sin^2\theta$. Отметим также, что наибольшие изменения множителя $G(\mathbf{E}_0, \mathbf{R})$ лежат именно вдоль вышеуказанной долины и начинаются примерно при $R \le 5$. При больших



Зависимость входящей в формулы (30), (35) и (37) функции $G(\mathbf{E}_0, \mathbf{R})$, определяемой формулой (31), от расстояния R между ядром атома водорода и протоном и угла θ между $\mathbf{E}_0$ и $\mathbf{R}$. Значения R приведены в атомных единицах, θ – в радианах в диапазоне $0 \le \theta \le \pi/2$. Функция $G(\mathbf{E}_0, \mathbf{R})$ безразмерна

же значениях R функция $G(\mathbf{E}_0, \mathbf{R})$ близка к нулю. При $R \to +\infty$ имеем $G(\mathbf{E}_0, \mathbf{R}) \to 0$.

Таким образом, спектры переизлучения аттосекундных импульсов электромагнитного поля оказываются существенно зависящими от квазимолекулярных эффектов, которые становятся существенными лишь при попадании партнеров по столкновению в область реакции.

4. Релаксация. Рассмотрим пример расчета спектров переизлучения аттосекундных импульсов электромагнитного поля мишенями, находящимися в процессе релаксации. Пусть одноэлектронный атом в момент времени $t = 0$ находится в возбужденном состоянии $\varphi_1(\mathbf{r})$ с энергией ε_1, которое может релаксировать путем перехода электрона в основное состояние $\varphi_2(\mathbf{r})$ с энергией ε_2 и излучения фотона частоты ω ($\mathbf{r}$ – координаты атомного электрона). Обозначим состояние фотонного вакуума через $|0\rangle$, а состояние с одним фотоном – через $|\omega\rangle$. Если ограничиться только этим процессом, то согласно [18] волновая функция атомного электрона и фотонного поля имеет вид

$$\Psi(t) = a_1\varphi_1(\mathbf{r})e^{-i\varepsilon_1 t}|0\rangle + \\ + \varphi_2(\mathbf{r})e^{-i\varepsilon_2 t}\sum a_{\omega 2}|\omega\rangle e^{-i\omega t}. \quad (38)$$

Здесь a_1 и $a_{\omega 2}$ – зависящие от времени t коэффициенты разложения, причем $a_1(t) = e^{-\Gamma t/2}$, где Γ – радиационная ширина уровня атома в состоянии φ_1. Суммирование в (38) проводится по частоте, направлению вылета и поляризации фотона. Пусть на эту систему в момент времени $t_0 > 0$ падает аттосекундный импульс электромагнитного поля, взаимодействующий с атомным электроном. Спектр переизлучения аттосекундного импульса описывается формулой (17), в которую надо подставить $\Psi(t_0)$ из (38). В результате с учетом ортогональности состояний фотонов получим

$$\frac{d^2W}{d\Omega_{\mathbf{k}}d\omega} = \frac{1}{(2\pi)^2}\frac{1}{c^3\omega}\big(|a_1(t_0)|^2\langle\varphi_1(\mathbf{r}) \mid (...) \mid \varphi_1(\mathbf{r})\rangle + \\ + \langle\varphi_2(\mathbf{r}) \mid (...) \mid \varphi_2(\mathbf{r})\rangle\big)\sum|a_{\omega 2}|^2, \quad (39)$$

где через (...) обозначено значение квадрата модуля векторного произведения из формулы (18). Используя выражение для $a_{\omega 2}$, приведенное в [18] на с. 279, получим

$$\sum|a_{\omega 2}|^2 = {\sum}'|\langle\omega 2|V|1\rangle|^2 \times \\ \times \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{|1 + e^{-\Gamma t} - e^{-\Gamma t/2}\cdot 2\cos[(\omega-\omega_{1,2})t]|}{(\omega-\omega_{1,2})^2 + (\Gamma/2)^2}, \quad (40)$$

где $\omega_{1,2} = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$ и $\Gamma \ll 1$, так что матричный элемент $\langle\omega 2|V|1\rangle$ вычисляется при $\omega = \omega_{1,2}$, а $\sum'$ означает суммирование только по поляризациям и направлениям вылета фотона, так что $2\pi\sum{}'|\langle\omega 2|V|1\rangle|^2 = \Gamma$. После элементарного интегрирования по частоте в (40) получаем, что в формуле (39)

$$\sum|a_{\omega 2}|^2 = 1 - e^{-\Gamma t_0}. \qquad (41)$$

Проведем в формуле (39) интегрирование по углам вылета фотона согласно (34) и вычислим входящие в (39) матричные элементы, считая, что $\varphi_1(\mathbf{r}) = |2p_0\rangle$ и $\varphi_2(\mathbf{r}) = |1s\rangle$. В результате получим

$$\frac{dW}{d\omega} = \frac{dW^{2p}}{d\omega}e^{-\Gamma t_0} + \frac{dW^{1s}}{d\omega}(1 - e^{-\Gamma t_0}) = \\ = \left(\frac{dW^{2p}}{d\omega} - \frac{dW^{1s}}{d\omega}\right)e^{-\Gamma t_0} + \frac{dW^{1s}}{d\omega}. \qquad (42)$$

Здесь $dW^{1s}/d\omega$ – спектр переизлучения изолированным атомом водорода, находящимся в состоянии $1s$:

$$\frac{dW^{1s}}{d\omega} = \frac{2}{(3\pi)^2}\frac{1}{c^3\omega}|f_0(\omega)|^2 E_0^2\left(1 + \frac{\omega^2}{Z^2c^2}\right), \qquad (43)$$

а $dW^{2p}/d\omega$ – спектр переизлучения атомом водорода, находящимся в состоянии $2p$:

$$\frac{dW^{2p}}{d\omega} = \frac{2}{(3\pi)^2}\frac{1}{c^3\omega}|f_0(\omega)|^2 E_0^2\left(1 + \frac{3\cdot 42}{5}\frac{\omega^2}{Z^2c^2}\right). \qquad (44)$$

Уточним, что (44) есть спектр переизлучения изолированным атомом в пренебрежении взаимодействием с вакуумными колебаниями электромагнитного поля, ответственными за релаксацию путем испускания спонтанных фотонов. При выводе формул (43) и (44) были использованы следующие матричные элементы:

$$\langle 1s|(\mathbf{E}_0\mathbf{r})^2|1s\rangle = \frac{E_0^2}{Z^2}, \qquad (45)$$

$$\langle 2p_0|(\mathbf{E}_0\mathbf{r})^2|2p_0\rangle = \frac{3\cdot 42}{5}\frac{E_0^2}{Z^2}, \qquad (46)$$

$$\langle 1s|(\mathbf{E}_0\mathbf{r})^2|2p_0\rangle = 0. \qquad (47)$$

Влияние эффектов релаксации удобно характеризовать отношением спектра (42), испускаемого атомом водорода, находящимся в состоянии релаксации, к спектру (43) изолированного атома водорода, находящегося в основном состоянии:

$$\frac{dW}{dW^{1s}} = 24.2\frac{\omega^2/Z^2c^2}{1 + \omega^2/Z^2c^2}e^{-\Gamma t_0} + 1. \qquad (48)$$

В области больших частот это отношение уменьшается более чем на порядок с ростом момента времени t_0 взаимодействия атома с аттосекундным импульсом. Время же взаимодействия аттосекундного импульса с атомом $\tau_c \sim 1/c \leq 10^{-2} \ll 1$ (характерного атомного времени).

5. Атом в резонансном внешнем поле. Рассмотрим переизлучение аттосекундного импульса электромагнитного поля двухуровневым атомом, находящимся в периодическом внешнем поле

$$\hat{V} = \hat{F}e^{-i\omega_e t} + \hat{F}^{+}e^{i\omega_e t}. \qquad (49)$$

В этом случае нестационарное состояние имеет вид [15]

$$\Psi(t) = c_1(t)\varphi_1 e^{-i\varepsilon_1 t} + c_2(t)\varphi_2 e^{-i\varepsilon_2 t}, \qquad (50)$$

где φ_1 и φ_2 – состояния изолированного атома с энергиями ε_1 и ε_2 соответственно. В случае точного резонанса (когда частота внешнего периодического поля $\omega_e = \varepsilon_2 - \varepsilon_1$) коэффициенты в волновой функции (50) будут равны $c_1(t) = \cos(\Omega t)$ и $c_2(t) = -i\sin(\Omega t)$, где $\Omega = \langle\varphi_1|\hat{F}|\varphi_2\rangle$. Пусть для определенности φ_1 и φ_2 есть $1s$- и $2p_0$-состояния атома водорода соответственно. Тогда, поскольку $\langle 2p\mid(...)\mid 1s\rangle = 0$, как и при выводе формулы (42) (и в тех же обозначениях), получим (с учетом значений (45) и (46) диагональных матричных элементов) спектр переизлучения в виде

$$\frac{dW}{d\omega} = \cos^2(\Omega t_0)\frac{dW^{2p}}{d\omega} + \sin^2(\Omega t_0)\frac{dW^{1s}}{d\omega}. \qquad (51)$$

Полученные нами результаты нуждаются в дополнительных комментариях. Мы рассматривали одноэлектронный двухуровневый атом, причем рассчитывали спектр переизлучения только за время действия внезапного возмущения при произвольной (просуммированной по всем конечным состояниям электрона мишени) судьбе мишени. После действия внезапного возмущения атом оказывается распределенным по всевозможным состояниям. Его дальнейшая эволюция, конечно же, не может быть описана в рамках двухуровневого приближения. При этом атом может релаксировать с излучением фотонов (за характерное для радиационных переходов время). Однако рассчитанные нами спектры переизлучения и спектры, испускаемые при релаксации, строго разделены по времени. Спектр переизлучения испускается лишь за время действия аттосекундного импульса, а спектр релаксации – после него. Таким образом, рассчитанные нами спектры могут быть идентифицированы по схеме совпадений с аттосекундным импульсом. Более сложная ситуация возникает, если рассматривать многоэлектронный атом. Такой атом содержит атомные электроны, находящиеся на не связанных резонансным возмущением (49) уровнях. Эти электроны также будут переизлучать ультракороткий импульс за время взаимодействия с ним. Вклад подобных процессов в спектры переизлучения следует рассматривать дополнительно, следуя схеме расчетов [9].

6. Выводы. Итак, если время взаимодействия аттосекундного импульса электромагнитного поля с мишенью много меньше характерных промежутков времени, за которые происходит заметное изменение состояния изолированной мишени, то можно считать, что импульс "застает" мишень в определенный момент времени t_0. В случае выбора в качестве мишеней систем, находящихся в состоянии столкновения или реакции, спектры переизлучения существенно зависят от конфигурации партнеров по столкновению, соответствующей моменту времени взаимодействия с аттосекундным импульсом. В случае мишеней, находящихся в состояниях релаксации, спектры переизлучения существенно зависят от времени попадания мишени в возбужденное состояние. Это позволяет при известной скорости релаксации (времени жизни в возбужденном состоянии) определить с точностью до длительности аттосекундного импульса момент образования возбужденной мишени. В случае двухуровневого атома, находящегося в периодическом поле, спектры переизлучения позволяют определить начальную фазу мишени.

---

1. F. Krausz and M. Ivanov, Rev. Mod. Phys. **81**, 163 (2009).
2. R. Moshammer, W. Schmitt, J. Ullrich, H. Kollmus, A. Gassimi, R. Dörner, O. Jagutzki, R. Mann, R. E. Olson, H. T. Prinz, H. Schmidt-Böcking, and L. Spielberger, Phys. Rev. Lett. **79**, 3621 (1997).
3. P. B. Corkit and F. Krausz, Nature Phys. **3**, 381 (2007).
4. V. Astapenko, *Interaction of Ulrashort Electomagnetic Pulses with Matter*, Springer Briefs in Physics, Springer-Verlag Berlin and Heidelberg GmbH and Co. KG (2013), 102 p.
5. А. М. Желтиков, УФН **181**, 33 (2011).
6. В. А. Астапенко, ЖЭТФ **139**, 228 (2011).
7. P. A. Golovinkii and E. M. Mikhailov, Laser Phys. Lett. **3**, 259 (2006).
8. V. A. Astapenko, Phys. Lett. A **374**, 1585 (2010).
9. В. И. Матвеев, ЖЭТФ **124**, 1023 (2003).
10. В. И. Матвеев, ЖТФ **73**, 17 (2003).
11. В. И. Матвеев, Д. У. Матрасулов, Письма в ЖЭТФ **96**, 700 (2012).
12. Д. Н. Макаров, В. И. Матвеев, ЖЭТФ **144**, 905 (2013).
13. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теория поля*, Наука, М. (1988), 512 с.
14. М. Я. Амусья, *Тормозное излучение*, Энергоатомиздат, М. (1990), 210 с.
15. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифщиц, *Квантовая механика*, Наука, М. (1989), 768 с.
16. Б. М. Смирнов, УФН **171**, 274 (1973).
17. А. С. Давыдов, *Квантовая механика*, Наука, М. (1973), с. 621.
18. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, М. (1989), 723 с.
19. М. К. Есеев, В. И. Матвеев, Письма в ЖТФ **35**, 47 (2009).