Калибровочно-эквивалентные формы уравнения Шрёдингера для водородоподобного атома в нестационарном электрическом поле

Ю. В. ПОПОВ
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
e-mail: popov@srd.sinp.msu.ru

К. А. КУЗАКОВ
Московский государственный университет им. М. В. Ломоносова
e-mail: kouzakov@srd.sinp.msu.ru

УДК 517.912

Ключевые слова: нестационарное уравнение Шрёдингера, калибровочно-эквивалентные формы, унитарные преобразования, ряды теории возмущений, разложение Магнуса.

Аннотация

Представлены некоторые (в том числе и новые) калибровочно-эквивалентные формы временно́го уравнения Шрёдингера для водородоподобного атома в нестационарном электрическом поле лазерного импульса. Они позволяют развить теорию возмущений как для слабых, так и для достаточно сильных интенсивностей электромагнитного поля.

Abstract

Yu. V. Popov, K. A. Kouzakov, Gage-equivalent forms of the Schrödinger equation for a hydrogenlike atom in a nonstationary electric field, Fundamentalnaya i prikladnaya matematika, vol. 13 (2007), no. 1, pp. 189—197.

Some gage-equivalent forms (including the new ones) of the time-dependent Schrödinger equation for a hydrogenlike atom in a nonstationary electric field of a laser pulse are presented. These forms allow one to develop a perturbation theory for both small and rather large intensities of the electromagnetic field.

1. Введение

Изучение взаимодействия электромагнитного поля с веществом — важнейшая и старейшая тема как классической, так и квантовой физики. Она имеет множество ответвлений, одним из которых является взаимодействие сильного импульсного лазерного поля с атомами и молекулами. Под «сильным» здесь

Фундаментальная и прикладная математика, 2007, том 13, № 1, с. 189—197.

понимается поле, сравнимое с электрическим полем в атоме, удерживающим электроны вокруг ядра. Сильное поле может приводить к интенсивной однократной и многократной ионизации атома или молекулы. Изучая угловые и энергетические распределения этих электронов, физики рассчитывают получить информацию о структуре квантового объекта и тонких механизмах ионизации (отрыва электрона от атома).

Становление теории таких процессов связывают с пионерскими работами Л. В. Келдыша [2] и его последователей. С тех пор появилось множество работ, где анализировались плюсы и минусы этой теории, исследовались её рамки, предлагались улучшающие коррекции. Одно поверхностное их перечисление заняло бы половину объёма журнала, поэтому мы отметим только несколько недавних обзоров [1, 3, 6, 8, 10, 11], где можно видеть пути развития данной науки. Теоретическое и математическое содержание большинства работ последних лет, однако, сместилось в сторону развития численных схем решения базовых уравнений, что связано с интенсивным ростом вычислительных возможностей современных ЭВМ.

Несмотря на значительный прогресс такого подхода в понимании процессов, происходящих в квантовом объекте под действием интенсивного электрического лазерного импульса, аналитические модели остаются чрезвычайно актуальными, поскольку имеют предсказательную силу. Точное решение поставленной задачи известно для очень небольшого круга локальных потенциалов, в частности для потенциала осциллятора (см., например, [4, 5]) $V(r) = 1/2\,\omega^2 r^2$. Однако в этом поле нет состояний ионизации. Для простейшего актуального случая атома водорода уже приходится рассматривать различные приближения, математическая корректность которых не всегда ясна.

В этой связи на помощь часто приходит свойство калибровочной инвариантности электромагнитного поля, которое, в свою очередь, позволяет получать различные эквивалентные формы уравнения Шрёдингера, связанные между собой унитарными преобразованиями, которые, как известно, ведут к инвариантности физических величин, задаваемых квадратичными формами волновой функции. Напомним, что уравнения Максвелла для электромагнитного поля можно записать в терминах скалярного $U(\vec{r}, t)$ и векторного $\vec{A}(\vec{r}, t)$ потенциалов. Эти потенциалы вполне однозначно определяют наблюдаемые характеристики электромагнитного поля: напряжённости электрического $\vec{E}$ и магнитного $\vec{H}$ полей. При этом сами потенциалы определены неоднозначно. Например, два набора потенциалов $(\vec{A}', U')$ и $(\vec{A}, U)$, где

$$\vec{A}' = \vec{A} + \vec{\nabla} f; \quad U' = U - \frac{1}{c}\frac{\partial f}{\partial t},$$

дают одни и те же напряжённости электрического и магнитного полей для произвольной функции $f(\vec{r}, t)$.

Формы уравнения Шрёдингера при использовании различных калибровочных преобразований электромагнитного поля и некоторые полезные следствия составляют содержание данной работы. В работе используются атомные единицы ($e = m_e = \hbar = 1$). В этих единицах скорость света c равна примерно 137.

2. Координатное представление

Прежде всего следует заметить, что по определению напряжённость поля связана с его потенциалами следующим образом:

$$\vec{E}(\vec{r},t) = -\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\vec{A}(\vec{r},t) - \vec{\nabla}U(\vec{r},t). \tag{1}$$

В так называемой кулоновской калибровке полагается

$$\operatorname{div}\vec{A} = 0.$$

В простейшем исследовании делается физическое предположение о слабой зависимости скалярного потенциала поля от координаты в пределах атомных размеров, т. е.

$$U(\vec{r},t) \simeq U(0,t),$$

которое позволяет пренебречь его градиентом в (1). Это приводит к известному дипольному приближению

$$\vec{A}(\vec{r},t) \simeq \vec{A}(0,t) = \vec{A}(t).$$

Полагая $\vec{A}(t) = \vec{e}A(t)$, получаем линейно поляризованный лазерный луч, где $\vec{e}$ есть единичный вектор поляризации. При этом условие отсутствия поля вне временных рамок действия лазерного импульса принимает вид

$$A(t \leqslant 0) = A(t \geqslant T) = 0.$$

Рассмотрим теперь нестационарное уравнение Шрёдингера, которое описывает взаимодействие электрического импульса продолжительностью от 0 до T с водородоподобным атомом:

$$\left[i\frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{2}\left(-i\vec{\nabla} + \frac{1}{c}\vec{e}A(t)\right)^2 + \frac{Z}{r}\right]\Psi(\vec{r},t) = 0, \quad \Psi(\vec{r},0) = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi}}e^{-Zr}, \tag{2}$$

где Z обозначает заряд атома. Начальное состояние задачи позволяет заключить, что в любой момент времени t мы имеем дело с квадратично интегрируемым волновым пакетом. Более того, должно выполняться условие нормировки

$$\int d\vec{r}\,|\Psi(\vec{r},t)|^2 = 1, \tag{3}$$

физический смысл которого — сохранение полной вероятности всех событий в системе.

Известное унитарное преобразование

$$\Psi(\vec{r},t) = \exp\left[-i\frac{1}{c}A(t)(\vec{e}\,\vec{r})\right]\Phi_L(\vec{r},t)$$

приводит к следующей форме уравнения Шрёдингера:

$$\left[i\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2}\Delta - \vec{E}(t)\vec{r} + \frac{Z}{r}\right]\Phi_L(\vec{r},t) = 0, \quad \Phi_L(\vec{r},0) = \Psi(\vec{r},0). \tag{4}$$

Здесь $\vec{E}(t) = -\vec{e}\,\partial A(t)/c\,\partial t$. Под $\Phi_L(\vec{r},t)$ понимается так называемое представление длины уравнения Шрёдингера. Иногда полагают, что $\Psi(\vec{r},t) = \Phi_V(\vec{r},t)$ — так называемое представление скорости. Обычно от хорошего численного алгоритма требуют совпадения (в пределах погрешности) выражений вычисленных наблюдаемых величин (вероятностей заселения уровней, угловых и энергетических распределений ионизованных электронов и т. п.) в представлениях длины и скорости. В точной теории они должны быть одинаковы.

Менее известно унитарное преобразование Хеннебергера—Крамерса с использованием унитарного оператора сдвига координаты [7]

$$\Psi(\vec{r},t) = \exp\left(b(t)(\vec{e}\,\vec{\nabla}) - \frac{i}{2c^2}\int\limits_0^t A^2(\tau)\,d\tau\right)\Phi_{HK}(\vec{r},t); \quad b(t) = -\frac{1}{c}\int\limits_0^t A(\tau)\,d\tau. \tag{5}$$

Подставляя (5) в (2) и полагая для удобства $b(t) = Af(t)$, где $|f(t)| \leqslant 1$ и $f(t \leqslant 0) = f(t \geqslant T) = 0$, мы получаем

$$\left[i\frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{2}\Delta + \frac{Z}{|\vec{r} - \vec{e}Af(t)|}\right]\Phi_{HK}(\vec{r},t) = 0; \quad \Phi_{HK}(\vec{r},0) = \Psi(\vec{r},0). \tag{6}$$

Отметим, что в каждый момент времени t волновой пакет нормирован на единицу:

$$\int d\vec{r}\,|\Phi_{HK}(\vec{r},t)|^2 = 1.$$

Выполнив масштабные преобразования

$$t = A\tau, \quad \vec{r} = A\vec{x}, \quad \Phi_{HK}(\vec{r},t) = A^{-3/2}\phi(\vec{x},\tau),$$

находим, что

$$\left[iA\frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{1}{2}\Delta_x + \frac{AZ}{|\vec{x} - \vec{e}f(A\tau)|}\right]\phi(\vec{x},\tau) = 0. \tag{7}$$

Положим

$$\phi(\vec{x},\tau) = Ne^{-AS(\vec{x},\tau)}, \tag{8}$$

где $\mathrm{Re}(S) > 0$, если $x \to \infty$. Из (8) следует, что

$$\left[i\frac{\partial S}{\partial \tau} - \frac{1}{2}(\vec{\nabla}_x S)^2\right] + \frac{1}{A}\left[\frac{1}{2}\Delta_x S - \frac{Z}{|\vec{x} - \vec{e}f(A\tau)|}\right] = 0. \tag{9}$$

В отсутствие внешнего электрического поля $f(t) = 0$ и

$$S_0(\vec{x},\tau) = Zx - \frac{i}{2}Z^2\tau.$$

Эта функция удовлетворяет не только (9), но также уравнению

$$\left[i\frac{\partial S_0}{\partial\tau} - \frac{1}{2}(\vec{\nabla}_x S_0)^2\right] = 0.$$

Данный факт позволяет использовать ряд теории возмущений, если $A \gg 1$:

$$S(\vec{x},\tau) = \sum_{n=0}\left(\frac{1}{A}\right)^n S_n(\vec{x},\tau). \tag{10}$$

Например, член S_1 удовлетворяет линейному неоднородному уравнению в частных производных

$$i\frac{\partial S_1}{\partial\tau} - \left(\frac{\vec{x}}{x}\vec{\nabla}_x\right)S_1 + \left[\frac{Z}{x} - \frac{Z}{|\vec{x} - \vec{e}f(A\tau)|}\right] = 0, \tag{11}$$

частное решение которого имеет вид

$$S_1(\vec{x},\tau) = i\int\limits_0^\tau d\xi\left[\frac{Z}{i\xi + C} - \frac{Z}{|(i\xi + C)\vec{x}/x - \vec{e}f(A\xi)|}\right]. \tag{12}$$

В формуле (12) $C = x - i\tau$ — интеграл движения уравнения (11), причём

$$\left|(i\xi + C)\frac{\vec{x}}{x} - \vec{e}f(A\xi)\right| = \sqrt{(i\xi + C)^2 + f^2(A\xi) - 2\frac{(\vec{x}\vec{e})}{x}(i\xi + C)f(A\xi)}.$$

После завершения лазерного импульса ($t \geqslant T$)

$$S_1(\vec{x},\tau) = i\int\limits_0^{T/A} d\xi\left[\frac{Z}{i\xi + C} - \frac{Z}{|(i\xi + C)\vec{x}/x - \vec{e}f(A\xi)|}\right]. \tag{13}$$

Для слагаемого S_2 получаем согласно (9) и (10) уравнение

$$\left[i\frac{\partial S_2}{\partial\tau} - \left(\frac{\vec{x}}{x}\vec{\nabla}_x\right)S_2\right] + \frac{1}{2}[\Delta_x S_1 - (\vec{\nabla}_x S_1)^2] = 0. \tag{14}$$

Его решение имеет вид

$$S_2(\vec{x},\tau) = \frac{i}{2}\int\limits_0^\tau d\eta\,[\Delta_x S_1 - (\vec{\nabla}_x S_1)^2]. \tag{15}$$

Чтобы подействовать в (15) операторами градиента и Лапласа на функцию $S_1(\vec{x},\eta)$, необходимо сначала положить в (12) $C = x - i\tau$, затем выполнить эти дифференциальные операции, после чего сделать обратную замену $\vec{x} = (i\eta + C)\vec{x}/x$.

В (13) и (15) можно перейти назад к переменным $(\vec{r},t)$ и убедиться, что показатель экспоненты в (8) не зависит явно от A, что является признаком квазиклассического приближения.

Для оценки величины A рассмотрим часто используемый в расчётах частный случай формы лазерного импульса

$$A(t) = \begin{cases} A_0 \sin^2(\frac{\pi t}{T}) \sin(\omega t + \varphi) & (0 \leqslant t \leqslant T), \\ A(t) = 0 & (t \geqslant T); \end{cases} \qquad \frac{A_0}{c} = \frac{1}{\omega}\sqrt{\frac{I}{I_0}}. \tag{16}$$

В (16) $I_0 = 3{,}5 \times 10^{16}$ *ватт/см*^{2} — единица интенсивности внутриатомного поля, $\omega = 0{,}056$ (основная частота титан-сапфирового лазера), $T \approx 2\pi n/\omega$ и n — количество циклов в импульсе. Фаза φ должна выбираться из условия $b(T) = 0$. Полагая $n = 10$ и $I \sim 10^{14}$ *ватт/см*^{2}, получаем оценку $A \sim 20$, или $1/A \sim 0{,}05$, что позволяет ожидать хорошую сходимость ряда (10) в случае достаточно интенсивного поля небольшой несущей частоты. В этой области получены экспериментальные данные, позволяющие проверить справедливость полученного разложения по обратным степеням интенсивности поля.

3. Импульсное представление

Уравнение Шрёдингера для рассматриваемой проблемы в импульсном пространстве следует из (2) и имеет вид

$$\left[i\frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{2}\left(\vec{p} + \frac{1}{c}A(t)\vec{e}\right)^2\right]\tilde{\Psi}(\vec{p},t) + \int \frac{d^3p'}{(2\pi)^3}\frac{4\pi Z}{|\vec{p}-\vec{p}\,'|^2}\tilde{\Psi}(\vec{p}\,',t) = 0; \tag{17}$$
$$\tilde{\Psi}(\vec{p},0) = \frac{8\sqrt{\pi Z^5}}{(p^2+Z^2)^2}.$$

В уравнении (17) функция $\tilde{\Psi}(\vec{p},t)$ обозначает Фурье-образ функции $\Psi(\vec{r},t)$. Унитарное преобразование

$$\tilde{\varphi}(\vec{p},t) = e^{i\frac{t}{2}p^2 - ib(t)(\vec{e}\,\vec{p}) + i\frac{1}{2}\int\limits_0^t d\tau (b'(\tau))^2}\tilde{\Psi}(\vec{p},t) \tag{18}$$

приводит к уравнению

$$i\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\varphi}(\vec{p},t) + \frac{Z}{2\pi^2}\int \frac{d^3x}{x^2}e^{-i\frac{t}{2}x^2 + i(\vec{p}t - \vec{e}\,b(t))\vec{x}}\tilde{\varphi}(\vec{p}-\vec{x},t) = 0. \tag{19}$$

Аналогичное уравнение можно получить в координатном пространстве, если выполнить преобразование Фурье:

$$\tilde{\varphi}(\vec{p},t) = \int d^3r e^{-i\vec{p}\,\vec{r}}\varphi(\vec{r},t).$$

В этом случае получаем из (19)

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi(\vec{r},t) + \frac{Z}{2\pi^2}\int \frac{d^3x}{x^2}e^{i\frac{t}{2}x^2 + i(\vec{r} - \vec{e}\,b(t))\vec{x}}\varphi(\vec{r} + \vec{x}\,t, t) = 0. \tag{20}$$

С использованием оператора сдвига уравнение (19) может быть переписано в виде

$$i\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\varphi}(\vec{p},t) + \frac{Z}{2\pi^2}\int \frac{d^3x}{x^2} e^{-i\frac{t}{2}x^2 + i(\vec{p}\,t - \vec{e}\,b(t))\vec{x}} e^{-\vec{x}\,\vec{\nabla}_p}\tilde{\varphi}(\vec{p},t) = 0. \tag{21}$$

Операторное тождество Вейля приводит к следующему результату:

$$e^{i\vec{p}\,\vec{x}t} e^{-\vec{x}\,\vec{\nabla}_p} \equiv e^{i\frac{t}{2}x^2} e^{i\vec{x}(\vec{p}\,t + i\vec{\nabla}_p)},$$

что позволяет из (21) получить уравнение

$$i\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\varphi}(\vec{p},t) + \frac{Z}{2\pi^2}\int \frac{d^3x}{x^2} e^{i\vec{x}\,\vec{\mathcal{H}}}\tilde{\varphi}(\vec{p},t) = 0. \tag{22}$$

Здесь $\vec{\mathcal{H}} = \vec{p}\,t - \vec{e}\,b(t) + i\vec{\nabla}_p$. Проинтегрировав по $\vec{x}$, представление (22) можно записать в более компактной операторной форме:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\tilde{\varphi}(\vec{p},t) + \frac{Z}{|\vec{p}\,t - \vec{e}\,b(t) + i\vec{\nabla}_p|}\tilde{\varphi}(\vec{p},t) = 0; \quad \tilde{\varphi}(\vec{p},0) = \tilde{\Psi}(\vec{p},0). \tag{23}$$

Схожее уравнение может быть получено и для $\varphi(\vec{r},t)$:

$$i\frac{\partial}{\partial t}\varphi(\vec{r},t) + \frac{Z}{|\vec{r} - \vec{e}\,b(t) - it\vec{\nabla}_r|}\varphi(\vec{r},t) = 0; \quad \varphi(\vec{r},0) = \Psi(\vec{r},0). \tag{24}$$

Собственными функциями оператора $\vec{\mathcal{H}}$ являются состояния Волкова [12]

$$\chi(\vec{p},t) = e^{i\frac{t}{2}p^2 - ib(t)(\vec{e}\,\vec{p}) - i\vec{p}\,\vec{r}},$$

т. е. $f(\vec{\mathcal{H}})\chi = f(\vec{r}\,)\chi$. Раскладывая функцию $\tilde{\varphi}(\vec{p},t)$ по базису состояний Волкова, опять получаем (17).

Таким образом, мы приходим к операторному уравнению

$$\frac{\partial \mathcal{S}(t)}{\partial t} = iZ\mathcal{A}(t)\mathcal{S}(t), \quad \mathcal{S}(0) = I, \quad \tilde{\varphi}(\vec{p},t) = \mathcal{S}(t)\tilde{\varphi}(\vec{p},0). \tag{25}$$

Формальное его решение может быть представлено, например, в форме экспоненциального разложения Магнуса [9]

$$\mathcal{S}(t) = \exp\left(iZ\int_0^t d\tau\,\mathcal{A}(\tau)\right) = \exp\left(\sum_{n=1}^{\infty} B_n\right), \tag{26}$$

где

$$B_1 = iZ \int_0^t d\tau\, \mathcal{A}(\tau),$$

$$B_2 = -\frac{Z^2}{2!} \int_0^t d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2\, [\mathcal{A}(\tau_1), \mathcal{A}(\tau_2)],$$

$$B_3 = -\frac{iZ^3}{3!} \int_0^t d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \int_0^{\tau_2} d\tau_3 \{[\mathcal{A}(\tau_1), [\mathcal{A}(\tau_2), \mathcal{A}(\tau_3)]] + [[\mathcal{A}(\tau_1), \mathcal{A}(\tau_2)], \mathcal{A}(\tau_3)]\}$$

и т. д., что приводит к необходимости вычислений коммутаторов оператора

$$\mathcal{A}(t) = \frac{1}{|\vec{p}\,t - \vec{e}\,b(t) + i\vec{\nabla}_p|} \tag{27}$$

в различные моменты времени t.

Несмотря на эстетическую привлекательность и симметрию уравнений (23) и (24) в координатах $(\vec{r}, \vec{p})$, его можно попытаться использовать лишь в рамках теории возмущений по обратным степеням параметра A (6). Точные решения уравнения (25) можно получить, если оператор $\mathcal{A}(t)$ выражается конечной линейной комбинацией генераторов конечной алгебры Ли с коэффициентами, зависящими от времени. Что же касается решения в виде разложений Магнуса (26), то его практическое использование представляется не слишком эффективным в силу совершенно неочевидной интерпретации результата действия операторов B_i на функцию начального состояния.

В заключение авторы выражают благодарность профессорам А. В. Михалёву и В. Ф. Бутузову за полезные обсуждения и замечания.

Литература

[1] Делоне Н. Б., Крайнов В. П. Туннельная и надбарьерная ионизация атомов и ионов в поле лазерного излучения // УФН. — 1998. — Т. 168, вып. 5. — С. 531—549.

[2] Келдыш Л. В. Ионизация в поле сильной электромагнитной волны // ЖЭТФ. — 1964. — Т. 47, вып. 5. — С. 1945—1957.

[3] Попов В. С. Туннельная и многофотонная ионизация атомов и ионов в сильном лазерном поле (теория Келдыша) // УФН. — 2004. — Т. 174, вып. 9. — С. 921—951.

[4] Došlić N., Danko Bosonac S. Harmonic oscillator with the radiation reaction interaction // Phys. Rev. A. — 1995. — Vol. 51, no. 5. — P. 3485—3494.

[5] Efthimiou C. J., Spector D. Separation of variables and exactly soluble time-dependent potentials in quantum mechanics // Phys. Rev. A. — 1994. — Vol. 49, no. 4. — P. 2301—2311.

[6] Gavrila M. Atomic stabilization in superintense laser fields // J. Phys. B. — 2002. — Vol. 35, no. 18. — P. R147—R193.

[7] Henneberger W. C. Perturbation method for atoms in intense light beams // Phys. Rev. Lett. — 1968. — Vol. 21, no. 12. — P. 838—841.

[8] Lambropoulos P., Maragakis P., Zhang J. Two-electron atoms in strong fields // Phys. Rep. — 1998. — Vol. 305, no. 5. — P. 203—293.

[9] Magnus W. On the exponential solution of differential equations for a linear operator // Comm. Pure Appl. Math. — 1954. — Vol. 7. — P. 649—673.

[10] Popov A. M., Tikhonova O. V., Volkova E. A. Strong-field atomic stabilization: numerical simulation and analytical modelling // J. Phys. B. — 2003. — Vol. 36, no. 10. — P. R125—R165.

[11] Scrinzi A., Ivanov M. Yu., Kienberger R., Villeneuve D. M. Attosecond physics // J. Phys. B. — 2006 — Vol. 39, no. 1. — P. R1—R37.

[12] Wolkow D. M. Über eine Klasse von Lösungen der Diracschen Gleichung // Z. Phys. — 1935. — Vol. 94, nos. 3—4. — P. 250—260.