



Д.20

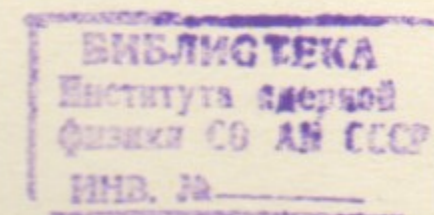
42

ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СО АН СССР

А.К.Дар, Ф.М.Израйлев, М.А.Нагараджан

ПОВЕДЕНИЕ АТОМА ВОДОРОДА
ПОД ДЕЙСТВИЕМ ПЕРИОДИЧЕСКОГО
ИМПУЛЬСНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

ПРЕПРИНТ 83-162



НОВОСИБИРСК

ПОВЕДЕНИЕ АТОМА ВОДОРОДА ПОД ДЕЙСТВИЕМ
ПЕРИОДИЧЕСКОГО ИМПУЛЬСНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

А.К.Дар¹⁾, Ф.М.Израйлев, М.А.Нагараджан²⁾

АННОТАЦИЯ

Исследуется поведение атома водорода в импульсном поле линейно поляризованной волны. Зависимость поля от времени задается в виде периодической δ -функции. Модель описывается уравнением Шредингера с гамильтонианом:

$$H = -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{1}{r} + F_0 z \delta(t-sT); \quad s=0,1,2,\dots$$

Изучается динамика возбуждения атома как для слабых, так и для сильных полей, когда внешнее поле порядка атомного. Основное внимание уделяется выяснению условий ионизации атома с высоковозбужденных уровней $n_0 = 5 \div 17$ за счет механизма стохастической диффузии, имеющей место в соответствующей классической системе. Описанный численный метод может быть использован для полей с произвольной зависимостью от времени.

¹⁾ Монреальский университет (Канада).

²⁾ Лаборатория Дарсбери (Англия).

§ I. ВВЕДЕНИЕ

В последнее время уделяется большое внимание исследованию поведения высоковозбужденных атомов в поле интенсивной электромагнитной волны (см., например, обзоры /1-2/). Одним из наиболее важных вопросов в этой области является вопрос о механизмах и условиях ионизации атома, когда частота внешнего поля меньше порога ионизации. В этом случае основная роль принадлежит нелинейным эффектам взаимодействия атома с полем /3/. К настоящему времени уже достаточно хорошо изучено нелинейное взаимодействие с сильным полем для атомов, находящихся в основном¹⁾ в низколежащих возбужденных состояниях. В частности, подробно исследованы такие эффекты, как многофотонное возбуждение и ионизация атома, а также туннельная ионизация атома /3-5/.

В то же время расчет тех же самых нелинейных эффектов для высоковозбужденных состояний значительно усложняется. Более того, для больших $n \gg 1$ могут возникать эффекты, не имеющие аналога в глубокой квантовой области малых $n \approx 1$, природа которых является чисто классической. Экспериментальное исследование также становится более сложным, поскольку необходимо сначала приготовить высоковозбужденные атомы с заданным состоянием $|n_0\rangle$. Тем не менее, имеющиеся экспериментальные данные по ионизации атомов водорода с $n_0 = 45,66$ /6-7/ дают возможность сопоставить их с некоторыми аналитическими предсказаниями относительно того, какие эффекты являются для ионизации наиболее существенными.

Как известно из общей теории для короткодействующего потенциала, характер нелинейной ионизации определяется параметром адиабатичности /8/:

$$\gamma = \frac{\omega}{n\xi} \quad (I.I)$$

где ω и ξ - частота и напряженность электрического поля, а n - номер рассматриваемого уровня. Считается, что при $\gamma^2 \gg 1$ процесс ионизации носит многофотонный характер, а при $\gamma^2 \ll 1$ - туннельный. В работе /9/ для высоковозбужденных атомов этот вопрос был рассмотрен более детально. Для кеплеровой частоты

$\omega \approx 1/n^3$ полученные оценки критических полей приводят к уточ-

ненному значению $\chi_{cr} \approx 7$, выше которого, т.е. при $\chi > \chi_{cr}$, характер ионизации — многофотонный.

Однако в области больших $n \gg 1$ может возникать еще один механизм ионизации, на существование которого впервые было указано в работе /10/. В основе его лежит хорошо известная в классической механике стохастическая диффузия, в результате которой происходит диффузионное возбуждение высоколежащих уровней, вплоть до непрерывного спектра. Аналитические оценки, полученные в /11/ для атома водорода в поле монохроматической волны круговой поляризации с помощью классического критерия перекрытия нелинейных резонансов /12-13/, позволили указать критическое поле, выше которого возникает стохастическая диффузия. В дальнейшем эти оценки были уточнены и обобщены в работах /14,2/.

Эксперименты по ионизации высоковозбужденного атома водорода /6-7/ стимулировали численное исследование соответствующей классической модели /15-17/, поскольку естественно было предположить, что поведение такой системы должно хорошо описываться классическими уравнениями движения. В целом результаты численного моделирования показали хорошее соответствие с экспериментальными данными, а также и с полученными позднее аналитическими оценками /11,2/. Подробный анализ и сопоставление экспериментальных, численных и аналитических данных приводится в /2/. В результате этих работ можно считать установленным, что наряду с многофотонной и туннельной ионизацией для высоковозбужденных атомов существенную, а иногда и определяющую роль может играть классическая стохастическая диффузия.

Согласно работам /11,2/, критические поля для стохастической диффузии определяются оценкой:

$$\xi > \xi_{cr} \approx \frac{1}{cn^4} \quad (1.2)$$

где параметр C колеблется в пределах:

$$C \approx 25 \div 84 \quad (1.3)$$

в зависимости от орбитального квантового числа ℓ и типа поляризации монохроматического поля. Условие (1.2) приведено для

случая, когда частота поля примерно равна кеплеровой частоте движения электрона. Как видно из (1.2-1.3), поле должно быть достаточно сильным. Из сравнения (1.1) и (1.2) следует, что туннельной ионизацией в этом случае можно пренебречь и основную конкуренцию стохастической ионизации составляет лишь многофотонная ионизация (см. /2,9/).

Однако имеющиеся аналитические и экспериментальные данные явно недостаточны для более или менее полной теории нелинейной ионизации. Одним из вопросов, относящихся к стохастической диффузии, является выяснение условий применения квазиклассического подхода, и аккуратная проверка предсказаний, полученных классическими методами. Известно, например, (см. обзоры /18-19/), что для квантовых систем, которые в классическом пределе являются стохастическими, имеются серьезные отклонения в поведении по сравнению с классическими системами. Основное отличие заключается в том, что в квантовых системах статистические свойства нарушаются /20-21/. Строго говоря, полное соответствие с поведением классической системы можно ожидать лишь на временах $t < t_r$ порядка распылывания волновых пакетов, однако, в стохастической области пакеты распылываются экспоненциально быстро. Тем не менее оказывается, что в течение некоторого времени $t_r < t < t_d$ в системе могут сохраняться такие простейшие статистические свойства, как, например, диффузия. Поэтому возникает вопрос, насколько обнаруженные в /18-21/ квантовые эффекты, приводящие к подавлению стохастичности существенны для таких конкретных моделей, как, например, модель атома водорода в переменном поле.

Исследуемый в данной работе вопрос имеет и самостоятельное значение. В настоящее время относительно мало известно о временной эволюции квантовых систем с зависящим от времени гамильтонианом, хотя к таким системам приводят многие задачи в самых различных областях физики. Имеющийся математический аппарат позволяет решать эти задачи лишь в рамках теории возмущений /22/. Поэтому обычно рассматриваются переменные поля малой амплитуды. В то же время во многих задачах атомной, молекулярной и ядерной физики возникают вопросы поведения систем в сильных нестационарных полях. Главные успехи в этой области связаны с новыми методами вычислений на ЭВМ. В частности, ис-

пользуя эффективные методы вычисления функциональных интегралов, получено много численных результатов в нестационарных задачах Хартри-Фока (см., например, /23/).

В основе настоящей работы лежит численное исследование квантовой модели атома водорода в периодическом δ -образном поле, начатое в /24/. На первый взгляд такая зависимость возмущения от времени является весьма специфической и далека от реальной ситуации взаимодействия атомов и молекул с полем излучения. Тем не менее, оказывается, что некоторые, довольно важные особенности поведения квантовой системы во внешнем периодическом поле типичны для любой периодической зависимости, в том числе и для исследуемой. Используя такую простую модель, в дальнейшем с помощью модуляции амплитуды δ -функции легко перейти и к возмущению, близкому к монохроматическому. Расчеты проводились на ЭВМ CRAY-1 (Лаборатория Дарсбери, Англия) и ЕС-40, ЕС-60 (Институт ядерной физики, Новосибирск, СССР).

§ 2. ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ КВАНТОВОЙ СИСТЕМЫ С ВНЕШНИМ ПЕРИОДИЧЕСКИМ ПОЛЕМ

Поведение квантовой системы под действием внешнего периодического электрического поля описывается гамильтонианом в форме:

$$H(t) = H_0 + H_{ext}(t); \quad H(t) = H(t+T) \quad (2.1)$$

где T - период поля, H_0 - гамильтониан невозмущенной системы и H_{ext} - гамильтониан, соответствующий внешнему полю. В данной работе рассматривается удобный с вычислительной точки зрения случай, когда внешнее поле представляет собой набор периодически действующих очень коротких толчков и записывается с помощью периодической δ -функции с периодом T :

$$H_{ext} = eF_0 \hat{v} \sum_s \delta(t-sT) \quad (2.2)$$

Здесь \hat{v} - одночастичный оператор, а F_0 - амплитуда поля.

Поскольку возмущение, заданное в виде толчков, является мгновенным, движение между толчками известно и описывается не-

возмущенным гамильтонианом H_0 , а каждый толчок вызывает изменение амплитуд всех состояний системы. Заметим, что возмущение в виде (2.2) фактически содержит бесконечный набор частот, кратных основной частоте $\omega_0 = 2\pi/T$. Кроме того, среднее значение внешнего поля не равно нулю, как, например, в случае синусоидального поля. Последнее обстоятельство легко обойти, задавая возмущение в виде двух периодических δ -функций с разными по знаку амплитудами:

$$H_{ext} = H_{ext}^{(1)} + H_{ext}^{(2)} \quad (2.3a)$$

где

$$H_{ext}^{(1)} = eF_0 \hat{v} \sum_s \delta(t-2sT) \quad (2.3б)$$

$$H_{ext}^{(2)} = -eF_0 \hat{v} \sum_s \delta[t-(2s+1)T] \quad (2.3в)$$

Для такого поля среднее значение за период $2T$ равно нулю.

Динамика квантовой системы с гамильтонианом (2.2) описывается нестационарным уравнением Шредингера:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\vec{r}, t) = H(t) \Psi(\vec{r}, t) \quad (2.4)$$

где $\Psi(\vec{r}, t)$ - полная волновая функция системы. Точное решение можно записать в виде:

$$\Psi(\vec{r}, t) = U(t, t_0) \Psi(\vec{r}, t_0) \quad (2.5)$$

где $U(t, t_0)$ - унитарный, зависящий от времени оператор, который можно представить в виде:

$$U(t, t_0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)} e^{-\frac{i}{\hbar} F_0 \hat{v}} \quad (2.6)$$

Поэтому имеем:

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H}_0(t-t_0)} e^{-\frac{i}{\hbar} F_0 \hat{v}} \Psi(\vec{r}, t_0) \quad (2.7)$$

Так как возмущение периодически во времени, решение представляет собой квазипериодическую по времени функцию /25-26/:

$$\Psi(\vec{r}, t) = \chi(\vec{r}, t) e^{-\frac{i}{\hbar}(E_0 + \Delta E)t} \quad (2.8)$$

где $\chi(\vec{r}, t) = \chi(\vec{r}, t+T)$; E_0 - невозмущенная энергия, а ΔE - средний сдвиг энергии под действием поля. Каждому решению (2.8) соответствует свое значение квазиэнергии $\Lambda = E_0 + \Delta E$, которое определяется с точностью до целого числа квантов внешнего возмущения $2\pi\hbar/T$, функция $\chi(\vec{r}, t)$ называется собственной функцией квазиэнергии Λ .

Рассматриваемые системы с периодическим возмущением имеют принципиальное отличие от систем с сохраняющейся энергией. Известно, что для стационарного уравнения Шредингера (если движение финитно) спектр энергии является дискретным. Из этого следует почти периодическая эволюция во времени как волновой функции, так и ее матрицы плотности (или функции Вигнера). В классической механике такой тип движения соответствует полностью интегрируемой системе. Однако для системы с периодическим возмущением спектр квазиэнергий может быть и непрерывным. Это дает основание полагать, что для таких систем в области квазиклассики, в принципе, возможен стохастический тип движения (подробнее см. обзор /18/).

В специальном случае, когда начальное состояние $\Psi(\vec{r}, t_0)$ в (2.7) может быть приближенно выражено через одночастичные волновые функции и представлено в виде определителя Слэтера, одночастичный оператор \hat{V} в экспоненте удобно разложить по некоторому конечному набору состояний a_p^+ , a_n , описывающих рождение и уничтожение частиц:

$$\hat{V} \Rightarrow \sum_{p,h} \theta_{p,h} a_p^+ a_h \quad (2.9)$$

Тогда действие внешнего поля на такие состояния приводит к возникновению когерентного состояния:

$$|G\rangle = \exp\left\{\sum_{p,h} \theta_{p,h} a_p^+ a_h\right\} |0\rangle \quad (2.10)$$

где

$$|0\rangle = \left(\prod_{h=1} a_h^+\right) |0\rangle \quad (2.11)$$

а состояние $|0\rangle$ является фермионным вакуумом. Заметим, что состояние $|G\rangle$ соответствует кенормированному определителю Слэтера. Подчеркнем, что замена оператора \hat{V} в экспоненте с помощью соотношения (2.9) эквивалентна линеаризации оператора, т.е. нелинейными эффектами автоматически пренебрегается. Поэтому для случая слабых внешних полей, когда

$$e^{-i\alpha\hat{V}} \approx 1 - i\alpha\hat{V} \quad (2.12)$$

уравнение (2.10) является точным и временная эволюция системы описывается когерентным состоянием.

§ 3. АТОМ ВОДОРОДА ВО ВНЕШНЕМ ИМПУЛЬСНОМ ПОЛЕ

Изучение вопроса о поведении атома водорода во внешнем периодическом импульсном поле сводится к решению уравнения Шредингера с гамильтонианом (2.2), в котором $\hat{V} = \hat{z}$ (направление однородного поля F_0 выбрано вдоль оси z). Задачу можно решить точно, для этого необходимо вычислить матричные элементы оператора $\exp\{-\frac{i}{\hbar}eF_0\hat{z}\}$. Это удастся сделать (в параболических координатах) для произвольного по величине поля F_0 . При этом матричные элементы выражаются в относительно простом виде, пригодном для непосредственных вычислений (см. § 4).

Поскольку атом водорода представляет собой одноэлектронную систему, решение уравнения Шредингера представляется зависящим от времени когерентным состоянием, заданном в виде

$$|L\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}eF_0\hat{z}} |n_0\rangle \quad (3.1)$$

где $|n_0\rangle$ - начальное состояние электрона в атоме водорода:

$$|n_0\rangle = a_n^+ |0\rangle \quad (3.2)$$

Уравнение (3.1) можно записать в другом представлении:

$$|\mathcal{L}\rangle = B_{nn}|n\rangle + \sum_{k \neq n} B_{kn}|k\rangle = B_{nn} \left\{ 1 + \sum_{k \neq n} D_{kn} a_k^\dagger a_n \right\} |0\rangle \quad (3.3)$$

где B и D - некоторые комплексные параметры, определенные следующим образом:

$$B_{kn} = \langle k | \exp\left(-\frac{i}{\hbar} e F_0 \hat{z}\right) | n \rangle$$

$$D_{kn} = B_{kn} / B_{nn} \quad (3.4)$$

Здесь a_n^\dagger , a_n - операторы рождения и уничтожения электрона в данном водородном состоянии $|n\rangle$. В отличие от когерентного состояния $|G\rangle$ (см. (2.10)), обобщенное когерентное состояние $|\mathcal{L}\rangle$ является нормированным и задается в бесконечномерном гильбертовом пространстве, содержащем как дискретные, так и непрерывные состояния атома водорода. Вследствие этого ширина пакета, соответствующего когерентному состоянию, должна изменяться не только из-за обычного расплывания, но также и из-за переходов в непрерывный спектр. Поэтому в такой постановке решение задачи выходит за рамки обычного рассмотрения зависящих от времени квантовых систем.

Запишем теперь в явном виде гамильтониан для атома водорода в импульсном периодическом поле (в дальнейшем используется система единиц, в которой $e = \hbar = m = 1$):

$$H(t) = -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{1}{r} + F_0 \hat{z} \sum_s \delta(t - sT) \quad (3.5)$$

где F_0 и T - амплитуда и период внешнего поля. Тогда общее решение, согласно (2.7) можно записать в форме:

$$\Psi(\vec{r}, t) = e^{-i\hat{H}_0 t} e^{-iF_0 \hat{z} t} \Psi(\vec{r}, 0) \quad (3.6)$$

где

$$H_0 = -\frac{1}{2} \nabla^2 - \frac{1}{r} \quad (3.7)$$

Переходя непосредственно к вычислительной модели, представим начальное состояние системы с помощью комплексного вектора \vec{C} :

$$\Psi(\vec{r}, 0) \Rightarrow \begin{pmatrix} C_1^0 \\ C_2^0 \\ \vdots \\ C_N^0 \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

компоненты которого являются амплитудами n -го дискретного состояния атома и удовлетворяют условию нормировки:

$$\sum_{n=1}^N |C_n^0|^2 = 1 \quad (3.9)$$

Это означает, что мы рассматриваем только часть дискретного спектра атома водорода, ограничиваясь конечным числом дискретных состояний N . Следовательно, переходы в состояния с $n > N$ и непосредственно в непрерывный спектр учитываются лишь интегрально через полную вероятность нахождения системы в рассматриваемой части дискретного спектра:

$$P_\Sigma = \sum_{n=1}^N P_n = 1 - P_{ion} \leq 1; \quad P_n \equiv |C_n(t)|^2 \quad (3.10)$$

Здесь мы ввели величину P_{ion} , которую в дальнейшем будем называть вероятностью ионизации атома.

Такое ограничение рассмотрения динамики переходов только между конечным числом дискретных уровней является неизбежным при численном моделировании. В нашей модели уменьшение вероятности из-за переходов в непрерывный спектр можно физически рассматривать как мгновенное поглощение ионизованного электрона, при этом обратными переходами из непрерывного спектра в дискретный пренебрегается. Что касается учета лишь части дискретного спектра $n \leq N$, то в численном моделировании влияние границы $n = N$, в принципе, всегда можно выяснить, увеличивая N . Если при этом изучаемые эффекты меняются слабо, то естественно считать, что ограничение $n < N$ для них не является существенным.

Итак, решение сводится к нахождению всех $C_n(t)$, для

которых $n \leq N$. Согласно (3.6) значения C_n после одного периода T , вычисляются через произведение

$$C_n(t_{s+1}) = \sum_{m=1}^N V_{mn} C_m(t_s) \quad (3.II)$$

где $C_n(t_{s+1})$ - значение C_n в момент времени $t_{s+1} = (s+1)T$, а $C_m(t_s)$ - в момент времени $t_s = sT$. Матрица V с элементами V_{mn} представляет собой произведение двух матриц - R , описывающей изменение невозмущенных состояний между двумя соседними толчками:

$$R = \begin{pmatrix} e^{-i\lambda_1 T} & & & 0 \\ & e^{-i\lambda_2 T} & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & e^{-i\lambda_N T} \end{pmatrix} \quad (3.I2)$$

и матрицы W , которая определяет переходы между невозмущенными состояниями под действием отдельного толчка:

$$W = \begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} & \dots & W_{1N} \\ W_{21} & W_{22} & \dots & W_{2N} \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ W_{N1} & W_{N2} & \dots & W_{NN} \end{pmatrix} \quad (3.I3)$$

Здесь λ_n - невозмущенные собственные значения n -го состояния атома водорода, а W_{ij} - матричные элементы внешнего возмущения:

$$W_{ij} = \langle u_i | e^{-iF_0 \hat{z}} | u_j \rangle \quad (3.I4)$$

(u_i, u_j - невозмущенные собственные функции атома водорода). Задавая начальное распределение $C_n(0)$ и последовательно вычисляя $C_n(t_s)$, можно полностью исследовать динамику системы.

§ 4. МАТРИЧНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ ВОЗМУЩЕНИЯ

Для упрощения была использована аксиальная симметрия, а внешнее поле направлено вдоль оси z (поляризация параллельна полю). Тогда проекция $m = \langle l_z \rangle$ углового момента вдоль этой оси сохраняется. Поэтому волновые функции характеризуются постоянным квантовым числом m . Оказывается удобным перейти к параболическим координатам по обычным формулам:

$$\begin{aligned} x &= \sqrt{\xi \eta} \cos \varphi & 0 \leq \xi \leq \infty \\ y &= \sqrt{\xi \eta} \sin \varphi & 0 \leq \eta \leq \infty \\ z &= \frac{1}{2} (\xi - \eta) & 0 \leq \varphi \leq 2\pi \end{aligned} \quad (4.I)$$

Заметим, что в этих координатах

$$r^2 = \frac{1}{4} (\xi + \eta)^2 \quad (4.2)$$

а элемент объема dV равен:

$$dx dy dz = \frac{1}{4} (\xi + \eta) d\xi d\eta d\varphi \quad (4.3)$$

Соответствующие нормированные волновые функции для атома водорода имеют вид /27/:

$$\begin{aligned} U_{n_1 n_2 m}(\xi, \eta, \varphi) &= \frac{2}{\sqrt{2\pi} (na)^3} \left[\frac{n_1! n_2!}{2n(n_1+m)!(n_2+m)!} \right]^{1/2} e^{im\varphi} \\ &\times \left[\frac{\xi \eta}{n^2 a^2} \right]^{l/2} e^{-(\xi+\eta)/2na} \left[L_{n_1}^{l/2} \left(\frac{\xi}{na} \right) \right] \left[L_{n_2}^{l/2} \left(\frac{\eta}{na} \right) \right] \end{aligned} \quad (4.4)$$

$$n = n_1 + n_2 + m + 1 \quad (4.5)$$

где n является главным квантовым числом, а n_1 и n_2 - параболические квантовые числа. В выражении для волновых функций (4.4) использованы полиномы Лаггера с нормировкой, приведенной в /28/.

Тогда матричный элемент характеризуется пятью квантовыми числами n_1, n_2, n'_1, n'_2, m и может быть записан в виде:

$$W_{n_1 n_2 n'_1 n'_2 m} = \langle U_{n_1 n_2 m} | e^{i(\lambda-\xi)\frac{F_0}{2}} | U_{n'_1 n'_2 m} \rangle \quad (4.6)$$

Используя (4.4-4.5), можно получить:

$$W_{n_1 n_2 n'_1 n'_2 m} = (d_n d_{n'})^{l_{m|+2}} \frac{a}{2} \left[\frac{n_1! n_2! (n'_1)! (n'_2)!}{(n_1+l_{m|})! (n_2+l_{m|})! (n'_1+l_{m|})! (n'_2+l_{m|})!} \right]^{1/2} \times \int_0^\infty \int_0^\infty f_0(\xi) g_0(\eta) (\xi+\eta) d\xi d\eta \quad (4.7)$$

где введены новые функции:

$$f_0(\xi) = \xi^{l_{m|}} e^{-b_{nn'}\xi} L_{n_1}^{l_{m|}}(d_n \xi) L_{n'_1}^{l_{m|}}(d_{n'} \xi) \quad (4.8)$$

$$g_0(\eta) = \eta^{l_{m|}} e^{-b_{nn'}\eta} L_{n_2}^{l_{m|}}(d_n \eta) L_{n'_2}^{l_{m|}}(d_{n'} \eta)$$

с параметрами $b_{nn'}$ и $d_n, d_{n'}$:

$$b_{nn'} = \frac{iF_0 + d_n + d_{n'}}{2}; \quad d_n = \frac{1}{na}; \quad d_{n'} = \frac{1}{n'a} \quad (4.9)$$

Здесь a - борковский радиус, который в выбранных единицах равен единице. Вычисление $W_{n_1 n_2 n'_1 n'_2 m}$ сводится к нахождению интегралов:

$$\int_0^\infty f_0(\xi) d\xi; \quad \int_0^\infty \xi f_0(\xi) d\xi \quad (4.10)$$

Используя рекуррентное соотношение:

$$(d_{n'} \xi) L_{n_1}^{l_{m|}}(d_n \xi) = (2n_1 + l_{m|} + 1) L_{n_1}^{l_{m|}}(d_n \xi) - (n_1 + l_{m|}) L_{n_1}^{l_{m|}}(d_n \xi) - (n_1 + 1) L_{n_1+1}^{l_{m|}}(d_n \xi) \quad (4.11)$$

можно доказать, что все интегралы сводятся к форме:

$$\int_0^\infty d\xi \cdot \xi^{l_{m|}} e^{-b_{nn'}\xi} L_{n_1}^{l_{m|}}(d_n \xi) L_{n'_1}^{l_{m|}}(d_{n'} \xi) = \quad (4.12)$$

$$= \frac{\Gamma(n_1 + q + l_{m|} + 1)}{n_1! q!} \left(\frac{b_{nn'} - d_n}{b_{nn'}} \right)^{n_1} \left(\frac{b_{nn'} - d_{n'}}{b_{nn'}} \right)^{q} \quad (4.12)$$

$$\times \frac{1}{(b_{nn'})^{l_{m|}+1}} \cdot F\left(-n_1, -q; -n_1 - q - l_{m|}; \frac{b_{nn'}(b_{nn'} - d_n - d_{n'})}{(b_{nn'} - d_n)(b_{nn'} - d_{n'})}\right)$$

где q равно n'_1 или $n'_1 \pm 1$, а F - гипергеометрическая функция. Для удобства дальнейших вычислений мы использовали следующее преобразование (см. Приложение):

$$F(-n_1, -q; -n_1 - q - l_{m|}; z) = \frac{(n_1 + l_{m|})! (q + l_{m|})!}{l_{m|}! (n_1 + q + l_{m|})!} F(-n_1, -q; l_{m|} + 1; 1 - z) \quad (4.13)$$

Тогда соотношение (4.12) принимает вид:

$$\int_0^\infty \xi^{l_{m|}} e^{-b_{nn'}\xi} L_{n_1}^{l_{m|}}(d_n \xi) L_{n'_1}^{l_{m|}}(d_{n'} \xi) d\xi = \frac{1}{l_{m|}!} \frac{(n_1 + l_{m|})! (q + l_{m|})!}{n_1! q!} \left(\frac{b_{nn'} - d_n}{b_{nn'}} \right)^{n_1} \left(\frac{b_{nn'} - d_{n'}}{b_{nn'}} \right)^q \quad (4.14)$$

$$\times \frac{1}{(b_{nn'})^{l_{m|}+1}} F\left(-n_1, -q; l_{m|} + 1; \frac{d_n d_{n'}}{(b_{nn'} - d_n)(b_{nn'} - d_{n'})}\right)$$

В итоге для матричного элемента имеем:

$$W_{n_1 n_2 n'_1 n'_2 m} = \frac{1}{l_{m|}! l_{m|}!} \sqrt{\frac{(n_1 + l_{m|})! (n_2 + l_{m|})! (n'_1 + l_{m|})! (n'_2 + l_{m|})!}{n_1! n_2! (n'_1)! (n'_2)!}} \times \frac{(d_n d_{n'})^{l_{m|}+2}}{2 d_n} \cdot \frac{1}{|b|^{2(l_{m|}+1)}} \left(\frac{d_n}{b} \right)^{n_1} \left(\frac{d_{n'}}{b} \right)^{n'_1} \left(\frac{d_n}{b^*} \right)^{n_2} \left(\frac{d_{n'}}{b^*} \right)^{n'_2} \quad (4.15)$$

$$\times d_1^{n_1} d_2^{n_2} (d_1^*)^{n'_1} (d_2^*)^{n'_2} \{G_1 F(-n_2, -n'_2; l_{m|} + 1; d_0) + G_2 F(-n_1, -n'_1; l_{m|} + 1; d_0)\}$$

где

$$G_1 = (2n_2 + l_{m|} + 1) F(-n_2, -n'_2; l_{m|} + 1; d_0) - n'_2 \left(\frac{b}{b - d_{n'}} \right) F(-n_2, -n'_2 + 1; l_{m|} + 1; d_0) - (n'_2 + l_{m|} + 1) \left(\frac{b - d_{n'}}{b} \right) F(-n_2, -n'_2 - 1; l_{m|} + 1; d_0)$$

$$G_2 = (2n_1 + l_{m|} + 1) F(-n_1, -n'_1; l_{m|} + 1; d_0) - n'_1 \left(\frac{b^*}{b^* - d_{n'}} \right) F(-n_1, -n'_1 + 1; l_{m|} + 1; d_0) - \quad (4.16)$$

$$-(n_2+|m|+1) \left(\frac{b^*-d_n}{b^*} \right) F(-n_2, -n_2-1; |m|+1; d_0)$$

$$d_1 = \frac{b-d_n}{d_n}; \quad d_2 = \frac{b-d_{n'}}{d_{n'}}; \quad b \equiv b_{nn'}; \quad d_0 = \frac{-1}{d_1 d_2}$$

Из полученных выражений видно, что вычисление преобразования (3.11) даже для одного периода оказывается непростой задачей. Матричный элемент является элементом четырехмерной матрицы (напомним, что в нашей задаче $m = \text{const}$) и время для вычисления действия одного толчка растет как N^4 , где N — число невозмущенных уровней атома водорода. Поэтому удобно вычисление $W_{n_1 n_2 n'_1 n'_2 m}$ проводить один раз и полученные значения помещать в быструю память ЭВМ. Однако это не всегда возможно из-за ограниченного объема оперативной памяти. Так, например, для ЭВМ с оперативной памятью объемом в $M = 300000$ слов $N_{\text{max}} \approx M^{1/4} \approx 23$. Для уменьшения требуемой памяти можно использовать имеющиеся в матрице $W_{n_1 n_2 n'_1 n'_2 m}$ симметрии. Тем не менее, уже для $N > 30$ приходится проводить вычисление $W_{n_1 n_2 n'_1 n'_2 m}$ каждый раз, что значительно увеличивает время счета.

В настоящей работе рассматривается частный случай, когда $m = \langle l_z \rangle = 0$. Это несколько упрощает выражение для W . Выделяя действительную и мнимую часть $W_{n_1 n_2 n'_1 n'_2}$ в результате некоторых дальнейших преобразований можно представить

$$W_{n_1 n_2 n'_1 n'_2} \text{ в более удобном виде:}$$

$$W_{n_1 n_2 n'_1 n'_2} = a_{nn'} e^{-i\pi(n-1)} e^{i\delta_1(n_1-n_2-n'_1+n'_2)} e^{i\delta_2(n_1-n_2+n'_1-n'_2)} |d_1|^{n_1+n_2} |d_2|^{n'_1+n'_2} \times$$

$$\times \left\{ b_0 F(-n_1, -n'_1; 1; d_0) F(-n_2, -n'_2; 1; d_0) + \right. \quad (4.17)$$

$$+ i \frac{F_0}{4} \left\{ [n'_1(1-d_0) F(-n_1, -n'_1+1; 1; d_0) - (n'_1+1) F(-n'_1, -n'_1-1; 1; d_0)] F(-n_2, -n'_2; 1; d_0) - \right. \\ \left. - [n'_2(1-d_0) F(-n_2, -n'_2+1; 1; d_0) - (n'_2+1) F(-n'_2, -n'_2-1; 1; d_0)] F(-n_1, -n'_1; 1; d_0) \right\}$$

где

$$a_{nn'} = \left| \frac{d_n}{b_{nn'}} \right|^{n+1} \cdot \left| \frac{d_{n'}}{b_{nn'}} \right|^{n'+1}; \quad b_0 = \frac{F_0^2}{(d_n - d_{n'})^2 + F_0^2}$$

$$d_0 = - \frac{4 d_n d_{n'}}{(d_n - d_{n'})^2 + F_0^2}; \quad 1 - d_0 = \frac{(d_n + d_{n'})^2 + F_0^2}{(d_n - d_{n'})^2 + F_0^2} \quad (4.18)$$

$$|d_1| = \frac{\sqrt{(d_{n'} - d_n)^2 + F_0^2}}{2 d_n}; \quad |d_2| = \frac{\sqrt{(d_n - d_{n'})^2 + F_0^2}}{2 d_{n'}}$$

а фазы δ_1 и δ_2 определяются соотношениями:

$$\text{tg } \delta_1 = \frac{F_0}{d_{n'} - d_n}; \quad \text{tg } \delta_2 = \frac{-F_0}{d_{n'} + d_n}; \quad d_n = \frac{1}{n}; \quad d_{n'} = \frac{1}{n'} \quad (4.19)$$

Из общего выражения (4.17) несложно получить матричный элемент в дипольном приближении. При этом необходимо, чтобы поле было слабым:

$$F_0 \ll \frac{|n \pm n'|}{nn'}; \quad n \neq n' \quad (4.20)$$

Наиболее существенными являются переходы на соседние уровни $n \rightarrow n' = n \pm 1$, откуда следует, что дипольное приближение справедливо, когда выполняется условие:

$$F_0 n^2 \ll 1 \quad (4.21)$$

В этом случае первый член разложения для $W_{n_1 n_2 n'_1 n'_2}$ по полю F_0 в точности совпадает с известным выражением /29/ и при необходимости нетрудно получить и следующие члены разложения.

§ 5. СЛАБОЕ ПОЛЕ

Основное внимание при численном моделировании уделялось исследованию поведения высоковозбужденных состояний, т.е. $n_0 \gg 1$, где n_0 — главное квантовое число первоначально возбужденного уровня. Численные эксперименты проводились для $n_0 = 5+17$ при полном числе уровней дискретного спектра $N = 20$ для $n_0 = 5; 9$ и $N = 30$ — для $n_0 = 13; 17$. При этом на временах $t_m = 40+300$ (время действия внешнего поля, выраженное в числе периодов T , или, что то же самое, в числе толчков) можно было проследить за динамикой всей системы, поскольку на каждом шаге (после очередного толчка) было известно распределение вероятности по всем N уровням невозмущенной системы.

Как уже говорилось, в спектре присутствуют все частоты, кратные основной частоте $\omega_0 = 2\pi/T$:

$$\delta(t-sT) = \frac{1}{T} \left(1 + 2 \sum_{p=1}^{\infty} \cos \omega_p t \right) \quad (5.1)$$

где $\omega_p = p\omega_0$. Из (5.1) следует, что нулевая гармоника, эквивалентная (при $t_m \gg 1$) наличию постоянного электрического поля равна:

$$\xi_0 = \frac{F_0}{T} \quad (5.2)$$

Для удобства сравнения поведения рассматриваемой системы с поведением атома водорода в плоскополяризованном монохроматическом поле введем параметр ξ - амплитуду периодической составляющей импульсного поля $F_0 \delta(t-sT)$:

$$\xi = \frac{2F_0}{T} \quad (5.3)$$

и безразмерный параметр возмущения, равный отношению внешнего поля к полю атома для какого-либо уровня n_0 :

$$\xi = \xi n_0^4 = \frac{2F_0}{T} n_0^4 \quad (5.4)$$

Тогда условие малости возмущения (слабое поле) будет иметь вид:

$$\xi \leq \xi_{cr} \ll 1 \quad (5.5)$$

Одним из наиболее интересных и важных вопросов является вопрос об условиях и механизме ионизации атома из высоковозбужденных состояний $n_0 \gg 1$ (см. § I). Экспериментальные результаты /6-7/ показывают, что сильная ионизация (в монохроматическом поле) наблюдается в полях, для которых $\xi > \xi_{cr}$, где $\xi_{cr} \approx 0,04$.

Аналитические оценки /II, 2/ критического возмущения для стохастической диффузии, имеющей место в соответствующей классической системе, дают $\xi_{cr} \approx 0,015 + 0,04$, что в целом согласуется с экспериментом /6, 7/ и численным моделированием /I5-I6/. Тем не менее вопрос требует более детального изучения, в частности, важно выяснить, при каких условиях квантовая система в действительности может быть описана классическими уравнениями

и какова роль квантовых эффектов.

Первые численные эксперименты с импульсным полем /24/ сразу же выявили ряд интересных особенностей в поведении системы даже для достаточно слабых полей. На рис. I приведена зависимость вероятности P_n для двух состояний $|n_0=9\rangle$ и $|n=10\rangle$ от времени t вплоть до $t_m = 300$ (в течение 300 периодов внешнего импульсного поля). В начальный момент времени ($t = 0$) было возбуждено одно состояние с параболическими квантовыми числами $n_1 = n_2 = 4$, т.е. $n_0 = n_1 + n_2 + 1 = 9$. Период внешнего поля соответствовал переходу из состояния $|n_0=9\rangle$ в состояние $|n=10\rangle$:

$$T = \frac{2\pi}{\omega_0}; \quad \omega_0 = \Omega \approx \frac{1}{2} \left\{ \frac{1}{n_0^2} - \frac{1}{(n_0+1)^2} \right\} \quad (5.6)$$

Параметр возмущения ξ равен

$$\xi = \xi n_0^4 \approx 0,005 + 0,0075 \quad (5.7)$$

В (5.7) приведены два значения для ξ , соответствующие $n_0 = 9$ и $n_0 = 10$, поскольку с течением времени вероятность из $|n_0=9\rangle$ под действием резонансного поля переходит в $|n=10\rangle$. В дальнейшем из двух значений всегда будет приводиться первое. Из рис. I хорошо виден квазипериодический характер взаимодействия двух состояний с внешним полем. Поведение системы оказывается более сложным, чем это следует из простейшей модели взаимодействия двухуровневой системы со слабым резонансным полем /27, 3/, для которой колебания вероятности должны быть гармоническими. Основная причина заключается в том, что уровни атома водорода невырождены и при взаимодействии двух невозмущенных уровней с внешним полем во взаимодействии включаются состояния с разными параболическими квантовыми числами (n_1, n_2). При этом, когда поле F_0 увеличивается, число эффективно взаимодействующих состояний с теми же главными квантовыми числами, но разными (n_1, n_2) увеличивается. Для рис. I взаимодействие в основном связывает следующие состояния (см. (4.4)):

$$|n_0=9\rangle = u_{4,4,0}(\xi, t) \quad (5.8)$$

$$|n=10\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} [u_{4,5,0}(\xi, \eta) - u_{5,4,0}(\xi, \eta)]$$

Как уже отмечалось, особенностью модели является то, что внешнее возмущение содержит сколь угодно высокие частоты. Это означает, что даже если основная частота ω_0 меньше частоты прямого перехода в непрерывный спектр, тем не менее такие переходы имеют место на кратных с ω_0 частотах. Такая прямая однократная ионизация в рассматриваемой модели имеется всегда и приводит к несохранению полной вероятности P_{Σ} . Для данных рис.1 она мала ($P_{ion} \approx 3\%$), и этим эффектом, по всей видимости, можно пренебречь. Действительно, из рис.1 видно, что возврат вероятности в начальное состояние на рассматриваемом отрезке времени нарушается значительно сильнее, чем с точностью 3%. В работе /24/ приводится более подробный анализ поведения системы (3.5) в слабом импульсном поле, который показывает, что при уменьшении поля F_0 поведение системы близко к поведению двухуровневой системы. В частности, частота колебаний вероятности линейно зависит от F_0 (колебания Раби). Меняя частоту ω_0 и подбирая соответствующие резонансные условия, можно добиться, чтобы приближенные резонансные соотношения выполнялись одновременно для трех состояний.

§ 6. КОГЕРЕНТНЫЕ КОЛЕБАНИЯ В СИЛЬНОМ ПОЛЕ

При увеличении поля дипольное приближение становится неприменимым и матричные элементы взаимодействия $W_{n_1 n_2 n_1' n_2'}$ становятся нелинейными (по полю F_0). Одновременно с увеличением F_0 растет и прямая ионизация, которая может приводить к существенному уменьшению полной вероятности рассматриваемых дискретных уровней. Тем не менее численное моделирование показывает, что даже в случае, когда P_{ion} велико, в системе остаются довольно сильные корреляции между некоторыми невозмущенными состояниями системы. Примечательно, что при этом возбуждаются всего несколько соседних (резонансных с полем) состояний и не наблюдается диффузии вверх по спектру. Такая ситуация является довольно типичной для $n_0 = 9$, $\xi \approx 0,02 + 0,03$ и начального состояния с $n_1 = n_2 = 4$. На рис.2 приведены три примера для несколько разных значений ξ и T . Во всех случаях

амплитуда импульсного поля одинакова и равна $F_0 = 0,008$, а меняется только период $T = 4000; 5000; 6000$. Для $T = 5000$ (рис.2б) период близок к резонансному для перехода между $n_0 = 9$, и $n = 10$ уровнями (точный резонанс соответствует $T_{9 \leftrightarrow 10} = 5357$, см. рис.1). Период $T = 4000$ (рис.2а) близок к резонансному значению $T_{9 \leftrightarrow 8} = 3832$. Видно, что в этих двух случаях основная вероятность распределена между двумя состояниями, а колебания строго скоррелированы между собой. С течением времени суммарная вероятность этих двух состояний заметно уменьшается. Более сложное поведение наблюдается на рис.2с, для которого $T = 6000$. Здесь в основном возникают когерентные колебания между состояниями $|n_0=9\rangle$ и $|n=11\rangle$, хотя заметная доля вероятности приходится и на $|n=10\rangle$. Резонансный период для перехода из состояния $|n_0=9\rangle$ в состояние $|n=11\rangle$ равен $T_{9 \leftrightarrow 11} \approx 3079$, т.е. переход совершается на второй гармонике внешнего поля.

С увеличением поля вероятность прямой ионизации увеличивается, однако корреляции в колебаниях вероятности для соседних состояний сохраняются. Это видно из рис.3, где убывание полной вероятности чрезвычайно сильное, тем не менее колебания вероятностей для состояний $|n_0=9\rangle$ и $|n=10\rangle$ остаются скоррелированными. Поэтому, несмотря на довольно сильное возмущение ($\xi \approx 0,04$), диффузия вероятности по дискретной части спектра практически отсутствует.

Неожиданным оказывается поведение системы для $T = 400$ и $n_0 = 9$ (рис.4). В этом случае основная частота ω_0 больше, чем минимальная частота ω_{min} , соответствующая переходу из $|n_0=9\rangle$ непосредственно в непрерывный спектр ($\omega_{min} \approx 1/(2n_0^2) \approx 0,0062$, в то время, как $\omega_0 \approx 0,0157$). Это означает, что разрешена однократная ионизация на основной частоте. Возмущение для данных рис.4 очень велико: $\xi \approx 0,26$ и соответственно этому, в течение первых же нескольких периодов полная вероятность резко уменьшается (см. также рис.5). Тем не менее примерно через $t = 20$ периодов устанавливается новый режим и колебания вероятностей для $|n_0=9\rangle$ и $|n=10\rangle$ далее затухают слабо. Следует напомнить, что исследуемая модель не включает в рассмотрение непрерывный спектр и эквивалентна системе с мгновенным поглощением в непрерывной части спектра. Поэтому естествен-

но ожидать в этом случае быстрого и постоянного уменьшения полной вероятности системы за счет сильной прямой ионизации. Однако этого не происходит и, как видно из рис.4, вероятность для $|n_0=9\rangle$ колеблется около среднего значения с точностью примерно $10\pm 12\%$, а для $|n=10\rangle$ - с точностью 35%. Такое поведение может быть объяснено тем, что после начальной ионизации и диффузии фазы состояния $|n_0=9\rangle$ и $|n=10\rangle$ оказываются сильно скоррелированы с фазой внешнего поля и между собой. Другими словами, возникают состояния, близкие к "собственным состояниям" полного гамильтониана, включающего внешнее поле.

§ 7. СТОХАСТИЧЕСКАЯ ДИФФУЗИЯ В СИЛЬНОМ ПОЛЕ

Согласно классическим представлениям, в нелинейной системе (2.1) при определенных условиях должна возникать стохастическая диффузия. Механизм этого явления (для классических систем) хорошо изучен (см., например, /12-13/) и основан на взаимодействии нелинейных резонансов, возникающих под действием периодического поля на невозмущенную систему (атом). Нелинейность невозмущенного гамильтониана является существенной для возникновения таких нелинейных резонансов, и приводит к тому, что невозмущенное движение содержит большое число гармоник, кратных кеплеровой частоте $\Omega \approx 1/n^3$. Это означает, что даже в случае гармонической зависимости внешнего поля от времени (монохроматическая волна) резонансное соотношение:

$$\omega \approx k \Omega_k = k n_k^{-3}; \quad k - \text{целое} \quad (7.1)$$

выполняется для разных невозмущенных уровней n_k . В изолированном нелинейном резонансе (т.е. когда влиянием соседних резонансов можно пренебречь) колебания переменной действия ограничены и это должно приводить лишь к регулярному обмену между группой уровней, захваченных этим резонансом. С увеличением внешнего поля ширина нелинейного резонанса (по частоте и, соответственно, по действию) увеличивается и становится сравнимой с расстоянием между соседними резонансами. В этом случае и возникает стохастическая диффузия по перекрывшимся резонансам. Впервые возможность использования классического подхода на основе нелинейного резонанса применительно к квантовым системам была исследована в работе /30/. В частности было отмечено, что

для такого подхода необходимо, чтобы каждый нелинейный резонанс захватывал большое число уровней невозмущенной системы. Численные эксперименты с (3.5) для больших значений F_0 показывают, что в системе возникает интенсивный обмен между соседними уровнями, приводящий к "расплыванию" вероятности, первоначально сосредоточенной на одном уровне. Так, на рис.6а приведено распределение вероятности по 30 уровням в разные моменты времени t . В начальный момент времени возбуждено лишь одно состояние $|n_0=9\rangle$. Параметр возмущения в этом случае равен $\xi = \xi n_0^4 \approx 0,052$. Из рисунка видно, что такое возмущение является сильным и приводит одновременно как к диффузии по дискретным уровням, так и к прямой ионизации. Последний эффект, как уже отмечалось, является следствием δ -функциональной зависимости возмущения от времени и оказывается даже сильнее, чем диффузия. Поскольку при постоянном F_0 прямая ионизация увеличивается с увеличением n , то резкое уменьшение полной вероятности для данных рис.6а в основном обусловлено тем, что в результате диффузии идет сильное возбуждение состояний с $n > n_0$, из которых в свою очередь происходит прямая ионизация. На рис.6а хорошо видно, что в начальный момент времени, когда падение полной вероятности еще не столь велико, имеет место диффузия в сторону больших n .

Ситуация, показанная на рисунке, является типичной для больших значений $\xi \geq 0,05$. Поэтому непосредственное наблюдение процесса диффузии во времени затрудняется из-за сильной прямой ионизации. На рис.7 приведены зависимости вероятности прямой ионизации от параметра ξ для разных моментов времени t_m . Обращает на себя внимание резкое увеличение ионизации в диапазоне $\xi \approx 0,04+0,08$ с последующим насыщением, которое, по всей видимости, отражает описанный в предыдущем разделе эффект установления когерентных колебаний.

Нужно отметить, что прямая ионизация по существу связана с диффузией вероятности вверх по спектру и усиливается, когда происходит возбуждение более высоких уровней $n \gg n_0$. При этом может оказаться, что возбуждаются такие уровни n , с которых возможна ионизация на основной частоте ω_0 . Тем самым, имеется граничное значение n_ω , выше которого (для $n > n_\omega$) нет смысла говорить о диффузии. Поскольку частота

внешнего поля задается из условия приближенного резонанса между состояниями $|n_0\rangle$ и $|n_0+1\rangle$, то значение n_ω определяется соотношением:

$$n_\omega = \frac{n_0(n_0+1)}{\sqrt{2n_0+1}} \quad (7.2)$$

Для значений $n_0 = 5; 9; 13; 17$ (начальные состояния, для которых проводились численные эксперименты) имеем:

$$\begin{array}{cccc} n_0 = & 5 & 9 & 13 & 17 \\ n_\omega = & 9 & 21 & 35 & 52 \end{array} \quad (7.3)$$

Это означает, что для $n_0 = 5; 9$ можно ограничиться рассмотрением уровней с $n < N = 20$. Действительно, контрольные эксперименты с увеличением N от 20 до 30 не приводили к заметному различию в динамике системы.

Другой эффект, который также может играть некоторую роль в рассматриваемой задаче - понижение ионизационного порога в постоянном электрическом поле. Как уже отмечалось, внешнее возмущение содержит нулевую гармонику, равную

$$\xi_0 = \frac{F_0}{T}$$

Поэтому можно оценить, насколько понижается порог в таком поле. Грубая оценка для критического поля ξ_c , как известно, дает /29/:

$$\xi_c \approx \frac{1}{16n^4} \quad (7.4)$$

Однако более точный анализ показывает, что на самом деле эта оценка занижена, поскольку она не учитывает сдвига штарковских уровней в зависимости от соотношения n_1/n_2 , где n_1 и n_2 - параболические квантовые числа (см., например, /31/). Минимальное значение ξ_c получается для значений $n_1 = n-1$, $n_2 = 0$, и равно:

$$\xi_c \approx 0.13n^{-4} \quad (7.5)$$

Используя (7.6) получим оценку для порогового значения n_s :

$$n_s \approx n_0 \sqrt[4]{2 \cdot \frac{0.13}{\xi}} \quad (7.6)$$

где n_0 - главное квантовое число начального состояния, а ξ - параметр возмущения (5.4). Для значения $\xi \approx 0.04$, которое соответствует достаточно сильному возмущению, получаем:

$$n_s \approx 1.7n_0 \quad (7.7)$$

или:

$$\begin{array}{cccc} n_0 = & 5; & 9; & 13; & 17 \\ n_s \approx & 9; & 15; & 22; & 29 \end{array} \quad (7.8)$$

Из (7.8) видно, что для малых n_0 диффузия может идти лишь по небольшому числу уровней $n < n_s$ (см. рис.6).

Из сказанного выше следует, что для надежного наблюдения за развитием стохастической диффузии во времени необходимо, чтобы n_0 было достаточно велико, а полное число рассматриваемых уровней N было не меньше, чем $N \approx 2n_0$.

Можно, однако, упростить задачу, и исследовать условия, при которых возникает интенсивный обмен между невозмущенными уровнями, характеризующий сильную диффузию на начальном этапе. Выше уже приводился пример такого поведения системы (см. рис.6а). Из рис.2-3 можно заметить, что имеется характерное время быстрого перераспределения вероятности между начальным состоянием $|n_0\rangle$ и соседними состояниями, после которого вероятность в состоянии $|n_0\rangle$ колеблется около среднего значения, а дальнейшее ее уменьшение происходит сравнительно медленно. Такое поведение является типичным и позволяет ввести некоторую количественную характеристику, отражающую интенсивность начальной диффузии. Для условий, когда частота внешнего поля близка к переходу из состояния $|n_0\rangle$ в соседнее состояние $|n_0+1\rangle$, естественно следить за суммарной вероятностью в этих состояниях. Действительно, как мы уже видели, между этими состояниями довольно быстро устанавливаются когерентные колебания.

Рассмотрим в качестве примера рис.3. Для большей наглядности приведем снова те же самые зависимости, но на начальном

отрезке времени $t < t_m = 40$. На рис.8 (кривые 1 и 2) хорошо видно, что примерно после трех толчков установились коррелированные колебания вероятностей в состояниях $|n_0=9\rangle$ и $|n=10\rangle$ причем сумма этих вероятностей $P_9 + P_{10}$ сперва резко уменьшилась, а затем меняется значительно слабее. Так как при этом происходит заметное уменьшение полной вероятности P_Σ за счет прямой ионизации (кривая 5), то удобно нормировать сумму вероятностей в состояниях $|n_0\rangle$ и $|n_0+1\rangle$ следующим образом:

$$\beta = \frac{P_{n_0} + P_{n_0+1}}{P_\Sigma} \quad (7.9)$$

Зависимость величины β от t , приведенная на рис.8 (кривая 3), указывает на то, что диффузия после 5-10 периодов практически прекращается, а относительная суммарная вероятность β даже при таком, достаточно сильном возмущении, остается довольно высокой. Колебания $\beta(t)$ можно сгладить, вводя усреднение по времени, начинающееся с $t = 0$ (кривая 4). В результате видно, что в качестве меры интенсивности взаимодействия между невозмущенными уровнями системы можно ввести эмпирическую характеристику $\langle \beta \rangle$. В рассматриваемом случае она равна $\langle \beta \rangle \approx 0,70$. Как следует из рис.8, выход на плато для $\langle \beta \rangle$ осуществляется довольно быстро. Основные численные расчеты по определению $\langle \beta \rangle$ проводились на времени $t_m = 40$. Качественное поведение $\langle \beta \rangle$ (кривая 4) является типичным для самых разных параметров исследуемой модели.

Если для данных рис.8 построить распределение вероятности в зависимости от t , аналогично рис.6а, то можно увидеть (см. рис.6б), что возбуждение высоких уровней значительно слабее, чем на рис.6а. В то же время, с увеличением ξ значение $\langle \beta \rangle$ резко падает. Практически, оказывается, что сильное возбуждение и диффузия в сторону высоких n с последующей сильной ионизацией (см.рис.6а) соответствует значениям $\langle \beta \rangle \approx 0,50$. Так, например, для данных рис.6а ($\xi \approx 0,05$) имеем: $\langle \beta \rangle \approx 0,55$. Поэтому в дальнейшем в качестве критического значения $\langle \beta \rangle$ для возникновения сильной диффузии принимается $\langle \beta \rangle_{cr} \approx 0,50$. Естественно, что такой эмпирический критерий является в известной степени условным, однако он позволяет исследовать зависимость диффузии от тех или иных параметров системы.

С помощью $\langle \beta \rangle$ была исследована зависимость диффузии от возмущения ξ для различных начальных состояний $|n_0\rangle$. Суммарный результат приведен на рис.9. Во всех случаях период был приближенно равен резонансному для перехода на соседний уровень $|n_0+1\rangle$, а в качестве начального распределения задавалось возбуждение состояния $|n_0\rangle$ с орбитальным квантовым числом $l = 0$. Используя формулу перехода от сферических состояний к параболическим [32], нетрудно получить, что состояние с $l = 0$ соответствует равномерному распределению вероятности по всем параболическим состояниям (n_1, n_2) , для которых $n = n_1 + n_2 + 1$. Такой выбор начального состояния (с $l = 0$) удобен для сравнения с некоторыми аналитическими оценками (см. § 8). Заметим сразу же, что отличие в поведении системы (и в итоговом значении $\langle \beta \rangle$ для $t_m = 40$) для начального распределения с $l = 0$ и начального распределения, описанного в § 5 ($n_1 = n_2$) оказывается довольно слабым. Тем не менее, вопрос о зависимости диффузии от вида начального распределения внутри состояния $|n_0\rangle$ с разными l (или в параболических числах, с разными n_1, n_2) довольно интересен, поскольку, оказывается, что критическое возмущение ξ_{cr} для возникновения стохастической диффузии по аналитическим оценкам сильно зависит от l [2]. Для сравнения на рис.10 приведены также зависимости $P_\Sigma = 1 - P_{ion}$ - полной вероятности в дискретных уровнях исследуемой модели за вычетом прямой ионизации. Прежде всего видно, что для $n_0 = 5$ ионизация очень велика. Поскольку в этом случае имеется довольно сильное понижение ионизационного порога, вряд ли можно в этом случае говорить о какой-либо диффузии. Кроме того оказывается, что для $n_0 = 5$ многофотонное возбуждение проявляется значительно сильнее, чем для больших n . Поэтому в дальнейшем случай с $n_0 = 5$ обсуждаться не будет.

Из рис.9 следует также, что для $n_0 = 9$ поведение системы значительно более устойчивее, чем для $n_0 = 13, 17$. Это также подтверждается данными о распределении вероятности по всем невозмущенным уровням. Резкое падение P_Σ при $\xi \approx 0,05$ до $P_\Sigma \approx 0,3$ (рис.10) объясняется относительно более сильной (чем для $n_0 = 13, 17$) прямой ионизацией с начальных уровней $n_0, n_0 + 1$, зависящей от амплитуды F_0 каждого толчка. Для $n_0 = 13, 17$ кривые $\langle \beta \rangle$ на рис.9-10 довольно близки и

если исходить из того, что критическому возмущению соответствует $\langle \beta \rangle \approx 0,5$, то можно сделать итоговое заключение, что $\xi_{cr} \approx 0,03+0,04$. При меньших значениях ξ распределение вероятности захватывает всего несколько ближайших с $|n_0\rangle$ состояний и диффузия вверх по спектру отсутствует.

§ 8. АНАЛИТИЧЕСКИЕ ОЦЕНКИ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Во введении уже отмечалось, что для высоковозбужденного атома ($n \gg 1$) кроме туннельной и многофотонной ионизации может возникать еще один тип ионизации, в основе которой лежит так называемая стохастическая диффузия. Такая диффузия имеет место для широкого класса нелинейных систем классической механики и к настоящему времени достаточно хорошо изучена (см. /12-13/). Основной особенностью этой диффузии является то, что она не связана с наличием в системе каких-либо случайных сил и имеет место в строго детерминированной системе. При этом не обязательно, чтобы число степеней свободы системы было велико. Например, для автономной системы достаточно всего лишь двух степеней свободы, а для неавтономной — даже одной (полторы степени свободы). Существенно, однако, чтобы система была нелинейной. Тогда при некоторых условиях возникает так называемая локальная неустойчивость движения, при которой близкие траектории в фазовом пространстве системы с течением времени расходятся друг от друга экспоненциально быстро. Вследствие ограниченности фазового объема это приводит к быстрому перемешиванию траекторий и, как следствие, к нерегулярности (стохастичности) движения системы. При этом в автономной системе обмен между степенями свободы имеет случайный характер, а в неавтономной системе под действием внешней силы возникает диффузионный рост энергии системы.

В предыдущем параграфе уже отмечалось, что критерий возникновения такого типа движения основан на взаимодействии между собой многочисленных нелинейных резонансов, появляющихся в системе под действием внешнего периодического возмущения /12-13/. Рассмотрим этот критерий более подробно для частного случая нашей задачи — для $m = 0$ и $\xi = 0$ (вытянутые орбиты). Далее мы будем следовать работе /2/, где оценки получены для мо-

нохроматического поля $F_0 \cos \omega t$. Запишем гамильтониан классической системы:

$$H = -\frac{1}{2n^2} + F_0 n^2 \delta(t-sT) \left\{ -\frac{3}{2} + 2 \sum_{k=1}^{\infty} x_k \cos k\lambda \right\} \quad (8.1)$$

Здесь n, λ — канонически сопряженные действие и фаза, а x_k — Фурье-компонента дипольного момента электрона /33/:

$$n^2 x_k = \frac{n^2}{k} \gamma'_k(k) \quad (8.2)$$

с эксцентриситетом e , равным $e = \sqrt{1 - l^2/n^2} = 1$. Считается, что вектор напряженности электрического поля F_0 параллелен орбите электрона. Разлагая δ -функцию в ряд Фурье (5.1-5.3), запишем (8.1) в виде:

$$H = -\frac{1}{2n^2} - \frac{3}{2} \xi_0 n^2 + 2 \xi n^2 \sum_{k,p=1}^{\infty} \cos p\omega_0 t \cdot \cos k\lambda \quad (8.3)$$

Для рассматриваемых значений поля F_0 ($\xi_0 n^4 \leq 0,08$) вторым членом в (8.3) можно пренебречь по сравнению с первым. Из (8.3) следует, что резонансное соотношение имеет вид:

$$p\omega_0 \approx k\dot{\lambda} = k\Omega \quad (8.4)$$

где Ω — кеплерова частота движения электрона на орбите, зависящая от энергии: $\Omega \approx 1/n^3$. В отличие от монохроматической волны, для которой $p = 1$, возмущение в (8.3) содержит значительно больше резонансных членов. Поэтому можно ожидать, что критическое значение ξ_{cr} , при котором возникает перекрытие резонансов, будет существенно ниже.

Наиболее сильный резонанс соответствует значениям $p=k=1$ (основной резонанс). При этом основная частота возмущения равна кеплеровой частоте: $\omega_0 = \Omega \approx 1/n_0^3$. Однако из (8.4) видно, что такое же резонансное условие возникает и для всех $p=k$. Это означает, что при рассмотрении основного резонанса необходимо учитывать вклад всех членов с разными $p=k$. Пренебрегая остальными резонансами и переходя к новым каноническим переменным $I = n - n_0$ и $\theta = \lambda - \omega_0 t$, получим резонансный га-

мильтониан (см. /2/):

$$H_1 = -\frac{3I^2}{2n_0^4} + \xi n_0^2 \sum_{k=1}^{\infty} x_k \cos k\theta \quad (8.5)$$

Этот гамильтониан не зависит от времени и описывает колебания нового действия I вблизи резонансного значения $n_0 = \Omega^{-1/3}$. Из (8.5) можно найти максимальное изменение действия:

$$(\Delta I)_{\max} = (\Delta n)_{\max} = \pm 2n_0^3 \sqrt{\frac{\xi}{3}} X_1 \quad (8.6)$$

где, с учетом (8.2):

$$X_1 = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{\infty} x_k [1 - (-1)^k] = \frac{1}{2} \quad (8.7)$$

Используя связь между частотой Ω и действием n , можно найти полуширину резонанса по частоте:

$$(\Delta \Omega)_{11} = \frac{d\Omega}{dn} (\Delta n)_{\max} = \pm \frac{2}{n_0} \sqrt{3\xi} X_1 \quad (8.8)$$

Полученные выражения (8.6–8.8) определяют амплитуду устойчивых нелинейных колебаний энергии и частоты электрона под действием внешнего поля с частотой, равной кеплеровой частоте электрона. Условие применимости (в классической механике) является малость возмущения, при которой остальными резонансами можно пренебречь, а также малость ΔI по сравнению с n_0 . В квазиклассическом подходе при $n_0 \gg 1$ в квантовой задаче появляется дополнительное условие: число квантовых уровней Δn , захваченных в нелинейный резонанс должно быть достаточно велико /30/. Для возмущения это приводит к оценке снизу: $\xi \gg n_0^{-6}$.

При увеличении возмущения, но все еще оставаясь в рамках применимости теории возмущения ($\xi n^4 \ll 1$), приближение изолированного резонанса перестает быть справедливым. Появляется необходимость учитывать взаимодействие близлежащих (по частоте или действию) резонансов. Именно это взаимодействие и приводит к стохастичности /12–13/. Простейший критерий стохастичности, как известно, заключается в нахождении условия перекрытия со-

седних нелинейных резонансов. Для этого нужно рассмотреть резонансную структуру возмущения и выделить эти резонансы. Детальный анализ показывает, что в нашем случае, когда частота ω_0 примерно равна кеплеровой $\Omega \approx 1/n_0^3$ где n_0 – начальное состояние атома водорода, наиболее сильным резонансом (с точки зрения возможности его перекрытия с основным, рассмотренным выше) является резонанс с $k=3$, $p=2$. Из (8.4) следует, что для него

$$\Omega_{pk} = \frac{1}{n_{pk}^3} = \frac{p}{k} \Omega_0 = \frac{2}{3} \Omega_0 \quad (8.9)$$

где n_{pk} определяет положение этого резонанса:

$$n_{pk} = n_0 \left(\frac{k}{p}\right)^{1/3} = \left(\frac{3}{2}\right)^{1/3} n_0 \quad (8.10)$$

Вводя новые переменные действие–фаза:

$$I_{pk} = n - n_{pk}; \quad \theta_{pk} = k\lambda - p\omega_0 t \quad (8.11)$$

аналогично (8.5) получим:

$$H_{pk} = -\frac{3I_{pk}^2}{2n_{pk}^4} + \xi n_{pk}^2 \sum_{r=1}^{\infty} x_{3r} \cos(r\theta_{pk}) \quad (8.12)$$

Здесь так же, как и ранее, учтены совпадающие резонансы $r(3\lambda - 2\omega_0 t) \approx 0$. Из (8.12) найдем полуширину резонанса по частоте:

$$(\Delta \Omega)_{pk} = \frac{2\sqrt{3\xi} X_3}{n_{pk}} \quad (8.13)$$

где

$$X_3 = \frac{1}{2} \sum_{r=1}^{\infty} x_{3r} [1 - (-1)^r] \approx 0.08 \quad (8.14)$$

Теперь, зная суммарную полуширину $(\Delta \Omega)_{11} + (\Delta \Omega)_{31}$ обоих резонансов и сравнивая ее с расстоянием между этими резонансами $\Omega_{11} - \Omega_{31}$, можно найти условие их перекрытия. Как показано в /13/, эффективное перекрытие, при котором траектория случайным образом переходит из одного резонанса в другой, возникает при

условии:

$$\mathcal{K} = 2.5 \cdot S^2 = \frac{\xi}{\xi_{cr}} > 1 \quad (8.15)$$

где

$$S = \frac{(\Delta\Omega)_{11} + (\Delta\Omega)_{31}}{\Omega_{11} - \Omega_{31}}; \quad \Omega_{11} \equiv \Omega_0 \quad (8.16)$$

В итоге для рассматриваемых резонансов получаем:

$$\xi_{cr} = \xi_{cr} n_0^4 \approx \frac{1}{220} \quad (8.17)$$

Анализ показывает, что при $\xi > \xi_{cr}$ одновременно перекрываются следующие по n два резонанса: $p=2, k=3$ и $p=1, k=2$. Оказывается также, что критические поля для перекрытия резонансов, расположенных выше n_{21} ($k=2, p=1$), уменьшаются с увеличением n . Поэтому достаточно рассмотреть лишь несколько низколежащих резонансов. Причина, по которой в данном случае не рассматриваются резонансы, лежащие между выбранными тремя, состоит в том, что для них значения k достаточно велики ($k \geq 5$), а с ростом k ширина резонанса резко падает и число захваченных в резонанс квантовых уровней становится меньше единицы. Для чисто классической модели, строго говоря, перекрытие достаточно высоких резонансов ($k, p \gg 1$) имеет место при сколь угодно слабом возмущении. Однако диффузия при этом также может быть сколь угодно слабой.

Сравнение (8.17) с оценкой критического поля для монохроматического возмущения /2/:

$$\xi_{cr} \approx \frac{1}{84} \quad (8.18)$$

показывает, что для импульсного периодического поля, рассматриваемого в данной работе, критические поля уменьшились примерно в 2,6 раза. Такое, не слишком сильное на наш взгляд отличие обусловлено двумя факторами. Во-первых, в обеих моделях уже в первом порядке по возмущению имеется довольно плотная резонансная структура возмущения. Во-вторых, амплитуда Фурье-гармоник \mathcal{X}_k с ростом k падает довольно быстро (как $k^{-5/3}$ см. /2/), что и приводит к резкому уменьшению дополнительных

(по сравнению с монохроматическим возмущением) резонансов, в то время, как основные меняются слабо.

Прямое сравнение классической оценки (8.17) критического возмущения с численными данными, приведенными в § 7, с определенностью показывают, что оценка для ξ_{cr} явно занижена. Согласно результатам, представленным на рис.6,9, сильный обмен между состояниями, соседними с n_0 начинается при $\xi \approx 0,04$. Правда, для $n_0 = 9$ данные заметным образом отличаются от данных с $n_0 = 13, 17$ (см. рис.9,10) в сторону большей устойчивости. В то же время отличие между $n_0 = 13$ и $n_0 = 17$ оказывается достаточно малым. Поэтому, по всей видимости, можно считать, что для $n_0 < 10$ движение носит существенно квантовый характер, в то время, как для $n_0 > 10$ проявляются некоторые черты классической стохастической диффузии.

Условие применимости квазиклассического подхода, как отмечалось выше, связано с необходимостью большого числа уровней Δn , захваченных нелинейным резонансом. Согласно соотношению (8.6) имеем:

$$\Delta n = 2(\Delta I)_{max} = 4n_0 \frac{k}{p} \sqrt{\frac{\xi}{3}} X_k \approx 0.33 n_0 \frac{k}{p} X_k^{1/2} \quad (8.19)$$

Для основного резонанса $p=k=1$ эта оценка дает:

n_0	9	13	17	
Δn	2,1	3,0	3,9	$\xi = 0.02$
Δn	3,0	4,2	5,6	$\xi = 0.04$

Видно, что условие квазиклассичности

$$\Delta n \gg 1 \quad (8.20)$$

при недостаточно больших n_0 и ξ может играть существенную роль в ограничении стохастической диффузии. Тем не менее, численные данные показывают, что даже для $\xi = 0,04$ и $n_0 = 13, 17$ интенсивный обмен происходит лишь между малым числом соседних с n_0 состояний. Это противоречит классическим оценкам, по которым условие перекрытия резонансов ослабляется по мере увеличения n . Из (8.19) для больших значений k следует, что

число захваченных уровней Δn растет как $k^{1/6}$, тем самым условие (8.20) улучшается. Для более ясной картины приведем резонансные значения действия n , соответствующие положению резонансов более высоких гармоник k , которые согласно оценкам, должны перекрываться: (см. (8.10) с $\rho = 1$):

n_0	$n_2 (k=2)$	$n_3 (k=3)$	$n_4 (k=4)$
9	11	13	14
13	16,4	18,7	20,7
17	21,4	24,5	27

В качестве сравнения с численными данными укажем, например, что для $\xi \approx 0,04$ и $n_0 = 13$ (при полном числе уровней $N = 30$) вероятность возбуждения состояния $n = 18$ примерно на порядок меньше, чем состояний с $n = 14, 15$.

Как уже отмечалось выше (см. § 2) по сравнению с монохроматическим возмущением в рассматриваемой модели имеется постоянная составляющая внешнего поля ξ_0 (см. (5.1-5.2)). При получении аналитических оценок влиянием ξ_0 в (8.3) пренебрегалось, поэтому возникает вопрос, насколько в действительности это оправдано. Анализируя численные данные, можно также предположить, что уменьшение полной вероятности P_{Σ} из-за прямой ионизации в значительной степени обусловлено понижением ионизационного порога, зависящего от величины ξ_0 (см. § 7). Поэтому был проведен специальный численный эксперимент с возмущением вида (2.3), в котором постоянная составляющая равна нулю. При этом амплитуда первой гармоники оставалась прежней:

$$H_{ext} = \frac{F_0}{2} \sum_s \delta(t-sT) - \frac{F_0}{2} \sum_s \delta(t-sT - \frac{T}{2}) \quad (8.21)$$

или:

$$H_{ext} = \frac{2F_0}{T} \sum_{p=1} \cos p\omega_0 t; \quad p - \text{нечетное} \quad (8.22)$$

Для данных рис. 3 ($\xi \approx 0,04$, $n_0 = 9$) поведение системы с

(8.21) оказывается намного более устойчивым. Так, например, среднее значение $\langle \beta \rangle$, характеризующее относительную долю вероятности в состояниях $|n_0\rangle$ и $|n_0+1\rangle$ (7,9), увеличилось от 0,70 до 0,84, одновременно с этим резко уменьшилась вероятность прямой ионизации ($P_{\Sigma} = 0,94$ вместо 0,79). Распределение вероятности по состояниям с различными значениями n также указывает на более ограниченный объем между различными состояниями. Практически эффективное возбуждение захватывает всего два состояния $|n_0\rangle$ и $|n_0+1\rangle$. Тем не менее нельзя утверждать, что отличие в поведении системы целиком обусловлено отсутствием постоянной составляющей электрического поля. Дело в том, что в возмущении (8.22) кроме нулевой гармоники отсутствуют также все четные гармоники с $p = 2, 4, \dots$. В то же время, как мы видели, нелинейный резонанс с $p = 2$ дает существенный вклад в критерий перекрытия (8.17). По всей видимости именно отсутствием целого набора резонансов с четными p и объясняется резкое уменьшение возбуждения высоколежащих состояний и, соответственно, уменьшение прямой ионизации из этих состояний.

Для более аккуратной проверки был проведен следующий численный эксперимент. К обычному возмущению V_1 (2.2) с периодом T и амплитудой F_0 было добавлено такого же типа возмущение V_2 , но с периодом $T_1 = T/5$ и амплитудой $F_1 = -F_0/5$, причем каждый 5-й толчок от V_2 совпадал с очередным толчком от V_1 . Тогда в таком возмущении по сравнению с (2.2) будут отсутствовать нулевая гармоника, пятая, десятая и т.д. Численные данные для тех же параметров ξ и n_0 в таком поле показывают, что поведение системы слабо отличается от приведенного на рис. 3, хотя и оказывается несколько более устойчивым. В целом, наличие постоянной составляющей в возмущении (2.2) не является существенным. Среднее значение $\langle \beta \rangle$ в этом случае равно $\langle \beta \rangle \approx 0,76$, а полная вероятность - $P_{\Sigma} \approx 0,85$.

Одним из интересных вопросов является изучение роли начального распределения по параболическим состояниям с различными n_1 и n_2 при постоянном $n_0 = n_1 + n_2 + 1$. Аналитические оценки /2/ указывают на существенную зависимость критерия стохастичности от орбитального квантового числа l . Именно, оказывается, что величина критического возмущения ξ_{cr} минималь-

на при малых l и резко увеличивается с увеличением l . Физически это связано с тем, что малые l соответствуют вытянутым вдоль направления внешнего электрического поля орбитам. Естественно ожидать, что в этом случае влияние возмущения гораздо сильнее, чем для орбит, близких к круговым. Используя формулы перехода от сферического базиса к параболическому /32/ нами были рассмотрены несколько вариантов начального распределения с разными l . Как уже говорилось, основное исследование проводилось для $l = 0$. В параболических координатах это соответствует равномерному возбуждению всех n_1, n_2 с фиксированным n_0 .

Для сравнения были проведены численные эксперименты с $l = 1$ и $l = n_0 - 1$ для $n_0 = 13$ и $\xi \approx 0,04$. В основном, результат сводится к следующему. Величина $\langle \rho \rangle$ для всех значений $l = 0; 1; n_0 - 1$ оставалась примерно одинаковой ($\langle \rho \rangle \approx 0,50$). Тем не менее при переходе от $l = 0; 1$ к $l = n_0 - 1 = 12$ распределение по уровням становится гораздо более узким с менее сильным возбуждением высоколежащих уровней. Соответственно этому, уменьшается и прямая ионизация. Так, например, если для $l = 0$ и $l = 1$ полная вероятность P_{Σ} в дискретной части спектра, соответственно, равна 0,72 (рис.10) и 0,64, то для $l = n_0 - 1$ значение P_{Σ} существенно выше: $P_{\Sigma} \approx 0,86$. Для $\xi \approx 0,02$ этот эффект также сохраняется, хотя и проявляется значительно слабее (P_{Σ} изменяется от 0,93 до 0,96).

Особый интерес представляет собой исследование параболических состояний с большим отношением $n_2/n_1 \gg 1$ (или $n_1/n_2 \gg 1$). При начальном возбуждении таких состояний оказывается, что остальные состояния возбуждаются слабо и это позволяет перейти к приближению одномерного гамильтониана, описывающего сильно вытянутые орбиты /34/. Такая модель используется также при описании поведения левитирующего над поверхностью жидкого гелия электрона во внешнем переменном поле /35-36/. Численные эксперименты с параболическим начальным распределением $n_1 = 0$,

$n_2 = 12$ для $n_0 = 13$ и $\xi \approx 0,04; 0,02$ действительно показывают, что возбуждение, в основном, охватывает состояния с $n_1 = 0$. Однако с течением времени при больших значениях ξ постепенно начинают возбуждаться состояния с $l = 1$, поэтому

этот вопрос требует более детального исследования.

Наконец, обсудим вопрос о роли многофотонного возбуждения, которое является основным механизмом ионизации при $\xi \gg 1$ (см. § I) наряду со стохастической диффузией. Этот вопрос очень важен, поскольку он связан с более общим вопросом о соотношении классических и квантовых эффектов в квазиклассической области $n \gg 1$. Прямое численное сравнение поведения классической и квантовой одномерной модели /34/ показывает, что даже для очень больших значений n ($n \approx 50-100$) на фоне стохастической диффузии проявляются очень сильные многофотонные резонансы. Это существенно ограничивает возможности классического описания. Естественно возникает вопрос о многофотонных резонансах в нашей модели с двумя степенями свободы (n_1, n_2). Суммируя результаты численных экспериментов с самыми различными n_0, ξ, l можно сделать заключение, что для малого возмущения, при котором интенсивный обмен ограничен лишь небольшим числом уровней, многофотонные резонансы могут играть значительную роль. С увеличением возмущения их влияние на общее поведение системы уменьшается. Другое наблюдение состоит в том, что многофотонные резонансы проявляются более сильно в случае, когда нет перемешивания по n_1, n_2 , т.е. когда ситуация близка к "одномерной". Особенно хорошо это заметно для параболического начального возбуждения $n_1 = 0, n_2 = n_0 - 1$, при котором многофотонные резонансы значительно сильнее, чем для $l = 0$. Несомненно, этот вопрос заслуживает большего внимания, однако уже сейчас можно предположить, что роль многофотонных резонансов в системе с двумя степенями свободы гораздо слабее, чем в "одномерной" модели.

В заключении рассмотрим еще один вопрос, связанный с неадиабатичностью включения внешнего поля. Для выяснения роли неадиабатичности нами был проведен дополнительный численный эксперимент с возмущением, медленно нарастающим во времени. Аналогично работе /15/ зависимость амплитуды поля $F(t)$ была выбрана в следующей форме:

$$F(t) = \begin{cases} F_0 \exp\{\gamma(t-t_0)\} & t \leq t_0 \\ F_0 & t > t_0 \end{cases} \quad (8.23)$$

Сравнение проводилось для данных рис.3 со следующими параметрами: $\gamma = 4/t_0$, $t_0 = 20$. Значение $\beta(t)$, усредненное по t от t_0 до $t_m = 60$ (40 периодов внешнего поля после полного его включения) оказалось несколько выше, чем при мгновенном включении, $\langle \beta \rangle \approx 0,78$. Распределение вероятности изменилось незначительно, но также указывает на менее интенсивное возбуждение соседних с n_0 и n_0+1 уровнями. В то же время, прямая ионизация осталась на прежнем уровне: $P_z \approx 0,79$. В целом адиабатичность включения поля не привела к качественно новым эффектам, хотя количественно критическое возмущение несколько увеличилось.

§ 9. ЗАКЛЮЧИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Проведенное численное исследование показывает, что поведение квантовой модели (3.5) даже в квазиклассической области $n \gg 1$ значительно отличается от ожидаемого по классическим представлениям. Одно из таких отличий, а именно, прямая ионизация, проявляющаяся в постоянном уменьшении полной вероятности системы, имеет чисто квантовую природу и обусловлено наличием в спектре возмущения частот, соответствующих прямому переходу в непрерывный спектр. Однако этот эффект в какой-то степени можно рассматривать как постоянный фон и учесть его влияние с помощью метода, описанного в § 8. Тем не менее, развивающееся на этом фоне возбуждение уровней в дискретной части спектра в целом оказывается существенно более слабым, чем это следует из классических оценок. Численные данные показывают, что при достаточно сильном возмущении вначале возникает интенсивное возбуждение вышележащих по сравнению с n_0 уровней. Однако в отличие от классической стохастической диффузии, при которой это возбуждение должно распространяться вверх по спектру, происходит резкое замедление диффузии, приводящее к обмену между ограниченным числом уровней. Такое поведение весьма похоже на исследованное ранее свойство временной стохастичности квантовых систем [20, 18] и, по всей видимости, имеет ту же самую природу. Предварительные численные эксперименты показали, что обнаруженные в настоящей работе особенности поведения сохраняются и в более реальной модели с монохроматическим возмущением.

Один из авторов (Ф.М.И.) благодарит Лабораторию Дарсбери и Научный Совет Англии за предоставленную возможность проведения необходимых численных расчетов и гостеприимство во время выполнения начальной фазы этой работы. Он также выражает благодарность Д.Л.Шепелянскому за обсуждение и ценные замечания.

Все авторы благодарны проф.Я.Персивало за плодотворные дискуссии.

Приложение

Как известно, гипергеометрическая функция F является рядом вида

$$F(\alpha, \beta; \nu; z) = 1 + \frac{\alpha \cdot \beta}{\nu \cdot 1} z + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{\nu(\nu+1)1 \cdot 2} z^2 + \\ + \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2)\beta(\beta+1)(\beta+2)}{\nu(\nu+1)(\nu+2) \cdot 1 \cdot 2 \cdot 3} z^3 + \dots \quad (I)$$

который обрывается, если α или β равны нулю или целому отрицательному числу. Для $\nu = -k$ ($k = 0, 1, 2, \dots$) гипергеометрический ряд неопределен, если ни α , ни β не равны $-\ell$ (где $\ell < k$, ℓ - натуральное число).

Поскольку в нашей задаче $m = 0$, а n_1 и q изменяются от нуля до некоторого значения, параметр $n_1 + q + |m|$ в уравнении (4.12) может обращаться в нуль. В этом случае гипергеометрический ряд

$$F(-n_1, -q; -n_1 - q - |m|; \frac{b_{nn'}(b_{nn'} - \alpha_n - \alpha_{n'})}{(b_{nn'} - \alpha_n)(b_{nn'} - \alpha_{n'})}) \quad (2)$$

неопределен. Чтобы избежать этой трудности, преобразуем ряд (2) к более удобному виду. Согласно общему определению (I) ряд с $\alpha = -k$, где k - положительное целое, обрывается и имеет вид:

$$F(-k, \beta; \nu; z) = 1 - \frac{k\beta}{\nu} z + \dots + (-1)^p \frac{k(k-1)\dots(k-p+1)\beta(\beta+1)\dots(\beta+p-1)}{\nu(\nu+1)\dots(\nu+p-1)} \frac{z^p}{p!} + \\ + \dots + (-1)^k \frac{k!\beta(\beta+1)\dots(\beta+k-1)}{\nu(\nu+1)\dots(\nu+k-1)} \cdot \frac{z^k}{k!} \quad (3)$$

Предположим, что

$$F(-k, \beta; \nu; z) = C_0 F(-k, \beta; \delta; 1-z) \quad (4)$$

Тогда, приравнявая в (4) коэффициенты для члена с наибольшей степенью ($z^k/k!$), получим:

$$C_0 \frac{k!\beta(\beta+1)\dots(\beta+k-1)}{\delta(\delta+1)\dots(\delta+k-1)} = (-1)^k \frac{k!\beta(\beta+1)\dots(\beta+k-1)}{\nu(\nu+1)\dots(\nu+k-1)} \quad (5)$$

откуда

$$C_0 = (-1)^k \frac{\delta(\delta+1)\dots(\delta+k-1)}{\nu(\nu+1)\dots(\nu+k-1)} \quad (6)$$

Аналогичным образом для коэффициента при $\frac{z^{k-1}}{(k-1)!}$ имеем:

$$C_0 (-1)^{k-1} \left\{ (-1)^k \frac{k!\beta(\beta+1)\dots(\beta+k-1)}{\delta(\delta+1)\dots(\delta+k-1)} + (-1)^{k-1} \frac{k!\beta(\beta+1)\dots(\beta+k-2)}{\delta(\delta+1)\dots(\delta+k-2)} \right\} = \\ = (-1)^{k-1} \frac{k!\beta(\beta+1)\dots(\beta+k-2)}{\nu(\nu+1)\dots(\nu+k-2)} \quad (7)$$

Поэтому

$$C_0 (-1)^k \left\{ \frac{k!\beta(\beta+1)\dots(\beta+k-2)}{\delta(\delta+1)\dots(\delta+k-1)} (\beta+k-1-\delta-k+1) \right\} = \\ = \frac{k!\beta(\beta+1)\dots(\beta+k-2)}{\nu(\nu+1)\dots(\nu+k-2)} \quad (8)$$

откуда

$$C_0 = (-1)^k \frac{\delta(\delta+1)\dots(\delta+k-1)}{\nu(\nu+1)\dots(\nu+k-2)(\beta-\delta)} \quad (9)$$

Сравнивая (9) и (6), получим:

$$\beta - \delta = \nu + k - 1$$

или

$$\bar{0} = \beta - \nu - k + 1$$
$$C_0 = (-1)^k \frac{(\beta - \nu) \dots (\beta - \nu - k + 1)}{\nu(\nu + 1) \dots (\nu + k - 1)} \quad (I0)$$

В итоге приходим к следующему соотношению:

$$F(-k, \beta; \nu; z) = \frac{(-1)^k (\beta - \nu) \dots (\beta - \nu - k + 1)}{\nu(\nu + 1) \dots (\nu + k - 1)} F(-k, \beta; \beta - \nu - k + 1; 1 - z) \quad (II)$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Н.Б.Делоне, В.П.Крайнов. Препринт ФИАН СССР № 5. - Москва, 1982.
2. Н.Б.Делоне, В.П.Крайнов, Д.Л.Шепелянский. УФН, 140 (1983), 355.
3. Н.Б.Делоне, В.П.Крайнов. Атом в сильном световом поле. М., Атомиздат, 1978.
4. Л.П.Рапопорт, Б.А.Зон, Н.Л.Манаков. Теория многофотонных процессов в атомах. М., Атомиздат, 1978.
5. Многофотонная ионизация атомов. Труды ФИАН СССР, Москва, т. II5 (1980).
6. J. Bayfield, P. Koch, Phys. Rev. Lett., 33 (1974), 258.
7. J. Bayfield, L. Gardner, P. Koch. Phys. Rev. Lett., 39 (1977) 76.
8. Л.В.Келдыш. ЖЭТФ, 47 (1964), 1945.
9. Н.Б.Делоне, М.Ю.Иванов, В.П.Крайнов. Препринт ФИАН СССР № 42. Москва, 1983.
10. Н.Б.Делоне, Б.А.Зон, В.П.Крайнов. ЖЭТФ, 75 (1978), 445.
11. Б.И.Меерсон, Е.А.Окс, П.В.Сасоров. Письма ЖЭТФ, 29 (1979), 79.
12. Г.М.Заславский, Б.В.Чириков. УФН, 105 (1971), 3.
13. В.В. Chirikov. Phys. Rept., 52 (1979) 263.
14. Д.Л.Шепелянский. Опт. и спектр, 53 (1982) 354.
15. J.G. Leopold, I.C. Percival. Phys. Rev. Lett., 41 (1978) 944; J. Phys. Ser. B., 12 (1979) 709.
16. D.A. Jones, J.G. Leopold, I.C. Percival. J. Phys. Ser. B., 13 (1980) 31.
17. J. Mostowski, J.J. Sanchez-Mondragon. Optics. Comm., 29 (1979) 293.
18. В.В. Chirikov, F.M. Izrailev, D.L. Shepelyansky. Soviet Sci. Rev. vol. 2С, p. 209; Препринты ИФ СО АН СССР 80-209; 80-210, Новосибирск, 1980.

19. G.M.Zaslavsky. Phys.Rept., 80(1981)157.
20. G.Casati, B.V.Chirikov, J.Ford, F.M.Izrailev. Lecture Notes in Physics, v. 93: Springer-Verlag, 1979.
21. D.L.Shepelyansky. Physica 8D(1983)208.
22. R.W.Landhoff, S.T.Epstein, M.Karplus. Rev.Mod.Phys., 44(1972)602.
23. A.K.Dhar, in Nuclear Physics; Proc. of Nucl.Phys., Workshop I.C.T.Triest, ed. C.Tasso (North Holland Pub. 1982)p.607.
24. A.K.Dhar, M.A.Nagarajan, F.M.Izrailev, R.R.Whitehead. J.Phys.B:At.Mol.Phys. 16(1983)L17.
25. Я.Б.Зельдович. ЖЭТФ, 51(1966)1492; УФН, 110(1973), 139.
26. В.И.Ритус. ЖЭТФ, 51(1966)1544.
27. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика. - Изд.3-е, М., Наука, 1974.
28. И.С.Градштейн, И.М.Рыжик. Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М., Физматгиз, 1963.
29. Г.Бете, Е.Солпитер. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. Пер. с англ. М., Физматгиз, 1960.
30. Э.В.Шуряк. ЖЭТФ, 71(1976)2039.
31. Б.М.Смирнов. УФН, 131(1980)577.
32. J.W.V.Hughes. Proc.Phys.Soc., 91(1967)810.
33. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Теория поля. Изд. 6-е. М., Наука, 1973.
34. Д.Л.Шепелянский. Препринт ИЯФ СО АН СССР, 83-61, Новосибирск, 1983.
35. В.С.Эдельман. УФН, 130(1980), 675.
36. R.V.Jensen. Phys.Rev.Lett., 49(1982)1365.

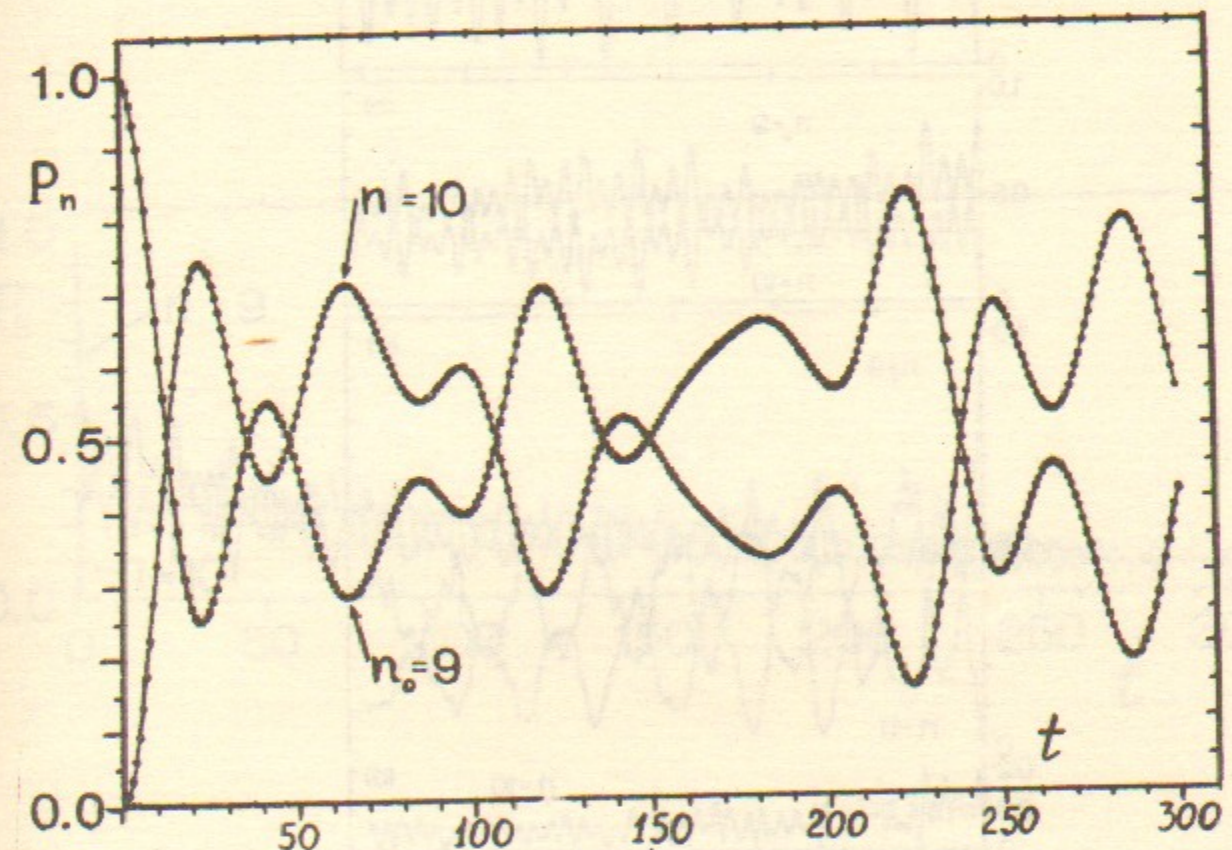


Рис.1. Зависимость вероятности P_n от времени для двух состояний $|n_0=9\rangle$ и $|n=10\rangle$. Вначале возбуждено состояние с $n_0=9$ ($n_1=n_2=4$), $\xi \approx 0,005$, $\tau = 5357$, $F_0 = 0,002$, $t_m = 300$, $P_\Sigma(t_m) = 0,97$.

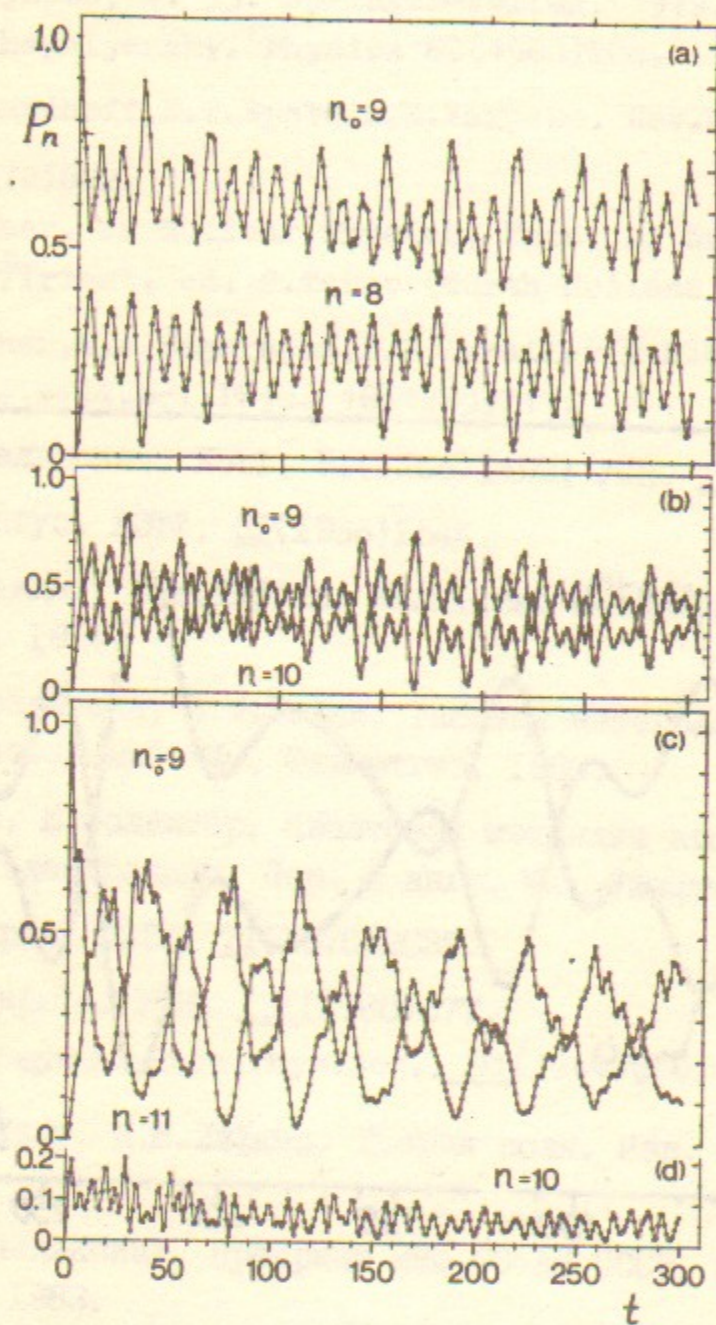


Рис.2. Когерентные колебания вероятности для $n_0 = 9$
 ($n_1 = n_2 = 4$) при разных значениях Γ ; $F_0 = 0,008$,
 $t_m = 300$.
 а) $\xi \approx 0,026$, $\Gamma = 4000$; б) $\xi = 0,021$, $\Gamma = 5000$;
 в) и д) $\xi \approx 0,017$, $\Gamma = 6000$.

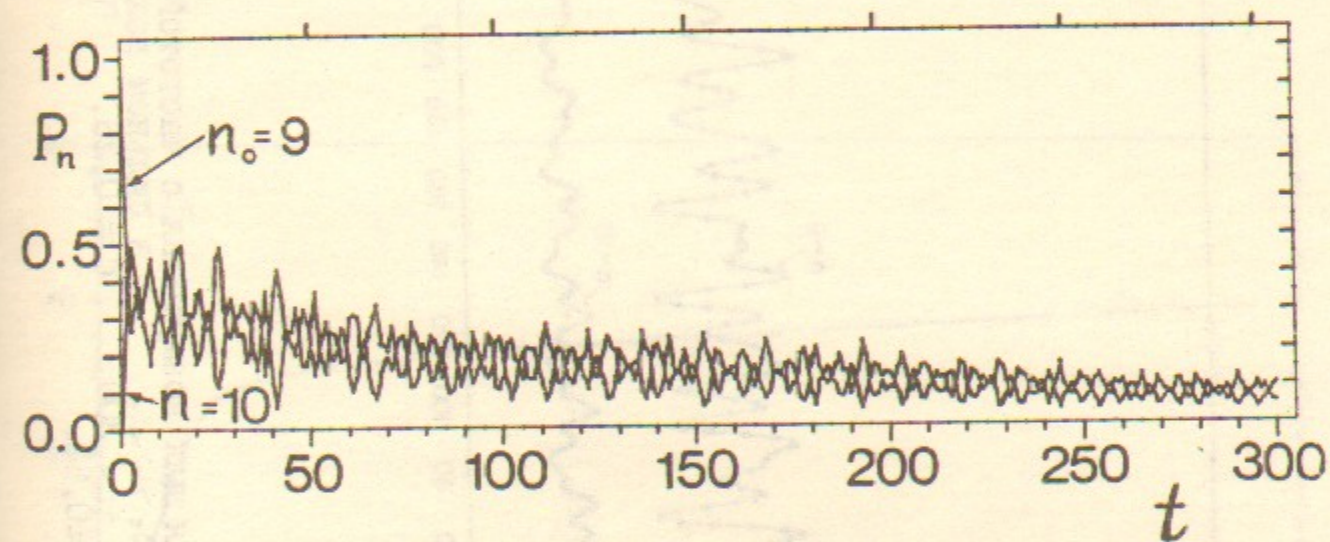


Рис.3. Когерентные колебания для состояний $|n_0\rangle$ и $|n_0+1\rangle$
 одновременно с сильной прямой ионизацией, $n_0 = 9$,
 ($n_1 = n_2 = 4$), $t_m = 300$, $\xi \approx 0,042$, $\Gamma = 5000$,
 $F_0 = 0,016$, $P_2(t_m) \approx 0,3$.

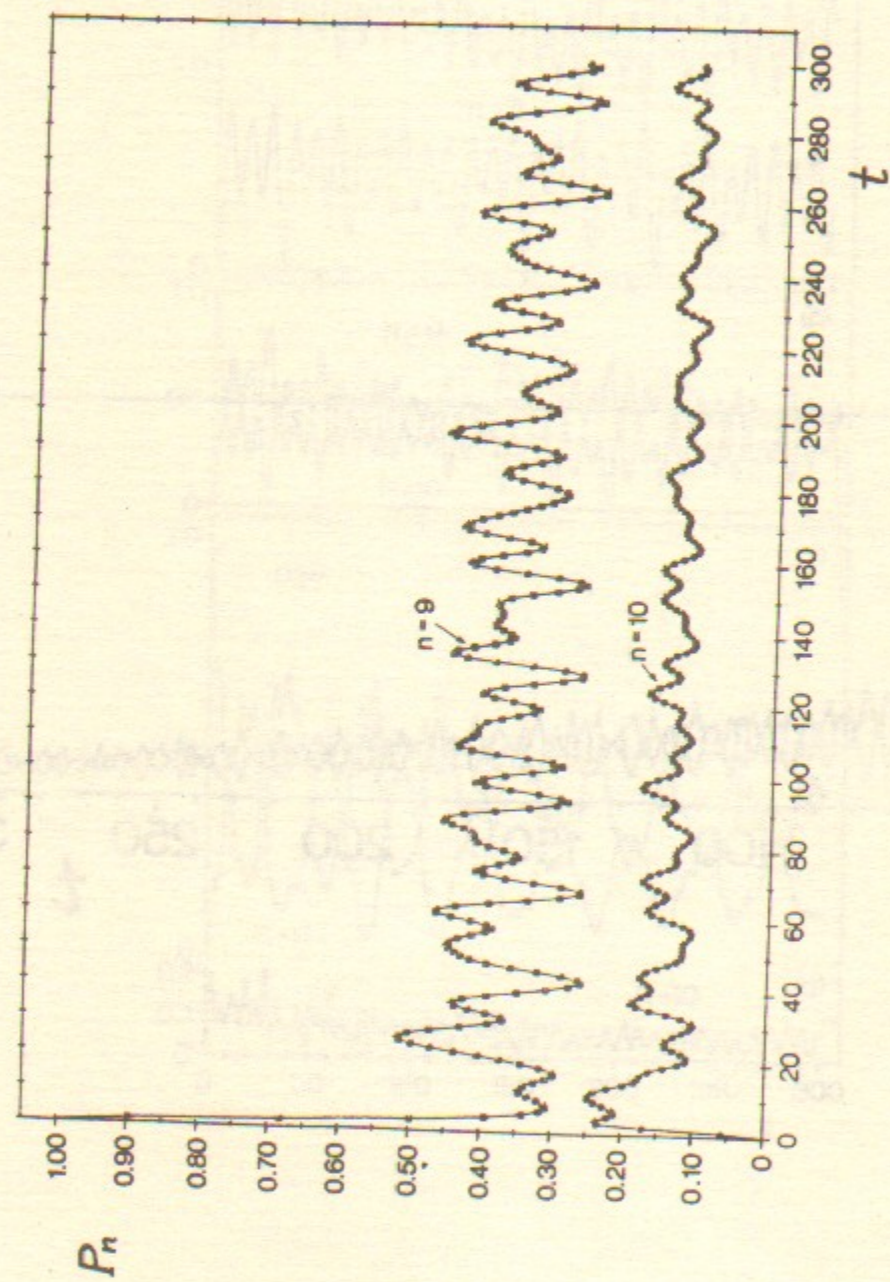


Рис.4. Когерентные колебания для возмущения с частотой выше порога прямой ионизации ($\omega_0 > \omega_{\text{min}}$) в сильном поле; $n_0 = 9$ ($\nu_L = \nu_z = 4$), $t_m = 300$, $\xi \approx 0,26$, $\Gamma = 400$, $F_0 = 0,008$, $\rho_z = 0,60$.

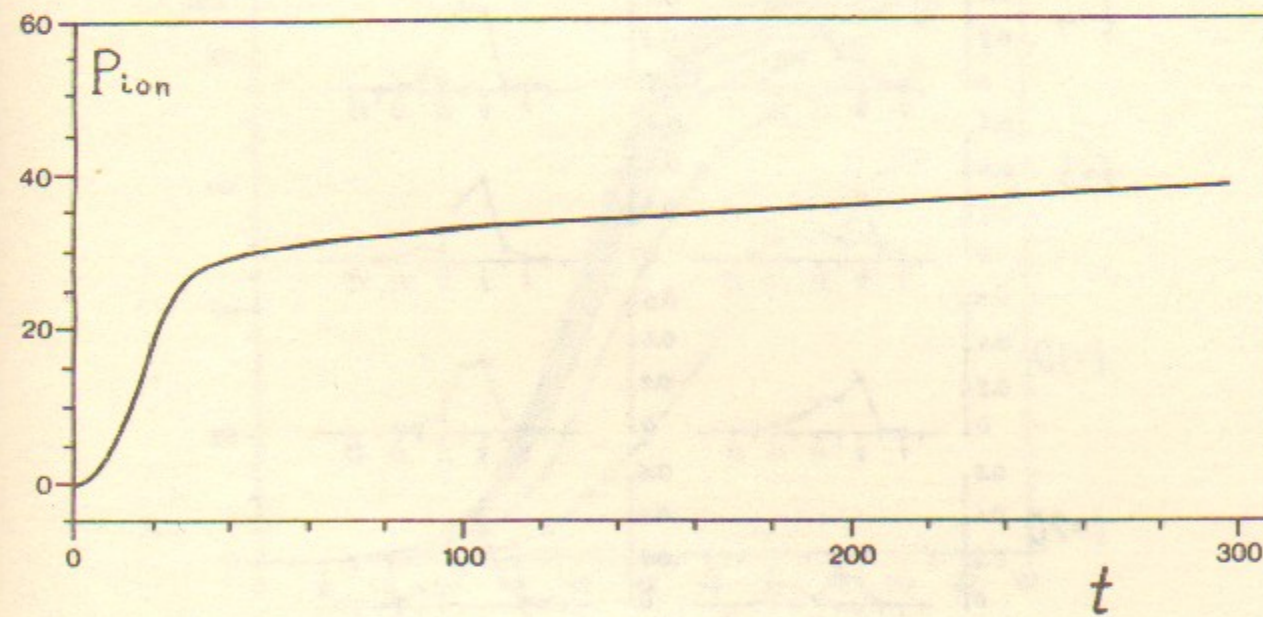


Рис.5. Вероятность прямой ионизации P_{ion} в зависимости от времени для данных рис.4.

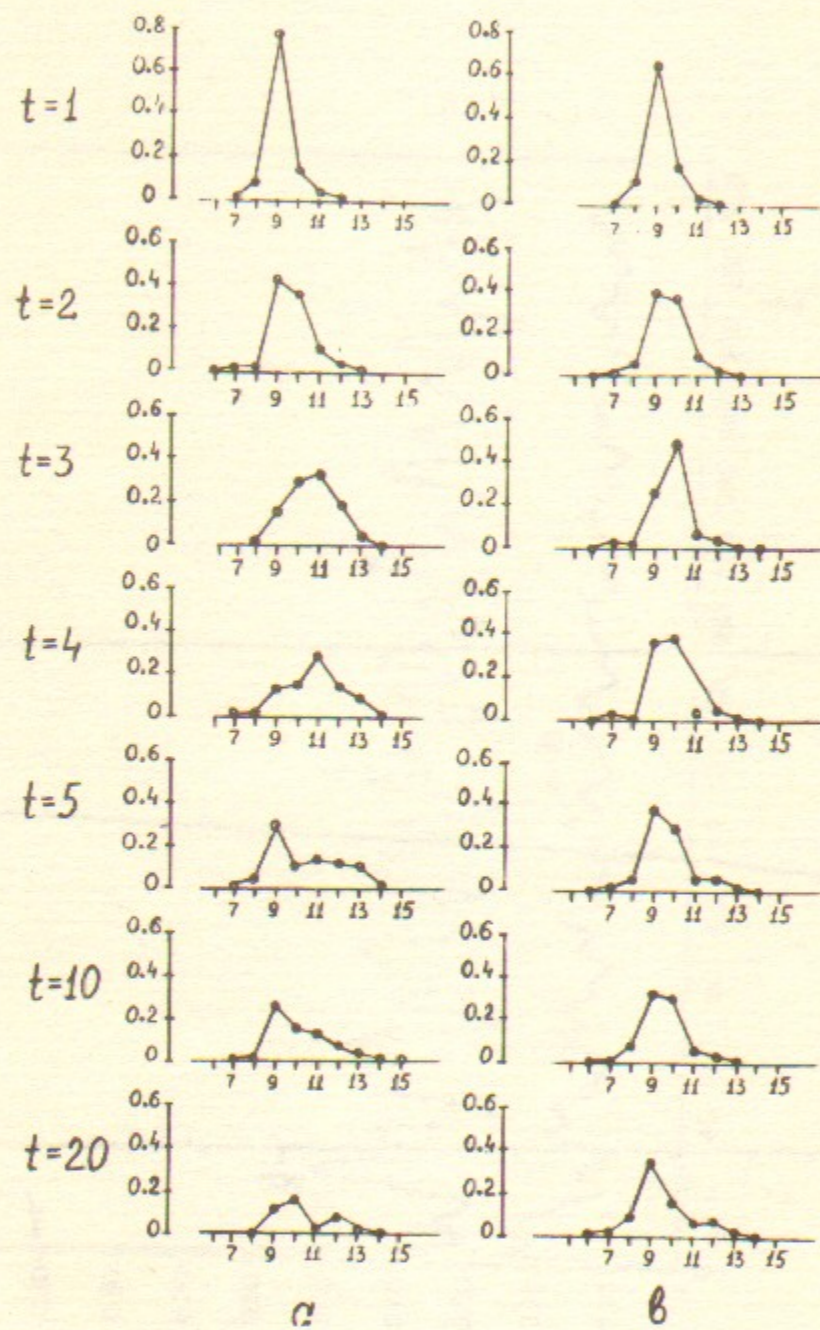


Рис.6. Распределение вероятности по уровням с разными n для $n_0 = 9$ после t_m периодов внешнего поля; $T = 5000$
 а) - вначале возбуждены все параболические состояния n_1, n_2 так что $\xi = 0$; $\zeta = 0,05$, $F_0 = 0,01$;
 б) - начальное возбуждение состояний с $n_1 = n_2 = 4$, $\zeta = 0,04$, $F_0 = 0,008$.

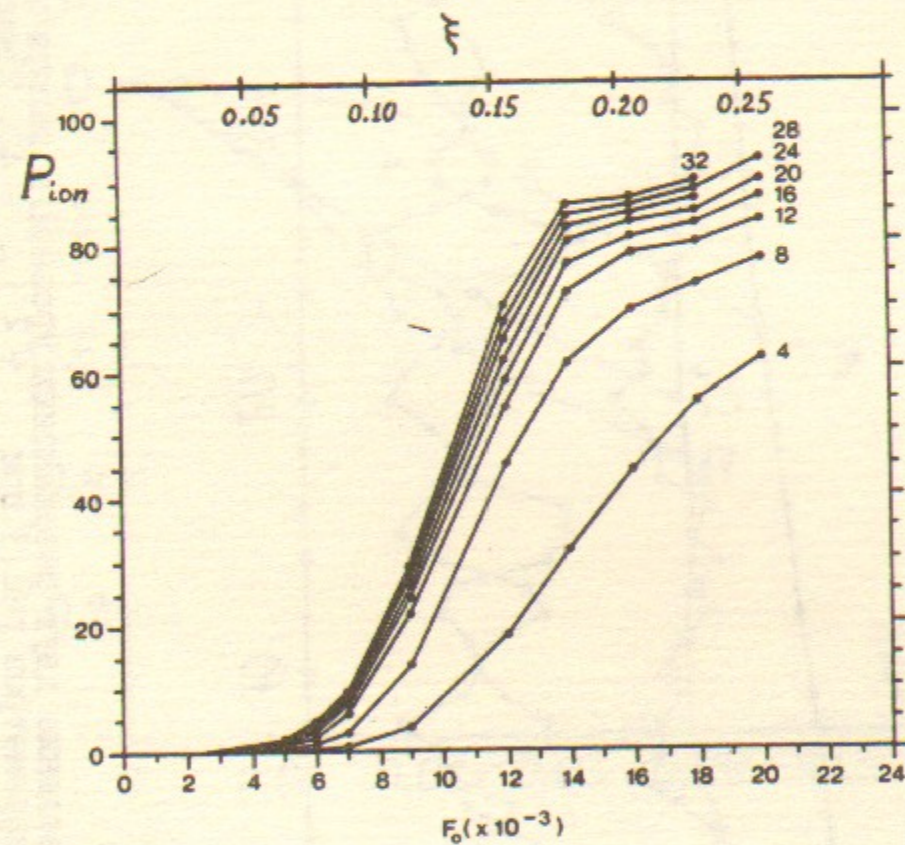


Рис.7. Зависимость вероятности прямой ионизации ($\omega_0 > \omega_{min}$) после t_m периодов (цифры рядом с кривыми) от возмущения F_0 (или F_0) для $n_0 = 9$ ($n_1 = n_2$), $T = 1000$.

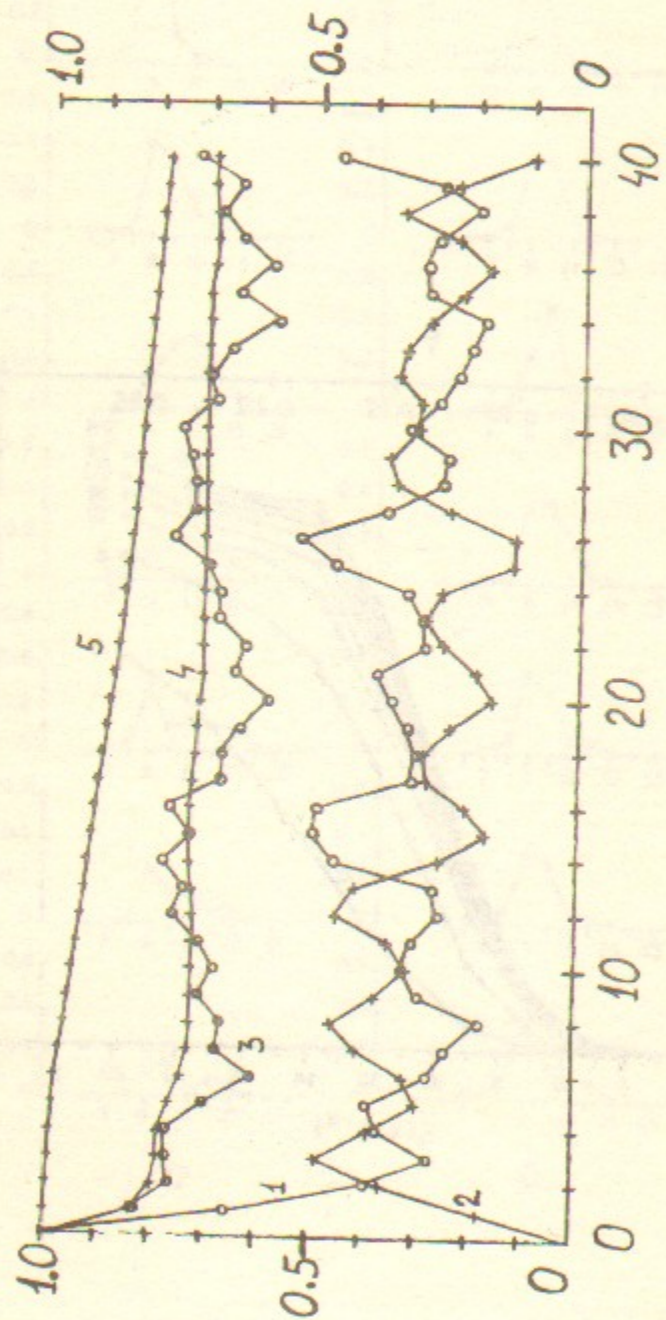


Рис.8. Типичное поведение двух резонансных уровней и эмпирическая характеристика $\langle \beta \rangle$ для параметров рис.3 при $t < t_m = 40$. Кривые 1, 2 — вероятности для состояний с $n_0 = 9$ и $n_0 = 10$ соответственно, кривая 3 — зависимость $\beta(t)$ (см. (7.9)), кривая 4 — усредненная $\langle \beta \rangle$, кривая 5 — полная вероятность $P_{\Sigma}(t)$.

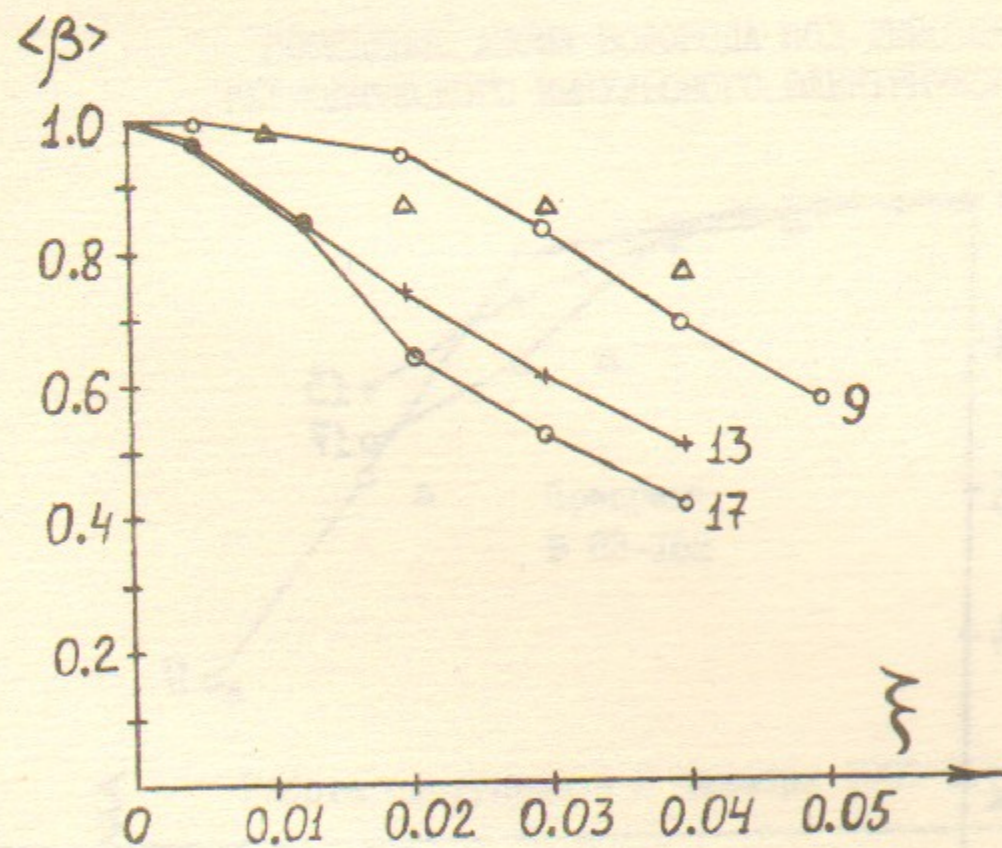


Рис.9. Итоговые данные для зависимости $\langle \beta \rangle$ от возмущения ξ для разных начальных состояний $|n_0\rangle$ с $l = 0$; $t_m = 40$. Цифры указывают значения первоначально возбужденного уровня $n_0 = 9, 13, 17$; треугольники соответствуют $n_0 = 5$.

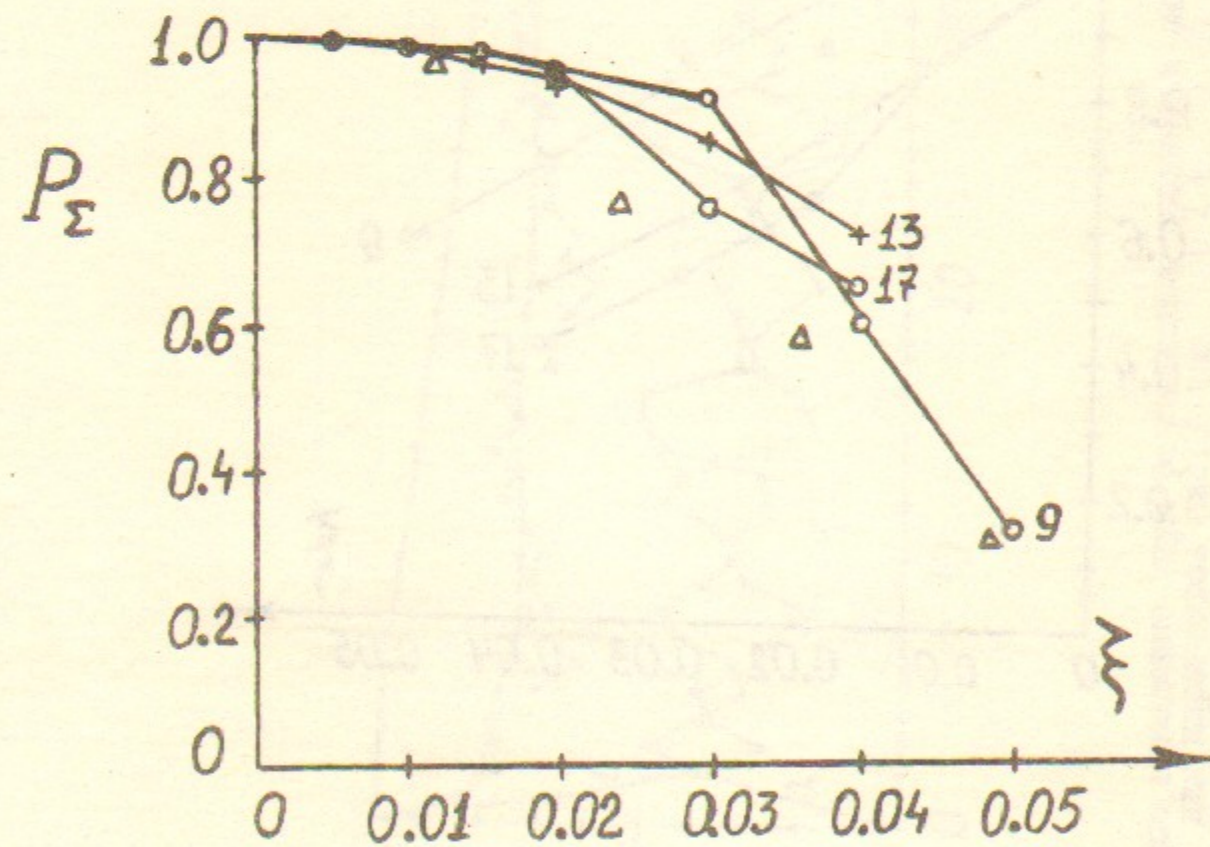


Рис.10. Зависимость полной вероятности P_Σ от ζ для различных n_0 , обозначения те же, что на рис.9, ($t_w=40$).

А.К.Дар, Ф.М.Израйлев, М.А.Нагараджан

ПОВЕДЕНИЕ АТОМА ВОДОРОДА ПОД ДЕЙСТВИЕМ
ПЕРИОДИЧЕСКОГО ИМПУЛЬСНОГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

Препринт
№ 83-162

Работа поступила - 2 декабря 1983 г.

Ответственный за выпуск - С.Г.Попов
Подписано к печати 15.12.83г. МН 03487
Формат бумаги 60x90 1/16 Усл. 3,4 печ.л., 2,8 учетно-изд.л.
Тираж 290 экз. Бесплатно. Заказ № 162
Ротапринт ИЯФ СО АН СССР, г.Новосибирск, 90