

РЕЗОНАНСНАЯ ФОТОИОНИЗАЦИЯ АТОМА ВОДОРОДА ИНТЕНСИВНЫМИ ФЕМТОСЕКУНДНЫМИ ИМПУЛЬСАМИ

М.Н. Хаердинов¹, А.Н. Грум-Гржимайло¹, Е.В. Грызлова¹, К. Bartschat²

¹Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д.В. Скобельцына
МГУ имени М.В. Ломоносова, Москва 119234, Россия

²Department of Physics and Astronomy Drake University, Des Moines, Iowa 50311, USA
E-mail: khaerdinovmn@gmail.com

Теоретическое изучение взаимодействия атома водорода с интенсивными лазерными импульсами позволяет на примере этой простой системы выявить главные закономерности сильно нелинейных фотопроцессов и опробовать методы их численного моделирования. Дальнейшее развитие теории в этой области связано с созданием нового поколения источников интенсивных фемто- и даже аттосекундных импульсов излучения в вакуумно-ультрафиолетовом (ВУФ) и рентгеновском диапазоне – лазеров на свободных электронах и источников, основанных на лазерной генерации высоких гармоник. Фотоионизация является одним из основных процессов, происходящих при взаимодействии такого излучения с атомами. Уже почти 50 лет назад с помощью простой модели М.В. Келдыш показал [1], что в зависимости от напряженности лазерного поля F и его частоты ω (все величины в атомных единицах) можно выделить два режима ионизации: пертурбативный режим при параметре Келдыша $\gamma = \omega (2E_i)^{1/2} / F \ll 1$ (где E_i – порог ионизации), когда доминирующими являются многофотонные процессы, и туннельный режим при $\gamma \gg 1$. В последнем случае электрон может отойти от ионного остова путем туннелирования через барьер, образованный кулоновским полем ядра и зависящим от времени электрическим полем лазерного излучения. Освобожденный электрон осциллирует в сильном внешнем поле и может многократно вернуться к иону, генерируя гармоники излучения. При многофотонном поглощении в спектре фотоэлектронов могут наблюдаться острые пики, отстоящие друг от друга примерно на величину энергии фотона, – свидетельство так называемой надпороговой ионизации (above threshold ionization – ATI), – процесса, когда фотоэлектрон в континууме поглощает еще один и более фотонов, переходя в состояния непрерывного спектра с еще большей энергией. Отметим, что для коротких импульсов критерии Келдыша надо применять с осторожностью, так как они получены для постоянных по амплитуде импульсов.

Стремление к более строгому описанию фотоионизации атомов фемтосекундными импульсами стимулировало развитие математических методов и численных алгоритмов решения нестационарного уравнения Шредингера (time dependent Schrödinger equation - TDSE). Численные решения TDSE разными вариантами спектрального и сеточного методов (например, [2-9]) значительно обогатили представление об основных закономерностях этого

процесса. Актуальным является поиск упрощенных моделей, позволяющих достичь подобных результатов с меньшими вычислительными затратами.

Непосредственной мотивацией для настоящей работы явились достаточно неожиданные результаты модельных расчетов [10] спектра фотоэлектронов (рис. 1) при ионизации $1s$ состояния атома водорода импульсом с пиковой интенсивностью $I = 4 \cdot 10^{14} \text{ Вт} \cdot \text{см}^{-2}$ и несущей частотой, настроенной в резонанс с $1s - 2p$ переходом ($\omega = 0.375 \text{ а.е.} = 10.2 \text{ эВ}$). Полная длительность импульса с трапецеидальной огибающей соответствует 40 оптическим циклам ($\sim 16.2 \text{ фсек}$), из которых 2 цикла приходится на передний фронт импульса, 36 циклов - на его плато и 2 цикла - на его задний фронт. Условно этот импульс обозначается 2-36-2. Полученный в [10] спектр содержит АТІ пики вплоть до максимальной рассмотренной энергии фотоэлектронов более 5 а.е., причем, начиная примерно с 2 а.е., эти пики остаются стабильными по амплитуде и лежащими на практически горизонтальном «плато». Хотя наличие «плато» в спектре, вообще говоря, явление, объясненное и наблюдаемое (например, [11]), оценки его протяженности по известным формулам для приведенной выше частоты и интенсивности поля дают пренебрежимо малую величину. Полученная дублетная структура всех АТІ пиков объяснена в [10] как дублет Ауслера-Таунса, образующийся из-за связи $n=2$ состояний водорода с непрерывным спектром, осуществляемая лазерным импульсом. Расчеты спектров в [10] основывались на модельном решении TDSE в импульсном пространстве, когда интегральное ядро нелокального кулоновского потенциала заменялось конечной суммой сепарабельных потенциалов. Результаты же безмодельного решения TDSE, которые позволили бы точнее судить о применимости такого модельного подхода, для рассматриваемого случая в литературе отсутствуют. В этой работе мы проводим такие расчеты с помощью недавно созданной программы численного решения TDSE матричным итерационным методом [12]; при этом мы также исследуем влияние формы импульса на спектр фотоэлектронов.

На рис. 2 приведены наши результаты для спектра фотоэлектронов при тех же параметрах импульса, для которых были получены результаты, приведенные на рис. 1. На рис. 3 более подробно показана часть спектра, на которой хорошо видно появление вычислительных шумов, в которых «утопают» АТІ пики и падение этих шумов в расчетах с различным шагом сетки.

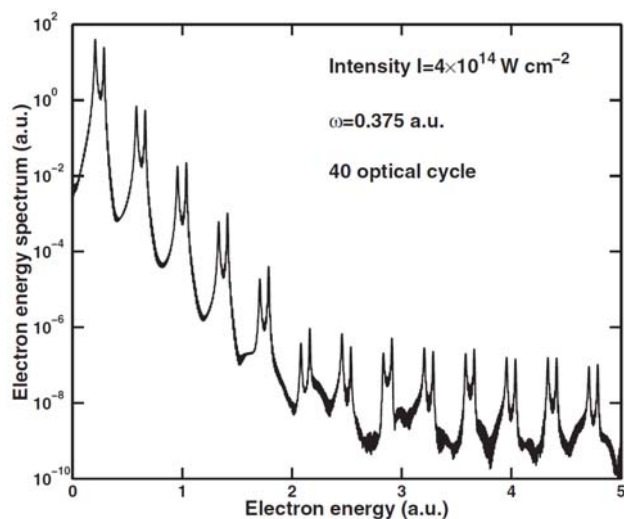


Рис.1. Спектр фотоэлектронов из [10], рассчитанный для взаимодействия атома водорода в $1s$ -состоянии с трапецидальным импульсом. Параметры 2-36-2 импульса указаны на рисунке.

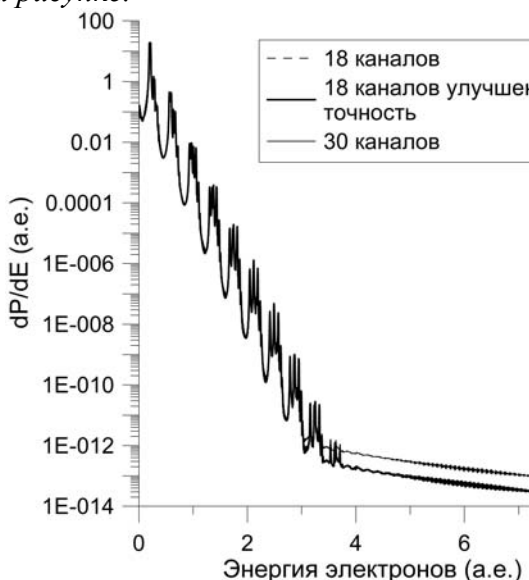


Рис. 2. Спектр электронов, рассчитанный путем прямого численного решения TDSE, для взаимодействия атома водорода с трапецидальным импульсом (см. текст). Пунктирная и сплошная кривые для 18 каналов неразличимы.

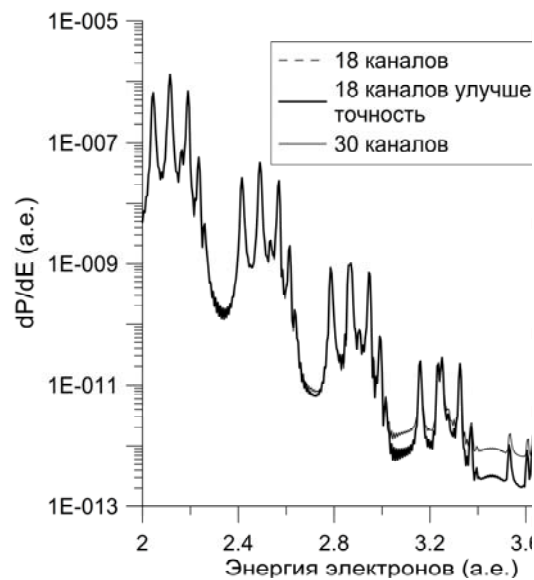


Рис. 3. Часть спектра электронов, изображенного на рис. 2.

Как видно из рис. 2 и 3, интенсивность АТІ пиков монотонно падает а «плато» обусловлено появлением вычислительных шумов, т.е. точностью расчетов. Эта точность очень высока – она обеспечивает надежные расчеты спектров в диапазоне 13-ти порядков. Рис. 2 и 3 демонстрируют также сходимость результатов с увеличением числа учитываемых парциальных волн (каналов) фотоэлектрона. АТІ пики имеют форму намного более сложную, чем дублетная структура, полученная в [10]. Тонкая структура АТІ пиков, полученная в наших расчетах и наиболее ясно видная на рис. 3, имеет, по-видимому, ту же природу, что и обнаруженная ранее тонкая структура АТІ

пиков при ионизации атома ксенона [2]. Именно, изменяющаяся при увеличении/уменьшении на переднем/заднем фронте импульса напряженность электрического поля вызывает переменный пондеромоторный сдвиг уровней атома водорода, который приводит к поочередному прохождению атомных уровней через резонансную энергию. Отсутствие тонкой структуры ATI пиков в работе [10], скорее всего, связано с ограниченным числом слагаемых сепарабельного потенциала, которые поддерживали только связанные состояния $1s$, $2s$, и $2p$.

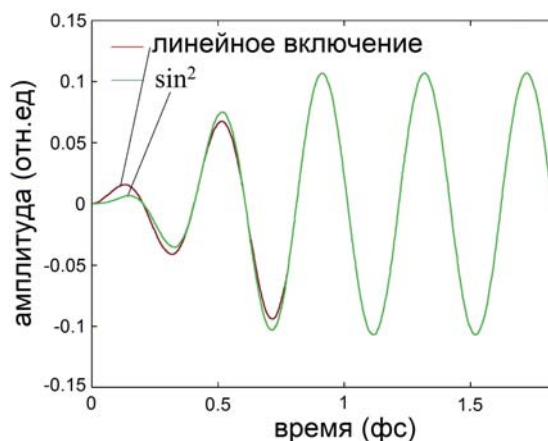


Рис. 4. Начальная область трапецеидального импульса («линейное включение») импульса с включением как \sin^2 .

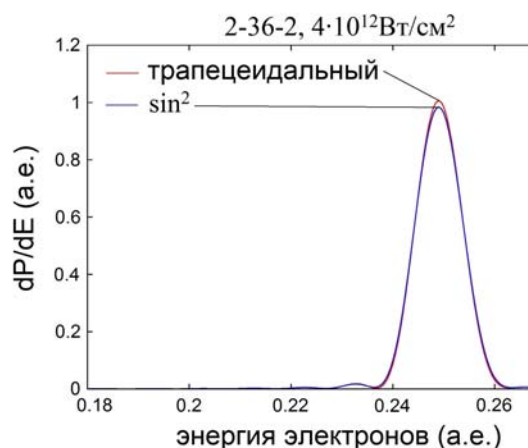


Рис. 5. Первый фотоэлектронный пик при интенсивности $4 \cdot 10^{12} \text{ Вт/см}^2$ для импульсов трапецеидального и с включением и выключением как \sin^2 .

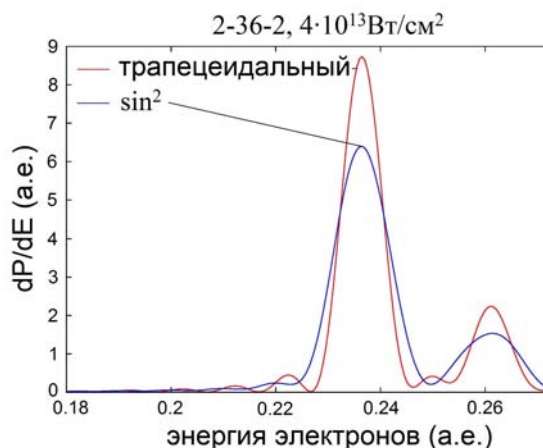


Рис. 6. То же, что на рис. 5, но для интенсивности $4 \cdot 10^{13} \text{ Вт/см}^2$.

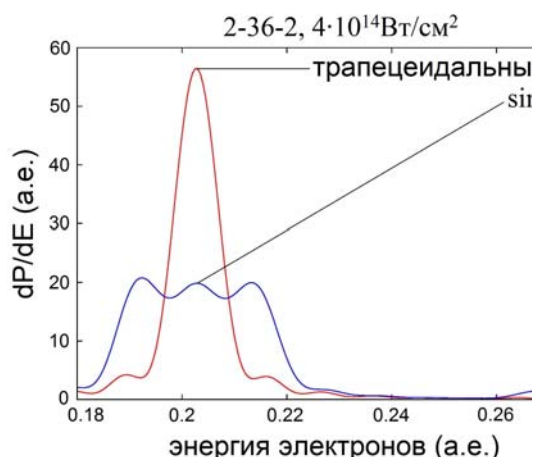


Рис. 7. То же, что на рис. 5, но для интенсивности $4 \cdot 10^{14} \text{ Вт/см}^2$.

Сопоставляя рис. 2 и 3 с рис. 1, можно сделать вывод о том, что модельный подход к решению TDSE, использованный в [10], лишь качественно передает особенности спектра фотоэлектронов до энергии примерно 2 а.е. При этом, однако, не воспроизводится тонкая структура ATI пиков. Для энергий выше 2 а.е. наши расчеты из первых принципов, в отличие от [10], не

показывают плато в спектре и приводят к монотонно падающим по интенсивности АТІ пикам.

Огибающую импульса во время его «включения» и «выключения» в расчетах часто представляют не в виде прямой линии, как у трапецеидального импульса, а в виде отрезка функции \sin^2 . Исследуем, как влияет форма импульса на спектр фотоэлектронов. На рис. 4 приведены первые 4.5 оптических цикла названных импульсов, из которых два первых цикла составляют «включение». Хотя отличие импульсов кажется совсем небольшим, оно очень сильно сказывается на форме и амплитуде АТІ пиков. На рис. 5-7 приведен первый пик тонкой структуры фотоэлектронного спектра в линейном масштабе для трапецеидального и \sin^2 импульсов при различных интенсивностях излучения. Для интенсивности $4 \cdot 10^{12} \text{Вт/см}^2$ (рис. 5) разница в форме импульсов слабо сказывается на форме пика, но ситуация резко меняется с увеличением интенсивности (рис. 6, 7), а при интенсивности $4 \cdot 10^{14} \text{Вт/см}^2$ форма пика меняется качественно. Можно наблюдать изменяющийся пондеромоторный сдвиг энергии пика при изменении интенсивности импульса.

Поскольку огибающая импульса очень сильно сказывается на форме и амплитуде АТІ пиков, можно ожидать, что длительность «включения» и «выключения» импульса при одинаковой общей его длительности также должна влиять на форму линий в спектре фотоэлектронов. Рис. 8 демонстрирует эти сильные изменения формы первой фотоэлектронной линии тонкой структуры для \sin^2 импульса при интенсивности $4 \cdot 10^{14} \text{Вт/см}^2$ с изменением длительности фронтов импульса. Чем резче происходит включение и выключение импульса, тем шире и разнообразнее становятся АТІ пики. Для импульса 4-36-4 практически достигается режим адиабатического включения, при котором форма пика стабилизируется. Причины, приводящие к конкретным формам фотоэлектронной линии при резком включении поля, требуют более обстоятельного анализа. По крайней мере, частично они связаны с разным спектральным составом импульсов разной формы.

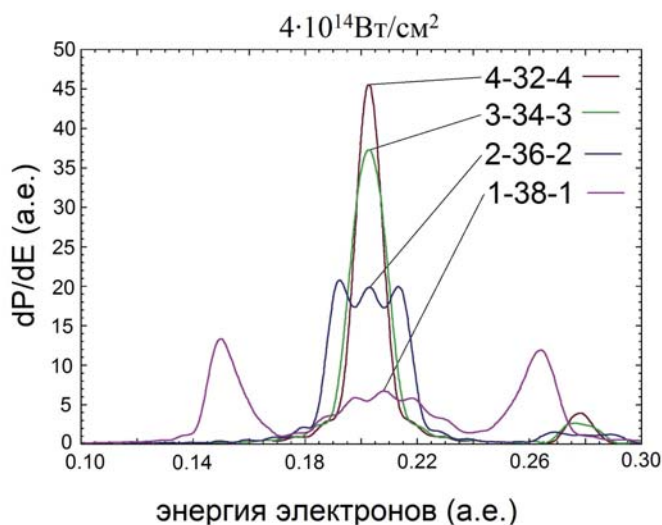


Рис. 8. Первый фотоэлектронный пик от импульса с включением и выключением как \sin^2 при интенсивности $4 \cdot 10^{14} \text{Вт/см}^2$ для разных длительностей включения (выключения).

Дальнейшее изучение многофотонной ионизации атома водорода методом численного решения TDSE может дать дополнительную ценную информацию о механизмах формирования спектров и других характеристик фотоэлектронов при ионизации атомов короткими интенсивными импульсами ВУФ и рентгеновского диапазона.

Работа выполнена при поддержке гранта Президента Российской Федерации МК-6509.2012.2 и с поддержкой фонда «Династия». Мы также благодарим вычислительный центр СКИФ МГУ за предоставленную возможность проводить расчеты на суперкомпьютере «Чебышев».

1. Л.В. Келдыш. Ионизация в поле сильной электромагнитной волны. ЖЭТФ, 47: 1945, 1964.
2. R.R. Freeman, P.H. Bucksbaum, H. Milchberg, S. Darack, D. Schumacher, and M.E. Geusic. Above threshold ionization with subpicosecond laser pulses. Phys. Rev. Lett., 59:1092, 1987.
3. L. A. Collins and A. L. Merts. Solutions to the time-dependent three-dimensional Schrodinger equation: Atoms in intense electric fields. Phys. Rev. A, 40:4127, 1989.
4. X. Tang, H. Rudolph, and P. Lambropoulos. Nonperturbative approach to atomic multiphoton processes under intense, short laser pulses. Phys. Rev. Lett. 65:3269, 1990.
5. M. Pont, D. Proulx, and R. Shakeshaft. Numerical integration of the time-dependent Schrödinger equation for an atom in a radiation field. Phys. Rev. A, 44:4486, 1991.
6. C. Cerjan and K. Kulander. Efficient time propagation for finite-difference representations of the time-dependent Schrodinger equation. Comput. Phys. Commun., 63:529, 1991.
7. K. C. Kulander. Multiphoton ionization of hydrogen: A time-dependent theory. Phys. Rev. A, 35:445, 1987.
8. K.J. LaGattuta. Laser effects in photoionization: numerical solution of coupled equations for a three-dimensional Coulomb potential. J. Opt. Soc. Am. B, 7:639, 1990.
9. M. Nurhuda and F. H. M. Faisal. Numerical solution of time-dependent Schrödinger equation for multiphoton processes: A matrix iterative method. Phys. Rev. A, 60:3125, 1999.
10. H.M. Tetchou Nganso, Yu. V. Popov, B. Piraux, J. Madrõnero, and M.G. Kwato Njock. Ionization of atoms by strong infrared fields: Solution of the time-dependent Schrödinger equation in momentum space for a model based on separable potentials. Phys. Rev. A, 83:013401, 2011.
11. G.G. Paulus, W. Nicklich, Huale Xu, P. Lambropoulos, and H. Walther. Plateau in above threshold ionization spectra. Phys. Rev. Lett., 72:2851, 1994.
12. A. N. Grum-Grzhimailo, B. Abeln, K. Bartschat, D. Weflen, and T. Urness. Ionization of atomic hydrogen in strong infrared laser fields. Phys. Rev. A, 81:043408, 2010.