

ПРОБЛЕМА УЛАМА И ИОНИЗАЦИЯ РИДБЕРГОВСКИХ АТОМОВ СВЧ-ПОЛЕМ

А. С. Роцупкин

*Московский инженерно-физический институт
115409, Москва, Россия*

*В. П. Крайнов**

*Московский физико-технический институт
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 17 декабря 1997 г.

Численными методами рассмотрена задача Улама для больших времен (несколько миллионов соударений). Показано, что в диффузионном режиме, справедливым для небольших времен, эта задача математически аналогична задаче о диффузионной ионизации ридберговских состояний атомов микроволновым полем. Сделан вывод, что диффузионный режим реализуется при весьма малом числе начальных условий (фазы поля). Сделано предположение о возможности экстраполяции аналогии между обеими задачами на большие времена по сравнению со временем диффузии. Показано, что в задаче Улама после окончания диффузионного набора энергии квазистационарный режим не продолжается до бесконечности, а после нескольких миллионов ударов частицы о стенку ее энергия быстро убывает до нуля. На основании такой экстраполяции рассмотрена возможность того, что после достижения непрерывного спектра электрон не улетает на бесконечность (ионизация), а возвращается в связанные ридберговские состояния атома (если поле действует достаточно долго). Это может существенно уменьшить вероятность диффузионной ионизации по сравнению с известными оценками.

1. ВВЕДЕНИЕ

Ионизация ридберговских состояний атомов (в первую очередь, атома водорода) микроволновым электромагнитным полем детально исследовалась как экспериментально, так и теоретически (см. в книге [1], а также [2, 3]). В работе [4] с использованием квазиклассического приближения было впервые показано, что электрон, находящийся в ридберговском состоянии с главным квантовым числом n , под действием микроволнового поля с частотой порядка кеплеровской частоты обращения электрона вокруг атомного остова, диффузионно переходит на орбиты с большими квантовыми числами, пока его спектр не станет непрерывным, т. е. пока не произойдет ионизация. Этот же процесс имеет место и в рамках чисто классической механики, но лишь при напряженности поля выше некоторого порогового значения, $F > F_{th}$ [5]. Таким образом, в классической механике (в соответствии с теоремой Колмогорова–Арнольда–Мозера) процесс диффузионной ионизации является пороговым. Например, для поля линейной поляризации с частотой $\omega = (1-4)/n^3$, согласно численным расчетам [6], величина пороговой напряженности поля есть $F_{th} = 1/40n^4$. Здесь и далее мы используем

*E-mail: kraynov@theory.mipt.ru

атомную систему единиц. Указанное значение мало по сравнению с атомным значением поля $F_a = 1/16n^4$ [7], при котором ионизация ридберговского состояния атома низкочастотным полем происходит в течение одного кеплеровского периода $2\pi n^3$. Ионизация ридберговских состояний атома водорода микроволновым полем наблюдалась экспериментально в работе [8]. Экспериментальные данные о величине пороговой напряженности поля согласуются с приведенной выше теоретической оценкой.

Диффузионное уравнение для функции распределения $f(n)$ по квантовым числам в процессе возбуждения электрона имеет стандартный вид:

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial n} \left[D(n) \frac{\partial f}{\partial n} \right]. \quad (1)$$

Нелинейный коэффициент диффузии равен [1]

$$D(n) = 0.27 \frac{F^2}{\omega^{4/3}} n^3. \quad (2)$$

При одномерной диффузии дисперсия главного квантового числа за время Δt пропорциональна этому интервалу времени:

$$\langle \Delta n^2 \rangle = 2D(\langle n \rangle) \Delta t. \quad (3)$$

Из (2) и (3) получим для среднего значения главного квантового числа следующий закон изменения:

$$-\frac{d}{dt} \left(\frac{1}{\langle n \rangle} \right) = 0.27 \frac{F^2}{\omega^{4/3}} = \text{const}. \quad (4)$$

Отсюда находим время достижения границы непрерывного спектра ($n \rightarrow \infty$), т. е. время ионизации:

$$t_{ion} = \frac{\omega^{4/3}}{0.27 F^2 n_0}. \quad (5)$$

Здесь n_0 — главное квантовое число начального ридберговского состояния атома. При напряженности поля $F \sim 1/40n^4$ и частоте $\omega \sim 1/n^3$ отсюда получим, что хотя аналитически время ионизации имеет оценку порядка кеплеровского периода оборота электрона $2\pi n^3$, численно оно весьма велико по сравнению с этим периодом.

Целью данной работы является попытка найти аналогию между классическим процессом ионизации ридберговских состояний атомов СВЧ-полем и известной задачей Улама [9] (см. детально ниже). Как мы увидим, проблема заключается в том, что по мере увеличения главного квантового числа n условия для диффузионной ионизации ухудшаются из-за уменьшения частоты кеплеровского вращения электрона на соответствующей орбите по сравнению с частотой микроволнового поля. Поэтому электрон может и не дойти до границы непрерывного спектра, либо дойти и возвратиться назад. Динамика его движения исследуется на основе аналогии с задачей Улама в области небольших времен, где диффузионные уравнения для обеих задач, как мы увидим ниже, математически выглядят одинаково. Конечно, экстраполяция такой аналогии в область больших времен является гипотезой, для которой в случае атомов расчеты данной работы не являются прямым подтверждением. Ввиду чрезвычайной математической сложности решения задачи в случае атомов мы поставили цель посмотреть, чем заканчивается процесс диффузии в задаче Улама для очень больших времен. На первый взгляд

должен был бы реализовываться квазистационарный режим. Однако численный расчет дал довольно необычные результаты, что и представляется нам наиболее интересным выводом.

2. ОТОБРАЖЕНИЕ УЛАМА

С математической точки зрения, как уже говорилось выше, задачу диффузионной ионизации атомов СВЧ-полем удобно свести к так называемому отображению Улама [9] так, чтобы диффузионные уравнения в обоих случаях выглядели бы одинаково, несмотря на различную физическую природу процессов. Это отображение возникло из идеи Ферми (1949 г.) о том, что космическая частица чаще сталкивается с межзвездными облаками, которые движутся навстречу частице, чем от нее. По этой причине частица в среднем за большое число ударов диффузионно ускоряется.

В задаче Улама рассматривается классическое движение частицы с большой скоростью в одномерном бесконечно высоком прямоугольном потенциальном ящике (рис. 1). Одна из стенок ящика (для определенности правая) колеблется со временем. Это и обеспечивает диффузионное ускорение Ферми для данной частицы.

Обозначим ширину ящика через l ; скорость его правой стенки V предполагается изменяющейся по гармоническому закону с частотой ω и амплитудой V_0 : $V(t) = V_0 \sin(\omega t + \varphi)$. Ширина ящика предполагается большой по сравнению с амплитудой колебания его стенки $a = V_0/\omega$: $l \gg a$. Мы предполагаем также, что скорость частицы u в любой момент времени велика по сравнению со скоростью колебаний стенки: $u \gg V_0$. Это позволяет исключить двойные удары частицы о правую стенку (которые имели бы место в случае малой скорости частицы).

Закон сохранения импульса при n -ом упругом ударе частицы о колеблющуюся стенку имеет простой вид:

$$u_{n+1} = u_n + 2V_0 \sin(\omega t_n + \varphi). \quad (6)$$

Здесь t_n — момент времени n -го удара, u_n — скорость частицы до n -го удара, u_{n+1} — скорость частицы перед следующим ($n+1$)-м ударом (после отражения от левой неподвижной стенки ящика).

Время свободного движения частицы между соседними ударами о колеблющуюся

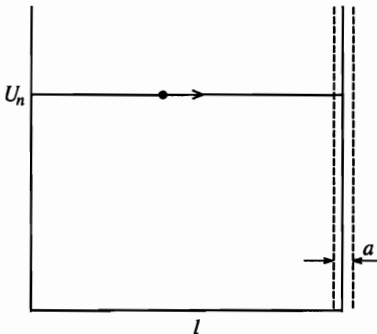


Рис. 1. Прямоугольный ящик с бесконечными стенками, в котором находится классическая частица; правая стенка осциллирует с малой амплитудой (задача Улама)

стенку равно

$$t_{n+1} - t_n = 2l/u_{n+1}. \tag{7}$$

Вводя безразмерную фазу $\psi_n \equiv \omega t_n + \varphi$ и безразмерную скорость $U_n \equiv u_n/2V_0$, а также безразмерный параметр

$$M \equiv \frac{l\omega}{2\pi V_0} \gg 1,$$

получим так называемое *отображение Улама* в безразмерных переменных (см. детальное обсуждение в книге [10]):

$$\begin{aligned} U_{n+1} &= U_n + \sin \psi_n, \\ \psi_{n+1} &= \psi_n + \frac{2\pi M}{U_{n+1}} \bmod (2\pi). \end{aligned} \tag{8}$$

Оно представляет собой частный случай отображения Пуанкаре.

Отметим, что если скорость частицы оказывается такой, что

$$U_n = M/m, \tag{9}$$

где m — целое число, то тогда, согласно первому из соотношений (8), скорость частицы начинает увеличиваться или уменьшаться регулярно на одну и ту же величину $\sin \psi_n$ при каждом ударе, пока соотношение (9) существенно не нарушится. В других точках имеет место нерегулярное изменение скорости. Указанные точки называются *периодическими точками* отображения (8) [10].

Коэффициент растяжения фазы (по Чирикову, см. [11]) определяется соотношением

$$K \equiv \left| \frac{(\psi_{n+1} - \psi_n) - (\psi_n - \psi_{n-1})}{\psi_n - \psi_{n-1}} \right|. \tag{10}$$

Динамический хаос, т. е. нерегулярное изменение скорости частицы со временем, имеет место при $K > 1$, когда разность фаз меняется не только сильно, но и нерегулярно при каждом ударе. Оценивая в среднем $|\psi_n - \psi_{n-1}| \sim \pi/2$, а $|\sin \psi_n| \sim 1$, получим из (8) и (10), что

$$K \approx \frac{2\pi M}{(\pi/2)U_n^2} |U_{n+1} - U_n| \approx \frac{4M}{U_n^2}. \tag{11}$$

Условие $K > 1$ означает, что в условиях реализации динамического хаоса имеют место неравенства $M \gg U_n \gg 1$.

3. ДИФФУЗИОННОЕ УВЕЛИЧЕНИЕ СКОРОСТИ

После каждого удара скорость частицы u_n в соответствии с (6) меняется очень мало по сравнению с самой этой скоростью. Большое изменение скорости может произойти

только после большого числа ударов. Введем понятия текущей и средней скорости (по многим ударам):

$$u_{n+1} - u_n = u - \langle u \rangle = \Delta u.$$

Усредняем квадрат этой разности за один удар, учитывая соотношения (6) и (7):

$$\langle \Delta u^2 \rangle = 4V_0^2 \langle \sin^2 \psi_n \rangle = 2V_0^2 = 2V_0^2 \frac{\Delta t}{2l/u}. \quad (12)$$

Это соотношение для одного удара обобщается на любое число ударов и соответствующий интервал времени Δt . В соответствии с законом одномерной диффузии имеем $\langle \Delta u^2 \rangle = 2D\Delta t$. Следовательно, согласно (12) переменный коэффициент диффузии линейно возрастает с увеличением скорости:

$$D(u) = \frac{V_0^2}{2l} u. \quad (13)$$

Подставляя это соотношение в уравнение диффузии (1), умножая его на текущую скорость u и интегрируя по всем скоростям, после двукратного интегрирования по частям получим:

$$\frac{d}{dt} \langle u \rangle = \frac{V_0^2}{2l}, \quad \langle u \rangle = u_0 + \frac{V_0^2}{2l} t. \quad (14)$$

Это уравнение соответствует равноускоренному движению частицы в задаче Улама.

Уравнение (14) имеет такой же вид, что и (4) в задаче о диффузионной ионизации ридберговского атома, если выполнить замену

$$\langle u \rangle \rightarrow u_0 - \frac{1}{\langle n \rangle} + \frac{1}{n_0}, \quad \frac{V_0^2}{2l} \rightarrow 0.27 \frac{F^2}{\omega^4/3}. \quad (15)$$

Таким образом, для задачи диффузионной ионизации ридберговского атома мы нашли отображение Улама (8) с параметрами (15).

4. РЕГУЛЯРНОЕ ДВИЖЕНИЕ

В задаче Улама скорость частицы повышается, но до определенного предела. Динамический хаос прекращается, когда коэффициент растяжения фазы K меньше единицы. Из (11) тогда получим, что это имеет место при скорости $U_{max} = 2\sqrt{M}$. Численно в работе [12] была найдена несколько более точная оценка:

$$U_{max} = 2.5\sqrt{M}. \quad (16)$$

Она соответствует условию исчезновения перекрытия соседних резонансов [11].

После достижения максимальной величины скорость сохраняется на протяжении многих тысяч ударов, слабо изменяясь. Когда значение скорости соответствует периодической точке (см. (9)) с индексом

$$m = \frac{M}{U_n} = \frac{U_n}{6.25} \gg 1, \quad (17)$$

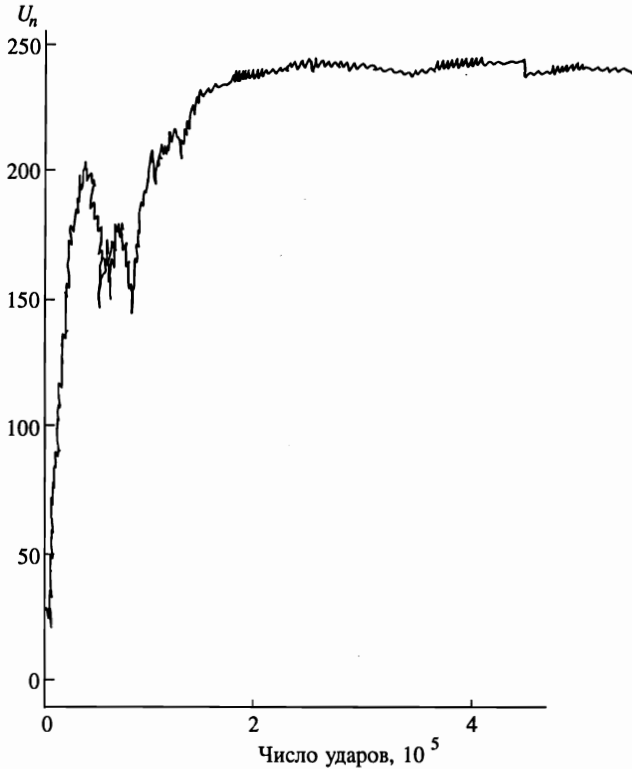


Рис. 2. Зависимость безразмерной скорости частицы в задаче Улама от числа ударов в режиме диффузии

в соответствии с изложенным в разд. 2 имеет место небольшой срыв скорости вверх или вниз на новое значение, слегка отличающееся от предыдущего (на доли процента), после чего опять новое значение долго держится с весьма слабыми осцилляциями.

В численном расчете приведем результаты для $M = 10000$, $U_0 = 25$, так что начальный коэффициент растяжения фазы согласно (11) составляет $K_0 = 64$. В соответствии с (16) максимальная скорость равна $U_{max} = 250$. Меняя фазу φ колебания правой стенки ящика, мы нашли, что диффузионный режим, описанный в предыдущем разделе, достигается реально лишь при ничтожно малом числе фаз. В абсолютном большинстве случаев имеет место нерегулярное изменение скорости, значения которой не слишком превышают начальное значение скорости частицы. При этом всего за несколько тысяч ударов скорость частицы вместо диффузионного увеличения резко убывает до нуля. После этого счет прекращался, так как возникала возможность двойных ударов о правую стенку ящика, при которых исходное упрощенное отображение Улама (8) несправедливо.

Специальный подбор фазы φ позволил найти те редкие случаи, когда реализуется диффузионный режим. Один из них иллюстрирует рис. 2, на котором показана зависимость безразмерной скорости частицы U_n от числа ударов n . Явно видно, что имеет место диффузионное возрастание скорости частицы со временем, а затем выход на плато, соответствующее максимальной скорости (16), как и должно быть согласно теорети-

ческому подходу. Режим диффузии имеет место в течение всего лишь ≈ 30000 ударов, в то время как плато распространяется на сотни тысяч и более ударов. Аналитическое выражение для диффузионной кривой непосредственно получается из (14) и имеет вид

$$\frac{dU_n}{dn} = \frac{1}{4U_n}, \quad (18)$$

причем кривая на рис. 2 достаточно точно воспроизводится аналитической зависимостью (18).

5. ДИФФУЗИЯ ЭЛЕКТРОНА ПО РИДБЕРГОВСКИМ ОРБИТАМ АТОМА

Из полученного выше соотношения (15) можно заключить следующее. При достижении максимальной скорости u_{max} для задачи Улама возникает вопрос, достигает ли соответствующее значение n_{max} бесконечности, что соответствует диффузионной ионизации, вместо того чтобы оставаться конечным и определяемым из соотношения (начальной скоростью u_0 можно пренебречь по сравнению с u_{max}):

$$\frac{1}{n_{max}} = \frac{1}{n_0} - u_{max}. \quad (19)$$

В таком случае имела бы место не диффузионная ионизация, а только диффузионное возбуждение атома до определенного уровня. Из соотношений (15) и (16) для M следует, что

$$u_{max} = 5.4\pi M^{3/2} \frac{F^2}{\omega^{7/3}}. \quad (20)$$

Подставляя приведенные выше значения $M = 10000$, $F = 1/40n_0^4$ и $\omega = 2/n_0^3$, получим, что $u_{max} = \text{const}/n_0$, причем $\text{const} \sim 10^3$. В соответствии с (19) это означает, что диффузионная ионизация заведомо имеет место для указанных значений напряженности и частоты.

Другая проблема возникает при больших временах наблюдения. Сам по себе вылет электрона в непрерывный спектр еще не означает ионизации, так как микроволновое поле продолжает действовать и оно может переводить электрон обратно в связанные состояния. Аналогичная ситуация действительно имеет место при туннельной ионизации атомов сильным низкочастотным полем лазерного излучения [13]. Электрон, вылетев из атома, может возвратиться через полпериода поля обратно к атому и даже перейти в его исходное связанное состояние, испустив спонтанный фотон большой частоты.

В задаче Улама соответствующая проблема формулируется следующим образом. Стационарное значение максимальной скорости частицы в ящике с колеблющейся стенкой держится или бесконечное время, или же после достаточно большого числа ударов существенно изменяется. Что же имеет место на самом деле?

В приведенном выше примере (см. рис. 2) численно найдено, что полученное максимальное квазистационарное значение скорости $U_n = 250$ держится вплоть до трех миллионов ударов. Однако далее наступает существенное изменение поведения скорости (рис. 3). В интервале от $3 \cdot 10^6$ до $3.3 \cdot 10^6$ ударов скорость частицы падает фактически до нуля! И такое поведение реализуется для всех начальных условий, для которых имеет место диффузионный процесс и достигается максимальное значение скорости. Это

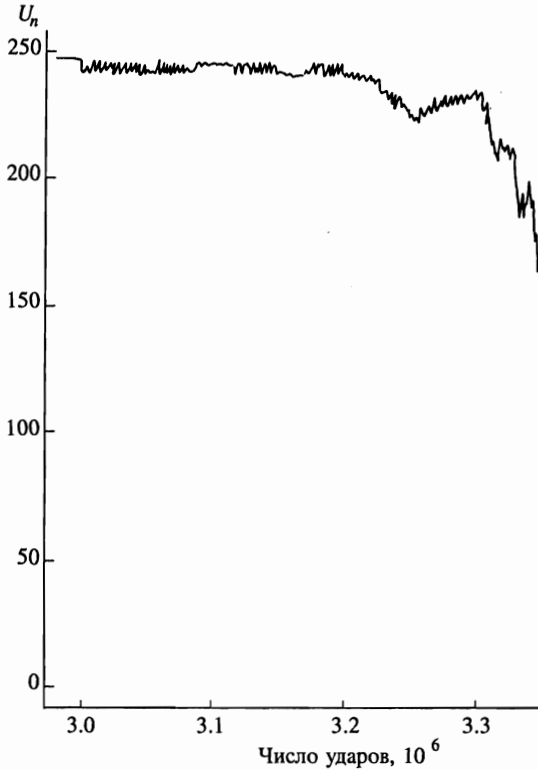


Рис. 3. Спад скорости частицы в задаче Улама при большом числе ударов

означает в случае атома, что электрон может возвратиться из непрерывного спектра обратно в связанные состояния (если справедливо предположение, что аналогия между обоими задачами распространяется и на большие времена, а не только на времена диффузии), причем скорость в какой-то момент времени быстро убывает.

В заключение отметим, что исходя из численных решений задачи Улама для больших времен можно ожидать, что возможность классической диффузионной ионизации ридберговского атома будет затруднена двумя обстоятельствами:

1) для большинства классических траекторий диффузия высоковозбужденного электрона по ридберговским орбитам вообще отсутствует, а реализуется лишь стохастическое изменение энергии электрона вблизи его начального значения;

2) даже когда диффузия имеет место, за большое время действия микроволнового излучения электрон возвращается в исходное связанное состояние, хотя промежуточные значения его энергии относятся к непрерывному спектру; фактическая диффузионная ионизация может произойти, если только импульс микроволнового излучения в необходимый момент времени (порядка оценки (5)) заканчивается.

Еще раз подчеркнем, что вне области диффузии нет никаких строгих оснований для экстраполяции аналогии между задачей ионизации атома водорода и проблемой Улама, и мы высказываем предположение, что такая экстраполяция имеет место.

Авторы благодарны С. П. Гореславскому, Н. Б. Делоне и М. В. Федорову за ценные замечания по содержанию работы. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 96-02-18299).

Литература

1. N. V. Delone and V. P. Krainov, *Multiphoton Processes in Atoms*, Springer, Berlin-Heidelberg (1994).
2. Н. Б. Делоне, В. П. Крайнов, Д. Л. Шепелянский, УФН **140**, 355 (1983).
3. G. Gasati, V. V. Chirikov, D. L. Shepelyansky, and I. Guarneri, *Phys. Rep.* **154**, 78 (1987).
4. Н. Б. Делоне, Б. А. Зон, В. П. Крайнов, ЖЭТФ **75**, 445 (1978).
5. Б. И. Меерсон, Е. А. Окс, П. В. Сасоров, Письма в ЖЭТФ **29**, 79 (1979).
6. R. V. Jensen, S. M. Susskind, and M. M. Sanders, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1476 (1989).
7. Г. Бете, Э. Солпитер, *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*, Физматгиз, Москва (1960).
8. V. E. Sauer, S. Yoakum, L. Moorman, P. M. Koch, D. Richards, and P. A. Dando, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 468 (1992).
9. Г. М. Заславский, Р. З. Сагдеев, *Введение в нелинейную физику*, Наука, Москва (1988).
10. А. Лихтенберг, М. Либерман, *Регулярная и стохастическая динамика*, Мир, Москва (1984).
11. V. V. Chirikov, *Phys. Rep.* **52**, 265 (1979).
12. M. A. Lieberman and A. J. Lichtenberg, *Phys. Rev. A* **5**, 1852 (1972).
13. P. V. Corkum, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 1994 (1993).