

О ВЛИЯНИИ МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ИОНИЗАЦИЮ АТОМОВ

В.С.Попов, А.В.Сергеев*

Институт теоретической и экспериментальной физики
117259 Москва, Россия*Государственный оптический институт им. С.И.Вавилова
199034 Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 30 января 1996 г.

Вычислена вероятность ионизации атомного s -уровня под действием постоянных электрического и магнитного полей с учетом кулоновского взаимодействия между вылетающим электроном и атомным остатком. Исследована структура рядов теории возмущений (ТВ) для энергии уровня и найдена асимптотика высших порядков ТВ.

PACS: 03.65.-w, 03.65.Sq, 32.60.+i

1. Проблемы, связанные с ионизацией атомов и ионов в сильных полях, стали особенно актуальными после появления лазеров. В 60-е годы была создана квазиклассическая теория ионизации в электрическом поле \mathcal{E} , причем рассмотрен как случай нейтральных атомов [1-3], так и отрицательных ионов [4] типа H^- , J^- и т. д. Первая из этих задач является более сложной из-за необходимости учитывать кулоновское взаимодействие между электроном и атомным остатком в процессе туннелирования.

Влияние магнитного поля \mathcal{H} на ширину уровня, то есть на вероятность ионизации $w(\mathcal{E}, \mathcal{H})$, изучалась в [5-8], однако в этих работах рассмотрен только случай отрицательных ионов. При этом были вычислены как экспоненциальный фактор [5] в вероятности w , так и предэкспонента [6-8] (последняя, правда, лишь в нескольких частных случаях).

Как известно, учет кулоновского взаимодействия в задачах такого рода представляет значительные трудности и, например, в теории многофотонной ионизации атомов [9-12] не выполнен в полной мере до настоящего времени (мы имеем в виду аналитические формулы, а не численные расчеты). Для задачи об ионизации атомного уровня под действием постоянных и однородных полей \mathcal{E} и \mathcal{H} такой расчет можно провести до конца в аналитическом виде; основные результаты излагаются ниже.

2. Пусть $E = -\kappa^2/2$ – энергия атомного уровня ($l=0$), а ϵ и h – ”приведенные” значения внешних полей:

$$\epsilon = \mathcal{E}/\kappa^3 \mathcal{E}_a, \quad h = \mathcal{H}/\kappa^2 \mathcal{H}_a, \quad (1)$$

где $\mathcal{E}_a = m_e^2 e^5 / \hbar^4 = 5.14 \cdot 10^9$ В/см и $\mathcal{H}_a = m_e^2 c e^3 / \hbar^3 = 2.35 \cdot 10^9$ Гс – атомные единицы напряженности поля (здесь и далее $\hbar = e = m_e = 1$); отношение \mathcal{H}/\mathcal{E} , а также угол θ между полями могут быть произвольными. Заметим, что для основного уровня $\kappa \approx 1$ (так, $\kappa = 1, 1.344$ и 1.259 , соответственно для атомов водорода, гелия и неона), однако для ридберговских состояний этот параметр может быть и меньше единицы (в атоме водорода $\kappa = 1/n$ для ns -уровней). В этом случае значения $\epsilon, h \sim 1$ достигаются для полей, значительно меньших, чем атомные.

Для вычисления вероятности ионизации мы применим метод мнимого времени (ММВ). Подбарьерная траектория электрона удовлетворяет классическим уравнениям движения, но с мнимым "временем". Вычисленная вдоль нее мнимая часть функции укороченного действия W определяет вероятность туннелирования, то есть (в данном случае) вероятность ионизации атома [10,11]

$$w(\mathcal{E}, \mathcal{H}) \propto \exp \left\{ -\frac{2}{\hbar} \text{Im} W(0, t_0) \right\}, \quad (2)$$

где t_0 - начальный (комплексный) момент подбарьерного движения, а $t = 0$ - момент выхода электрона из-под барьера. В случае δ -потенциала (то есть при $Z = 0$, Z - заряд атомного остатка) подбарьерные траектории находятся аналитически. Приведем выражение для экстремальной траектории, минимизирующей $\text{Im} W$ и определяющей наиболее вероятный путь туннелирования частицы:

$$\begin{aligned} x &= i \frac{\mathcal{E}}{\omega_L^2} \left(\tau - \tau_0 \frac{\text{sh} \tau}{\text{sh} \tau_0} \right) \sin \theta, & y &= \frac{\mathcal{E}}{\omega_L^2} (\text{ch} \tau - \text{ch} \tau_0) \frac{\tau_0}{\text{sh} \tau_0} \sin \theta, \\ z &= \frac{\mathcal{E}}{2\omega_L^2} (\tau_0^2 - \tau^2) \cos \theta, \end{aligned} \quad (3)$$

где $\tau = i\omega_L t$ ($-\tau_0 \leq \tau \leq 0$), ω_L - ларморовская частота, начальный момент подбарьерного движения определяется из уравнения

$$\tau_0^2 - \sin^2 \theta (\tau_0 \text{cth} \tau_0 - 1)^2 = \gamma^2, \quad (4)$$

а $\gamma = \kappa \mathcal{H} / c \mathcal{E} = \hbar / \epsilon$ (обозначения - те же, что и в работе [5]). Подстановка (3) в формулу (2) дает¹⁾

$$w_{\text{кор}}(\mathcal{E}, \mathcal{H}) = \omega_0 P(\gamma, \theta) \epsilon \exp \left\{ -\frac{2}{3\epsilon} g(\gamma, \theta) \right\}, \quad (5)$$

$$g(\gamma, \theta) = \frac{3\tau_0}{2\gamma} \left[1 - \frac{1}{\gamma} \left(\frac{\tau_0^2}{\gamma^2} - 1 \right)^{1/2} \sin \theta - \frac{\tau_0^2}{3\gamma^2} \cos^2 \theta \right], \quad \omega_0 = \frac{\kappa^2}{2},$$

где индекс "кор" означает, что формула относится к ионизации s -уровня, связанного короткодействующим ($Z = 0$) потенциалом, см. рис.1, а P - предэкспонента (вычисленная в [6-8] в двух случаях: при $\theta = 0$ и для $\theta = \pi/2$, $\gamma \ll 1$), причем в случае δ -потенциала $P(0, \theta) = 1$.

Для учета кулоновского взаимодействия используем процедуру сшивания [1], вводя точку сшивания r_1 такую, что $\kappa^{-1} \ll r_1 \ll r_0 \ll b$, где $b \sim \kappa^2 / 2\mathcal{E}$ - ширина барьера, а $r_0 = \sqrt{Z/\mathcal{E}}$ - расстояние, на котором кулоновское поле атомного остатка (заряд Z) сравнивается по величине с внешним полем. При $r > r_1$ кулоновское взаимодействие слабо искажает подбарьерную траекторию, а при $r < r_1$ волновая функция электрона практически та же, что и в свободном атоме. Поэтому изменение функции действия, вызванное кулоновским

¹⁾ Отметим, что параметр γ аналогичен известному параметру Келдыша в теории многофотонной ионизации атомов [9].

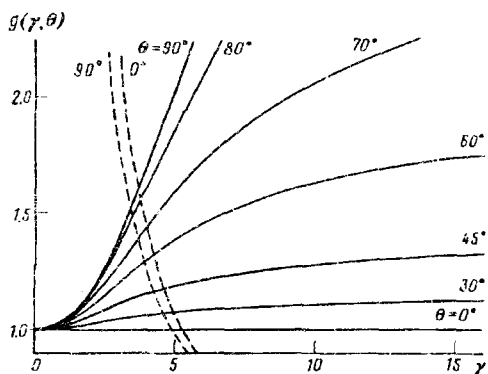


Рис.1. Функция $g(\gamma, \theta)$ в зависимости от параметра γ ; у кривых указаны значения угла θ между электрическим и магнитным полями. Штриховые кривые соответствуют комплексному решению $g_c(\gamma, \theta)$

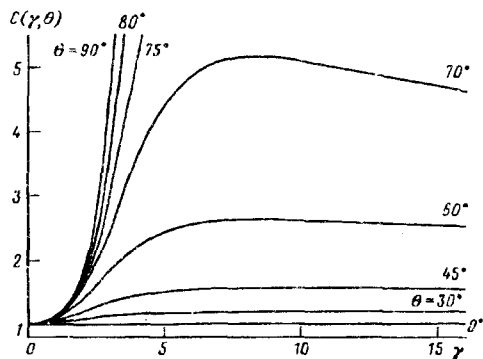


Рис.2. Кулоновский фактор $C(\gamma, \theta)$ в вероятности ионизации атомов, см. формулу (7)

потенциалом $\delta V(r) = -Z/r$, можно рассчитать по формуле теории возмущений (ТВ) в рамках ММВ ²⁾

$$\delta W = -i\eta \ln \kappa r_1 - \int_{t_1}^0 \delta V(r(t)) dt, \quad (6)$$

где $r(t)$ – подбарьерная траектория, $r_1 = r(t_1)$ и $\eta = Z/\kappa$ – параметр Зоммерфельда. Из (3)–(6) после простых, хотя и громоздких, вычислений получаем:

$$w(\mathcal{E}, \mathcal{H}) = |A_{\kappa s}|^2 \left[\frac{2}{\epsilon} C(\gamma, \theta) \right]^{2\eta} w_{kop}(\mathcal{E}, \mathcal{H}), \quad (7)$$

где $w_{kop}(\mathcal{E}, \mathcal{H})$ определена в (5),

$$C(\gamma, \theta) = \exp \left\{ \ln \frac{\tau_0}{2\gamma} + \int_0^{\tau_0} d\tau \left[\frac{\gamma}{\xi(\tau)} - \frac{1}{\tau_0 - \tau} \right] \right\}, \quad (8)$$

$$\xi(\tau) = \left\{ \frac{1}{4} (\tau_0^2 - \tau^2)^2 \cos^2 \theta + \tau_0^2 \left[\left(\frac{\text{ch} \tau_0 - \text{ch} \tau}{\text{sh} \tau_0} \right)^2 - \left(\frac{\text{sh} \tau}{\text{sh} \tau_0} - \frac{\tau}{\tau_0} \right)^2 \right] \sin^2 \theta \right\}^{1/2} \quad (8a)$$

и $A_{\kappa s}$ – асимптотический коэффициент волновой функции s -состояния (в свободном атоме) на больших расстояниях:

$$\psi_0(\tau) \approx A_{\kappa s} \sqrt{\frac{\kappa^3}{2\pi}} e^{-\kappa\tau} (\kappa\tau)^{\eta-1}, \quad \tau \gg \kappa^{-1} \quad (9)$$

²⁾Проверкой данной процедуры является выпадение произвольной точки сшивания τ_1 из окончательного ответа, что и имеет место в формулах (7) и (8).

(в случае трехмерного δ -потенциала $A = 1$, а для ns -уровней атома водорода $|A_{n,s}| = 2^{n-1/2}/n!$). Учет кулоновского взаимодействия дает множитель в квадратных скобках в формуле (7), но не меняет функцию $g(\gamma, \theta)$, входящую в экспоненту. Поскольку $C = 1 + \frac{1}{9} \sin^2 \theta \gamma^2 + \dots$ при $\gamma \ll 1$ ("слабое" магнитное поле), то (7) в этом случае сводится к хорошо известному [1-3,10] кулоновскому фактору $(2\kappa^3/\mathcal{E})^{2\eta} \gg 1$. В другом предельном случае ($\gamma \rightarrow \infty$) функция $C(\gamma, \theta)$ выходит на константу, равную $1/\cos \theta$, если $\theta \neq \pi/2$, см. рис.2.

Численный расчет по (5) и (8) дает кривые, представленные на рис.1 и 2. Магнитное поле уменьшает вероятность ионизации, стабилизируя уровень; это связано с тем, что при включении поля \mathcal{H} подбарьерная траектория электрона "закручивается", и ширина барьера b возрастает. В то же время, учет кулоновского взаимодействия значительно повышает вероятность ионизации нейтрального атома по сравнению со случаем отрицательного иона (при одинаковой энергии связи $\kappa^2/2$ и сравнимых значениях $|A_{\kappa l}|^2$).

Подчеркнем, что формулы (5) и (7) являются асимптотически точными для достаточно слабых полей ($\epsilon, h \ll 1$), когда вероятность ионизации w имеет экспоненциальную малость. Следует отметить, что в случае $\theta = \pi/2$ и $\gamma > 1$ (скрещенные электрическое и магнитное поля, лоренцева ионизация) вероятность w хотя и мала, но отнюдь не обращается в нуль (в отличие от того, что утверждается в работе [6]).

3. Вычисление ширины уровня $\Gamma = \hbar w(\mathcal{E}, \mathcal{H})$ дает возможность исследовать асимптотику высших порядков ТВ. Разлагая энергию в ряд ТВ

$$E = \sum_{k=0}^{\infty} E_{2k}(\gamma) \mathcal{E}^{2k}, \quad \gamma = h/\epsilon, \quad (10)$$

и используя дисперсионные соотношения [13], получаем из (7) и (5) при $k \rightarrow \infty$:

$$E_{2k} \approx (2k)! a^{2k} k^\beta (c_0 + \frac{c_1}{k} + \dots), \quad a = \frac{3}{2\kappa^3 g(\gamma, \theta)} \quad (11)$$

(здесь рассматривается основное состояние, для которого нечетные порядки ТВ сбрасываются в нуль тождественно).

Численный анализ уравнения (4) показал, что наряду с найденным выше вещественным решением $\tau_0(\gamma, \theta)$ у него имеется и комплексное решение $\tau_c(\gamma, \theta)$, для которого $\tau_c = i\pi[1 - i\gamma^{-1} \sin \theta + O(\gamma^{-3})]$ при $\gamma \rightarrow \infty$. Ему соответствует функция $g_c(\gamma, \theta)$, показанная на рис.1 штриховой кривой. Из рис.1 видно, что существует такое $\gamma_*(\theta)$, что $|g_c(\gamma, \theta)| < g(\gamma, \theta)$ при $\gamma > \gamma_*(\theta)$. В этом случае асимптотика коэффициента ТВ определяется уже не точкой перевала τ_0 , а вторым решением τ_c (и комплексно-сопряженным к нему):

$$E_{2k} \approx (-1)^k (2k)! \operatorname{Re}(c_c a_c^{2k}) k^{\beta_c}, \quad k \rightarrow \infty, \quad (11a)$$

где $a_c = 3/2g_c$ и c_c - комплексные параметры. Для $\kappa = 1$ и $\theta = 0$ (основное состояние атома водорода, параллельные поля) имеем:

$$g(\gamma, 0) \equiv 1, \quad g_c(\gamma, 0) = i \frac{3\pi}{2\gamma} \left(1 + \frac{\pi^2}{3\gamma^2} \right),$$

откуда

$$\gamma_*(\theta = 0) = \pi [(\sqrt{2} + 1)^{1/3} - (\sqrt{2} - 1)^{1/3}]^{-1} = 5.270... \quad (12)$$

Если $\gamma < \gamma_*$, то ряд ТВ является знакопостоянным, поскольку параметр $a > 0$. Если же $\gamma > \gamma_*$, то знаки E_{2k} должны чередоваться в соответствии с (11а). Мы проверили это прямым вычислением высших порядков ТВ вплоть до $2k = 80$ (при $2k \leq 10$ наши результаты согласуются с работой [14]). Было показано, что между $\gamma = 5$ и 5.5 действительно меняется структура ряда ТВ (в том числе чередование знаков у E_{2k}). Кроме того, при $\gamma < \gamma_*$ коэффициенты E_{2k} – все одного порядка величины (поскольку параметр асимптотики $a = 3/2$ не зависит от γ), а при $\gamma > \gamma_*$ начинается их дополнительный (и очень быстрый) рост в соответствии с уменьшением $|g_c(\gamma)|$.

Таким образом, комплексные подбарьерные траектории могут быть существенны для определения высших порядков ТВ. Формула (7) для ширины уровня $\Gamma = \hbar\omega$ при этом, однако, не меняется, поскольку такие траектории не удовлетворяют граничным условиям, отвечающим выходу частицы из-под барьера и уходу ее на бесконечность.

Был вычислен также предэкспоненциальный множитель³⁾ в (5), (7), что позволяет провести сравнение с экспериментальными данными. За недостатком места мы отложим обсуждение этих вопросов до более подробной публикации.

Авторы выражают искреннюю благодарность Б.М.Карнакову и В.Д.Муру за очень полезные обсуждения в ходе работы. Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 95-02-05417).

-
1. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, *Квантовая механика*, М.: Физматгиз, 1963, §77.
 2. Б.М.Смирнов, М.И.Чибисов, *ЖЭТФ* **49**, 841 (1965).
 3. T.Yamabe, A.Tachibana, and H.J.Silverstone, *Phys. Rev.* **16**, 877 (1977).
 4. Ю.Н.Демков, Г.Ф.Друкарев, *ЖЭТФ* **47**, 918 (1964).
 5. Л.П.Котова, А.М.Переломов, В.С.Попов, *ЖЭТФ* **54**, 1151 (1968).
 6. Г.Ф.Друкарев, Б.С.Монозон, **61**, 956 (1971).
 7. С.П.Андреев, В.А.Полунин, *Письма в ЖЭТФ* **42**, 154 (1985).
 8. В.А.Полунин, *ФТТ* **28**, 2182 (1986).
 9. Л.В.Келдыш, *ЖЭТФ* **47**, 1945 (1964).
 10. А.М.Переломов, В.С.Попов, М.В.Терентьев, *ЖЭТФ* **51**, 309 (1966); **52**, 514 (1967).
 11. В.С.Попов, В.П.Кузнецов, А.М.Переломов, *ЖЭТФ* **53**, 331 (1967).
 12. А.И.Никишов, В.И.Ригус, *ЖЭТФ* **52**, 223 (1967).
 13. С.М.Bender and Т.Т.Wu, *Phys. Rev. D* **7**, 1620 (1973).
 14. В. R.Johnson, K.F.Scheibner, and D.Farrelly, *Phys. Rev. Lett.* **51**, 2280 (1983).

³⁾Который оказался довольно резкой функцией γ при $\gamma \gg 1$, то есть в области сильных магнитных полей, и должен учитываться при сравнении с экспериментом.