

Моделирование многофотонной ионизации атомов и молекул методом интегралов по траекториям

А.А. Бирюков¹, Я.В. Дегтярева¹, М.А. Шлеенков¹

¹Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева, Московское шоссе 34А, Самара, Россия, 443086

Аннотация. Вероятность квантовых переходов молекулы между ее состояниями под действием электромагнитного поля представляется как интеграл по траекториям от действительного знакопеременного функционала. Предложен метод вычисления интеграла с использованием рекуррентных соотношений. Метод прилагается для описания процессов многофотонных атомов и молекул.

1. Введение

В настоящее время активно изучаются нелинейные процессы взаимодействия микросистем с лазерным излучением различной конфигурации и различной степени интенсивности (возбуждение и диссоциация молекул, ионизация атомов под действием лазерного излучения и др.). Представляется актуальным исследовать вероятности переходов в многоуровневых квантовых системах вне рамок теории возмущений и приближений, которые накладывают ограничения на структуру лазерного излучения – как по интенсивности, так и по форме импульсов. С этой целью развивается теория представления вероятностей квантовых переходов интегралами по траекториям от действительного знакопеременного функционала в энергетическом представлении [1-3]. Данный подход позволяет рассмотреть процессы многофотонной ионизации атомов и молекул.

2. Описание метода

В работах [2-3] доказано, что вероятность $P(n_f, t_f | n_{in}, 0)$ квантового перехода системы из квантового состояния $|n_{in}\rangle$ в момент времени $t = 0$ в состояние $|n_f\rangle$ за интервал времени $(t_f - t_0)$ под действием электромагнитного поля с частотой Ω может быть представлена в виде функционального интеграла с действительным подынтегральным функционалом в энергетическом представлении:

$$P(n_f, t_f | n_{in}, t_0) = A \delta_{n_{K+1}, m_{K+1}} \delta_{n_{in}, m_{in}} \prod_{k=1}^K R_k \cos \left(\sum_{k=1}^{K+1} \Delta S(n_k, m_k, n_{k-1}, m_{k-1}, \xi_{k-1}, \zeta_{k-1}) \right), \quad (1)$$

где

$$R_k = \sum_{n_k = 1}^N \sum_{m_k = 1}^{N-1} \int d\xi_k \int d\zeta_k, \quad k = 1, 2, \dots$$

$$\Delta S(n_k, m_k, n_{k-1}, m_{k-1}, \xi_{k-1}, \zeta_{k-1}) = S(n_k, n_{k-1}, \xi_{k-1}) - S(m_k, m_{k-1}, \zeta_{k-1}),$$

$$S(n_k, n_{k-1}, \xi_k) = 2\pi(n_k, n_{k-1}, \xi_{k-1}) + \Omega_{n_k, n_{k-1}}^R \cos[2\pi(n_k - n_{k-1})\xi_{k-1} - (\Omega - \omega)t_{k-1}] \Delta t$$

- действие для изучаемого перехода в энергетическом представлении, n_i, m_i - квантовые числа, характеризующие состояние системы, A - константа, сохраняющая нормировочное условие $\sum_{n_f} P(n_f, t_f | n_{in}, 0) = 1$, $\Omega_{n_k n_{k-1}}^R$ — частота Раби, $\omega_{n_k n_{k-1}}$ — частота перехода между состояниями $|n_k\rangle, |n_{k-1}\rangle$, $t_{k-1} = (k-1)\Delta t$.

Численное вычисление вероятностей по формуле (1) дает хорошие результаты для малых интервалов времени $(t_f - t_0)$, однако приводит к большим ошибкам для больших интервалов $(t_f - t_0)$. В работе предлагается метод, позволяющий вычислять вероятности квантовых переходов формулой (1) за любой интервал времени, используя метод рекуррентных представлений.

Введем функции

$$P_{\cos}(n_K, m_K, t; n_{in}, m_{in}, t_0) = \prod_{k=1}^{K-1} R_k \cos \left[\sum_{k=1}^K \Delta S(n_k, m_k, n_{k-1}, m_{k-1}, \xi_{k-1}, \zeta_{k-1}) \right],$$

$$P_{\sin}(n_K, m_K, t; n_{in}, m_{in}, t_0) = \prod_{k=1}^{K-1} R_k \sin \left[\sum_{k=1}^K \Delta S(n_k, m_k, n_{k-1}, m_{k-1}, \xi_{k-1}, \zeta_{k-1}) \right].$$

Тогда вероятность квантового перехода будет вычисляться по формуле

$$P(n_f, t_f; n_{in}, t_0) = A \delta_{n_K = n_f, m_f} \delta_{n_{in} m_{in}} P_{\cos}(n_f, m_f, t; n_{in}, m_{in}, t_0).$$

Программа численного вычисления интеграла (1) базируется на рекуррентных соотношениях для вспомогательных функций вероятностей \bar{P}_{\cos} , \bar{P}_{\sin} :

$$P_{\cos}(n_k, m_k, t; n_{in}, t_0) = R_{k-1} \{ \cos[\Delta S(n_k, m_k, n_{k-1}, m_{k-1}, \xi_{k-1}, \zeta_{k-1})] \times P_{\cos}(n_{k-1}, m_{k-1}, t_{k-1}; n_{in}, t_0) \} - R_{k-1} \{ \sin[\Delta S(n_k, m_k, n_{k-1}, m_{k-1}, \xi_{k-1}, \zeta_{k-1})] P_{\sin}(n_{k-1}, m_{k-1}, t_{k-1}; n_{in}, t_0) \};$$

и

$$P_{\sin}(n_{k-1}, m_{k-1}, t_{k-1}; n_{in}, t_0) = R_{k-2} \{ \sin[\Delta S(n_{k-1}, m_{k-1}, n_{k-2}, m_{k-2}, \xi_{k-2}, \zeta_{k-2})] \times P_{\cos}(n_{k-2}, m_{k-2}, t_{k-2}; n_{in}, t_0) \} + R_{k-2} \{ \cos[\Delta S(n_{k-1}, m_{k-1}, n_{k-2}, m_{k-2}, \xi_{k-2}, \zeta_{k-2})] P_{\sin}(n_{k-2}, m_{k-2}, t_{k-2}; n_{in}, t_0) \}.$$

Определяя функции $P_{\cos}(n_k, m_k, t; n_{in}, t_0)$ и $P_{\sin}(n_k, m_k, t; n_{in}, t_0)$ на основании начальных условий, мы находим вероятность квантового перехода из состояния $|n_{in}\rangle$ в момент времени $t = t_0$ в состояние $|n_k\rangle$ в момент времени $t_k > t_0$.

Данный метод позволяет успешно вычислять вероятности квантовых переходов электронов в атомах и молекулах из основного квантового связанного состояния в свободное состояние при воздействии любого электромагнитного излучения как по структуре, так и по интенсивности, то есть вычислять вероятности ионизации.

3. Литература

- [1] Ryazanov, G.V. Quantum-mechanical probability as a sum over path / G.V. Ryazanov // JETP. – 1958. – Vol. 35(1). – P. 121-131.
- [2] Бирюков, А.А. Вычисление вероятностей переходов квантовой системы путем интегрирования вещественных функционалов / А.А. Бирюков, М.А. Шлеенков // Теоретическая физика. – 2012. – Т. 13. – С. 8-42.
- [3] Бирюков, А. А. Представление вероятностей квантовых переходов функциональным интегралом в пространстве энергетических состояний / А.А. Бирюков, М.А. Шлеенков // Вестник Самарского государственного технического университета. Сер. Физ.-мат. науки. – 2015. – Т. 19, № 2. – С. 221-240.

Modeling of multiphoton ionization of atoms and molecules by the path integral method

A.A. Biryukov¹, Ya.V. Degtyareva¹, M.A. Shleenkov¹

¹Samara National Research University, Moskovskoe Shosse 34A, Samara, Russia, 443086

Abstract. The probability of quantum transitions of a molecule between its states under the action of an electromagnetic field is represented as an integral over trajectories from a real alternating functional. A method is proposed for computing the integral using recurrence relations. The method is applied to describe the processes of multiphoton atoms and molecules.

Keywords: numerical simulation, multiphoton ionization, path integral approach.