



ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СО АН СССР

60

Д.Л. Шепелянский

**ТЕОРИЯ  
ДИФфуЗИОННОГО ФОТОЭФФЕКТА  
В АТОМЕ ВОДОРОДА.**

2. Методика численных экспериментов
3. Одномерная модель атома водорода  
в монохроматическом поле

ПРЕПРИНТ 89-89



НОВОСИБИРСК

## 2. МЕТОДИКА ЧИСЛЕННЫХ ЭКСПЕРИМЕНТОВ

### § 2.1 МОДЕЛИРОВАНИЕ КЛАССИЧЕСКОЙ ДИНАМИКИ

Динамика классического электрона в атоме под действием линейно-поляризованного поля описывается гамильтонианом:

$$H = \frac{p^2}{2} - \frac{1}{r} + \epsilon z \cos \omega t. \quad (2.1.1)$$

Используются атомные единицы.

Для одномерных траекторий, вытянутых вдоль направления поля, движение определяется гамильтонианом одномерного атома:

$$H = \frac{p^2}{2} - \frac{1}{r} + \epsilon z \cos \omega t, \quad z \geq 0. \quad (2.1.2)$$

В этом случае траектория всегда проходит вблизи ядра, где ее скорость обращается в бесконечность. Для того, чтобы обойти эту особенность в численном моделировании, оказалось удобным перейти от невозмущенных переменных действие—фаза  $(n, \lambda)$  к новым переменным  $(n, \chi)$  и новому «времени»  $\sigma$ , определяемому параметрическим представлением для кеплеровского движения [1]. В этих переменных уравнения движения принимают вид (см. I, [33]):

$$\frac{dn}{d\sigma} = -\epsilon n^2 \cos \omega t \sin \chi,$$

$$\frac{d\chi}{d\sigma} = n^{-3} + 2\epsilon n \cos \omega t (1 - \cos \chi), \quad (2.1.3)$$

$$\frac{dt}{d\sigma} = 1 - \cos \chi, \quad \lambda = \chi - \sin \chi.$$

Эти уравнения уже не содержат никаких особенностей и численно интегрировались методом Рунге—Кутта. Начальное распределение классических траекторий в фазовом пространстве представляло собой линию:  $n=n_0$  и равномерное распределение по угловой переменной  $\lambda$ , что в точности соответствовало начальным условиям в квантовой одномерной модели атома (один уровень с  $n=n_0$ ). Полное число траекторий  $N$ , как правило, было равно 1000 или 250. В численных экспериментах находилась вероятность возбуждения  $W_{1.5}$  в состояния с  $n \geq 1.5n_0$ , функция распределения  $f(n)$  по действию (уровням) и определялась зависимость первого  $M_1 = \langle n - n_0 \rangle$  и второго  $M_2 = \langle (n - \langle n \rangle)^2 \rangle$  моментов распределения от числа периодов поля  $\tau = \omega t / 2\pi$ . Поскольку уравнения (2.1.3) описывают только финитное движение, то для траекторий, возбуждавшихся выше,  $n \approx 4n_0$  вводилось поглощение. Перемещение границы поглощения слабо сказывалось на вероятности возбуждения  $W_{1.5}$ . Проводилось также численное моделирование, при котором учитывался переход от финитного движения к инфинитному (см. ниже). Выбранная схема интегрирования для постоянного поля давала сохранение энергии с точностью лучше чем  $10^{-5}$ . Из уравнений (2.1.3) видно также, что классическая динамика зависит только от масштабных переменных  $\varepsilon_0 = \varepsilon n_0^4$ ,  $\omega_0 = \omega n_0^3$  и при их фиксированных значениях не зависит от  $n_0$ .

В силу аксиальной симметрии (2.1.1) проекция момента на направление поля  $m$  является точным интегралом движения (при  $m=0$  траектория все время лежит в одной плоскости). Для того, чтобы задать начальное распределение траекторий, соответствующее квантовому состоянию с заданными параболическими квантовыми числами, надо найти выражение для канонических фаз  $\lambda_1, \lambda_2$ , сопряженных с  $n_1, n_2$ . С этой целью перейдем к параболическим координатам

$$\begin{aligned} x &= (\xi\eta)^{1/2} \cos \varphi, \\ y &= (\xi\eta)^{1/2} \sin \varphi, \\ z &= (\xi - \eta)/2, \end{aligned} \quad (2.1.4)$$

в которых невозмущенный гамильтониан принимает вид

$$H = \frac{2\xi p_\xi^2}{\xi + \eta} + \frac{2\eta p_\eta^2}{\xi + \eta} + \frac{p_\varphi^2}{2\xi\eta} - \frac{2}{\xi + \eta}. \quad (2.1.5)$$

Переход к переменным действие—фаза  $(n_1, n_2, m, \lambda_1, \lambda_2, \varphi)$  получается путем деления переменных в уравнении Гамильтона—

Якоби [1]. Производящая функция для этого преобразования есть

$$S(n_1, n_2, m, \xi, \eta, \varphi) = \int_\xi p_\xi d\xi' + \int_\eta p_\eta d\eta' + m\varphi, \quad (2.1.6)$$

где канонические импульсы  $p_\xi, p_\eta, p_\varphi$  равны [1,2]:

$$\begin{aligned} p_\xi &= \left[ \frac{E}{2} + \frac{\beta_1}{\xi} - \frac{m^2}{4\xi^2} \right]^{1/2}, & \beta_{1,2} &= \frac{n_{1,2} + |m|/2}{n}, \\ p_\eta &= \left[ \frac{E}{2} + \frac{\beta_2}{\xi} - \frac{m^2}{4\eta^2} \right]^{1/2}, & n &= n_1 + n_2 + |m|, \\ p_\varphi &= m, & E &= -\frac{1}{2n^2}. \end{aligned} \quad (2.1.7)$$

Тогда фазы

$$\lambda_{1,2} = \frac{\partial S}{\partial n_{1,2}} \quad (2.1.8)$$

получаются путем дифференцирования (2.1.6) и дальнейшим интегрированием. Для упрощения удобно ввести фазы  $\chi_1, \chi_2$ , определяемые соотношением

$$\begin{aligned} \xi &= -2n^2\mu_1 \sin \chi_1 + 2n(n_1 + |m|/2), \\ \eta &= -2n^2\mu_2 \sin \chi_2 + 2n(n_2 + |m|/2), \end{aligned} \quad (2.1.9)$$

где параметры  $\mu_{1,2} = \left[ \frac{n_{1,2}(n - n_{2,1})}{n^2} \right]^{1/2}$ . В результате получаем

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= -\mu_1 \cos \chi_1 - \mu_2 \cos \chi_2 - \chi_1 + \pi/2, \\ \lambda_2 &= -\mu_1 \cos \chi_1 - \mu_2 \cos \chi_2 - \chi_2 + \pi/2. \end{aligned} \quad (2.1.10)$$

Из (2.1.9) следует выражение для  $z$ :

$$z = n^2(\mu_2 \sin \chi_2 - \mu_1 \sin \chi_1) + n(n_1 - n_2). \quad (2.1.11)$$

Отметим, что из (2.1.11) можно найти фурье-компоненты  $z_{k_1 k_2}$ , которые, согласно принципу соответствия [2], дают матричные элементы дипольных переходов между высоковозбужденными параболическими состояниями:

$$z_{k_1 k_2} = \int d\lambda_1 \int d\lambda_2 z \exp \{ -i(k_1 \lambda_1 + k_2 \lambda_2) \}, \quad (2.1.12)$$

где  $k_{1,2} = \Delta n_{1,2}$ . Подставляя в интеграл  $z$  в виде (2.1.11) и переходя к интегрированию по  $\chi_1, \chi_2$  из (2.1.10), получаем

$$z_{k_1, k_2} = n^2 \int_0^{2\pi} d\chi_1 \int_0^{2\pi} d\chi_2 D(\chi_1, \chi_2) (\mu_2 \sin \chi_2 - \mu_1 \sin \chi_1) \times \\ \times \exp\{-i(k_1 \lambda_1 + k_2 \lambda_2)\} + n(n_1 - n_2) \delta_{k_1, 0} \delta_{k_2, 0}, \quad (2.1.13)$$

где  $D(\chi_1, \chi_2) = 1 - \mu_1 \sin \chi_1 - \mu_2 \sin \chi_2$  — якобиан преобразования  $(\lambda_1, \lambda_2) \rightarrow (\chi_1, \chi_2)$ . После вычисления двойного интеграла находим выражение для матричных элементов перехода (см. I, [33, 37]):

$$z_{k_1, k_2} = \frac{n^2}{k_1 + k_2} [\mu_2 J_{k_1}(\mu_1(k_1 + k_2)) J'_{k_2}(\mu_2(k_1 + k_2)) - \\ - \mu_1 J'_{k_1}(\mu_1(k_1 + k_2)) J_{k_2}(\mu_2(k_1 + k_2))], \quad k_1 + k_2 \neq 0 \quad (2.1.14)$$

$$z_{k, -k} = \frac{3}{2} n(n_1 - n_2), \quad k=0; \quad z_{k, -k} = 0, \quad k \neq 0.$$

Элемент  $z_{00}$ , который есть просто среднее от  $z$ , дает стандартный квантовомеханический результат для линейного эффекта Штарка. Полученное выражение для матричных элементов будет использовано в дальнейшем.

Для того чтобы обойти особенность вблизи ядра при численном моделировании траекторий с  $m=0$ , запишем гамильтониан (2.1.1) в расширенном фазовом пространстве (см. I, [63]):

$$H' = \frac{2(\xi p_\xi^2 + \eta p_\eta^2)}{\xi + \eta} - \frac{2}{\xi + \eta} + I + \frac{\varepsilon}{2} (\xi - \eta) \cos \omega \theta = 0, \quad (2.1.15)$$

где фаза  $\theta = t$ , а сопряженное действие  $I = -H$ . Вводя новые канонические переменные  $q_1^2 = \xi$ ,  $q_2^2 = \eta$ ,  $p_1 = 2q_1 p_\xi$ ,  $p_2 = 2q_2 p_\eta$ , приходим к консервативному гамильтониану

$$\Gamma = \frac{p_1^2}{2} + \frac{p_2^2}{2} + I(q_1^2 + q_2^2) + \frac{\varepsilon}{2} (q_1^4 - q_2^4) \cos \omega \theta = 2. \quad (2.1.16)$$

В отсутствие поля переменные разделяются и  $\Gamma$  представляет собой сумму двух осцилляторных гамильтонианов, действия которых соответствуют параболическим квантовым числам  $n_1$  и  $n_2$ :

$$q_{1,2} = 2\sqrt{nn_{1,2}} \sin\left(\frac{\chi_{1,2}}{2} - \frac{\pi}{4}\right), \quad p_{1,2} = 2\sqrt{\frac{n_{1,2}}{n}} \cos\left(\frac{\chi_{1,2}}{2} - \frac{\pi}{4}\right). \quad (2.1.17)$$

Полученный гамильтониан (2.1.16) уже не имеет особенностей и описывает как финитное ( $I > 0$ ), так и инфинитное ( $I < 0$ ) движение. Начальное распределение траекторий было равномерно по  $\lambda_1$ ,

$\lambda_2$  (по данным  $\lambda_{1,2}$  из (2.1.10), (2.1.17) находились  $\chi_{1,2}$ ). Полное число траекторий  $N=900$ . При интегрировании точность сохранения интеграла  $\Gamma$  составляла  $10^{-3} - 10^{-7}$  и не влияла на характеристики движения.

Отметим, что при большом удалении траектории от ядра, например, при инфинитном движении, для подавления ошибок интегрирования удобно переходить от гамильтониана (2.1.16) обратно к (2.1.1) и декартовым координатам. Из (2.1.16) при  $q_2 = p_2 = 0$  получаются уравнения для одномерной модели применимые и при инфинитном движении.

## § 2.2. КВАНТОВАЯ ДИНАМИКА В НЕВОЗМУЩЕННОМ БАЗИСЕ

Исследование квантовой динамики одномерной модели атома (2.1.2) проводилось в невозмущенном и штурмовском (§ 2.3) базисах. В первом случае решались уравнения для амплитуд вероятности  $C_n$  на дискретных уровнях:

$$i\dot{C}_n = -\frac{1}{2n^2} C_n + \varepsilon(t) \sum_{n'=n_{\min}}^{n_{\max}} z_{nn'} C_{n'}. \quad (2.2.1)$$

Величина  $n_{\min}$  была, как правило, приблизительно на 20—50 уровней меньше, чем номер начально возбужденного уровня  $n_0$ . Дальнейшее уменьшение не сказывалось на динамике системы из-за экспоненциального убывания распределения  $f(n) = |C_n|^2$  в области  $n < n_0$ , где классическое движение является устойчивым (см. § 3.1). Типичное значение полного числа уровней, для которого решались уравнения (2.2.1), было равно  $ND = n_{\max} - n_{\min} = 192$ . В ряде случаев, при  $n \geq 200$ , величина  $ND$  увеличивалась и в максимуме достигала 576.

При численном решении уравнений (2.1.1) зависимость поля от времени аппроксимировалась выражением

$$\varepsilon(t) = \Delta t \varepsilon \cos \omega t \sum_k \delta(t - k\Delta t) \quad \text{с} \quad \Delta t = \frac{2\pi}{\omega L},$$

где  $L$  — число шагов интегрирования на одном периоде поля. Такая схема интегрирования физически эквивалентна введению дополнительных полей с частотами  $\omega_k = kL\omega$ ,  $k=1, 2, \dots$ . Поскольку в численных экспериментах  $\omega \sim 1/n_0^3$ , а число шагов менялось между 100 и 500, то даже частота  $\omega_1 \approx 100\omega$  была значительно больше, чем все частоты переходов между невозмущенными уровнями.

Вследствие этого, влияние дополнительных частот было малым.

Выбранная аппроксимация поля допускает точное интегрирование:

$$C(t + \Delta t) = T \exp[-i\varepsilon(\cos \omega t_k) \Delta t z] C(t) = T Q Z Q^{-1} C(t), \quad (2.2.2)$$

где  $T$  и  $Z$  — унитарные диагональные матрицы, с  $T_{nn} = \exp(i\Delta t/2n^2)$  и  $Z_{nn} = \exp(-i\varepsilon \cos \omega t_k \Delta t z_n)$ ,  $z_n$  — собственные значения матрицы  $z_{nm}$ , а  $Q$  — унитарная матрица, приводящая матрицу  $z_{nm}$  к диагональному виду. При такой схеме интегрирования полная вероят-

ность  $W = \sum_{n_{\min}}^{n_{\max}} |C_n|^2 = 1$  сохранялась с очень высокой точностью ( $\sim 10^{-7}$ ). Другой способ вычисления оператора эволюции, использовавшийся ранее в [33, 34] (см. I), состоял в разложении  $\exp(-i\Delta t \varepsilon z \cos \omega t_k)$  по степеням  $\Delta t$  (до 5-го порядка), что приводило к эффективному затуханию на высоких уровнях и более сильному несохранению нормировки ( $\sim 10^{-3}$ ). Кроме того, метод интегрирования (2.2.2) оказывается значительно более эффективным, так как он позволяет существенно сократить число шагов  $L$  на одном периоде.

Однако, при численном моделировании квантовой динамики в двумерном случае ( $m=0$ ), разложение оператора эволюции по степеням  $\Delta t$  оказывается намного более эффективным и, по-видимому, единственно приемлемым. Действительно, в этом случае уравнения для амплитуд в невозмущенном сферическом базисе  $n, l$  имеют вид

$$i\dot{C}_{nl} = -\frac{1}{2n^2} C_{nl} + \varepsilon(t) \sum_{n'l'} z_{nl}^{n'l'} C_{n'l'}, \quad (2.2.3)$$

где  $z_{nl}^{n'l'}$  — дипольные матричные элементы [3]. Преимущество этого базиса состоит в том, что в нем имеет место правило отбора по орбитальному моменту  $l' = l \mp 1$ . Распределение вероятностей по параболическим числам  $n_1, n_2$  получалось пересчетом из  $C_{nl}$  по коэффициентам Клебша-Гордана [2]. Суммирование по  $n$  проводилось до  $n=128$ . При этом учитывались все значения  $l$ , вследствие чего размерность базиса составляла  $n^2/2 \sim 10^4$ . Поэтому вычисления в двумерной квантовой модели были существенно более трудоемкими, чем в одномерной, и число периодов поля было ограничено относительно небольшим значением  $\tau=120$ . В процессе вычислений находилось распределение вероятностей в параболическом базисе  $F(n, n_2)$  ( $n_2 = n - n_1 - 1$ ) и по главному квантовому числу

$f(n) = \sum_{n_2} F(n_1 n_2)$ . Определялась также вероятность возбуждения

$W_{1.5}$  в состояния с  $n > 1.5n_0$  и находилась зависимость двух первых моментов распределения  $\langle n - n_0 \rangle$ ,  $\langle (n - \langle n \rangle)^2 \rangle$ ,  $\mu_1 = \langle n_2 - n_{20} \rangle$ ,  $\mu_2 = \langle (n_2 - \langle n_2 \rangle)^2 \rangle$  от времени. Для подавления флуктуаций распределение  $f(n)$  усреднялось по времени. Интервал усреднения, как правило, был равен 10 периодам.

### § 2.3. ШТУРМОВСКИЙ БАЗИС

Основной недостаток описанной выше схемы интегрирования заключается в том, что она совершенно не учитывает непрерывный спектр. И хотя имеется ряд соображений в пользу того, что влияние континуума несущественно (см. § 3.2, § 3.8), тем не менее важно иметь численную модель, свободную от этого недостатка.

Частичный учет переходов в континуум был сделан в [4]. Однако, при этом совершенно не учитывались переходы внутри континуума, которые, вообще говоря, не малы по сравнению с переходами из дискретного спектра в континуум и обратно. Кроме того, число решаемых уравнений резко возрастает с увеличением начально возбужденного уровня  $n_0$ , что сильно затрудняет исследование состояний с  $n_0 \geq 60$ . В [5] для учета континуума использовался метод комплексного вращения координат. Этот метод, однако, всегда завышает вероятность ионизации, а контроль этого завышения недостаточно эффективен.

Более эффективный учет континуума может быть получен в штурмовском базисе (см. I, [11, 37]). Для введения этого базиса рассмотрим уравнение на собственные значения в одномерной модели атома:

$$-\frac{1}{2} \frac{d^2 u}{dz^2} - \frac{\beta}{z} u = E u, \quad z > 0, \quad E < 0, \quad \beta > 0. \quad (2.3.1)$$

Для  $\beta=1$  это есть просто уравнение Шредингера для стационарных состояний. Переходя к переменным  $\xi = 2z$ ,  $u(z) = (\xi/2)^{1/2} v(\xi)$ , получаем

$$S_E v = \frac{d}{d\xi} \left( \xi \frac{dv}{d\xi} \right) + \left( \frac{E}{2} \xi - \frac{1}{4\xi} \right) v = -\beta v. \quad (2.3.2)$$

Штурмовский базис получается из (2.3.2), если рассматривать  $-\beta$  как собственное значение оператора  $S_E$ , а  $E < 0$  как произвольный фиксированный параметр. Если же в (2.3.2) рассматривать  $\beta$  как

параметр, а  $E$  как собственное значение, то получим обычный базис, включая функции непрерывного спектра.

Оператор  $S_E$  является самосопряженным и имеет чисто дискретный спектр  $\beta_s = (s+1)(-2E)^{1/2}$  с целыми  $s \geq 0$  [2]. Собственные функции  $S_E$  имеют вид

$$f_s(\xi) = [(s+1)(-2E)^{1/2} F(-s, 2, \xi(-2E)^{1/2}) (\xi(-2E)^{1/2})^{1/2} \times \\ \times \exp\left[-\frac{\xi}{2}(-2E)^{1/2}\right] \quad (2.3.3)$$

и удовлетворяют условию ортогональности:

$$\int_0^{\infty} d\xi f_s(\xi) f_{s'}(\xi) = \delta_{s,s'}$$

Здесь и ниже  $F$  с тремя переменными обозначает вырожденную гипергеометрическую функцию. В дальнейшем выберем  $E = -1/2n_0^2$ , где  $n_0$  — начально возбужденный уровень. Тогда с точностью до нормировочной константы  $z^{1/2} f_{n_0-1}(2z)$  есть собственная функция невозмущенного уровня  $n_0$ .

В дальнейшем нам потребуются матричные элементы  $\xi$  и  $\xi^2$ . Для  $\xi^2$  эти элементы приведены в [2], где они используются при вычислении квадратичного эффекта Штарка. Матричные элементы  $\xi$  получаются прямым вычислением. Отличные от нуля элементы равны:

$$\begin{aligned} \xi_{s,s} &= 2n_0(s+1), \\ \xi_{s-1,s} &= \xi_{s,s-1} = -n_0[s(s+1)]^{1/2}, \\ (\xi^2)_{s,s} &= 6n_0^2(s+1)^2, \\ (\xi^2)_{s,s-1} &= (\xi^2)_{s-1,s} = -2n_0^2(2s+1)[s(s+1)]^{1/2}, \\ (\xi^2)_{s,s-2} &= (\xi^2)_{s-2,s} = n_0^2s(s^2-1)^{1/2}. \end{aligned} \quad (2.3.4)$$

Пусть теперь  $\varphi(t) = \sqrt{z} \psi(t)$  будет решением уравнения Шредингера с гамильтонианом (2.1.2) и  $z = \xi/2$ . Тогда

$$\frac{1}{4} \int_0^{\infty} \xi |\psi|^2 d\xi = 1.$$

Так как  $f_s$  образуют полный набор, то  $\psi$  может быть представлена в виде

$$\psi(t) = \sum_{s=0}^{\infty} A_s(t) e^{iE_0 t} f_s \quad \text{с } E_0 = -1/2n_0^2 \quad \text{и } \psi(0) = \frac{\sqrt{2}}{n_0} f_{n_0-1},$$

что соответствует начально возбужденному уровню  $n_0$ . Используя условия ортогональности для  $f_s$  и выражение для матричных элементов (2.3.4), из уравнения Шредингера получаем уравнения для амплитуд  $A_s(t)$ :

$$\begin{aligned} 2(s+1)A_s - [s(s+1)]^{1/2} A_{s-1} - [(s+1)(s+2)]^{1/2} A_{s+1} = \\ = -i \left\{ [2(s+1-n_0)/n_0^2] A_s + 3\varepsilon(t)n_0(s+1)^2 A_s - \right. \\ \left. - \varepsilon(t)n_0[(2s+1)(s(s+1))]^{1/2} A_{s-1} + (2s+3)((s+1)(s+2))^{1/2} A_{s+1} \right\} + \\ + \frac{n_0}{2} \varepsilon(t) [s(s^2-1)]^{1/2} A_{s-2} + (s+2)((s+2)^2-1)^{1/2} A_{s+2} \}. \quad (2.3.5) \end{aligned}$$

Эта бесконечная система уравнений является точной, и, хотя в ней используется только дискретный базис, она точно учитывает влияние континуума. Это происходит вследствие того, что каждое штурмовское состояние является суперпозицией дискретных и непрерывных функций невозмущенного базиса.

По известным  $A_s$  амплитуды вероятности  $C_n$ , для разложения  $\varphi(t)$  по невозмущенному базису

$$u_n = 2zn^{-3/2} e^{-z/n} F\left(-n+1, 2, \frac{2z}{n}\right),$$

могут быть получены из соотношения  $C_n(t) = \sum_s B_{ns} A_s(t)$ , где матрица перехода  $B_{ns}$  от штурмовского базиса к невозмущенному имеет вид

$$\begin{aligned} B_{ns} &= \frac{1}{2} \int_0^{\infty} d\xi \left(\frac{\xi}{2}\right)^{1/2} f_s(\xi) u_n\left(\frac{\xi}{2}\right) = \\ &= 4(s+1-n_0) [2(s+1)n]^{1/2} (n_0-n)^{s+n-2} (n_0n)^2 (-1)^n (n_0+n)^{-s-n-2} \times \\ &\times F(-s, -n+1, 2, -4n_0n/(n-n_0)^2). \quad (2.3.6) \end{aligned}$$

Здесь  $F$  — гипергеометрическая функция. Матрица перехода в непрерывный спектр получается путем замены  $n$  на  $i/p$ , где  $p$  — импульс электрона (аналогичный метод использовался, например, в [6]).

При вычислении гиперфункции в (2.3.6) при  $n \sim s \sim 100$  возни-

кает следующая трудность. Прямое разложение  $F$  в ряд по параметру  $-4nn_0/(n-n_0)^2$  не позволяет получить правильные значения  $F$  из-за сильных сокращений членов ряда между собой и ошибок округления в компьютере (при этом не помогает даже двойная точность). Поэтому был использован другой метод основанный на рекуррентном соотношении (см, например, [7]) между тремя последовательными значениями  $F$  для  $s-1, s, s+1$ .

Брались два значения  $F(-s, -n+1, 2z)$  для  $s=0, s=1$ , ( $F(s=0)=1, F(s=1)=1+(n-1)z/2$ ) и затем рекуррентно определялись все значения  $f_s$  до  $s=n_s \approx n$ . Так как  $F_s$  экспоненциально растет от  $s=0$  до  $s \approx n$ , а затем экспоненциально затухает при  $s \rightarrow \infty$ , то эта процедура дает правильные значения  $F_s$  только до  $s=n_s$ , а дальше происходит быстрое нарастание ошибок округления. Чтобы вычислить  $F_s$  в интервале  $n < s < s_{\max}$  брались два произвольных значения  $F_m, F_{m+1}$  с  $m \gg s_{\max}$  (например,  $m \approx 5s_{\max}$ ), а затем рекуррентно вычислялись значения  $F_s$  вплоть до  $n_s-10$ . При этом происходило экспоненциальное затухание всех ошибок, в результате чего получались правильные значения  $F_s$  ( $n_s-10 \leq s \leq s_{\max}$ ) с точностью до нормировочной константы  $C_F$ . Последняя определялась из сравнения с ранее вычисленными значениями  $F_s$  при  $s < n_s$ . Разница в значениях  $C_F$ , получаемая при сравнении с разными  $F_s$  при  $s < n_s$ , была меньше чем  $10^{-10}$ , что служило подтверждением правильности метода. После деления на этот постоянный множитель получались очень точные значения для всех  $F_s$  с  $0 < s < s_{\max}$ , которые, конечно, не зависели от начальных произвольных значений  $F_m, F_{m+1}$ . Дополнительная проверка состояла в сравнении результатов, полученных таким способом и методом прямого разложения в ряд, в тех областях, где работают оба метода (например, при  $s \approx n \approx 30$ ).

Численное интегрирование уравнений (2.3.5) проводилось следующим образом. Начально возбуждался один уровень с  $s_0 = n_0 - 1$ , так что  $A_s(0) = \frac{\sqrt{2}}{n_0} \delta_{s, n_0-1}$ . Затем уравнения (2.3.5) решались численно для  $s_{\min} < s < s_{\max}$ . Как правило,  $s_{\min} \approx 10 \div 30$ , а полное число штурмовских уровней  $NS$  менялось от 256 до 576. Зависимость поля от времени выбиралась такой же, как и для невозмущенного базиса (§2.2) приблизительно с тем же числом шагов на периоде:  $100 \leq L \leq 500$ . Как и в §2.2 в этом случае интегрирование выполняется точно и сводится к умножению матрицы на вектор. При этом нормировка сохраняется с точностью  $\sim 10^{-7}$ . В отличие от дискретного базиса, частоты  $\omega_k = kL\omega$  приво-

дят к прямым переходам в континуум, однако, для использованных значений  $L$  вероятность таких переходов была пренебрежимо мала. Так, например, для  $n_0=60, \omega_0=1, \varepsilon_0=0.1, L=100$  получаем  $\omega_1 n_0^3 = 100$  и отношение однофотонной скорости ионизации (3.6.4) к диффузионной (3.2.4) оказывается порядка  $5 \cdot 10^{-4}$ . Таким образом, маленькие  $\delta$ -функциональные толчки, возникающие при численном интегрировании монохроматического возмущения, не оказывают никакого влияния на физику задачи. Кроме того, их влияние может быть проконтролировано путем изменения шага интегрирования.

Следует отметить, что монохроматичность возмущения существенна и поэтому замена  $\cos \omega t$  на дельта-функцию  $\sum_k \delta\left(t - \frac{2\pi k}{\omega}\right)$  [8,

9] меняет физическую картину многофотонного возбуждения. Роль многофотонных переходов в двумерной модели с  $\delta$ -функциональным возмущением изучалась в [8].

При численном интегрировании (2.3.5) по полученным значениям  $A_s$  с помощью матрицы перехода  $B_{ns}$  (2.3.6) находились амплитуды  $C_n$  в невозмущенном базисе, приблизительно для 200 нижних уровней. Поскольку полная вероятность сохранялась с большой точностью, то по найденным  $C_n$  определялась вероятность возбуждения выше некоторого уровня, которая включала в себя вероятность нахождения электрона в континууме. Так, например, вероятность  $W_{1.5}$  включала вероятность на дискретных уровнях с  $n > 1.5n_0$  и во всем непрерывном спектре. В процессе интегрирования находилось распределение вероятностей по уровням  $f(n) = |C_n|^2$ , первые два момента распределения, среднее расстояние между электроном и ядром. Для подавления флуктуаций  $f(n)$  усреднялось по  $\Delta t$  периодам поля. Как правило,  $\Delta t$  было равно 40 или 60.

Точность численных результатов проверялась следующим образом. Во-первых, для проверки того, что штурмовский базис действительно позволяет правильно учесть непрерывный спектр, была проведена серия численных экспериментов с частотой, большей чем энергия ионизации  $\omega_0 > n_0/2$ . Ввиду отсутствия резонансов в дискретном спектре вероятность на дискретных уровнях с  $n > 1.5n_0$  была пренебрежимо мала и поэтому вероятность ионизации  $W_i \approx W_{1.5}$ . Пример зависимости  $W_i$  от времени представлен на рис. 1. На рис. 2 дано сравнение теоретической скорости однофотонной ионизации (3.6.5) с данными численных экспериментов.

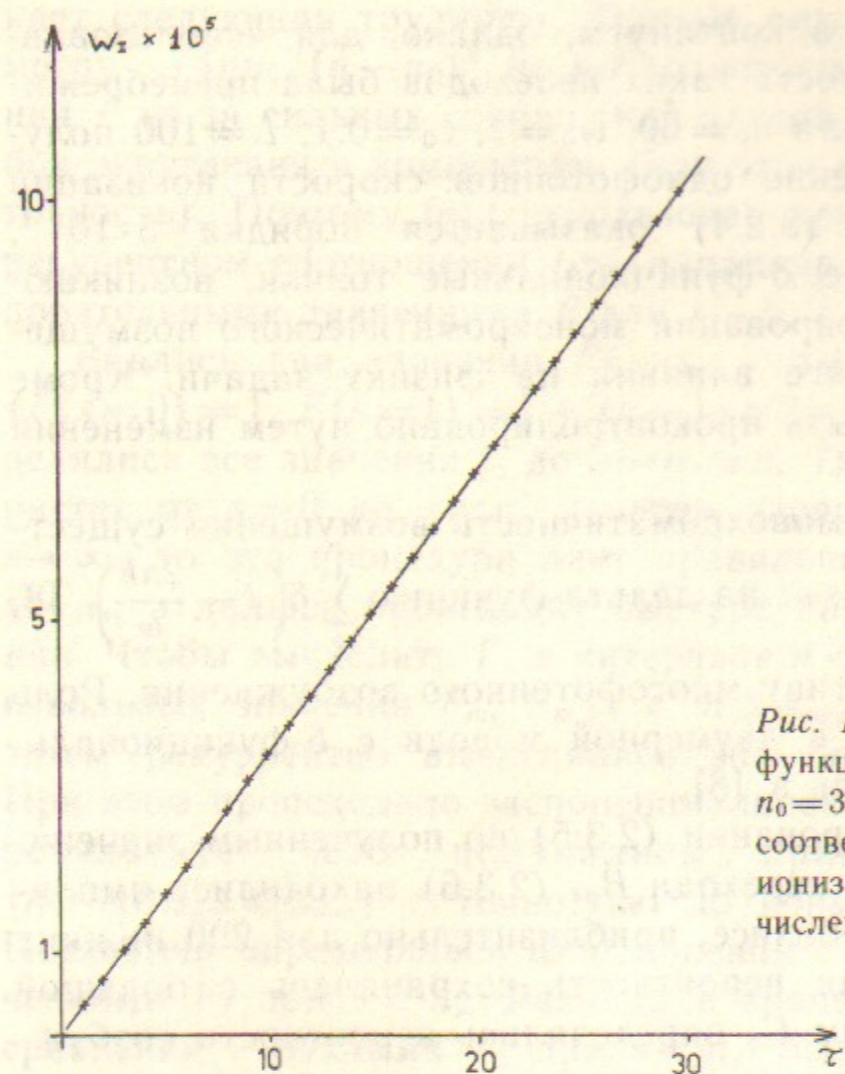


Рис. 1. Вероятность ионизации  $W_I$  как функция числа периодов поля  $\tau$  для  $n_0=30$ ,  $\omega_0=30$ ,  $\epsilon_0=0.075$ . Прямая соответствует теоретической скорости ионизации (3.6.5), крестики — данные численного моделирования в штормовском базисе.

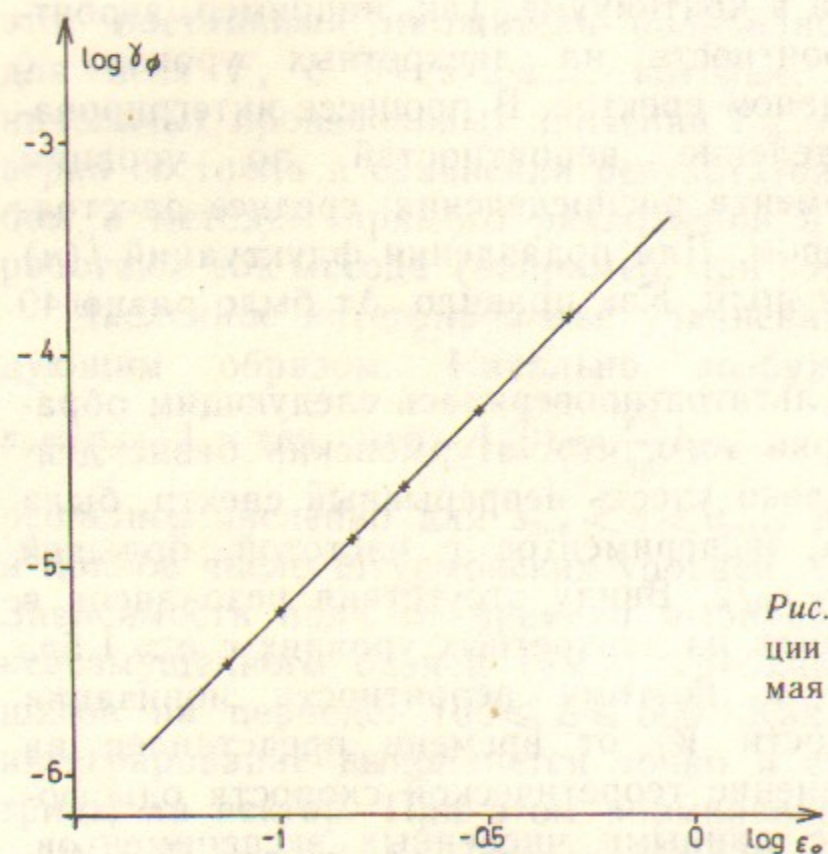


Рис. 2. Зависимость скорости ионизации от поля для  $n_0=30$ ,  $\omega_0=30$ . Прямая — теоретическая формула (3.6.5), крестики — численные данные.

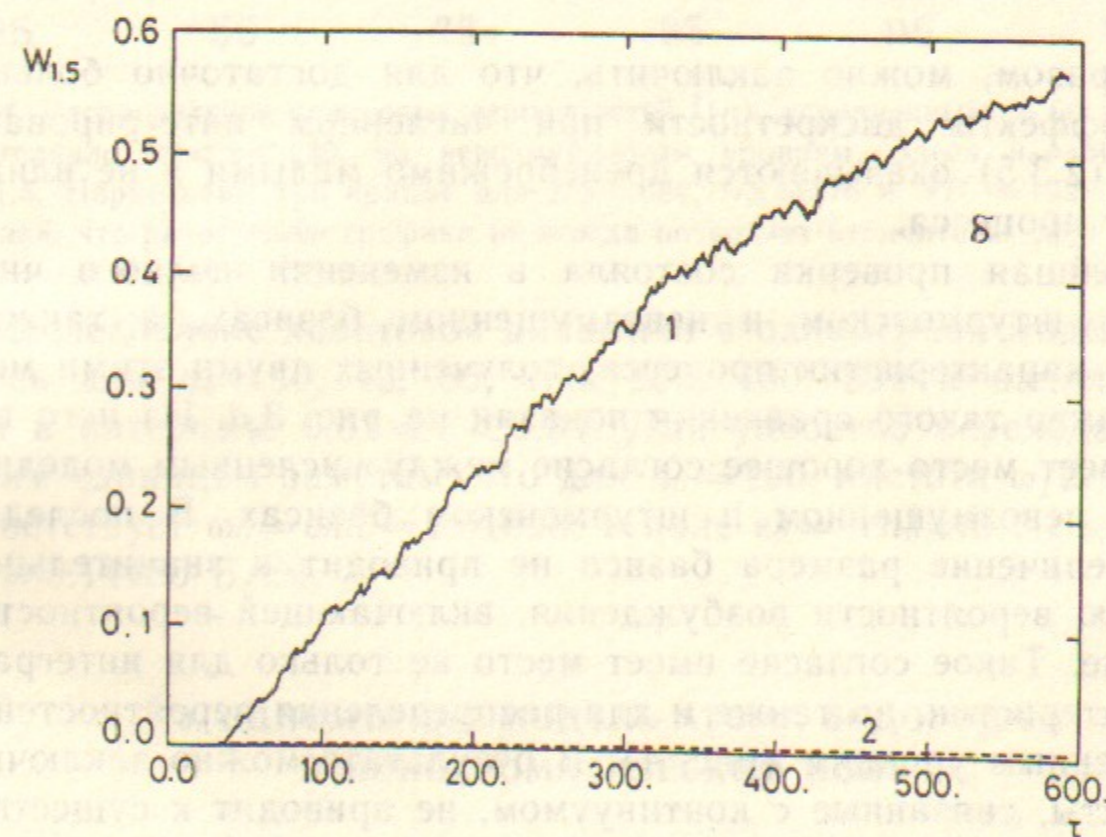
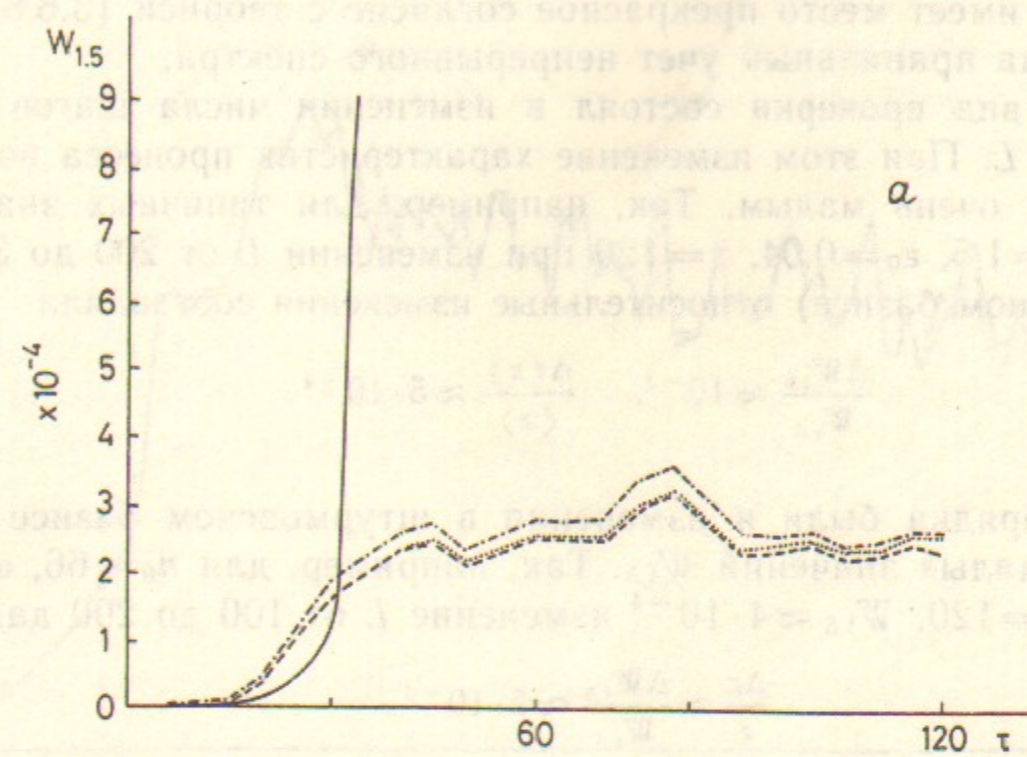


Рис. 3. а — Зависимость вероятности возбуждения  $W_{1.5}$  от  $\tau$  для  $n_0=66$ ,  $\epsilon_0=0.04$ ,  $\omega_0=2.5$ . Численное моделирование квантовой динамики проводилось в невозмущенном базисе с числом состояний  $ND=192$  (— · — · —); в штормовском базисе с числом уровней  $NS=384$  (...); в штормовском базисе с  $NS=576$  (— — —). б — Классическая (1) и квантовая (2) вероятности возбуждения  $W_{1.5}$  как функции времени.



Как видно, имеет место прекрасное согласие с теорией (3.6.5), что указывает на правильный учет непрерывного спектра.

Другой вид проверки состоял в изменении числа шагов интегрирования  $L$ . При этом изменение характеристик процесса возбуждения было очень малым. Так, например, для типичных значений  $n_0=66$ ,  $\omega_0=1.5$ ,  $\varepsilon_0=0.04$ ,  $\tau=120$  при изменении  $L$  от 200 до 300 (в невозмущенном базисе) относительные изменения составляли

$$\frac{\Delta W_{1.5}}{W_{1.5}} \approx 10^{-3}, \quad \frac{\Delta \langle z \rangle}{\langle z \rangle} \approx 5 \cdot 10^{-4}.$$

Того же порядка были и изменения в штурмовском базисе даже для более малых значений  $W_{1.5}$ . Так, например, для  $n_0=66$ ,  $\omega_0=2$ ,  $\varepsilon_0=0.03$ ,  $\tau=120$ ,  $W_{1.5} \approx 4 \cdot 10^{-4}$  изменение  $L$  от 100 до 200 давало

$$\frac{\Delta z}{z} \approx \frac{\Delta W_{1.5}}{W_{1.5}} \approx 5 \cdot 10^{-3}.$$

Таким образом, можно заключить, что для достаточно больших  $L \geq 100$  эффекты дискретности при численном интегрировании (2.2.1) и (2.3.5) оказываются пренебрежимо малыми и не влияют на физику процесса.

Дальнейшая проверка состояла в изменении полного числа уровней в штурмовском и невозмущенном базисах, а также в сравнении характеристик процесса, полученных двумя этими методами. Пример такого сравнения показан на рис. 3,а. Из него видно, что имеет место хорошее согласие между численным моделированием в невозмущенном и штурмовском базисах. В последнем случае увеличение размера базиса не приводит к значительному увеличению вероятности возбуждения, включающей вероятность в континууме. Такое согласие имеет место не только для интегральных характеристик, но также и для распределения вероятностей по невозмущенным уровням (рис. 4). В результате можно заключить, что эффекты, связанные с континуумом, не приводят к существенным изменениям в процессе возбуждения, во всяком случае при не слишком сильных полях и высоких частотах. Кроме того использованный штурмовский базис был достаточно большим и позволял провести правильное моделирование квантовой динамики с учетом континуума. Отметим также, что согласие между классическими и квантовыми величинами, которое наблюдалось в области делокализации (§ 3.5, 3.7) и при  $\tau < \tau_D$ , служит еще одним подтверждением правильности использованных численных методов.

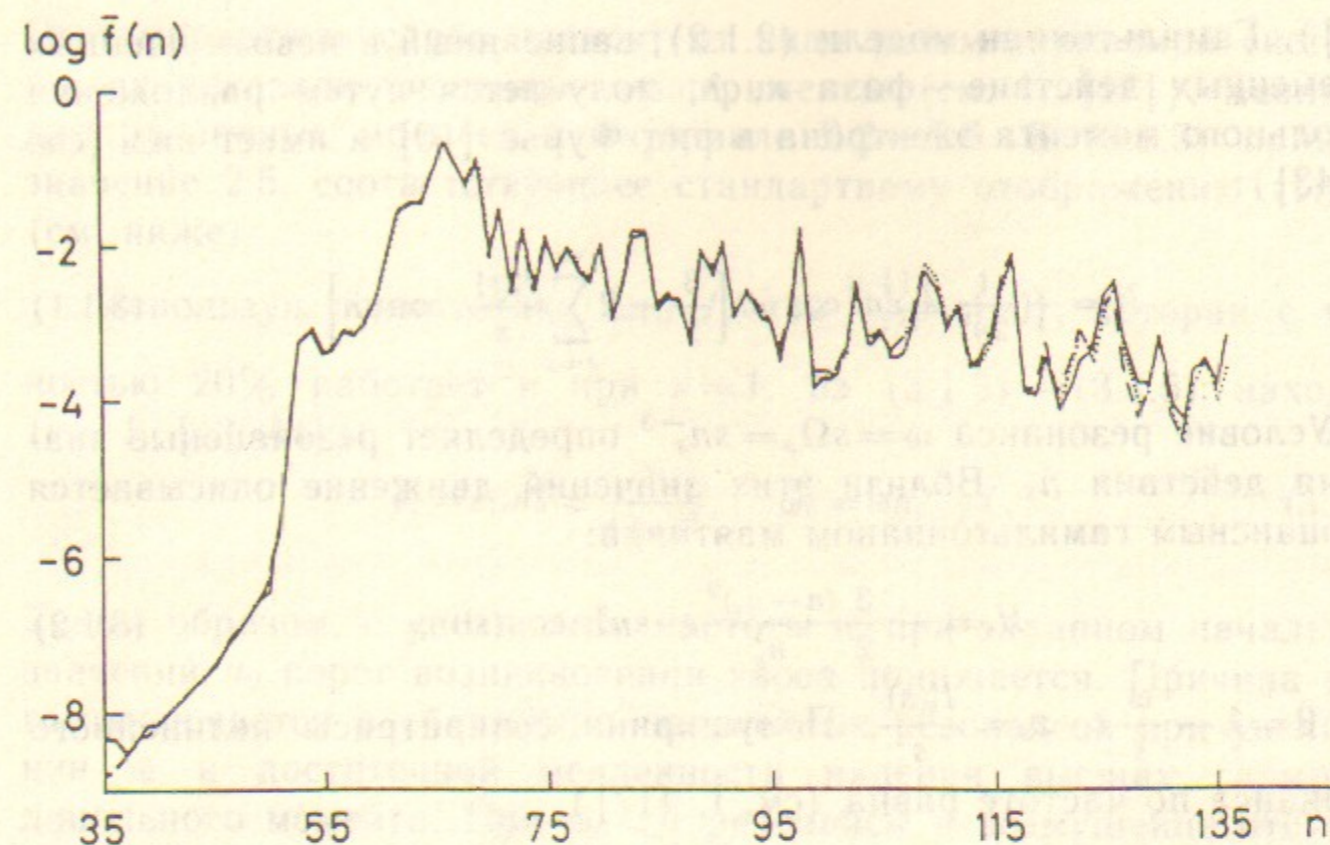


Рис. 4. Распределение квантовых вероятностей  $\bar{f}(n)$ , усредненных по 60 значениям  $\tau$  в интервале  $60 < \tau < 120$ , по невозмущенным уровням. Здесь  $n_0=66$ ,  $\varepsilon_0=0.04$ ,  $\omega_0=1.5$ . Нарисованы три кривые для  $NS=384$ ,  $NS=576$  и  $ND=192$ . Кривые так близки, что разрешение графика не всегда позволяет отличить их друг от друга.

Исследование квантовой динамики в одномерной модели проводилось для  $n_0=30, 45, 66, 100, 200, 400, 500$  и напряженности поля в интервале  $0.01 < \varepsilon < 0.34$ . Для удобства перехода к физическим единицам заметим, что для  $n_0=100$ , частота  $\omega/2\pi=10$  Гц соответствует  $\omega_0=\omega n_0^3=1.51998$ , а поле  $\varepsilon_0=\varepsilon n_0^4=0.1$  соответствует  $\varepsilon=5.14485$  В/см.

### 3. ОДНОМЕРНАЯ МОДЕЛЬ АТОМА ВОДОРОДА В МОНОХРОМАТИЧЕСКОМ ПОЛЕ

#### § 3.1. КЛАССИЧЕСКАЯ ДИНАМИКА И ОТОБРАЖЕНИЕ КЕПЛЕРА

Из формулы для дипольных матричных элементов в параболическом базисе (2.1.14) видно, что для состояний в которых  $m \sim 1$ , а, например,  $n_2 \ll n_1$  вероятность перехода с  $\Delta n_2=1$  в  $\sim (n_2/n)^2$  раз меньше, чем для  $\Delta n_1=1$ . Вследствие этого динамику возбуждения из таких состояний в течение некоторого времени можно приближенно описывать одномерной моделью атома (2.1.2) (см. I,

[33]). Гамильтониан модели (2.1.2), записанный в невозмущенных переменных действие — фаза  $n, \lambda$ , получается путем разложения дипольного момента электрона в ряд Фурье [10] и имеет вид (см. I, [43]):

$$H = -\frac{1}{2n^2} + \varepsilon n^2 \cos \omega t \left[ \frac{3}{2} - 2 \sum_{s=1}^{\infty} \frac{J'_s(s)}{s} \cos s\lambda \right]. \quad (3.1.1)$$

Условие резонанса  $\omega = s\Omega_s = sn_s^{-3}$  определяет резонансные значения действия  $n_s$ . Вблизи этих значений движение описывается резонансным гамильтонианом маятника:

$$H_s = -\frac{3}{2} \frac{(n-n_s)^2}{n_s^4} - \varepsilon n_s^2 z_s \cos(s\theta), \quad (3.1.2)$$

где  $\theta = \lambda - \frac{\omega}{s}t$ ,  $z_s = \frac{J'_s(s)}{s}$ . Полуширина сепаратрисы нелинейного резонанса по частоте равна (см. I, [17])

$$\Delta\Omega_s = \frac{2}{n_s} (3\varepsilon z_s)^{1/2}. \quad (3.1.3)$$

Определим теперь критическую напряженность поля  $\varepsilon_{cr}$ , при которой происходит перекрытие  $s$  и  $s+1$  резонансов и начинаются хаотические блуждания электрона. Введем параметр, характеризующий степень перекрытия резонансов:

$$S = \frac{\Delta\Omega_s + \Delta\Omega_{s+1}}{\Omega_s - \Omega_{s+1}}. \quad (3.1.4)$$

При  $S \ll 1$  влиянием соседних резонансов можно пренебречь, и ограниченные колебания электрона могут быть описаны в приближении одного изолированного резонанса (3.1.2). Значение  $S=1$  соответствует касанию сепаратрис невозмущенных резонансов. Согласно критерию перекрытия резонансов (см. I, [17, 67]) траектория начинает случайно переходить из одного резонанса в другой при выполнении условия

$$K \approx 2.5S^2 = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_{cr}} > 1. \quad (3.1.5)$$

Здесь полуэмпирический численный множитель учитывает резонансы высших гармоник, искажение невозмущенных сепаратрис под действием соседних резонансов, а также конечную ширину хаотического слоя, возникающего вблизи невозмущенной сепаратрисы.

Этот множитель слабо зависит от вида рассматриваемой системы и, как показали численные эксперименты (см. I, [17]), меняется для различных моделей в интервале 2.2—2.5. В (3.1.5) принято значение 2.5, соответствующее стандартному отображению (1.1.5) (см. ниже).

Используя асимптотику для  $J'_s(s) \approx \frac{0.411}{s^{2/3}}$  [10], которая с точностью 20% работает и при  $s=1$ , из (3.1.3) — (3.1.5) находим (см. I, [43, 44]):

$$\varepsilon_c = \varepsilon_{cr} n_0^4 \approx \frac{1}{49\omega_0^{1/3}}, \quad \omega_0 = \omega n_0^3 \geq 1. \quad (3.1.6)$$

Таким образом, с увеличением частоты  $\omega$  при заданном начальном значении  $n_0$  порог возникновения хаоса понижается. Причина этого заключается в сближении нелинейных резонансов при увеличении  $\omega$  и достаточной медленности падения высших гармоник дипольного момента. При  $\omega_0 < 1$  резонансы в возмущении отсутствуют. Поэтому в этой области хаотическое возбуждение может иметь место либо из-за попадания траектории в область (3.1.3) лежащего выше резонанса с  $s=1$ , либо из-за перекрытия высших резонансных гармоник в достаточно сильном поле.

Следует отметить, что одномерная модель описывает также возбуждение левитирующих электронов (электроны над поверхностью жидкого гелия [11]) в микроволновом поле [12]. После перехода к соответствующим единицам для нее получается то же значение критического поля (3.1.6) [13].

Другой подход к исследованию динамики одномерной модели (2.1.2) основан на выводе отображения для канонических переменных за один оборот электрона вокруг ядра. Как будет видно, это отображение имеет довольно простой вид и позволяет понять ряд особенностей классического движения. Для вывода отображения проинтегрируем уравнения (2.1.3) на одном обороте электрона вокруг ядра: от афелия до афелия ( $\chi = \pm\pi$ ). Поскольку нам достаточно найти изменение  $\Delta n$  только в первом порядке по  $\varepsilon$ , то в последних двух уравнениях (2.1.3) можно положить  $\varepsilon=0$ . Тогда  $\sigma = \chi n^3$ ,  $\omega t = \omega n^3(\chi - \sin\chi) + \Phi$ , где  $\Phi = \omega t|_{\chi=0}$  — фаза поля в момент прохождения электрона через перигелий  $\chi=0$ . В результате интегрирования получаем

$$\begin{aligned} \Delta n &= -\epsilon n^5 \int_{-\pi}^{\pi} \cos(\kappa(\chi - \sin \chi) + \Phi) \sin \chi d\chi = \\ &= 2\pi \epsilon n^5 J'_\kappa(\kappa) \sin \Phi \quad (\kappa = \omega n^3), \end{aligned} \quad (3.1.7)$$

где  $J'_\kappa(\kappa) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \sin(\kappa(\chi - \sin \chi)) \sin \chi d\chi$  — производная от так называемой функции Ангера [7]. Оказывается удобным ввести переменную  $N = \frac{E}{\omega} = -\frac{1}{2\omega n^3}$ , изменение которой в квантовом случае дает число поглощенных или испущенных фотонов. Из (3.1.7) следует

$$\Delta N \approx \frac{\Delta n}{\omega n^3} = \frac{2\pi \epsilon n^2}{\omega} J'_\kappa(\kappa) \sin \Phi. \quad (3.1.8)$$

Используя то, что для целых  $\kappa$  функция Ангера совпадает с функцией Бесселя, а для  $\kappa \gg 1$  имеет такое же асимптотическое поведение, введем

$$A(\kappa) = \frac{\kappa^{2/3} J'_\kappa(\kappa)}{0.411}. \quad (3.1.9)$$

Тогда  $A(\kappa) = 1$ , для  $\kappa \gg 1$  (см. приведенную выше асимптотику  $J'_s(s)$ ), а при  $\kappa \rightarrow 0$  имеем  $J'_\kappa(\kappa) = \kappa/2$ . Зависимость  $A(\kappa)$  показана на рис. 5.

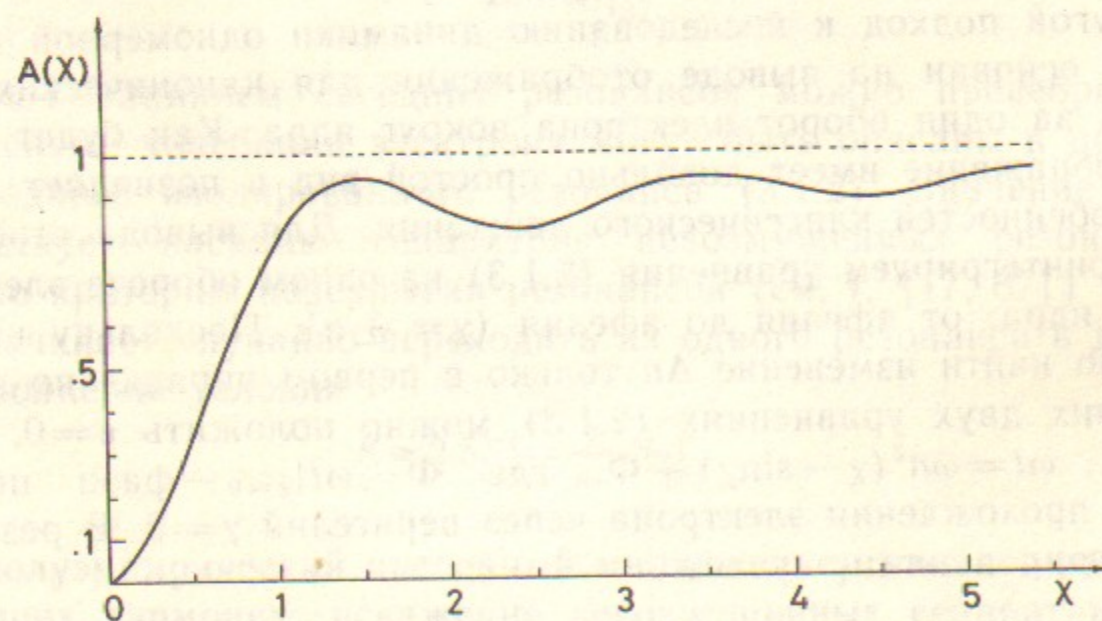


Рис. 5. Зависимость амплитуды толчка  $A$  (3.1.9) от  $\kappa = \omega n^3$ .

Из (3.1.8), (3.1.9) получаем

$$\Delta N = kA(\kappa) \sin \Phi, \quad k = \frac{0.822\pi\epsilon}{\omega^{5/3}}. \quad (3.1.10)$$

Интеграл в (3.1.7) может быть вычислен и методом стационарной фазы, из которого видно, что при больших  $\kappa$  основной вклад в интеграл дает малая область  $\Delta\chi \kappa^{-1/3}$  ( $\omega\Delta t \sim 1$ ) вблизи перигелия  $\chi = 0$ , где из-за кулоновской особенности нарушается аналитичность движения. В нулевом порядке по  $\epsilon$  изменение фазы  $\Phi$  равно  $\Delta\Phi = 2\pi\omega(-2\omega N)^{-3/2}$ . Отметим, что переменные  $N, \Phi$ , так же, как энергия и время, образуют канонически сопряженную пару. Каноническое отображение может быть получено из производящей функции  $G(\bar{N}, \Phi)$ , на основе соотношений (см. I, [63]):

$$N = \frac{\partial G}{\partial \Phi}, \quad \bar{\Phi} = \frac{\partial G}{\partial \bar{N}}. \quad (3.1.11)$$

С учетом выражений для  $\Delta N, \Delta\Phi$  получаем

$$G(\bar{N}, \Phi) = \bar{N}\Phi + 2\pi(-2\omega\bar{N})^{-1/2} + kA(\bar{\kappa}) \cos \Phi \quad (3.1.12)$$

с  $\bar{\kappa} = \omega(2\omega\bar{N})^{-3/2}$ . В результате, отображение имеет вид

$$\bar{N} = N + kA(\bar{\kappa}) \sin \Phi, \quad (3.1.13)$$

$$\bar{\Phi} = \Phi + 2\pi\omega(-2\omega\bar{N})^{-3/2} + 3k\omega^2(-2\omega\bar{N})^{-5/2}A'(\bar{\kappa}) \cos \Phi.$$

Отметим, что неявная запись отображения позволяет сделать его каноническим. Вследствие этого во втором уравнении (3.1.13) появляется поправка первого порядка по  $\epsilon$  к выражению для  $\bar{\Phi}$ .

Поскольку  $A(\kappa) \approx 1$  при  $\kappa = \omega n^3 \gg 1$ , то в этой области отображение принимает особенно простой вид (см. I, [45]):

$$\bar{N} = N + k \sin \Phi, \quad \bar{\Phi} = \Phi + 2\pi\omega(-2\omega\bar{N})^{-3/2}. \quad (3.1.14)$$

Так как, согласно рис. 5,  $A(\kappa)$  близко к 1 даже для  $\kappa = 1$ , то отображение Кеплера (3.1.14) описывает динамику при  $\omega_0 \geq 1$ . Отображение определено только для финитного движения ( $N < 0$ ), поскольку траектории, попадающие в область положительных энергий ( $N > 0$ ), уже больше не проходят через перигелий и поэтому уходят на бесконечность, испытывая только малые осцилляции вблизи значения  $N > 0$ , даваемого последним толчком (подробнее см. в § 3.8). Отметим, что отображения (3.1.13), (3.1.14) были независимо получены в [14].

Чтобы проверить, насколько хорошо отображение Кеплера опи-

сывает настоящую динамику, численно интегрировались уравнения непрерывной модели (2.1.2) и находились фазы поля  $\Phi_j$  в момент прохождения перигелия. По трем последовательным значениям  $\Phi_{j-1}$ ,  $\Phi_j$ ,  $\Phi_{j+1}$  находились  $N_j = [(\Phi_j - \Phi_{j-1}) / 2\pi\omega]^{-2/3}$  и строилась

функция  $g(\Phi_j) = (N_{j+1} - N_j) / k$ . Сравнение с теорией  $g(\Phi) = \sin\Phi$  представлено на рис. 6. Видно, что даже для  $\omega_0 = 1.5$  имеет место вполне удовлетворительное согласие численных данных с теорией.

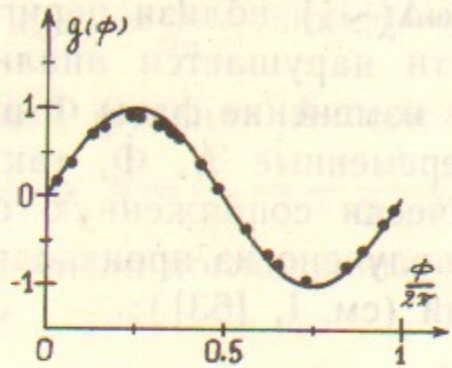


Рис. 6. Численно найденная функция  $g(\Phi_j)$  (точки) и ее сравнение с теоретической кривой  $g = \sin\Phi$  для  $\epsilon_0 = \epsilon n_0^4 = 0.04$ ,  $\omega_0 = \omega n_0^3 = 1.5$ .

Отображение Кеплера позволяет очень просто получить условие возникновения глобального хаоса. Для этого линеаризуем второе уравнение в (3.1.14) и в результате получим стандартное отображение (1.1.5) в виде

$$\bar{N} = N + k \sin \Phi, \quad \bar{\Phi} = \Phi + T\bar{N}, \quad (3.1.15)$$

где  $T = 6\pi\omega^2 n_0^5$ ,  $K = kT = \epsilon_0 / \epsilon_c$ , а во втором уравнении опущена несущественная константа. Глобальная диффузия возникает при  $K > 1$  или  $\epsilon_0 > \epsilon_c$ , где выражение для  $\epsilon_c$  совпадает с (3.1.6). Таким образом, при  $\epsilon_0 > \epsilon_c$  в системе (2.1.2) происходит неограниченное возбуждение электрона, а при  $\epsilon_0 < \epsilon_c$  его энергия осциллирует в интервале, ограниченном инвариантными кривыми. Типичный вид движения для отображения (3.1.14) показан на рис. 7. Островки устойчивости вблизи  $\Phi = \pi$  соответствуют главным резонансам, которые определяются условием  $2\pi s = 2\pi\omega(-2\omega N)^{-3/2}$ . Нерегулярно разбросанные точки принадлежат одной траектории.

Выражение (3.1.6) для  $\epsilon_c$  было получено из отображения (3.1.14), которое справедливо при  $\omega_0 > 1$ . Для  $\omega_0 < 1$  можно использовать более сложное отображение (3.1.13). Опять линеаризуя второе уравнение и пренебрегая в нем членами первого порядка по  $\epsilon$ , получим отображение (3.1.15) с заменой  $k$  на  $kA$ . Это дает новую границу

$$\epsilon_c \approx \frac{1}{49\omega_0^{1/3} A(\omega_0)}. \quad (3.1.16)$$

Откуда, например, для  $\omega_0 = 0.6$ ,  $A(\omega_0) \approx 0.45$  и  $\epsilon_c \approx 0.05$ , что удовлетворительно согласуется с численными данными дающими  $\epsilon_c \approx 0.04$  (см. рис. 20). Для существенно более низких частот значение  $\epsilon_c$  становится слишком большим, так что описание с помощью линеаризованного отображения становится неправомерным. Для таких малых частот критическое значение поля приближается к границе статической ионизации  $\epsilon_s = \epsilon_{st} n_0^4 \approx 0.13$  [15] (также см. I, [1]).

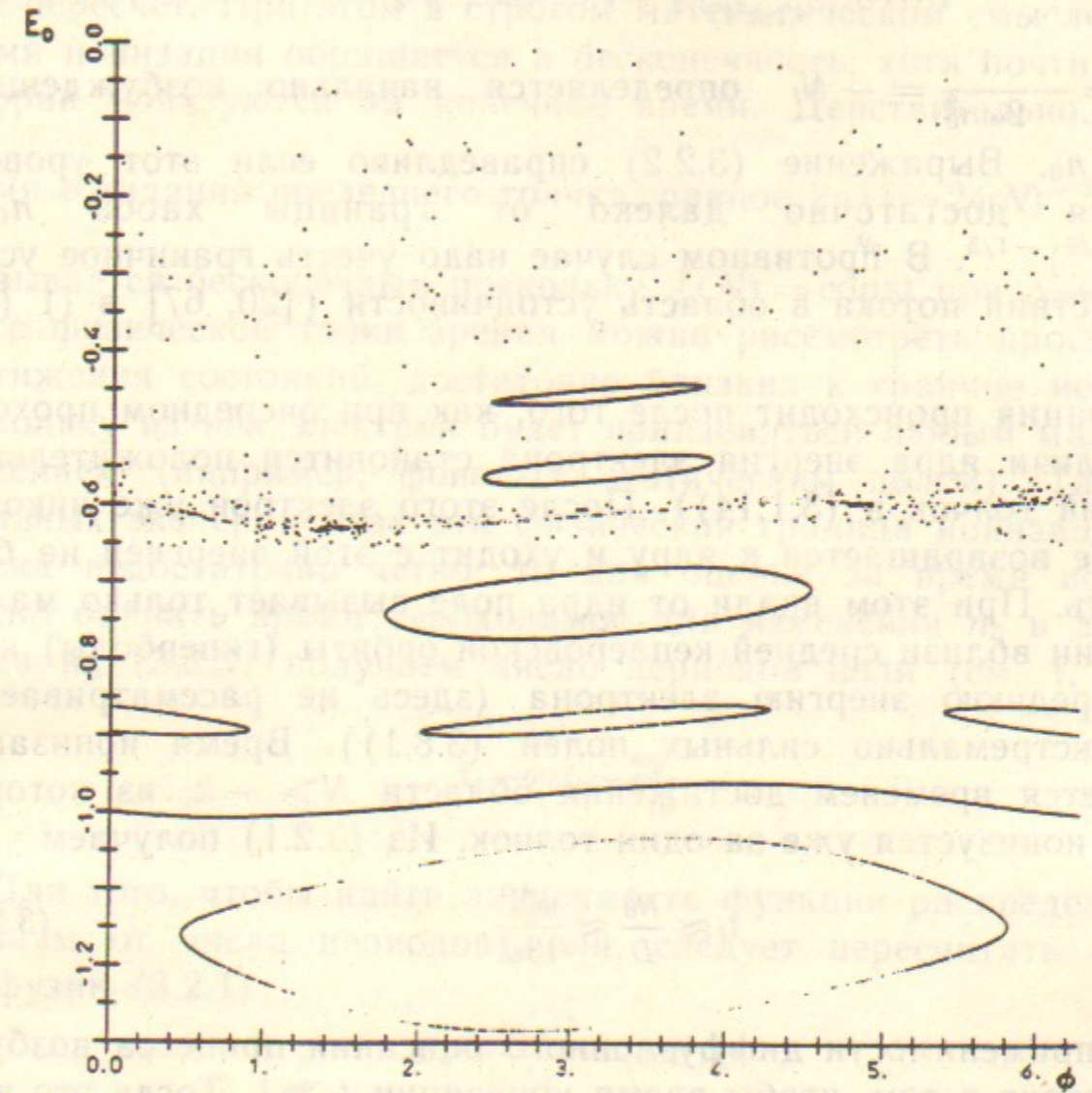


Рис. 7. Фазовая плоскость для отображения Кеплера (3.1.14) в переменных  $E_0 = \omega N n_0^2 = -n_0^2 / 2n^2$ ,  $\Phi$  для параметров  $\epsilon_0 = 0.03$ ,  $\omega_0 = 3.5$ . Показано 6 регулярных и 1 хаотическая траектория.

### § 3.2. ДИФФУЗИОННЫЙ ПРОЦЕСС ВОЗБУЖДЕНИЯ И ИОНИЗАЦИИ

При  $\omega_0 \geq 1$  и  $\epsilon_0 > \epsilon_c$  происходит хаотическое возбуждение электрона. При этом с ростом  $n$  локальное значение параметра стохастичности  $K = \epsilon_0 / \epsilon_c = 49\epsilon\omega^{1/3} n^5$  быстро возрастает. Вследствие этого фазы в (3.1.14) случайны и независимы, а скорость диффу-

зии дается квазилинейным выражением (см. I, (1.1.3)):

$$D = \frac{(\Delta N)^2}{\Delta t} = \frac{k^2}{2} = 3.33 \frac{e^2}{\omega^{10/3}}. \quad (3.2.1)$$

Здесь и далее  $t$  измеряется в числе оборотов электрона вокруг ядра. Функция распределения по  $N$  является решением уравнения ФПК с постоянной скоростью диффузии и имеет вид

$$f(N, t) = \frac{1}{(\pi k^2 t)^{1/2}} \exp(-(N - N_0)^2 / k^2 t), \quad (3.2.2)$$

где  $N_0 = -\frac{1}{2\omega n_0^2} = -N_I$  определяется начально возбужденным уровнем  $n_0$ . Выражение (3.2.2) справедливо если этот уровень находится достаточно далеко от границы хаоса  $n_0 \gg \gg (49\epsilon_0 \omega^{1/3})^{-1/5}$ . В противном случае надо учесть граничное условие отсутствия потока в область устойчивости ([20, 67] в I) (см. ниже).

Ионизация происходит после того, как при очередном прохождении вблизи ядра энергия электрона становится положительной (последний толчок в (3.1.14)). После этого электрон уже никогда больше не возвращается к ядру и уходит с этой энергией на бесконечность. При этом вдали от ядра поле вызывает только малые осцилляции вблизи средней кеплеровской орбиты (гиперболы) и не меняет среднюю энергию электрона (здесь не рассматривается случай экстремально сильных полей (3.8.1)). Время ионизации определяется временем достижения области  $N > -k$ , из которой электрон ионизируется уже за один толчок. Из (3.2.1) получаем

$$t_I \approx \frac{N_0^2}{D} \approx \frac{\omega_0^{4/3}}{13\epsilon_0^2}. \quad (3.2.3)$$

Условие применимости диффузионного описания процесса возбуждения состоит в том, чтобы время ионизации  $t_I \gg 1$ . Тогда это время будет намного превышать время фазового перемешивания  $t_c \sim 1$  и ионизация будет происходить диффузионным образом. При  $k > N_I$ , ( $\epsilon_0 > \omega_0^{2/3}/5$ ) электрон может ионизоваться за один оборот. Отметим, что при  $\omega_0 \gg 1$  время ионизации оказывается большим даже при  $\epsilon_0 \gg \epsilon_s = 0.13$ .

Описанная картина диффузионного возбуждения была получена на основе отображения (3.1.14), которое применимо при  $\omega_0 \gg 1$ . Для частот  $\omega_0 \ll 1$  возбуждение может происходить благодаря зах-

вату в хаотический слой резонанса с  $s = \omega n^3 = 1$ , либо из-за перекрытия высших резонансов в сильном поле. При этом из-за большого размера резонанса с  $s = 1$  (см. рис. 7) уже один оборот вокруг него приводит к сильному изменению  $N$ , и поэтому в области  $\omega_0 \ll 1$  возбуждение не является диффузионным.

Следует также иметь в виду, что  $t_I$  дает время ионизации в числе оборотов электрона и для получения физического времени ионизации в числе периодов поля требуется произвести дополнительный пересчет. При этом в строгом математическом смысле среднее время ионизации обращается в бесконечность, хотя почти все траектории ионизируются за конечное время. Действительно, среднее

время ожидания последнего толчка, равное  $2\pi \int_{N_0}^0 (-2\omega N)^{-3/2} f(N) dN$

оказывается бесконечным поскольку,  $f(N) = \text{const}$  при  $N \rightarrow 0$ . Однако, с физической точки зрения можно рассмотреть просто время достижения состояний, достаточно близких к границе ионизации, поскольку из них электрон будет ионизоваться любым малым возмущением (например, фоновым статическим полем). Так как в реальных экспериментах эта физическая граница ионизации определена недостаточно четко, то для оценки за время ионизации можно принять время необходимое для изменения  $n_0$  в два раза. Тогда из (3.2.3) получаем число периодов поля (см. I, [43, 11, 37]):

$$\tau_I \sim \omega_0 t_I \sim \frac{\omega_0^{7/3}}{\epsilon_0^2}. \quad (3.2.4)$$

Для того, чтобы найти зависимость функции распределения по уровням от числа периодов поля, следует пересчитать скорость диффузии (3.2.1):

$$D_n = \frac{(\Delta n)^2}{\Delta \tau} = (\omega n^3) D.$$

Поскольку на высоких уровнях мера устойчивой компоненты пренебрежимо мала, то в системе имеет место детальное равновесие и недиффузионный поток в уравнении ФПК отсутствует [16]. В результате получаем уравнение диффузии:

$$\frac{\partial j(n, \tau)}{\partial \tau} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial n} D_n \frac{\partial j(n, \tau)}{\partial n}, \quad D_n = \frac{3.33 e^2 n^3}{\omega^{7/3}}. \quad (3.2.5)$$

В безразмерных переменных  $y = n/n_0$ ,  $\bar{\tau} = D_n \tau$  функция Грина для

этого уравнения имеет вид

$$G(y, \bar{\tau} | y_0) = \frac{zz_0}{\sqrt{yy_0}} e^{-(z^2+z_0^2)} I_{\pm 2}(2zz_0), \quad (3.2.6)$$

где  $z = 1/\sqrt{y\bar{\tau}}$ ,  $z_0 = 1/\sqrt{y_0\bar{\tau}}$ ,  $y_0 = 1$ , а  $I_p$  — модифицированная функция Бесселя. При  $\bar{\tau} \ll 1$ ,  $z \gg 1$ , используя асимптотику  $I_p(x) = e^x/\sqrt{2\pi x}$ , получаем выражение для функции распределения

$$f(y, \bar{\tau}) \approx \frac{\exp(-(1-1/\sqrt{y})^2/\bar{\tau})}{2\sqrt{\pi y^{3/4}}\sqrt{\bar{\tau}}}. \quad (3.2.7)$$

Учет того, что диффузия не проникает в область регулярного движения  $n < \bar{n}$ , требует дополнить уравнение (3.2.5) граничным условием отсутствия потока на границе  $\left. \frac{\partial f}{\partial n} \right|_n = 0$ . Вводя  $\bar{y} = \bar{n}/n_0$ , из (3.2.7) получим достаточно простое выражение для функции распределения при  $\bar{\tau}\sqrt{\bar{y}} \ll 1$  (см. I, [35, 37]):

$$f(y, \bar{\tau}) = \frac{\exp\left[-\frac{(1/\sqrt{\bar{y}} - 2/\sqrt{\bar{y}} + 1)^2}{\bar{\tau}}\right] + \exp\left[-\frac{(1/\sqrt{\bar{y}} - 1)^2}{\bar{\tau}}\right]}{2y^{3/4}\sqrt{\pi\bar{\tau}}}. \quad (3.2.8)$$

Сравнение этого распределения с данными численного моделирования классической динамики показывает, что оно вполне удовлетворительно описывает истинное распределение (см. рис. 8).

### § 3.3. ЛОКАЛИЗАЦИЯ ФОТОННЫХ ПЕРЕХОДОВ

Перейдем теперь к анализу квантовой динамики возбуждения в одномерной модели атома. Согласно результатам первой главы квантовые эффекты приводят к локализации диффузионного возбуждения. Для стационарного распределения вероятности по уровням длина локализации равна скорости диффузии (см. I, (1.7.7)) и из (3.2.5) получаем (см. I, [34, 37]):

$$l_s \approx D_n|_{n=n_0} \approx \frac{3.33\varepsilon_0^2 n_0^2}{\omega_0^{7/3}}. \quad (3.3.1)$$

Ввиду того, что скорость диффузии  $D_n$  растет с  $n$  эта формула применима только при  $l_s \ll n_0$ , когда зависимость  $D_n$  от  $n$  на длине локализации несущественна. Если длина локализации  $l_s \ll n_0$ , то квантовая вероятность возбуждения будет намного меньше классической.

Этот эффект действительно наблюдался еще в первых численных экспериментах (см. I, [33]). Типичный пример квантовой локализации хаоса для  $n_0 = 66$ ,  $\omega_0 = 2.5$ ,  $\varepsilon = 0.04$  показан на рис. 8. В этом случае поле превышает границу хаоса (3.1.6) и поэтому в классической системе происходит диффузионное возбуждение электрона. Классическое распределение  $f(n, \tau)$  удовлетворительно согласуется с решением диффузионного уравнения (3.2.8). При этом численный множитель в выражении (3.2.5) для скорости диффузии был принят равным 2, чтобы учесть то, что в этой области  $A(\omega_0) < 1$  (см. рис. 5). Квантовое распределение локализовано вблизи начального уровня  $\bar{f}(n) \propto \exp(-2|n - n_0|/l_s)$  и с увеличением времени счета остается практически неизменным, в то время как классическое продолжает диффундировать дальше. Специальные численные эксперименты показали, что одномерная модель действительно хорошо описывает динамику двумерных вытянутых состояний с  $n_2 = 0$ ,  $n_1 = n_0 - 1$ , для которых также имеет место локализация (рис. 8).

Локализация приводит также к тому, что квантовый и классический моменты распределения  $M_2 = \langle (n - \langle n \rangle)^2 \rangle$  близки только в течение времени  $\tau_D \approx 5$ , а дальше рост  $M_2$  в квантовой системе прекращается (рис. 9). Величина  $\tau_D$  согласуется с оценкой  $\tau_D \approx l_s \approx 3$ . На рис. 10 показана зависимость среднего нормированного расстояния между ядром и электроном от времени. В классическом случае расстояние между ними растет, а в квантовом электрон все время осциллирует вблизи ядра. Квантовая вероятность возбуждения оказывается намного меньше классической (рис. 3, а, б).

Отметим, что на высоких уровнях возмущение  $V$  может оказаться больше, чем расстояние между невозмущенными уровнями. В этом случае будет возбуждаться много уровней, однако, при  $\varepsilon_0 < \varepsilon_c$  сильного возбуждения не происходит из-за существования инвариантных кривых (рис. 7), ограничивающих расплывание пакета относительно небольшой областью по  $n$ . Пример такой ситуации показан на рис. 11 для  $n_0 = 100$ . В этом случае  $V/\Delta E = 3\varepsilon n^5/2 > 1$ , так что теория возмущений неприменима. Тем не менее квантовое и классическое распределения оказываются близкими и остаются практически неизменными при увеличении времени счета. Причина этого заключается в устойчивости классического движения при  $\varepsilon_0 < \varepsilon_c$ . В квантовом случае наблюдается туннелирование в классически запрещенную область.

Из рис. 8 видно, что локализация диффузии по уровням не

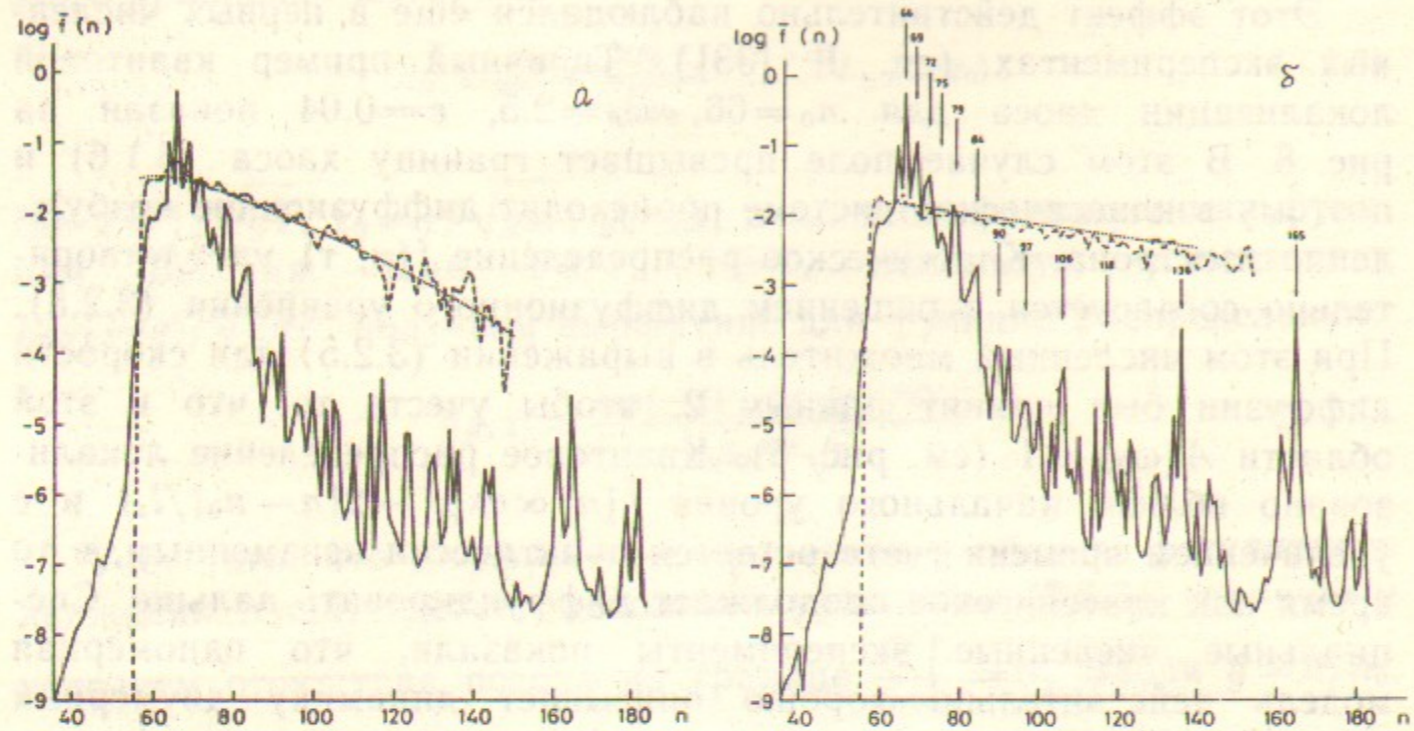


Рис. 8. Классическое (пунктир) и квантовое (сплошная линия) распределения  $\bar{f}(n)$ , усредненные по 40 периодам, для  $n_0=66$ ,  $\omega_0=2.5$ ,  $\varepsilon_0=0.04$ :

а — Усреднение в интервале  $80 < \tau < 120$ ; б — в интервале  $560 < \tau < 600$ . Линии из точек в обоих случаях представляет аналитическое решение (3.2.8) уравнения ФПК. Стрелки показывают значения главного квантового числа в пиках. в — Сравнение распределений в одномерной (\*) и двумерной (линия,  $n_2=0$ ) моделях при  $\tau=60$ ; кружки показывают значения  $\log|\Delta f(n)|$ , где  $\Delta f(n)$  — разница двух распределений.

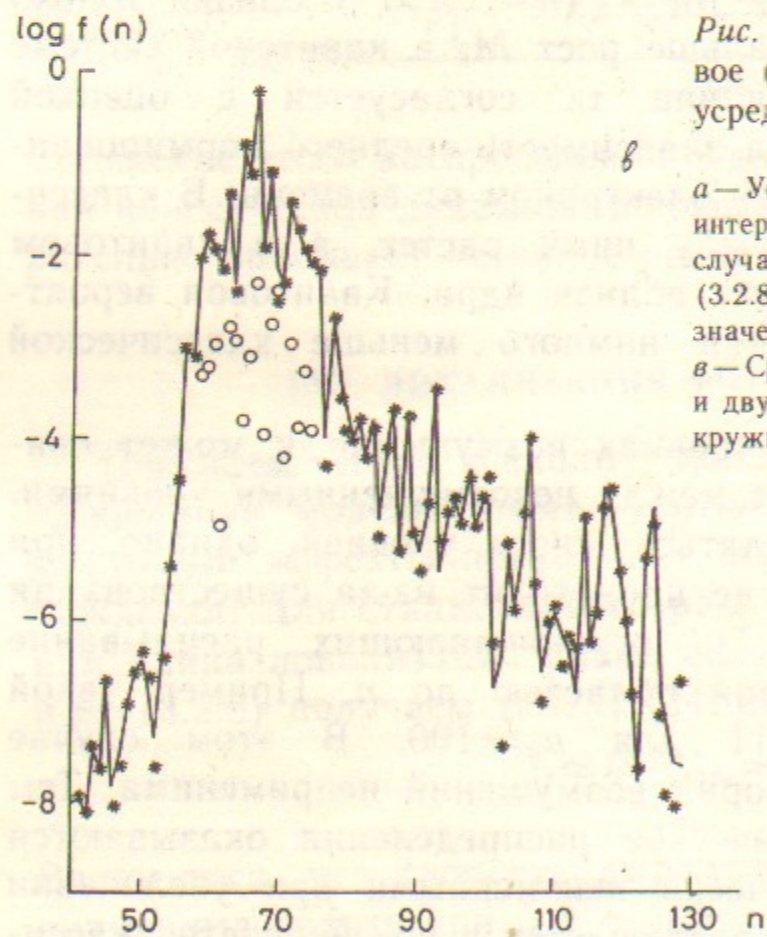


Рис. 9. Зависимость второго момента  $M_2 = \langle (n - \langle n \rangle)^2 \rangle / n_0^2$  классического (штрихи) и квантового (линия) распределений от времени  $\tau = \omega t / 2\pi$  для параметров рис. 8.

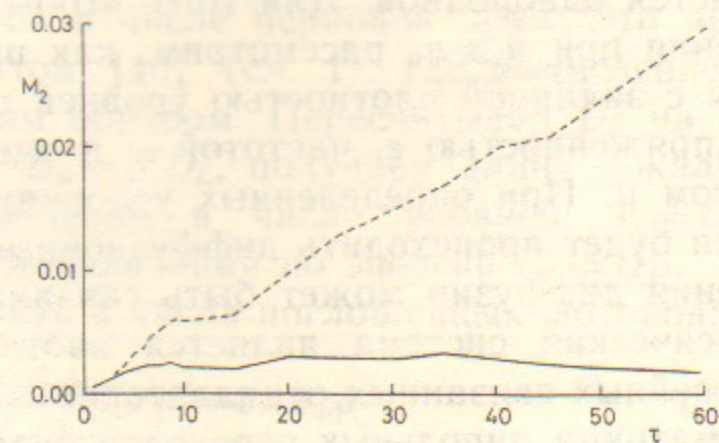


Рис. 10. Зависимость нормированного среднего расстояния между электроном и ядром от времени для параметров рис. 8; штриховая линия — классический случай, сплошная — квантовая,  $RL = \langle z \rangle / n_0^2$ .

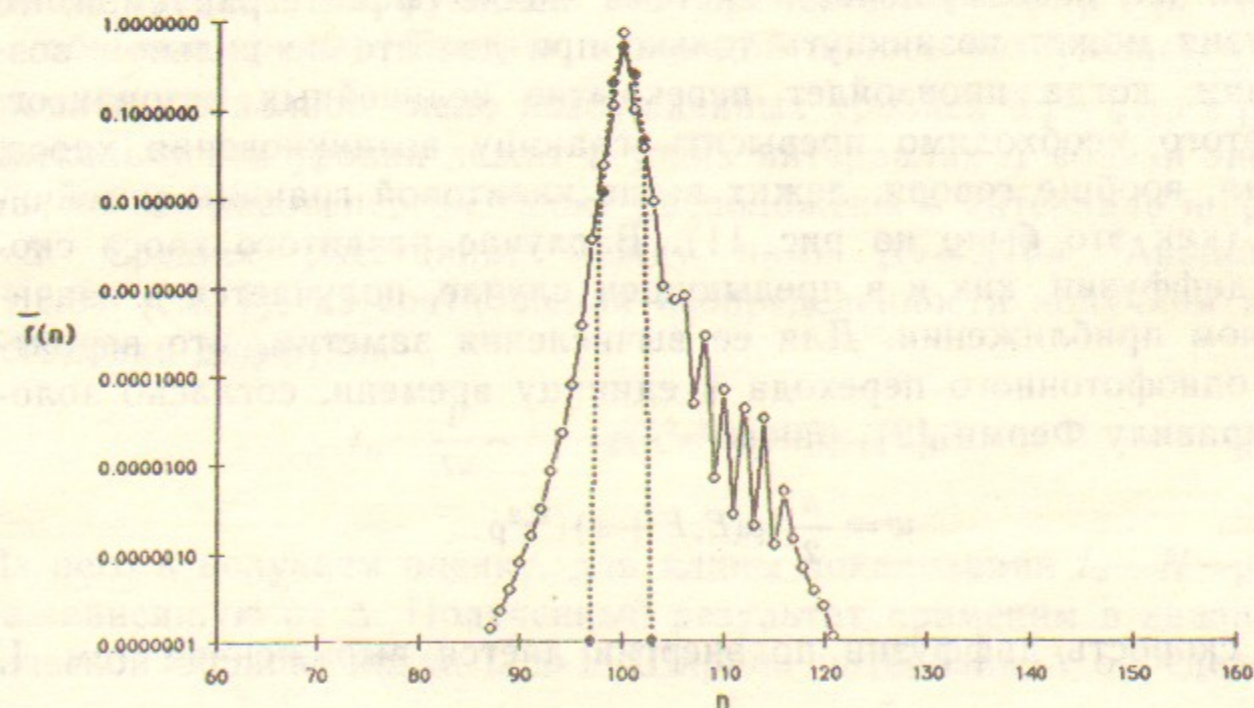
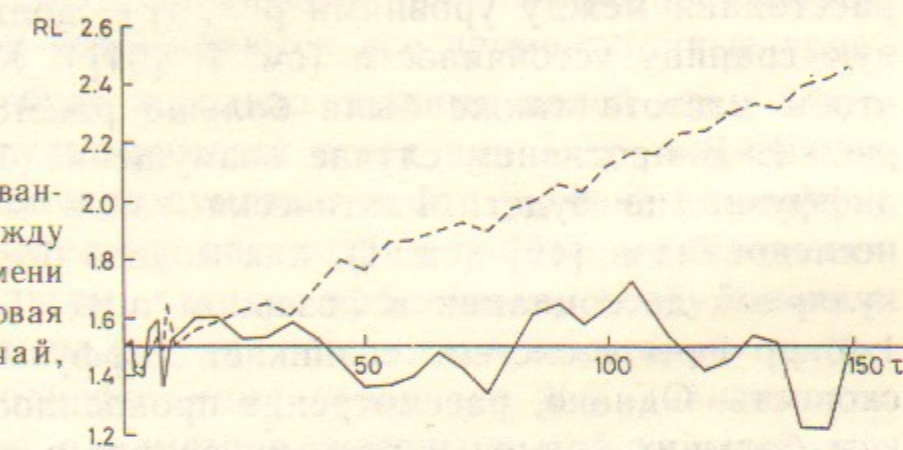


Рис. 11. Классическое (●) и квантовое (○) распределения, усредненные в интервале  $80 < \tau < 120$ ;  $n_0=100$ ,  $\varepsilon_0=0.01$ ,  $\omega_0=1.5$ . Здесь  $\varepsilon_0 < \varepsilon_c < \varepsilon_q$  и поэтому оба распределения локализованы.

является однородной. Для того, чтобы понять особенности распределения при  $n \gg n_0$  рассмотрим, как происходит возбуждение системы с заданной плотностью уровней  $\rho$  в монохроматическом поле с напряженностью  $\epsilon$ , частотой  $\omega$  и однофотонным матричным элементом  $\mu$ . При определенных условиях начальная стадия возбуждения будет происходить диффузионным образом. Причина возникновения диффузии может быть связана с тем, что невозмущенная классическая система является хаотической (например, система нелинейных связанных осцилляторов). Тогда можно предположить, что матрица дипольных переходов будет случайной, что и вызовет диффузию, по крайней мере на начальном этапе по времени. При этом, однако, необходимо, чтобы возмущение  $V = \epsilon \mu$  было больше расстояния между уровнями  $\rho^{-1}$ , т. е. должно превышать квантовую границу устойчивости (см. I, [54]). Кроме того, необходимо, чтобы частота также была больше расстояния между уровнями  $\rho \omega > 1$ . В противном случае возмущение будет адиабатическим и диффузии не будет. Фактически такая модель была введена и исследована в [46] (см. I), как модель бесстолкновительной молекулярной диссоциации в лазерном поле. Было показано, что при  $1 \ll \epsilon \mu \rho \ll \rho \omega$  в системе возникает диффузия и была вычислена ее скорость. Однако, рассмотрение проводилось только для не слишком больших времен и поэтому вопрос о том, будет ли диффузия идти неограниченно, требует специального анализа.

Если же невозмущенная система является интегрируемой, то диффузия может возникнуть только при достаточно сильном возмущении, когда произойдет перекрытие нелинейных резонансов. Для этого необходимо превысить границу возникновения хаоса, которая, вообще говоря, лежит выше квантовой границы устойчивости (как это было на рис. 11). В случае развитого хаоса скорость диффузии, как и в предыдущем случае, получается в квазилинейном приближении. Для ее вычисления заметим, что вероятность однофотонного перехода в единицу времени, согласно золотому правилу Ферми [2], равна

$$\omega = \frac{\pi}{2} |\mu(E, E + \omega)|^2 \epsilon^2 \rho.$$

Тогда скорость диффузии по энергии дается выражением (см. I, [30]):

$$D_E = \frac{(\Delta E)^2}{\Delta \tau} = 2\omega \omega^2 \frac{2\pi}{\omega} = 2\pi^2 \mu^2 \epsilon^2 \rho \omega, \quad (3.3.2)$$

где  $\tau$  по-прежнему измеряется в числе периодов поля. Это выражение совпадает с результатом [46] (см. I), где вычисление  $D_E$  было проведено более строгим образом. Пересчитывая  $D_E$  на скорость диффузии по уровням  $D_n = \rho^2 D_E$ , получаем длину локализации стационарного распределения в числе уровней:  $l_s = D_n = 2\pi \mu^2 \epsilon^2 \rho^3 \omega$ , а из нее длину локализации по энергии  $l_{sE} = l/\rho$ .

Последнюю удобно измерять в числе поглощенных фотонов:

$$l_\phi = \frac{l_{sE}}{\omega} = 2\pi^2 \mu^2 \epsilon^2 \rho^2 = 2\pi D_\phi \rho \quad (3.3.3)$$

где  $D_\phi = \pi \mu^2 \epsilon^2 \rho$  — скорость диффузии в числе фотонов в единицу времени. При выводе (3.3.3) фактически неявно предполагалось, что в процессе диффузии возбуждаются все промежуточные уровни ( $\Delta n = \sqrt{D_n \tau}$ ), что требует довольно сильных полей  $\epsilon \gg \sqrt{\omega/\rho}/\mu$  (см. ниже). Однако, результирующий ответ для  $l_\phi$  не зависит от частоты поля и поэтому можно думать, что это условие не является обязательным. Действительно, рассмотрим процесс возбуждения при  $1 \ll \mu^2 \epsilon^2 \rho^2 \ll \rho \omega$ . В этом случае эффективно возбуждаются только близкие к резонансу уровни, лежащие в некоторой полосе  $\Delta E = \Delta$  вблизи энергий однофотонных переходов  $N\omega$ . Зависимость ширины этой полосы  $\Delta$  от параметров системы мы обсудим немного позднее. Согласно (3.3.3), число поглощенных фотонов (число полос) растет диффузионно со временем  $N = \sqrt{\pi \mu^2 \epsilon^2 \rho t}$  (здесь  $t$  — обычное время). Так как в каждой полосе возбуждается  $\sim \rho \Delta$  уровней, то полное число возбужденных уровней  $\delta n \sim \sqrt{\pi \mu^2 \epsilon^2 \rho t} \rho \Delta$ . Поскольку эти уровни лежат в узких интервалах  $\Delta$  вблизи энергий  $N\omega$ , то все квазиэнергии также расположены в интервале шириной  $\sim \Delta$ . Среднее расстояние между ними  $\Delta v \sim \Delta/\delta n$ . Аналогично (1.2.3) (см. I), из соотношения неопределенности получаем время остановки диффузии

$$t_D \sim \frac{1}{\Delta v} \sim N \rho \sim (\mu^2 \epsilon^2 \rho t_D)^{1/2} \sim \mu^2 \epsilon^2 \rho^3. \quad (3.3.4)$$

Из него и получаем оценку, для длины локализации  $l_\phi \sim N \sim \mu^2 \epsilon^2 \rho^2$ , не зависящую от  $\Delta$ . Полученный результат применим в квазиклассической области когда  $l_\phi \gg 1$ . Ширина интервала  $\Delta$  определяется скоростью однофотонного перехода  $\omega = \frac{\pi}{2} \mu^2 \epsilon^2 \rho \sim \Delta$  (такая же оценка для  $\Delta$  была получена в [46] (см. I)). Величина  $\omega \sim \Delta$



модифицированным невозмущенным гамильтонианом. Отличительная особенность (3.4.2) состоит в наличии поглощения при  $N > 0$ , что приводит к появлению мнимой части у квазиэнергии  $\nu$ , определяемой соотношением  $\bar{\psi} = e^{-i\nu} \psi$ .

Уравнение на СФКЭ могут быть записаны и в несколько ином виде. Действительно, при переходе к (3.4.2) можно не использовать приближенное соотношение  $N_0 = -1/2n_0^2\omega$ , а вместо него потребовать, чтобы СФКЭ удовлетворяло условию  $\bar{\psi} = \psi$ , которое в отсутствие возмущения дает правильный спектр собственных значений  $E = \omega N_0 = -1/2n_0^2$  (как видно  $H_0$  играет роль действия, квантование которого дает  $H_0 = 2\pi n_0$ ). В результате получим нелинейное уравнение на собственные значения  $E$ :

$$\sum_{N_1=-\infty}^{N_0} (-i)^{N_\Phi - N_0} J_{N_\Phi - N_1}(k) A_{N_1} = \exp \{i2\pi[-2(E + \omega N_\Phi)]^{-1/2}\} A_{N_\Phi}, \quad (3.4.3)$$

где  $N_0 = [E/\omega]$ , а скобки обозначают целую часть. Близкое уравнение для СФКЭ было выведено из уравнения Шредингера в работе [19].

Из-за того, что уравнение на собственное значение  $E$  является существенно нелинейным, исследование временной эволюции волновой функции на основе СФКЭ для уравнения (3.4.3) оказывается довольно сложной задачей, хотя поведение собственных функций для (3.4.2) и (3.4.3) в среднем является одинаковым. Поэтому для исследования временной эволюции  $\psi$  использовалось отображение (3.4.2), которое приближенно описывает динамику при  $|N_\Phi| \ll N_I$ . Итерация квантового отображения Кеплера давала распределение вероятности по числу поглощенных фотонов. Для его сравнения с распределением по уровням, получаемым прямо из уравнения Шредингера, в последнем проводилось суммирование вероятностей по всем невозмущенным уровням с энергиями, лежащими в интервале  $[N_\Phi - 1/2, N_\Phi + 1/2]$  вблизи данного  $N_\Phi$ .

Пример сравнения стационарных распределений, полученных из уравнения Шредингера и из квантового отображения Кеплера, показан на рис. 12. Из него видно, что распределение действительно имеет вид пиков, эквидистантных по энергии. Расстояние между пиками равно энергии фотона  $\omega$ . Вблизи значения  $N_\Phi = 0$  истинное распределение вполне удовлетворительно согласуется с распределением, полученным из (3.4.2). Для больших  $N_\Phi$  два распределения согласуются только в среднем. Причина этого заклю-

чается в приближенном характере отображения (3.3.2), из-за которого трудно ожидать точного согласия в той области, где вероятность экспоненциально мала. Стационарное «шредингеровское» распределение было получено усреднением вероятностей по 50 периодам поля в интервале  $450 < \tau \leq 500$ . Для «кеплеровского» распределения усреднение проводилось по 15 итерациям отображения для  $135 < t \leq 150$ , что приближенно соответствует тому же физическому интервалу. Отметим, что в области локализации изменение интервала усреднения слабо сказывается на распределении, если, конечно, этот интервал не слишком мал или слишком велик. Три вида распределений, показанных на рис. 12, получены при одинаковых значениях  $\varepsilon_0$ ,  $\omega_0$  и поэтому соответствуют одному и тому же классическому поведению, представленному на рис. 12,б. В отличие от квантового случая классическое распределение расплывается по всем невозмущенным уровням, что приводит к значительно более быстрому возбуждению и ионизации.

Из отображения (3.4.2) видно, что, так же, как и для модели квантового ротатора (1.1.4), скорость диффузии по числу фотонов однородна и длина локализации стационарного распределения равна  $l_\Phi = D = k^2/2$ , что согласуется с результатом (3.3.6), полученным ранее другим способом. Таким образом, распределение вероятности должно быть экспоненциальным по числу фотонов, а длина локализации должна быть равна (3.3.6).

Для проверки этих предсказаний полный интервал изменения  $N_\Phi = N_I - \frac{1}{2\omega n^2}$  в стационарном «шредингеровском» распределении разбивался на однофотонные интервалы и в каждом интервале находился максимум распределения. После этого длина локализации  $l_\Phi$  получалась из линейной интерполяции этих максимумов  $\ln \bar{f}_N = -2N_\Phi/l_\Phi + c$  по методу наименьших квадратов для  $N_\Phi > 0$  (см. рис. 12). Такая процедура была выполнена для 47 распределений, находившихся в памяти компьютера. Для этих распределений параметры системы менялись в интервалах  $1 \leq \omega_0 \leq 3.5$ ,  $0.02 \leq \varepsilon_0 \leq 0.16$ , а начальный номер уровня был равен  $n_0 = 30, 45, 66, 100, 200, 400, 500$ . С целью проверки экспоненциального закона локализации максимумы отдельного распределения откладывались на графике как функция перенормированной переменной  $x = 2N_\Phi/l_\Phi$ , где использовалось значение  $l_\Phi$ , полученное по методу наименьших квадратов. При этом отбрасывалась постоянная часть в  $\ln \bar{f}_N$ , так что чисто экспоненциальное распределение соответствовало  $\ln \bar{f}_N = -x$ . В результате для 47 распределений был получен

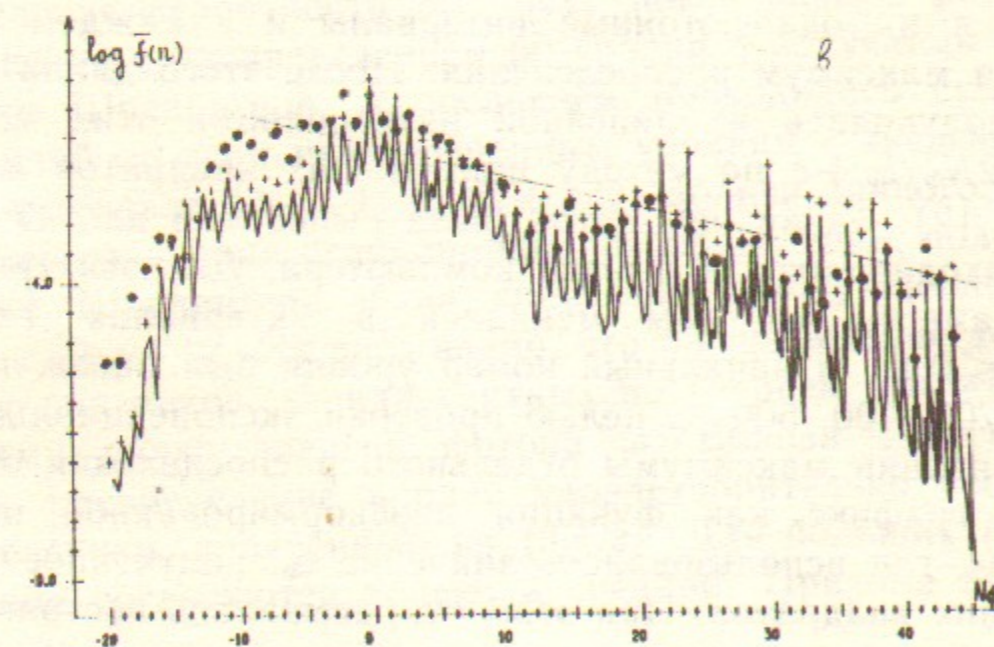
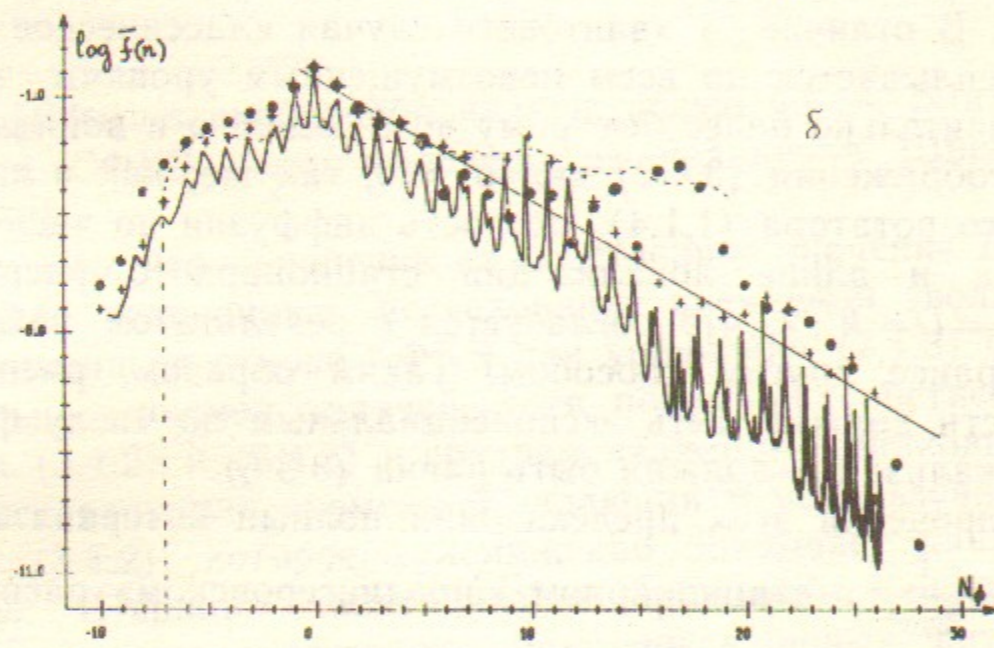
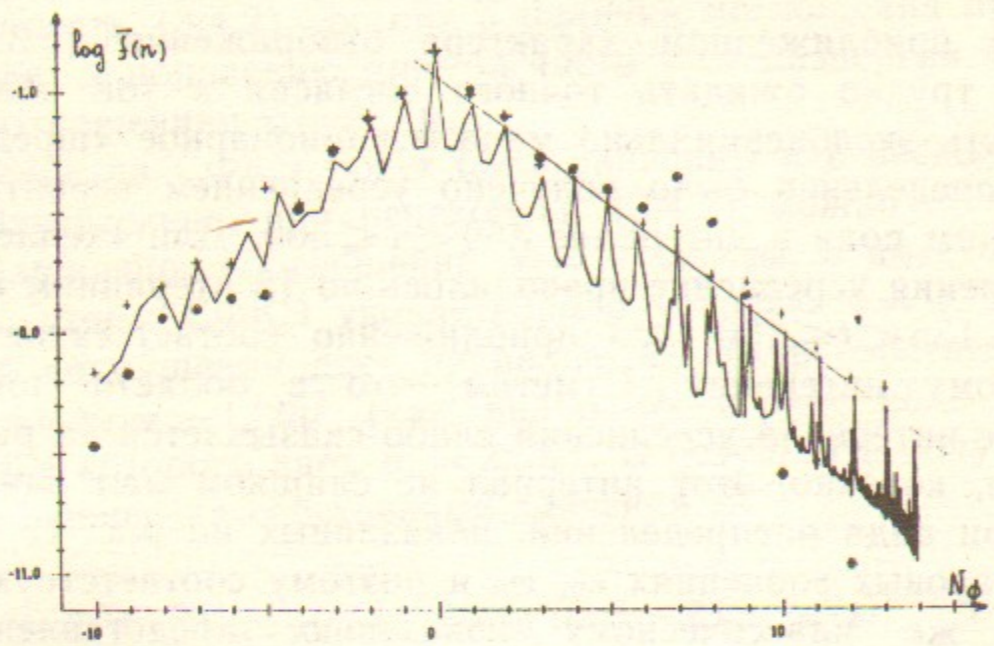


рис. 13. Несмотря на разброс точек, связанный с флуктуациями в стационарных распределениях, из этого рисунка явно видно, что в среднем локализация является экспоненциальной.

Для проверки зависимости (3.3.6) полученные численно значения  $l_\Phi$  перенормировались и откладывались как функция мощности излучения  $\epsilon^2$ . При изменении последней на десять порядков наблюдается (рис. 14) удовлетворительное согласие численных результатов (43 случая с теоретическим значением  $l_\Phi > 1$ ) с аналитической формулой (3.3.6). Другой вид проверки представлен на рис. 15, где отложено отношение  $R$  экспериментального значения  $l_\Phi^E$  к теоретическому для тех же 43 случаев. Разброс точек вокруг величины  $R=1$  связан с сильными флуктуациями в стационарном распределении (см. рис. 13). Для больших значений  $l_\Phi$  разброс становится больше из-за уменьшения интервала изменения  $\ln \bar{f}_N$  и сильных флуктуаций на интервале одной длины локализации. Среднее значение  $\langle R \rangle = 1.23 \pm 0.08$  близко к теоретическому  $R=1$ .

Таким образом, результаты численных экспериментов показывают, что локализация возбуждения в одномерной модели атома водорода удовлетворительно описывается квантовым отображением Кеплера (3.4.2). Это отображение обладает такими же свойствами, как и отображение для квантового ротатора (1.1.7) при  $K \gg 1$ . Поэтому стационарное распределение  $\bar{f}_{N_\Phi}$  также можно описывать приближенным выражением (1.7.4) с  $l_s = l_\Phi$ :

$$\bar{f}_{N_\Phi} \approx \frac{1}{2l_\Phi} \left( 1 + \frac{2|N_\Phi|}{l_\Phi} \right) \exp\left( -\frac{2|N_\Phi|}{l_\Phi} \right), \quad l_\Phi \approx \frac{3.33\epsilon^2}{\omega^{10/3}}. \quad (3.4.4)$$

Длина локализации СФКЭ равна  $l_\Phi/2$ .

На основе полученных результатов можно сделать несколько замечаний о характере возбуждения в детерминированной системе с заданной плотностью уровней  $\rho$  (§ 3.3). Будем считать, что невоз-

Рис. 12. Зависимость распределения вероятности по невозмущенным уровням (сплошная линия, усреднение по интервалу  $450 < \tau < 500$ ) от числа фотонов  $N_\Phi = (1/2n_0^2 - 1/2n^2)/\omega$  для параметров рис. 7:  $\epsilon_0 = \epsilon n_0^4 = 0.03$ ,  $\omega_0 = \omega n_0^3 = 3.5$ .

Прямая — результат линейной интерполяции для максимумов распределения в каждом однофотонном интервале, (+) показывает суммарную вероятность в однофотонном интервале  $[N_\Phi - 1/2, N_\Phi + 1/2]$ . Кружки (●) дают стационарное распределение полученное из квантового отображения Кеплера (3.4.2) и усредненное в интервале  $135 < t < 150$ :  $n_0 = 100$  (а);  $n_0 = 200$  (б);  $n_0 = 400$  (в). Для сравнения на рис. 12,б показано классическое распределение по невозмущенным уровням (пунктир).

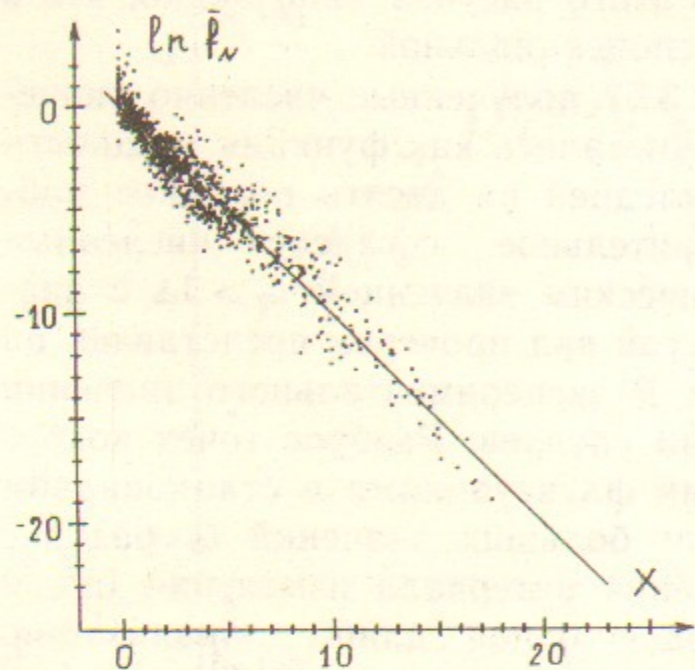


Рис. 13. Зависимость  $\ln \bar{f}_N$  от перенормированного числа фотонов  $x = 2N_\phi / l_\phi$ . В качестве  $l_\phi$  берется численное значение, получаемое из линейной интерполяции. Отложены максимумы для 47 распределений при разных значениях  $\epsilon_0, \omega_0, n_0$ . Постоянная составляющая в  $\ln \bar{f}_N$  исключалась так, что чисто экспоненциальная зависимость соответствовала прямой линии  $\ln \bar{f}_N = -x$ .

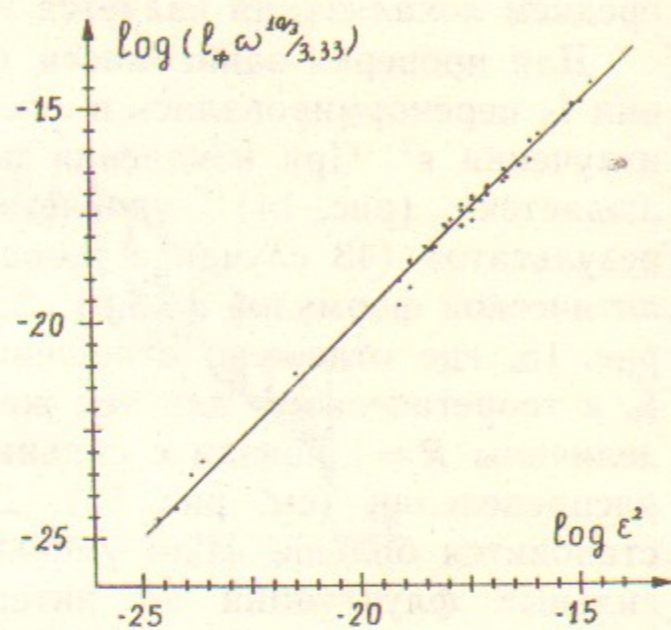


Рис. 14. Зависимость перенормированной длины локализации  $\log(l_\phi \omega^{10/3} / 3.33)$  от  $\log \epsilon^2$ . Прямая — теоретическая зависимость (3.3.6). Точки получены из численных данных для 43 различных распределений с  $l_\phi > 1$ .

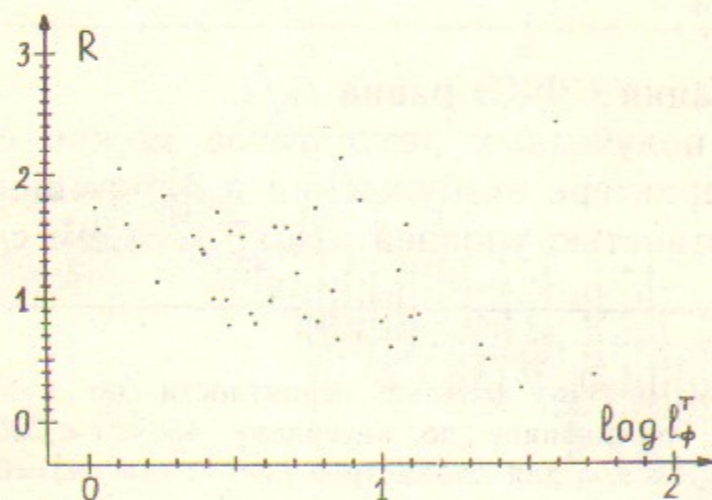


Рис. 15. Отношение  $R = l_\phi^E / l_\phi^T$  экспериментального значения  $l_\phi^E$  к теоретическому  $l_\phi^T$  (3.3.6) для 43 разных значений  $l_\phi^E$  рис. 14. Среднее значение  $\langle R \rangle = 1.23 \pm 0.08$ .

мушенная классическая система является интегрируемой. Из сопоставления с отображением Кеплера следует, что параметры  $k$  и  $T$  представляются в виде

$$k = 2\pi\mu\epsilon\rho, \quad T = 2\pi\omega \frac{\partial\rho}{\partial N} = 2\pi\omega^2 \frac{\partial\rho}{\partial E}. \quad (3.4.5)$$

Условие возникновения хаоса тогда выполняется для

$$K = kT = 4\pi^2\mu\epsilon\omega^2\rho \frac{\partial\rho}{\partial E} > 1. \quad (3.4.6)$$

При этом считается, что матричные элементы убывают с энергией не слишком быстро. Это условие, вообще говоря, накладывает на возмущение более жесткое ограничение, чем квантовая граница устойчивости (см. I, [54]), которая в этом случае соответствует  $k > 1$ .

Интересно отметить, что из-за существования дополнительного интеграла квазиимпульса  $\{-1/2n_0^2\omega\}$ , состояния с разными квазиимпульсами ведут себя почти независимо (глубокие провалы между эквидистантными пиками). Вследствие этого можно ожидать, что квазиэнергии  $\nu$  рассматриваемой системе рассталкиваться не будут даже в области развитого хаоса и  $\epsilon_0 > \epsilon_q$ . Распределение близких  $\nu$  будет, по-видимому, близко к пуассоновскому. Рассталкивание может иметь место только для квазиэнергий с одинаковыми  $\{-1/2n_0^2\omega\}$ .

### § 3.5. ГРАНИЦА ДЕЛОКАЛИЗАЦИИ

Формула (3.4.4) дает правильное описание стационарного распределения в том случае, когда длина локализации  $l_\phi$  мала по сравнению с числом фотонов  $N_I = 1/2\omega n_0^2$ , требуемым для ионизации. Если же  $l_\phi$  больше или сравнимо с  $N_I$ , то локализация отсутствует и происходит сильное возбуждение атома. Условие  $l_\phi \approx N_I$  определяет критическую напряженность поля или «границу делокализации» (см. I, [34, 37, 45]):

$$\epsilon_q = \epsilon_{qu} n_0^4 \approx \frac{\omega_0^{7/6}}{\sqrt{6.6n_0}}. \quad (3.5.1)$$

Ниже этой границы квантовые эффекты приводят к локализации диффузионного возбуждения и вероятность ионизации оказывается намного меньше классической. Выше границы делокализации про-

цесс возбуждения идет диффузионным образом и близок к классическому.

С целью проверки соотношения (3.5.1) для границы делокализации в численных экспериментах была исследована зависимость вероятности возбуждения  $W_{1.5}$  от  $\varepsilon_0$  при фиксированных  $n_0, \omega_0$ . Для каждой пары  $n_0, \omega_0$  вводилась перенормированная напряженность поля  $\varepsilon_0/\varepsilon_q$ , а вероятность возбуждения  $W_{1.5}$  нормировалась на классическое значение при  $\varepsilon_0 = \varepsilon_q$ . Таким образом были получены зависимости  $\tilde{W}_{1.5}(\tilde{\varepsilon}_0) = W_{1.5}^q(\varepsilon_0)/W_{1.5}^{cl}(\varepsilon_q)$  для разных  $\tilde{\varepsilon}_0 = \varepsilon_0/\varepsilon_q$  (рис. 16). Если выражение (3.5.1) является верным, то все линии на рис. 16 для разных  $n_0, \omega_0$  должны при  $\tilde{\varepsilon}_0 = 1$  собраться в одну точку  $\tilde{W}_{1.5}(\tilde{\varepsilon}_0) = 1$ . Из рис. 16 видно, что такой эффект действительно имеет место и, следовательно, граница делокализации дается соотношением (3.5.1).

Следует, однако, отметить, что, строго говоря, выражение (3.5.1) справедливо только для  $\omega_0 \geq 1$ . При  $\omega_0 < 1$ , его можно рассматривать только как грубую оценку, основанную на том, что на высоких уровнях, где  $\omega n^3 > 1$ , длина локализации по-прежнему дается формулой (3.3.6). При этом существенно то, что для  $\omega_0 < 1$  возбуждение не является диффузионным, поскольку в этой области значительную роль играют первый  $s=1$  и дробные  $s=p/q < 1$  резонансы, размер которых достаточно велик. Поэтому уже за один полуоборот вокруг такого резонанса происходит сильное изменение  $n$ , что можно рассматривать как эффективное увеличение напряженности поля  $\varepsilon_0$ . Наиболее сильно этот эффект проявляется, когда частота  $\omega_0$  оказывается немного меньше, чем  $s=1, 1/2$ , например  $\omega_0 = 0.7, 0.4$ . Такое динамическое усиление возбуждения приводит к тому, что для  $\omega_0 < 1$  распределение вероятности по уровням близко к классическому даже для небольших значений  $n_0$ . Пример сравнения классического и квантовых распределений для  $n_0 = 10, 20, 30, 45, 66, 100$  при  $\omega_0 = 0.7$  показан на рис. 17. Из него видно, что удовлетворительное согласие наблюдается даже для  $n_0 = 10, 20$ , где уже  $\varepsilon_0 > \varepsilon_q$ . Поэтому, по-видимому, при  $\omega_0 < 1$  формулу (3.5.1) можно рассматривать как грубую оценку сверху для истинной величины  $\varepsilon_q$ . При этом, однако, надо иметь в виду, что область  $\omega_0 \ll 1$  требует отдельного исследования.

С уменьшением  $\omega_0$  или увеличением  $n_0$  граница делокализации (3.5.1) оказывается меньше классической границы хаоса (3.1.6), (3.1.16) и поэтому именно последняя определяет границу ионизации.

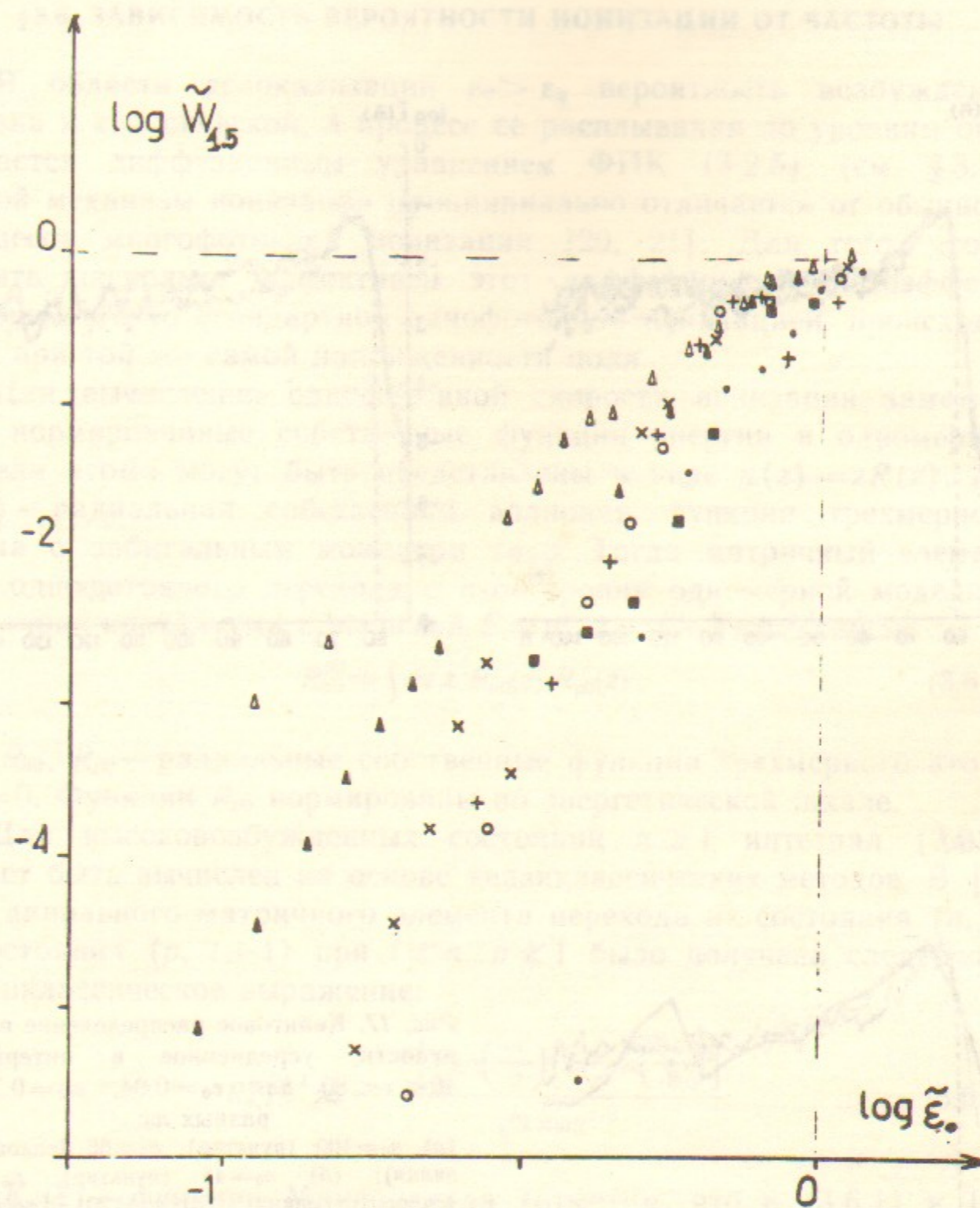


Рис. 16. Вероятность возбуждения после 60 периодов поля как функция напряженности поля для разных значений  $n_0, \omega_0$ .

$\tilde{W}_{1.5}(\tilde{\varepsilon}_0) = W_{1.5}^q(\varepsilon_0)/W_{1.5}^{cl}(\varepsilon_q)$  дает отношение квантовой вероятности возбуждения при заданном  $\varepsilon_0$  к классической вероятности при  $\varepsilon_0 = \varepsilon_q$ ;  $\tilde{\varepsilon}_0 = \varepsilon_0/\varepsilon_q$  — перенормированная напряженность поля:  $n_0 = 30, \omega_0 = 3$  ( $\Delta$ );  $n_0 = 45, \omega_0 = 1$  ( $\blacksquare$ );  $n_0 = 45, \omega_0 = 3$  ( $\blacktriangle$ );  $n_0 = 66, \omega_0 = 1$  ( $\bullet$ );  $n_0 = 66, \omega_0 = 2$  ( $\times$ );  $n_0 = 66, \omega_0 = 3$  ( $\times$ );  $n_0 = 100, \omega_0 = 3$  ( $\circ$ ). То, что все точки сходятся в точке  $\tilde{W}_{1.5} = 1, \tilde{\varepsilon}_0 = 1$ , является численным подтверждением выражения для границы делокализации (3.5.1).

### § 3.6. ЗАВИСИМОСТЬ ВЕРОЯТНОСТИ ИОНИЗАЦИИ ОТ ЧАСТОТЫ

В области делокализации  $\varepsilon_0 > \varepsilon_q$  вероятность возбуждения близка к классической, а процесс ее расплывания по уровням описывается диффузионным уравнением ФПК (3.2.5) (см. § 3.7). Такой механизм ионизации принципиально отличается от обычного процесса многофотонной ионизации [20, 21]. Для того, чтобы понять насколько эффективен этот диффузионный фотоэффект, сравним его со стандартной однофотонной ионизацией, происходящей при той же самой напряженности поля.

Для вычисления однофотонной скорости ионизации заметим, что нормированные собственные функции энергии в одномерной модели атома могут быть представлены в виде  $u(z) = zR(z)$ , где  $R(z)$  — радиальная собственная волновая функция трехмерного атома с орбитальным моментом  $l=0$ . Тогда матричный элемент для однофотонного перехода с  $n$ -го уровня одномерной модели в состояние континуума с энергией  $E = p^2/2 = \omega - 1/2n^2$  равен:

$$R_{n0}^{p0} = \int dz z^3 R_{n0}(z) R_{p0}(z), \quad (3.6.1)$$

где  $R_{n0}$ ,  $R_{p0}$  — радиальные собственные функции трехмерного атома с  $l=0$ . Функции  $R_{p0}$  нормированы по энергетической шкале.

Для высоковозбужденных состояний  $n \gg 1$  интеграл (3.6.1) может быть вычислен на основе квазиклассических методов. В [6] для дипольного матричного элемента перехода из состояния  $(n, l)$  в состояние  $(p, l \pm 1)$  при  $l \ll n$ ,  $p \ll 1$  было получено следующее квазиклассическое выражение:

$$R_{n,l}^{p,l \pm 1} \approx - \frac{il^2 \left[ K_{2/3} \left( \frac{\omega l^3}{3} \right) \pm K_{1/3} \left( \frac{\omega l^3}{3} \right) \right]}{\sqrt{3} \pi \omega n^{3/2}} \quad (3.6.2)$$

где  $K_\nu(\xi)$  — функции Макдональда (отметим, что в (3.6.1) и [6] используются разные нормировки). При малых  $\xi$  второе слагаемое в (3.6.2) мало по сравнению с первым, в котором для  $\xi \rightarrow 0$  можно воспользоваться асимптотикой

$$K_{2/3}(\xi) \approx 0.459(3\pi)^{1/2} \left( \frac{3}{2} \xi \right)^{-2/3}.$$

В результате получаем квазиклассическое выражение для (3.6.1):

$$R_{n0}^{p0} \approx R_{n0}^{p1} \approx 0.459 \cdot 2^{2/3} \cdot (-i) n^{-3/2} \omega^{-5/3} / \sqrt{\pi}. \quad (3.6.3)$$

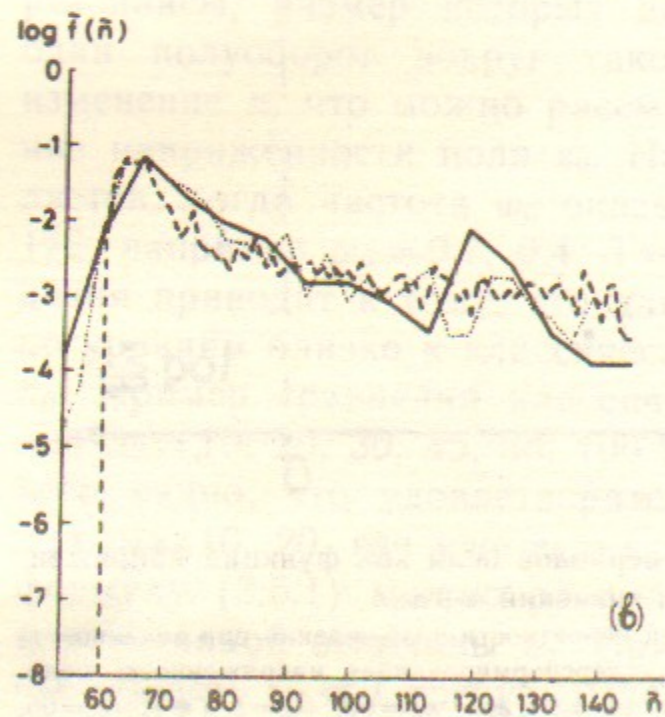
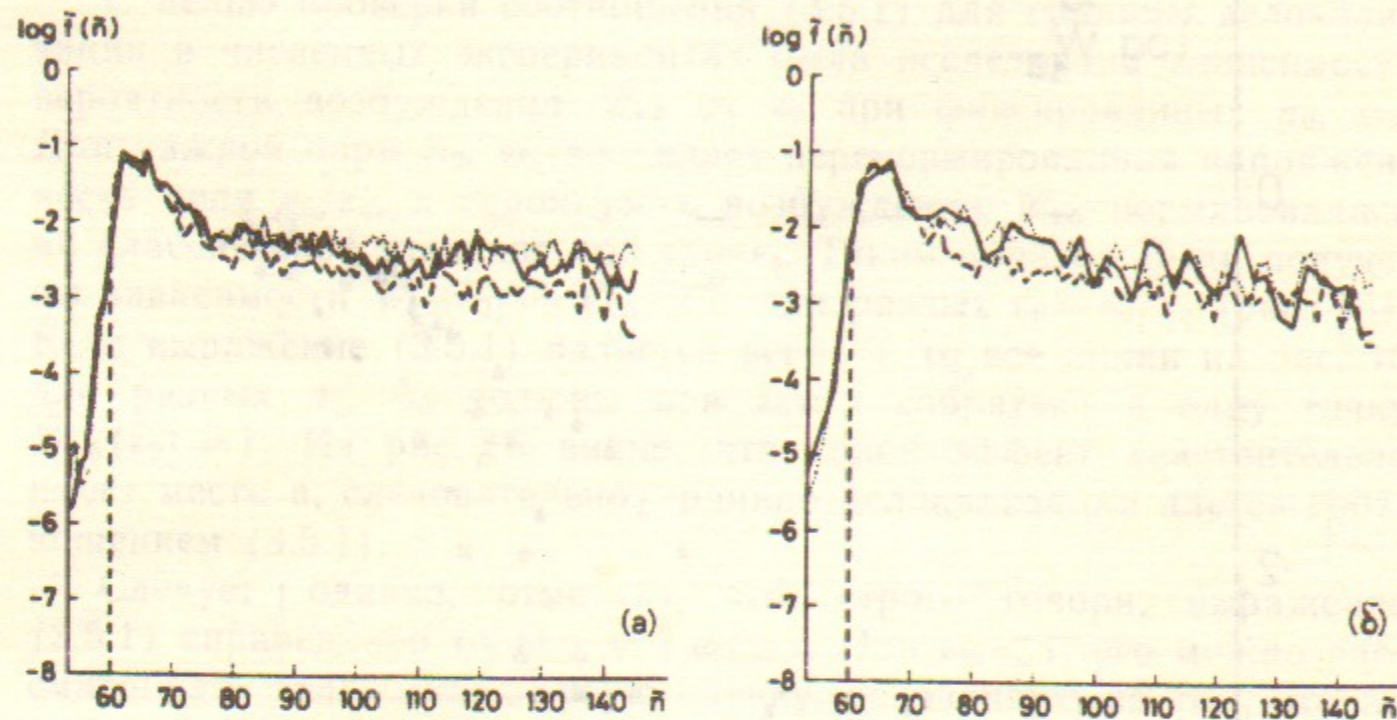


Рис. 17. Квантовое распределение вероятности, усредненное в интервале  $40 < \tau < 80$  для  $\varepsilon_0 = 0.04$ ,  $\omega_0 = 0.7$  и разных  $n_0$ :

(а)  $n_0 = 100$  (пунктир),  $n_0 = 66$  (сплошная линия); (б)  $n_0 = 45$  (пунктир),  $n_0 = 30$  (сплошная линия); (в)  $n_0 = 20$  (пунктир),  $n_0 = 10$  (сплошная линия). Штриховая линия показывает классическое распределение. Для сравнения квантовых распределений с разными  $n_0$  использовались перенормированные переменные  $f = \frac{n_0}{66} j$  и  $\tilde{n} = \frac{66}{n_0} n$ .

Тогда скорость ионизации в единицу времени равна

$$\Gamma_1 = \frac{\pi}{2} \varepsilon^2 |R_{n0}^{p0}|^2 \approx \frac{0.265 \varepsilon^2}{n^3 \omega^{10/3}}, \quad (3.6.4)$$

а за один период поля скорость станет равной

$$\gamma_1 = \frac{2\pi}{\omega} \Gamma_1 \approx 1.67 \frac{\varepsilon_0^2 n_0^2}{\omega_0^{13/3}} \quad (3.6.5)$$

(для  $\omega_0 \geq n_0/2$ ). Полученное значение оказывается в 3/2 раза больше чем в [6] из-за отсутствия усреднения по сферическому углу.

Для сравнения однофотонной скорости ионизации с диффузионной выберем наиболее оптимальный режим для каждого процесса. В однофотонном случае примем  $\omega \approx 1/2n_0^2$  и тогда  $\gamma_1 \approx 34\varepsilon_0^2/n_0^{7/3}$ . Для диффузионного процесса скорость  $\gamma_D \sim \tau_I^{-1}$  максимальна при  $\omega_0 \approx 1$  (см. (3.2.4)), так что  $\gamma_D \sim \varepsilon_0^2$ .

Таким образом, из полученных результатов следует, что диффузионная ионизация происходит при частотах, много меньших, чем для однофотонной ионизации, а ее скорость намного больше (см. I, [11, 36, 37]):

$$\frac{\gamma_D}{\gamma_1} \sim \frac{n_0^{7/3}}{34}. \quad (3.6.6)$$

Для реального физического времени каждое  $\gamma_D$ ,  $\gamma_1$  должно быть умножено на свою оптимальную частоту и отношение скоростей становится равным

$$\frac{\Gamma_D}{\Gamma_1} \sim n_0^{4/3}/16. \quad (3.6.7)$$

Это отношение также велико при  $n_0 \gg 1$ .

Для проверки полученных результатов были проведены численные эксперименты, в которых исследовалась зависимость вероятности ионизации из состояний с  $n_0=30$  и  $n_0=66$  от частоты. Напряженность поля выбиралась таким образом, что двухфотонная ионизация была существенно меньше однофотонной. Кроме того, его величина была меньше границы статической ионизации  $\varepsilon_0 < \varepsilon_s = 0.13$ . В этом случае должно наблюдаться резкое уменьшение вероятности ионизации ниже однофотонного порога  $\omega_0 < \omega_\Phi = n_0/2$ .

Примеры зависимости вероятности ионизации  $W_I$  от частоты

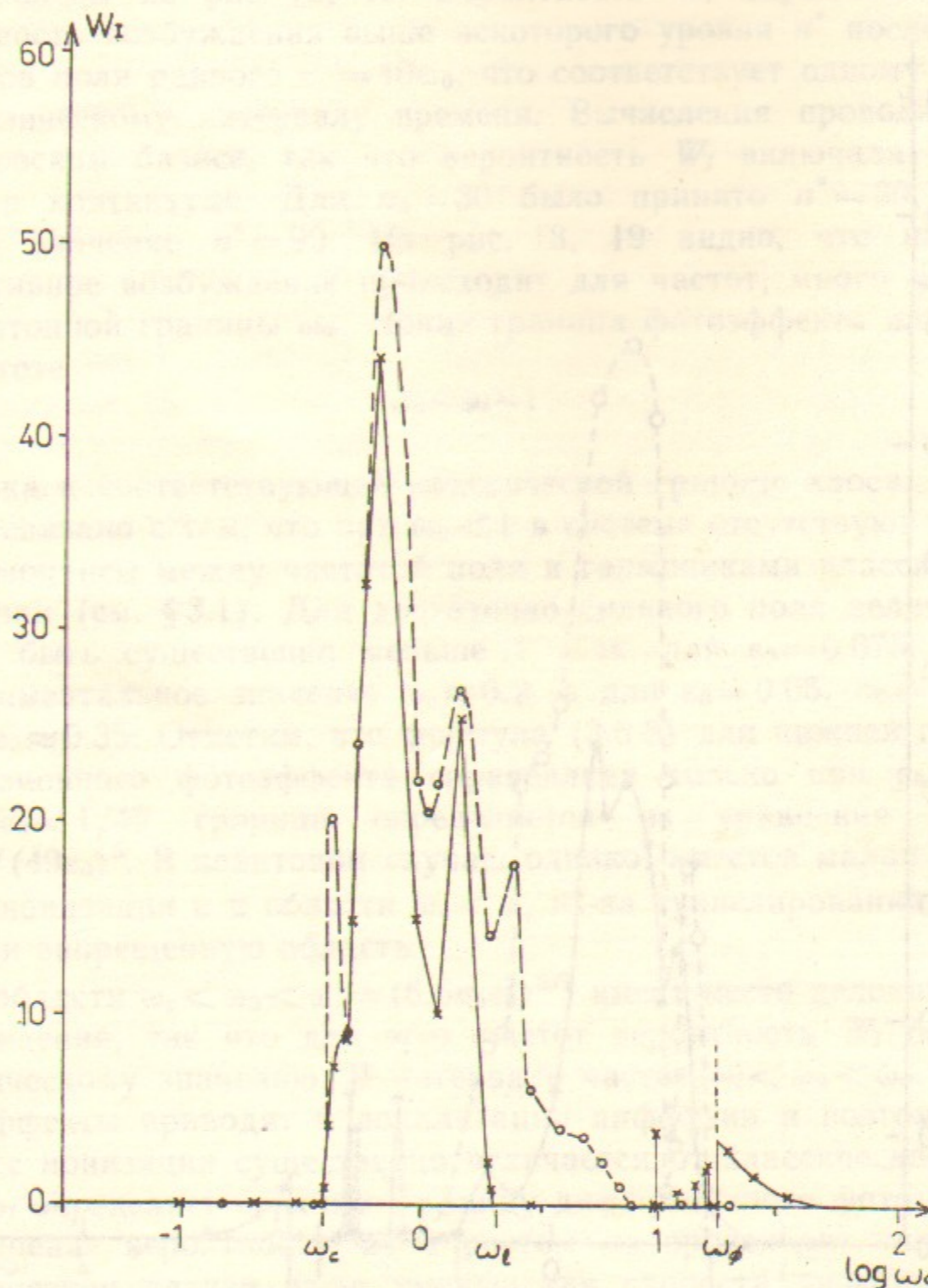


Рис. 18. Зависимость вероятности ионизации  $W_I = \sum_{n>n^*} |C_n|^2$  от частоты поля  $\omega_0$  после  $\tau = 40\omega_0$  периодов поля, что соответствует одному и тому же физическому времени  $t$  для всех частот. Здесь  $n_0=66$ ,  $\varepsilon_0=0.05$ ,  $n^*=99$ , \* — квантовые численные данные,  $\circ$  — классические. Значение однофотонной границы  $\omega_\Phi$  несколько меньше  $n_0/2$  из-за конечности  $n^*$ .

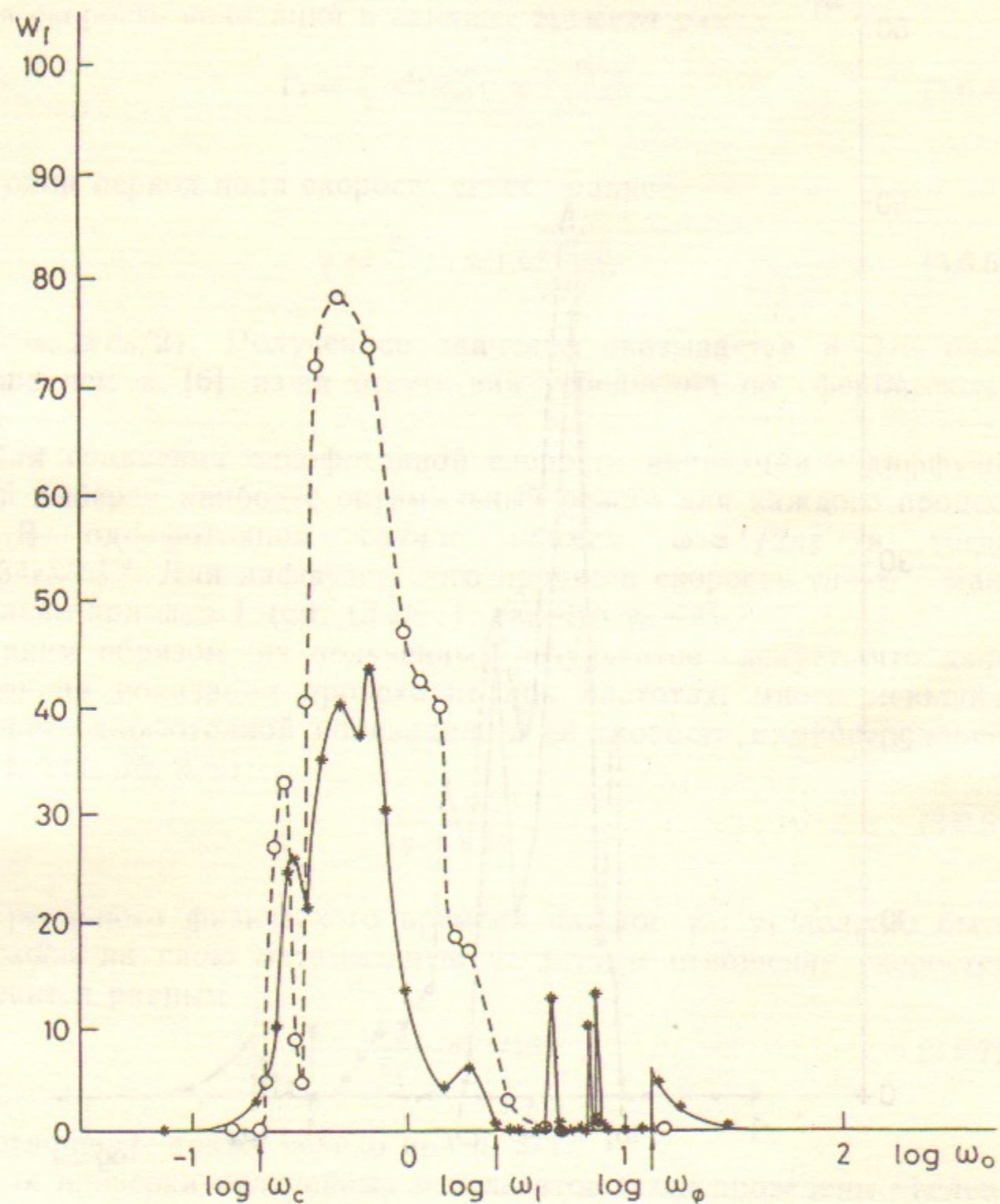


Рис. 19. То же, что и на рис. 18 с  $n_0=30$ ,  $\epsilon_0=0.075$ ,  $n^*=90$ .

представлены на рис. 18, 19. Вероятность  $W_I$  определялась как вероятность возбуждения выше некоторого уровня  $n^*$  после числа периодов поля равного  $\tau = 40\omega_0$ , что соответствует одному и тому же физическому интервалу времени. Вычисления проводились в штурмовском базисе, так что вероятность  $W_I$  включала вероятность в континууме. Для  $n_0=30$  было принято  $n^*=90$ , а для  $n_0=66$  значение  $n^*=99$ . Из рис. 18, 19 видно, что наиболее эффективное возбуждение происходит для частот, много меньших однофотонной границы  $\omega_\phi$ . Новая граница фотоэффекта находится на частоте

$$\omega_0 \sim \omega_c \sim 1 \quad (3.6.8)$$

и близка к соответствующей классической границе хаоса. То, что  $\omega_c \sim 1$ , связано с тем, что при  $\omega_0 < 1$  в системе отсутствуют первичные резонансы между частотой поля и гармониками классического движения (см. § 3.1). Для достаточно сильного поля величина  $\omega_c$  может быть существенно меньше 1. Так, для  $\epsilon_0=0.075$ ,  $n_0=30$  экспериментальное значение  $\omega_c \approx 0.2$ , а для  $\epsilon_0=0.05$ ,  $n_0=66$  граница  $\omega_c \approx 0.35$ . Отметим, что формула (3.6.8) для нижней границы диффузионного фотоэффекта справедлива только при  $\epsilon_0 > 1/49$ . Для  $\epsilon_0 < 1/49$  граница определяется из уравнения (3.1.6):  $\omega_c \approx 1/(49\epsilon_0)^{3/7}$ . В квантовом случае, однако, имеется малая вероятность ионизации и в области  $\omega_0 < \omega_c$  из-за туннелирования в классически запрещенную область.

В области  $\omega_c < \omega_0 < \omega_l = (6.6n_0\epsilon_0^2)^{3/7}$  имеет место делокализация возбуждения, так что для этих частот вероятность  $W_I$  близка к классическому значению. В интервале частот  $\omega_l < \omega_0 < \omega_\phi$  квантовые эффекты приводят к локализации диффузии и поэтому здесь процесс ионизации существенно отличается от классического. Частота  $\omega_l$  определяет верхнюю границу диффузионного фотоэффекта. Уменьшение вероятности  $W_I$  с ростом  $\omega_0$  происходит также и в классическом случае из-за уменьшения скорости диффузии с  $\omega_0$  (3.2.5). Действительно, для диффузионного процесса вероятность возбуждения выше уровня  $n^*$  будет близкой к нулю, если время взаимодействия с полем  $\tau \ll (n^* - n_0)^2 / D_{n_0}$ . Однако, в классической системе уменьшение  $W_I$  происходит гораздо более плавным образом, чем в квантовом случае, где  $W_I$  экспоненциально падает с  $\omega_0$  (см. (3.6.10)). В той области частот, где уже возможна двухфотонная ионизация, в квантовом случае для специальных значений частот может происходить резкое увеличение вероятности  $W_I$  из-за промежуточных резонансов на дискретных уровнях. Это приводит

к появлению острых пиков в зависимости  $W_I(\omega_0)$ , которые отчетливо видны на рис. 18, 19. Однако, ширина таких двух- и трехфотонных пиков очень мала и поэтому они не влияют на общую картину ионизации в этой области частот.

Для частот  $\omega_0 \approx \omega_\Phi$  вероятность  $W_I$  резко возрастает, поскольку становится возможной прямая однофотонная ионизация. При этом, однако, вероятность  $W_I$  существенно меньше, чем для  $\omega_0 \approx 0.7$ , когда возможна диффузионная ионизация. Для  $\omega_0 > \omega_\Phi$  численные данные удовлетворительно согласуются с теоретической формулой (3.6.5), что служит еще одним подтверждением того, что штурмовский базис правильно учитывает непрерывный спектр.

Зависимость вероятности возбуждения в классическом случае от  $\omega_0$  для разных  $\epsilon_0$  представлена на рис. 20. Характерные минимумы вблизи целых значений  $\omega_0$  объясняются тем, что часть тра-

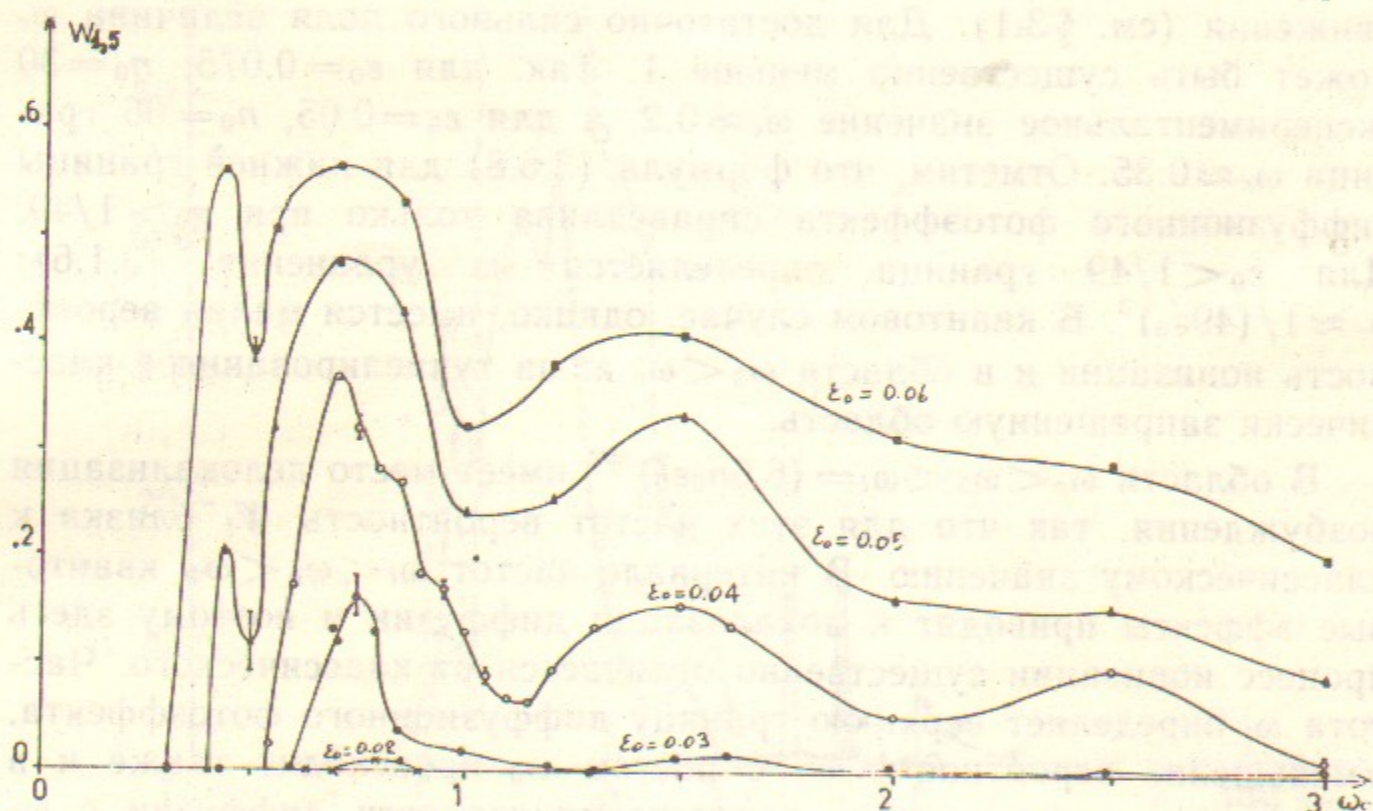


Рис. 20. Классическая вероятность возбуждения  $W_{1.5}$ , после  $\tau = 40\omega_0$ , как функция частоты для разных значений напряженности поля.

Здесь  $W_{1.5}$  — полная вероятность в состояниях выше  $n = 1.5n_0$ ;  $\times$  —  $\epsilon_0 = 0.02$ ;  $\circ$  —  $\epsilon_0 = 0.03$ ;  $\triangle$  —  $\epsilon_0 = 0.04$ ;  $\blacktriangle$  —  $\epsilon_0 = 0.05$ ;  $\blacksquare$  —  $\epsilon_0 = 0.06$ .

екторий из начального распределения ( $n = n_0$ ,  $0 \leq \lambda < 2\pi$ ) попадает в устойчивые области резонансов, находящихся в целых  $\omega_0$  (см. рис. 7), в которых она остается навсегда и поэтому не дает вклада в  $W_{1.5}$ . По этой же причине наблюдается минимум для  $\omega_0 = 1/2$ , соответствующий дробному резонансу. Максимумы при  $\omega_0 \approx 0.4$ ,  $0.7$  связаны с динамическим усилением возбуждения, которое

обсуждалось в §3.5. С увеличением  $\epsilon_0$  размер областей устойчивости уменьшается и зависимость  $W_{1.5}(\omega_0)$  становится более плавной. Значение поля  $\epsilon_0$ , выше которого центры резонансов становятся неустойчивыми, можно получить из линеаризованного стандартного отображения (3.1.15), в котором основной резонанс разрушается при  $K = 49\omega_0^{1/3}\epsilon_0 = 4$ . При  $\omega_0 = p/q < 1$  условия разрушения дробных резонансов с небольшими  $p, q$  были численно найдены в [22]. Отметим, что характерная зависимость рис. 20 сохраняется и в трехмерном случае (см. [23]).

Сравнение классической и квантовых вероятностей при разных значениях  $n_0$  и  $\epsilon_0 = 0.04$  представлено на рис. 21. С ростом  $\omega_0 > 1$  квантовая вероятность  $W_{1.5}$  становится существенно меньше классической, что связано с увеличением границы делокализации (3.5.1). Из рис. 20, 21 видно, что при  $\epsilon_0 = 0.04$  классическая вероятность максимальна для  $\omega_0 \approx 0.7$ . Для этих частот квантовые вероятности близки к классической, так же, как и распределения по уровням на рис. 17, а, б, и поэтому можно считать, что для этих параметров имеет место делокализация. Такая же ситуация происходит и для  $\omega_0 = 0.43$  при немного более сильном поле  $\epsilon_0 = 0.05$  (рис. 18). При этом граница делокализации фактически совпадает с границей хаоса, которая, согласно данным рис. 20, лежит в интервале  $0.04 \leq \epsilon_0 < 0.05$ .

Пример тонкой структуры зависимости  $W_{1.5}(\omega_0)$  показан на рис. 22. Из него видно, что в области локализации наблюдается резонансная зависимость  $W_{1.5}$  от частоты, связанная с многофотонными переходами между дискретными состояниями. При переходе к области делокализации  $\omega_0 \leq 0.7$  эта зависимость становится более плавной. Аналогичное сглаживание происходит вблизи  $\omega_0 \approx 1$ , при увеличении  $n_0$  от 30 до 100.

Обсудим теперь особенности ионизации в области локализации, когда  $N_I > l_\Phi > k > 1$ . В этом случае за один толчок в континуум попадает приблизительно вся вероятность, которая находится на «фотонных» уровнях с  $N_I - k < N_\Phi < N_I$ . Поэтому скорость ионизации, измеряемая в числе итераций отображения (3.4.2), равна:

$$\gamma_\Phi \sim \sum_{N=N_I-k}^{N_I} \bar{f}_N \sim k \bar{f}_{N_I}, \quad (3.6.9)$$

где  $\bar{f}_N$  — стационарное распределение (3.4.4). Учитывая, что характерный интервал времени между итерациями  $\sim (k\omega)^{-3/2}$ , после



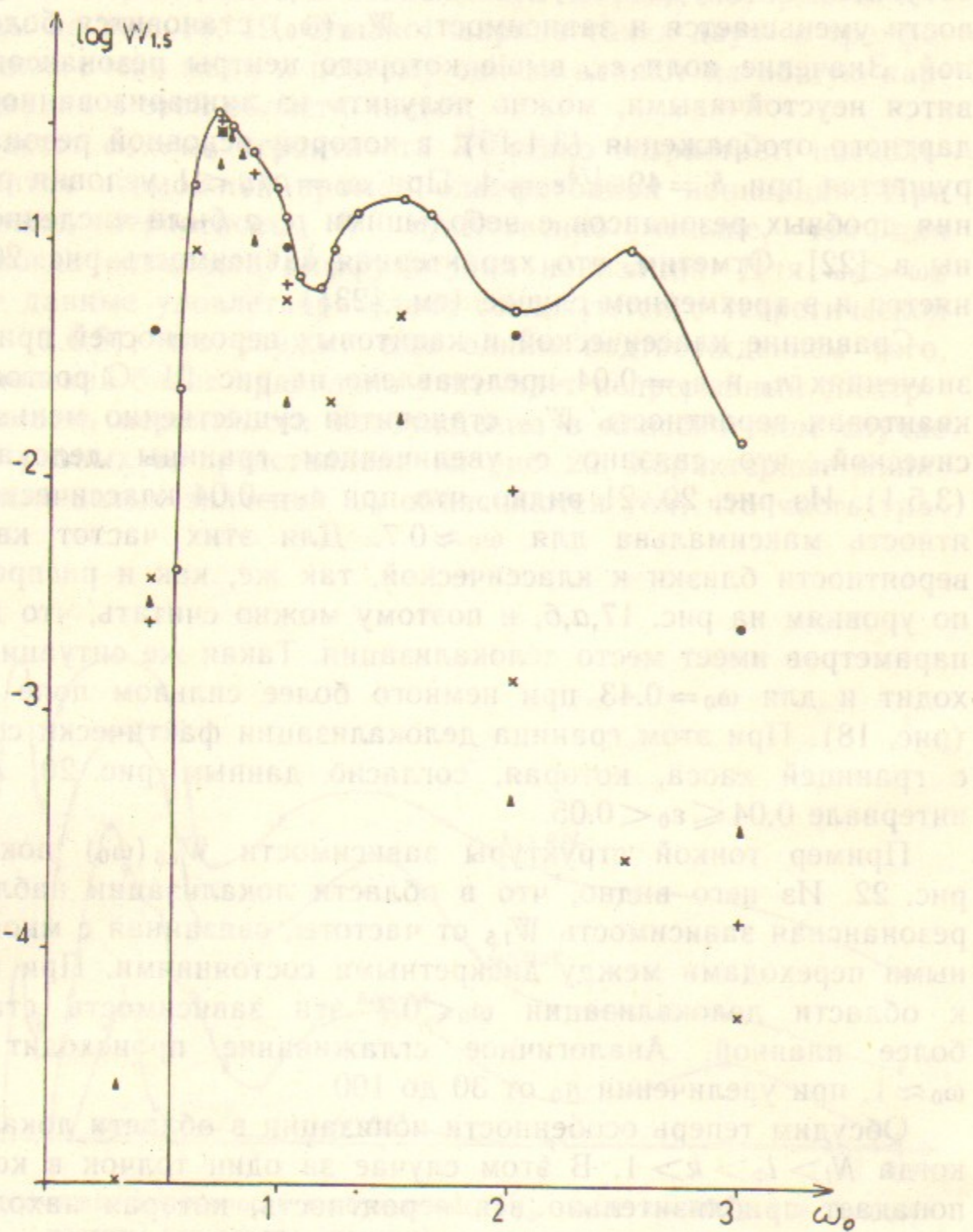


Рис. 21. Вероятность возбуждения  $W_{1.5}$  как функция частоты  $\omega_0$  при  $\tau = 40\omega_0$ ,  $\epsilon_0 = 0.04$  и разных  $n_0$ :  
 ● —  $n_0 = 30$ ; ▲ —  $n_0 = 45$ ; × —  $n_0 = 66$ ; + —  $n_0 = 100$ . Сплошная линия с кружками показывает классическую вероятность возбуждения.

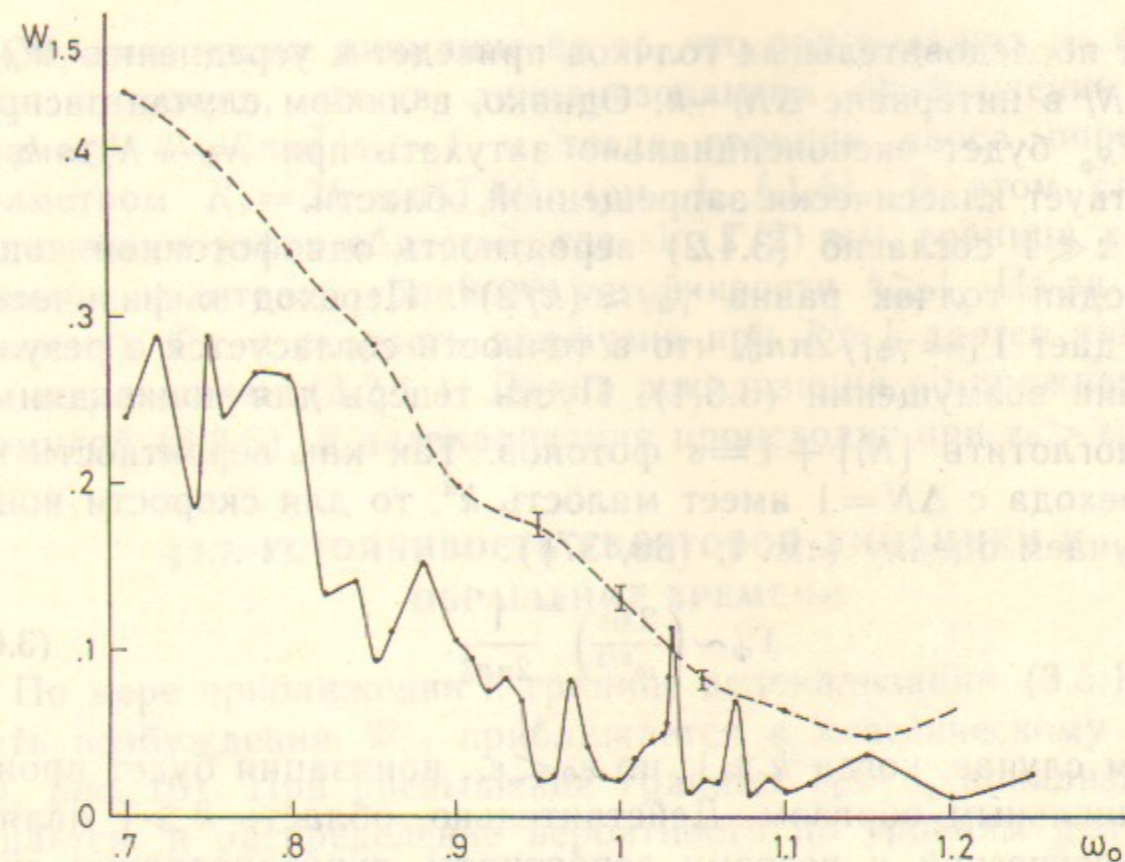


Рис. 22. Зависимость вероятности возбуждения от частоты в небольшом частотном интервале для  $\tau = 40$ ,  $\epsilon_0 = 0.04$ ,  $n_0 = 45$  (сплошная линия); штриховая — классическая вероятность.

перехода к физическому времени из (3.6.9) и (3.4.4) получим

$$\Gamma_\Phi \sim k \bar{f}_N(k\omega)^{3/2} \sim \frac{\omega^{5/4}}{\sqrt{n_0}} \left(\frac{\epsilon_q}{\epsilon_0}\right)^{3/2} \exp\left(-2\left(\frac{\epsilon_q}{\epsilon_0}\right)^2\right). \quad (3.6.10)$$

В той области, где стационарное распределение экспоненциально мало,  $\bar{f}_N$  очень чувствительно к малым изменениям параметров, например, напряженности поля  $\epsilon_0$ . Кроме того, распределение  $\bar{f}_N$  только в среднем описывается выражением (3.4.4), а на длине локализации оно сильно флуктуирует. Поскольку при  $\epsilon_0 \ll \epsilon_q$  скорость ионизации определяется только малым интервалом значений  $\Delta n \sim k \ll l_\Phi$  (см. (3.6.9)), то эти флуктуации скажутся и на скорости ионизации, которая будет очень нерегулярной изрезанной функцией, например,  $\epsilon_0$ .

Распределение ионизованных электронов по энергии получается из квантового отображения Кеплера (3.4.2). Действительно, из разложения  $e^{-ik \cos \Phi}$  в ряд Фурье видно, что после одного толчка вероятность иметь энергию  $E = N_\Phi \omega - 1/2n_0^2$  равна  $W_{N_\Phi} = |J_{N_\Phi - [N_i]}(k)|^2$ , где  $[N_i]$  обозначает целую часть от  $N_i < N_\Phi$  ( $k \gg 1$ ). Этот результат находится в согласии с [19]. Эффект не-

скольких последовательных толчков приведет к усреднению  $W_{N_\Phi}$  по разным  $N_i$  в интервале  $\Delta N_i \sim k$ . Однако, в любом случае распределение  $W_{N_\Phi}$  будет экспоненциально затухать при  $N_\Phi - N_i > k$ , что соответствует классически запрещенной области.

При  $k \ll 1$  согласно (3.4.2) вероятность однофотонной ионизации за один толчок равна  $\gamma_{\Phi 2} \approx (k/2)^2$ . Переход к физическому времени дает  $\Gamma_1 = \gamma_{\Phi 1} / 2\pi n_0^3$ , что в точности согласуется с результатом теории возмущений (3.6.4). Пусть теперь для ионизации требуется поглотить  $[N_i] + 1 = s$  фотонов. Так как вероятность каждого перехода с  $\Delta N = 1$  имеет малость  $k^2$ , то для скорости ионизации получаем оценку (см. I, [36, 37]):

$$\Gamma_\Phi \sim \left( \frac{2.6\epsilon}{\omega^{5/3}} \right)^{2s} \frac{1}{2\pi n_0^3}. \quad (3.6.11)$$

В том случае, когда  $k \gg 1$ , но  $\epsilon_0 < \epsilon_c$ , ионизация будет происходить туннельным образом. Действительно, область  $k \gg 1$  является квазиклассической и поэтому вероятность туннелирования сквозь инвариантные кривые в классически запрещенную область будет экспоненциально мала. По аналогии с туннелированием в постоянном поле скорость ионизации в этом случае очень грубо можно оценить как

$$\Gamma_\Phi \sim \Gamma_D \exp(-cn_0(\epsilon_c - \epsilon_0)/\epsilon_0), \quad (3.6.12)$$

где численный множитель  $c \sim 1$ , а  $\Gamma_D$  учитывает время ионизации из хаотической компоненты. Интересно отметить, что в области такой туннельной ионизации

$$\frac{\omega_0^{5/3}}{2.6n_0} \ll \epsilon_0 < \epsilon_c \approx (49\omega_0^{1/3})^{-1}$$

адиабатический параметр Келдыша [24]

$$\gamma_K = \frac{\omega}{\epsilon n_0} = \frac{\omega_0}{\epsilon_0},$$

который описывает переход от теории возмущений (многофотонная ионизация при  $\gamma_K \gg 1$ ) к туннелированию ( $\gamma_K \ll 1$ ), может быть очень большим  $\gamma_K \gg 1$ . Так, например, при  $\epsilon_0 \approx \epsilon_c$  и  $n_0 \gg 50\omega_0^2$  параметр  $\gamma_K \approx 50\omega_0^{4/3} \gg 1$ . Причина возникновения такого различия связана с тем, что в рассматриваемой задаче между начальным уровнем и континуумом имеется много промежуточных состояний, играющих существенную роль.

Обратим также внимание на то, что при больших  $\omega_0$  возникает такая ситуация, что в линеаризованном отображении (3.1.15) параметр  $T = 6\pi\omega_0^2/n_0 > 1$  и тогда граница хаоса определяется параметром  $K_1 = 2k \cdot \sin(T/2)$  (см. I, §1.5). В этом случае, за исключением узких областей, где  $\sin(T/2) \approx 0$ , граница хаоса совпадает с квантовой границей устойчивости  $k \geq 1$ . Из-за быстрого изменения  $T$  с  $n$  скорость диффузии при  $T \gg 1$  дается квазилинейным выражением (3.2.1). Длина локализации по-прежнему дается формулой (3.3.6), а делокализация происходит при  $\epsilon_0 > \epsilon_q$  (3.5.1).

### §3.7. УСТОЙЧИВОСТЬ КВАНТОВОЙ ДИНАМИКИ И ОБРАЩЕНИЕ ВРЕМЕНИ

По мере приближения к границе делокализации (3.5.1) вероятность возбуждения  $W_{1.5}$  приближается к классическому значению (см. рис. 16). При превышении границы  $\epsilon_0 > \epsilon_q$  локализация разрушается, и распределение вероятности по уровням должно быть близко к классическому. Пример сравнения распределений в области делокализации представлен на рис. 23,а. Из него видно, что квантовое распределение действительно близко к классическому и оба они вполне удовлетворительно описываются решением диффузионного уравнения (3.2.8). Кроме того, близки и вероятности возбуждения  $W_{1.5}$ .

Тем не менее, даже в области делокализации квантовая динамика принципиально отличается от классической тем, что ее движение является устойчивым (см. I, §1.4). Наиболее ярко это различие проявляется при обращении времени. Действительно, хотя точные уравнения обратимы в моменты времени  $\pi t/\omega$  (см. I, (1.8.2)), но даже малые ошибки округления в компьютере в классической системе приводят к быстрой потере обратимости из-за экспоненциальной локальной неустойчивости движения. В квантовом случае устойчивость приводит к обратимости динамики.

Результаты численных экспериментов по проверке обратимости движения в области делокализации представлены на рис. 23, 24 [35, 37]. До момента обращения времени ( $\tau = 60$ ) диффузионное возбуждение идет и в квантовой, и в классической системе (рис. 23,а; 24). При  $\tau = 60$  делалось обращение скоростей у всех 1000 классических траекторий, а волновая функция заменялась на комплексно-сопряженную. В классической системе из-за экспоненциальной неустойчивости движения ошибки округления приводят к тому, что уже через несколько периодов поля обратимость сменя-

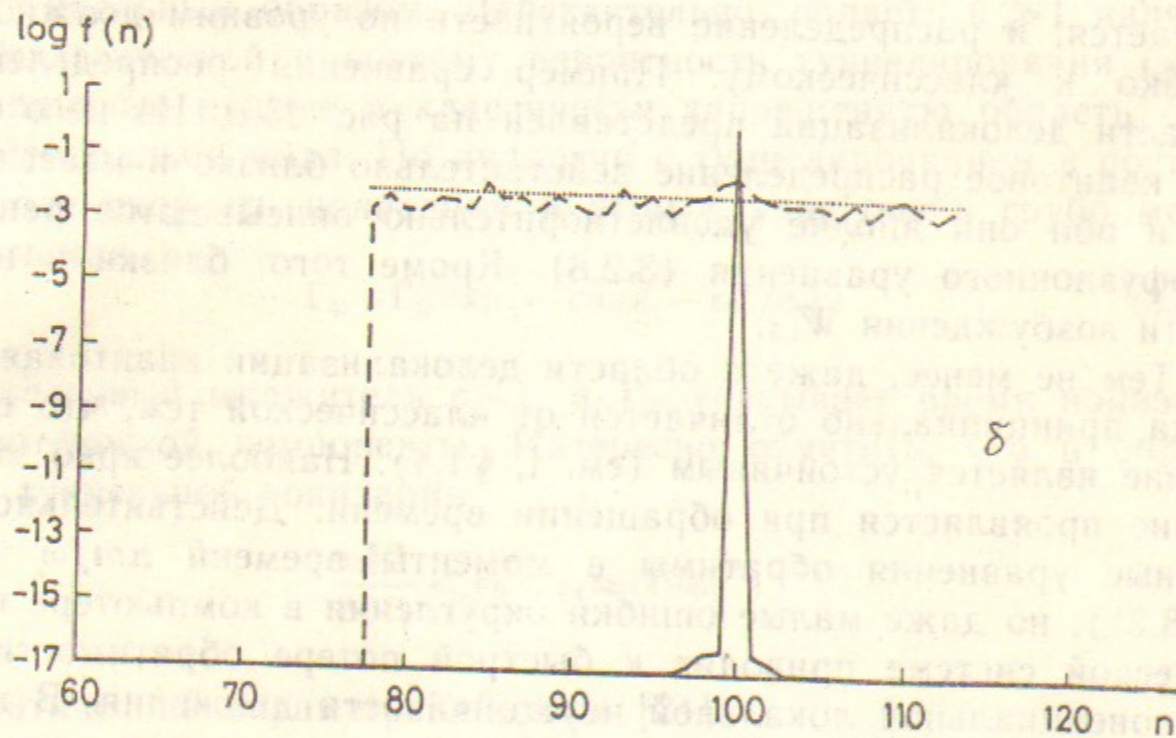
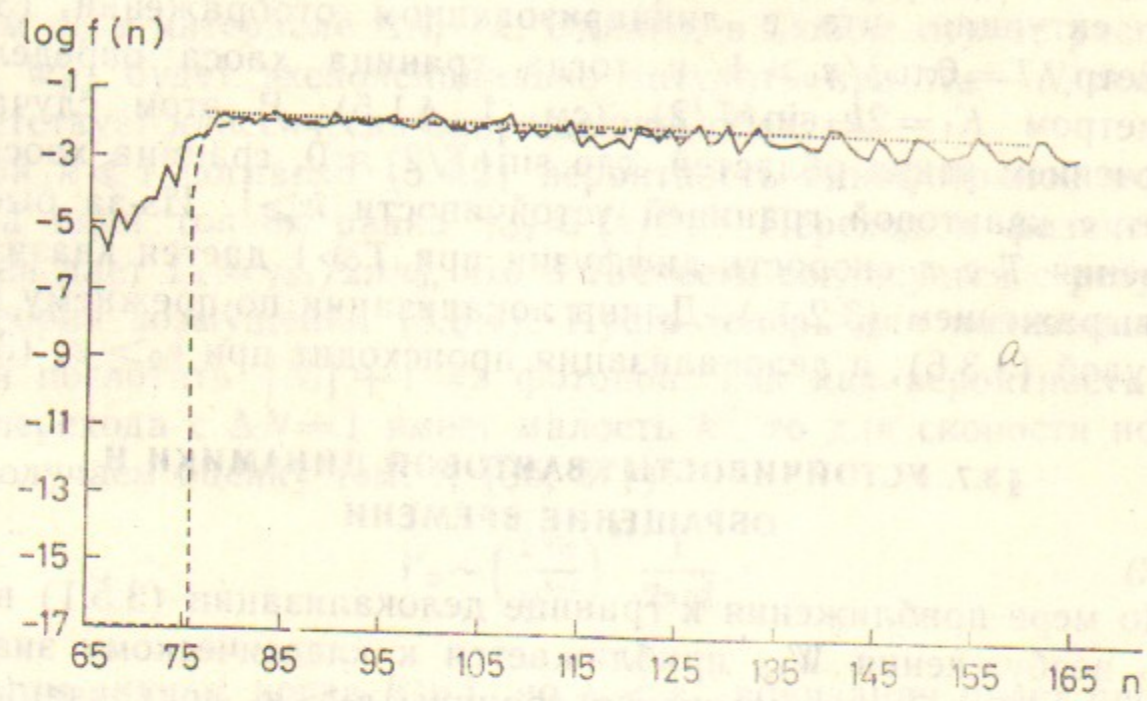


Рис. 23. а — Классическое (штриховая линия) и квантовое (сплошная линия) распределения  $f(n)$  для  $n_0=100$ ,  $\epsilon_0=0.08$ ,  $\omega_0=1.5$  в момент времени  $t=60$ . Пунктирная линия — аналитическое решение (3.2.8) уравнения ФПК. б — Эти же распределения в момент времени  $t=120$  после обращения скоростей (времени) при  $t=60$ . Классическое распределение удовлетворительно согласуется с (3.2.8) при  $t=120$ .

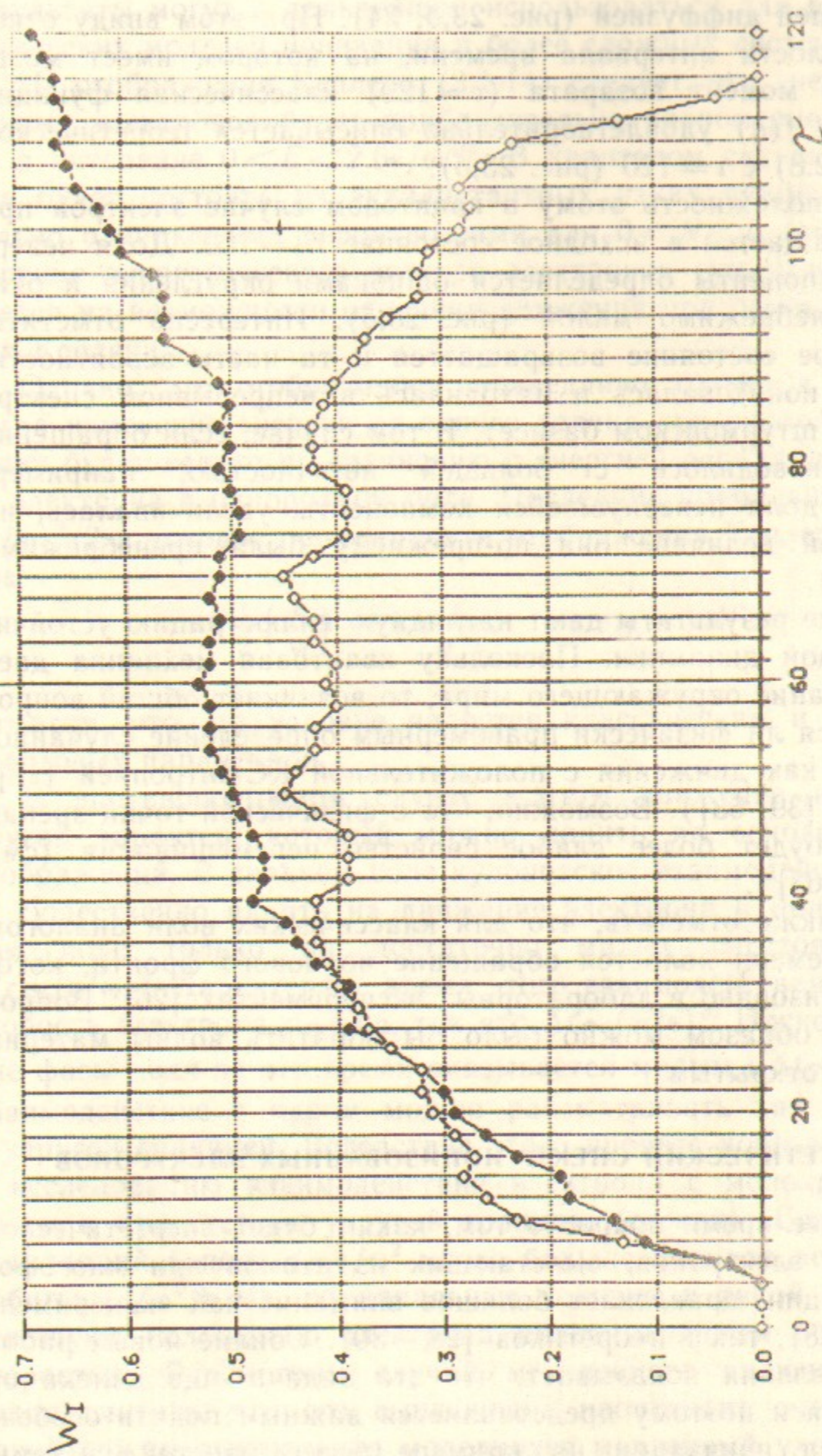


Рис. 24. Классическая (◆) и квантовая (◇) вероятности ионизации (возбуждение выше  $n^*=150$ ) как функция числа периодов поля для случая с рис. 23. Обращение времени происходит при  $t=60$ .

ется дальнейшей диффузией (рис. 23,б, 24). При этом ввиду относительной малости интервала времени, на котором имеет место обращение, в момент возврата ( $\tau=120$ ) классическая функция распределения  $f(n)$  удовлетворительно описывается теоретической формулой (3.2.8) с  $\tau=120$  (рис. 23,б).

В противоположность этому в квантовом случае электрон при  $\tau=120$  возвращается в исходное состояние  $n_0=100$ . Доля невернувшейся компоненты определяется ошибками округления и оказывается пренебрежимо малой (рис. 23,б). Интересно отметить, что в исходное состояние возвращается и та часть вероятности, которая уже ионизовалась и находилась в непрерывном спектре (счет велся в штурмовском базисе). В том случае, если обращение времени производилось с большей неточностью, например,  $\Delta\tau \sim 10^{-2}$ , то доля невернувшейся компоненты увеличивалась, но по абсолютной величине она по-прежнему была пренебрежимо мала ( $\sim 10^{-4}$ ).

Полученные результаты дают наглядную иллюстрацию устойчивости квантовой динамики. Поскольку квантовая механика дает истинное описание окружающего мира, то возникает общий вопрос о том, является ли физически правомерным определение случайного движения, как движения с положительной КС-энтропией [25], (см. также I, [39, 63]). Возможно, что с физической точки зрения достаточным будет более слабое свойство перемешивания (см., например, I, [63]).

Следует также отметить, что для классических волн аналогом обращения времени является обращение волнового фронта, которое было реализовано в лабораторных экспериментах [26]. Вопрос о том, каким образом можно было бы обратить волны материи остается пока открытым.

### §3.8. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ИОНИЗОВАННЫХ ЭЛЕКТРОНОВ

В настоящее время вопрос о том, каким будет энергетическое распределение электронов, вылетающих из атомов при многофотонной ионизации, привлекает большое внимание как экспериментаторов [27, 28], так и теоретиков [28—30]. Обилие новых работ в этом направлении показывает, что эта задача еще далека от своего решения и поэтому представляется важным понять особенности процесса ионизации на примере более простой системы высоковозбужденного атома водорода. Полученные таким образом

результаты могут в дальнейшем использоваться для проверки теоретических моделей ионизации в более сложных системах.

Из отображения Кеплера (3.1.14) следует, что энергия ионизованных электронов будет приблизительно равномерно распределена в интервале  $0 < E < 2.6\varepsilon/\omega^{2/3}$ . В квантовом случае распределение будет состоять из эквидистантных узких пиков с приблизительно одинаковыми вероятностями для  $0 < N < k$  (см. §3.6). Эта картина энергетического спектра электронов существенно основывается на возможности описания движения при помощи отображения Кеплера.

Однако, это отображение справедливо только в том случае, когда изменение энергии от одного толчка при прохождении перигелия будет велико по сравнению с энергией осцилляций свободного электрона в однородном поле. Последняя приблизительно равна  $(\varepsilon/\omega)^2/2$  и условие применимости отображения Кеплера принимает вид

$$\frac{1}{2} \left( \frac{\varepsilon}{\omega} \right)^2 \ll 2.6 \frac{\varepsilon}{\omega^{2/3}}, \quad \varepsilon \ll \varepsilon_{ATI} \approx 5\omega^{4/3}. \quad (3.8.1)$$

Отметим, что это условие является классическим и не содержит квантовых параметров.

В противоположном случае  $\varepsilon \gg \varepsilon_{ATI}$  движение имеет совсем другой характер, который можно понять на основе следующих соображений. В сильном поле кулоновское взаимодействие начинает существенно влиять на движение электрона в монохроматическом поле только на достаточно малых расстояниях, когда  $1/r \sim (\varepsilon/\omega)^2$ . Характерное время этого взаимодействия  $\Delta t \sim r/v$ , где скорость электрона  $v \sim \varepsilon/\omega$ , так что  $\Delta t \sim (\omega/\varepsilon)^3$ . Поскольку изменение фазы поля за это время оказывается малым  $\omega\Delta t \sim \omega^4/\varepsilon^3 \ll 1$ , то взаимодействие с ядром можно рассматривать как столкновение с упругой границей. Вследствие этого процесс ионизации сводится к исследованию взаимодействия электрона с монохроматическим полем в присутствии упругой границы (стенки). Если амплитуда осцилляций в поле  $z \sim \varepsilon/\omega^2$  много больше размера невозмущенной орбиты ( $\varepsilon/\omega^2 \gg n_0^2$ ), то начальные условия в такой модели соответствуют положению электрона вблизи границы с очень малой скоростью. Рассмотрим случай мгновенного включения поля и будем считать, что его выключение происходит очень медленно. Такой режим выключения моделирует медленный уход ионизованных электронов из области взаимодействия с полем. Тогда энергия вылетевшего электрона определяется начальной фазой поля

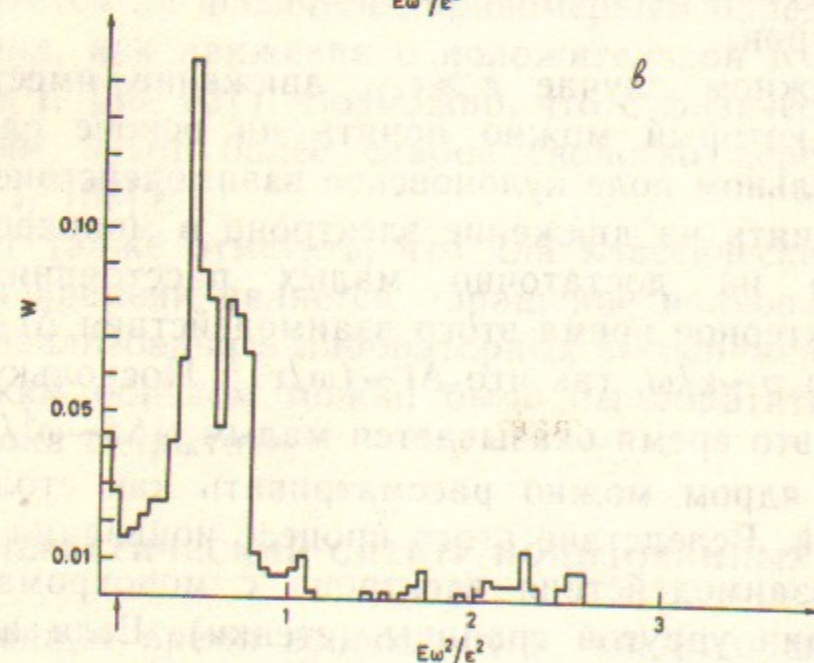
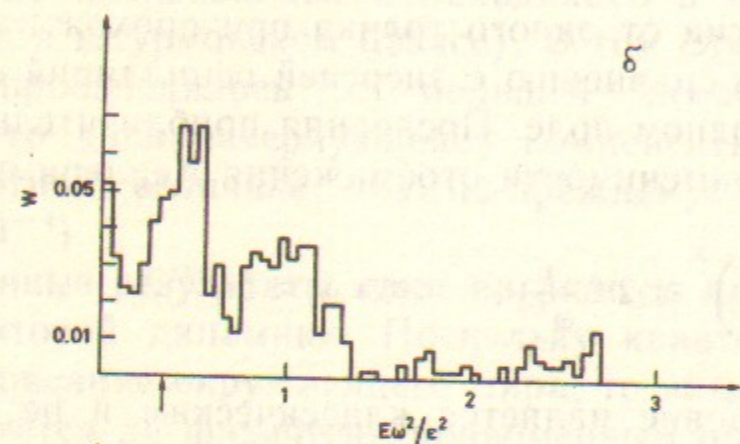
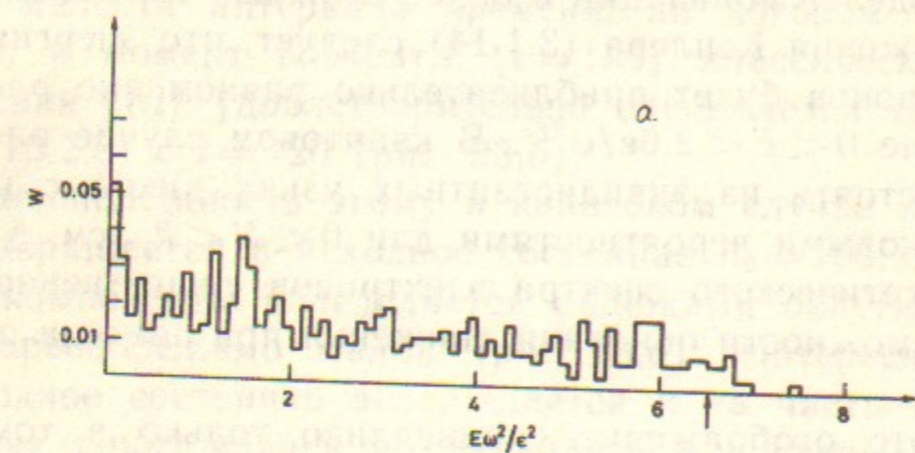


Рис. 26. Энергетическое распределение ионизованных электронов для ансамбля из 500 классических траекторий, равномерно распределенных по орбитальной фазе и фазе поля,  $\omega_0 = 2$ :  $\epsilon_0 = 1 \ll \epsilon_{0ATI} \approx 13$  (а);  $\epsilon_0 = 20$  (б);  $\epsilon_0 = 80$  (в). Стрелки показывают амплитуду одного толчка.

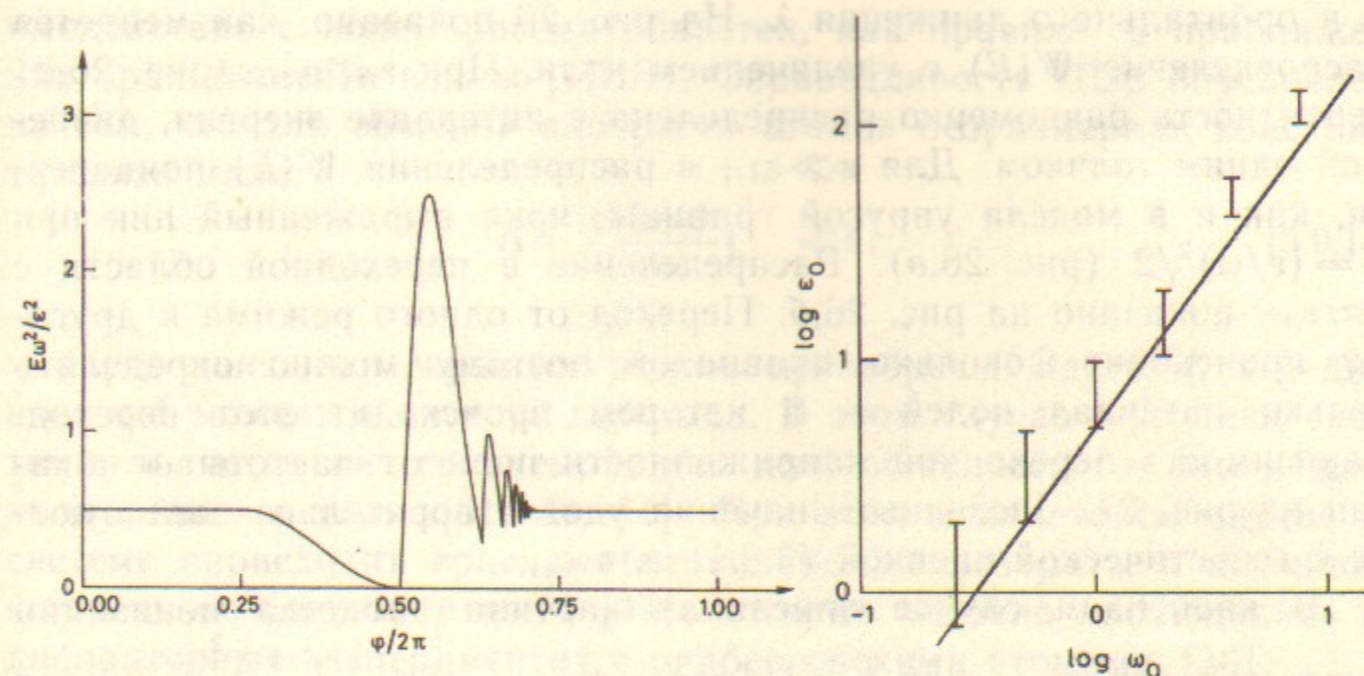


Рис. 25. Зависимость энергии ионизации  $E$  от начальной фазы поля в модели с упругой границей.

Рис. 27. Интервалы напряженностей полей (вертикальные отрезки), в которых, согласно численным данным, происходит переход от отображения Кеплера к модели упругой границы. Прямая линия — теоретическая оценка (3.8.1).

$\epsilon \cos(\omega t + \varphi)$ , а функция распределения по энергии получается из равномерного распределения по этой фазе.

Зависимость энергии ионизации  $E$  от фазы  $\varphi$ , найденная путем численного моделирования модели с упругой границей, представлена на рис. 25. Так как распределение по фазе  $\varphi$  равномерно, то из этого рисунка легко получается распределение по энергии. Как видно, около 50% начальных значений  $\varphi$  дает одну и ту же энергию ионизации  $E = (\epsilon/\omega)^2/2$ , что соответствует дельта-функции в энергетическом распределении. Для фаз  $0 < \varphi < \pi/2$  число столкновений электрона с границей растет до бесконечности при  $\varphi \rightarrow 0$ . Для  $\pi/2 < \varphi < \pi$  электрон уходит на бесконечность, не испытав ни одного столкновения. В интервале  $\pi < \varphi < 3\pi/2$  число столкновений меняется от одного до  $\infty$ , причем каждое число соответствует максимуму на кривой. При  $3\pi/2 < \varphi < 2\pi$  число столкновений обратно пропорционально начальной скорости электрона, которая предполагается очень малой.

Для проверки предсказаний описанной простой модели численно исследовался процесс ионизации в одномерной системе (см. I, (1.8.2)). Всего интегрировалось 500 траекторий с одинаковой начальной энергией и равномерно распределенными фазами поля

ф и орбитального движения  $\lambda$ . На рис. 26 показано, как меняется распределение  $W(E)$  с увеличением поля. При  $\varepsilon \ll \varepsilon_{ATI}$  (рис. 26,а) вероятность равномерно распределена в интервале энергии, даваемой одним толчком. Для  $\varepsilon \gg \varepsilon_{ATI}$  в распределении  $W(E)$  появляется, как и в модели упругой границы, ярко выраженный пик при  $E = (\varepsilon/\omega)^2/2$  (рис. 26,в). Распределение в переходной области с  $\varepsilon \approx \varepsilon_{ATI}$  показано на рис. 26,б. Переход от одного режима к другому происходит довольно плавно, и поэтому можно определить только интервал полей  $\varepsilon$ , в котором происходит этот переход. Зависимость переходной напряженности поля от частоты  $\omega$  показан на рис. 27. Численные значения удовлетворительно согласуются с теоретической оценкой (3.8.1) для  $\varepsilon_{ATI}$ .

В квантовом случае описанная картина процесса ионизации будет справедлива, если  $k \gg 1$  (для  $\varepsilon \ll \varepsilon_{ATI}$ ) или  $\frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon}{\omega}\right)^2 \gg \omega$  (для  $\varepsilon \gg \varepsilon_{ATI}$ ). Действительно, в последнем случае распределение будет иметь вид эквидистантных пиков с интервалом  $\omega$ . Так как расстояние между ними много меньше, чем  $\frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon}{\omega}\right)^2$ , то, как и в классическом случае, будет наблюдаться большой пик в распределении  $W(E)$  на энергии  $\frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon}{\omega}\right)^2$  много большей энергии одного кванта  $\omega$ .

### § 3.9. ХАОС ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ АТОМОВ С САМОСОГЛАСОВАННЫМ ПОЛЕМ В СЛУЧАЕ МАЛОЙ КОНСТАНТЫ СВЯЗИ

До сих пор при исследовании возбуждения электрона внешнее монохроматическое поле резонатора считалось заданным. Такое приближение справедливо в том случае, когда энергия, требуемая для ионизации всех атомов в резонаторе, много меньше энергии поля. Если же эти энергии сравнимы, то поле должно учитываться самосогласованным образом, что может существенно изменить физику процесса. В этом параграфе будут рассмотрены некоторые особенности взаимодействия атомов в одномерных состояниях ( $n_1 \ll n_2$  или  $n_1 \gg n_2$ ,  $m=0$ ) с самосогласованным полем.

Сама по себе, задача о взаимодействии атомов с самосогласованным полем в резонаторе, начиная с пионерской работы Джейнса и Каммингса [31], привлекает к себе большое внимание исследователей (см., например, [32—35]). При этом наиболее изученным является случай двухуровневых атомов [31, 33], а вза-

имодействие с полем рассматривается, как правило, в приближении вращающейся волны (ПВВ). Справедливость ПВВ обусловлена тем, что для обычной плотности атомов безразмерная константа связи мала:

$$\Lambda = \left(\frac{16\pi\rho d^2}{\hbar\omega}\right)^{1/2} \ll 1, \quad (3.9.1)$$

и нерезонансными членами можно пренебречь. Здесь  $d$ ,  $\omega$  — дипольный момент и частота перехода. В этом случае динамика системы является интегрируемой, как для классического, так и для квантованного поля [31, 33, 34]. При этом в квантовом случае в системе происходят красивые периодические возвраты в исходное когерентное состояние поля [34], которые недавно наблюдались в лабораторных экспериментах с ридберговскими атомами [36].

При  $\Lambda \sim 1$  влияние нерезонансных членов становится существенным, что приводит к нарушению ПВВ и возникновению хаоса [37—39]. Обзор исследований в этом направлении дан в [40]. Следует, однако, отметить, что для оптических частот осуществление этого необычного режима требует экстремально высокой плотности  $\rho \sim 10^{21} \text{ см}^{-3}$ , что делает проблематичным его экспериментальное наблюдение. Для ридберговских же атомов требуются настолько большие плотности, что расстояние между атомами становятся сравнимыми с их размерами.

Рассмотрим теперь модель атома, в которой хаос имеет место и при  $\Lambda \rightarrow 0$  (см. I, [47]). Модель представляет собой три приблизительно эквидистантных уровня. Матричные элементы перехода между всеми тремя уровнями отличны от нуля, причем примем, что  $V_{12} = V_{23} = d$ ,  $V_{13} = d_1 \neq 0$ . Физическим примером такой системы служит высоковозбужденный атом водорода в состояниях  $n_1 \gg n_2 \sim 1$ ,  $m=0$ , соответствующих одномерной модели. Если главное квантовое число  $n \gg 1$ , то спектр близок к эквидистантному и три его уровня как раз и дают рассматриваемую модель с  $d \approx 0.325n^2$  и  $d_1/d \approx 0.344$  (см. (2.1.14), (3.1.1)), (используем а.е.). Существенно новым элементом этой модели является возможность прямого перехода  $1 \rightarrow 3$ , который сравним с переходами  $1 \rightarrow 2$ ,  $2 \rightarrow 3$ . Это приводит к эффективному возбуждению двух полевых мод, если частоты резонатора близки к частотам перехода.

В ПВВ уравнения для напряженностей  $\varepsilon_1$ ,  $\varepsilon_2$  и амплитуд вероятности  $C_{1,2,3}$  на уровнях имеют вид [38, 40]:

$$\ddot{\varepsilon}_1 + \omega^2 \varepsilon_1 = 4\pi\omega^2 \rho d (C_1^* C_2 + C_1 C_2^* + C_2^* C_3 + C_2 C_3^*),$$

$$\begin{aligned} \ddot{\varepsilon}_2 + \omega_2^2 \varepsilon_2 &= 4\pi\omega_2^2 d_1 (C_1^* C_3 + C_1 C_3^*), \\ i\dot{C}_1 &= -(\varepsilon_1 d C_2 + \varepsilon_2 d_1 C_3), \\ i\dot{C}_2 &= \omega C_2 - \varepsilon_1 d (C_1 + C_3), \\ i\dot{C}_3 &= (2\omega + \Delta\omega) C_3 - (\varepsilon_1 d C_2 + \varepsilon_2 d_1 C_1), \end{aligned} \quad (3.9.2)$$

где  $\varepsilon_{1,2}$  и  $\omega_{1,2}$  — напряженности и частоты полевых мод в резонаторе, частоты переходов  $1 \rightarrow 2$  и  $2 \rightarrow 3$  соответственно равны  $\omega$  и  $\omega + \Delta\omega$ ,  $\hbar = 1$ . Эти уравнения могут быть записаны в гамильтоновой форме. Для этого удобно ввести канонические переменные действие-фаза:

$$C_j = \sqrt{2I_j} e^{i\theta_j}, \quad \dot{\varepsilon}_k / \omega_k + i\varepsilon_k = (16\pi\omega_k J_k)^{1/2} e^{i\psi_k}, \quad j=1,2,3; \quad k=1,2.$$

После чего, проводя усреднение по быстрым осцилляциям в ПВВ, получаем гамильтониан:

$$\begin{aligned} H &= I_2 + (2 + \delta)I_3 + \nu_1 J_1 + \nu_2 J_2 - \\ &- \Lambda \left\{ \sqrt{J_1} \left[ \sqrt{I_1 I_2} \sin(\varphi_1 - \theta_2 + \theta_1) + \sqrt{I_2 I_3} \sin(\varphi_1 - \theta_3 + \theta_2) \right] + \right. \\ &\quad \left. + D \sqrt{J_2 I_1 I_3} \sin(\varphi_2 - \theta_3 + \theta_1) \right\}, \end{aligned} \quad (3.9.3)$$

где сделана замена времени  $t' = \omega t$ , а  $\delta = \Delta\omega/\omega$ ,  $\nu_k = \omega_k/\omega$ ,  $D = \sqrt{\omega_2/\omega_1} d_1/d$ . Система (3.9.3) имеет два дополнительных интеграла движения:  $H_0 = I_2 + 2I_3 + J_1 + 2J_2$  и  $I_1 + I_2 + I_3 = 1/2$ . Первый из них дает сохранение энергии системы без учета взаимодействия, а второй соответствует сохранению нормировки вероятности на уровнях. Вводя три новых линейно независимых фазы

$$\chi_3 = \theta_3 - 2\theta_2 + \theta_1, \quad \psi_1 = \varphi_1 - \theta_2 + \theta_1, \quad \psi_2 = \varphi_2 - 2\theta_2 + 2\theta_1,$$

сопряженных действиям  $I_3, J_1, J_2$ , и новое время  $\tau = -\Lambda t'$  получаем окончательный гамильтониан:

$$\begin{aligned} K &= K_R + \Delta I_3 + \Lambda^{-1}((\nu_1 - 1)J_1 + (\nu_2 - 2)J_2) \\ K_R &= \left[ J_1 \left( \frac{1}{2} + I_3 + 2J_2 + J_1 - H_0 \right) (H_0 - 2I_3 - J_1 - 2J_2) \right]^{1/2} \sin \psi_1 + \\ &+ [J_1 I_3 (H_0 - 2I_3 - J_1 - 2J_2)]^{1/2} \sin(\psi_1 - \chi_3) + \\ &+ D \left[ J_2 J_3 \left( \frac{1}{2} + I_3 + 2J_2 + J_1 - H_0 \right) \right]^{1/2} \sin(\psi_2 - \chi_3), \end{aligned} \quad (3.9.4)$$

где  $\Delta = -\delta/\Lambda$ . В случае точного резонанса  $\Delta = 0$  и  $\nu_2 = 2\nu_1 = 2$  динамика системы (3.9.4) определяется резонансным гамильтонианом  $K_R$  и не зависит от малой константы связи (3.9.1). Если движение этой системы является хаотическим, то хаос в системе (3.9.2) будет сохраняться при сколь угодно малом  $\Lambda$ . Это красивое явление было обнаружено и исследовано в [41] для задачи взаимодействия трех волн. Такой же эффект возникает и при взаимодействии классических массивных однородных полей Янга—Миллса [42]. Отметим, что теорема КАМ (Колмогорова—Арнольда—Мозера) в данном случае неприменима из-за изохронности системы (2.9.3) при  $\Lambda = 0$  [43].

Исследование системы (3.9.4) проводилось методом численного моделирования при  $\nu_2 = 2\nu_1 = 2$ . Рассмотрим вначале случай точного резонанса  $\Delta = 0$ . Численные эксперименты показали, что в системе имеется хаотическая компонента, которая характеризуется положительным максимальным показателем Ляпунова  $\lambda_R > 0$ . Значение  $\lambda_R$  зависит от интегралов движения  $H_0, K_R$  и определяет максимальный показатель  $\lambda \approx \Lambda \lambda_R$  в системе (3.9.2). Положительность  $\lambda$  означает положительность КС-энтропии  $h \geq \lambda > 0$  и является одним из наиболее эффективных численных критериев хаотического движения (см. I, [17, 63]). Пример вычисления  $\lambda_R$  для хаотической ( $\lambda_R > 0$ ) и устойчивой ( $\lambda_R = 0$ ) траекторий представлен на рис. 28. Начальные условия соответствовали случаю, когда при  $\tau = 0$  поле в резонаторе отсутствовало ( $J_1 = J_2 = 0, K_R = 0$ ). Такое состояние нулевого поля осуществляется, когда атомы вле-

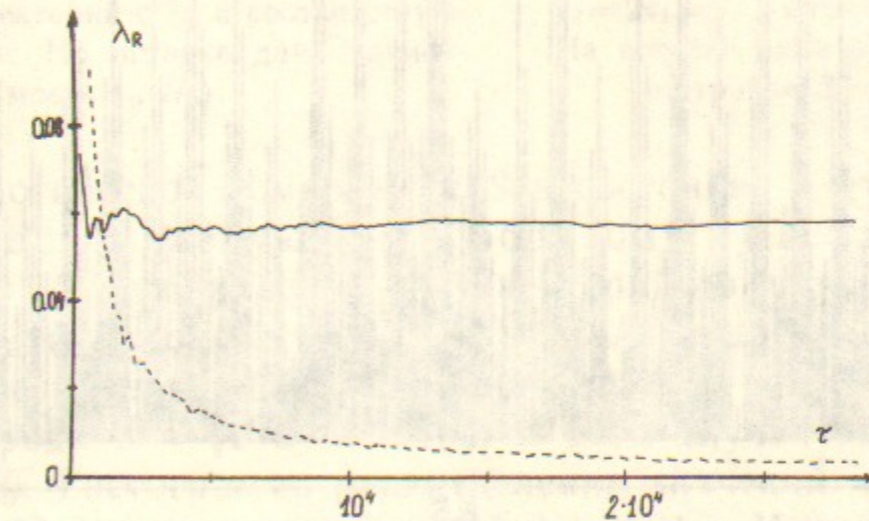
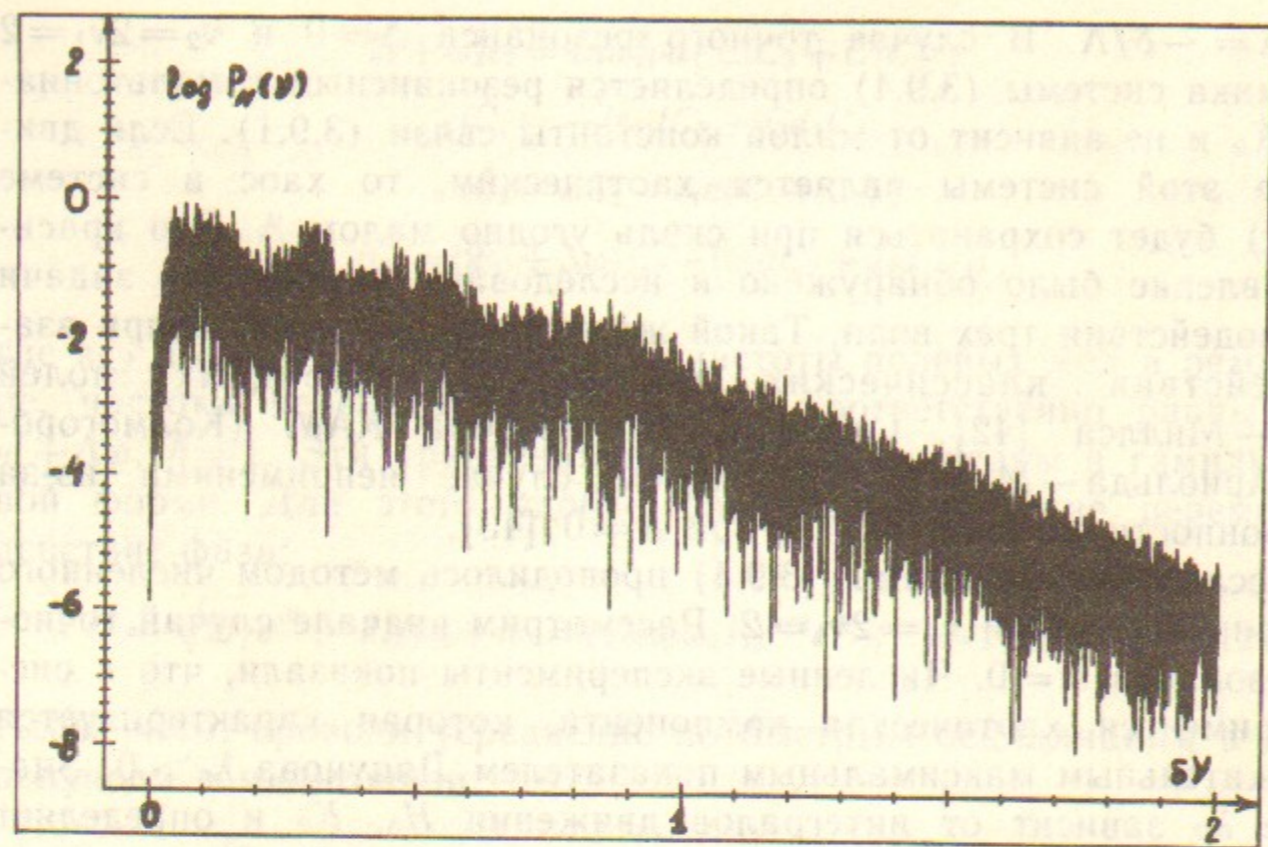
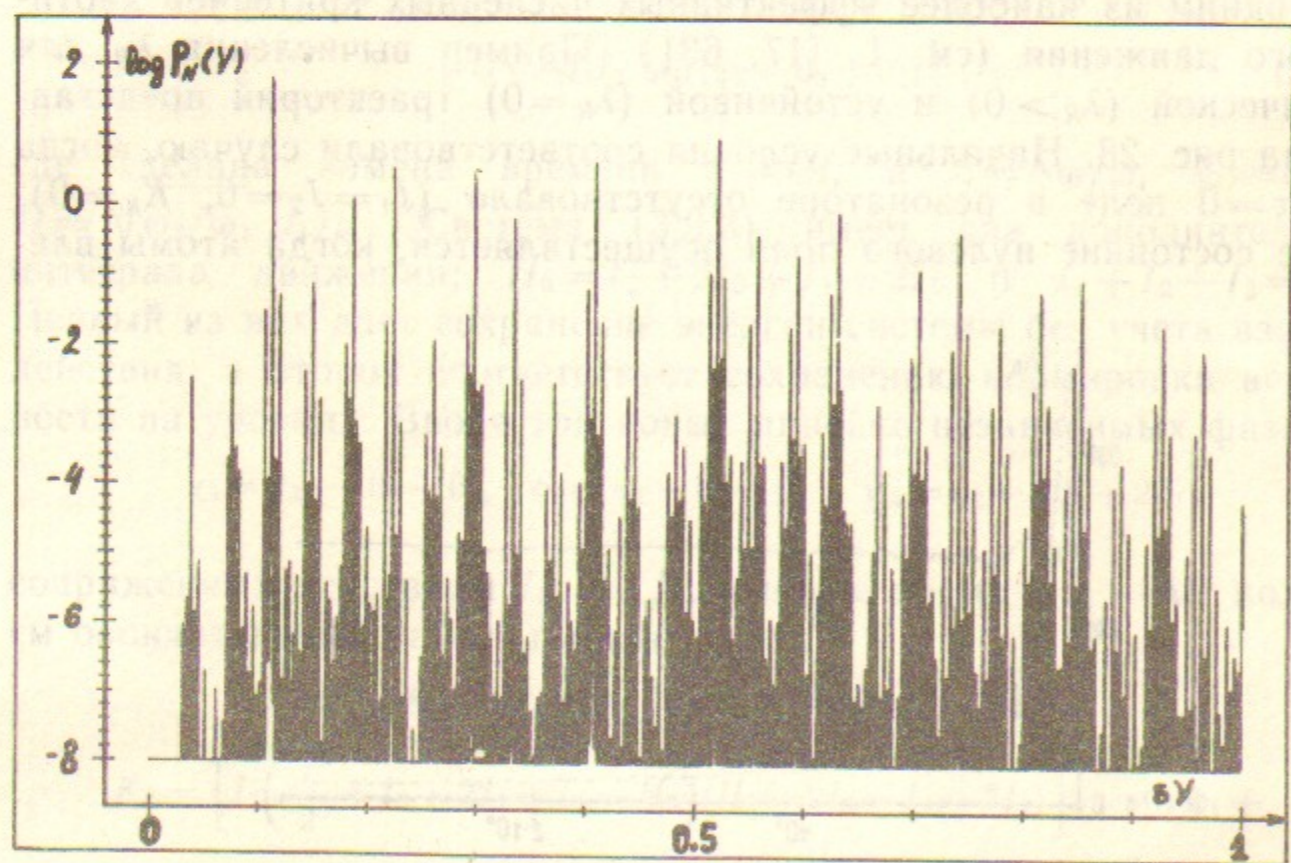


Рис. 28. Максимальный показатель Ляпунова  $\lambda_R$  в случае точного резонанса в (3.9.4).

Сплошная линия  $H_0 = 0.985$ ; штриховая —  $H_0 = 0.464$  ( $\lambda_R$  увеличено в 10 раз);  $K_R = 0$ .



a



б

Рис. 29. Нормированный спектр мощности дипольного момента  $d_{13}(t)$  для траекторий рис. 28,  $P_N(v) = \omega \Lambda P(v) / d_1^2$ ,  $\delta v = |v - 2\omega| / \Lambda \omega$ :  $\lambda_R > 0$  (a),  $\lambda_R = 0$  (б).

тают в невозбужденный резонатор. Спектр мощности  $P(v)$  дипольного момента

$$d_{13}(t) = \frac{d_1}{2} (C_1^* C_3 + C_1 C_3^*)$$

для траекторий рис. 28 приведен на рис. 29. При  $\lambda_R = 0$  спектр содержит только дискретные линии, а при  $\lambda_R > 0$  он становится непрерывным. В последнем случае основная часть мощности сосредоточена в области частот  $\delta v = |v - 2\omega| / \Lambda \omega \approx 1$ . Для получения  $P(v)$  использовалось быстрое преобразование Фурье для 16384 значений  $d_{13}(t)$ .

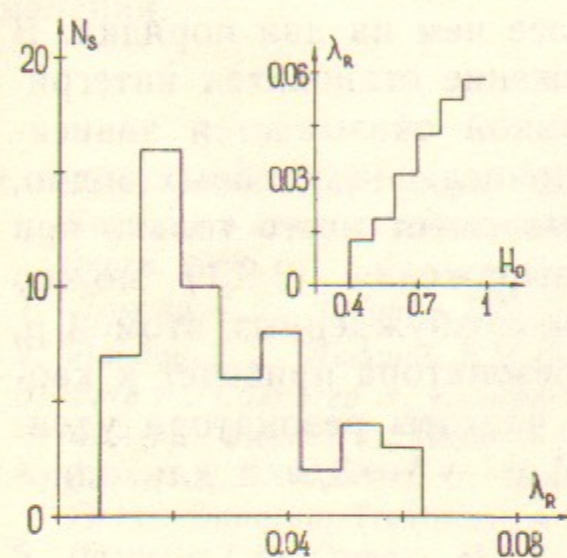


Рис. 30. Гистограмма распределения  $\lambda_R$  для системы (3.9.4) с  $\Delta = 0$ ,  $\nu_2 = 2\nu_1 = 2$ ,  $D = 1/2$  при  $K_R = 0$  (начально  $J_1 = J_2 = 0$ );  $N_s$  — число траекторий с  $\lambda_R$  в соответствующем интервале. На вставке дана зависимость  $\lambda_R(H_0)$ .

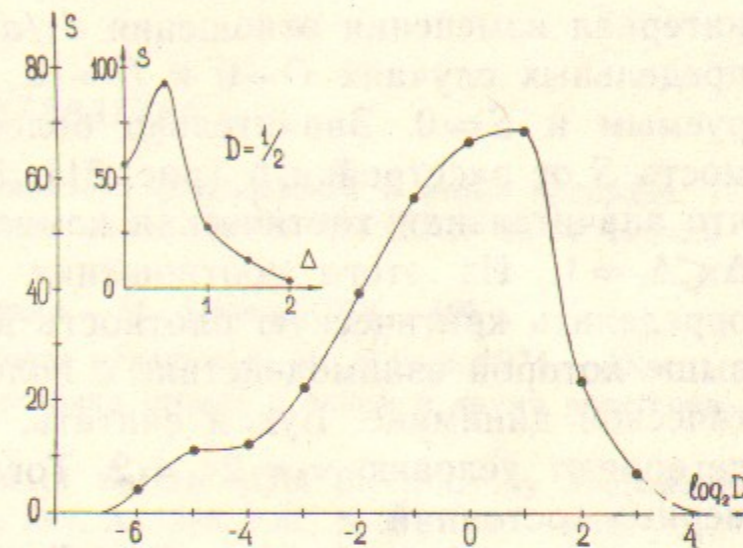


Рис. 31. Зависимость доли хаотической компоненты в (3.9.4) от параметра  $D = \sqrt{2} d_1 / d$  при  $\Delta = 0$ ,  $\nu_2 = 2\nu_1 = 2$ , начально  $J_1 = J_2 = 0$ . На вставке дана зависимость  $S$  от отстройки  $\Delta$  при  $D = 1/2$ .

Доля хаотической компоненты  $S$  в состоянии с нулевым полем определялась следующим образом. На поверхности  $I_1 + I_2 + I_3 = 1/2$  выбиралось 100 траекторий со случайными значениями  $I_j$ ,  $\theta_j$ , для которых вычислялось  $\lambda_R$ . Тогда число траекторий с  $\lambda_R > 0$  дает значение  $S$  в процентах. Для одномерной модели атома водорода  $D = \sqrt{2} d_1 / d \approx 1/2$ . В этом случае было получено, что  $S = 56\%$ . Гистограмма распределения значений  $\lambda_R$  представлена на рис. 30, среднее значение  $\langle \lambda_R \rangle \approx 0.016$ . Максимальное значение  $\lambda_R \approx 0.06$  достигается для  $H_0 \approx 1$  (заселенность верхнего уровня близка к единице). Зависимость  $\lambda_R(H_0)$ , полученная усреднением по небольшому интервалу  $\Delta H_0$  для траекторий с  $\lambda_R > 0$  пред-



ставлена на вставке рис. 30. Относительно небольшой разброс значений  $\lambda_R$ , взятых в одном интервале  $\Delta H_0$  ( $\Delta\lambda_R/\lambda_R \sim 1/10$ ) указывает на отсутствие дополнительного интеграла движения в (3.9.4). Отметим, что качественно такой же вид движения имеет место и при  $K_R \sim H_0 \sim 1$ . Однако, при дальнейшем увеличении  $H_0 \gg 1$  динамика становится устойчивой, поскольку в этом случае поле можно считать заданным.

Динамика системы (3.9.4) зависит от двух внешних параметров  $\Delta$  и  $D$  (считаем  $\nu_2 = 2\nu_1 = 2$ ). При  $\Delta = 0$  доля хаотической компоненты  $S$  оказывается значительной даже при малом отношении  $d_1/d \sim 1/50$  (см. рис. 31). Десятипроцентный уровень  $S$  охватывает интервал изменения отношения  $d_1/d$  более чем на два порядка. В предельных случаях  $D \rightarrow 0$  и  $D \rightarrow \infty$  движение становится интегрируемым и  $S = 0$ . Значительно более резкой оказывается зависимость  $S$  от расстройки  $\Delta$  (рис. 31). Из приведенных данных видно, что значительная хаотическая компонента имеет место только при  $\Delta \leq \Delta_c = 1$ . Из этого соотношения и выражения (3.9.1) можно определить критическую плотность высоковозбужденных атомов  $\rho_c$ , выше которой взаимодействие с полем резонатора приведет к хаотической динамике. Будем считать, что частоты резонатора удовлетворяют условию  $\nu_2 = 2\nu_1 = 2$ . Тогда  $\Lambda_c = -\delta = 3/n$  и для одномерных состояний

$$\rho_c \approx \frac{4 \cdot 10^{24}}{n^9} \text{ (см}^{-3}\text{)}. \quad (3.9.5)$$

При этом  $\rho_c (a_B n^2)^3 \sim n^{-3}$  и, следовательно, газ атомов является разреженным. Для  $n \sim 70$  получаем  $\rho_c \sim 10^8 \text{ см}^{-3}$ . Здесь следует отметить, что для точного определения значения  $\rho_c$  в атоме водорода с  $n \gg 1$  надо учитывать взаимодействие поля с другими уровнями, которые также близки к резонансу. Учет большого числа уровней приведет, по-видимому, к понижению  $\rho_c$  и требует отдельного исследования. Возможный путь понижения  $\rho_c$  состоит в ведении достаточно сильного статического поля, делающего уровни более эквидистантными. Другой способ заключается в поиске трех эквидистантных уровней, связанных прямыми переходами, для высоковозбужденного атома в магнитном поле, которые заведомо можно найти в области хаоса (см. I, [25]).

Значительный интерес представляет также квантование электромагнитного поля в области хаоса, как это было сделано для двухуровневой модели с  $\Lambda \sim 1$  [44]. При этом, однако, для того, чтобы поле было квазиклассическим и одновременно его энергия

была сравнима с энергией атомов (условие хаоса), необходимо чтобы число атомов было велико ( $\sim 10$ ). Для одного же атома с увеличением числа квантов происходит переход в область устойчивости, что фактически и происходило в [44]. При большом числе трехуровневых атомов следует ожидать, что статистика уровней будет описываться законом Вигнера—Дайсона (см. I, [23]). Для нескольких ( $\approx 10$ ) двухуровневых атомов с  $\Lambda \sim 1$  близкое распределение было получено в [45].

Высокий уровень современного эксперимента с ридберговскими атомами (см., например, I, [2, 7, 50]) позволяет возбуждать вытянутые состояния [50] и делает возможным наблюдение описанного явления.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Шепелянский Д.Л. Теория диффузионного фотоэффекта в атоме водорода. I. Квантовая локализация динамического хаоса. — ИЯФ СО СССР 89-54. Новосибирск, 1989.
1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Механика. — М.: Наука, 1973. — 196 с.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. — М.: Наука, 1974. — 335 с.
3. Бете Г., Солпитер Э. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами — М.: Физматгиз, 1960. — 434 с.
4. Blumel R., Smilansky U. Ionization of Surface-State Electrons by Microwave Fields: Quantum Treatment. — Phys. Rev. A, 1985, v.32, N 3, p.1900—1902.
5. Bardsley J.N., Camella M.J. Ionization of a One-Dimensional Hydrogen Atom by a Resonant Electric Field. — J. Phys. B, 1986, v.19, N 17, p.L565—L568.
6. Гореславский С.П., Делоне Н.Б., Крайнов В.П. Вероятности радиационных переходов между высоковозбужденными атомными состояниями. — ЖЭТФ, 1982, т.82, № 6, с.1789—1797.
7. Бейтмен Г., Эрдейн А. Высшие трансцендентные функции, т.1. — М.: Наука, 1973. — 296 с.
8. Dhar A.K., Izrailev F.M., Nagarajan M.A. Behavior of Hydrogen Atom under the Influence of Periodic Time-Dependent Electric Fields. — Preprint 83-162, INP Novosibirsk, 1983, 54 p.
9. Blumel R., Smilansky U. Suppression of Classical Stochasticity by Quantum-Mechanical Effects in the Dynamics of Periodically Perturbed Surface-State Electrons. — Phys. Rev. A, 1984, v.30, N 2, p.1040—1051.
10. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теория поля. — М.: Наука, 1973. — 504 с.
11. Эдельман В.С. Левитирующие электроны. — УФН, 1980, т.130, № 4, с.675—706.
12. Jensen R.V. Stochastic Ionization of Surface-State Electrons. — Phys. Rev. Lett., 1982, v.49, N 19, p.1365—1368.
13. Jensen R.V. Stochastic Ionization of Surface-State Electrons: Classical Theory. — Phys. Rev. A, 1984, v.30, N 1, p.386—397.
14. Gontis V., Kaulakys B. Stochastic Dynamics of Hydrogenic Atoms in the Microwave Field: Modelling by Maps and Quantum Description. — J. Phys. B, 1987, v.20, N 19, p.5051—5064.
15. Смирнов Б.М. Возбужденные атомы. — М.: Энергоиздат, 1982. — 232 с.

16. *Чуриков Б.В., Шепелянский Д.Л.* Диффузия при многократном прохождении нелинейного резонанса. — ЖТФ, 1982, т.52, № 2, с.238—245.
17. *Chirikov B.V.* Dynamical Mechanisms of Noise. — Preprint 87-123, INP Novosibirsk, 1987, 22p.
18. *Боголюбов Н.Н.* Избранные труды, т.2. — Киев: Наукова думка, 1970, с.77—98.
19. *Берсонс И.Я.* Ионизация высоковозбужденных состояний атома водорода сильным низкочастотным полем. — ЖЭТФ, 1984, т.86, № 3, с.860—865.
20. *Рапопорт Л.П., Зон Б.А., Манаков Н.Л.* Теория многофотонных процессов в атомах. — М.: Атомиздат, 1978. — 182 с.
21. *Делоне Н.Б., Крайнов В.П.* Атом в сильном световом поле. — М.: Атомиздат, 1978. — 288 с.
22. *Leopold J.G., Richards D.* The Effect of a Resonant Electric Field on a One-Dimensional Classical Hydrogen Atom. — J. Phys. B, 1985, v.18, N 16, p.3369—3394.
23. *Jones D.A., Leopold J.G., Percival I.C.* Ionization of Highly Excited Atoms by Electric Fields IV. Frequency and Amplitude Dependence for Linearly Polarized Fields. — J Phys. B, 1980, v.13, N 1, p.31—40.
24. *Келдыш Л.В.* Ионизация в поле сильной электромагнитной волны. — ЖЭТФ, 1964, т.47, № 5(11), с.1945—1957.
25. *Alekseev V.M., Yakobson M.V.* Symbolic Dynamics and Hyperbolic Dynamic Systems. — Phys. Rep., 1981, v.75, N 5, p.287—325.
26. *Зельдович Б.Я., Пилипецкий Н.Ф., Шкунов В.В.* Обращение волнового фронта. — М.: Наука, 1985, 247 с.
27. *Agostini P., Fabre F., Mainfray G., Rahman N.K.* Free-Free Transitions Following Six-Photon Ionization of Xenon Atoms. — Phys. Rev. Lett., 1979, v.42, N 17, p.1127—1130.
28. Proc. IV Intern. Conf. on Multiphoton Processes, July 1987, Boulder, Colorado. — 350 p.
29. *Deng Z., Eberly J.H.* Effect of Coherent Continuum-Continuum Relaxation and Saturation in Multiphoton Ionization. — Phys. Rev. Lett., 1984, v.53, N 19, p.1810—1813.
30. *Гореславский М.С.П., Нарожный Н.Б., Яковлев В.П.* Пондермоторный эффект в надпороговой ионизации. — Письма в ЖЭТФ, 1987, т.46, № 5, с.173—175.
31. *Jaynes E.T., Cummings F.W.* Comparison of Quantum and Semiclassical Radiation Theories with Application to the Beam Maser. — Proc. IEEE, 1963, v.51, N 1, p.89—109.
32. *Казанцев А.П., Смирнов В.С.* О резонансном взаимодействии излучения со средой. — ЖЭТФ, 1964, т.46, № 1, с.182—186.
33. *Аллен Л., Эберли Дж.* Оптический резонанс и двухуровневые атомы. — М.: Мир, 1978. — 224 с.
34. *Narozhny N.B., Sanchez—Mandragon J.J., Eberly J.H.* Coherence Versus Incoherence: Collapse and Revival in a Simple Quantum Model. — Phys. Rev. A, 1981, v.23, N 1, p.236—247.
35. *Боголюбов Н.Н. (мл.), Плечко В.Н., Шумовский А.С.* Квантовая статистика систем, взаимодействующих с электромагнитными полями. — ЭЧАЯ, 1983, т.14, № 6, с.1443—1499.
36. *Remple G., Walther H., Klein N.* Observation of Quantum Collapse and Revival in a One-Atom Maser. — Phys. Rev. Lett., 1987, v.58, N 4, p.353—356.
37. *Белобров П.И., Заславский Г.М., Тартаковский Г.Х.* Стохастическое разрушение связанных состояний в системе атомов, взаимодействующих с полем излучения. — ЖЭТФ, 1976, т.71, № 5(11), с.1799—1812.
38. *Белобров П.И., Берман Г.П., Заславский Г.М., Сливинский А.П.* О стохастическом механизме возбуждения молекул, взаимодействующих с собственным полем излучения. — ЖЭТФ, 1979, т.76, № 6, с.1960—1968.
39. *Milloni P.W., Ackerhalt J.R., Galbraith H.W.* Chaos in the Semiclassical *N*-Atom Jaynes—Cummings Model: Failure of the Rotating-Wave Approximation. — Phys. Rev. Lett., 1983, v.50, N 13, p.966—969.
40. *Ackerhalt J.R., Millonni P.W., Shin M.—L.* Chaos in Laser-Matter Interactions. — Singapore, World Scient. Publ., 1987. — 400 pp.
41. *Ford J., Lunsford G.H.* Stochastic Behavior of Resonant Nearly Linear Oscillator Systems in the Limit of Zero Nonlinear Coupling. — Phys. Rev. A, 1970, v.1, p.59—70.
42. *Чуриков Б.В., Шепелянский Д.Л.* Динамика некоторых однородных моделей классических полей Янга—Миллса. — ЯФ, 1982, т.36, № 6(12), с.1563—1576.
43. *Арнольд В.И.* Малые знаменатели и проблемы устойчивости движения в классической и небесной механике. — УМН, 1963, т.18, № 6, с.91—192.
44. *Graham R., Hohnerbach M.* Quantum Chaos of the Two-Level Atom. — Phys. Lett. A, 1984, v.101, N 2, p.61—65.
45. *Graham R., Hohnerbach M.* Statistical Spectral and Dynamical Properties of Two-Level Systems. — Phys. Rev. Lett., 1986, v.57, N 11, p.1378—1378.

Содержание

2. Методика численных экспериментов . . . . .	3
2.1. Моделирование классической динамики . . . . .	3
2.2. Квантовая динамика в невозмущенном базисе . . . . .	7
2.3. Штурмовский базис . . . . .	9
3. Одномерная модель атома водорода в монохроматическом поле . . . . .	17
3.1. Классическая динамика и отображение Кеплера . . . . .	17
3.2. Диффузионный процесс возбуждения и ионизации . . . . .	23
3.3. Локализация фотонных переходов . . . . .	26
3.4. Квантовое отображение Кеплера . . . . .	33
3.5. Граница делокализации. . . . .	39
3.6. Зависимость вероятности ионизации от частоты. . . . .	43
3.7. Устойчивость квантовой динамики и обращение времени. . . . .	53
3.8. Энергетический спектр ионизованных электронов . . . . .	56
3.9. Хаос при взаимодействии атомов с самосогласованным полем в случае малой константы связи . . . . .	60
Литература . . . . .	67

*Д.Л. Шепелянский*

**Теория диффузного фотоэффекта  
в атоме водорода.**

**2. Методика численных экспериментов**

**3. Одномерная модель атома водорода  
в монохроматическом поле**

Ответственный за выпуск С.Г.Попов

Работа поступила 7 июня 1989 г.

Подписано в печать 14.06. 1989 г. МН 10273

Формат бумаги 60×90 1/16 Объем 4,1 печ.л., 3,0 уч.-изд.л.

Тираж 290 экз. Бесплатно. Заказ № 89

*Набрано в автоматизированной системе на базе фото-  
наборного автомата ФА1000 и ЭВМ «Электроника» и  
отпечатано на ротапринтере Института ядерной физики  
СО АН СССР,  
Новосибирск, 630090, пр. академика Лаврентьева, 11.*