



ДИНАМИКА ЗАСЕЛЕННОСТЕЙ В АТОМЕ ВОДОРОДА ПОД ДЕЙСТВИЕМ УЛЬТРАКОРОТКОГО ИМПУЛЬСА ЛАЗЕРНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Н.И. Тенер, В.Л. Дербов

Динамика заселенностей высоковозбужденных состояний атома водорода под действием ультракороткого интенсивного лазерного импульса исследована посредством прямого численного решения уравнения Шредингера в конечном базисе собственных состояний дискретного и непрерывного энергетического спектра. Продемонстрирована существенная роль состояний непрерывного спектра. Обсуждается формирование локализованных волновых пакетов ридберговских состояний.

Введение

В результате суперпозиции ридберговских состояний водородоподобного атома с большими значениями квантовых чисел во всех степенях свободы могут возникать локализованные в пространстве квазистабильные волновые пакеты, движущиеся вдоль классической кеплеровской траектории на большом удалении (несколько тысяч боровских радиусов) от ядра. Такие состояния являются классическим пределом атома, а их динамика обнаруживает и классические, и квантовые свойства. Для таких волновых пакетов произведение неопределенностей координаты и импульса близко к минимальному значению, поэтому они являются хорошим приближением когерентного состояния.

Возможность создания волновых пакетов с различными значениями орбитального и магнитного квантовых чисел и разной степенью локализации, подтверждалась в многочисленных публикациях и привлекла внимание большого числа исследователей. Были предложены различные способы теоретического описания таких локализованных состояний [1] и методы их экспериментального получения [2–6].

Развитие новых подходов к получению локализованных волновых пакетов и исследование их свойств имеет большое значение для изучения принципа соответствия классического предела атома, установления связей между орбитами классически хаотических систем и движением квантового волнового пакета, управления поведением ридберговского электрона [7].

Формирование суперпозиции ридберговских состояний может быть достигнуто в результате взаимодействия атома в основном состоянии с коротким сильным

лазерным импульсом [8–11]: в этом случае одновременно заселяется большое число ридберговских уровней вокруг центрального уровня. Поскольку при дипольных переходах справедливо правило отбора $\Delta L = \pm 1$, такой пакет неизбежно представляет собой суперпозицию ридберговских состояний с низкими значениями орбитального и магнитного квантовых чисел. Как показано в [8–11], он локализован по радиальной переменной и совершает осцилляции между классическими поворотными точками. Другие исследователи предполагают, что увеличение продолжительности импульса, учет переходов между соседними уровнями, а также между стационарными состояниями и состояниями непрерывного спектра, позволяют получать волновой пакет, включающий состояния с высокими значениями орбитального квантового числа [12].

В данной работе рассматривается возможность создания волнового пакета, включающего ридберговские состояния атома водорода с различными значениями орбитального и магнитного квантовых чисел при использовании ультракоротких лазерных импульсов высокой интенсивности. Новым в работе является учет переходов между состояниями дискретного и непрерывного спектра. Посредством численного моделирования исследуется динамика заселенностей энергетических уровней и форма образующегося волнового пакета.

1. Возбуждение переходов под действием лазерного импульса

В работах [8–11], а также в проведенном нами ранее исследовании [13] процесс взаимодействия атома с лазерным импульсом рассматривался на основании упрощенной модели без учета состояний непрерывного спектра. Ввиду близости ридберговских уровней к границе ионизации, высокой мощности и малой длительности (и следовательно, большой спектральной ширине) исследуемых импульсов такой учет представляется необходимым. Для демонстрации этого рассмотрим вначале модель без непрерывного спектра.

Предположим, что в модели переходы имеют место только между основным состоянием и ридберговскими состояниями с $n = 20 \div 40$. Пусть поле имеет круговую поляризацию, тогда заселяются ридберговские уровни с $l = m = 1$. Волновая функция системы может быть записана в виде

$$\Psi(C, t) = \sum_{n=20}^{40} C_{n1}(t) R_{n1} Y_{11} + C_{10}(t) R_{10} Y_{00}, \quad (1)$$

где $C_{10}(t)$ и $C_{n1}(t)$ амплитуды заселенностей основного и ридберговских состояний; R_{01} и R_{n1} – радиальные функции основного и ридберговских состояний; Y_{00} и Y_{11} – сферические функции.

Пусть огибающая импульса задается гауссовой функцией $E(t) = E_0 \cdot \exp[-(2t/T)^2] \sin(\omega t)$, где T – продолжительность импульса, E_0 – амплитуда импульса, ω – его частота. Частоту внешнего поля выберем резонансной к переходу между основным состоянием и ридберговским состоянием с $n = 25$.

Численное решение системы уравнений для амплитуд заселенностей показало, что в результате действия импульса подходящей амплитуды и продолжительности

можно достичь почти полного перехода атомов из основного состояния в ридберговские. Динамика заселенностей в такой модели представлена на рис. 1.

На рисунке хорошо видно как заселенность из основного состояния перераспределяется между возбужденными уровнями с $n = 20 \div 40$ и $l = m = 1$.

Одновременное возбуждение большого числа состояний вблизи границы ионизации указывает на необходимость учета переходов в состояния непрерывного спектра. Поэтому рассмотрим модель, в которой наряду с дискретными уровнями учитывается часть непрерывного спектра, лежащая вблизи границы ионизации. Как часто делают в подобных случаях [12], используем дискретное представление непрерывного спектра последовательностью 40 состояний с равноотстоящими значениями волнового числа k , начиная от 0 с шагом 0.02; при этом покрывается энергетический интервал от 0 до 0.3 атомных единиц. Волновую функцию системы можно представить в виде

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{n=20}^{40} C_{n1}(t) R_{n1} Y_{11} + \sum_k C_{k1}(t) R_{k1} Y_{11} + C_{10}(t) R_{10} Y_{00}, \quad (2)$$

где $C_{n1}(t)$ и $C_{k1}(t)$ – амплитуды заселенностей соответствующих ридберговских состояний и состояний непрерывного спектра. Расчеты показали, что динамика заселенностей в системе с волновой функцией (2) существенно отличается от упрощенной модели (1) при тех же параметрах поля.

На рис. 2 показана временная зависимость суммарной заселенности состояний непрерывного спектра, а на рис. 3 – заселенности основного состояния. Видно, что примерно половина атомов переходит в непрерывный спектр, а половина остается в основном состоянии. Осцилляции заселенностей аналогичны осцилляциям Раби, их высокая частота связана с очень большой напряженностью поля. Анализ показал, что в более слабых полях эта частота понижается. Заселение высоковозбужденных состояний дискретного спектра оказывается незначительным (суммарная заселенность составляет около 0.2%). Напомним, что параметры импульса подобраны так, чтобы в упрощенной модели почти все атомы переходили в ридберговские состояния. При

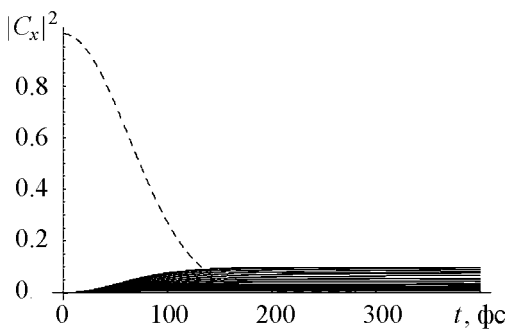


Рис. 1. Динамика заселенностей в упрощенной модели взаимодействия атома с лазерным импульсом. Заселенность основного состояния показана прерывистой линией, ридберговских – сплошными. Максимальная амплитуда E_0 напряженности лазерного поля составляла $5.1 \cdot 10^7$ В/см, продолжительность импульса 600 фс

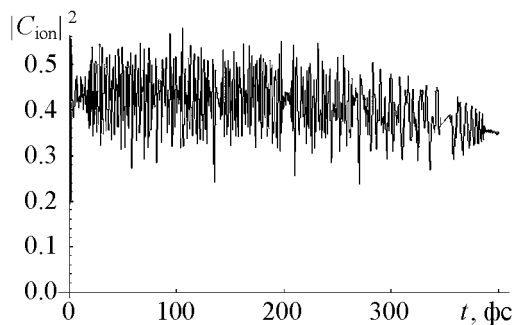


Рис. 2. Суммарная заселенность непрерывного спектра. $E_0 = 5.1 \cdot 10^7$ В/см, продолжительность импульса 600 фс

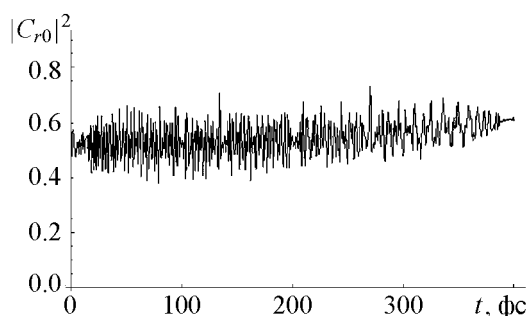


Рис. 3. Заселенность основного состояния. $E_0 = 5.1 \cdot 10^7$ В/см, продолжительность импульса 600 фс

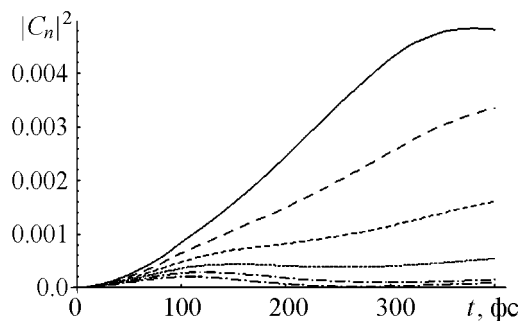


Рис. 4. Заселенность ридберговских состояний $n = 20 \div 25$. $E_0 = 4.6 \cdot 10^6$ В/см, продолжительность импульса 600 фс

наличии континуума такая напряженность поля оказывается завышенной и вместо заселения ридберговских уровней преобладает возбуждение состояний непрерывного спектра. Анализ показал, что наиболее интенсивное заселение ридберговских состояний происходит при существенно меньшей амплитуде поля (рис. 4). В этом случае их суммарная заселенность достигает около 1%.

Можно сделать вывод о неприменимости упрощенной модели без непрерывного спектра для описания процесса заселения ридберговских состояний и формирования волнового пакета в реальном атоме.

2. Получение состояний с высокими значениями орбитального и магнитного квантовых чисел

Дальнейшее расширение модели связано с включением в нее большего числа состояний с различными значениями n , l и m . Рассмотрим теперь модель, в которой для каждого энергетического уровня непрерывного спектра l принимает значения от 1 до 10. Таким образом, для описания непрерывного спектра используется 400 базисных функций. К базисному набору состояний дискретного спектра добавим уровни со значениями главного квантового числа n от 3 до 40 и орбитальным числом от 1 до 10. Общее число базисных состояний дискретного спектра составляет 328. Внешнее поле предполагается циркулярно поляризованным: разрешены переходы с увеличением l и m на 1. Поэтому в рассматриваемой модели для всех уровней $l = m$. Переходы между низковозбужденными состояниями дискретного спектра и континуумом достаточно далеки по частоте от несущей частоты лазерного поля, однако, как показывает анализ, они существенно участвуют во взаимодействии атома с полем из-за весьма высоких значений их дипольных моментов. Более того, их присутствие в модели открывает возможность каскадных процессов с повышением орбитального квантового числа и его проекции на единицу на каждом шаге. Полная схема переходов, включенных в модель, представлена на рис. 5.

Итак, конечное состояние атома представим в виде суперпозиции состояний дискретного и непрерывного спектра, общее число которых теперь составляет 728.

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n \sum_{l=m} C_{nl}(t) R_{nl} Y_{l,m=l} + \sum_k \sum_{l=m} C_{kl}(t) R_{kl} Y_{l,m=l}. \quad (3)$$

Первая сумма в выражении (3) представляет состояния дискретного, вторая – состояния непрерывного спектра. Для исследования динамики заселенностей численно решались уравнения для амплитуд заселенностей.

$$\begin{aligned} \frac{dC_{10}(t)}{dt} = i \sum_{n=20}^{40} d_{10}^{n1} \exp[i(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{2})t] E(t) \cdot C_{n1}(t) + \\ + i \sum_k d_{10}^{k1} \exp[i(-E_k - \frac{1}{2})t] E(t) \cdot C_{k1}(t), \end{aligned} \quad (4)$$

$$\begin{aligned} \frac{dC_{n1}(t)}{dt} = i d_{10}^{n1} \exp[-i(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{2})t] E(t) \cdot C_{10}(t) + \\ + i \sum_k d_{n1}^{k2} \exp[-i(-\frac{1}{n^2} - E_k)t] E(t) \cdot C_{k2}(t), \end{aligned} \quad (5)$$

$$\begin{aligned} \frac{dC_{nl}(t)}{dt} = i \sum_k d_{nl}^{kl-1} \exp[-i(-\frac{1}{n^2} - E_k)t] E(t) \cdot C_{kl-1}(t) + \\ + i \sum_k d_{nl}^{kl+1} \exp[i(-\frac{1}{n^2} - E_k)t] E(t) \cdot C_{kl+1}(t), \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \frac{dC_{kl}(t)}{dt} = i \sum_k d_{nl-1}^{kl} \exp[-i(-\frac{1}{n^2} - E_k)t] E(t) \cdot C_{nl-1}(t) + \\ + i \sum_k d_{nl+1}^{kl} \exp[i(-\frac{1}{n^2} - E_k)t] E(t) \cdot C_{nl+1}(t), \end{aligned} \quad (7)$$

где $d_{nl}^{kl'}$ – дипольные матричные элементы переходов, E_k – энергия состояния непрерывного спектра для заданного k . Для переходов между состояниями дискретного и непрерывного спектра матричные элементы рассчитывались путем численного интегрирования, а для переходов между состояниями дискретного спектра – по известным формулам [14].

Исследование динамики заселенностей проводилось для различных длительностей импульса. Амплитуда напряженности лазерного поля составляла $3.57 \cdot 10^8$ В/см. В момент включения поля атомы находились в основном состоянии с $n = 1, l = 0, m = 0$. На рис. 6 и 7 изображено действие импульса продолжительностью 5 фс.

На рис. 6 изображена временная зависимость заселенности основного состояния и четырех состояний непрерывного спектра с энергиями близкими к нулю. Видно, что существенная часть атомов переходит из основного состояния в состояния непрерывного спектра. Затем происходят переходы из непрерывного спектра на дискретные уровни с различными значениями n , которые сопровождаются увеличением орбитального и магнитного квантовых чисел на 1. Такой процесс обмена заселенностей иллюстрируется рис. 7, где показана заселенность уровней с $n = 3 \div 7$ и $l = 2$. Хорошо заметны осцилляции, связанные с переходами из непрерывного спектра и обратно. На начальном этапе максимально заселяется уровень с $n = 3$, затем заселенность перераспределяется между другими уровнями благодаря переходам через

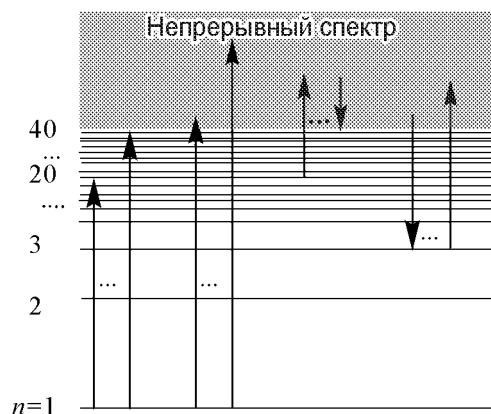


Рис. 5. Схема переходов в модели, допускающей возбуждение состояний с высокими значениями орбитального момента и его проекции под действием лазерного импульса с круговой поляризацией

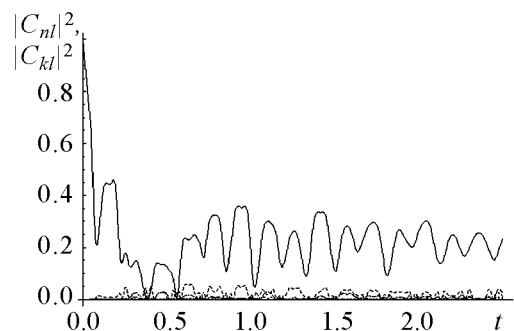


Рис. 6. Динамика заселенностей под действием импульса продолжительностью 5 фс при максимальной напряженности поля $E_0 = 3.57 \cdot 10^8$ В/см. Сплошная линия – заселенность основного состояния, штриховые линии – заселенности четырех состояний непрерывного спектра с энергиями близкими к нулю

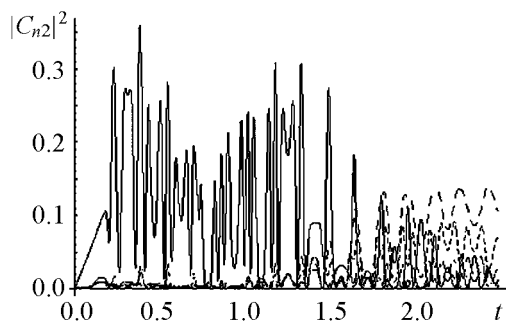


Рис. 7. Заселенность стационарных состояний с $l = 2$: сплошная линия – $n = 3$, штриховые линии – $n = 4, 5, 6, 7$. $E_0 = 3.57 \cdot 10^8$ В/см

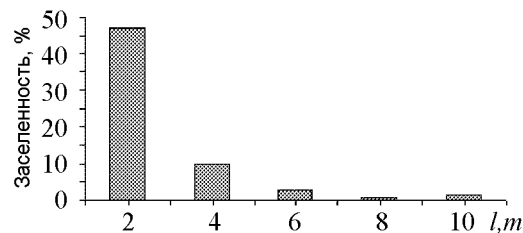


Рис. 8. Распределение заселенности по l и m в процентах

непрерывный спектр. Существенно заселяются состояния с $l = m = 2$, что соответствует результатам, полученными другими авторами [12]. Часть атомов остается в основном состоянии.

Аналогичная динамика заселенностей наблюдается для лазерного импульса продолжительностью 25 фс. Заметно, что за более длительное время действия импульса успевает произойти большее число переходов в континуум и обратно, в результате чего заселяются состояния с большими значениями орбитального и магнитного квантовых чисел. В конце действия импульса примерно 30% атомов переходит в непрерывный спектр, примерно 13% – остается в основном состоянии. Остальные атомы перераспределяются между связанными состояниями с различными значениями n, l и m . Распределение населенности в зависимости от l представлено на рис. 8.

На рисунке виден заметный вклад состояний с высокими значениями орбитального и магнитного квантовых чисел в общую заселенность сформировавшегося в результате действия импульса волнового пакета. Можно отметить, что состояния с нечетными значениями l и m (1, 3, 5, 7, 9) практически не заселяются. Это объясня-

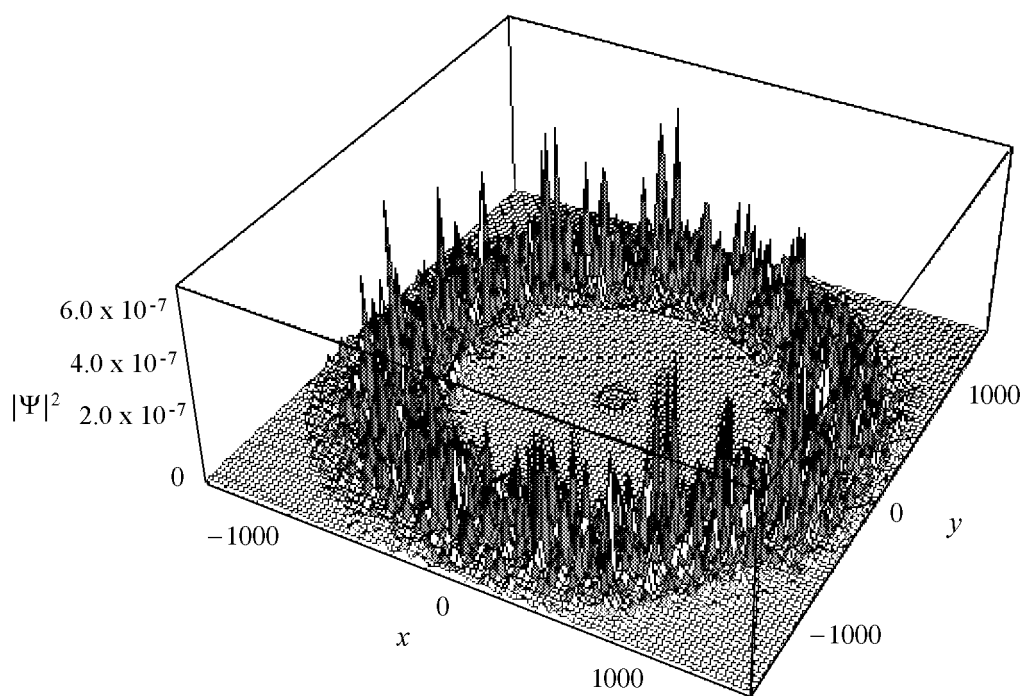


Рис. 9. Распределение плотности вероятности для волнового пакета, сформированного импульсом с круговой поляризацией продолжительностью 25 фс

ется сохранением четности в системе [15]. На основе рассчитанных коэффициентов $C_{nl}(t)$ можно построить пространственное распределение плотности. На рис. 9 такое распределение изображено в плоскости $z = 0$. Видна локализация электрона по радиальной переменной и отсутствие локализации по азимутальному углу, что является характерным для суперпозиции с преобладанием состояний с низкими значениями орбитального и магнитного квантовых чисел.

Заключение

Результаты исследований показали, что упрощенная модель и модель с учетом непрерывного спектра дают принципиально различные результаты. Без учета дополнительных уровней дискретного спектра не удастся получить заметного заселения ридберговских состояний. В то же время существенная часть заселенности переходит в непрерывный спектр. Более точные расчеты с использованием расширенной модели, включающей большое число дискретных состояний и состояний непрерывного спектра с различными значениями орбитального и магнитного квантовых чисел, показали, что в результате действия импульса заселение ридберговских уровней происходит вследствие обмена заселенности между стационарными состояниями и непрерывным спектром. Наблюдается рост заселения состояний с более высокими значениями орбитального и магнитного квантовых чисел по мере увеличения длительности импульса. Можно предположить, что выбор подходящей продолжитель-

ности и амплитуды импульса позволит достигать высоких значений l и m , вплоть до максимальных. Преимущественно каскадный характер заселения дискретных уровней через континуум подтверждается и тем обстоятельством, что в отличие от модели с чисто дискретным спектром практически не заселяются состояния с $l = m = 1$, что объясняется четным числом участвующих в процессе фотонов.

Библиографический список

1. *Gaeta Z.D. and Stroud C.R.* Classical and quantum-mechanical dynamics of quasi-classical state of the hydrogen atom // *Phys. Rev. A.* 1990. 42. P. 6308.
2. *Gaeta Z.D., Noel M.W. and Stroud C.R.* Excitation of the classical-limit state of an atom // *Phys. Rev. Lett.* 1994. 73. P. 636.
3. *Bromage J. and Stroud C.R.* Excitation of a three-dimensionally localized atomic electron wave packet // *Phys. Rev. Lett.* 1999. 83. P. 4963.
4. *Hulet G. and Kleppner D.* Rydberg atom in «circular» states // *Phys. Rev. Lett.* 1983. 51. P. 1430.
5. *Hare J., Gross M. and Goy P.* Circular atoms prepared by a new method of crossed electric and magnetic fields // *Phys. Rev. Lett.* 1988. 61. P. 1938.
6. *Cheng C.H., Lee C.Y. and Gallaghe T.F.* Production of circular Rydberg states with circularly polarized microwave fields // *Phys. Rev. Lett.* 1994. 73. P. 3078.
7. *Shapiro E.A., Kalinski M. and Eberly J.H.* Non-circular Trojan-like wavepackets: quantum theory and application to quantum control // *J. Phys. B.* 2000. 33. P. 3079.
8. *Alber G., Ritsch H. and Zoller P.* Generation and detection of Rydberg wave packets by short laser pulses // *Phys. Rev. A.* 1986. 34. P. 1058.
9. *Parker J. and Strong C.R.* Coherence and decay of Rydberg wave packets // *Phys. Rev. Lett.* 1986. 56. P. 716.
10. *Wolde A. et al.* Observation of radially localized atomic electron wave packets // *Phys. Rev. Lett.* 1988. 61. P. 2099.
11. *Noordam L.D., Duncan D.I. and Gallagher T.F.* Ramsey fringes in atomic Rydberg wave packets // *Phys. Rev. A.* 1992. 45. P. 4734.
12. *Nilsen H.M. and Hansen J.P.* Generation of an angular and radial Rydberg wave packet in a single laser pulse // *Phys. Rev. A.* 2000. 63. P. 011405.
13. *Тенер Н.И., Дербов В.А.* Лазерное возбуждение локализованных волновых пакетов Ридберговских атомов // Проблемы оптической физики / Материалы 10-й Международной молодежной научной школы по оптике, лазерной физике и биофизике. 26–29 сентября, 2006, Саратов, Саратов: Изд-во «Новый ветер», 2007. 248 с.
14. *Бете Г., Солпитер Э.* Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами. М.: Физматгиз, 1960.
15. *Делоне Н.Б., Крайнов В.П.* Атом в сильном световом поле. 2-е изд., перераб. М.: Энергоатомиздат, 1984.

*Саратовский государственный
социально-экономический университет
Саратовский государственный
университет*

Поступила в редакцию 12.01.2008

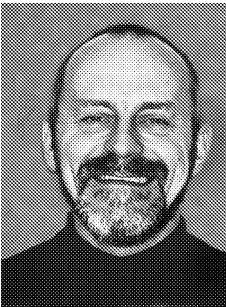
**POPULATION DYNAMICS IN A HYDROGEN ATOM
UNDER THE ACTION OF AN ULTRA-SHORT PULSE
OF LASER RADIATION**

N.I. Teper; V.L. Derbov

Population dynamics of highly excited states of a hydrogen atom under the action of an ultra-short intense laser pulse is studied by means of direct numerical solution of Schrödinger equation in the finite basis of eigenstates of the discrete and continuous energy spectrum. The essential role of continuous spectrum states is demonstrated. Formation of localized wave packets of Rydberg states is discussed.



Тепер Наталья Игоревна – родилась в Ульяновске (1975), окончила Саратовский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского (1997). В 2001 году окончила аспирантуру СГУ по специальности «лазерная физика». С 2000 года работает преподавателем в Саратовском государственном социально-экономическом университете. Автор 8 научных статей по теории и численному моделированию воздействия лазерного излучения на атомные и молекулярные системы.



Дербов Владимир Леонардович – родился в Саратове (1949), окончил физический факультет СГУ (1972), аспирантуру СГУ (1975). Защитил диссертацию на соискание звания кандидата (1977) и доктора (1998) физико-математических наук по специальности «оптика». Работал на кафедре теоретической и ядерной физики СГУ, в НИИ механики и физики СГУ, на кафедре оптики, а затем лазерной и компьютерной физики СГУ. В настоящее время профессор, зав. кафедрой теоретической и ядерной физики СГУ. Автор более 140 печатных работ. Область научных интересов – нелинейная оптика, квантовая механика, взаимодействие атомов и молекул с лазерным излучением.