

## НОВОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ДЛЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АТОМА С ИНТЕНСИВНЫМ ЭЛЛИПТИЧЕСКИ-ПОЛЯРИЗОВАННЫМ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ ПОЛЕМ

Л.П.Рапопорт, А.С.Корнев<sup>1)</sup>

Воронежский государственный университет  
394693 Воронеж, Россия

Поступила в редакцию 8 декабря 1999 г.

Получено новое представление для взаимодействия лазерного поля с атомом. Фурье-компонента взаимодействия представлена в виде разложения по мультиполям и зависит от силового параметра поля  $a_0 = F/\omega^2$  и степени его эллиптичности  $\eta$ , что позволяет аналитически отделить углы в зависящем от времени уравнении Шредингера. Выделена центрально-симметричная стационарная часть взаимодействия "одетого полем" атома  $V_0(r, a_0, \eta)$ . Обсуждено применение к расчету нелинейных эффектов и рассеянию электронов в поле на атоме.

PACS: 32.80.-t, 42.65.-k

В последнее время для рассмотрения взаимодействия атома со сверхсильным монохроматическим электромагнитным полем, описываемым вектор-потенциалом  $\mathbf{A}(t)$ , зависящим только от времени (дипольное приближение), эффективно используется метод Крамерса [1]. Метод основан на унитарном, зависящем от времени, преобразовании гамильтониана атома, осуществляющего переход в колеблющуюся с частотой поля систему координат. Если ввести вектор  $\mathbf{a}(t)$ , связанный с  $\mathbf{A}(t)$  соотношением

$$\mathbf{a}(t) = c^{-1} \int^t \mathbf{A}(t') dt',$$

то данное преобразование состоит в замене координаты электрона  $\mathbf{r}$  в лабораторной системе координат на  $\mathbf{r} - \mathbf{a}(t)$ . Гамильтониан водородоподобного атома с зарядом ядра  $Z$  при этом принимает вид (в работе используется атомная система единиц  $\hbar = e = m = 1$ )

$$\hat{H}_{\text{vib}} = -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{Z}{|\mathbf{r} - \mathbf{a}(t)|}. \quad (1)$$

В общем случае поляризация поля, содержащаяся в  $\mathbf{a}(t)$ , может быть любой и переменные в зависящем от времени уравнении Шредингера с гамильтонианом (1) не разделяются. Для линейно-поляризованного излучения это уравнение обычно интегрируется численно без разделения переменных [2]. Сильное поле с произвольной эллиптической поляризацией не исследовалось вообще. В частном случае для циркулярной поляризации

$$\mathbf{a}(t) = \frac{a_0}{\sqrt{2}} (e_x \cos \omega t - \eta e_y \sin \omega t), \quad (2)$$

где  $a_0 = F/\omega^2$ ,  $F$  – амплитуда напряженности поля,  $\omega$  – его частота,  $\eta = \pm 1$  для левой(правой) поляризации волны. В работе [3] было показано, что потенциал в уравнении (1) с  $\mathbf{a}(t)$  в форме (2) может быть разложен по мультиполям. Действительно, из (2) видно, что  $|\mathbf{a}(t)| = a_0/\sqrt{2}$ ;  $\cos(\hat{\mathbf{r}}, \hat{\mathbf{a}}(t)) = \cos(\varphi + \eta\omega t)$  (здесь и далее

<sup>1)</sup> e-mail: kornev@tooth.vsu.ru

введено обозначение  $\hat{\alpha} \equiv \alpha/|\alpha|$ . Учитывая, что потенциал в (1) является производящей функцией для полиномов Лежандра, получаем следующее его разложение по сферическим функциям  $Y_{LM}(\hat{r})$  и  $Y_{LM}(e_z)$ :

$$|\mathbf{r} - \mathbf{a}(t)|^{-1} = \sum_{L=0}^{\infty} \sum_{M=-L}^L \frac{4\pi}{2L+1} \xi_L(r, a_0) Y_{LM}(\hat{r}) Y_{LM}^*(e_z) e^{i\eta M \omega t}, \quad (3)$$

где  $\xi_L(r, a_0) = r_{<}^L/r_{>}^{L+1}$ ;  $r_{<} = \min(r, a_0/\sqrt{2})$ ;  $r_{>} = \max(r, a_0/\sqrt{2})$ .

В нестационарном уравнении Шредингера с потенциалом (3),

$$i \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \left\{ -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{Z}{|\mathbf{r} - \mathbf{a}(t)|} \right\} \Psi(\mathbf{r}, t),$$

можно отделить угловые части, проецируя его на  $Y_{lm}(\hat{r})$ , и свести к одномерной системе уравнений для квазиэнергий. Применение (3) к задаче рассеяния электрона в поле дано в [4]. Однако разложение по мультиполям (3) изложенным методом возможно только для циркулярно-поляризованного поля, так как в общем случае эллиптической поляризации  $|\mathbf{a}(t)|$  будет зависеть от времени.

Целью настоящей работы является вывод разложения по мультиполям для эллиптически-поляризованного поля.

Используем разложение  $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^{-1}$  по мультиполям, где  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}_2$  входят симметризованным образом, а не в виде  $r_{<}^L/r_{>}^{L+1}$  [5]:

$$|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^{-1} = \sum_{L=0}^{\infty} \sum_{M=-L}^L \frac{4\pi}{2L+1} f_L(r_1, r_2) Y_{LM}(\hat{r}_1) Y_{LM}^*(\hat{r}_2), \quad (4)$$

где

$$f_L(r_1, r_2) = \frac{(r_1 r_2)^L}{(r_1^2 + r_2^2)^{L+1/2}} {}_2F_1 \left( \frac{L}{2} + \frac{1}{4}, \frac{L}{2} + \frac{3}{4}; L + \frac{3}{2}; \left( \frac{2r_1 r_2}{r_1^2 + r_2^2} \right)^2 \right), \quad (5)$$

${}_2F_1$  – гипергеометрическая функция. В нашем случае положим  $\mathbf{r}_1 \equiv \mathbf{r}$ ,  $\mathbf{r}_2 \equiv \mathbf{a}(t)$ . Введем также волновой вектор фотонов  $\mathbf{k} = n\omega/c$ , а ось  $z$  направим вдоль  $\mathbf{k}$ , то есть  $e_z = \mathbf{n}$ .

В общем случае эллиптически-поляризованного поля

$$\mathbf{a}(t) = \frac{a_0}{\sqrt{1 + \eta^2}} (e_x \cos \omega t - \eta e_y \sin \omega t); \quad -1 \leq \eta \leq 1. \quad (6)$$

Параметр  $\eta$  определяет степень линейной,  $l = (1 - \eta^2)/(1 + \eta^2)$ , и циркулярной,  $A_C = 2\eta/(1 + \eta^2)$ , поляризации. Из (6) видно, что амплитуды  $|a_{x0}| \neq |a_{y0}|$ . Вращением координатных осей с помощью  $D_{MM'}^{(L)}(\alpha, \beta, \gamma)$ -функций Вигнера перейдем к новой системе координат  $(e'_x, e'_y, e'_z)$ , выбрав угол поворота  $\beta$  вокруг оси  $e_y = e'_y$  так, чтобы в новых координатах амплитуды  $|a'_{x0}| = |a'_{y0}|$ . Полагая  $\beta = \arcsin(1 - \eta^2)^{1/2}$ ,  $0 \leq \beta \leq \leq \pi/2$ , преобразуем (4) и (6) к новой системе координат. Учитывая, что скалярное произведение сферических функций, входящих в (4), не изменяется, имеем:

$$\sum_M Y_{LM}(\hat{r}) Y_{LM}^*(\hat{\mathbf{a}}(t)) = \sum_M Y_{LM}(\hat{r}') Y_{LM}^*(\hat{\mathbf{a}}'(t)),$$

а преобразование

$$a'_{m'}(t) = \sum_m D_{mm'}^{(1)}(0, \beta, 0) a_m(t),$$

где  $m, m' = 0, \pm 1$ ,  $a_m(t)$  и  $a'_{m'}(t)$  – циклические компоненты вектора  $\mathbf{a}(t)$  соответственно в исходной и повернутой системах координат, дает

$$\mathbf{a}(t) = \frac{a_0}{\sqrt{1+\eta^2}} \{(\sqrt{1-\eta^2} \mathbf{e}'_z + |\eta| \mathbf{e}'_x) \cos \omega t - \eta \mathbf{e}'_y \sin \omega t\};$$

$$Y_{LM}^*(\hat{\mathbf{a}}'(t)) = Y_{LM}^*(\theta'_a, \varphi'_a) = \sqrt{\frac{2L+1}{4\pi} \frac{(L-M)!}{(L+M)!}} P_L^M(\cos \theta'_a) e^{iM\varphi'_a},$$

где  $P_L^M(x)$  – присоединенный полином Лежандра;

$$\cos \theta'_a = \frac{\sqrt{1-\eta^2} \cos \omega t}{\sqrt{\eta^2 + (1-\eta^2) \cos^2 \omega t}}; \quad \varphi'_a = \text{sign} \eta \omega t';$$

$$a^2(t) = \frac{a_0^2}{1+\eta^2} [\eta^2 + (1-\eta^2) \cos^2 \omega t]. \quad (7)$$

В новой системе координат разложение (4) принимает вид

$$|\mathbf{r} - \mathbf{a}(t)|^{-1} = \sum_{L=0}^{\infty} \sum_{M=-L}^L \sqrt{\frac{4\pi}{2L+1}} \mathcal{F}_{LM}(r, a_0, \eta, \omega t) Y_{LM}(\hat{\mathbf{r}}') e^{i \text{sign} \eta M \omega t},$$

где

$$\mathcal{F}_{LM}(r, a_0, \eta, \omega t) = F(\cos^2 \omega t) P_L^M \left( \frac{\sqrt{1-\eta^2} \cos \omega t}{\sqrt{\eta^2 + (1-\eta^2) \cos^2 \omega t}} \right);$$

$$F(\cos^2 \omega t) \equiv \sqrt{\frac{(L-M)!}{(L+M)!}} f_L(r, a(t)).$$

Разложим  $\mathcal{F}_{LM}(r, a_0, \eta, \omega t)$  в ряд Фурье:

$$\mathcal{F}_{LM}(r, a_0, \eta, \omega t) e^{i \text{sign} \eta M \omega t} = \sum_{N=-\infty}^{\infty} \bar{f}_N(LM; r, a_0, \eta) e^{i(N + \text{sign} \eta M) \omega t}.$$

Коэффициенты разложения

$$\bar{f}_N(LM; r, a_0, \eta) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \mathcal{F}_{LM}(r, a_0, \eta, \alpha) e^{-iN\alpha} d\alpha.$$

Если  $\cos N\alpha$  представить в виде

$$\cos N\alpha = \sum_{k=|N| \bmod 2}^{|N|} b_k^{(|N|)} \cos^k \alpha,$$

где

$$b_k^{(n)} = \begin{cases} 2^{k-1} \frac{2n}{n-k} (-1)^{(n-k)/2} \binom{\frac{n+k}{2}-1}{\frac{n-k}{2}-1}, & k < n; \\ 2^{n-1} (1 + \delta_{n0}), & k = n \end{cases}$$

(см. [6], формула (1.331.3)), а штрих над знаком суммы означает суммирование по четным либо нечетным  $k$  в зависимости от  $N$ , то  $N$ -я компонента Фурье  $\tilde{f}_N$  примет вид

$$\tilde{f}_N(LM; r, a_0, \eta) = \frac{1}{2\pi} \sum'_{k=|N| \bmod 2}^{|N|} b_k^{(|N|)} \int_0^{2\pi} F(\cos^2 \alpha) \times \\ \times P_L^M \left( \frac{\sqrt{1-\eta^2} \cos \alpha}{\sqrt{\eta^2 + (1-\eta^2) \cos^2 \alpha}} \right) \cos^k \alpha d\alpha. \quad (8)$$

Формулу (8) можно привести к виду

$$\tilde{f}_N(LM; r, a_0, \eta) = \begin{cases} \sum'_{k=|N| \bmod 2}^{|N|} b_k^{(|N|)} G_{LM}(k, \eta), & L + M + N \text{ четно;} \\ 0, & L + M + N \text{ нечетно,} \end{cases}$$

где

$$G_{LM}(k, \eta) = \frac{2}{\pi} \int_0^1 F(x^2) P_L^M \left( \frac{\sqrt{1-\eta^2} x}{\sqrt{\eta^2 + (1-\eta^2)x^2}} \right) \frac{x^k dx}{\sqrt{1-x^2}}.$$

Можно показать, что

$$\int_0^{2\pi} (\dots) \sin(N\alpha) d\alpha = 0.$$

Окончательно для  $|\mathbf{r} - \mathbf{a}(t)|^{-1}$  получаем следующее Фурье-разложение по мультиполям:

$$|\mathbf{r} - \mathbf{a}(t)|^{-1} = \sum_{N=-\infty}^{\infty} \sum_{L=0}^{\infty} \sum_{M=-L}^L \sqrt{\frac{4\pi}{2L+1}} \tilde{f}_N(LM; r, a_0, \eta) Y_{LM}(\hat{\mathbf{r}}') e^{i(N+\text{sign}\eta M)\omega t}. \quad (9)$$

В частных случаях имеем:

1) линейная поляризация ( $\eta = 0$ ):

$$\sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}} \frac{(L-M)!}{(L+M)!} P_L^M(+1) = \delta_{M,0} \sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}}; \quad P_L^M(-1) = (-1)^L P_L^M(+1).$$

Таким образом, в разложении (9) слагаемые с  $M \neq 0$  исчезают;

2) циркулярная поляризация ( $\eta = \pm 1$ ):

$$\sqrt{\frac{2L+1}{4\pi}} \frac{(L-M)!}{(L+M)!} P_L^M(0) = Y_{LM}(\mathbf{e}_z);$$

$|\mathbf{a}(t)| = a_0/\sqrt{2}$  — не зависит от времени. В этом случае в разложении (9) исчезают слагаемые с  $N \neq 0$ , а  $f_L(r, a(t)) = r_-^L/r_+^{L+1}$ , то есть совпадает с (3).

При  $N = 0$  потенциал не зависит от времени (“одетый полем” атом). Если, кроме того, положить  $L = M = 0$ , то мы выделим центрально-симметричную часть потенциала “одетого полем” атома. В этом случае  ${}_2F_1$ , входящее в (5), может быть выражено через элементарную функцию (см. [7], формула (15.1.14)):

$${}_2F_1 \left( \frac{1}{4}, \frac{3}{4}; \frac{3}{2}; z \right) = \left( \frac{2}{1 + \sqrt{1-z}} \right)^{1/2}.$$

С такой формой  ${}_2F_1$  при

$$z = \left( \frac{2ra(t)}{r^2 + a^2(t)} \right)^2,$$

где  $a(t)$  дано в (7), вычисляем  $f_0(r, a(t))$ . Для нахождения Фурье-образа  $\bar{f}_0$  необходимо еще провести интегрирование по времени от  $f_0(r, a(t))$ . Это приводит к разбиению аналитической зависимости  $\bar{f}_0$  от  $r$  на 3 области:

$$1) r < \frac{|\eta| a_0}{\sqrt{1 + \eta^2}}; \quad 2) \frac{|\eta| a_0}{\sqrt{1 + \eta^2}} < r < \frac{a_0}{\sqrt{1 + \eta^2}}; \quad 3) r > \frac{a_0}{\sqrt{1 + \eta^2}};$$

$$V_0^{(e)}(r, a_0, \eta) = -Z \begin{cases} 2\sqrt{1 + \eta^2} K(\sqrt{1 - \eta^2}) / (\pi a_0), & \text{обл. (1);} \\ 2g(r, a_0, \eta) / \pi, & \text{обл. (2);} \\ 1/r, & \text{обл. (3),} \end{cases} \quad (10)$$

где

$$g(r, a_0, \eta) = \frac{1}{r} \arcsin \sqrt{\frac{(1 + \eta^2)r^2 - \eta^2 a_0^2}{a_0^2(1 - \eta^2)}} + \\ + \frac{1}{a_0} \sqrt{1 + \eta^2} F \left( \arccos \sqrt{\frac{(1 + \eta^2)r^2 - \eta^2 a_0^2}{a_0^2(1 - \eta^2)}}, \sqrt{1 - \eta^2} \right);$$

$K(m)$  и  $F(\alpha, m)$  – соответственно полный и неполный эллиптические интегралы первого рода.

Из (10) видно, что асимптотика  $V_0^{(e)}(r \rightarrow \infty, a_0, \eta)$  является кулоновской. В частных случаях для линейной и циркулярной поляризации из (10) имеем:

1) линейная поляризация ( $\eta = 0$ ):

$$V_0^{(l)}(r, a_0) = -Z \begin{cases} \frac{2}{\pi} \frac{1}{r} \arcsin \left( \frac{r}{a_0} \right) + \frac{2}{\pi} \frac{1}{a_0} \ln \frac{a_0 + \sqrt{a_0^2 - r^2}}{a_0 - \sqrt{a_0^2 - r^2}}, & r < a_0; \\ 1/r, & r > a_0. \end{cases}$$

При  $r \rightarrow 0$  имеется логарифмическая сингулярность;

2) циркулярная поляризация ( $\eta = \pm 1$ ):

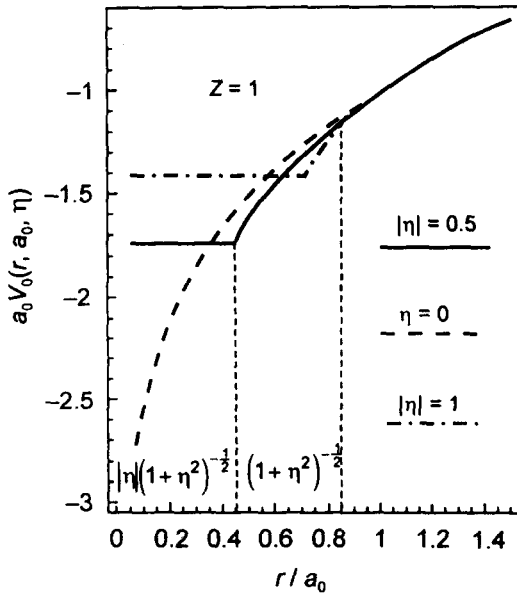
$$V_0^{(c)}(r, a_0) = -Z \begin{cases} \sqrt{2}/a_0, & r < a_0/\sqrt{2}; \\ 1/r, & r > a_0/\sqrt{2}. \end{cases}$$

Потенциал  $V_0$  для различных поляризаций с  $|\eta| = 0, 0.5, 1$  представлен на рисунке.

Для применения теории к сложному  $N$ -электронному атому вместо гамильтониана (1) имеем:

$$\hat{H}_0^{(N)} = \sum_{k=1}^N \left\{ -\frac{1}{2} \nabla_k^2 - V_{0k}^{(e)}(r, a_0, \eta) \right\} + \frac{1}{2} \sum_{k \neq q=1}^N \frac{1}{|r_k - r_q|}.$$

Потенциал кулоновского взаимодействия между электронами при преобразовании Крамерса [1] не изменяется и поэтому просто складывается с  $V_{0k}^{(e)}(r, a_0, \eta)$ . На этой части гамильтониана можно построить уравнения Хартри – Фока, решения которых определяют энергию электрона в “одетом полем” атоме  $\epsilon_k(a_0, \eta)$  и одночастичную



Стационарная центрально-симметричная часть потенциала  $V_0(r, a_0, \eta)$  как функция  $r/a_0$  для эллиптически- (выбрано  $|\eta| = 0.5$ ), линейно- ( $\eta = 0$ ) и циркулярно-поляризованного поля ( $|\eta| = 1$ ). При  $r > a_0(1 + \eta^2)^{-1/2}$  потенциал является кулоновским

волновую функцию  $\varphi_k(r, a_0, \eta)$ . Полный, зависящий от времени, гамильтониан будет содержать также разложенную по мультиполям часть (9), в которой необходимо опустить слагаемые с  $N = L = M = 0$  (они вошли в  $V_{0k}^{(e)}$ ), то есть взять  $V_{Nk}^{(e)}(LM; r, a_0, \eta)$  с  $|N| \geq 0, L > 0, |M| \geq 0$ . На базисных хартри-фоковских функциях "одетого полем" атома, считая  $V_N^{(e)}$  "затравочной" вершиной, можно построить уравнения для эффективной вершины в приближении метода случайных фаз с обменом (RPAE) и аналитически отделить угловые переменные, как это рассмотрено для RPAE в циркулярно-поляризованном поле [3].

Задачу рассеяния электрона в сильном эллиптически-поляризованном поле на кулоновском потенциале (в общем случае — на атоме) методом сильной связи каналов можно свести к одномерной системе связанных уравнений, подобных рассмотренным в работе [4] для циркулярно-поляризованного поля. Ищем решение уравнения Шредингера в колеблющейся системе координат в виде

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{nl'm'} \frac{1}{r} R_{nl'm'}(r) Y_{l'm'}(\hat{\mathbf{r}}) e^{-i(E - n\omega)t}.$$

Проецируя уравнение Шредингера на состояние  $Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}})$  и приравнивая слагаемые с одинаковыми множителями  $e^{in\omega t}$ , получим:

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} - 2V_0^{(e)}(r, a_0, \eta) + k_n^2 \right\} R_{nlm}(r) = 2 \sum_{n'l'm'} V_{n'l'm'}^{n'l'm'}(r, a_0, \eta) R_{n'l'm'}(r),$$

где

$$V_{n'l'm'}^{n'l'm'}(r, a_0, \eta) = -Z \sum_{N=-\infty}^{\infty} \sum_{L=1}^{\infty} \bar{f}_N(L, m - m'; r, a_0, \eta) \times$$

$$\times (-1)^m [(2l+1)(2l'+1)]^{1/2} \begin{pmatrix} l' & L & l \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l' & L & l \\ m' & m - m' & m \end{pmatrix} \delta_{n', n+(m-m')\text{sign}\eta + N};$$

$$k_n^2 = 2(E - n\omega).$$

Очевидно, что соответствующие дифференциальные сечения будут зависеть от  $\text{sign}\eta$ , то есть от спиральности фотона (эллиптический дихроизм). В слабом поле по теории возмущений эллиптический дихроизм рассматривался в работе [8].

Работа выполнялась при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант #00-02-1656).

- 
1. H.A.Kramers, *Quantum mechanics*, Amsterdam, North. Holl., 1956.
  2. *Super-Intense Laser-Atom Physics IV (1995)*, Eds. H.G.Müller and M.V.Fedorov, Dordrecht Kluwer Acad., 1996.
  3. Л.П.Рапопорт, Письма в ЖЭТФ **68**, 189 (1998).
  4. Л.П.Рапопорт, А.С.Корнев, ЖЭТФ **116**, 1241 (1999).
  5. R.A.Sack, *J. of Math. & Phys.* **37**, 215 (1957).
  6. И.С.Градштейн, И.М.Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, М.: Наука, 1971.
  7. М.Абрамовиц, И.Стиган, *Справочник по специальным функциям*, М.: Наука, 1979.
  8. N.L.Manakov, A.Maquet, S.I.Marmo et al., *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **32**, 3747 (1999).