

МЕТОД РАСЧЕТА НАДПОРОГОВЫХ МНОГОФОТОННЫХ ПРОЦЕССОВ В АТОМАХ: ДВУХФОТОННАЯ НАДПОРОГОВАЯ ИОНИЗАЦИЯ

Н. Л. Манаков, С. И. Мармо, С. А. Свиридов*

*Воронежский государственный университет
394006, Воронеж, Россия*

Поступила в редакцию 18 февраля 2008 г.

Показано, что двухфотонная надпороговая ионизация атомов может быть рассчитана с использованием численных алгоритмов аппроксимации Паде в методе модельного потенциала с кулоновской асимптотикой. Приведены полные и дифференциальные сечения надпороговой ионизации атомов гелия и щелочных металлов эллиптически поляризованным излучением. Анализируется зависимость угловых распределений фотоэлектронов от знака степени эллиптичности излучения (явление эллиптического дихроизма) в надпороговой области частот.

PACS: 32.80.-t, 32.80.Rm

1. ВВЕДЕНИЕ

Надпороговая ионизация (НПИ) (above-threshold ionization, ATI) состоит в отрыве связанного электрона (с энергией связи $|E_i|$) при поглощении им большего числа фотонов N ($N = K + S$, $S = 1, 2, \dots$), чем минимально необходимое в соответствии с законом сохранения энергии: $K = \lceil |E_i|/\hbar\omega + 1 \rceil$, где $\lceil x \rceil$ — целая часть x . Исследования НПИ были инициированы в 1979 г., когда при измерении энергетического спектра фотоэлектронов, образующихся при ионизации атомов ксенона излучением второй гармоники неодимового лазера ($\hbar\omega = 2.34$ эВ) с интенсивностью $I \sim 10^{13}$ Вт/см², были обнаружены электроны с энергией $E_i + 7\hbar\omega$ при пороговом числе фотонов $K = 6$ [1]. В дальнейшем такого рода эксперименты неоднократно проводились с другими атомами при значительно большей интенсивности оптического излучения (см., например, ссылки в книге [2]), причем при $K \approx 10$ добавочное число S поглощенных фотонов достигало значительной величины. Попытки теоретического описания этих результатов в рамках теории возмущений по взаимодействию атома с полем не приводили к согласию теории с

экспериментом, а после обнаружения в спектрах надпороговых электронов ярко выраженных эффектов плато (неубывания сечений ионизации в широком диапазоне значений S) [3] стало ясно, что процесс НПИ в интенсивном поле оптической частоты ($\hbar\omega \ll |E_i|$) носит существенно непертурбативный характер и определяется не столько структурой спектра конкретного атома, сколько движением свободного электрона в сильном световом поле.

Иная ситуация сложилась в последние годы с появлением достаточно интенсивных источников когерентного излучения в ультрафиолетовом диапазоне с энергией фотонов вплоть до десятков электронвольт и интенсивностью 10^{14} – 10^{16} Вт/см² (в частности, с использованием высших гармоник интенсивного излучения фемтосекундных лазеров, а также лазеров на свободных электронах). В этом случае ионизация возможна уже при поглощении одного фотона, причем если энергия фотона существенно превосходит $|E_i|$, то теория возмущений применима для полей с интенсивностью I , сравнимой с внутриатомной $I_0 \approx 10^{16}$ Вт/см² (см., например, работу [4]), так что сечение НПИ существенно определяется структурой атома. Сечения двухфотонной НПИ в высокочастотном поле впервые были измерены в недавних экспериментах по ионизации благородных газов

*E-mail: manakov@phys.vsu.ru

(He, Ag и Xe) пятой гармоникой K_gF-лазера (с энергией фотона 25 эВ) [5] и гелия 27-й гармоникой титан-сапфирового лазера ($\hbar\omega = 41.8$ эВ) [6]¹⁾, поэтому представляет интерес дальнейшее развитие методов расчета НПИ многоэлектронных атомов с учетом структуры конкретного атома в рамках теории возмущений по полю. В этом подходе НПИ атома водорода как двухфотонная [9–12], так и многофотонная [13–15], была подробно исследована более 20 лет назад. Однако пертурбативный расчет двухфотонной НПИ многоэлектронных атомов даже в приближении одного активного электрона представляет собой значительно более сложную и менее исследованную проблему. В частности, при $\hbar\omega > |E_i|$ использование известного метода Далгарно–Левиса [16] для расчета поправочных функций $\psi^{(n)}(\mathbf{r})$ n -го порядка теории возмущений, основанного на численном интегрировании зацепляющихся неоднородных дифференциальных уравнений для поправочных функций $\psi^{(k)}(\mathbf{r})$ ($k = 1, 2, \dots, n$), становится неэффективным, поскольку в надпороговом случае уже $\psi^{(1)}(\mathbf{r})$ является осциллирующей функцией r (в отличие от подпорогового случая, когда функции $\psi^{(k)}(\mathbf{r})$ экспоненциально затухают при больших r). В работе [17] амплитуда НПИ атомов щелочных металлов в рамках теории квантового дефекта исследована с помощью специальной вычислительной процедуры, основанной на разделении функции конечного состояния на слагаемые с асимптотикой расходящихся и сходящихся волн и повороте контура интегрирования в комплексной плоскости r . В работах [18, 19] предложен метод расчета многофотонных матричных элементов НПИ в многоэлектронном приближении, основанный на дискретизации состояний непрерывного спектра и использовании B -сплайнов. Процесс двухфотонной одноэлектронной НПИ гелия является конкурирующим при исследованиях двухфотонной двухэлектронной ионизации, которые активно ведутся в ряде лабораторий, и в этой связи анализировался в ряде работ на основе различных методов численного решения точного уравнения Шредингера для атома гелия в электромагнитном поле [20, 21] (см. также [22, 23]). Однако точные методы расчета НПИ достаточно громоздки и требуют большого объема вычислений, поэтому сечения НПИ могут быть получены лишь в весьма ограниченном интервале параметров лазерного излучения

(преимущественно для случая линейной поляризации).

В настоящей работе показана возможность применения численных алгоритмов аппроксимации Паде [24] для количественной оценки сечений НПИ неводородных атомов. Метод расчета основан на использовании модельного потенциала Фьюса [25] для описания состояния валентного электрона. Этот потенциал был использован впервые в работах [26, 27] для расчета сил осцилляторов и сечений фотоионизации атомов. В работах [28, 29] (см. также [30]) метод модельного потенциала (ММП) был обобщен для расчета матричных элементов высших порядков теории возмущений на основе техники функции Грина для потенциала Фьюса, для которой известно удобное представление (штурмовское разложение) в виде ряда по полиномам Лагерра. Однако использование штурмовского разложения приводит к расходящимся рядам для амплитуд надпороговых процессов (когда энергетический параметр функции Грина является положительным). В недавней работе [31] показано, что штурмовские ряды для динамической поляризуемости при надпороговых частотах ($\hbar\omega > |E_i|$) можно сделать сходящимися, используя специальное переразложение функции Грина потенциала Фьюса, содержащее свободные параметры, однако этот метод неприменим при расчете по ММП амплитуды двухфотонной НПИ из-за наличия осциллирующей волновой функции конечного состояния фотоэлектрона в континууме. Амплитуду многофотонной ионизации в ММП можно представить в виде ряда из относительно легко вычисляемых функций гипергеометрического типа (функций Аппеля F_2) [32], который, однако, расходится при надпороговых значениях частоты поля. Для численного суммирования ряда мы используем стандартный ϵ -алгоритм [24], аналогично вычислению амплитуды двухфотонной НПИ атома водорода [10]. Как показано ниже, несмотря на более сложную структуру расходящихся рядов, через которые выражается амплитуда НПИ в случае неводородных атомов, применение ϵ -алгоритма позволяет выполнить их суммирование и в этом случае. В разд. 2 изложены необходимые для дальнейшего понимания сведения о ММП Фьюса. В разд. 3 обсуждается структура расходящихся рядов для амплитуды двухфотонной НПИ в ММП и технические детали расчетов, а в разд. 4 приведены численные результаты для атомов щелочных металлов и гелия, полученные с использованием ϵ -алгоритма. Корректность использования ϵ -алгоритма в рассматриваемой задаче обсуждается в Приложении.

¹⁾ В работе [7] сообщается также о наблюдении двухфотонной НПИ гелия излучением лазера на свободных электронах с $\hbar\omega = 13$ эВ, однако эти результаты сомнительны (см. работу [8] и ссылки в ней).

В статье используется атомная система единиц (если не оговаривается противное).

2. ОСНОВНЫЕ ПОЛОЖЕНИЯ МЕТОДА МОДЕЛЬНОГО ПОТЕНЦИАЛА ФЬЮСА

В рамках ММП состояние валентных электронов атомов описывается одночастичным уравнением Шредингера с потенциалом Фьюса $V_F(\mathbf{r})$, который представляет собой экранированный кулоновский потенциал ядра с дополнительным операторным слагаемым, учитывающим воздействие атомного остова на валентный электрон:

$$V_F(\mathbf{r}) = -\frac{Z}{r} + \sum_{l=0}^{\infty} \frac{B_l}{r^2} \hat{P}_l. \quad (1)$$

Здесь B_l — эмпирические параметры, \hat{P}_l — оператор проектирования на подпространство сферических функций с данным l : $\hat{P}_l Y_{lm} = \delta_{ll'} Y_{lm}$. В результате радиальное уравнение Шредингера с потенциалом Фьюса получается из кулоновского заменой центробежного потенциала:

$$\frac{l(l+1)}{2r^2} \rightarrow \frac{l(l+1)+2B_l}{2r^2} \equiv \frac{\lambda_l(\lambda_l+1)}{2r^2},$$

что эквивалентно замене орбитального квантового числа l в кулоновской задаче на нецелый «орбитальный параметр» λ_l (ниже мы рассматриваем нейтральные атомы, так что $Z = 1$):

$$l \rightarrow \lambda_l = [(l+1/2)^2 + 2B_l]^{1/2} - 1/2.$$

Поэтому радиальные волновые функции состояний дискретного ($|n_l i\rangle$) и непрерывного ($|E_f l_f\rangle$) спектра для потенциала Фьюса следуют из кулоновских при замене $l \rightarrow \lambda_l$:

$$R_{n_l i}(r) = \frac{C_{\nu_l i}}{\Gamma(2\lambda_l + 2)} \left(\frac{2r}{\nu_l}\right)^{\lambda_l} \exp\left(-\frac{r}{\nu_l}\right) \times \Phi(-\nu_l + \lambda_l + 1, 2\lambda_l + 2; 2r/\nu_l), \quad (2)$$

$$R_{E_f l_f}(r) = \frac{C_{E_f l_f}}{\Gamma(2\lambda_f + 2)} (2pr)^{\lambda_f} \exp(-ipr) \times \Phi(\lambda_f + 1 + i/p, 2\lambda_f + 2; 2ipr), \quad (3)$$

где

$$\begin{aligned} \nu_i &= 1/\sqrt{-2E_{n_l i}}, \quad p = \sqrt{2E_f}, \\ \lambda_i &\equiv \lambda_{l_i}, \quad \lambda_f \equiv \lambda_{l_f}, \\ C_{\nu_l i} &= \frac{2}{\nu_i^2} \left[\frac{\Gamma(\nu_i + \lambda_i + 1)}{\Gamma(\nu_i - \lambda_i)} \right]^{1/2}, \end{aligned}$$

$$C_{E_f l_f} = \sqrt{\frac{2p}{\pi}} \exp\frac{\pi}{2p} \left| \Gamma\left(\lambda_f + 1 - \frac{i}{p}\right) \right|, \quad (4)$$

$\Phi(a, c; x)$ — вырожденная гипергеометрическая функция. Аналогично формулам (2)–(4), заменой $l \rightarrow \lambda_l$ в штурмовском разложении радиальной кулоновской функции Грина [30] получаем функцию Грина валентного электрона для модельного потенциала Фьюса:

$$g_l(E; r, r') = \nu \sum_{k=0}^{\infty} \frac{k! S_{kl}(2r/\nu) S_{kl}(2r'/\nu)}{\Gamma(k+2\lambda_l+2)(k+\lambda_l+1-\nu)}, \quad (5)$$

где

$$S_{kl}\left(\frac{2r}{\nu}\right) = \frac{2}{\nu} \frac{\Gamma(k+2\lambda_l+2)}{k! \Gamma(2\lambda_l+2)} \left(\frac{2r}{\nu}\right)^{\lambda_l} \exp\left(-\frac{r}{\nu}\right) \times \Phi(-k, 2\lambda_l + 2; 2r/\nu) \quad (6)$$

— штурмовские функции,

$$\nu = 1/\sqrt{-2(E+i0)}. \quad (7)$$

Использование ММП Фьюса в практических задачах требует знания энергий E_{nl} связанных состояний валентного электрона (например, из экспериментального оптического спектра одноэлектронных возбуждений атома). В свою очередь, выражение для энергии связанных состояний в потенциале (1)

$$E_{nl} = -\frac{Z^2}{2(n_r + \lambda_l + 1)^2} \quad (8)$$

($n_r = n - l - 1 = 0, 1, \dots$ — радиальное квантовое число) используется для задания эмпирических параметров $\lambda_l = \lambda_l(E_{nl})$ для каждой серии уровней с заданным l через соответствующие экспериментальные энергии:

$$\lambda_l(E_{nl}) = Z/\sqrt{-2E_{nl}} - n_r - 1, \quad (9)$$

что позволяет согласовать расчетные и экспериментальные положения резонансов (полюсов функции Грина (5)). В межрезонансных промежутках параметры $\lambda_l = \lambda_l(E)$ в формуле (5) определяются интерполяцией на основе соотношения (9). Значения $\lambda_l(E_{nl})$ для высоковозбужденных состояний, рассчитанные по данным таблиц [33], незначительно отличаются друг от друга, поэтому значения $\lambda_l(E)$ в волновых функциях континуума (3) и в функции Грина (5) при надпороговых энергиях $E > 0$ выбирались равными значению $\lambda_l(E_{nl})$ для одного из известных верхних возбужденных состояний. Поскольку ММП в значительной степени аналогичен

методу квантового дефекта [34] (квантовый дефект $\mu_l(E_{nl})$ связан с параметром $\lambda_l(E_{nl})$ соотношением $\mu_l(E_{nl}) = l - \lambda_l(E_{nl})$), возможен и более точный выбор параметров $\lambda_l(E)$ при $E > 0$ путем линейной или квадратичной экстраполяции по E из области $E < 0$, как это делается при расчете сечений фотоионизации в методе квантового дефекта [35].

3. РАСЧЕТ СЕЧЕНИЯ ДВУХФОТОННОЙ ИОНИЗАЦИИ В МЕТОДЕ МОДЕЛЬНОГО ПОТЕНЦИАЛА

Амплитуда двухфотонной ионизации атома из начального состояния $|n_i l_i\rangle$ содержит линейную комбинацию радиальных матричных элементов связанно-свободных переходов:

$$T_{l_i l_f}^l(E_i, E, E_f) = \langle E_f l_f | r g_l(E; r, r') r' | n_i l_i \rangle, \quad (10)$$

где $l = l_i \pm 1$, $l_f = l_i, l_i \pm 2$. Выражения (2), (3) для волновых функций и (5) для функции Грина позволяют аналитически выполнить интегрирование по радиальным переменным функций $T_{l_i l_f}^l$ и представить их в виде ряда

$$T_{l_i l_f}^l = C_{if}(p) \sum_{k=0}^{\infty} A_k. \quad (11)$$

Здесь

$$C_{if}(p) = \nu \frac{C_{\nu l_i} C_{E_f l_f} \Gamma(\zeta_f) \Gamma(\zeta_i)}{\Gamma(2\lambda_i + 2) \Gamma(2\lambda_f + 2)} \times \left[\frac{(2/\nu)^{\lambda+1}}{\Gamma(2\lambda + 2)} \right]^2 \frac{(2/\nu_i)^{\lambda_i} (2p)^{\lambda_f}}{(2/x)^{\zeta_f} (2/y)^{\zeta_i}},$$

$$p = \sqrt{2(E_i + 2\omega)}, \quad x = \frac{2}{1/\nu + ip}, \quad y = \frac{2}{1/\nu + 1/\nu_i},$$

$$\zeta_i = \lambda + \lambda_i + 4, \quad \zeta_f = \lambda + \lambda_f + 4,$$

а члены ряда A_k выражаются через произведения гипергеометрических функций двух переменных (функции Аппеля F_2 [36]) как

$$A_k = \frac{\Gamma(k + 2\lambda + 2)}{k!(k + \lambda + 1 - \nu)} \times F_2 \left(\zeta_f, -k, \lambda_f + 1 + \frac{i}{p}, 2\lambda_f + 2, 2\lambda + 2; ipx, \frac{x}{\nu} \right) \times F_2 \left(\zeta_i, -k, -\nu_i + \lambda_i + 1, 2\lambda + 2, 2\lambda_i + 2; \frac{y}{\nu}, \frac{y}{\nu_i} \right). \quad (12)$$

Вычисление членов A_k ряда (11) проводится достаточно просто, поскольку функции Аппеля в (12)

с отрицательным параметром $-k$ сводятся к сумме k гипергеометрических функций ${}_2F_1$ и их можно вычислить по рекуррентным соотношениям. Численные расчеты показывают, что при $\omega < |E_i|$ ряд (11), (12) сходится (см., например, [32]). Однако при $\omega > |E_i|$, т. е. в случае НПИ, штурмовский ряд (11) для $T_{l_i l_f}^l$ расходится. Чтобы выяснить причину расходимости, необходимо исследовать поведение далеких членов ряда (11). Воспользовавшись известной асимптотикой функций Аппеля F_2 в (12) при больших k [37], находим, что при $k \rightarrow \infty$

$$A_k \sim [c_1 k^{-\lambda_f - 4} + c_2 k^{1-i/p} q_1^k + c_3 k^{1+i/p} q_1^{-k}] \times [d_1 k^{-\lambda_i - 4} + d_2 k^{1+\nu_i} q_2^k], \quad (13)$$

где

$$q_1 = \frac{ip - 1/\nu}{ip + 1/\nu}, \quad q_2 = \frac{1/\nu_i - 1/\nu}{1/\nu_i + 1/\nu}.$$

Отсюда видно, что при $\omega < |E_i|$, когда ν — вещественная величина (см. (7)), ряд сходится, поскольку $|q_1| = 1$, а $|q_2| < 1$. Однако при $\omega > |E_i|$ параметр ν становится мнимым ($\nu = i|\nu|$) и ряд расходится, поскольку $|q_1| > 1$, $|q_2| = 1$.

Обратим внимание, что ряд (11) для матричного элемента двухфотонной ионизации в ММП Фьюса имеет более сложную структуру асимптотики, чем в кулоновской задаче. Из асимптотики функции F_2 при больших k [37] следует, что в выражении (13)

$$c_1 \sim \frac{1}{\Gamma(\lambda_l - \lambda_{l_f} - 2)}, \quad d_1 \sim \frac{1}{\Gamma(\lambda_l - \lambda_{l_i} - 2)}. \quad (14)$$

В кулоновском случае нецелые параметры λ_{l_i} , λ_{l_f} , λ_l в (14) заменяются на l_i , l_f , l , что с учетом дипольных правил отбора $|l - l_f| = 1$, $|l - l_i| = 1$ обращает в нуль коэффициенты c_1 и d_1 в (13). Таким образом, асимптотика общего члена (12) штурмовского ряда матричного элемента двухфотонной ионизации в ММП оказывается сложнее, чем для кулоновского ряда, поскольку в последнем случае в правой части (13) отсутствуют чисто степенные слагаемые в квадратных скобках. Это усложнение оказывается принципиальным и приводит, в частности, к невозможности вычислить матричные элементы НПИ в виде сходящихся рядов, используя для функции Грина потенциала Фьюса обобщенные штурмовские разложения со свободными параметрами [37, 38], в то время как такие представления кулоновской функции Грина позволяют получить для амплитуд многофотонной ионизации водорода сходящиеся ряды, а в двухфотонном случае — даже замкнутое аналитическое выражение для ионизации

из произвольного начального состояния $|n_i l_i\rangle$ (через функции Аппеля F_1 [38]).

В настоящей работе суммирование расходящихся в надпороговой области рядов (11) для матричных элементов $T_{l_i l_f}^l$ проводилось с помощью известного ε -алгоритма, описанного, например, в работе [24] и являющегося одной из разновидностей широко используемой аппроксимации Паде для суммирования расходящихся рядов. Использование ε -алгоритма предполагает построение таблицы (« ε -таблица»), элементы $\varepsilon_k^{(j)}$ которой вычисляются рекуррентным образом по частичным суммам исходного ряда (11). Если последовательность элементов $\varepsilon_k^{(j)}$ (например, последовательность $\varepsilon_k^{(0)}$, $k = 0, 1, \dots$) сходится, то ее предел и дает сумму исходного расходящегося ряда. ε -алгоритм тесно связан с суммированием рядов с помощью аппроксимаций Паде. Элементы $\varepsilon_{2k}^{(j)}$ четных столбцов ε -таблицы равны значениям аппроксимант Паде $[L/M](z)$ с $L = k + j$, $M = k$, построенных для степенного ряда

$$\sum_{k=0}^{\infty} A_k z^k$$

и взятых при $z = 1$:

$$\varepsilon_{2k}^{(j)} = [k + j/k](1) \quad (15)$$

(см. [24], гл. 3, формула (4.10)). Таким образом, использование ε -алгоритма эквивалентно построению последовательности аппроксимаций Паде, определяемой формулой (15).

Так же, как и при использовании паде-аппроксимант, вычисления по рекурсиям при суммировании расходящегося ряда по ε -алгоритму связаны с сильными сокращениями. Чтобы оценить их масштаб, укажем, что в типичной ситуации для расчета сечения ионизации с тремя значащими цифрами необходимо учитывать 60–70 членов расходящегося ряда для амплитуды (что позволяет вычислить элемент таблицы $\varepsilon_k^{(0)}$ с $k \sim 60$ –70), при этом результат суммирования по ε -алгоритму по абсолютной величине оказывается в 10^{35} – 10^{45} раз меньше максимального учитываемого члена комплексного ряда (11). Таким образом, применение паде-суммирования к вычислению амплитуд надпороговой ионизации в ММП требует высокой точности вычисления членов A_k расходящихся штурмовских рядов (11). Ее удается достичь, используя упоминавшиеся выше рекуррентные соотношения для расчета функций F_2 в (12) и известные компьютерные алгоритмы вычислений с повышенной точностью, так что все расчеты выполняются на стандартном персональном компьютере.

Несомненным достоинством используемого метода расчета является тот факт, что как в подпороговом, так и в надпороговом случае приходится иметь дело лишь с легко вычисляемыми коэффициентами A_k ряда (11) с той разницей, что в первом случае рассчитывается просто их сумма, а во втором — некоторые их комбинации (элементы ε -таблицы), получаемые из A_k с помощью простых арифметических действий.

Возможность суммирования ряда (11) в надпороговой области частот по ε -алгоритму означает, что паде-суммирование позволяет численными методами осуществить аналитическое продолжение амплитуды двухфотонной ионизации из области частот $\omega < |E_i|$, в которой ряд (11) сходится, на область надпороговых частот $\omega > |E_i|$. Тем не менее, остается вопрос о правильности полученного результата, в частности, необходимо убедиться в правильном выборе ветви аналитического продолжения многозначной функции $T_{l_i l_f}^l = T_{l_i l_f}^l(\omega)$ в процессе использования ε -алгоритма. При расчете двухфотонной НПИ атома водорода правильность аналитического продолжения по Паде проверялась прямым сравнением результатов паде-аппроксимации с результатами независимых вычислений сечения, например, основанных на аналитических преобразованиях штурмовского ряда для амплитуды, обеспечивающих его сходимость. (Кроме того, как уже отмечалось, для кулоновского потенциала матричный элемент $T_{l_i l_f}^l$ может быть вычислен и в замкнутом аналитическом виде). В случае же потенциала Фьюса не удается найти преобразования, которые сделали бы ряд (11) сходящимся во всей области частот или выражали его через известные аналитические функции, поэтому в Приложении мы используем аналитические результаты для мнимой части $T_{l_i l_f}^l$, а также низкочастотной асимптотики амплитуды надпороговой ионизации с участием мягкого фотона для проверки корректности численных значений амплитуды НПИ в ММП Фьюса, полученных при использовании паде-аппроксимации.

4. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДЛЯ СЕЧЕНИЙ НАДПОРОГОВОЙ ИОНИЗАЦИИ И ОБСУЖДЕНИЕ

Используя ε -алгоритм для суммирования ряда (11) для матричных элементов двухфотонной ионизации, мы рассчитали полные сечения и угловые распределения электронов при двухфотонной

НПИ основных s -состояний щелочных атомов и гелия.

4.1. Полные сечения двухфотонной надпороговой ионизации из s -состояний

В дипольном приближении сечение двухфотонной ионизации атома из s -состояния световой волной с интенсивностью $I = cF^2/8\pi$ и электрическим вектором

$$\mathbf{F}(t) = F \operatorname{Re} \{ \mathbf{e} \exp(-i\omega t) \}, \quad \mathbf{e} \cdot \mathbf{e}^* = 1,$$

где F, ω и \mathbf{e} — амплитуда, частота и вектор поляризации волны, определяется двумя радиальными матричными элементами

$$T_{l_f} = \langle E_i + 2\omega, l_f | r g_1(E_i + \omega; r, r') r' | n_i l_i = 0 \rangle \quad (16)$$

с $l_f = 0, 2$. В общем случае эллиптической поляризации волны полное (проинтегрированное по направлениям импульса фотоэлектрона) сечение ионизации имеет вид (см., например, [39])

$$\begin{aligned} \sigma &= \sigma^{(l)} \ell^2 + \sigma^{(c)} \xi^2, \\ \sigma^{(l)} &= \frac{I}{I_0} \frac{\alpha \pi^2 \omega}{45} \left(5|T_0|^2 + 4|T_2|^2 \right), \\ \sigma^{(c)} &= \frac{I}{I_0} \frac{2\alpha \pi^2 \omega}{15} |T_2|^2, \end{aligned} \quad (17)$$

где $I_0 = ce^2/8\pi a_0^4 = 3.51 \cdot 10^{16}$ Вт/см², a_0 — боровский радиус, $\ell = \mathbf{e} \cdot \mathbf{e}$ — степень линейной поляризации ($0 \leq \ell \leq 1$), $\xi = i(\hat{\mathbf{k}} \cdot [\mathbf{e} \times \mathbf{e}^*])$ — степень циркулярной поляризации волны ($\hat{\mathbf{k}}$ задает направление распространения волны, $-1 \leq \xi \leq 1$, $\ell^2 + \xi^2 = 1$), а $\sigma^{(l)}$ и $\sigma^{(c)}$ — сечения для случаев чисто линейной и циркулярной поляризацій.

В табл. 1 представлены полные сечения $\sigma^{(l)}$ и $\sigma^{(c)}$ двухфотонной НПИ атомов щелочных металлов для ряда значений надпороговых частот (для сравнения приведены также результаты для подпороговой частоты $\omega = 0.6|E_i|$ и данные для атома водорода). Как принято в литературе, численные данные приводятся для сечений, деленных на плотность потока фотонов ($\tilde{\sigma} = (\hbar\omega/I)\sigma$) и имеющих размерность см⁴·с. В табл. 1 приведены также приближенные значения $\sigma_{ds}^{(l)}$ сечений $\sigma^{(l)}$, полученные с учетом только суммы по дискретному спектру в спектральном разложении функции Грина (П.1) при расчете матричных элементов (16). Такое приближение часто используется при оценке составных матричных элементов в теории возмущений. В частности, вещественная часть поляризуемости атомов щелочных металлов практически полностью определяется состояниями дискретного спектра во всей области частот [40]

(хотя мнимая часть поляризуемости в этом приближении полностью теряется). Как видно из табл. 1, вклад континуума в сечение двухфотонной ионизации оказывается весьма существенным как в подпороговой, так и в надпороговой области частот, причем в последнем случае $\sigma_{ds}^{(l)}$ систематически занижает сечение, так что при достаточно высоких частотах ($\omega > 2|E_i|$) вклад континуума становится доминирующим.

Особый интерес представляет расчет двухфотонной НПИ гелия, поскольку в этом случае есть возможность сравнить наши результаты как с экспериментом [5, 6], так и с другими расчетами. Соответствующее сравнение приводится в табл. 2 для случая линейной поляризации и ряда частот, для которых имеются результаты других авторов. Для $\omega = 25$ эВ полученный нами результат $\tilde{\sigma}^{(l)} = 3.2 \cdot 10^{-52}$ см⁴·с ближе к эксперименту [5], чем теоретический расчет [19], занижающий сечение почти в два раза. Для $\omega = 41.8$ эВ наш результат для $\tilde{\sigma}^{(l)}$ меньше экспериментального [6] и близок к расчетному значению [41] (приведенному в экспериментальной работе [6]). В связи с упоминавшимся во Введении экспериментом [7] укажем, что наш результат ($\sigma^{(l)} = 1.47 \cdot 10^{-51}$ см⁴·с) для сечения подпороговой ионизации He на частоте $\omega = 13$ эВ хорошо согласуется с полученным в расчетах [42] ($\sigma^{(l)} = 1.75 \cdot 10^{-51}$ см⁴·с). Хорошее согласие с известными результатами наблюдается и для подпороговой частоты $\omega = 15$ эВ (см. табл. 2). Обратим внимание на значительное (до трех раз) различие результатов работы [20] для $\omega = 45$ эВ, полученных в рамках теории возмущений по полю в методе Хартри–Фока и из численного решения точного уравнения Шредингера при интенсивности $I \approx 10^{14}$ Вт/см². Хотя в работе [20] нет однозначного ответа, является ли причиной отмеченных различий отклонение от теории возмущений или они обусловлены межэлектронными корреляциями, не учитываемыми в приближении Хартри–Фока, ясно, что с ростом частоты многоэлектронные эффекты могут приводить к качественным особенностям процесса ионизации. Эти эффекты существенны в области частот (достаточно узкой) вблизи резонансов с автоионизационными состояниями, а также отвечают за альтернативный механизм двухфотонной одноэлектронной ионизации — с возбуждением одного из электронов атомного остова (core-excited resonances [20, 21, 23]). Так, для случая гелия энергия возбуждения иона He⁺ при переходе $1s \rightarrow 2p$ составляет $\Delta = 40.8$ эВ, так что процессы с возбуждением конкурируют с процессом прямой двухфотон-

Таблица 1. Полное сечение $\tilde{\sigma} = (\hbar\omega/I)\sigma$ двухфотонной ионизации (в единицах $10^{-52} \text{ см}^4 \cdot \text{с}$) атомов щелочных металлов и водорода в линейно ($\tilde{\sigma}^{(l)}$) и циркулярно ($\tilde{\sigma}^{(c)}$) поляризованном поле, а также $\tilde{\sigma}_{ds}^{(l)}$ — вклад промежуточных состояний дискретного спектра в $\tilde{\sigma}^{(l)}$

$\omega/ E_i $	$\tilde{\sigma}^{(l)}$	$\tilde{\sigma}_{ds}^{(l)}$	$\tilde{\sigma}^{(c)}$	$\tilde{\sigma}^{(l)}$	$\tilde{\sigma}_{ds}^{(l)}$	$\tilde{\sigma}^{(c)}$
H, $ E_i = 13.6 \text{ эВ}$			Li, $ E_i = 5.39 \text{ эВ}$			
0.6	111	74.0	166	379	435	457
1.5	0.925	0.018	0.988	7.65	1.30	7.59
2.0	2.09(-1)	1.76(-3)	2.04(-1)	2.33	0.31	2.19
5.0	1.85(-3)	4.80(-6)	1.48(-3)	4.48(-2)	4.33(-3)	3.58(-2)
7.0	3.22(-4)	6.88(-7)	2.45(-4)	9.88(-3)	9.76(-4)	7.52(-3)
Na, $ E_i = 5.14 \text{ эВ}$			K, $ E_i = 4.34 \text{ эВ}$			
0.6	120	193	138	52.2	54.2	33.0
1.5	1.74	0.78	1.11	1.99	1.40	0.51
2.0	0.61	0.15	0.36	0.68	0.36	0.12
5.0	1.72(-2)	1.89(-3)	8.34(-3)	2.14(-2)	6.75(-3)	6.91(-3)
7.0	4.16(-3)	4.33(-4)	1.94(-3)	5.36(-3)	1.16(-3)	2.07(-3)
Rb, $ E_i = 4.18 \text{ эВ}$			Cs, $ E_i = 3.89 \text{ эВ}$			
0.6	109	62.0	129	146	71.1	195
1.5	2.91	2.28	2.13	4.60	3.71	4.59
2.0	0.86	0.55	0.49	1.29	0.85	1.11
5.0	2.36(-2)	9.00(-3)	1.18(-2)	3.08(-2)	1.23(-2)	2.20(-2)
7.0	5.85(-3)	2.07(-3)	3.13(-3)	7.36(-3)	2.73(-3)	5.29(-3)

Таблица 2. Полные сечения $\tilde{\sigma}^{(l)}$ и $\tilde{\sigma}^{(c)}$ двухфотонной ионизации гелия (в единицах $10^{-52} \text{ см}^4 \cdot \text{с}$) и сравнение $\tilde{\sigma}^{(l)}$ с экспериментом и результатами других расчетов

$\omega, \text{ эВ}$	Эксперимент	[19]	[20]	[20], РТ	[22]	[41]	$\tilde{\sigma}_{MMP}^{(l)}$	$\tilde{\sigma}_{MMP}^{(c)}$
15.0	—	11	12	12	—	—	13	19
25.0	1.9[5]	1.0	—	—	—	—	3.2	4.2
27.2	—	1.0	4.5	2.5	2.7	—	2.2	2.8
41.8	2.0 [6]	—	—	—	—	0.53	0.35	0.40
45.0	—	0.12	1.0	0.33	—	—	0.26	0.28

Примечание. РТ — результаты, полученные в рамках теории возмущений.

ной НПИ при $\omega \gtrsim 40 \text{ эВ}$. Хотя сечения таких процессов оказываются достаточно большими [20, 21, 23], они уже не относятся к классу надпороговых процессов, а энергия фотоэлектрона в таком процессе отличается от энергии фотоэлектрона при обычном фотоэффекте не на величину энергии фотона (как в НПИ), а лишь на величину $\omega - \Delta$. Очевидно, что многоэлектронные эффекты требуют отдельного анали-

за и не учитываются в нашем одноэлектронном рассмотрении.

Данные, приведенные в табл. 1, 2, позволяют сделать ряд общих замечаний о характере процесса двухфотонной НПИ в рамках теории возмущений. Во-первых, для данного атома сечения НПИ существенно меньше сечений подпороговой ($\hbar\omega < |E_i|$) двухфотонной ионизации, что обусловлено осцилли-

Таблица 3. Критические интенсивности I_{cr} (в единицах $I_0 = 3.51 \cdot 10^{16}$ Вт/см²), при которых $\sigma^{(l)} = \sigma$, где σ — сечение однофотонной ионизации на частоте ω

$\omega/ E_i $	H	Li	Na	K	Rb	Cs
1.1	7.08(-1)	1.53(-3)	8.01(-3)	4.31(-3)	5.25(-3)	4.30(-3)
1.5	2.11(0)	1.05(-2)	5.75(-4)	2.20(-5)	1.73(-3)	2.46(-3)
2.0	5.54(0)	4.13(-2)	7.92(-3)	1.04(-2)	1.33(-3)	1.80(-5)
3.0	2.08(1)	2.18(-1)	1.43(-1)	1.30(-1)	6.36(-2)	2.86(-2)
5.0	1.05(2)	1.45(0)	1.38(0)	1.04(0)	6.73(-1)	3.93(-1)

Таблица 4. Матричные элементы T_0 и T_2 для двухфотонной НПИ цезия и отношения полного сечения НПИ $\sigma^{(l)}$ к сечению $\sigma_{ESA}^{(l)}$, соответствующему учету только мнимой части матричных элементов T_{l_f} , для атомов цезия и водорода:
 $r = \sigma^{(l)}/\sigma_{ESA}^{(l)}$

$\omega/ E_i $	T_0 , ат. ед.	T_2 , ат. ед.	r_{Cs}	r_H
1.2	18.4 - i10.4	34.9 - i18.0	4.58	2.30
1.6	9.00 - i1.61	13.4 - i2.81	26.2	2.74
2.0	4.91 + i0.058	6.36 + i0.10	487	3.22
2.4	2.92 + i0.38	3.44 + i0.66	37.9	3.70
2.8	1.86 + i0.39	2.04 + i0.68	14.0	4.19
3.2	1.24 + i0.34	1.29 + i0.58	8.50	4.69

рующим характером функции Грина $g_l(E_i + \omega; r, r')$ как функции радиальных переменных r, r' в матричных элементах (16) при $E_i + \omega > 0$. С ростом частоты в надпороговой области сечения НПИ быстро убывают, поэтому с увеличением ω расширяется диапазон интенсивностей, в котором процесс НПИ может быть описан в рамках теории возмущений. Для примера в табл. 3 приведены критические значения интенсивностей I_{cr} , при которых сечения НПИ сравниваются с сечениями фотоэффекта $\sigma(\omega)$ на частоте ω (также рассчитанными с помощью ММП) и, следовательно, теория возмущений для описания НПИ становится заведомо неприменимой. Как видно, в щелочных атомах при $\hbar\omega \gtrsim 5|E_i|$ величина I_{cr} сравнивается с I_0 (немонотонность поведения I_{cr} при $\hbar\omega \lesssim 3|E_i|$ связана с наличием куперовского минимума в сечениях $\sigma(\omega)$ в этой области частот). Для гелия $I_{cr}/I_0 \approx 3$ при $\omega = 25$ эВ и $I_{cr}/I_0 \approx 20$ при $\omega = 45$ эВ. Различие радиальных зависимостей функций Грина $g_l(E; r, r')$ при отрицательных и положительных энергиях E объяс-

няет и различия поляризационных зависимостей сечений двухфотонной ионизации при $\hbar\omega < |E_i|$ и $\hbar\omega > |E_i|$. Как правило, в первом случае (вещественный) матричный элемент T_2 значительно больше, чем T_0 , так что из формулы (17) следует известная оценка: $\sigma^{(c)}/\sigma^{(l)} \approx 3/2$ [43]. Малость T_0 в этом случае соответствует известному «правилу Бете» (propensity rule): дипольные матричные элементы перехода $|E_i l_i\rangle \rightarrow |E_f l_f\rangle$ с $E_f > E_i$ максимальны при условии $l_f = l_i + 1$, которое выполняется и для составных матричных элементов, содержащих функции Грина с отрицательной энергией E . При $E = E_i + \omega > 0$ правило Бете не выполняется и комплексные матричные элементы T_0 и T_2 становятся сравнимыми по абсолютной величине (см. табл. 4), так что при фиксированной интенсивности двухфотонная НПИ щелочных атомов и водорода в линейно поляризованном поле оказывается более эффективной, чем в циркулярном, а в гелии (см. табл. 2) сечения $\sigma^{(l)}$ и $\sigma^{(c)}$ сравниваются по величине. Наконец отметим, что выражение (П.3) для мнимой части надпороговых матричных элементов T_{l_f} (которое является следствием полюса в интеграле по континууму в спектральном разложении (П.1) для $g_l(E > 0; r, r')$) позволяет предположить, что в надпороговом случае двухфотонная ионизация может рассматриваться как каскадный процесс — фотоионизация с последующим тормозным поглощением второго фотона электроном в континууме, — если при этом можно пренебречь реальной частью функции Грина $g_l(E_i + \omega; r, r')$ при расчете матричных элементов (16). (Это приближение составляет основу полюсного приближения или метода «существенных состояний» (essential states approximation — ESA) [44] для анализа многофотонных переходов в кулоновском континууме в сильном световом поле). Для примера в табл. 4 приведены реальные и мнимые (согласно (П.3)) части матричных элементов T_{l_f} для цезия, а также отношения точных и «кас-

кадных» сечений НПИ для водорода и цезия для ряда надпороговых частот (для гелия отношение $\sigma^{(l)}/\sigma_{ESA}^{(l)}$ составляет 4.1–4.3 для частот, указанных в табл. 2). Как видно, во всех случаях $\sigma^{(l)}$ значительно превышает $\sigma_{ESA}^{(l)}$, так что, как и в подпороговом случае, двухфотонная ионизация при $\hbar\omega > |E_i|$ также происходит в результате одновременного поглощения двух фотонов первоначально связанным электроном.

4.2. Угловые распределения

Угловое распределение фотоэлектронов при двухфотонной ионизации из s -состояния эллиптически поляризованным полем описывается четырьмя атомными параметрами [39]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{p}}} = \frac{I}{I_0} \frac{\alpha\pi\omega}{36} \left[|u_0|^2 \ell^2 + \frac{1}{4} |u_2|^2 \sin^4 \theta (1 + \ell \cos 2\varphi)^2 + \operatorname{Re}(u_0 u_2^*) \ell \sin^2 \theta (\ell + \cos 2\varphi) + \operatorname{Im}(u_0 u_2^*) \ell \xi \sin^2 \theta \sin 2\varphi \right]. \quad (18)$$

Здесь θ и φ — углы вектора \mathbf{p} в сферической системе координат с осью z вдоль вектора $\hat{\mathbf{k}}$ и осью x вдоль главной полуоси эллипса поляризации волны, а u_0 и u_2 выражаются через матричные элементы T_{l_f} и фазы рассеяния $\delta_{l_f}(E_f)$ фотоэлектрона на атомном остове:

$$\begin{aligned} u_0 &= \exp\{i\delta_0(E_f)\} T_0 + \exp\{i\delta_2(E_f)\} T_2, \\ u_2 &= -3 \exp\{i\delta_2(E_f)\} T_2. \end{aligned} \quad (19)$$

Отметим, что параметр $\delta_{ed} = \operatorname{Im}(u_0 u_2^*)$ в (18) описывает интересное явление эллиптического дихроизма, т. е. зависимость углового распределения от знака степени циркулярной поляризации ξ эллиптически поляризованной волны, исчезающую в случае чисто циркулярной поляризации $\xi = \pm 1$ (см. подробнее в работах [39, 45]). (Заметим, что угловую зависимость дихроичного слагаемого в (18) можно записать также в виде $\sin^2 \theta \sin 2\varphi = 2 \cos \vartheta \cos \vartheta'$, где ϑ и ϑ' — углы вектора \mathbf{p} с большой и малой полуосями эллипса поляризации). Как видно, численные значения параметра δ_{ed} должны существенно различаться при $\omega < |E_i|$ и $\omega > |E_i|$, поскольку в первом случае

$$\delta_{ed} \sim T_0 T_2 \sin[\delta_0(E_f) - \delta_2(E_f)],$$

а при НПИ δ_{ed} содержит также интерференцию реальных и мнимых частей комплексных матричных элементов T_0 и T_2 . При $\ell = 0$ и $\ell = 1$ из (18) следуют

известные выражения для угловых распределений в циркулярно и линейно поляризованном поле:

$$\frac{d\sigma^{(c)}}{d\Omega_{\mathbf{p}}} = \frac{I}{I_0} \frac{\alpha\pi\omega}{144} |u_2|^2 \sin^4 \theta = \frac{15}{32\pi} \sigma^{(c)} \sin^4 \theta, \quad (20)$$

$$\frac{d\sigma^{(l)}}{d\Omega_{\mathbf{p}}} = \frac{I}{I_0} \frac{\alpha\pi\omega}{36} |u_0 + u_2 \sin^2 \vartheta|^2, \quad (21)$$

где ϑ — угол между импульсом фотоэлектрона \mathbf{p} и осью линейной поляризации поля.

Переходя к численным результатам для угловых распределений в НПИ в приближении ММП, отметим, что в работе [5] (согласно расчету [46]) приведено следующее выражение для формы углового распределения фотоэлектронов при ионизации гелия линейно поляризованным полем с $\hbar\omega = 25$ эВ:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{p}}} = a(0.729 \cos^4 \vartheta - 0.345 \cos^2 \vartheta + 0.075). \quad (22)$$

Выражение (21), записанное аналогично (22), дает следующий результат для $\hbar\omega = 25$ эВ:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\mathbf{p}}} = 0.107 \frac{I}{I_0} (0.729 \cos^4 \vartheta - 0.315 \cos^2 \vartheta + 0.035),$$

так что форма углового распределения отличается от формы распределения (22) лишь в области углов вылета электрона перпендикулярно направлению поляризации поля, в которой абсолютная величина сечений мала.

Для иллюстрации зависимости угловых распределений от поляризации поля на рис. 1 приведены полярные диаграммы для угловых распределений электронов в плоскости поляризации поля [$\theta = \pi/2$, см. (18)] для атомов Rb и Cs для четырех значений параметра ξ . (Отметим, что степень циркулярной поляризации связана с часто используемой степенью эллиптичности η (отношением малой и большой полуосей эллипса поляризации) соотношением $\xi = 2\eta/(1 + \eta^2)$). Как видно из формулы (18), в отличие от случаев линейной и циркулярной поляризации симметрия трехмерных угловых распределений в эллиптически поляризованном поле с $0 < |\xi| < 1$ состоит лишь в инвариантности относительно операции пространственной инверсии ($\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$) и относительно вращения на угол π вокруг направления волнового вектора \mathbf{k} , $\varphi \rightarrow \varphi + \pi$ (в плоскости эллипса поляризации замена $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$ эквивалентна вращению $\varphi \rightarrow \varphi + \pi$). Интересно отметить, что если дихроичное слагаемое (пропорциональное δ_{ed}) в

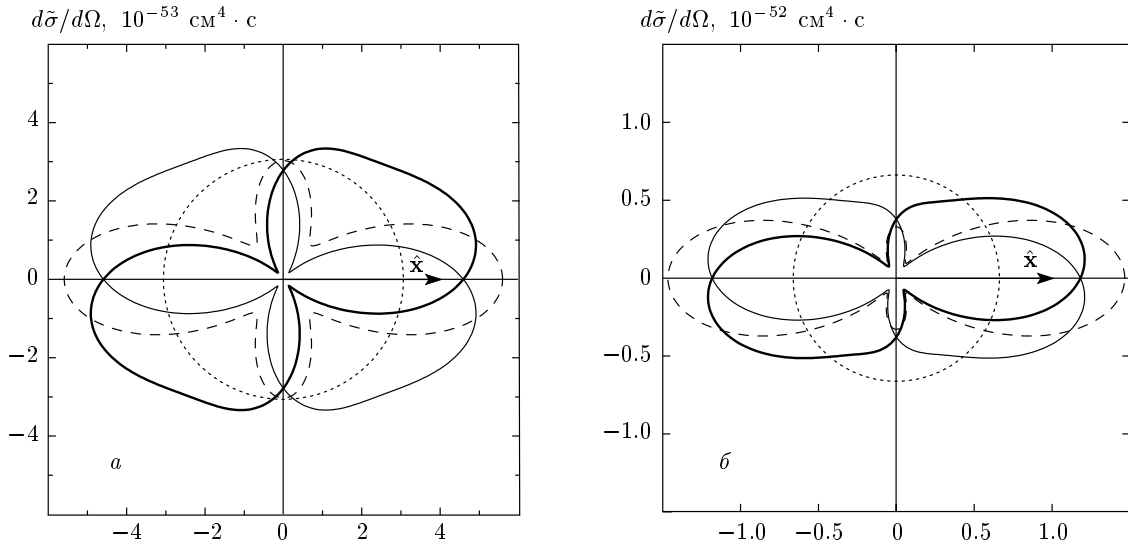


Рис. 1. Поляризационные зависимости углового распределения электронов в плоскости эллипса поляризации излучения с частотой $\omega = 1.51|E_i|$ при двухфотонной НПИ рубидия (а) и цезия (б) (единичный вектор \hat{x} направлен вдоль главной оси эллипса поляризации): $\xi = 0$ (штриховые линии), $1/\sqrt{2}$ (жирные сплошные), $-1/\sqrt{2}$ (тонкие сплошные), ± 1 (пунктирные)

(18) обращается в нуль, то $d\sigma/d\Omega_{\mathbf{p}}$ обладает симметрией относительно двух ортогональных плоскостей, содержащих волновой вектор \mathbf{k} и соответственно большую и малую оси эллипса поляризации, т. е. при заменах $\varphi \rightarrow -\varphi$ и $\varphi \rightarrow \pi - \varphi$. Дихроичное слагаемое нарушает эту симметрию и приводит к асимметрии угловых распределений. При этом кривые на рис. 1 для $\xi = 1/\sqrt{2}$ и $\xi = -1/\sqrt{2}$ не могут быть совмещены вращением в плоскости поляризации, а налагаются одна на другую лишь при повороте одной из них на угол 180° вокруг большой или малой оси эллипса поляризации (что эквивалентно замене осей координат $x \rightleftharpoons y$). Это соответствует инвариантности $d\sigma/d\Omega_{\mathbf{p}}$ в (18) при одновременной замене $\xi \rightarrow -\xi$ и $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ (что легко видеть из инвариантной записи угловой зависимости дихроичного слагаемого в (18) через единичные векторы \hat{x} , $\hat{\mathbf{k}}$ и $\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{p}/p$: $\sin^2 \theta \sin 2\varphi = 2(\hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{x}})(\hat{\mathbf{p}} \cdot [\hat{\mathbf{k}} \times \hat{\mathbf{x}}])$). Хотя дихроичный параметр δ_{ed} и не имеет буквенной малости по сравнению с другими атомными параметрами в (18), ввиду специфической интерференции между реальными и мнимыми частями амплитуд u_0 и u_2 его численное значение обычно мало по сравнению с $|u_0|^2$ и/или $|u_2|^2$. (Укажем, что для примеров, приведенных на рис. 1, все атомные параметры имеют одинаковый порядок величины, что и приводит к ярко выраженному эффекту эллиптического дихроизма). Удобной характеристикой величины эллиптическо-

го дихроизма, позволяющей судить о возможности экспериментального наблюдения эффекта, является параметр относительного дихроизма

$$\Delta_{ed} = \frac{d\sigma(|\xi|)/d\Omega - d\sigma(-|\xi|)/d\Omega}{d\sigma(|\xi|)/d\Omega + d\sigma(-|\xi|)/d\Omega}. \quad (23)$$

На рис. 2а приведены зависимости Δ_{ed} от угла φ в плоскости поляризации (см. рис. 1) для щелочных атомов на частоте $\hbar\omega = 1.51|E_i|$. Для гелия эффекты дихроизма в надпороговой области частот несущественно отличаются от случая подпороговой ионизации (см. рис. 2б, где для сравнения приведены также результаты для атома водорода).

Приведенные результаты показывают, что величина дихроичных слагаемых в угловом распределении (18) вполне доступна для экспериментального измерения, так что наблюдение НПИ в поле с эллиптической поляризацией позволяет получить наиболее полную информацию об атомных параметрах, описывающих процесс ионизации (выполнить «полный эксперимент»), причем измерение эллиптического дихроизма дает информацию об относительной фазе комплексных амплитуд u_0 и u_2 . (Для случая подпороговой двухфотонной ионизации рубидия такие измерения были выполнены в работе [47]). Кроме того, наблюдение дихроизма в угловом распределении фотоэлектронов при ионизации атомов достаточно интенсивным эллиптически поля-

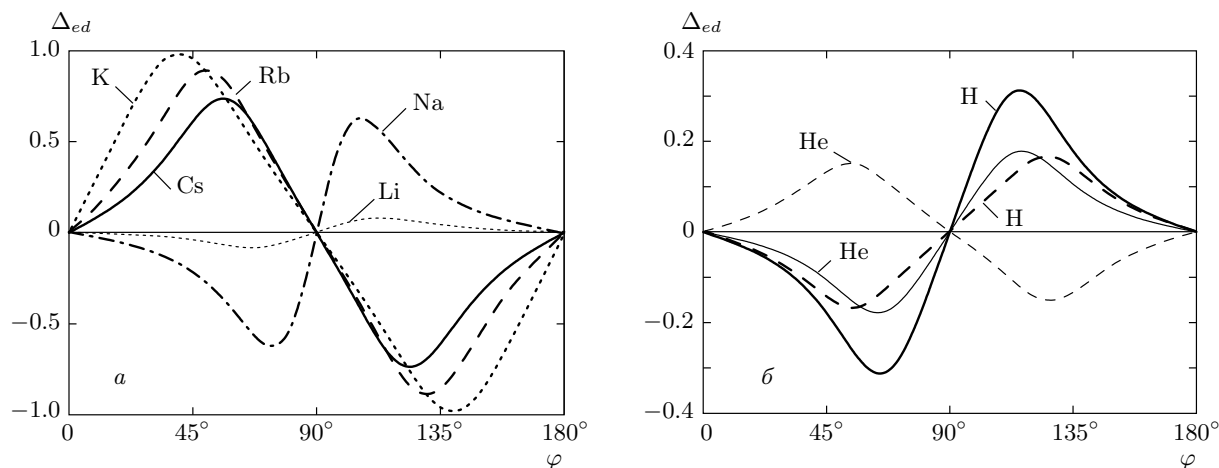


Рис. 2. а) Угловые зависимости параметра относительного дихроизма Δ_{ed} в угловом распределении электронов в плоскости эллипса поляризации излучения с частотой $\omega = 1.51|E_i|$ и $|\xi| = \ell = 1/\sqrt{2}$ при двухфотонной НПИ щелочных атомов. б) То же для атомов гелия и водорода и частот $\omega = 1.51|E_i|$ (сплошные линии), $0.7|E_i|$ (штриховые)

ризованным излучением с частотой, превышающей порог фотоионизации, позволяет однозначно идентифицировать наличие процесса надпороговой ионизации без анализа энергетического спектра электронов (поскольку при обычном фотоэффекте явление эллиптического дихроизма отсутствует). Отметим, что эффект эллиптического дихроизма имеет место и в угловых распределениях фотоэлектронов при существенно непертурбативной многофотонной НПИ атомов сильным полем оптической частоты. Как показывают точные расчеты сечений НПИ из связанного состояния в короткодействующем потенциале под действием сильного эллиптически поляризованного поля [48], симметрия угловых распределений фотоэлектронов остается той же, что и описанная выше для двухфотонной НПИ в пертурбативном режиме, а параметр относительного дихроизма Δ_{ed} может достигать значений порядка единицы. При этом, как и в выражении (18), дихроичные параметры в сечениях НПИ определяются интерференцией реальных и мнимых (или эрмитовых и анти-эрмитовых) частей амплитуды ионизации, так что эллиптический дихроизм не описывается в известном приближении Келдыша в теории нелинейной ионизации [49] (поскольку амплитуда ионизации в этом приближении эрмитова) и необходим учет действия атомного потенциала на электрон в конечном состоянии континуума. Как показано в работе [50], пертурбативный учет действия кулоновского потенциала на электрон в области выхода из-под барьера приводит к хорошему качественному согласию модифицированной теории Келдыша с эксперименталь-

ными результатами для асимметрии угловых распределений низкоэнергетических электронов при ионизации благородных газов сильным низкочастотным ($\hbar\omega/|E_i| \approx 0.1$) полем.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В настоящей работе мы продолжили начатое в работе [31] исследование многофотонных процессов в области надпороговых частот, превышающих энергию связи электрона в атоме, в рамках теории возмущений на основе простого модельного потенциала, использующего экспериментальные данные о спектре одноэлектронных возбуждений атома. В отличие от надпороговых связанно-связанных переходов [31], в случае НПИ не удается представить амплитуду ионизации в виде сходящихся рядов гипергеометрического типа, тем не менее и в этом случае оказывается возможным развить алгоритм расчета сечений ионизации при надпороговых частотах на основе методов аппроксимации Паде для суммирования расходящихся рядов. Хотя ввиду полумпирического характера модельного потенциала Фьюса результаты ММП не могут претендовать на прецизионную точность, приведенные выше сравнения с другими результатами для атома гелия показывают, что предлагаемая техника расчетов позволяет развить достаточно универсальный метод количественной оценки полных и дифференциальных сечений двухфотонной ионизации атомов как в широком интервале надпороговых частот, так и при

произвольной степени эллиптичности лазерного излучения. В заключение укажем, что предлагаемый метод может использоваться не только для описания ионизации основных состояний атомов в поле высокочастотного излучения, но и для оценки сечений двухфотонной НПИ высоковозбужденных атомных уровней в оптических полях умеренной интенсивности.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 07-02-00574).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Проверка корректности ϵ -алгоритма при расчете надпороговой ионизации

Одну из возможностей проверки корректности ϵ -алгоритма для суммирования ряда (11) дает независимое вычисление мнимой части матричных элементов $T_{l_i l_f}^l$. (Укажем, что в подпороговой области, $\omega < |E_i|$, эти матричные элементы являются вещественными, а паде-аппроксимация дает для них те же результаты, что и прямое суммирование сходящегося ряда (11).) Поскольку радиальные функции дискретного и непрерывного спектров (2), (3) вещественны, а мнимую часть функции Грина легко отделить, используя спектральное разложение

$$g_l(E; r, r') = \sum_{n=l+1}^{\infty} \frac{R_{nl}(r)R_{nl}(r')}{E_n - E} + \int_0^{\infty} d\mathcal{E} \frac{R_{\mathcal{E}l}(r)R_{\mathcal{E}l}(r')}{\mathcal{E} - E - i0} \quad (\text{П.1})$$

и известное соотношение (V.p. обозначает символ главного значения)

$$\frac{1}{\mathcal{E} - E - i0} = \text{V.p.} \frac{1}{\mathcal{E} - E} + i\pi\delta(\mathcal{E} - E), \quad (\text{П.2})$$

при $E > 0$ имеем

$$\text{Im } T_{l_i l_f}^l(E_f, E, E_i) = \pi \langle R_{E_f l_f} | r | R_{E_l} \rangle \langle R_{E_l} | r | R_{n_i l_i} \rangle. \quad (\text{П.3})$$

Для потенциала Фьюса матричный элемент однофотонного перехода в непрерывном спектре выражается через функцию Аппеля F_2 ,

$$\begin{aligned} \langle R_{E_f l_f} | r | R_{E_l} \rangle &\sim \\ &\sim F_2(\zeta_f, \alpha_{l_f}(p), \alpha_l(|\nu|), 2\lambda_{l_f}+2, 2\lambda_l+2; x, y), \\ &\alpha_{l_f}(p) = \lambda_{l_f} + 1 + i/p, \\ &\alpha_l(|\nu|) = \lambda_l + 1 + i/|\nu|, \end{aligned} \quad (\text{П.4})$$

$$\zeta_f = \lambda_{l_f} + \lambda_l + 4, \quad x = \frac{2ip\nu}{1+ip\nu}, \quad y = \frac{2}{1+ip\nu},$$

которая представляет собой двойной бесконечный ряд и в отличие от кулоновского случая не сводится к конечной сумме функций ${}_2F_1$. Мы вычисляли функцию F_2 в (П.4), выражая ее через интеграл от ${}_2F_1$ [37]. Расчеты показывают, что значения $\text{Im } T_{l_i l_f}^l$, полученные при суммировании штурмовского ряда (11) с помощью паде-аппроксимации, совпадают с рассчитанными по формуле (П.3).

Точность расчета как реальной, так и мнимой частей $T_{l_i l_f}^l$ по ϵ -алгоритму можно оценить, если рассмотреть низкочастотный предел $\omega' \rightarrow 0$ в более общих, чем $T_{l_i l_f}^l$, матричных элементах $\tilde{T}_{l_i l_f}^l$ двухфотонного перехода, происходящего по схеме $E_i + \omega + \omega' = E_f$, где $\omega > |E_i|$ (что соответствует двухфотонной ионизации излучением двух различных частот ω и ω'):

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{l_i l_f}^l(E_i, E_i + \omega, E_f) &= \\ &= \langle R_{E_f l_f} | r g_l(E_i + \omega; r, r') r' | R_{n_i l_i} \rangle. \end{aligned} \quad (\text{П.5})$$

Из общих результатов теории электрон-фотонного взаимодействия («инфракрасная расходимость») [51] следует, что в рассматриваемом случае амплитуда процесса оказывается сингулярной при $\omega' \rightarrow 0$, а матричный элемент $\tilde{T}_{l_i l_f}^l(\omega' \rightarrow 0)$ должен выражаться через произведение матричных элементов однофотонной ионизации и поглощения фотона с частотой ω' при столкновительном переходе электрона в непрерывном спектре. Чтобы получить соответствующее выражение для $\tilde{T}_{l_i l_f}^l(\omega' \rightarrow 0) \equiv \tilde{T}_{l_i l_f}^{l, (lf)}$, запишем аналогичный (П.5) радиальный матричный элемент двухфотонной ионизации в калибровке скорости (вместо калибровки длины, использованной в формуле (П.5)):

$$\langle R_{E_f l_f} | D(l_f, l) g_l(E_i + \omega) D(l, l_i) | R_{n_i l_i} \rangle, \quad (\text{П.6})$$

где

$$D(l, l') = \frac{d}{dr} + \frac{\text{sign}(l' - l) \max(l, l') + 1}{r}.$$

Чтобы найти расходящуюся при $\omega' \rightarrow 0$ часть выражения (П.6), оставим в спектральном разложении функции Грина (П.1) только интеграл по непрерывному спектру,

Таблица 5. Точность низкочастотной аппроксимации (П.10) матричных элементов двухфотонных переходов в непрерывный спектр из основного s -состояния атомов щелочных металлов ($\tilde{T}_{l_f} \equiv \tilde{T}_{l_f=0, l_f}^{l=1}$): отношение

$$R_{l_f} = |(\tilde{T}_{l_f} - \tilde{T}_{l_f}^{(l_f)})/\tilde{T}_{l_f}| \text{ для частоты } \omega = 2|E_i|$$

$\omega'/ E_i $	Na		K		Rb		Cs	
	R_0	R_2	R_0	R_2	R_0	R_2	R_0	R_2
0.1	0.12	0.19	0.13	0.14	0.15	0.086	0.46	0.60
0.08	0.11	0.16	0.11	0.13	0.12	0.091	0.36	0.40
0.06	0.094	0.13	0.099	0.11	0.10	0.089	0.25	0.20
0.04	0.075	0.096	0.079	0.087	0.079	0.077	0.14	0.057
0.02	0.048	0.058	0.052	0.056	0.052	0.053	0.059	0.022

$$g_i(r, r'; E_i + \omega) \rightarrow \int_0^\infty \frac{R_{\mathcal{E}l}(r')R_{\mathcal{E}l}(r)}{\mathcal{E} - E_i - \omega - i0} d\mathcal{E}, \quad (\text{П.7})$$

и учтем, что однофотонный матричный элемент $d_{l_f l} = \langle R_{E_f l_f} | D(l_f, l) | R_{\mathcal{E}l} \rangle$ имеет следующее поведение при $\mathcal{E} \rightarrow E_f$ [52, 53]:

$$d_{l_f l} = i^{l_f - l + 1} p \left[\cos [\delta_l(E_f) - \delta_{l_f}(E_f)] \delta(E_f - \mathcal{E}) + \frac{\sin [\delta_l(E_f) - \delta_{l_f}(E_f)]}{\pi(E_f - \mathcal{E})} \right]. \quad (\text{П.8})$$

Вычисляя теперь (П.6) (с g_i из (П.7)) и учитывая в интеграле по \mathcal{E} только вклад слагаемого с дельта-функцией из (П.8), найдем сингулярный член в вещественной части матричного элемента (П.6). Для выделения сингулярности в мнимой части следует в точном выражении типа (П.3) для мнимой части матричного элемента (П.6) заменить матричный элемент $\langle R_{E_f l_f} | D(l_f, l) | R_{\mathcal{E}l} \rangle$ его асимптотикой, которая в этом случае ($\mathcal{E} \neq E_f$) дается вторым слагаемым в (П.8). Наконец, принимая во внимание, что при $\omega' \rightarrow 0$ матричные элементы (П.6) и (П.5) в калибровке скорости и длины связаны соотношением

$$\begin{aligned} \langle R_{E_f l_f} | D(l_f, l) g_l(E_i + \omega) D(l, l_i) | R_{n_i l_i} \rangle &= \\ &= \omega \omega' \langle R_{E_f l_f} | r g_l(E_i + \omega) r' | R_{n_i l_i} \rangle + \\ &+ \frac{1}{2} (\omega' - \omega) \langle R_{E_f l_f} | r^2 | R_{n_i l_i} \rangle \approx \\ &\approx \omega' \omega \langle R_{E_f l_f} | r g_l(E_i + \omega) r' | R_{n_i l_i} \rangle, \end{aligned} \quad (\text{П.9})$$

приходим к окончательному выражению

$$\begin{aligned} \tilde{T}_{l_i l_f}^{l, (l_f)} &= \frac{p}{\omega'^2} i^{l - l_f + 1} \times \\ &\times \exp \{ i [\delta_l(E_i + \omega) - \delta_{l_f}(E_i + \omega)] \} \times \\ &\times \langle E_i + \omega, l | r | n_i l_i \rangle. \end{aligned} \quad (\text{П.10})$$

Выполненное выше вычисление «инфракрасного предела» (П.10) радиального матричного элемента двухфотонной ионизации (П.5) справедливо для произвольного центрального потенциала $V(r)$. В случае потенциала Фьюса фаза рассеяния $\delta_l(E)$ в (П.10) имеет вид

$$\delta_l(E) = \frac{\pi}{2} (l - \lambda_l) + \delta_l^C, \quad \exp(i\delta_l^C) = \frac{\Gamma(\lambda_l + 1 - i/p)}{|\Gamma(\lambda_l + 1 - i/p)|}.$$

В табл. 5 приведено сравнение матричных элементов $\tilde{T}_{l_i l_f}^l$, рассчитанных суммированием штурмовского ряда типа (11) с использованием ε -алгоритма и полученных по приближенной формуле (П.10). Хотя ε -алгоритм позволяет просуммировать указанный ряд только при не слишком малых значениях частоты ω' [$\omega' \gtrsim 0.02(E_i + \omega)$], тем не менее отчетливо видно сближение результатов при уменьшении ω' .

ЛИТЕРАТУРА

1. P. Agostini, F. Fabre, G. Manfray et al., Phys. Rev. Lett. **42**, 1127 (1979).
2. Н. Б. Делоне, В. П. Крайнов, *Нелинейная ионизация атомов лазерным излучением*, Физматлит, Москва (2001).
3. G. G. Paulus, W. Nicklich, H. Xu et al., Phys. Rev. Lett. **72**, 2851 (1994).
4. Е. А. Волкова, А. М. Попов, М. А. Тихонов, О. В. Тихонова, ЖЭТФ **132**, 596 (2007).
5. N. Miyamoto, M. Kamei, D. Yoshitomi et al., Phys. Rev. Lett. **93**, 083903 (2004).
6. H. Hasegawa, E. J. Takahashi, Y. Nabekawa et al., Phys. Rev. A **71**, 023407 (2005).

7. T. Laarmann, A. R. B. de Castro, P. Gürtler et al., *Phys. Rev. A* **72**, 023409 (2005).
8. L. A. A. Nikolopoulos and P. Lambropoulos, *Phys. Rev. A* **74**, 063410 (2006).
9. E. Karule, *J. Phys. B* **11**, 441 (1978).
10. S. Klarsfeld and A. Maquet, *J. Phys. B* **12**, L553 (1979); S. Klarsfeld and A. Maquet, *Phys. Lett. A* **78**, 40 (1980).
11. A. G. Fainshtein, N. L. Manakov, and S. I. Marmo, *Phys. Lett. A* **104**, 347 (1984).
12. R. Shakeshaft, *J. Phys. B* **18**, L611 (1986).
13. Y. Gontier, N. K. Rahman, and M. Trahin, *Phys. Rev. A* **34**, 1112 (1986); *Europhys. Lett.* **5**, 595 (1988).
14. E. Karule, *J. Phys. B* **21**, 1997 (1988).
15. R. M. Potvliege and R. Shakeshaft, *Phys. Rev. A* **39**, 1545 (1989).
16. A. Dalgarno and J. T. Lewis, *Proc. Roy. Soc. A* **223**, 70 (1955).
17. M. Edwards, X. Tang, and R. Shakeshaft, *Phys. Rev. A* **35**, 3578 (1987).
18. P. Lambropoulos, P. Maragakis, and J. Zhang, *Phys. Rep.* **305**, 203 (1998).
19. L. A. A. Nikolopoulos and P. Lambropoulos, *J. Phys. B* **34**, 545 (2001).
20. J. Colgan and M. S. Pindzola, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 173002 (2002).
21. L. Feng and H. W. van der Hart, *J. Phys. B* **36**, L1 (1993).
22. D. Proulx and R. Shakeshaft, *J. Phys. B* **26**, L7 (1993).
23. R. Shakeshaft, *Phys. Rev. A* **76**, 063405 (2007).
24. Дж. Бейкер, П. Грейвс-Моррис, *Аппроксимации Паде*, Мир, Москва (1986).
25. G. Simons, *J. Chem. Phys.* **55**, 756 (1971).
26. G. Simons, *J. Chem. Phys.* **60**, 645 (1974).
27. G. Simons and J. Martin, *J. Chem. Phys.* **62**, 4799 (1975).
28. Н. Л. Манаков, В. Д. Овсянников, Л. П. Рапопорт, *Опт. и спектр.* **38**, 206 (1975).
29. Н. Л. Манаков, В. Д. Овсянников, Л. П. Рапопорт, *Опт. и спектр.* **38**, 424 (1975).
30. Л. П. Рапопорт, Б. А. Зон, Н. Л. Манаков, *Теория многофотонных процессов в атомах*, Атомиздат, Москва (1978).
31. Н. Л. Манаков, С. И. Мармо, С. А. Свиридов, *ЖЭТФ* **132**, 796 (2007).
32. N. L. Manakov and V. D. Ovsiannikov, *J. Phys. B* **10**, 569 (1978).
33. C. E. Moore, *Atomic Energy Levels*, Natl. Bur. Stand. (U.S.) Circ. 467, Vol. I, II (1952).
34. M. J. Seaton, *Rep. Progr. Phys.* **46**, 167 (1983).
35. F. Burgess and M. J. Seaton, *Month. Not. Roy. Astron. Soc.* **120**, 121 (1960).
36. Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, т. 2, Наука, Москва (1973).
37. Н. Л. Манаков, С. И. Мармо, А. Г. Файнштейн, *ТМФ* **59**, 49 (1984).
38. А. А. Крыловецкий, Н. Л. Манаков, С. И. Мармо, *ЖЭТФ* **119**, 45 (2001).
39. N. L. Manakov, A. Maquet, S. I. Marmo et al., *J. Phys. B* **32**, 3747 (1999).
40. M. S. Safronova, C. J. Williams, and C. W. Clark, *Phys. Rev. A* **69**, 022509 (2004).
41. К. Л. Ishikawa, частное сообщение.
42. A. Saenz and P. Lambropoulos, *J. Phys. B* **32**, 5629 (1999).
43. P. Lambropoulos, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 585 (1972).
44. Z. Deng and J. H. Eberly, *Phys. Rev. Lett.* **53**, 1810 (1984); *J. Opt. Soc. Amer. B* **2**, 486 (1985).
45. N. L. Manakov, M. V. Frolov, B. Borca, and A. F. Starace, *J. Phys. B* **36**, R49 (2003), Sec. 1.1.
46. Т. Nakajima, частное сообщение.
47. Z. M. Wang and D. S. Elliot, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3795 (2000).
48. B. Borca, M. V. Frolov, N. L. Manakov, and A. F. Starace, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 133001 (2001).
49. Л. В. Келдыш, *ЖЭТФ* **47**, 1945 (1964).
50. S. P. Goreslavski, G. G. Paulus, S. V. Popruzhenko, and N. I. Shvetsov-Shilovski, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 233002 (2004).
51. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Физматлит, Москва (2002).
52. A. V. Korol, *J. Phys. B* **28**, 3873 (1995).
53. А. А. Крыловецкий, Н. Л. Манаков, С. И. Мармо, А. Ф. Старас, *ЖЭТФ* **122**, 1168 (2002).