

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Физический факультет
Кафедра Квантовой механики

Исследование процессов взаимодействия
многозарядных ионов с сильными короткими
импульсами когерентного излучения

Выпускная квалификационная работа студента 407
группы

Крапивина Дмитрия Андреевича

Научный руководитель:

д.ф. - м.н., профессор ТЕЛЬНОВ Д. А.

Рецензент:

д.ф. - м.н., профессор УЛЬЯНОВ С. В.

Санкт-Петербург
2017 г.

Содержание

1	Введение	3
2	Сфероидальные координаты	3
3	Уравнение Дирака в сфероидальной системе координат	4
4	Псевдоспектральные методы	5
5	Применение псевдоспектральных методов	6
6	Результаты для атома водорода	9
7	Ионы с зарядом ядра Z	11
8	Результаты для ионов	12
8.1	Результат для Ar^{17+}	12
8.2	Результат для Sn^{49+}	13
8.3	Результат для U^{91+}	14
9	Заключение	15
	Список литературы	16

1 Введение

Существует целый ряд инфраструктурных проектов по всему миру, в которых достигаются все более и более высокие интенсивности лазеров (подробный обзор, к примеру [1]). Эксперименты с ионизацией могут быть проведены на различных современных установках, таких как NLLITE, European X-Ray Free-Electron Laser, Linac Coherent Light Source. Крайне важно использовать релятивистское описание процессов взаимодействия частиц с лазерным полем, так как электроны, расположенные на первых электронных орбитах, в ионах с большими зарядами ядер движутся с релятивистскими скоростями. Особый интерес представляет взаимодействие лазерного излучения с многозарядными ионами и двухцентровыми молекулами, так как, чем больше заряд ядер, тем большая интенсивность лазерного излучения необходима для того чтобы ионизовать рассматриваемую систему. Для тяжелых ядер будем применять релятивистское описание, используя уравнение Дирака. Взаимодействие рассматриваемой системы с лазерным полем высокой интенсивности будем проводить в дипольном приближении. Для решения уравнения Дирака, предлагается использовать сфероидальные координаты, так как они обладают рядом серьезных преимуществ. Во-первых, при численном решении уравнения Дирака в этой системе координат не возникают шпурриозные состояния, что значительно упрощает дальнейшие расчеты. Во-вторых эта система очень удобна для описания двухатомных молекул, так как при решении уравнения Дирака ядра молекулы могут быть совмещены с центрами этой системы координат. В данной работе приводятся теоретическое описание и расчеты энергий связанных состояний для атома водорода, и некоторых ионов: Ar^{17+} , Sn^{49+} , U^{91+} , а так же вероятность ионизации под действием сильных коротких импульсов когерентного излучения. Все расчеты проводятся в атомной системе единиц ($m_0 = e = \hbar = 1$)

2 Сфероидальные координаты

Для заявленных целей необходимо решить уравнение Дирака для различных атомов. Сначала рассматривается атом водорода. В данной работе оно решается в вытянутых сфероидальных координатах. Рассматривается система из двух центров, где параметр f половина расстояния между центрами. В этих центрах могут располагаться ядра атомов исследуемой двухцентральной молекулы. При рассмотрении водорода, в одном из центров располагается ядро атом водорода, второй же центр пустой. Связь вытянутых сфероидальных координат с декартовыми имеет вид [2]:

$$z = f\xi\eta, \quad x = f\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}\cos\phi, \quad y = f\sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)}\sin\phi \quad (1)$$

Где, сфероидальные координаты изменяются в интервалах:

$$1 < \xi < \infty, \quad -1 < \eta < 1, \quad 0 < \phi < 2\pi \quad (2)$$

Для того чтобы записать уравнение Дирака в сфероидальной системе координат потребуются множители Ламе а так же формула градиента в сфероидальной системе координат [2]:

$$H_\xi = f \sqrt{\frac{\xi^2 - \eta^2}{\xi^2 - 1}}, \quad H_\eta = f \sqrt{\frac{\xi^2 - \eta^2}{1 - \eta^2}}, \quad H_\phi = f \sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \quad (3)$$

Так же, необходимо записать орты декартовой системы координат через орты сфероидальной системы координат:

$$\vec{e}_z = \frac{f\eta}{H_\xi} \vec{e}_\xi + \vec{e}_\eta \frac{f\xi}{H_\eta} \quad (4)$$

$$\vec{e}_x = \vec{e}_\xi \cos \phi \frac{f\xi}{H_\eta} - \vec{e}_\eta \cos \phi \frac{f\eta}{H_\xi} - \sin \phi \vec{e}_\phi \quad (5)$$

$$\vec{e}_y = \vec{e}_\xi \sin \phi \frac{f\xi}{H_\eta} - \vec{e}_\eta \sin \phi \frac{f\eta}{H_\xi} + \cos \phi \vec{e}_\phi \quad (6)$$

$$\vec{p} = \frac{1}{H_\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \vec{e}_\xi + \frac{1}{H_\eta} \frac{\partial}{\partial \eta} \vec{e}_\eta + \frac{1}{H_\phi} \frac{\partial}{\partial \phi} \vec{e}_\phi \quad (7)$$

3 Уравнение Дирака в сфероидальной системе координат

Стационарное уравнение Дирака для двухцентрковой системы с зарядами q_1 и q_2 в сфероидальной системе координат принимает вид:

$$(c(\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p}) + m_0 c^2 \beta - \frac{(q_1 + q_2)\xi + (q_2 - q_1)\eta}{\xi^2 - \eta^2}) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z) \quad (8)$$

где матрицы α и β равны соответственно

$$\beta = \begin{pmatrix} I & 0 \\ 0 & -I \end{pmatrix} \alpha = (\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z) \quad (9)$$

$$\alpha_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \alpha_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (10)$$

Тогда, уравнение Дирака в сфероидальной системе координат имеет вид:

$$\begin{aligned}
& \left(\begin{pmatrix} mc^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & mc^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -mc^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -mc^2 \end{pmatrix} + \right. \\
& \left. \begin{pmatrix} -\frac{(q_1+q_2)\xi+(q_1-q_2)\eta}{\xi^2-\eta^2} & 0 & 0 & \frac{M}{H_\phi} \\ 0 & -\frac{(q_1+q_2)\xi+(q_1-q_2)\eta}{\xi^2-\eta^2} & -\frac{M}{H_\phi} & 0 \\ 0 & \frac{M}{H_\phi} & -\frac{(q_1+q_2)\xi+(q_1-q_2)\eta}{\xi^2-\eta^2} & 0 \\ -\frac{M}{H_\phi} & 0 & 0 & -\frac{(q_1+q_2)\xi+(q_1-q_2)\eta}{\xi^2-\eta^2} \end{pmatrix} - \right. \\
& \left. -ci \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{f\eta}{H_\xi^2} & \frac{f}{H_\eta H_\xi} \xi \\ 0 & 0 & \frac{f}{H_\eta H_\xi} \xi & -\frac{f\eta}{H_\xi^2} \\ \frac{f\eta}{H_\xi^2} & \frac{f}{H_\eta H_\xi} \xi & 0 & 0 \\ \frac{f}{H_\eta H_\xi} \xi & -\frac{f\eta}{H_\xi^2} & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \xi} \right. \\
& \left. -ci \begin{pmatrix} 0 & 0 & \frac{f\xi}{H_\eta^2} & \frac{f}{H_\eta H_\xi} \eta \\ 0 & 0 & \frac{f}{H_\eta H_\xi} \eta & -\frac{f\xi}{H_\eta^2} \\ \frac{f\xi}{H_\eta^2} & \frac{f}{H_\eta H_\xi} \eta & 0 & 0 \\ \frac{f}{H_\eta H_\xi} \eta & -\frac{f\xi}{H_\eta^2} & 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{\partial}{\partial \eta} \right) \psi = E\psi
\end{aligned}$$

4 Псевдоспектральные методы

Рассмотрим отдельно применение псевдоспектральных методов. В данном случае нас интересует дискретизация функций по точкам коллокации. Точками коллокации будут корни полиномов Лежандра. Зададим отображение $x \rightarrow \xi : x \in (-1; 1)$

$$\xi = 1 + R_l \frac{(1+x)^2}{1-x+4\frac{R_l}{R_b}} \quad (11)$$

Где R_l параметр, определяющий распределение точек коллокации и R_b параметр "ящика" за пределами которого волновые функции будем считать равными 0. Будем использовать схему Гаусса-Лежандра-Радау для интегралов по ξ , которые возникнут в дальнейшем, точки коллокации, для которой, имеют вид [2]:

$$x_i : P_{N_x}(x_i) - P_{N_x+1}(x_i) = 0 \quad (12)$$

Где $P_{N_x+1}(x_i), P_{N_x}(x_i)$ полиномы Лежандра, вычисленные в точках коллокации. Веса для дискретизации в точках коллокации имеют вид :

$$w_i^x = \frac{1}{(N_x+1)^2} \frac{1+x_i}{(P_{N_x}(x_i))^2} \quad (13)$$

Дискретизация произвольной интегрируемой функции по точкам коллокации запишется в виде:

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \sum_{i=1}^{N_x+1} f(x_i) w_i^x \quad (14)$$

$$\frac{df}{dx}(\xi(x_i)) = \frac{1}{\xi_i'} \sum_{i'=1}^{N_x+1} D_{ii'}^x f(x_{i'}) \quad (15)$$

Где:

$$D_{ii'}^x = \frac{(1+x_{i'})P_{N_x}(x_i)}{(x_i-x_{i'})(1+x_i)P_{N_x}(x_{i'})} \quad (i \neq i') \quad (16)$$

$$D_{ii}^x = -\frac{(1+x_i)P_{N_x}(x_i)}{2(1+x_i)(1+x_i)P_{N_x}(x_i)} \quad (i = i') \quad (17)$$

Для координаты η зададим отображение $\eta \rightarrow y : y \in (-1; 1)$

$$\eta = \cos\left(\frac{\pi}{2}(y+1)\right) \quad (18)$$

Для нее будем применять схему Гаусса-Лежандра [2]:

$$y_j : P_{N_y}(y_j) = 0 \quad \int_{-1}^1 g(y) dy = \sum_{j=1}^{N_y} g(y_j) w_j^y \quad (19)$$

$$w_j^y = \frac{1}{(1-y_j^2)[P'_{N_y}(y_j)]^2} \quad (20)$$

$$\frac{dg}{dy}(\eta(y_j)) = \frac{1}{\eta_j'} \sum_{j'=1}^{N_y} D_{jj'}^y g(y_{j'}) \quad (21)$$

Где:

$$D_{jj'}^y = \frac{P'_{N_y}(y_j)}{(y_j-y_{j'})P'_{N_y}(y_{j'})} \quad (j \neq j') \quad (22)$$

$$D_{jj'}^y = \frac{y_j P'_{N_y}(y_j)}{(1-y_j^2)P'_{N_y}(y_j)} \quad (j = j') \quad (23)$$

5 Применение псевдоспектральных методов

Умножим обе части уравнения Дирака на комплексно сопряженную волновую функцию и проинтегрируем по всем возможным координатам обе части уравнения. Переведем интегралы по декартовым координатам в интегралы по сфероидальным координатам, а так же симметризуем получающиеся операторы (интегрированием по частям, при этом волновые функции на границе "ящика" обращаются в 0, что позволяет записать интеграл от оператора как половина самого интеграла от оператора и половина от нового интеграла, возникающего при взятии изначального интеграла по частям). Процесс симметризации необходим, чтобы получить эрмитову матрицу. Затем применим к ним псевдоспектральные методы описанные в пункте 4 (заметим так же, что в уравнении нет зависимости от ϕ

поэтому при интегрировании левой и правой части возникнут множители 2π которые сокращаются). Рассмотрим процедуру симметризации на примере первой строки из матрицы Гамильтониана, для остальных слагаемых она аналогична:

$$(mc^2 - \frac{(q_1 + q_2)\xi + (q_1 - q_2)\eta}{\xi^2 - \eta^2})\psi_1 + \frac{M}{H_\phi}\psi_4 - ci(\frac{\eta}{H_\xi^2}\frac{\partial}{\partial\xi}\psi_3 + \frac{1}{H_\eta H_\xi}\frac{\partial}{\partial\xi}\psi_4) - ci(\frac{\xi}{H_\eta^2}\frac{\partial}{\partial\eta}\psi_3 + \frac{1}{H_\eta H_\xi}\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\psi_4) = E\psi_1 \quad (24)$$

Где $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \psi_4$ -компоненты четырех компонентного волнового вектора ψ . Теперь умножаем на ψ^* и интегрируем в сфероидальной системе координат, в итоге получаем:

$$\int_f^\infty \int_{-1}^1 \int_0^\pi (\xi^2 - \eta^2) [\psi_1^* (mc^2 - \frac{(q_1 + q_2)\xi + (q_1 - q_2)\eta}{\xi^2 - f^2\eta^2})\psi_1 + \psi_1^* \frac{M}{H_\phi}\psi_4 - ci\psi_1^* (\frac{\eta}{H_\xi^2}\frac{\partial}{\partial\xi}\psi_3 + \frac{1}{H_\eta H_\xi}\frac{\partial}{\partial\xi}\psi_4) - ci\psi_1^* (\frac{\xi}{H_\eta^2}\frac{\partial}{\partial\eta}\psi_3 + \frac{1}{H_\eta H_\xi}\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\psi_4)] d\xi d\eta d\phi = \int_f^\infty \int_{-1}^1 \int_0^\pi (\xi^2 - \eta^2) \psi_1^* E \psi_1 d\xi d\eta d\phi \quad (25)$$

Рассмотрим какое-либо слагаемое содержащее частную производную под интегралом в формуле (25), к примеру $\psi_1^* \frac{1}{H_\eta H_\xi} \eta \frac{\partial}{\partial\eta} \psi_4$. От него берется интеграл по трем переменным, рассмотрим сначала интеграл по той же самой переменной, по которой берется частная производная в рассматриваемом слагаемом. Возьмем этот интеграл по частям, тогда получим:

$$\int_{-1}^1 (\xi^2 - \eta^2) \psi_1^* \frac{1}{H_\eta H_\xi} \eta \frac{\partial}{\partial\eta} \psi_4 d\eta = ((\xi^2 - \eta^2) \psi_1^* \frac{f}{H_\eta H_\xi} \eta \psi_4) \Big|_{-1}^1 - \int_{-1}^1 \frac{\partial}{\partial\eta} ((\xi^2 - \eta^2) \psi_1^* \frac{f}{H_\eta H_\xi} \eta) \psi_4 \quad (26)$$

Теперь, нетрудно понять, что вне интегральное слагаемое обращается в 0 (это связано с тем, что в H_η входит $\sqrt{1 - \eta^2}$, которое обращается в 0 в граничных точках). Теперь запишем левое слагаемое (26) через половину самого себя и половину того интеграла, что получается при интегрировании по частям. От полученного выражения так же необходимо брать интеграл по двум оставшимся переменным ξ и ϕ . Как уже было сказано ранее, интеграл от ϕ даст справа и слева в формуле 2π которые сократятся (так как от ϕ под интегралами ничего не зависит). Для оставшихся интегралов по ξ и η применим псевдоспектральные методы, описанные в главе 4. В результате слагаемые в формуле (25) принимают вид:

$$\psi^* (\frac{(q_1 + q_2)\xi + (q_1 - q_2)\eta}{\xi^2 - f^2\eta^2}) \psi \rightarrow \psi_{ij}^* (\sum_{i', i=1}^{N_x+1} (\sum_{j', j=1}^{N_y} (\frac{(q_1 + q_2)\xi_i + (q_1 - q_2)\eta_j}{\xi_i^2 - f^2\eta_j^2}) \xi' \eta' w_i^x) \delta_{i' i} \delta_{j' j} w_j^y) \psi_{ij} \quad (27)$$

$$\psi^* \frac{M}{H_\phi} \psi \rightarrow \psi_{ij}^* \left(\sum_{i',i=1}^{N_x+1} \left(\sum_{j',j=1}^{N_y} \frac{M}{H_{\phi ij}} \xi' \eta' w_i^x \right) \delta_{ii'} \delta_{jj'} w_j^y \right) \psi_{ij} \quad (28)$$

$$\psi^* \frac{\eta}{H_\xi^2} \frac{\partial}{\partial \xi} \psi \rightarrow \sum_{j',j=1}^{N_y} \left(\sum_{i',i=1}^{N_x+1} (\psi_{ij} (D_{ii'}^x w_i^x - D_{i'i}^x w_{i'}^x) \psi_{i'j} \frac{\eta_j}{H_{\xi ij}^2} \eta'_j \xi'_i) \right) w_j^y \delta_{jj'} \quad (29)$$

$$\psi^* \frac{\xi}{H_\eta H_\xi} \frac{\partial}{\partial \xi} \psi \rightarrow \sum_{j',j=1}^{N_y} \left(\sum_{i',i=1}^{N_x+1} (\psi_{ij} (D_{ii'}^x w_i^x - D_{i'i}^x w_{i'}^x) \psi_{i'j} \frac{\xi_i}{H_{\eta ij} H_{\xi ij}} \eta'_j \xi'_i) \right) w_j^y \delta_{jj'} \quad (30)$$

$$\psi^* \frac{\xi}{H_\eta^2} \frac{\partial}{\partial \eta} \psi \rightarrow \sum_{i',i=1}^{N_x+1} \left(\sum_{j',j=1}^{N_y} (\psi_{ij} (D_{jj'}^y w_j^y - D_{j'j}^y w_{j'}^y) \psi_{ij'} \eta'_j \frac{\xi_i}{H_{\eta ij}^2} \xi'_i) \right) w_i^x \delta_{ii'} \quad (31)$$

$$\psi^* \frac{\eta}{H_\eta H_\xi} \frac{\partial}{\partial \eta} \psi \rightarrow \sum_{i',i=1}^{N_x+1} \left(\sum_{j',j=1}^{N_y} (\psi_{ij} (D_{jj'}^y w_j^y - D_{j'j}^y w_{j'}^y) \psi_{ij'} \eta'_j \frac{\eta_j}{H_{\eta ij} H_{\xi ij}}) \right) w_i^x \delta_{ii'} \quad (32)$$

Где, индекс i, i' соответствует методу Гаусса-Лежандра-Радау, а j, j' методу Гаусса-Лежандра. В данной работе расчеты производились при числе точек для каждого из этих методов $N_x=80$ и $N_y=40$ соответственно. Проведем теперь, процедуру диагонализации матрицы Гамильтониана, для того чтобы получить возможные энергии состояний и волновые функции этих состояний. Получив их, для различных атомов, рассмотрим изменение волнового вектора основного состояния под действием лазерного поля[3, 4].

$$\psi(t + \Delta t) = \exp(-i \frac{1}{2} \Delta t H_0) \exp[-i \Delta t V(\xi, \eta, t + \frac{1}{2} \Delta t)] \exp(-i \frac{1}{2} \Delta t H_0) \psi(t) + O((\Delta t)^3) \quad (33)$$

Где Δt шаг по времени, H_0 невозмущенный Гамильтониан. В данной работе Δt выбиралось таким, что оно составляет $\frac{T}{20N_{\Delta t}}$, где T длительность импульса содержащего 20 оптических циклов, $N_{\Delta t}$ число точек по времени в каждом оптическом цикле. $V(\xi, \eta, t)$ оператор взаимодействия электрона с лазерным полем. В предположении линейно поляризованного поля, считая что вектор поляризации лежит в плоскости $x - z$, получаем выражение для $V(\xi, \eta, t)$ в дипольном приближении в следующем виде[5]:

$$V(\xi, \eta, t) = f F(t) (\xi \eta \cos \beta + \sqrt{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \cos \phi \sin \beta) \quad (34)$$

Где β угол между вектором поляризации и молекулярной осью (в данной работе $\beta = 0$. F имеет вид:

$$F(t) = F_0 \sin^2\left(\frac{\pi t}{T}\right) \sin(\omega_0 t) \quad (35)$$

Здесь F_0 -амплитуда пика, ω_0 частота несущей, где:

$$F_0 = 10^{14} \frac{\text{Вт}}{\text{см}^2}, \quad \omega_0 = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad \lambda = 800 \text{ нм}, \quad T = \frac{20\pi}{\omega_0} \quad (36)$$

Пропагатор может быть записан как:

$$\exp(-i \frac{1}{2} \Delta t H_0) = \sum_k \exp(-i \frac{1}{2} \Delta t E_k) |\psi_k\rangle \langle \psi_k| \quad (37)$$

Как известно, в результате решения уравнения Дирака получаются два континуума значений энергии. В пропагатор следует включать энергии в интервале от нижней границы верхнего континуума (обозначим ее как E_{min}) до $E_{min} + 10Z^2$, а так же в интервале от $E_{max} - 10Z^2$ до E_{max} (где E_{max} верхняя граница нижнего континуума значений энергий). Из пропагатора необходимо исключить значения со слишком большими значениями $|E|$, так как такие значения не достигаются электроном, то есть сохраняемый интервал значений содержит всю физику процесса. Включение же этих значений энергии в пропагатор может привести к численной нестабильности наших расчетов. Так же, при каждом шаге Δt волновую функцию будем умножать на функцию фильтра, для того чтобы исключить отражения волновых функций от стенок рассматриваемого "ящика". Функция фильтра имеет вид:

$$Filtr = \begin{cases} 1 & \xi \in (1, 30) \\ \cos\left(\frac{\xi-30}{(Rb-30)}\frac{\pi}{2}\right)^{\frac{1}{4}} & \xi \in (30, Rb) \end{cases} \quad (38)$$

6 Результаты для атома водорода

В результате диагонализации матрицы Гамильтониана получаем энергии связанных состояний. Формула для энергии связанных состояний известна из решения релятивистского уравнения Дирака для водородоподобных атомов. Это позволяет сравнить результаты расчета с расчетом по точной формуле. Энергии связанных состояний в атомной системе единиц имеют вид [6]:

$$E = c^2 \left[1 + \frac{(Z\alpha)^2}{(\sqrt{\kappa^2 - (Z\alpha)^2} + n_r)^2} \right]^{-\frac{1}{2}} - c^2 \quad (39)$$

Где $|\kappa| = j + \frac{1}{2}$, j -квантовое число полного углового момента, α -постоянная тонкой структуры, n_r радиальное квантовое число (главное квантовое число связано с ним следующим образом $n = |\kappa| + n_r$). В результате, для атома водорода

Состояние	Энергия из численного расчета	Энергия из точной формулы
$1s_{\frac{1}{2}}$	-0.500006656649930	-0.500006656595360
$2s_{\frac{1}{2}}$	-0.125002080181730	-0.125002080178125
$2p_{\frac{1}{2}}$	-0.125002080278092	-0.125002080178125
$2p_{\frac{3}{2}}$	-0.125000416021066	-0.125000416015625

Из сравнения численных расчетов полученных из точной формулы и численных расчетов, проведенных при помощи псевдоспектральных методов видим, что точность расчета составляет порядка 9-11 значащих цифр. Получив энергии связанных состояний, а с ними и волновые функции этих состояний, можно проследить изменение волновой функции основного состояния под действием лазерного поля. В результате, после воздействия лазерного импульса на протяжении 20 оптических циклов, получающаяся функция позволит определить вероятность ионизации в конце процесса взаимодействия. Для атома водорода результат следующий:

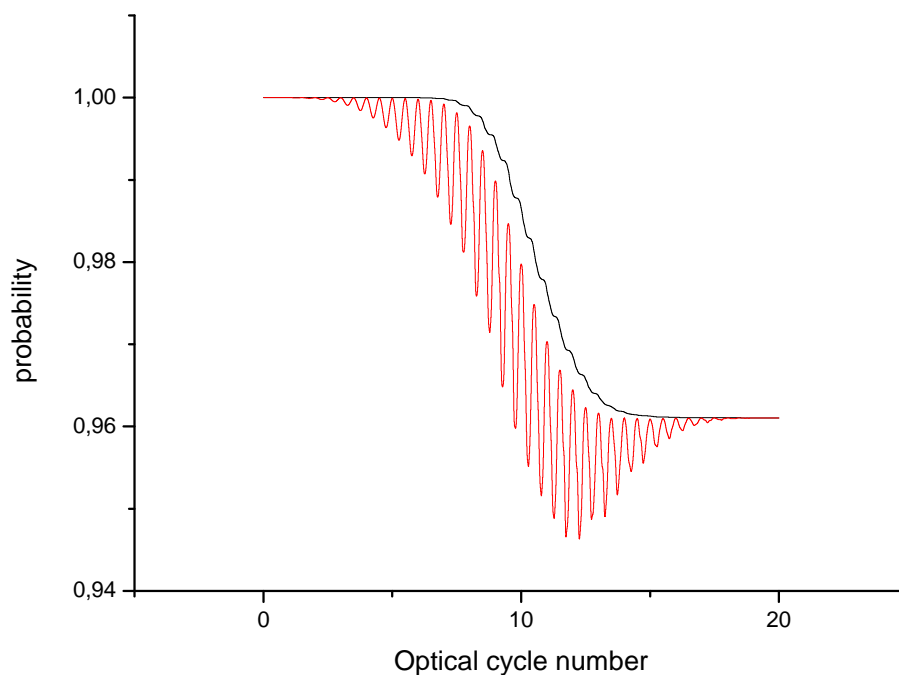


Рис. 1: Результат релятивистского расчета для атома водорода

Где черная линия-квадрат нормы ψ на каждом шаге, красная-заселенность основного состояния. Как показали численные расчеты вероятность ионизации при таком лазерном воздействии для атома водорода порядка 3,9%. Результаты релятивистского расчета хорошо совпадают с результатами нерелятивистского расчета. Для сравнения приведем их здесь:

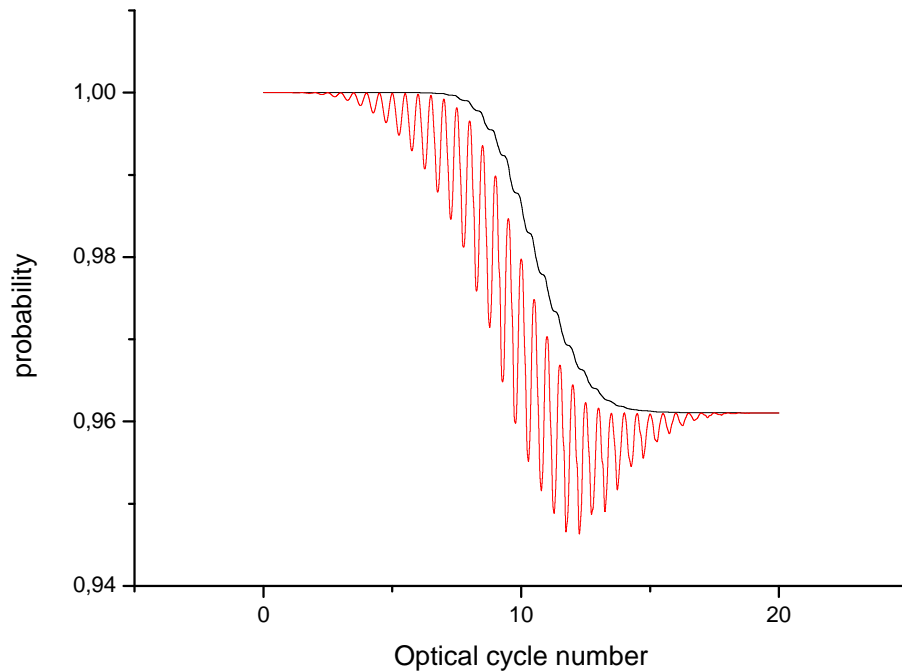


Рис. 2: Результат нерелятивистского расчета для атома водорода

На этом графике видно, что вероятность ионизации так же порядка 3,9%. Это можно объяснить тем, что релятивистские эффекты для небольших зарядов проявляются слабо. Теперь перейдем к рассмотрению атомов, чье ядро имеет больший заряд. Так же, убедимся на атоме водорода в одном из преимуществ использования сфероидальной системы координат-отсутствии шпуриозных состояний. Для этого устремим расстояние между центрами в нашей системе координат к 0, то есть $f=0$ и произведем расчет энергий связанных состояний, в итоге получим:

Энергетическое состояние	Энергия из численного расчета
$1s_{\frac{1}{2}}$	-0.5000066564
Шпуриозное состояние	-0.5000066565
$2s_{\frac{1}{2}}$	-0.12500208017
$2p_{\frac{1}{2}}$	-0.12500208011
$2p_{\frac{3}{2}}$	-0.1250004161
Шпуриозное состояние	-0.1250004159

7 Ионы с зарядом ядра Z

Для атома водорода была использована модель точечного ядра, взаимодействие между ядром и электроном описывалось как взаимодействие между точечными зарядами. Такая модель взаимодействия дает неудовлетворительные численные результаты для ядер с

большими зарядами, поэтому от нее необходимо перейти к другой модели взаимодействия между ядром и электроном. Будем рассматривать модель распределения Ферми, тогда плотность заряда в ядре имеет следующий вид:

$$\rho = \frac{\rho_0}{1 + e^{\frac{r-r_0}{b}}} \quad (40)$$

Где ρ_0 -параметр нормировки, выбираемый так, что бы в ядре был заряд Z , b -параметр регулирующий насколько быстро убывает плотность заряда в ядре, r_0 -среднеквадратичный радиус ядра. Так же, можно произвести изменение параметров $f, R_l, R_b, F_0, \omega_0$ таким образом, чтобы результат нерелятивистского расчета при изменении заряда ядра Z оставался таким же, но менялись бы только выше перечисленные параметры. Рассмотрим как для этого их нужно изменить на примере уравнения Шредингера:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi = [-\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{Z}{r} + (\vec{F} \cdot \vec{r})\cos(\omega t)]\psi \quad (41)$$

Произведем замену $r \rightarrow \alpha r$ и $t \rightarrow \beta t$ и приведем уравнение к водородоподобному виду. Оказывается что константы α и β равны $\frac{1}{Z}$ и $\frac{1}{Z^2}$ соответственно, а уравнение принимает вид:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi = [-\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r} + \frac{(\vec{F} \cdot \vec{r})}{Z^3}\cos(\frac{\omega}{Z^2}t)]\psi \quad (42)$$

В результате приходим к выводу, что для того чтобы результаты расчетов не изменился, параметры следует изменить следующим образом:

$$r \rightarrow \frac{r_H}{Z}, \quad F \rightarrow F_H Z^3, \quad \omega \rightarrow \omega_H Z^2. \quad (43)$$

Соответственно с теми же параметрами будем проводить расчет уравнения Дирака и вероятности ионизации в релятивистском случае.

8 Результаты для ионов

В данном пункте будут приведены результаты для ионов Ar^{17+} , Sn^{49+} и U^{91+}

8.1 Результат для Ar^{17+}

Энергии связанных состояний находятся так же в результате диагонализации Гамильтониана. В результате они получаются следующими:

Энергетическое состояние Энергия из численного расчета

$1s_{\frac{1}{2}}$	-162.704540905
$2s_{\frac{1}{2}}$	-40.7203637115
$2p_{\frac{1}{2}}$	-40.7203235899
$2p_{\frac{3}{2}}$	-40.5437672098

Так же проследив за вектором основного состояния при воздействии на ион сильным лазерным полем получим вероятность ионизации в конце процесса. среднеквадратичный радиус ядра иона аргона $r_0 \approx 3,4085$ [7]. Здесь же приведем результат для нерелятивистского расчета.

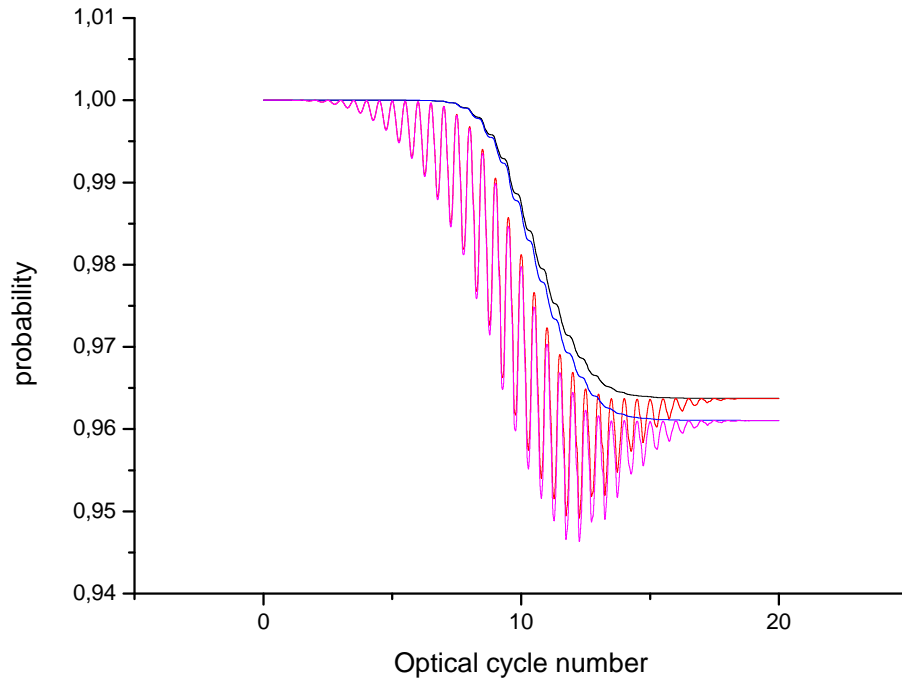


Рис. 3: Сравнение Релятивистских и нерелятивистских результатов для иона аргона

Здесь уже видна достаточно сильная разница. Если для нерелятивистского уравнения результат расчета вероятности ионизации не изменился, то для релятивистского случая вероятность ионизации оказывается немного меньше, порядка 3,6%.

8.2 Результат для Sn^{49+}

Среднеквадратичный радиус ядра иона олова $r_0 \approx 4,6413$ [7]. Расчет энергий связанных состояний :

Энергетическое состояние Энергия из численного расчета

$1s_{\frac{1}{2}}$	-1294.553976505
$2s_{\frac{1}{2}}$	-326.494528802
$2p_{\frac{1}{2}}$	-326.484643347
$2p_{\frac{3}{2}}$	-315.144354810

Эти результаты различаются еще больше. В случае использования релятивистского уравнения вероятность ионизации около 2,2%

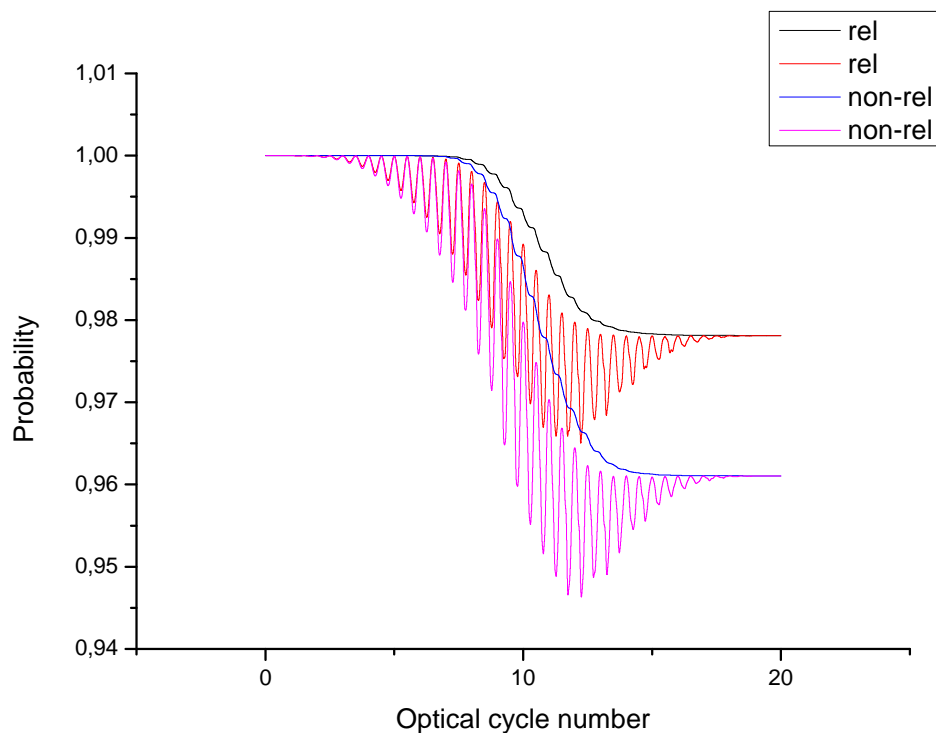


Рис. 4: Сравнение Релятивистских и нерелятивистских результатов для иона олова

8.3 Результат для U^{91+}

Среднеквадратичный радиус ядра иона урана $r_0 \approx 5.8507$ [7]. Энергии связанных состояний:

Энергетическое состояние	Энергия из численного расчета
$1s_{\frac{1}{2}}$	-4853.905137116
$2s_{\frac{1}{2}}$	-1257.233865106
$2p_{\frac{1}{2}}$	-1256.010507460
$2p_{\frac{3}{2}}$	-1089.611415253

Зависимость заселенности основного состояния и квадрата нормы имеет следующий вид:

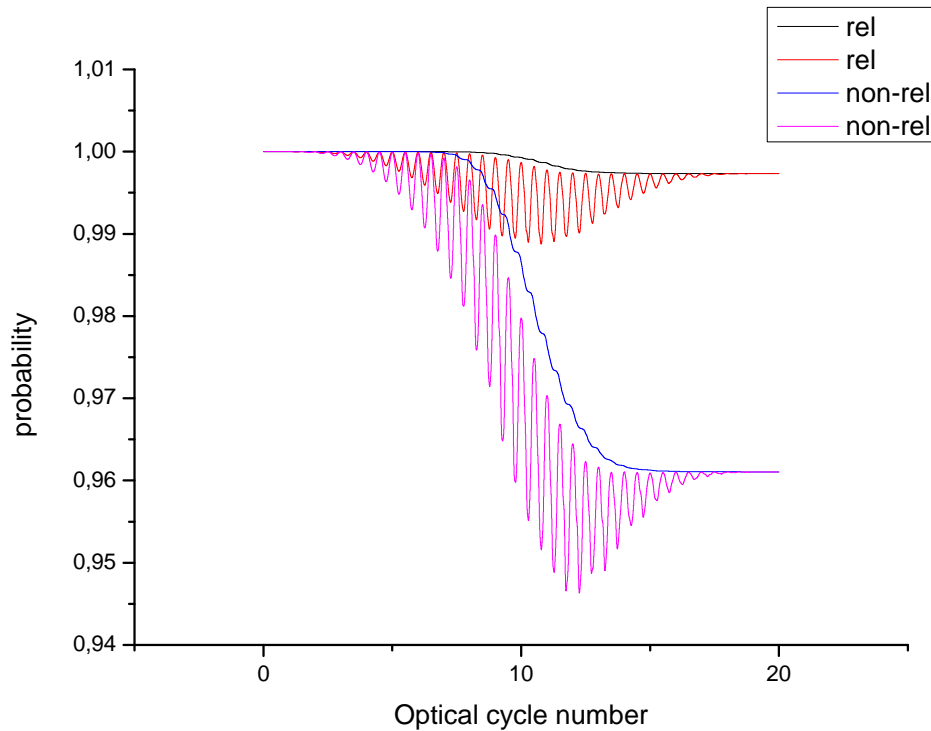


Рис. 5: Сравнение Релятивистских и нерелятивистских результатов для иона урана

Вероятность ионизации получается порядка 0,3%.

9 Заключение

В заключении отметим, что такое расхождение для вероятности ионизации у различных ионов связано с тем, что уровни энергии связанных состояний в релятивистском случае располагаются глубже по шкале энергии, чем уровни энергии из нерелятивистского уравнения Шредингера. В данной работе взаимодействие многозарядных ионов с лазерным полем описывалось в электрическом дипольном приближении. Для электромагнитного излучения с очень короткой длиной волны применимость этого приближения может нарушаться. Поэтому в дальнейших расчетах следует выйти за рамки дипольного приближения, учитывая следующие члены мультипольного разложения. Так же, могут представлять интерес эффекты рождения электрон-позитронных пар. Это связано с тем, что, при больших интенсивностях лазерных полей и при достаточно больших зарядах ядер уровни дискретного спектра многозарядного иона, в частности, энергия его основного состояния, могут опускаться близко к границе нижнего континуума. Тогда под действием лазерного поля с заметной вероятностью могут происходить переходы из нижнего континуума на эти уровни энергии, что интерпретируется как рождение электрон-позитронной пары.

Список литературы

- [1] A. Di Piazza, C. Müller, K. Z. Hatsagortsyan, and C. H. Keitel, *Rev. Mod. Phys.* 84, 1177 (2012)
- [2] *Handbook of Mathematical Functions*, edited by M. Abramowitz and I. Stegun (Dover, New York, 1965).
- [3] D. A. Telnov and S. I. Chu, *Phys. Rev. A* 71, 013408 (2005).
- [4] D. A. Telnov and S. I. Chu, *J. Phys. B* 37, 1489 (2004).
- [5] Dmitry A. Telnov and Shih-I Chu *Phys. Rev. A* 76, 043412 (2007)
- [6] Е.М Лифшиц и Л.Д. Ландау, Том IV Квантовая электродинамика.М.,1989. С. 160-167.
- [7] I. Angeli *Atomic Data and Nuclear Data Tables* 87 (2004) 185–206