Сборник тезисов докладов конференции и школы молодых учёных по фундаментальной атомной спектроскопии

ФАС - ХХ

www.fas.vsu.ru

23 – 27 сентября 2013 г



Воронеж

Спонсоры



РОССИЙСКИЙ ФОНД ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ





Династия Фонд Дмитрия Зимина



Воронежский государственный университет ООО «Квант»

Сборник тезисов докладов конференции и школы молодых ученых издан при поддержке:

- грантов РФФИ
 № 13-02-06118 г,
 № 13-02-06837 мол_г
- фонда некоммерческих программ «Династия»
- Воронежского государственного университета

«Воронежский государственный университет»

Физический факультет

Сборник тезисов докладов конференции и школы молодых учёных по фундаментальной атомной спектроскопии ФАС – XX

23-27 сентября 2013 г.

«Цифровая полиграфия» Воронеж 2013 УДК 535: 535.33 ББК...22: 22.344

> Редакторы: чл.-корр. РАН Виноградов Евгений Андреевич, д.ф.-м.н. Зон Борис Абрамович

Сборник тезисов докладов конференции и школы молодых ученых по фундаментальной атомной спектроскопии ФАС - XX – Воронеж: Издательство ООО «Цифровая полиграфия», 2013. – 282 с.

ISBN 978-5-906384-04-1

Материалы публикуются в точном соответствии с файламиоригиналами, предоставленными авторами в оргкомитет конференции.

> © ФГБОУ ВПО «Воронежский государственный университет», 2013 © Физический факультет ВГУ, 2013

Содержание

Оргкомитет	13
Лекции приглашенных ученых в рамках научной школы для молодых ученых	15
А.М. Шалагин, А.И. Пархоменко ХИМИЧЕСКИ ПЕКУЛЯРНЫЕ ЗВЕЗДЫ И СВЕТОИНДУЦИРОВАННЫЙ ДРЕЙФ	17
Н.В. Введенский, В.А. Костин, А.А. Силаев ЛАЗЕРНО-ПЛАЗМЕННЫЕ МЕТОДЫ ГЕНЕРАЦИИ ТЕРАГЕРЦОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ	19
И.Ю. Костюков, Е.Н. Неруш, В.Ф. Башмаков КВАНТОВО-ЭЛЕТРОДИНАМИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ, СОПРОВОЖДАЮЩИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭКСТРЕМАЛЬНО СИЛЬНЫХ ЛАЗЕРНЫХ ПОЛЕЙ С ВЕЩЕСТВОМ	22
С.В. Попруженко МЕТОД КОМПЛЕКСНЫХ КВАНТОВЫХ ТРАЕКТОРИЙ В АТОМНОЙ ФИЗИКЕ СИЛЬНЫХ ПОЛЕЙ	25
D. Kartashov, S. Haesler, A. Pugzlys, A. Baltuska, M. Spanner, S. Patchkovskii, F. Morales, M. Richter, O. Smirnova, M. Ivanov LASING WITHOUT INVERSION: UNFORSEEN CONSEQUENCES OF LASER FILAMENTATION	27
<i>Р.А. Ганеев</i> ГЕНЕРАЦИЯ ВЫСШИХ ГАРМОНИК В ЛАЗЕРНОЙ ПЛАЗМЕ	28
Е.А. Виноградов, Н.Н. Новикова, В.А. Яковлев ИК СПЕКТРОСКОПИЯ БЛИЖНЕГО ПОЛЯ ПЛЕНОК НАНОМЕТРОВОЙ ТОЛЩИНЫ	31
Д.Б. Третьяков, В.М. Энтин, Е.А. Якшина, И.И. Бетеров, И.И. Рябцев ТРЕХФОТОННАЯ ЛАЗЕРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ХОЛОДНЫХ РИДБЕРГОВСКИХ АТОМОВ Rb	34
<i>В.Г. Пальчиков</i> ОПТИЧЕСКИЕ СТАНДАРТЫ ВРЕМЕНИ И ЧАСТОТЫ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ НА ХОЛОДНЫХ АТОМАХ И ИОНАХ	37
Тезисы устных докладов	39
M.Ya. Amusia, L.V. Chernysheva, V.G. Yarzhemsky ON PHOTOIONIZATION IN HARD X-RAY REGION	41

Ю.А. Климова, С.И. Мармо, А.В. Меремьянин УГЛОВЫЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ФОТОЭЛЕКТРОНОВ ПРИ ИОНИЗАЦИИ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ АТОМОВ	44
А.Н. Грум-Гржимайло, Е.В. Грызлова, Е.И. Кузьмина, С.И.Страхова, А.С. Четверкина НЕДИПОЛЬНЫЕ ЭФФЕКТЫ В НЕЛИНЕЙНЫХ ФОТОПРОЦЕССАХ В АТОМАХ	46
<i>М.Я. Амусья, Е.Г. Друкарев, Е.Ζ. Liverts, А.И. Михайлов</i> ФИЗИКА МАЛЫХ МОМЕНТОВ ОТДАЧИ В ДВОЙНОЙ ФОТОИОНИЗАЦИИ ГЕЛИЯ	49
V.E. Chernov, D.L. Dorofeev, S.V. Elfimov, G.E. Gavrilov, A. Gottwald, M. Braune, H.Kühn, M. Krumrey, A.A. Markova, M. Richter, Yu.G. Naryshkin, A.A. Sorokin, K. Tiedtke, B.A. Zon TOWARDS X-RAY FEL GAS MONITOR DETECTOR	52
А.А. Крыловецкий, Н.Л. Манаков, С.И. Мармо КУЛОНОВСКОЕ ТОРМОЗНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ: КЛАССИЧЕСКИЙ ПРЕДЕЛ И КВАНТОВЫЕ ПОПРАВКИ	55
<i>M.Ya. Amusia</i> FULLERENES AND ENDOHEDRALS AS RESONATORS AND AMPLIFIERS	57
<i>Е.Г. Друкарев, М.Я. Амусья</i> ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ БЫСТРЫХ ФОТОЭЛЕКТРОНОВ С ФУЛЛЕРЕННОЙ ОБОЛОЧКОЙ	60
А.В. Крисилов, Б.А. Зон, И.В. Нечаев, А.Л. Котова, Е.В. Попов РОЛЬ ИНКАПСУЛИРОВАННОГО АТОМА В ФОРМИРОВАНИИ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ ЭНДОФУЛЛЕРЕНОВ МЕТАЛЛОВ M@C ₆₀	63
А.В. Масалов, В.Г. Миногин О СООТНОШЕНИИ ДЛЯ СКОРОСТИ СПОНТАННОГО ПЕРЕХОДА АТОМА ВБЛИЗИ ТЕЛ	66
<i>Н.П. Стадная, А.Ф. Клинских</i> ДИНАМИКА СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ ПЕРЕХОДОВ МЕЖДУ ЗАПУТАННЫМИ КВАНТОВЫМИ СОСТОЯНИЯМИ	68
М.В. Петренко, В.П. Белик, Р.А. Демидов, С.Г. Калмыков, А.М. Можаров, М.Э. Сасин ДИНАМИКА НАЧАЛЬНОЙ ИОНИЗАЦИИ В ЛАЗЕРНОЙ ПЛАЗМЕ ПРИ НИЗКИХ ПЛОТНОСТЯХ ГАЗОВОЙ МИШЕНИ	71

Д.А. Тельнов, К.Е. Соснова, Е.Б. Розенбаум, Shih-I Chu МЕТОД КОМПЛЕКСНОГО МАСШТАБИРОВАНИЯ КООРДИНАТ ВО ВНЕШНЕЙ ОБЛАСТИ В НЕСТАЦИОНАРНОЙ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ. МНОГОФОТОННАЯ ИОНИЗАЦИЯ И ГЕНЕРАЦИЯ ВЫСШИХ ГАРМОНИК АТОМАМИ АРГОНА В СИЛЬНОМ ЛАЗЕРНОМ ПОЛЕ.	74
<i>Н.Л. Манаков, Т.С. Саранцева, М.В. Фролов, А.F. Starace</i> АНАЛИТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ГЕНЕРАЦИИ ВЫСШИХ ГАРМОНИК ЭЛЛИПТИЧЕСКИ ПОЛЯРИЗОВАННОГО ЛАЗЕРНОГО ПОЛЯ И ЕЁ ПРИЛОЖЕНИЕ К АТОМНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ.	77
П.А. Головинский, А.А. Дробышев ИЗЛУЧЕНИЕ ТУННЕЛЬНОГО ЭЛЕКТРОНА НА ВТОРИЧНОМ ЦЕНТРЕ РЕКОМБИНАЦИИ	79
<i>М.Ю. Рябикин, М.Ю. Емелин, Л.А. Смирнов</i> ДИНАМИЧЕСКАЯ СТАБИЛИЗАЦИЯ АТОМА В СВЕРХСИЛЬНОМ ПОЛЕ ПРОИЗВОЛЬНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ: ДОЛГОВРЕМЕННАЯ ЭВОЛЮЦИЯ ЭЛЕКТРОННОГО ВОЛНОВОГО ПАКЕТА И РОЛЬ МАГНИТНОГО ПОЛЯ ЛАЗЕРНОГО ИМПУЛЬСА	82
Б.А. Зон, А.С. Корнев, Е.Б. Туленко НЕУПРУГИЙ ТУННЕЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ В АТОМАХ И МОЛЕКУЛАХ	85
<i>А.Н. Желтухин, М.В. Фролов, А.В.Флегель, Н.Л. Манаков, А.F. Starace</i> РЕЗОНАНСНОЕ ТОРМОЗНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ ЭЛЕКТРОНА НА АТОМЕ В СИЛЬНОМ ЛАЗЕРНОМ ПОЛЕ	88
<i>Е.Б. Розенбаум, В.М. Шабаев, К.Е. Соснова, Д.А. Тельнов</i> МЕТОД ДУАЛЬНОГО КИНЕТИЧЕСКОГО БАЛАНСА ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ДИРАКА В АКСИАЛЬНО-СИММЕТРИЧНОМ ПОЛЕ И ЕГО ПРИМЕНЕНИЕ ДЛЯ РАСЧЁТА ВЕРОЯТНОСТИ ИОНИЗАЦИИ ВОДОРОДОПОДОБНОГО ИОНА ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ	91
Б.А. Зон, А.С. Корнев, Е.Б. Туленко РЕЛЯТИВИСТСКИЕ ЭФФЕКТЫ В МНОГОЧАСТИЧНОЙ ТЕОРИИ ОБРАЗОВАНИЯ ИОНОВ РЕКОРДНОЙ КРАТНОСТИ В СВЕРХСИЛЬНОМ ЛАЗЕРНОМ ПОЛЕ	94
В.А. Антонов, Е.В. Радионычев, М.Ю. Емелин, М.Ю. Рябикин, О.А. Кочаровская ПРИНЦИПЫ ФОРМИРОВАНИЯ ЭКСТРЕМАЛЬНО КОРОТКИХ ИМПУЛЬСОВ ИЗ РЕЗОНАНСНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В АТОМАРНЫХ ГАЗАХ.	96

<i>М.К. Есеев, В.И. Матвеев</i> НЕУПРУГИЕ ПРОЦЕССЫ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ УЛЬТРАКОРОТКИХ ИМПУЛЬСОВ С ЭКЗОТИЧЕСКИМИ АТОМАМИ	99
<i>Н.Л. Манаков, М.В. Фролов, А.F. Starace</i> АНАЛИТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО ПЛАТО В СПЕКТРАХ ИОНИЗАЦИИ И ГЕНЕРАЦИИ ГАРМОНИК АТОМАМИ В ИНТЕНСИВНОМ КОРОТКОМ ЛАЗЕРНОМ ИМПУЛЬСЕ	102
Д.Н. Макаров, В.И. Матвеев ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ ПРЕИЗЛУЧЕНИЯ УЛЬТРАКОРОТКОГО ИМПУЛЬСА ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ МНОГОАТОМНЫМИ СИСТЕМАМИ С УЧЁТОМ ТЕПЛОВЫХ КОЛЕБАНИЙ.	104
П.В. Редькин, М.Б. Данаилов, Х. Захариас, Р.А. Ганеев РАСЧЕТЫ ЭНДОФУЛЛЕРЕНОВ ДЛЯ ГЕНЕРАЦИИ ВЫСШИХ ГАРМОНИК	106
V.A. Astapenko, V.A. Bagan FEATURES OF EXCITATION OF A TWO-LEVEL SYSTEM BY SHORT NONRESONANCE LASER FIELD	109
Э.Р. Сайфутярова, С.А. Яковлева, А.К. Беляев, А.А. Бучаченко ПЕРЕНОС ЗАРЯДА В СТОЛКНОВЕНИЯХ Yb II и Rb I ПРИ ТЕМПЕРАТУРЕ НИЖЕ 1 К.	111
В.С. Лебедев, А.А. Нариц ЭФФЕКТЫ ДАЛЬНОДЕЙСТВУЮЩЕГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ИОННО-КОВАЛЕНТНОЙ СВЯЗИ И ПРОЦЕССАХ ПЕРЕНОСА СЛАБОСВЯЗАННОГО ЭЛЕКТРОНА ПРИ СТОЛКНОВЕНИЯХ РИДБЕРГОВСКИХ АТОМОВ И ПОЛЯРНЫХ МОЛЕКУЛ С МАЛОЙ ЭНЕРГИЕЙ СРОДСТВА К ЭЛЕКТРОНУ	113
<i>Б.А. Зон</i> КОГЕРЕНТНЫЕ ЭФФЕКТЫ ПРИ РАССЕЯНИИ БЫСТРЫХ ЭЛЕКТРОНОВ НА АТОМАХ, МОЛЕКУЛАХ И КЛАСТЕРАХ	116
И.А. Мальцев, Г.Б. Дейнека, И.И. Тупицын, В.М. Шабаев, Ю.С. Кожедуб, G. Plunien, T. Stoehlker РЕЛЯТИВИСТСКИЕ РАСЧЁТЫ ВЕРОЯТНОСТЕЙ ПЕРЕЗАРЯДКИ В СТОЛКНОВЕНИЯХ ТЯЖЁЛЫХ ИОНОВ	119
А.В. Майорова, А. Surzhykov, S. Tashenov, В.М. Шабаев УГЛОВЫЕ И ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ В ПРОЦЕССЕ РЕКОМБИНАЦИИ ДВУХ ЭЛЕКТРОНОВ С ТЯЖЕЛЫМ МНОГОЗАРЯЛНЫМ ИОНОМ	121
	141

А.В. Столяров, В.В. Мешков ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ И ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА РЕАЛЬНЫХ ГАЗОВ ПРИ ПОВЫШЕННЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ	124
Д.С. Родионов, А.К. Беляев, П.С. Барклем, М. Гиту, А. Спилфидель, Н. Фотриер ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НЕУПРУГИХ СТОЛКНОВЕНИЙ АТОМОВ МАГНИЯ И ВОДОРОДА ПРИ НИЗКИХ ЭНЕРГИЯХ.	125
В.А. Ерохин, И.И. Тупицын, В.М. Шабаев ОПЕРАТОР ЛЭМБОВСКОГО СДВИГА ДЛЯ РЕЛЯТИВИСТСКОГО АТОМА: ОТ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ К МОДЕЛЬНОМУ ПОТЕНЦИАЛУ	128
И.И. Тупицын, К.В. Берсенева, А.В. Волотка, Д.А. Глазов, В.М. Шабаев МЕТОД ДИРАКА–ФОКА–ШТУРМА В РЕЛЯТИВИСТСКИХ РАСЧЕТАХ КОНСТАНТ СВЕРХТОНКОГО РАСЩЕПЛЕНИЯ И G-ФАКТОРОВ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ	129
А.А. Щепетнов, А.В. Волотка, Д.А. Глазов, В.М. Шабаев, Г. Плюниен ЭФФЕКТ ОТДАЧИ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ В БОРОПОДОБНЫХ ИОНАХ	131
<i>А.С. Ульянов, <mark>А.А. Садовой</mark> АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ДИРАКА ДЛЯ МАЛОЭЛЕКТРОННЫХ ИОНОВ ТЯЖЕЛЫХ ЭЛЕМЕНТОВ</i>	134
В.А. Зайцев, А.В. Майорова, В.М. Шабаев, А.В. Волотка, G. Plunien ЭФФЕКТЫ НЕСОХРАНЕНИЯ ЧЕТНОСТИ В ТЯЖЕЛЫХ ЛИТИЕПОДОБНЫХ ИОНАХ	137
Н.А. Зубова, В.М. Шабаев, И.И. Тупицын, G. Plunien ЭФФЕКТ НА ОТДАЧУ ЯДРА К УРОВНЯМ ЭНЕРГИИ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ	140
И. Юрова EFFECTIVE RELATIVISTIC POTENTIALS FOR <i>e</i> –Au ⁺ AND <i>e</i> –Au SYSTEMS	142
S. Civiš, M. Ferus, B.E. Чернов, Е.М. Занозина ВРЕМЯРАЗРЕШЕННАЯ ФУРЬЕ-СПЕКТРОСКОПИЯ АТОМНЫХ РИДБЕРГОВСКИХ СОСТОЯНИЙ С ВЫСОКИМ ОРБИТАЛЬНЫМ МОМЕНТОМ.	144
И.В. Копытин, А.С. Корнев, Имад А. Хуссейн ВЛИЯНИЕ ИОНИЗАЦИИ АТОМОВ В СИЛЬНО НАГРЕТОМ ВЕЩЕСТВЕ МАССИВНОЙ ЗВЕЗДЫ НА СКОРОСТЬ ПРОЦЕССА СИНТЕЗА р-ИЗОТОПОВ	146

А.С. Четверкина, А.Н. Грум-Гржимайло, Е.В. Грызлова ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ДВОЙНОЙ ТРЁХ-ФОТОННОЙ ИОНИЗАЦИИ АТОМОВ В ДИАПАЗОНЕ ВУФ	179
Тезисы стендовых докладов в рамках научной школы для молодых ученых	177
Е.А. Егорушина, Е.А. Струкова, А.Н. Латышев, О.В. Овчинников, М.А. Ефимова АНТИСТОКСОВСКОЕ РЕКОМБИНАЦИОННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ В ПРИСУТСТВИИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ	173
А.С. Перепелица, О.В. Овчинников, М.С. Смирнов, Т.С. Шатских, Г.С. Кузнецова, С.Н. Иванников СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА КОЛЛОИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК Ag2S	170
Ю.С. Бездетко, В.Г. Клюев ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРА НАНОКРИСТАЛЛОВ CdS НА ПАРАМЕТРЫ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ	167
В.С. Лебедев, А.С.Медведев ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ: РОЛЬ ПЛАЗМОН-ЭКСИТОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И РАЗМЕРНЫХ ЭФФЕКТОВ	164
А.А. Каменский, В.Д. Овсянников АСИМПТОТИЧЕСКИЕ ФОРМУЛЫ ДЛЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЕЙ РИДБЕРГОВСКИХ СОСТОЯНИЙ АТОМОВ И ИОНОВ	161
И.Л. Глухов, Е.А. Никитина, В.Д. Овсянников ТЕРМОИНДУЦИРОВАННЫЕ СДВИГИ И УШИРЕНИЯ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ В ИОНАХ II ГРУППЫ	158
<i>А.А. Бучаченко</i> АНИЗОТРОПИЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ И МЕЖАТОМНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ АТОМОВ В <i>S</i> -СОСТОЯНИЯХ, ИНДУЦИРОВАННАЯ СПИН-ОРБИТАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ	155
В.Н. Барышев, А.И. Магунов, В.Г. Пальчиков СПЕКТРОСКОПИЯ КОГЕРЕНТНОГО ПЛЕНЕНИЯ НАСЕЛЕННОСТЕЙ АТОМА РУБИДИЯ В ЛАЗЕРНЫХ ПОЛЯХ	154
В.Д. Овсянников, С.Н. Мохненко, А.В. Щербаков ПРЕЦИЗИОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ АТОМОВ В ОПТИЧЕСКИХ РЕШЕТКАХ.	151
<i>Н.Л. Манаков, А.А. Некипелов</i> НЕКОТОРЫЕ АНАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОТЕНЦИАЛА ПОЛЯРИЗАЦИИ ВАКУУМА КУЛОНОВСКИМ ПОЛЕМ	149

А.И. Гомонай, Е.Ю. Ремета ОБ ИДЕНТИФИКАЦИИ РЕЗОНАНСНОЙ СТРУКТУРЫ СПЕКТРОВ ТРЕХФОТОННОЙ ИОНИЗАЦИИ АТОМА САМАРИЯ	181
О.В. Андреев, Д.А. Глазов, А.В. Волотка, В.М. Шабаев, G. Plunien ДВУХЭЛЕКТРОННЫЕ ПОПРАВКИ НА ПОЛЯРИЗАЦИЮ ВАКУУМА К СВЕРХТОНКОЙ СТРУКТУРЕ В ЛИТИЕПОДОБНОМ ВИСМУТЕ	184
А.В. Малышев, А.В. Волотка, Д.А. Глазов, И.И. Тупицын, В.М. Шабаев, Г. Плюниен КЭД РАСЧЕТ ЭНЕРГИЙ ИОНИЗАЦИИ 1s ² 2s ² 2p _{1/2} И 1s ² 2s ² 2p _{3/2} СОСТОЯНИЙ БОРОПОДОБНЫХ ИОНОВ	186
Д.В. Миронова, И.И. Тупицын, В.М. Шабаев, G. Plunien РЕЛЯТИВИСТСКИЕ ЭНЕРГИИ И КРИТИЧЕСКИЕ РАССТОЯНИЯ МНОГОЗАРЯДНЫХ ДВУХАТОМНЫХ КВАЗИМОЛЕКУЛ	189
В.А. Агабабаев КВАНТОВОЭЛЕКТРОДИНАМИЧЕСКИЕ ПОПРАВКИ К ЭФФЕКТУ ЗЕЕМАНА В МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНАХ	191
В.С. Лисица, В.А. Астапенко, Л.А. Буреева, М.В. Кадомцев, В.А. Шурыгин КОЛЛЕКТИВНЫЕ ЭФФЕКТЫ В АТОМНЫХ СПЕКТРАХ	194
С.В. Елфимов, Д.Л. Дорофеев, Б.А. Зон РИДБЕРГОВСКИЕ СОСТОЯНИЯ ПОЛЯРНЫХ МОЛЕКУЛ: ГРАНИЦЫ ПРИМЕНИМОСТИ ПРЯМОГО И ОБРАТНОГО ПРИБЛИЖЕНИЙ БОРНА-ОППЕНГЕЙМЕРА	197
<i>И.Н. Еремкин, Ю.Б. Малыханов</i> КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЕЙ ОСНОВНЫХ И ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ АТОМОВ	198
А.А. Головизин, С.А. Снигирев, Д.Д. Сукачев, А.В. Акимов, Н.Н. Колачевский, В.Н. Сорокин ШТАРК-ЭФФЕКТ ДЛЯ 5d УРОВНЯ АТОМА РУБИДИЯ	200
В.В. Казаков, В.Г. Казаков, В.С. Ковалев, А.С. Яценко ЭМУЛИРОВАННЫЙ МЕТОД КОНТРОЛЯ ЧИСТЫХ ВЕЩЕСТВ	203
В.Н. Барышев, А.И. Магунов, В.Г. Пальчиков ЛАЗЕРНАЯ СЕЛЕКТИВНАЯ НАКАЧКА МАГНИТНЫХ ПОДУРОВНЕЙ СВЕРХТОНКОЙ СТРУКТУРЫ АТОМА ЦЕЗИЯ	206
<i>Ю.Б. Малыханов, М.В. Горшунов</i> РАСЧЕТ ЭНЕРГИЙ АТОМОВ И ИОНОВ В АЛГЕБРАИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ МЕТОДА ХАРТРИ–ФОКА	207

В.В. Чернушкин, Е.А. Никитина, С.Н. Мохненко, В.Д. Овсянников СТАНДАРТЫ ЧАСТОТЫ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ НА ОСНОВЕ ИОНОВ АЛЮМИНИЯ И МАГНИЯ	210
В.В. Мешков, А.В. Столяров ВЫСОКОТОЧНЫЙ МЕТОД ЧИСЛЕННОГО РАСЧЕТА ФАЗОВОГО СДВИГА ДЛЯ РАДИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА	213
С.В. Борзунов, М.Ю. Иванов, Н.Л. Манаков, С.С. Мармо, М.В. Фролов, А.F. Starace ДИНАМИЧЕСКАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ И СЕЧЕНИЕ ФОТООТРЫВА СЛАБОСВЯЗАННОГО ЭЛЕКТРОНА В ПОЛЕ ДВУХ δ-ПОТЕНЦИАЛОВ	214
В.И. Келемен, Е.Ю. Ремета ПОЛНАЯ СПИНОВАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ ЭЛЕКТРОНОВ УПРУГО РАССЕЯННЫХ АТОМАМИ	216
<i>Г.Г. Богачёв, Р.В. Тымчик</i> ВОЗБУЖДЕНИИ ВУФ СПЕКТРОВ ИОНА КАЛИЯ ПРИ ЭЛЕКТРОН- АТОМНЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ	219
В.В. Грицко, В.И. Роман, А.В. Куплиаускиене, А.А. Боровик ВОЗБУЖДЕНИЕ МЕТАСТАБИЛЬНЫХ АВТОИОНИЗАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ АТОМА РУБИДИЯ ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ	222
<i>А.Н. Гомонай</i> РОЛЬ АВТОИОНИЗАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ В ВОЗБУЖДЕНИИ ИНТЕРКОМБИНАЦИОННЫХ ПЕРЕХОДОВ ИОНОВ In ⁺ И TI ⁺ ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ	225
А.Н. Гомонай, Ю.И. Гутич, А.И. Гомонай ДИЭЛЕКТРОННАЯ РЕКОМБИНАЦИЯ ИОНА In ⁺	228
Ю.С. Кожедуб, И.И. Тупицын, В.М. Шабаев, G. Plunien, S. Hagmann, Th. Stölker РЕЛЯТИВИСТСКИЙ РАСЧЕТ ПРОЦЕССОВ ОБРАЗОВАНИЯ ВАКАНСИЙ ВО ВНУТРЕННИХ ОБОЛОЧКАХ АТОМОВ В НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ИОН-АТОМНЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ	231
А.И. Бондарев, Ю.С. Кожедуб, И.И. Тупицын, В.М. Шабаев, G. Plunien РЕЛЯТИВИСТСКИЕ РАСЧЕТЫ ВЕРОЯТНОСТЕЙ ИОНИЗАЦИИ В НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ СТОЛКНОВЕНИЯХ ТЯЖЕЛЫХ ИОНОВ	233
А.А. Нариц, Е.С. Мирончук, В.С. Лебедев ОБРАЗОВАНИЕ ИОННОЙ ПАРЫ И СТОЛКНОВИТЕЛЬНОЕ ТУШЕНИЕ РИДБЕРГОВСКИХ УРОВНЕЙ АТОМОВ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ АТОМАМИ ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ Ca, Sr И Ba	234

А.П. Шевелько 14АУЧНОЕ ОБОРУДОВАНИЕ ДЛЯ РЕНТГЕНО-СПЕКТРАЛЬНОЙ ЦИАТНОСТИКИ ПЛАЗМЫ	<i>А.П. Шевелько</i> НОВЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ ДЛЯ РЕНТГЕНОВСКОЙ И ВУФ СПЕКТРОСКОПИИ ПЛАЗМЫ	237
Б.А. Зон, А.С. Корнев, И.М. Семилетов ТЕОРИЯ КЕЛДЫША ДЛЯ ТУННЕЛЬНОЙ ИОНИЗАЦИИ АТОМА МАЛОПЕРИОДНЫМ ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ	<i>А.П. Шевелько</i> НАУЧНОЕ ОБОРУДОВАНИЕ ДЛЯ РЕНТГЕНО-СПЕКТРАЛЬНОЙ ДИАГНОСТИКИ ПЛАЗМЫ	240
Н.Л. Манаков, С.С. Мармо, М.В. Фролов НАМАГНИЧЕНИЕ АНИЗОТРОПНОЙ СРЕДЫ ЛИНЕЙНО ПОЛЯРИЗОВАННЫМ СВЕТОВЫМ ИМПУЛЬСОМ	Б.А. Зон, А.С. Корнев, И.М. Семилетов ТЕОРИЯ КЕЛДЫША ДЛЯ ТУННЕЛЬНОЙ ИОНИЗАЦИИ АТОМА МАЛОПЕРИОДНЫМ ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ	243
П.А. Мелешенко, Hang T.T. Nguyen, А.Ф. Клинских 247 ААРОНОВА-БОМА	<i>Н.Л. Манаков, С.С. Мармо, М.В. Фролов</i> НАМАГНИЧЕНИЕ АНИЗОТРОПНОЙ СРЕДЫ ЛИНЕЙНО ПОЛЯРИЗОВАННЫМ СВЕТОВЫМ ИМПУЛЬСОМ	245
ААРОНОВА-БОМА. 247 <i>М.В. Фролов, Н.Л. Манаков, Т.С. Саранцева, А.F. Starace</i> ГЕНЕРАЦИЯ ВЫСШИХ ГАРМОНИК В ДВУХЧАСТОТНОМ ПОЛЕ: ПРИЛОЖЕНИЕ К АТОМНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ. 250 <i>М.В. Фролов, Н.Л. Манаков, Д.В. Князева,</i> 250 <i>Шаложение к АТОМНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ</i> . 250 <i>М.В. Фролов, Н.Л. Манаков, Д.В. Князева,</i> 250 <i>Шаложение к АТОМНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ</i> . 250 <i>М.В. Фролов, Н.Л. Манаков, Д.В. Князева,</i> 250 <i>М.В. Фролов, Н.Л. Манаков, Д.В. Князева,</i> 250 <i>М.В. Фролов, Н.Л. Манаков, Д.В. Князева,</i> 250 <i>М.М. Соколов,</i> 28. <i>Князева,</i> 252 <i>М.М. Соколов</i> 252 252 <i>М.М. Соколов</i> 10 252 <i>М.М. Соколов</i> 10 255 <i>А.А. Жуков, В.П. Яковлев, С.А. Зибров, В.Л. Величанский</i> 255 <i>А.А. Жуков, В.П. Яковлев, С.А. Зибров, В.Л. Величанский</i> 258 <i>БИХРОМАТИЧЕСКОМ</i> ПОЛЕ 258 <i>Д.И. Севостьянов, В.П. Яковлев, А.Н. Козлов, В.В. Васильев,</i> 2. <i>Д.И. Севостьянов, В.П. Яковлев, А.Н. Козлов, В.В. Васильев,</i> 2. <i>Д.И. Севостьянов, В.Г. Клюев</i> 261 <i>Ю.С. Бездетко, В.Г. Клюев</i> 261	П.А. Мелешенко, Hang T.T. Nguyen, А.Ф. Клинских СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ПРОЯВЛЕНИЯ ЭФФЕКТА	
М.В. Фролов, Н.Л. Манаков, Т.С. Саранцева, А.F. Starace ГЕНЕРАЦИЯ ВЫСШИХ ГАРМОНИК В ДВУХЧАСТОТНОМ ПОЛЕ: ПРИЛОЖЕНИЕ К АТОМНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ	ААРОНОВА-БОМА	247
М.В. Фролов, Н.Л. Манаков, Д.В. Князева, Liang-You Peng, Ji-Wei Geng, A.F. Starace ИОНИЗАЦИЯ АТОМОВ В СИЛЬНОМ ЛАЗЕРНОМ ПОЛЕ КОРОТКОЙ ДЛИТЕЛЬНОСТИ	<i>М.В. Фролов, Н.Л. Манаков, Т.С. Саранцева, А.F. Starace</i> ГЕНЕРАЦИЯ ВЫСШИХ ГАРМОНИК В ДВУХЧАСТОТНОМ ПОЛЕ: ПРИЛОЖЕНИЕ К АТОМНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ	250
М.М. Соколов НЕЛИНЕЙНЫЕ ПО МАГНИТНОМУ ПОЛЮ ВКЛАДЫ В ЭФФЕКТ ЗЕЕМАНА В МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНАХ	М.В. Фролов, Н.Л. Манаков, Д.В. Князева, Liang-You Peng, Ji-Wei Geng, A.F. Starace ИОНИЗАЦИЯ АТОМОВ В СИЛЬНОМ ЛАЗЕРНОМ ПОЛЕ КОРОТКОЙ ДЛИТЕЛЬНОСТИ	252
А.А. Жуков, В.П. Яковлев, С.А. Зибров, В.Л. Величанский МАГНИТО-ОПТИЧЕСКИЙ РЕЗОНАНС ДЛЯ ОТКРЫТОЙ V-КОНФИГУРАЦИИ АТОМНЫХ ПЕРЕХОДОВ В БИХРОМАТИЧЕСКОМ ПОЛЕ	<i>М.М. Соколов</i> НЕЛИНЕЙНЫЕ ПО МАГНИТНОМУ ПОЛЮ ВКЛАДЫ В ЭФФЕКТ ЗЕЕМАНА В МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНАХ	255
Д.И. Севостьянов, В.П. Яковлев, А.Н. Козлов, В.В. Васильев, С.А. Зибров, В.Л. Величанский ИСКАЖЕНИЕ ДОПЛЕРОВСКОГО КОНТУРА D ₁ и D ₂ ЛИНИЙ Cs В ЯЧЕЙКЕ С АНТИРЕЛАКСАЦИОННЫМ ПОКРЫТИЕМ	А.А. Жуков, В.П. Яковлев, С.А. Зибров, В.Л. Величанский МАГНИТО-ОПТИЧЕСКИЙ РЕЗОНАНС ДЛЯ ОТКРЫТОЙ V-КОНФИГУРАЦИИ АТОМНЫХ ПЕРЕХОДОВ В БИХРОМАТИЧЕСКОМ ПОЛЕ	258
201 Ю.С. Бездетко, В.Г. Клюев МОДЕЛЬ ФИЗИЧЕСКОЙ ПРИРОДЫ ЦЕНТРОВ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В НАНОКРИСТАЛЛАХ CdS	Д.И. Севостьянов, В.П. Яковлев, А.Н. Козлов, В.В. Васильев, С.А. Зибров, В.Л. Величанский ИСКАЖЕНИЕ ДОПЛЕРОВСКОГО КОНТУРА D ₁ и D ₂ ЛИНИЙ Cs В ЯЧЕЙКЕ С АНТИРЕЛАКСАЦИОННЫМ ПОКРЫТИЕМ	261
Ю.С. Бездетко, В.Г. Клюев, А.Г. Беляев, А.А. Седых ЗАВИСИМОСТЬ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СИСМЕМЫ НАНОКРИСТА ПЛОВ CdS-A gaS	Ю.С. Бездетко, В.Г. Клюев МОДЕЛЬ ФИЗИЧЕСКОЙ ПРИРОДЫ ЦЕНТРОВ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В НАНОКРИСТАЛЛАХ CdS	264
1111110111101110100000071920207	Ю.С. Бездетко, В.Г. Клюев, А.Г. Беляев, А.А. Седых ЗАВИСИМОСТЬ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СИСМЕМЫ НАНОКРИСТАЛЛОВ CdS-Ag ₂ S	267

И.В. Копытин, Имад А. Хуссейн	
ЗАВИСИМОСТЬ РАСПАДНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ЯДЕР ОТ	
ЗАПОЛНЕННОСТИ К-ОБОЛОЧЕК ИХ АТОМОВ В СИЛЬНО	
НАГРЕТОМ ВЕЩЕСТВЕ	270
Т.Л. Майорова, В.Г. Клюев, Ю.С. Бездетко	
РОЛЬ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ В	
РЕКОМБИНАЦИОННЫХ ПРОЦЕССАХ В ПЛЕНОЧНЫХ	
НАНОСТРУКТУРАХ СУЛЬФИДА КАДМИЯ	273
А.С. Медведев, В.С. Лебедев	
СПЕКТРАЛЬНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ	
НАНООБОЛОЧЕК С ДИЭЛЕКТРИЧЕСКИМ ИЛИ	
ПОЛУПРОВОДНИКОВЫМ ЯДРОМ, ПОКРЫТЫХ	
МОЛЕКУЛЯРНЫМИ Ј-АГРЕГАТАМИ КРАСИТЕЛЕЙ	276
А.Д. Кондорский, А.С. Медведев, В.В. Воробьев, В.С. Лебедев	
ВЛИЯНИЕ ФОРМЫ КОМПОЗИТНОЙ МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКОЙ	
НАНОСТРУКТУРЫ НА ХАРАКТЕР СВЯЗИ ЛОКАЛИЗОВАННОГО	
ПЛАЗМОНА С ЭКСИТОНОМ ФРЕНКЕЛЯ И СПЕКТРЫ	
ПОГЛОЩЕНИЯ И РАССЕЯНИЯ СВЕТА	279

Организационный комитет XX Конференции по фундаментальной атомной спектроскопии

Сопредседатели:

- Виноградов Евгений Андреевич, чл.-корр. РАН. ФГБУН Институт спектроскопии РАН
- Зон Борис Абрамович, д.ф.-м.н. ФГБОУ ВПО Воронежский государственный университет

Заместитель председателя:

• Буреева Людмила Алексеевна, к.ф.-м.н. ФГБУН Институт спектроскопии РАН

Александров Евгений Борисович, акад. РАН.

ОАО Государственный оптический институт имени С. И. Вавилова, ФГБУН Физико-технический институт РАН

Амусья Мирон Янкелевич, д.ф.-м.н.

 $\Phi \Gamma F F F$ Физико-технический институт PAH The Hebrew University of Jerusalem, Israel

Бобашёв Сергей Васильевич, д.ф.-м.н.

ФГБОУ ВПО Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

Кабачник Николай Мартинович, д.ф.-м.н.

Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д.В. Скобельцына Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова Deutsches Elektronen-Synchrotron (DESY), Hamburg, Germany

Кошелев Константин Николаевич, к.ф.-м.н.

ФГБУН Институт спектроскопии РАН

Лисица Валерий Степанович, д.ф.-м.н.

НИЦ Курчатовский институт

Овсянников Виталий Дмитриевич, д.ф.-м.н.

ФГБОУ ВПО Воронежский государственный университет

Рябцев Александр Николаевич, д.ф.-м.н. ФГБУН Институт спектроскопии РАН

Сергеев Александр Михайлович, чл.-корр. РАН. ФГБУН Институт прикладной физики РАН

Федоров Михаил Владимирович, д.ф.-м.н. ФГБУН Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН

Шабаев Владимир Моисеевич, д.ф.-м.н. ФГБОУ ВПО Санкт-Петербургский государственный университет

Шалагин Анатолий Михайлович, акад. РАН. ФГБУН Институт автоматики и электрометрии СО РАН

Локальный комитет XX конференции по фундаментальной атомной спектроскопии

<u>Председатель</u>

• Манаков Николай Леонидович, д.ф.-м.н. ФГБОУ ВПО Воронежский государственный университет

<u>Ученый секретарь</u>

- Корнев Алексей Станиславович, д.ф.-м.н. ФГБОУ ВПО Воронежский государственный университет
- Фролов Михаил Владимирович, д.ф.-м.н. ФГБОУ ВПО Воронежский государственный университет

Мармо Сергей Иванович, д.ф.-м.н.

ФГБОУ ВПО Воронежский государственный университет

Меремьянин Алексей Васильевич, д.ф.-м.н.

ФГБОУ ВПО Воронежский государственный университет

Дорофеев Дмитрий Львович, к.ф.-м.н.

ФГБОУ ВПО Воронежский государственный университет

Чернов Владислав Евгеньевич, к.ф.-м.н.

ФГБОУ ВПО Воронежский государственный университет

Мохненко Сергей Николаевич

ФГБОУ ВПО Воронежский государственный университет



Лекции приглашенных ученых в рамках научной школы для молодых ученых



ХИМИЧЕСКИ ПЕКУЛЯРНЫЕ ЗВЕЗДЫ И СВЕТОИНДУЦИРОВАННЫЙ ДРЕЙФ

А.М. Шалагин, А.И. Пархоменко

630090, г. Новосибирск, Институт автоматики и электрометрии СО РАН <u>shalagin@iae.nsk.su</u>

В обширном семействе звезд есть класс весьма необычных объектов - химически пекулярные (СР) звезды [1]. СР-звезды отличаются от обычных составом своих атмосфер: концентрация ряда элементов может отличаться на порядки от стандартной. В отношении происхождения таких аномалий наиболее приемлемым и общепринятым объяснением является представление о сепарации химических элементов и их изотопов в атмосферах СР-звезд при сохранении в среднем по звезде нормального химического состава. В качестве такого процесса наиболее подробно обсуждается механизм селективной диффузии атомов и ионов под действием двух сил: силы тяжести, заставляющей более тяжелые элементы тонуть, и выталкивающей силы светового давления, возникающей при поглощении излучения в спектральных линиях соответствующих элементов [2,3]. Исследования этого механизма показали, что он может объяснить некоторые аномалии, но не объясняет ту высокую степень сепарации, какая иногда наблюдается, а в некотослучаях предсказывает противоположный знак эффекта (например, рых обогащение вместо наблюдаемого обеднения).

Ранее нами было предложено [4] объяснение аномалий химического состава в атмосферах СР-звезд на основе эффекта светоиндуцированного дрейфа (СИД). Эффект СИД, теоретически предсказанный [5] и впервые экспериментально зарегистрированный [6] в 1979 году, относится к ряду наиболее сильных эффектов воздействия излучения на поступательное движение частиц газа. В работах [4,7] показано, что сепарация химических элементов и изотопов под действием СИД в условиях атмосфер СР-звезд может быть существенно более эффективной по сравнению с сепарацией, обусловленной световым давлением. Эта работа положила начало исследованиям сепарации химических элементов и изотопов в СР-звездах под действием СИД (см., например, [8 – 11]).

Как известно, скорость дрейфа при эффекте СИД пропорциональна относительной разности транспортных частот столкновений резонансных (взаимодействующих с излучением) частиц, находящихся в основном и возбужденном состояниях, с буферными (не взаимодействующими с излучением) частицами. Вычисление этого фактора является, пожалуй, самой сложной проблемой для расчета СИД в атмосферах СР-звезд. Следует иметь в виду, что в

17

атмосферах СР-звезд тяжелые элементы, как правило, почти полностью ионизованы. Ряд авторов, обсуждавших проблему сепарации элементов в атмосферах СР-звезд, заявляли, что роль СИД по отношению к тяжелым элементам должна быть ничтожной по той причине, что для ионов потенциалы взаимодействия с буферными частицами не зависят от внутренних состояний (поляризационное взаимодействие). Наша позиция по этому вопросу иная: поляризационное взаимодействие в условиях атмосфер СР-звезд (достаточно высокие температуры) не велико по сравнению с близкодействием, обусловленным структурой электронной оболочки, которое различно для разных электронных состояний. Как выясняется, это действительно так.

На основе появившихся в литературе данных о потенциалах взаимодействия возбужденных и невозбужденных ионов некоторых элементов (Be, Mg, Ca) с атомами водорода и гелия вычислены относительные изменения транспортных частот столкновений этих ионов, которые оказались практически такими же, как и для нейтральных атомов. Это означает, что в атмосферах химически пекулярных звезд СИД ионов проявляется почти так же эффективно, как и в случае нейтральных атомов, вопреки тому, что принято в литературе по этому вопросу. В итоге показано, что сепарация химических элементов под действием СИД ионов в условиях атмосфер холодных СР звезд может быть на порядок более эффективна по сравнению с сепарацией, обусловленной световым давлением. В атмосферах более горячих звезд (20 000 K> T > 10 000 K) можно ожидать примерно одинаковую величину проявления эффектов СИД и светового давления.

- [1] В. Л. Хохлова, в кн.: Итоги науки и техники, сер. Астрономия, ред. Р. А. Сюняев (М: ВИНИТИ, 1983), 24, с. 233.
- [2] G. Michaud, Astrophys. J. 160, 641 (1970).
- [3] G. Michaud, Y. Charland, S. Vauclair, and G. Vauclair, Astrophys. J. 120, 447 (1976).
- [4] С.Н. Атутов, А. М. Шалагин, Письма в Астрон. журн. 14, 664 (1988).
- [5] Ф.Х. Гельмуханов, А. М. Шалагин, Письма в ЖЭТФ 29, 773 (1979).
- [6] В.Д. Анцыгин и др., Письма в ЖЭТФ 30, 262 (1979).
- [7] K.A. Nasyrov and A. M. Shalagin, Astron. Astrophys. 268, 201 (1993).
- [8] A. Sapar and A. Aret, Astron. Astrophys. Transactions 7, 1 (1995).
- [9] A. Aret and A. Sapar, Astron. Nachr. 323, 21 (2002).
- [10] A. Sapar, A. Aret, L. Sapar, and R. Poolamae, New Astron. Rev. 53, 240 (2009).
- [11] T. Ryabchikova, O. Kochukhov, and S. Bagnulo, Astron. Astrophys. 408, 811 (2008).

ЛАЗЕРНО-ПЛАЗМЕННЫЕ МЕТОДЫ ГЕНЕРАЦИИ ТЕРАГЕРЦОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

<u>Н.В. Введенский^{1,2}</u>, В.А. Костин^{1,2}, А.А. Силаев^{1,2}

¹ 603950, г. Нижний Новгород, Институт прикладной физики РАН

² 603950, г. Нижний Новгород, Нижегородский государственный университет

им. Н.И. Лобачевского

vved@appl.sci-nnov.ru

В работе представлен обзор результатов исследований методов генерации терагерцового излучения, основанных на использовании лазерно-индуцированной плазмы [1-21]. Эти методы обычно реализуются при ионизации различных газов, включая окружающий воздух, фемтосекундными лазерными импульсами миллиджоульного уровня энергии. Полем накачки в лазерно-плазменных схемах генерации терагерцового излучения может быть как поле самого ионизирующего лазерного импульса, так и внешние поля других частотных диапазонов, включая статические поля. Эти схемы достаточно компактны и сравнительно легко реализуемы и могут обеспечивать стабильную генерацию последовательности терагерцовых импульсов с очень высокой (от десятков герц до сотен килогерц) частотой повторения. Большой интерес к лазерно-плазменным методам обусловлен возможностями получения когерентных интенсивных терагерцовых импульсов, обладающих широкой частотной полосой. Кроме того, лазерно-плазменные методы генерации могут быть использованы совместно с методами детектирования, которые также являются широкополосными и реализуются при ионизации окружающего воздуха [4-6]. В связи с этими особенностями имеются перспективы использования лазерно-плазменных схем для терагерцовой спектроскопии в большом количестве приложений, таких как диагностика различных материалов и веществ, химический анализ смесей, контроль качества фармацевтической продукции, интравидение и т. п. Особенно привлекательной выглядит возможность удаленного размещения (в непосредственной близости от облучаемого диагностируемого объекта) генерирующей и детектирующей лазерной плазмы, что позволяет избежать транспортировки терагерцового излучения, сильно поглощающегося в атмосферном воздухе [4-7].

К настоящему времени применение лазерно-плазменных методов позволило получить терагерцовые импульсы с электрическим полем до 1 МВ/см и пиковой мощностью до 1 МВт и выше [8–10], были продемонстрированы возможности управления поляризацией и спектром терагерцовых импульсов за счет изменения поляризационных свойств и условий фокусировки лазерных импульсов [8, 11, 12], а также давления и вида ионизируемого газа [8, 12–14]. Высказаны перспективные идеи для генерации перестраиваемого сверхширокополосного терагерцового излучения [9, 15, 16] и достижения гигаваттных значений пиковой мощности в генерируемых терагерцовых импульсах [2]. Разработаны теоретические модели, которые хорошо описывают результаты экспериментов и включают в себя полуклассические и квантовомеханические подходы к расчету плотности низкочастотных (остаточных) токов, возбуждаемых в плазме в процессе ионизации различных газов короткими (в том числе и предельно короткими) лазерными импульсами [2, 17–20], и самосогласованные модели расчета параметров порождаемого этими токами терагерцового излучения [3, 21].

Работа выполнена при поддержке гранта Правительства Российской Федерации № 14.В25.31.0008, грантов Министерства образования и науки Российской Федерации №№ 8611, 8835, 14.В37.21.0770 и грантов Российского фонда фундаментальных исследований №№ 11–02–01416, 12–02–31424, 12–01–31270, 12–02– 33087, 12–02–12101, 13–02–00964.

- [1] B. Clough, J. Dai, and X.-C. Zhang, Mater. Today 15, 50 (2012).
- [2] V.B. Gildenburg and N.V. Vvedenskii, Phys. Rev. Lett. 98, 245002 (2007).
- [3] А.М. Быстров, Н.В. Введенский, В.Б. Гильденбург, Письма в ЖЭТФ 82, 852 (2005).
- [4] J. Liu, J. Dai, S. L. Chin, and X. C. Zhang, Nat. Photonics 4, 627 (2010).
- [5] А.А. Фролов, А.В. Бородин, М.Н. Есаулков, И.И. Курицын, А.П. Шкуринов, ЖЭТФ, 141, 1027 (2012)
- [6] Z. Lu, D. Zhang, C. Meng, L. Sun, Z. Zhou, Z. Zhao, and J. Yuan, Appl. Phys. Lett. 101, 081119 (2012).
- [7] T.-J. Wang, S. Yuan, Y. Chen, J.-F. Daigle, C. Marceau, F. Theberge, M. Chateauneuf, J. Dubois, and S. L. Chin, Appl. Phys. Lett. 97, 111108 (2010).

- [8] K.Y. Kim, A.J. Taylor, J.H. Glownia, and G. Rodriguez, Nat. Photonics 2, 605 (2008).
- [9] M. D. Thomson, V. Blank, and H. G. Roskos, Opt. Express 18, 23173 (2010).
- [10] Y. Minami, T. Kurihara, K. Yamaguchi, M. Nakajima, and T. Suemoto, Appl. Phys. Lett. 102, 041105 (2013).
- [11] J. Dai, N. Karpowicz, and X.-C. Zhang, Phys. Rev. Lett. 103, 023001 (2009).
- [12] G. Rodriguez and G.L. Dakovski, Opt. Express 18, 15130 (2010).
- [13] П.А. Чижов, Р.В. Волков, В.В. Букин, А.А. Ушаков, С.В. Гарнов, А.Б. Савельев-Трофимов, Квантовая электроника 43, 347 (2013).
- [14] N. Karpowicz and X. C. Zhang, Phys. Rev. Lett. 102, 093001 (2009).
- [15] I. Babushkin, S. Skupin, A. Husakou, C. Koehler, E. Cabrera-Granado, L. Berge, and J. Herrmann, New J. Phys. 13, 123029 (2011).
- [16] A.V. Borodin, N.A. Panov, O.G. Kosareva, V.A. Andreeva, M.N. Esaulkov, V.A. Makarov, A.P. Shkurinov, S.L. Chin, and X.-C. Zhang, Optics Lett. 38, 1906 (2013).
- [17] A.A. Silaev and N.V. Vvedenskii, Phys. Rev. Lett. 102, 115005 (2009).
- [18] A.A. Silaev and N.V. Vvedenskii, Phys. Scr. T135, 014024 (2009).
- [19] A.A. Silaev, M.Y. Ryabikin, and N.V. Vvedenskii, Phys. Rev. A 82, 033416 (2010).
- [20] L.N. Alexandrov, M.Y. Emelin, and M.Y. Ryabikin, Phys. Rev. A 87, 013414 (2013).
- [21] V.A. Kostin and N.V. Vvedenskii, Opt. Lett. 35, 247 (2010).

КВАНТОВО-ЭЛЕТРОДИНАМИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ, СОПРОВОЖДАЮЩИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ЭКСТРЕМАЛЬНО СИЛЬНЫХ ЛАЗЕРНЫХ ПОЛЕЙ С ВЕЩЕСТВОМ

<u>И.Ю. Костюков</u>^{1,2}, Е.Н. Неруш^{1,2}, В.Ф. Башмаков^{1,2} ¹ 603950, г. Нижний Новгород, Институт прикладной физики РАН ² 603950, г. Нижний Новгород, Нижегородский государственный университет kost@appl.sci-nnov.ru

В настоящее время в мире проектируются лазерные системы, позволяющие генерировать излучение с интенсивностью более 10²⁴ Вт/см². При такой интенсивности напряженность электрического поля в области, куда фокусируется лазерное излучение, становится почти на 5 порядков выше, чем напряженность атомного поля. Интенсивное лазерное излучение может быть использовано для исследования в лабораторных условиях структуры физического вакуума, для проверки основ квантовой электродинамики, разработки источников гаммаизлучения и т.д. Одним из вопросов, который привлекает к себе большое внимания еще с момента возникновения квантовой электродинамики, является нестабильность вакуума, сопровождающаяся массовым рождением электронпозитронных пар.

Важно отметить, что «пробой вакуума» с образованием электронпозитронной плазмы возможен для электромагнитных полей с напряженностью, несколько порядков напряженности критического квантовона ниже электродинамического поля $E_{cr} = m^2 c^3 / (e\hbar) \approx 1.3 \times 10^{16} \, \text{B/cm}$ в результате развития электромагнитного каскада. Данный процесс имеет близкую аналогию с газовым разрядом в электрическом поле, возникающим в следствии развития электронной лавины. В электромагнитном каскаде затравочная зараженная частица сначала ускоряется в лазерном поле и излучает высокоэнергетичный фотон, который распадается в сильном поле на электрон-позитронную пару. Образовавшаяся пара также ускоряется и образует следующее поколение фотонов и электронпозитронных пар. В результате происходит лавинообразное рождение частиц, приводящее к образованию среды с высокой плотностью энергии, состоящей из горячих электронов, позитронов и энергичных гамма-квантов. Такая среда, эффективно поглощает энергию лазерного излучения, что может являться фундаментальным механизмом, ограничивающим интенсивность электромагнитного поля, достижимую в лабораторных условиях.

Построена самосогласованная численная модель, учитывающая обратное

влияние электромагнитных полей образовавшейся электронпозитронной плазмы на динамику ≰ каскада и поглощение лазерной энергии [1,2]. Предполагается, что каскад развивается в поле двух сталкивающихся линейно- ≰ поляризованных лазерных импульсов. Впервые исследована стадия насыщения каскада в результате ге-



нерации собственных полей электрон-позитронной плазмы и поглощения лазерной энергии [1]. Вычислена пороговое значение интенсивности лазерного излучения, после превышения которого начинается развитие каскада [1]. На базе системы кинетических уравнений построена теория электромагнитного каскада во вращающемся электрическом поле [3]. Найдены соотношения подобия для параметров каскада. Вычислен энергетический спектр частиц каскада. Исследована возможность направленного излучения гамма-квантов, возникающих в результате развития каскада [4]. Показано, что направление гамма-излучения можно контролировать, подбирая нужным образом начальные условия (начальную форму лазерных импульсов, положение затравки в начальный момент).

Работа выполнена при поддержке Гранта Правительства РФ № 14.В25.31.0008, Гранта Российского Фонда Фундаментальных Исследований № 13–02–00886, Гранта Министерства образования и науки РФ (Соглашение № 8835).

- [1]. E.N. Nerush, I.Yu. Kostyukov, A.M. Fedotov, N.B. Narozhny, N.V. Elkina, H. Ruhl, Phys. Rev. Lett. 106, 035001 (2011).
- [2]. N. V. Elkina, A. M. Fedotov, I. Yu. Kostyukov, M. V. Legkov, N. B. Narozhny,

E.N. Nerush, and H. Ruhl, Phys. Rev. ST Accel. Beams 14, 054401 (2011).

- [3]. E.N. Nerush, V.F. Bashmakov, I.Yu. Kostyukov, Phys. Plasmas 18, 083107 (2011).
- [4]. E.N. Nerush, I.Yu. Kostyukov, Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment 653, 7 (2011).

МЕТОД КОМПЛЕКСНЫХ ТРАЕКТОРИЙ В АТОМНОЙ ФИЗИКЕ СИЛЬНЫХ ПОЛЕЙ

С.В. Попруженко

Национальный исследовательский ядерный университет «МИФИ», Каширское шоссе 31, 115409, г.Москва, Россия

poprz@mail.ru

В лекции дается обзор современного состояния метода комплексных траекторий в приложении к описанию явлений атомной физики в интенсивных электромагнитных полях. Формализм комплексных траекторий восходит к теории Келдыша [1] и методу мнимого времени [2], которые на протяжении нескольких десятилетий остаются одними из наиболее эффективных аналитических методов в физике сильных лазерных полей.

Показано, каким образом амплитуды многоквантовых процессов в интенсивном лазерном поле – нелинейной ионизации, излучения высокой гармоники основной частоты и др. – могут быть представлены в виде суммы вкладов, вычисленных вдоль классических (т.е., удовлетворяющих уравнению Ньютона) траекторий в комплексном пространстве и времени. Для нахождения амплитуды фотоионизации необходимо вычислить действие для электрона в поле электромагнитной волны вдоль соответствующей комплексной траектории; при этом мнимая часть действия определяет величину, а действительная – фазу искомой амплитуды. Если кулоновское взаимодействие между фотоэлектроном и атомным остатком не учитывается (что физически соответствует случаю отрицательно заряженных ионов), полученный на языке траекторий результат полностью эквивалентен теории Келдыша или приближению сильного поля [1,3].

Далее обсуждается включение в теорию кулоновского взаимодействия, что позволяет достигнуть количественной точности при описании квантовой динамики атомов и молекул в интенсивных лазерных полях. Излагается развитая в работах [4,5] техника вычисления кулоновских поправок к траектории и к действию фотоэлектрона в поле электромагнитной волны в комплексном пространстве и времени. Кулоновская расходимость в начале координат устраняется за счет сшивки действия с комплексной фазой атомной волновой функции на больших расстояниях от атома. Показано, что теорию можно сформулировать «инвариант-

25

ным» образом, так что в нее не входят ненаблюдаемые величины, такие как положение точки выхода из-под барьера и время туннелирования, а контур интегрирования в плоскости комплексного времени выбирается исходя из свойств аналитического продолжения функции 1/r в комплексную плоскость, где она имеет точки ветвления и разрезы. Соответственно, разделение движения фотоэлектрона на подбарьерное и классическое оказывается неоднозначным и в ряде случаев вообще не может быть выполнено общепринятым образом, когда электрон начинает движение в вещественном времени от точки выхода из-под квазистатического барьера.

Продемонстрированы приложения теории к расчету спектрально-угловых распределений фотоэлектронов при ионизации атомов интенсивными лазерными импульсами с линейной и эллиптической поляризацией. Полученные результаты сравниваются с экспериментальными данными, в частности с результатами "attoclock experiments" [6], в которых предпринималась попытка измерения времени туннелирования фотоэлектрона.

Работа выполнена при поддержке Гранта Президента РФ для молодых докторов наук МД-5838.2013.2.

[1]. Л.В. Келдыш, ЖЭТФ 47, 1945 (1964).

[2]. В.С. Попов, УФН 174, 921 (2004); ЯФ 68, 717 (2005).

[3]. F.H.M. Faisal, J.Phys. B 6, L89 (1973); H.R. Reiss, Phys. Rev. A 22, 1786 (1980).

[4]. S.V. Poprizhenko and D. Bauer, J. Mod. Opt. 55, 2573 (2008); S.V. Popruzhenko,

V.D. Mur, V.S. Popov and D. Bauer, Phys. Rev. Lett. 101, 193003 (2008).

[5]. T-M. Yan and D. Bauer, Phys. Rev. A 86, 053403 (2012).

[6]. Adrian N. Pfeiffer, Claudio Cirelli, Mathias Smolarski et al., Nature Physics **8**, 76 (2011); Adrian N. Pfeiffer, Claudio Cirelli, Mathias Smolarski, Ursula Keller, Chemical Physics **414**, 84 (2013).

LASING WITHOUT INVERSION: UNFORSEEN CONSEQUENCES OF LASER FILAMENTATION

D. Kartashov¹, S. Haesler¹, A. Pugzlys¹, A. Baltuska¹, M. Spanner², S. Patchkovskii², F. Morales³, M. Richter³, O. Smirnova³, <u>M. Ivanov³</u>

¹ Photonics Institute, Vienna University of Technology, Gusshausstrasse 27/387, A-1040 Vienna, Austria

² National Research Council of Canada, Ottawa, Ontario, K1A 0R6 Canada

³ Max-Born Institute for Nonlinear Optics and Short Pulse Spectroscopy,

Max-Born-Strasse 2A, D-12489 Berlin, Germany

m.ivanov@imperial.ac.uk

We consider a typical situation which happens during filamentation: the combination of ionization followed by electronic and rotational excitation. Air is mostly made of nitrogen molecules, and ionization naturally leads to the population of the ground X and excited electronic A and B states of the nitrogen ion. Typically, the number of the ground X state nitrogen ions significantly exceeds the number of electronically excited A and B states produced by strong-field ionization. However, filamentation also generates a very broad spectrum, which enables one-photon electronic excitations in the ion and naturally leads to the population in the e.g. excited B state approaching that in the ground X state of the nitrogen ion. Finally, another natural consequence of the filamentation process is that the molecules and their ions are impulsively aligned by the laser pulse, with periodic rotational revivals of the alignment on the picoseconds time scale. Difference in rotational constants between the X and B states ensures that revivals do not happen at the same time. In particular, there are temporal windows, lasting about 100 fs, when the *B* state molecules are well aligned while the *X* state molecules are not. During these windows, emission for the parallel B-X transition transiently dominates absorption even if the total number of B state molecules is less than in the X state, creating conditions for lasing. The exact conditions at which lasing becomes possible depend on the degree of molecular alignment, and for room-temperature gas the population in the excited B state should be about 2/3 of that in the X state. Note that transient population inversion exists only between coherent superpositions of the rotational states, not for the pairs of individual rotational states.

ГЕНЕРАЦИЯ ВЫСШИХ ГАРМОНИК В ЛАЗЕРНОЙ ПЛАЗМЕ

Р. А. Ганеев

Saitama Medical University, Advanced Laser Medical Center, Saitama, Japan ganeev@saitama-med.ac.jp

Представлен обзор исследований генерации высших гармоник (ГВГ) в плазме при лазерной абляции различных материалов импульсами с частотой повторения 1 кГц. Эти эксперименты продемонстрировали, что в случае 1 кГц лазеров, наряду с кардинальным увеличением средней генерируемой мощности гармоник, появляется возможность изучения ряда процессов, которые невозможно исследовать в случае использования лазерных систем с малой частотой следования импульсов.

Предложенный в работе [1] метод вращающегося цилиндра позволил решить принципиальные вопросы стабильности плазмообразования при большой частоте следования импульсов, что обеспечило эффективную ГВГ в различных плазменных формированиях. В частности, он (а) значительно повысил стабильность плазменных гармоник, (б) позволил избежать перекрывание пути прохождения лазерного излучения и гармоник при очень близком расположении мишени относительно оси распространения фемтосекундного импульса и (в) позволил эффективно использовать порошкообразные материалы для абляции и плазменной ГВГ.

В этих исследованиях часть нескомпрессированного излучения титансапфирового лазера (200 мкДж, 8 пс, 780 нм, 1 кГц) использовалась для создания плазмы на поверхности вращающегося стержня. Другая часть излучения этого лазера после двойной компрессии (250 мкДж, 3,5 фс, 780 нм, 1 кГц) с задержкой 35 нс проходила через плазменный факел.

Стабильная генерация гармоник реализовалась при вращающейся мишени. На рис. 1а показано, что остановка вращения алюминиевой мишени вела к резкому снижению эффективности преобразования в гармоники. Это изменение было следствием резкого ухудшения плазмообразования при абляции одной и той же точки мишени импульсами с высокой частотой повторения. Снижение эффективности преобразования в гармоники на один порядок величины происходило за промежуток времени около 1 – 2 секунд (т.е. через 1000 – 2000 импульсов).

Преимущество вращающихся мишеней наглядно продемонстрировано на рис. 16, где показана зависимость стабильности пикосекундной ГВГ от количества лазерных импульсов. Эти эксперименты показали, что гармоники могут стабильно генерироваться в данных условиях в течение длительного промежутка времени (по крайней мере 20 минут, что соответствовало более чем 1 миллиону импульсов лазерной системы). Этого улучшения в стабильности гармоник было достаточно для анализа ряда процессов [2-8], на описании одного из которых мы остановимся более подробно. Речь пойдет о наблюдавшейся интерференции квантовых траекторий [2] в условиях экспериментов, описанных выше.



Рис. 1. (а) Уменьшение эффективности преобразования в гармоники в плазме при остановке вращения алюминиевого стержня. (б) Стабильная ГВГ при абляции вращающейся мишени.



Рис. 3. Зависимость спектра гармоник от положения алюминиевой плазмы относительно плоскости фокусировки преобразуемого излучения (а) – (д).

ГВГ может служить инструментом для анализа различных процессов, протекающих во временном интервале между ионизацией и рекомбинацией электрона. В данном случае речь будет идти 0 различных траекториях электронов, при которых реализуется ГВГ. Поскольку две траектории ускоренного И рекомбинирующего электрона (т.н. короткая И длинная траектории), ответственные за ГВГ, приводят к одному и тому процессу (генерации же гармоник), экспериментах в возможно наблюдение различие фаз одной и той же гармоники, реализованной двумя разными траекториями этого электрона. Результирующая разница фаз

этих двух путей генерации гармоник должна проявляться в виде их интерференции.

Относительный вклад короткой и длинной траекторий электронов в генерацию гармоник может варьироваться путем изменения позиции плазменного факела относительно плоскости фокусировки преобразуемого импульса (рис. 2). Другими параметрами, влияющими на спектральную и амплитудную формы преобразованных импульсов, являются чирп лазерного излучения, концентрация плазмы и интенсивность лазерного излучения.

Использование 1 кГц лазеров позволило также исследовать такие процессы как двухцветная накачка плазмы для увеличения эффективности ГВГ и генерации четных гармоник [3], ГВГ в графитовой плазме [4] и в плазме, содержащей фуллерены [5], а также провести сравнительные эксперименты по генерации гармоник в газах и плазменных факелах [6] и резонансному усилению одиночных гармоник [7,8]. Анализ этих исследований показывает, что новые методы оптимизации процесса плазменной ГВГ значительно увеличивают возможности использования когерентного коротковолнового излучения в связи с улучшением ряда характеристик гармоник в лазерной плазме, генерируемой импульсами с высокой частотой повторения.

Автор благодарит J. P. Marangos за представленную возможность проведения этих исследований, а также выражает признательность Фонду Мария Кюри за финансовую поддержку.

[1]. C. Hutchison, R. A. Ganeev, T. Witting, F. Frank, W. A. Okell, J. W. G. Tisch, and J. P. Marangos, Opt. Lett. 37, 2064 (2012).

[2]. R. A. Ganeev, C. Hutchison, T. Siegel, A. Zaïr, and J. P. Marangos, Phys. Rev. A 83, 063837 (2011).

[3]. R. A. Ganeev, C. Hutchison, A. Zaïr, T. Witting, F. Frank, W. A. Okell, J. W. G. Tisch, and J. P. Marangos, Opt. Express 20, 90 (2012).

[4]. 4.R. A. Ganeev, T. Witting, C. Hutchison, F. Frank, P. V. Redkin, W. A. Okell, D. Y. Lei, T. Roschuk, S. A. Maier, J. P. Marangos, and J. W. G. Tisch, Phys. Rev. A 85, 015807 (2012).

[5]. R. A. Ganeev, C. Hutchison, T. Witting, F. Frank, S. Weber, W. A. Okell, E. Fiordilino, D. Cricchio, F. Persico, A. Zaïr, J. W. G. Tisch, and J. P. Marangos, J. Opt. Soc. Am. B 30, 7 (2013).

[6]. R. A. Ganeev, C. Hutchison, T. Witting, F. Frank, W. A. Okell, A. Zaïr, S. Weber, P. V. Redkin, D. Y. Lei, T. Roschuk, S. A. Maier, I. López-Quintás, M. Martín, M. Castillejo, J. W. G. Tisch, and J. P. Marangos, J. Phys. B: At. Mol. At. Phys. 45, 165402 (2012).

[7]. R. A. Ganeev, V. V. Strelkov, C. Hutchison, A. Zaïr, D. Kilbane, M. A. Khokhlova, and J. P. Marangos, Phys. Rev. A 85, 023832 (2012).

[8]. R. A. Ganeev, T. Witting, C. Hutchison, F. Frank, M. Tudorovskaya, M. Lein, W. A. Okell, A. Zaïr, J. P. Marangos, and J. W. G. Tisch, Opt. Express 20, 25239 (2012).

ИК СПЕКТРОСКОПИЯ БЛИЖНЕГО ПОЛЯ ПЛЕНОК НАНОМЕТРОВОЙ ТОЛЩИНЫ

<u>Е.А.Виноградов</u>, Н.Н.Новикова, В.А.Яковлев Федеральное Государственное Бюджетное Учреждение Науки Институт спектроскопии РАН, ул. Физическая 5, г.Троицк, г.Москва, 142190 evinogr@isan.troitsk.ru

Для использования тонких пленок широкозонных полупроводников в различных приложениях, в том числе и для оптоэлектроники, требуется знать их физические свойства. В большинстве случаев свойства пленок сильно отличаются от свойств объемных материалов, из которых они изготовлены. Для исследования физических (оптических) свойств сверхтонких (нанометровых) пленок до сих пор нет спектрометров с необходимой фотометрической точностью. В ряде случаев для определения физических параметров нанопленок полезно использовать спектроскопию поверхностных поляритонов. Поверхностные поляритоны (ПП) являются нерадиационными электромагнитными возбуждениями на границе раздела двух сред, распространяющимися вдоль границы раздела, если диэлектрические проницаемости контактирующих веществ имеют разные знаки [1-3]. Поле ПП концентрируется непосредственно у границы раздела и экспоненциально убывает с расстоянием от интерфейса (ближнее поле), так что ПП очень чувствительны к характеристикам интерфейса. В силу этого спектроскопия ПП может быть уникальным источником информации о физических свойствах сверхтонких пленок на поверхности монокристаллов. Если частота оптических фононов пленки попадает в область существования ПП подложки, то, в силу резонанса между ними, возникает расщепление и сдвиг спектров поглощения ПП подложки. Из этих экспериментальных данных можно восстановить все константы диэлектрической проницаемости пленки и ее толщину, и тем самым характеризовать свойства пленки. Возникающая при этом щель в дисперсионных кривых ПП подложки пропорциональна корню квадратному из толщины пленки, что позволяет измерять толщину и очень тонких пленок [1-3].

В докладе обсуждаются экспериментальные результаты по исследованию оптических свойств пленок MgO (толщиной 10, 30, 100 и 300 nm) [2] и пленок AlN (толщиной 40 и 400 nm) на сапфире [3]. Спектры ПП измерялись в режиме

31

нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО) на ИК-Фурье спектрометре IFS66v (Брукер), а спектры внешнего (в дальнем поле) отражения при углах близких к нормальному падению.

В спектрах отражения (рис.1) пленки MgO толщиной 10 и 30 нм не видны, а пленки толщиной 100 и 300 нм проявляются только в низкочастотной области (вблизи 400 см⁻¹) благодаря резонансу TO фонона пленки с низкочастотным TO фононом сапфира.

На рис.2 и 3 представлены спектры ближнего поля при различных углах внутри призмы НПВО для сапфира и сапфира с пленкой MgO толщиной 100нм.

Высокочастотная полоса поглощения в спектрах НПВО сапфира обусловлена ПП границы раздела сапфир-вакуум. Зависимость частоты этой полосы от угла падения света в призме дает дисперсию ПП.

Как видно из рис.3 пленка MgO радикально изменяет спектр ПП сапфира за счет резонанса ПП сапфира с оптическим фононом пленки MgO. Это взаимодействие приводит к расщеплению высокочастотной ветви ПП сапфира вблизи частоты 700 см⁻¹. Из угловой зависимости спектров отра-



Рис. 1. Спектры отражения пленок MgO толщиной 10, 30, 100 и 300 нм на сапфире при нормальном падении в дальнем поле [2].



Рис. 2 Спектры НПВО сапфира для четырех углов падения света в призме KRS-5. (Спектры сдвинуты вдоль оси у, чтобы избежать их перекрытия).

жения в режиме НПВО восстанавливалась дисперсия ПП сапфира с пленкой. Она сравнивалась с дисперсией ПП, рассчитанной с использованием параметров диэлектрической проницаемости сапфира (найденными из дисперсионного анализа спектров внешнего отражения) при подгонке параметров диэлектрической проницаемости пленки, которые определялись лучшим совпадением рассчитанной дисперсии ПП с экспериментальными частотно-угловыми спектрами. На рис.4 представлены дисперсионные кривые ПП пленки MgO толщиной 10 нм на сапфире, которую в спектрах дальнего поля было не видно совсем. Удивительно, результаты исследований показали, что оптические константы пленок MgO толщиной 10 и 300 нм оказались очень близкими к таковым для объемного MgO, в отличие от пленок толщиной 30 и 100нм.

Итак, исследованы резонансы ПП подложки с оптическими фононами пленок, измерено расщепление дисперсионных кривых ПП. Подтверждено, что это расщепление пропорционально корню квадратному из толщины пленки. Определены константы диэлектрических проницаемостей исследованных пленок.

Авторы благодарны G.Rossetto, A. Sartori, M. Bolzan (Istituto di Chimica Inorganica e delle Superfici, Padova, Italy) за приготовление образцов с пленками MgO на сапфире, Константину Журавлеву, Владимиру Мансурову и Тимуру Малину из Института физики полупроводников им A.B.Pжанова CO PAH, а также S.S. Ng, Z. Hassan, H. Abu Hassan (School of Physics, University Sains Malaysia) за приготовление образцов с пленками



Рис. 3 Спектры НПВО пленки MgO толщиной 100 нм на сапфире для четырех углов падения света в призме KRS-5. (Спектры сдвинуты вдоль оси у, чтобы избежать их перекрытия).



Рис.4. Дисперсия поверхностных поляритонов структуры «пленка MgO толщиной 10 нм на сапфире». Сплошные кривые вычислены с использованием оптических констант массивного MgO [2] и сапфира.

AlN на сапфире. Работа поддержана грантом Программы фундаментальных исследований ОФН РАН «Физика новых материалов и структур» и грантом РФФИ 11-02-00325а.

[1]. G.N.Zhizhin, M.A.Moskaleva, E.A.Vinogradov, V.A.Yakovlev. Appl.Spectr.Rev., 18(2), 171-263 (1982-1983).

[2]. V.A.Yakovlev, N.N.Novikova, E.A.Vinogradov, G.Rossetto, A.Sartori,M.Bolzan. Journal of Nanoparticle Research, 2011, 13(11), pp.5841-5846.

[3]. V.A. Yakovlev, N.N. Novikova, E.A. Vinogradov, S.S. Ng, Z. Hassan, H. Abu Hassan. Physics Letters A 373 (2009) 2382–2384.

ТРЕХФОТОННАЯ ЛАЗЕРНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ ХОЛОДНЫХ РИДБЕРГОВСКИХ АТОМОВ Rb

Д.Б.Третьяков¹, В.М.Энтин¹, Е.А.Якшина^{1, 2, 3}, И.И.Бетеров^{1, 2}, И.И.Рябцев^{1, 2, 3} ¹ Институт физики полупроводников СО РАН, 630090, Новосибирск, Россия ² Новосибирский государственный университет, 630090, Новосибирск, Россия ³ Российский квантовый центр, Сколково, Московская обл., 143025, Россия ryabtsev@isp.nsc.ru

Лазерное возбуждение холодных ридберговских атомов с высоким спектральным разрешением требуется в экспериментах по квантовой информатике и спектроскопии дальнодействующих взаимодействий.

В нашей работе [1] мы показали теоретически, что трехфотонное лазерное возбуждение ридберговских состояний тремя различными лазерными лучами может быть реализовано в звездообразной геометрии, которая одновременно подавляет эффект отдачи и доплеровское уширение. Аналитические и численные расчеты для схемы возбуждения $5S \rightarrow 5P \rightarrow 6S \rightarrow nP$ в атомах Rb продемонстрировали, что, по сравнению с одно- и двухфотонным лазерным возбуждением, трехфотонное возбуждение обеспечивает гораздо меньшую ширину линии и большее время когерентности, как для ансамблей холодных атомов, так и для горячих атомов в газовой ячейке, при условии, что промежуточные однофотонные резонансы трехфотонного перехода имеют отстройку большую, чем соответствующие доплеровские уширения промежуточных переходов. Этот метод может быть использован для улучшения точности квантовых операций с ридберговскими атомами и спектроскопических измерений.

В настоящем докладе мы представляет экспериментальные результаты по трехфотонной спектроскопии переходов $5S \rightarrow 5P \rightarrow 6S \rightarrow nP$ в холодных атомах Rb. На первой ступени возбуждения с длиной волны 780 нм использовалось излучение полупроводникового лазера с внешним резонатором, на второй ступени с длиной волны 1367 нм – телекоммуникационного полупроводникового DFB-лазера, а на третьей ступени с длиной волны 743 нм – непрерывного кольцевого титан-сапфирового лазера. Ридберговские атомы регистрировались методом селективной полевой ионизации с разрешением по числу атомов [2].

34
Первые эксперименты [3] выполнялись в работающей магнитооптической ловушке (МОЛ), где первая ступени возбуждения реализовывалась охлаждающим лазером с красной отстройкой частоты δ_1 =-(10-20) МГц. Частота лазера второй ступени была настроена на центр резонанса 5*P*→6*S*, а частота лазера третьей ступени сканировалась для записи спектров возбуждения ридберговских состояний 37*P* и 77*P*. Спектры демонстрировали два пика разной амплитуды, разнесенные по частоте на δ_1 (Рис.1). Эти пики соответствовали когерентному трехфотонному и некогерентному трехступенчатотму возбуждению вследствие наличия двух возможных путей возбуждения через одетые промежуточные состояния. Для описания этих спектров была построена теоретическая модель на основе оптических уравнений Блоха. Хорошее согласие с экспериментом достигалось при введении в модель конечной ширины линий лазеров и других источников уширений, включая дальнодействующие взаимодействия (Рис.1).



Рис.1. Спектры трехфотонного возбуждения ридберговских состояний 37*P* и 77*P* в атомах Rb. Черные кривые – эксперимент, красные кривые – теория. Параметры теоретической модели на каждом графике указаны слева.

В последующих экспериментах нами были уменьшены ширины линий лазеры и реализованы измерения в выключенной МОЛ. Лазер первой ступени имел синюю отстройку δ_1 =+85 МГц. В этом случае при больших частотах Раби наблюдался узкий пик когерентного трехфотонного возбуждения, а пик некогерентного трехступенчатого возбуждения был подавлен. В докладе будут обсуждаться особенности эксперимента по когерентному трехфотонному возбуждению ридберговских атомов. Нами также исследовалась статистика трехфотонного лазерного возбуждения и регистрации ридберговских атомов. Дальнодействующие взаимодействия между ридберговскими атомами могут приводить к дипольной блокаде, которая уменьшает вероятность возбуждения более чем одного ридберговского атома в мезоскопическом атомном ансамбле. Разрешение по числу атомов в нашей системе регистрации позволило нам изучить спектры многоатомного возбуждения, которые будут также обсуждаться в докладе.

Работа поддержана РФФИ (грант №13-02-00283), программами РАН и СО РАН, президентским грантом МК-7060.2012.2, проектом EU FP7 IRSES "COLIMA" и Российским квантовым центром.

[1] I.I.Ryabtsev et al., Phys. Rev. A 84, 053409 (2011).

[2] I.I.Ryabtsev et al., Phys. Rev. Lett. 104, 073003 (2010).

[3] В.М.Энтин и др., ЖЭТФ 143, 831-843 (2013).

ОПТИЧЕСКИЕ СТАНДАРТЫ ВРЕМЕНИ И ЧАСТОТЫ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ НА ХОЛОДНЫХ АТОМАХ И ИОНАХ

В.Г. Пальчиков

141570, Менделеево, Московская обл., ФГУП «ВНИИФТРИ» vitpal@mail.ru

Последние несколько лет ознаменовались существенными достижениями в спектроскопии сверхвысокого разрешения и фундаментальной метрологии в части повышения точности, улучшения стабильности и воспроизводимости стандартов частоты в оптическом диапазоне. Точностью и стабильность воспроизведения размеров единиц времени и частоты в настоящее время достигла уровня 10^{-17} – 10^{-18} .

Среди перспективных приложений оптических стандартов можно отметить применение в глобальной спутниковой навигационной системе; атомные часы могут открыть новые возможности в геодезии и удаленной диагностике атмосферы; чувствительность высокостабильных и точных оптических часов позволяет использовать их для прямого измерения земных геоидов (гравитационная эквипотенциальная поверхность) с высоким пространственным разрешением на уровне нескольких сантиметров; длительные измерения изменяемого локального гравитационного потенциала Земли имеют важную перспективу мониторинга сезонных и долговременных тенденций движения ледниковых масс, океанических течений, а также изменения массы Мирового океана; использование оптических часов на Земле и в космосе в рамках ГЛОНАСС откроет возможность существенного повышения точности частотно-временных и пространственных определений; точные измерения частоты могут позволить предложить высокочувствительные тесты фундаментальных теорий (например, общей теории относительности).

В рамках Федеральной целевой программы ГЛОНАСС в ФГУП «ВНИИФТРИ» проводятся работы по созданию оптического стандарта частоты на лазерной решетке. Эти работы были начаты в период программы ГЛОНАСС на 2007–2011 гг.; исследования по разработке ионного оптического стандарта стали проводиться в рамках программы ФЦП ГЛОНАСС 2012-2020 гг. Следует отме-

37

тить, что именно на основе использования данного стандарта в США были получены рекордные на сегодняшний день значения для точности воспроизведения единицы частоты (8×10^{-18}). Проводимая в ФГУП «ВНИИФТРИ» работа направлена на исследование возможности создания оптического стандарта частоты нового поколения на ионах алюминия с точностью воспроизведения размеров единиц на уровне $< 10^{-17}$.

В настоящем докладе представлен обзор современного состояния в данной области исследований, детально изложен подход к разработке оптического стандарта частоты на ионах алюминия по следующим направлениям:

- лазерное охлаждение ионов в линейной ловушке Пауля;

- реализация режима Лэмба - Дике;

- лазерное и симпатическое охлаждение;

 – спектроскопия ионов как процесс манипулирования квантовой информацией на основе квантовой логики.

В заключительной части доклада рассмотрены перспективы создания оптических стандартов частоты на основе ядерных переходов в ядрах 229 Th. Как и в атомных часах, уникальный изомерный ядерный переход 7.6 ± 0.5 эВ [1], т.е. высокодобротный осциллятор, может быть доступен при использовании существующей лазерной техники, с дополнительным преимуществом, обусловленным уменьшением чувствительности перехода к окружению из-за экранирования атомными электронами.

[1]. B.R. Beck et al., Phys. Rev. Lett., 98, 142501 (2007)



Тезисы устных докладов



ON PHOTOIONIZATION IN HARD X-RAY REGION

M. Ya. Amusia^{1, 2}, L. V. Chernysheva², and V. G. Yarzhemsky^{3, 4}

¹Racah Institute of Physics, the Hebrew University, Jerusalem, 91904, Israel

² Ioffe Physical-Technical institutes, RAS, St. Petersburg, 194021, Russia ³ Kurnakov institute of General and Inorganic Chemistry, Moscow, 119991, Russia

⁴ Moscow institute of Physics and Technology, Moscow Region, 141700, Russia

amusia@vms.huji.ac.il

It is demonstrated that the results of recent experiments on ionization of 3p and 3s electrons in Ni film and solid body [1] cannot be reproduced in the frames either Hartree-Fock or the random phase approximation with exchange (RPAE). The difference between experimental data and calculation results is so big that from theory side it requires inclusion of huge and yet not understood effects. It requires experimental efforts to clarify the big difference obtained for films and crystal samples.

Recently the first measurements were performed of the ionization crosssection by photons in the energy range $\omega = 2 - 9keV$ on 3s and 3p subshells of Ni thin films and crystals [1]. The results were compared to old calculations [2], and an essential difference, particularly for 3s subshell, in the high frequency region was disclosed. The measured cross-section is smaller than the calculated by a factor 2.5-3. A surprising prominent difference was observed between thin films and crystals: ionization potentials of 3s and 3p subshells are much bigger than the solid state binding energies and much smaller than photon energy ω .

These experiments are of special interest since until recently our knowledge on the high ω photoionization cross-section was based only upon theoretical considerations. Moreover, it was a general belief that with ω growth the crosssection acquires textbook asymptotic behavior $\sigma_{nl}(\omega) = A_{nl} / \omega^{l+7/2}$, where *nl* are the principal quantum number and angular momentum of the ionized subshell.

It was demonstrated in [3] that the RPAE corrections remain important even in the high photon energy limit, so the presented above simple hydrogenlike formula is non-valid. It was shown there that the RPAE corrections to all but ssubshells are non-negligible at any high, but non-relativistic values of ω . Therefore, it was quite natural to apply the high ω RPAE approach developed in [3] in an attempt to reproduce the data from [1].

The experimentally measured in [1] is the differential in angle photoionization cross section $d\sigma_{nl}(\omega)/d\Omega$ at emission angle $\theta = 0$. Calculations of the cross-section and angular anisotropy parameters were performed for subshells nl = 3s; 3p. In fact, experimentally measurement was not the photoionization cross-section $\sigma_{3s,3p}(\omega)$, but $\sigma_{3s,3p}(1 + \beta_{3s,3p})$, where $\beta_{3s,3p}$ are the dipole angular anisotropy parameters. To derive the photoionization cross-sections in [1], the parameters $\beta_{3s,3p}$ were taken from [2] and [4]. They vary with ω inessential, around 1 for β_{3p} and very close to 2 for β_{3s} .

We have calculated the cross sections and angular anisotropy parameters, in the frame of one electron HF approach and in RPAE. The dipole parameters and cross-sections are almost the same in HF and RPAE, signaling that RPAE corrections are small. Our calculations show an essential deviation from experiment, with its big difference between photoionization of Ni thin films and crystal samples. As to calculations, they were performed for an isolated Ni atom.

Comparison between theory and experiment demonstrates reasonable agreement for 3p subshell. For 3s subshell, the relative difference between theory



Fig. 1. Calculation and measurements [1] data for the ratio $\sigma_{3s}(1+\beta_{3s})/\sigma_{3p}(1+\beta_{3p})$ in Ni film and crystal.

and experiment is steadily and very slow increasing with the photon energy growth. This difference is big, the experimental value being smaller than the calculated one by a factor of 2.5-3.

Fig.1 shows the data $\sigma_{3s}(1+\beta_{3s})/\sigma_{3p}(1+\beta_{3p}),$

both measured [1] and calculated. On the same Fig. 1 along with our calculations we

present results derived from [2] and in HF - Slater approximation [4]. As is mentioned

above, we put $\beta_{3s} = 2$. In the entire considered photon energy region the ratio increases. Since the role of angular anisotropy parameters in the presented in Fig. 1 ratio is important but depends upon photon energy weakly, the linear increase of $\sigma_{3s}(1+\beta_{3s})/\sigma_{3p}(1+\beta_{3p})$ in the region $\omega = 1 \div 10 KeV$ reflects the linear increase of the ratio σ_{3s}/σ_{3p} in the hydrogenlike approximation. It is seen that our results as well as that from [4] are considerably higher than that of [2]. The small role of electron correlations is clearly seen. The experimental data are deviating from the linear low. Starting from 5 KeV the data for Ni film increases much faster than a simple, $\sim \omega$, function. The same is valid for the crystal Ni data, if imagine a smooth curve that goes via the experimental Ni bulk points. It is seen that the RPAE results are in general closer to thin film data. The results for crystal Ni up to 6 KeV are closer to the data of [2] than to RPAE and only at higher ω lie closer to RPAE.

Neither HF nor RPAE are able to describe the experimental data for the crosssections or their ratio. Since the dynamic correlations rapidly die out with photon energy increase, these correlations cannot be responsible for the observed difference.

On the way out, the photoelectron can collide with the residual ion inelastic, or even lead to collective excitation of the target. For high energy photoelectrons they would contribute similarly for 3s and 3p photoionization and the corresponding effect would decrease as 1/E. Obvious, this is not what was observed in [1].

The strong influence of the shape of the sample, namely, whether it is a crystal or a film surprises. For levels with binding energy of 110 eV (for 3s) and 67 eV (for 3p) a strong effect of location of neighboring atoms looks almost improbable.

Entirely, the investigation of atomic photoionization in the tens keV region requires and deserves further efforts and clarifications, theoretical and experimental.

- [1]. A.M. Gorgoi, F. Schäfers, S. Svensson, N. Mårtensson, J. Electron Spectroscopy & Related Phenomena (2013) <u>http://dx.doi.org/10.1016/j.elspec.2013.01.004</u>
- [2]. J.H. Scofield, Lawrence Livermore Nat. Lab. Report UCRL-51326 (1973).
- [3]. M.Ya. Amusia, N.B. Avdonina, E.G. Drukarev, S.T. Manson, and R.H. Pratt. Phys. Rev. Lett. 85, 4703 (2000).
- [4]. M.B. Trzhaskovskaya, V.I. Nefedov, and V.G. Yarzhemsky, At. Data Nuclear Data Tables, 82, 257 (2002).

УГЛОВЫЕ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ФОТОЭЛЕКТРОНОВ ПРИ ИОНИЗАЦИИ ПОЛЯРИЗОВАННЫХ АТОМОВ

Ю. А. Климова, С. И. Мармо, А. В. Меремьянин

Воронежский государственный университет meremianin@phys.vsu.ru

Угловые распределения фотоэлектронов (ADP) содержат наиболее полную информацию о процессе ионизации, поскольку они более чувствительны, чем полные сечения, к динамике процесса и состояниям (свободно ориентирующиеся или поляризованные) атомов. В частности, в ADP проявляются эффекты, отсутствующие в полных, проинтегрированных по углам вылетевшего электрона сечениях. Одним из таких эффектов, является линейный магнитный дихроизм (LMD) — изменение ADP при инверсии поляризованной атомной мишени, которое наблюдается даже в случае линейно поляризованной ионизующей волны.

К настоящему времени в литературе достаточно подробно исследована однофотонная ионизация поляризованных атомов (см., например, обзор [1]), тогда как для сечений многофотонной ионизации получены лишь общие, весьма громоздкие выражения [2]. В настоящей работе предложен подход, позволяющий разделить динамические и кинематические части в амплитуде многофотонной ионизации и представить сечение в инвариантной (не зависящей от системы координат) векторной форме, наиболее удобной для анализа поляризационных эффектов.

Мы ограничиваемся приближением валентного электрона и пренебрегаем здесь релятивистскими эффектами (такие приближения вполне обоснованы для легких атомов щелочных металлов). Рассмотрим ионизацию чистого поляризованного состояния $|n_0l_0m_0\rangle$ (где l_0 — орбитальное квантовое число, m_0 — магнитное квантовое число, задающее проекцию орбитального момента на ось поляризации атома с единичным вектором **a**) линейно поляризованной волной с частотой ω и вектором поляризации **e**. Сечение *N*-фотонной ионизации

$$\frac{d\sigma^{(N)}}{d\Omega_{\mathbf{p}}} \propto \left| M_{l_0 m_0}^{(N)} \right|^2 \tag{1}$$

определяется амплитудой $M_{l_0m_0}$ N-фотонного перехода из начального состояния в непрерывный спектр. Используя стандартные методы квантовой теории углового момента и технику редукции биполярных гармоник [3], можно привести амплитуду к виду

$$M_{l_0 m_0}^{(N)} = A_e^{(N)}(x) Y_{l_0 m_0}(\mathbf{e}) + A_n^{(N)}(x) Y_{l_0 m_0}(\mathbf{n}),$$
(2)

где $x = (\mathbf{e} \cdot \mathbf{n})$, $\mathbf{n} = \mathbf{p}/p$, \mathbf{p} — импульс фотоэлектрона, а скалярные коэффициенты $A_e^{(N)}$ и $A_n^{(N)}$ выражаются через производные полиномов Лежандра $d^k P_l(x)/dx^k$, радиальные матричные элементы и фазовые сдвиги атомного потенциала. Представление амплитуды (2) позволяет записать сечение через скалярные и смешанные произведения векторов задачи $\mathbf{a}, \mathbf{e}, \mathbf{n}$ и установить, что при произвольном N сечение состоит из регулярной и дихроичной частей,

$$\frac{d\sigma^{(N)}}{d\Omega} = \frac{d\sigma^{(N)}_{reg}}{d\Omega} + \frac{d\sigma^{(N)}_{dichr}}{d\Omega}.$$
(3)

Здесь дихроичный член $d\sigma_{dichr}^{(N)}/d\Omega \propto \operatorname{sign}(m_0)$ ($\mathbf{a} \cdot [\mathbf{e} \times \mathbf{n}]$) меняет знак при замене $m_0 \to -m_0$ и, следовательно, описывает эффект LMD; регулярная часть сечения $d\sigma_{reg}^{(N)}/d\Omega$ не зависит от знака m_0 . При небольших N для коэффициентов $A_e^{(N)}$ и $A_n^{(N)}$ в (2) и, соответственно, для регулярной и дихроичной частей сечения нетрудно найти явные выражения, например, в [4] рассчитано сечение трехфотонной ионизации (N = 3). Проведенные (с использованием модельного потенциала Фьюса) в [4] численные оценки ADP при трехфотонной ионизации 2p-состояния Li показывают, что относительная величина эффекта LMD может достигать нескольких десятков процентов, что, очевидно, делает возможным его экспериментальное наблюдение.

- [1] F.J. Wuilleumier, M. Meyer, J. Phys. B **39** R425 (2006).
- [2] M.Ya. Agre, V.D. Ovsiannikov, L.P. Rapoport, Las. Phys. 3 719 (1993).
- [3] N.L. Manakov, S.I. Marmo, A.V. Meremianin, J. Phys. B 29 2711 (1996).
- [4] Yu.A. Klimova, S.I. Marmo, A.V. Meremianin, Phys. Lett. A 377 1439 (2013).

НЕДИПОЛЬНЫЕ ЭФФЕКТЫ В НЕЛИНЕЙНЫХ ФОТОПРОЦЕССАХ В АТОМАХ

<u>А.Н. Грум-Гржимайло</u>¹, Е.В. Грызлова¹, Е.И. Кузьмина^{1,2}, С.И. Страхова¹, А.С. Четверкина^{1,2}

¹ 119991, г. Москва, Ленинские горы, НИИЯФ имени Д.И. Скобельцына МГУ имени М.В. Ломоносова

² 119991, г. Москва, Ленинские горы, Физический факультет

МГУ имени М.В. Ломоносова

algrgr1492@yahoo.com

Рентгеновские лазеры на свободных электронах (РЛСЭ) являются мощным инструментом для исследования взаимодействия высокочастотного излучения с атомами в нелинейном режиме [1]. До недавнего времени нелинейные процессы наблюдались в оптическом и инфракрасном диапазонах, где применение дипольного приближения хорошо обосновано. Однако при энергиях фотонов, характерных для РЛСЭ, в экспериментах с источниками синхротронного излучения третьего поколения по однофотонной ионизации наблюдались заметные недипольные эффекты [2]. Естественно ожидать проявления этих эффектов в нелинейных фотопроцессах. Первые теоретические расчеты [3] предсказывают заметную величину этих эффектов. Теория нелинейных фотопроцессов с выходом за рамки дипольного приближения находится в стадии становления. Здесь мы рассматриваем, на примере атомов инертных газов, два простейших нелинейных процесса, в которых можно ожидать заметного вклада от более высоких мультиполей излучения: последовательную двухфотонную двойную ионизацию (рис. 1а) и двухчастотную двухфотонную ионизацию в надпороговом режиме (рис. 1b). Оба процесса уже наблюдались экспериментально, однако при условиях, когда вкладом от недипольных поправок можно пренебречь. В первом случае реакция проходит под действием двух фотонов из одного импульса РЛСЭ в две ступени через образование промежуточного выстроенного однократно заряженного иона. Во втором случае РЛСЭ производит ионизацию, а оптический лазер вызывает вынужденное поглощение или испускание второго фотона у_{орt}, приводя к фотоэлектронным пикам е_{SB} с энергиями, соответствующими боковым частотам.

Доминирующие поправки к дипольному приближению происходят от интерференции электрических дипольных (Е1) и квадрупольных (Е2) амплитуд фотоионизации, проявляющейся в угловых распределениях фотоэлектронов. При интегрировании по углам вылета фотоэлектронов вклад от интерференционных членов исчезает.



Нами получены общие выражения для угловых распределений и в широкой области энергий рассчитаны соответствующие динамические коэффициенты для ионизации внешней оболочки атомов неона и аргона (процесс на рис. 1а) и ионизации К-оболочки атома неона (процесс на рис. 1b). В качестве примера приведем здесь

Рис. 1. Схема простейших нелинейных процессов в атомах инертных газов с фотонами РЛСЭ.

некоторые результаты для коллинеарных пучков фотонов с однонаправленной линейной поляризацией. Выберем ось Z по направлению линейной поляризации, а ось X по направлению волнового вектора фотонов. В этом случае угловое распределение фотоэлектронов для обоих случаев имеет вид

$$W(\theta,\varphi) = \frac{\sigma_0}{4\pi} \left(1 + \beta_2 P_2(\cos\theta) + \beta_4 P_4(\cos\theta) + \left(\delta + \gamma_2 \cos^2\theta + \gamma_4 \cos^4\theta\right) \sin\theta \cos\varphi \right), \tag{1}$$

где σ_0 – интегральное по углу сечение двойной (рис. 1b) или однократной (рис. 1б) ионизации в дипольном приближении; $P_n(x)$ – полином Лежандра. Параметры β_2 , β_4 характеризуют угловое распределение фотоэлектронов в дипольном приближении, а параметры δ , γ_2 , γ_4 являются результатом интерференции амплитуд Е1 и Е2 переходов. При этом параметры β_4 and γ_4 характерны для нелинейного процесса. Для двойной ионизации (рис. 1а) мы приводим данные по электронам е₂. Недипольные взаимодействия нарушают осевую симметрию относительно направления линейной поляризации и приводят к асимметрии вперед-назад по отношению к направлению лазерных пучков.

На рис. 2 показана асимметрия $A = (I_{forward} - I_{backward})/(I_{forward} + I_{backward})$, где

в числителе стоит разность между числом фотоэлектронов, вылетевших в переднюю и заднюю полусферы, при двойной ионизации атомов неона и аргона. Ре-



Рис. 2. Асимметрия электронов *e*₂ при двойной ионизации атомов аргона (сплошная кривая) и неона (пунктирная кривая) в зависимости от энергии фотонов (см. текст).

зультаты просуммированы по состояниям тонкой структуры $np^{5} {}^{2}P_{3/2,1/2}$ промежуточных ионов и приведены для конечных состояний ионов $np^{4} {}^{3}P$. Для конечных состояний $np^{4} {}^{1}D$ и ${}^{1}S$ асимметрия практически не отличается от приведенной на рис. 2. Расчеты амплитуд проводились в многоконфигурационном приближении Хартри-Фока, аналогичном работе [4]. Полученные значения асимметрии для энер-

гий фотонов, начиная с нескольких сотен эВ доступны для наблюдения на работающих РЛСЭ. Небольшой максимум в асимметрии для аргона в области 45-60 эВ связан с куперовским минимумом в дипольном сечении фотоионизации.

Для однократной ионизации (рис. 1b), мы обнаружили, что недипольные эффекты могут усиливаться за счет дополнительного вынужденного поглощения или испускания фотона γ_{opt} оптического диапазона, взаимодействие которого с атомом описывается в дипольном приближении.

Работа выполнена при поддержке Гранта РФФИ 12-02-01123 и Гранта Президента РФ МК-6509.2012.2.

- [1]. N. Berrah et al., J. Mod. Opt. 57, 1015 (2010).
- [2]. O. Hemmers, R. Guillemin and D.W. Lindle, Radiat. Phys. Chem. 70, 123 (2004).
- [3]. A.N. Grum-Grzhimailo, E.V. Gryzlova and M. Meyer, J. Phys. B 45, 215602 (2012).
- [4]. S. Fritzsche, A.N. Grum-Grzhimailo, E.V. Gryzlova and N.M. Kabachnik, J. Phys. B 41, 165601 (2008).

ФИЗИКА МАЛЫХ МОМЕНТОВ ОТДАЧИ В ДВОЙНОЙ ФОТОИОНИЗАЦИИ ГЕЛИЯ

М.Я. Амусья^{1,2}, <u>Е.Г. Друкарев</u>³, Е.Ζ. Liverts², А.И. Михайлов³
¹ 194021 Санкт-Петербург, Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе
² The Racah Institute of Physics, Hebrew University of Jerusalem,

91904 Jerusalem, Israel

³ 188300, г. Гатчина, Ленинградская обл.,

ФГБУ Петербургский институт ядерной физики

drukarev@thd.pnpi.spb.ru

Ранее при исследовании двойной фотоионизации, т.е. выбивания двух электронов атомной оболочки одним фотоном, обычно вычислялись распределения по характеристикам одного из фотоэлектронов. В настоящей работе мы вычисляем распределения $d\sigma^{2+}/dq^2 d\epsilon$ и $d\sigma^{2+}/dq^2$. Здесь q — импульс отдачи, передаваемый ядру, выражающийся через импульсы фотоэлектронов \mathbf{p}_i и импульс фотона \mathbf{k} как $\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2$; ϵ — энергия одного из фотоэлектронов. Мы рассматриваем большие энергии фотонов ω , существенно превосходящие энергию связи основного состояния, т.е. интересуемся энергиями ω , составляющими, по крайней мере, несколько сотен эВ. При этом предполагаем, что фотоэлектроны допускают нерелятивистмкое описание, т.е. энергия фотона значительно меньше энергии покоящегося электрона 0.5 МэВ.

Эти вычисления были стимулированы недавно проведенной серией экспериментов [1], в которых было показано, что распределение по импульсам отдачи имеет локальный максимум при малых $q \sim 2$ а.е. В этих экспериментах использовались фотоноы с энергиями 450, 800 и 900 эВ. Результат интерпретировался самими авторами эксперимента как доказательство существования специфического квазисвободного механизма двойной фотоионизации, предсказанного мгного лет назад [2].

До публикации работы [2] обсуждались механизмы процесса, включающие обычное выбивание связанного электрона, непосредственно взвимодействующего с фотоном, и требующие передачи ядру большого импульса $q \gg 1$. Квазисвободный механизм (КСМ) основан на том, что система, состоящая из двух свободных электронов, может поглотить фотон, т.е. процесс может идти при q = 0. В КСМ

ядру передается малый импульс $q \sim 1$, и амплитуда не содержит малых факторов, связанных с передачей большого импульса. Однако, КСМ требует специальной кинематики. Он возможен лишь вблизи центра энергетического распределения, т.е. при соотношении энергий фотоэлектронов $\beta = |\varepsilon_1 - \varepsilon_2|/(\varepsilon_1 + \varepsilon_2) \ll 1$. В КСМ фотоэлектроны вылетают в почти противоположных направлениях, $t = (\mathbf{p}_1 \cdot \mathbf{p}_2)/p_1 p_2 \approx -1$. Наконец, КСМ требует выхода за рамки дипольного приближения, и его амплитуда определяется квадрупольными членами взаимодействия электронов с фотонами.

Впоследствии было найдено [3], что КСМ определяется поведением функции основного состояния атома гелия $\Psi(r_1, r_2, r_{12})$ при малых межэлектронных расстояниях $r_{12} = |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$, и для его правильного воспроизведения волновая функция, используемая в вычислениях, должна удовлетворять условию Като: $\partial \Psi(r_1, r_2, r_{12}) / \partial r_{12}|_{r_{12}=0} = \Psi(r_1, r_2, r_{12} = 0) / 2$, которое можно рассматривать как необходимое условие сокращения сингулярностей в уравнении Шредингера для атома гелия.

Мы вычисляем дифференциальные характеристики процесса при малых импульсах отдачи q в ведущем порядке по величине q/p_1 , что соответствует учету ведущих членов разложения по параметру r_{12}/r_i в волновых функциях. Для описания основного состояния атома гелия мы используем волновую функцию, полученную в [4]. Эта функция удовлетворяет условию Като и допускает простую аналитическую аппроксимацию при $r_{12} \rightarrow 0$. Конечное состояние мы описываем произведением нерелятивистских кулоновских функций. Это оправдывается тем, что взаимодействие электронов конечного состояния определяется квадратом параметра $\xi = 1/v$, где v — скорость их относительного движения, и составляет не более 4×10^{-2} при $\omega = 800$ эВ.

Как и ожидалось, распределение $d^2\sigma/dq^2d\beta$ достигает наибольших значений при малых q ~ 1 а.е. Распределение угловых корреляций $d^2\sigma/dt d\beta$ имеет максимум при t, близких к –1, что соответствует вылету фотоэлектронов в противоположных направлениях. Оба распределения быстро спадают с увеличением относительной разницы энергий фотоэлектронов β . Мы получили также распределение по моментам отдачи $d\sigma/dq^2$ и угловые корреляции $d\sigma/dt$. Распределение $d\sigma/dq^2$ имеет локальный максимум при *q* вблизи 1 а.е. Угловые корреляции имеют пик при *t* = -1. Общая картина находится в согласии с результатами эксперимента [1]. К сожалению, способ представления результатов, использованный в [1], лишает нас возможности произвести количественное сравнение.

Исследование КСМ позволяет уяснить поведение волновой функции основного состояния вблизи сингулярной точки слияния электронов. Кроме чисто теоретического интереса это представляется важным для прецизионного вычисления атомных характеристик.

Появление новых мощных источников фотонов открывает дополнительные возможности изучения процессов фотопоглощения. В частности, ожидается более детальное изучение процессов, вызываемых фотонами, несущими энергию порядка 1 кэВ. Мы надеемся, что это даст толчок и более подробному исследованию КСМ. Очень интересно было бы исследование эволюции формы спектральной кривой вблизи ее центра. Другой увлекательной задачей было бы исследование зависимости отношения сечений двойной и однократной фотоионизации от энергии, где КСМ вызывает линейный рост с энергией фотона. Очередной задачей является исследование энергий, соответствующих релятивистским фотоэлектронам, где вклад КСМ в полное сечение становится доминирующим.

- [1]. M.S. Schöffler et al., arXiv: 1207.7181 [physics.atom-ph] (2012).
- [2]. M.Ya. Amusia, E.G. Drukarev, V.G. Gorshkov, and M.P. Kazachkov, J. Phys. B 8, 1248 (1975).
- [3]. T. Suric, E.G. Drukarev, and R.H. Pratt, Phys. Rev. A 67, 022709 (2003).
- [4]. E.Z. Liverts, N. Barnea, Comp. Phys. Com. 182, 1790 (2011).

TOWARDS X-RAY FEL GAS MONITOR DETECTOR

V.E. Chernov¹, D.L. Dorofeev¹, S.V. Elfimov¹, G.E. Gavrilov², A. Gottwald⁵, M. Braune³, <u>H.Kühn³</u>, M. Krumrey⁵, A.A. Markova⁴, M. Richter⁵, Yu.G. Naryshkin², A.A.Sorokin^{3,4}, K.Tiedtke³, B.A. Zon¹

¹ 394006, Voronezh State University, Russia

² Petersburg Nuclear Physics Institute, Orlova Roscha, Gatchina, Leningrad District 188300, Russia

³ Deutsches Elektronen-Synchrotron (DESY), Notkestraße 85, D-22603 Hamburg, Germany

⁴ *Ioffe Physico-Technical Institute, Polytekhnicheskaya 26, 194021 St. Petersburg, Russia*

⁵ Physikalisch-Technische Bundesanstalt, Abbestraße 2-12, D-10587 Berlin, Germany

henning.kuehn@desy.de

On-line diagnostics of photon pulse intensity of the Free-Electron Lasers (FELs) based on a Self-Amplified Spontaneous Emission (SASE) is mandatory for FEL operation and user experiments. This is due to stochastic nature of the SASE process resulting in the pulse-to-pulse intensity fluctuation. In order to monitor photon pulse intensity online and non-destructive with respect to the FEL beam, sophisticated gas monitor detectors (GMDs) have been developed within the framework of a German-Russian collaboration [1]. The GMDs are based on the photoionization of rare gases at low pressure in the range of 10^{-3} hPa to 10^{-2} hPa and the simultaneous detection of generated photoions and photoelectrons by simple metal Faraday cups and in the case of photoins by an open electron multiplier. So far, different types of GMGs have been successfully used in the photon energy from 12eV to 9.8 keV at all existing soft- and X-ray FELs such as FLASH in Germany, FERMI in Italy, LSLC in USA, SCSC in Japan [e.g. 1,2,3]. Recently we developed a new X-ray GMD (XGMD) for European XFEL, the latter will start operation in 2015 and will delivery radiation with the photon energy up to 24 keV. The XGMD have been already successfully tested at the SALA-XFEL in Japan in the photon energy range from 4 keV to 14 keV [4]. However in the hard X-ray regime the operation of XGMD might be affected by the different phenomena mentioned below. Thus, the investigation of the photon-atom interaction is crucial not only from fundamental point of view but also for application of photoionization based detectors.

In general, in the hard X-ray regime photoionization based detectors like the XGMD suffer from the decreasing photoionization cross section and increasing photoelectron kinetic energy of up to few tens keV. Moreover, with increasing photon energy measurements of the photoelectron signal become more and more difficult because an extraction electrode in front of the Faraday cup and the cup itself have to be kept under an extremely high voltage of up to 20 kV to separate the photoelectrons and photoions in the interaction volume of the XFMD. This requires using a high voltage capacitor to separate the detection electrode from read-out electronics. The capacitor might distort a shape of the electron signal resulting in reduction of a temporal resolution of the XGMD. To overcome these challenges we initiated study a new detection concept as a further continuation of the existing German-Russian cooperation. The concept implies to use an inorganic scintillator for the photoelectron detection. The scintillator will be integrated to the XGMD and will convert the high energetic photoelectrons to visible (or ultraviolet) light, which can be easily measured by a commercial photomultiplier without use any high voltage capacitor resulting in improvement of the temporal resolution of the XGMD. Since a conversion factor of up to 200 photons per incident electron might be achieved in the scintillator at the photon energies about 20 keV, the use of the latter can also increase a sensitivity of the XGMD in the hard X-ray regime. Thus, the application of such a new detection scheme might improve the operation capability of the XGMD in the hard X-ray range.

However, in order to provide an efficient conversation of the photoelectrons to the visible light and it transport to the input of the photomultiplier, a material and geometry of the scintillator need to be optimized with the help of Monte-Carlo simulation. This task requires detailed information about angular and energy distribution of the photoe-lectrons, which strongly depend on several elementary processes upon the interaction of hard X-ray photons with gaseous media. These processes are as follows.

1. The main processes in the photon-atom interaction in the keV energy range are photoionization and elastic (Rayleigh) and inelastic (Compton and electron Raman) scattering from bound electrons. Photoionization cross sections normally exceed the scattering cross sections in the energy range from ionization threshold to far above the respective atomic K edges. Since the photoionization cross section rapidly decreases for a given element with increasing photon energy, Compton scattering is the dominating process at photon energies of several tens keV. Below the lowest ionization thresholds Rayleigh scattering is the dominating process. Several simplified theoretical models of Compton scattering on bound electron are available.

2. Photoionization by an inner-shell electron of a many-electron atom produces an excited intermediate state that rapidly relaxes either radiative or non-radiative by emission of a fluorescent X-ray or an Auger electron, respectively. The decay rates for radiative and non-radiative processes depend on the atomic number and subshell, and have partly been calculated, measured, and tabulated for K- and L-shell only.

3. Other processes resulting from the photoionization can also contribute to the yield and energy of photoelectrons. For example, Auger relaxation can occasionally produce two continuum electrons (shake-off) or it may produce a continuum and excited valence electron (shake-up). One could call shake-off a "multi-electron" Auger process which produces triply ionized ions.

All processes mentioned above contribute to the angular and energy distribution of the photoelectrons and might have an influence on the operation not only the scintillator based detector but also any photoionization based detectors like XGMD. For the hard X-ray regime these important information are not available. Therefore, we initiated a theoretical investigation of the processes mentioned above. Further, data on partial photoionization cross sections and ion mean charge of rare gas atoms are incomplete in the hard X-ray range, while this fundamental information is very important from theoretical point of view and mandatory for accurate operation of the XGMD. Here, we present detail calculations and recent measurements of the partial photoionization cross sections and ion mean charge for Krypton and Xenon, which are the most promising target gases for the XGMD in the hard X-ray range.

References:

- [1] K. Tiedtke et al J. Appl. Phys. 103, 094511 (2008).
- [2] N. Saito et al Metrologia 47, 21 (2010).
- [3] M. Kato et al Metrologia 47, 518 (2010).
- [4] M. Kato et al Appl. Phys. Lett. 101, 023503 (2012).

КУЛОНОВСКОЕ ТОРМОЗНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ: КЛАССИЧЕСКИЙ ПРЕДЕЛ И КВАНТОВЫЕ ПОПРАВКИ

А. А. Крыловецкий, Н. Л. Манаков, С. И. Мармо

Воронежский государственный университет marmo@phys.vsu.ru

Сравнение результатов квантовой и классической теорий кулоновского тормозного излучения (ТИ) представляет фундаментальный интерес, поскольку дает возможность аналитически проверить принцип соответствия. В квантовой теории наиболее полную информацию о процессе ТИ, включающую сведения о поляризации (e), частоте (ω), угловом распределении излученного фотона (с импульсом **k**) и угловом распределении рассеянного электрона (с импульсом **p**'), содержит трижды дифференциальное сечение

$$\frac{d\sigma_{\mathbf{ekp}'}(\omega)}{d\omega d\Omega_{\mathbf{p}'} d\Omega_{\mathbf{k}}} = \frac{e^2}{(2\pi)^4 \hbar^3 c^3} \frac{p'\omega}{p} \left| \mathbf{e}^* \cdot \mathbf{M} \right|^2,\tag{1}$$

где $\mathbf{M} = \langle \psi_{\mathbf{p}'}^{(-)} | \hat{\mathbf{p}} | \psi_{\mathbf{p}}^{(+)} \rangle$ — амплитуда перехода между начальным (с импульсом $\mathbf{p} = m\mathbf{v}$) и конечным (с импульсом $\mathbf{p}' = m\mathbf{v}'$) состояниями. Суммированием по поляризациям излученного фотона и интегрированием по направлениям излученного фотона и рассеянного электрона (последнее не может быть выполнено в общем виде) из (1) получают сечение, дифференциальное по частоте (его также называют спектральным распределением излучения)

$$\frac{d\sigma(\omega)}{d\omega} = \frac{4e^2}{3(2\pi)^3\hbar^3c^3} \frac{p'\omega}{p} \int |\mathbf{M}|^2 d\Omega_{\mathbf{p}'}.$$
(2)

При рассеянии в кулоновском поле $\left(U=-Ze^{2}/r\right)$ амплитуда

$$\mathbf{M} = Q(p, p', \theta) \,\mathbf{n} + Q(p', p, \theta) \,\mathbf{n}', \quad \mathbf{n} = \frac{\mathbf{p}}{p}, \quad \mathbf{n}' = \frac{\mathbf{p}'}{p'}, \quad \cos \theta = (\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}'), \quad (3)$$

где параметры ${\cal Q}$ выражаются через гипергеометрическую функцию

$$Q(p, p', \theta) \propto F(2 - ia, 1 - ia'; 2; z), \tag{4}$$

$$a = \frac{Ze^2}{\hbar v}, \quad a' = \frac{Ze^2}{\hbar v'}, \quad z = -\frac{2aa'}{(a'-a)^2}(1-\cos\theta).$$
 (5)

Дифференциальное по частоте сечение в кулоновской задаче тоже выражается через гипергеометрическую функцию

$$\frac{d\sigma(\omega)}{d\omega} \propto \frac{d}{dz_0} |F(ia, ia'; 1; z_0)|^2, \quad z_0 = -\frac{4aa'}{(a'-a)^2}.$$
(6)

Переход к классическому описанию ТИ формально означает разложение квантовых сечений (1), (2) по $\hbar \to 0$ (при этом $a, a' \to \infty, \hbar \omega / mv^2 \to 0$), причем основная трудность состоит в разложении гипергеометрических функций. В настоящей работе найдено асимптотическое выражение для F(m-ia, m'-ia'; n; z), где m, m', n — положительные целые числа, справедливое с относительной точностью $\sim \hbar$ включительно, которое позволяет найти квантовые поправки к классическим выражениям как для дифференциального по частоте, так и для трижды дифференциального сечений. Например, из наших результатов следует, что

$$|F(ia, ia', 1, z_0)|^2 = \frac{1}{\pi^2} e^{\pi(a+a')} K_{i\xi}^2 \left(2\sqrt{\frac{aa'}{-z_0}} \right) + O(\hbar^2),$$

где $\xi = a' - a, K_{\mu}(z) - функция Макдональда. Подставляя это выражение в (6) и вычисляя производную, приходим к$

$$d\sigma(\omega) = -\frac{16}{3} \frac{e^2}{\hbar c} \left(\frac{Ze^2}{mv^2}\right)^2 \frac{v^2}{c^2} \xi e^{\pi\xi} K_{i\xi}(\xi) K'_{i\xi}(\xi) \frac{d\omega}{\omega},\tag{7}$$

где $K'_{\mu}(z) = \frac{d}{dz} K_{\mu}(z)$. Последнее выражение, справедливое с точностью до членов ~ \hbar^2 , при замене $\xi \to \nu$ (где $\nu = \frac{Ze^2\omega}{mv^3}$ — безразмерная «классическая» частота) переходит в соответствующий результат классической электродинамики [1]. Другими словами, приближенное квантовое выражение (7) может быть получено из классического сечения обратной заменой. Заметим, что впервые сечение (7) на основе принципа соответствия было получено Вентцелем [2] еще до создания квантовой механики. В настоящей работе найдены также классический предел и квантовая поправка ~ \hbar для трижды дифференциального сечения (1).

^[1] Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, Теория поля, Физматлит, Москва (2003).

^[2] G. Wentzel, Z. Physik **27** 257 (1924).

FULLERENES AND ENDOHEDRALS AS RESONATORS AND AMPLIFIERS

M.Ya. Amusia^{1,2}

¹ Racah Institute of Physics, The Hebrew University, Jerusalem 91904, Israel
 ² Ioffe Physical-Technical Institute, 194021 St. Petersburg, Russia

amusia@vms.huji.ac.il

Endohedrals are complex objects that represent the fullerene C_N consisting of N carbon atoms C, and "stuffed" with almost every element of the Periodic table, or even simple molecules. Fullerenes are two-dimensional closed shell of spherical or more complex shapes. In C_N four electrons are transferred from each carbon atom to the community of collectivized electrons. Our main attention will be C_{60} that are near-perfect spheres.

Endohedrals are denoted as $A@C_N$. These objects are of great scientific and technological interest. They are both beautiful and complex many-particle systems with nontrivial symmetry, being at the same time potential "carrier" of other elements, and "building blocks" of new substances.

The purpose of this talk is to discuss the calculations and obtained peculiarities of the absolute and differential in the emitted electron angle cross-sections of the processes of photon absorption and scattering of fast charged particles by endohedrals. These cross-sections manifest interesting features, such as *confinement resonances* [1, 2], *induced resonances* [3, 4], *polarization resonances* [5, 6] and *giant endohedral resonances* [7]. Confinement resonances appear due to reflection by the fullerene shell of the photoelectron wave coming from the internal atom A. The induced resonances appear under the influence of confinement resonances in the inner shell that affect the outer shell of the atom A.

Incoming photon beam deforms significantly and polarizes the electron shell of the fullerene C_N , which leads to additional so-called *polarization* resonances. Their combination with confinement resonances in the outer shells leads to a sharp increase in cross-sections. Corresponding peaks have the name Giant endohedral resonances. Their total cross section exceeds the corresponding pure atomic values by about two - three orders of magnitude [7].

From the theoretical point of view, one can consider endohedrals as huge atoms [8], in which the role of the nucleus plays the located inside atom A. The complex structure of the endohedral prevents performance of reliable calculation of their properties based on "first principles". In fact, everything that we have used in their study, is based on and obtained with the help of the random phase approximation with exchange (RPAE). This approach is well-established in the investigation of isolated atoms.

To simplify consideration of endohedrals, we take into account analytically that the radius of the fullerene C_N is much greater than that of the atom A, and the thickness of the fullerene shell is of the carbon atomic radius value. In this approximation, the impact of C_N on the ionization of the atom A is reduced to two major effects. The first is the static potential of zero or non-zero thickness that reflects and refracts (but not absorb) electrons that are removed from the atom A. Thus, the fullerenes shell acts as a resonator. The second effect is the deformation or polarization of the electron shell of the fullerene under the action of the beam of incident photons or electrons. This modifies the field acting upon atom A, particularly at selected frequences. In this sence the fullerene shell acts as a dempher or amplifier.

As specific examples are considered rare-gas atoms that are placed inside almost spherically symmetric shell C_{60} . Calculations of the cross-sections of photoionization and inelastic scattering of fast electrons are performed in RPAE. This approach has acquired a good reputation in the study of isolated atoms. In our calculations, we use mainly the fullerene shell potential of zero thickness. Polarizability of C_{60} , which by the dispersion relation is connected to the experimentally observed photoionization crosssection of C_{60} , determines the modification of the incoming photon beam, and thus, the shape and power of polarization resonances.

The validity of the approach we used is based not only on its internal theoretical coherence. It is also important that the prediction of the complete destruction of the atomic 4d Giant resonance under the action of the C_{60} shell we have made within the above described approach [2]. Our results, in contrast to at first glance more accurate calculations in the frame of the time-dependent density functional theory (TDDFT), have been confirmed by recent measurements [9].

We will present also results for fast electrons inelastic scattering. Namely, the cross-sections and angular anisotropy parameters, both dipole and non-dipole for 3p and

3s subshells of Ar and 5p, 5s and 4d subshells of Xe [10, 11]. It will be shown that the anisotropy parameters for photoionization and scattering of fast electrons are very different. This is explained by the difference in corresponding operators describing "projectile-atomic A electron" interaction.

Considered resonances show up in the decay of vacancies created in the photoionization of and inelastic electron scattering by endohedral atoms. Their account dramatically increases the role of additional decay channels that become opened due to the presence of the fullerene shell and affects quite visible even pure atomic A channels.

Some attention will be given to so-called "onion"-type endohedrals with a structure that is referred to as A @ C_{60} @ C240, i.e. of "matreshka" type [12].

In conclusion, we will pay some attention to other than C_{60} fullerenes and non-noble gases, staffed inside.

References

- [1]. J.-P. Connerade, V.V. Dolmatov, and S.T. Manson, J. Phys. B 33, 2279 (2000).
- [2]. M.Ya. Amusia, A.C. Baltenkov, L.V. Chernysheva, Z. Felfli, and A.Z. Msezane, J. Phys. B 38, L169 (2005).
- [3]. M.Ya. Amusia, L.V. Chernysheva and V.K. Dolmatov, Phys. Rev. A 84, 063201 (2011).
- [4]. M. Ya. Amusia and L. V. Chernysheva, JETP Letters, 95, No 2, 74 (2012).
- [5]. M.Ya. Amusia and A.S. Baltenkov, Phys. Rev. A 73, 062723 (2006).
- [6]. M.Ya. Amusia and A. S. Baltenkov, Phys. Lett. A 360, 294-298, 2006
- [7]. M.Ya. Amusia, A.S. Baltenkov, and L. V. Chernysheva), JETP Letters, 87, 4, 230 (2008).
- [8]. M.Ya. Amusia, Chemical Physics **414**, 168 (2013).
- [9]. A. Kilcoyne, A. Aguilar, A. Möller, S. Schippers, C. Cisneros, G. Alna'Washi, N. Aryal, K. Baral, D, Esteves, C. Thomas, and R. A. Phaneuf, Phys. Rev. Letts. 105 213001 (2010).
- [10]. M.Ya. Amusia, L.V. Chernysheva, and E.Z. Liverts, JETP Letters, 94, No. 6, pp. 431 (2011).
- [11]. M.Ya. Amusia, L.V. Chernysheva, and E.Z. Liverts, Int. Jour. Quant. Chem. 112, 3119 (2012).
- [12]. M.Ya. Amusia, L.V. Chernysheva, and E.Z. Liverts, Phys. Rev. A, 80.032503, 2009.

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ БЫСТРЫХ ФОТОЭЛЕКТРОНОВ С ФУЛЛЕРЕННОЙ ОБОЛОЧКОЙ

<u>Е.Г. Друкарев</u>¹, М.Я. Амусья^{2,3}

¹ 188300, г. Гатчина, Ленинградская обл.,

ФГБУ Петербургский институт ядерной физики

² 194021 Санкт-Петербург, Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе ³ The Racah Institute of Physics, Hebrew University of Jerusalem,

91904 Jerusalem, Israel

drukarev@thd.pnpi.spb.ru

Мы показали, что при ионизации внутреннего атома эндоэдрала, вызванной достаточно энергичными фотонами, неупругие процессы в фуллеренной оболочке (ФО) происходят с вероятностью, близкой к единице. Результат получен суммированием по всем каналам с помощью условия замкнутости и отдельным вычислением вероятности упругого процесса. Мы вычисляем отношение

 $r(E) = \sigma_A(E)/\sigma_{\gamma}(E) \tag{1}$

суммы сечений неупругих процессов (сечение абсорбции) σ_A и сечения фотоионизации изолированного атома σ_γ при достаточно больших энергиях фотоэлектрона E (далее мы увидим, что это означает $E \gg 50$ эВ). На первый взгляд результат выглядит неожиданным, так как возбуждения ФО определяются малыми параметрами. Встряска, вызванная изменением заряда внутреннего атома, дает вклад порядка R^{-2} , где $R \gg 1$ — радиус ФО. Непосредственное взаимодействие фотоэлектрона с ФО (взаимодействие в конечном состоянии, ВКС) определяется параметром $\xi^2 = 1/2E \ll 1$.

Заметим, однако, что ФО реагирует на встряску как целое, в то время как в случае ВКС фотоэлектрон взаимодействует индивидуально с каждым электроном ФО. Таким образом, эффективный параметр ВКС $\zeta = \xi^2 N$, где N — количество электронов в ФО. Таким образом, взаимодействие становится слабым ($\zeta \ll 1$) только при очень больших энергиях. Например, в фуллерене C₆₀, где ФО содержит N = 360 электронов, $\zeta \ll 1$ лишь при $E \gg 5$ кэВ.

В случае эндоэдральных атомов можно просуммировать ряд теории возмущений для ВКС по параметру ζ . Это происходит благодаря большому радиусу $\Phi O R \gg 1$. То обстоятельство, что электроны ΦO локализованы в тонком слое

 $R < r < R + \Delta$, где $\Delta \ll R$, позволяет просуммировать ряд по ζ модельнонезависимым путем.

Мы предполагаем, что электроны внутреннего атома и ФО движутся независимо друг от друга. Это предположение оправдывается, например, предсказаниями «резонанса конфайнмента» [1], впоследствии подтвержденного в экспериментах [2]. В нескольких специальных случаях проявляется взаимное влияние внешних электронов внутреннего атома и ФО («гибридизация»). Эти случаи мы не рассматриваем.

Если энергия фотоэлекрона *E* и его момент *p* достаточно велики, первым шагом процесса является фотоионизация внутреннего атома, происходящая на расстояниях $r \sim p^{-1}$. После этого фотоэлектрон проходит расстояние $r \sim R \gg 1$ до ФО, где с ней и взаимодействует. Поэтому при больших энергиях амплитуда $F_x(E)$ процесса, в котором ионизуется внутренний атом, а ФО переходит в состояние *x*, содержит в качестве множителя амплитуду фотоионизации внутреннего атома $F_{\gamma}(E)$, т.е.

$$F_x(E) = F_{\gamma}(E)T_x,\tag{2}$$

где T_x — амплитуда перехода ФО с состояние x при взаимодействии с фотоэлектроном. В первом приближении по ξ [3]

$$T_x^{(1)} = \left\langle \Phi_x \left| U_1 \right| \Psi_0 \right\rangle, \tag{3}$$

Где $U_1 = \sum_k U_1(\mathbf{r}^{(k)}), k$ обозначает электрон ФО, а $U_1(\mathbf{r}^{(k)})$ — его взаимодействие с фотоэлектроном. Непосредственное вычисление дает [3]

$$U_{1}(\mathbf{r}^{(k)}) = i\xi\Lambda(\mathbf{r}^{(k)}), \quad \Lambda = \sum_{k} \ln(r^{(k)} - r_{z}^{(k)})\lambda.$$
(4)

Можно показать, что для взаимодействия фотоэлектрона с ФО в любом порядке *n*

$$U_n(\mathbf{r}^{(k)}) = \frac{\left(U_1(\mathbf{r}^{(k)})\right)^n}{n!},\tag{5}$$

что дает

$$T_{x} = \left\langle \Phi_{x} \right| \prod_{k} \left(r^{(k)} - r_{z}^{(k)} \right)^{i\xi} \left| \Psi_{0} \right\rangle e^{i\xi \ln \lambda}.$$
(6)

Здесь $|\Psi_0\rangle$ и $\langle \Phi_x|$ описывают соответственно основное состояние ФО эндоэдрала с внедренным атомом и любое состояние *x* ФО с внедренным ионом, образовав-

шимся в результате фотоионизации. Фазовый множитель $e^{i\xi \ln \lambda}$ сокращается с сопряженным при вычислении сечения. Малая толщина ФО, т.е. условие $\Delta \ll R$, позволяет положить $r^{(k)} = R$ в формуле (6), что приводит к

$$T_{x} = \left\langle \Phi_{x} \left| \prod_{k} \left(1 - t^{(k)} \right)^{i\xi} \right| \Psi_{0} \right\rangle, \tag{7}$$

где опущен фазовый множитель, а $t^{(k)} = \mathbf{pr}^{(k)}/pr^{(k)}$. Используя условие полноты функций $\langle \Phi_x |$, найдем

$$r(E) = 1 - \frac{1}{(1 + \xi^2)^N} = 1 - e^{-N \ln(1 + \xi^2)}.$$
(8)

Использование условия полноты возможно, если энергия фотоэлектрона *E* достаточно велика, чтобы включить все состояния *x*, дающие существенный вклад. Поэтому *E* должна быть существенно больше, нежели энергетические потери $\overline{\epsilon}$ фотоэлектрона в ФО. Для фуллерена C₆₀ можно оценить $\overline{\epsilon} \approx 50$ эВ, и формула (8) справедлива при *E* \gg 50 эВ. Таким образом, для фуллерена C₆₀ мы получаем *r* = 0.9997 при *E* = 300 эВ и *r* = 0.992 для *E* = 1 кэВ. Только при *E* \gg 5 кэВ параметр $N\xi^2 \ll 1$, и отношение *r*(*E*) в этой области энергий падает как 1/*E*.

Наш результат допускает проверку в экспериментах по измерению потерь энергии фотоэлектрона в ионизации эндоэдральных атомов. Среди следствий полученного результата упомянем, что нередко встречающееся описание влияния ФО на фотоэлектрон с помощью «эффективного потенциала» является некорректным. Необходимо учитывать неупругие процессы в ФО. Техника суммирования ряда теории возмущений, использованная в работе, может быть применена для исследования и других объектов с двумя сильно различающимися масштабами расстояний. В частности, это могут быть электронные оболочки тяжелых атомов или большие молекулы.

- [1]. M.Ya. Amusia, A.S. Baltenkov and L.V. Chernysheva, JETP Lett. 87, 230 (2008).
- [2]. A.L.D. Kilcoyne et al., Phys. Rev. Lett. 105, 213001 (2010).
- [3]. Е.Г. Друкарев, М.И. Стрикман, ЖЭТФ 91, 1160 (1986).

РОЛЬ ИНКАПСУЛИРОВАННОГО АТОМА В ФОРМИРОВАНИИ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ СПЕКТРОВ ЭНДОФУЛЛЕРЕНОВ МЕТАЛЛОВ М@С60

<u>А.В. Крисилов</u>^{1,2}, Б.А. Зон^{1,2}, И.В. Нечаев¹, А.Л. Котова¹, Е.В Попов¹ ¹ 394006, г. Воронеж, Воронежский государственный университет ² 309850, Белгородская область, г. Алексеевка, ЗАО ЭФКО-НТ alexph@mail.ru

Эндофуллерены привлекают значительное внимание исследователей в области физики и химии, а также биологии, фармации, медицины, материаловедения и квантовой информатики [1]. В данной работе представлены квантовохимические расчеты геометрической структуры и колебательных спектров эндофуллеренов лантаноидов.

Квантовохимическое моделирование эндофуллеренов лантаноидов Ln@C₆₀ проводились методом функционала плотности с помощью программ GAUSSIAN2003 и ПРИРОДА-10.



Рис. 1 Схема симметрии эндофуллеренов М@ C_{60} . Вертикальной линией отмечена плоскость симметрии, для изомеров C_{3v} , C_{2v} ось симметрии находится в плоскости симметрии и перпендикулярна рисунку, изомеры симметрии C_s не имеют осей симметрии.

На основании расчета кривых потенциальной энергии в программе GAUSSIAN2003 были определены смещения атомов лантаноидов от центра фуллерена в пределах симметрии С_{3v}. Для лантаноидов La - Dy минимум потенциальной энергии соответствует длине связи металл-углерод 1,8 Å, для лантаноидов Ho - Lu минимум потенциальной энергии соответствует длине связи металл-углерод 2.2 Å [2].

По результатам полной оптимизации в программе ПРИРОДА-10 установлено, что атом металла внутри фуллерена может располагаться напротив центра шестиугольной грани (симметрия C_{3v} - рис.1 а), напротив связи 6-6 (симметрия C_{2v} - рис.1 б), занимать промежуточное положение (симметрия C_s - рис.1 в), а также смещаться из плоскости симметрии и занимать полностью несимметричное положение (симметрич-



Рис. 2 ИК спектр $Er@C_{60}$ (симметрия C_1).

С помощью квантовохимических расчетов были определены равновесные геометрические структуры эндофуллеренов с учетом всех степеней свободы. Эндофуллерен La@C₆₀ обладает симметрией C_s, Ce@C₆₀ – симметрией C_{3v}, Pr@C₆₀ – симметрией C_{3v}, Er@C₆₀ – симметрией C₁, Tm@C₆₀ – симметрией C_{2v}, Yb@C₆₀ – симметрией C_{3v}, Lu@C₆₀ – симметрией C_s. Эндофуллерен Ho@C₆₀ имеет два близких по энергии изомера симметрии C_{3v} и C₁. Полученные длины связей R(La-C)=2.53-2.62 Å согласуются с независимыми расчетными результатами для La@C₆₀: атом металла связан с 6 атомами углерода, длины связей R(La-C)= 2.45–2.88 Å [3].

Колебания атома металла внутри фуллерена проявляются в ИК-спектре, так как колебания иона металла внутри поляризованного углеродного каркаса приводят к значительным изменениям дипольного момента. Колебательные спектры эндофуллеренов лантаноидов $Ln@C_{60}$ существенно отличаются от спектра пустого фуллерена C_{60} . Фуллерен C_{60} обладает высокой симметрией Ih, поэтому его ИК-спектр состоит только из 4 линий 527, 576, 1182 и 1429 см⁻¹ [4]. Для всех рассматриваемых эндофуллеренов обнаружены группы линий различной интенсивности, которые не совпадают с линиями ИК-спектра пустого фуллерена C₆₀.

Установлено, что частоты колебаний атома металла внутри фуллерена зависят от симметрии положения атома металла, а также от расстояния между атомом металла и углеродным каркасом фуллерена. Эндофуллерены $M@C_{60}$ обладают более низкой степенью симметрии, чем пустой фуллерен C_{60} , поэтому в колебательных спектрах эндофуллеренов проявляются колебания, которые в фуллерене C_{60} запрещены по симметрии. Для фуллеренов с каркасом C_{60} изменение колебательных спектров при внедрении атома металла значительно более контрастно, чем для высших фуллеренов. Наличие линий, не характерных для C_{60} , позволяет обнаружить эндофуллерены $M@C_{60}$ в смеси с фуллеренами C_{60} .

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (грант 01201155974).

[1]. М. Мікаwa, Н. Каto, М. Okumura et al., Bioconjugate Chem. 12, 510 (2001);
А.Р. Хаматгалимов, В.И. Коваленко, Рос. хим. Журнал 48, №5. С.28 (2004);
J. Twamley, Phys. Rev. A 67, 052318-1 (2003).

[2]. А.В. Крисилов, Б.А. Зон, Ж. физ. хим. 85, №10. С. 1 (2011).

[3]. J. G. Rodríguez-Zavala, I. Padilla-Osuna, R.A. Guirado-López, Phys Rev B 78, 155426-1 (2008).

[4]. D.S. Bethune, G. Meijer, W.C. Tang, H.J. Rosen, W.G. Golden, H. Seki, C.A. Brown, M.S. de Vries, Chem. Phys. Lett. **179**, 181 (1991)

О СООТНОШЕНИИ ДЛЯ СКОРОСТИ СПОНТАННОГО ПЕРЕХОДА АТОМА ВБЛИЗИ ТЕЛ

<u>А.В.Масалов</u>¹, В.Г.Миногин²

¹ 119991, г. Москва, Физический институт им.П.Н.Лебедева РАН

² 142190 г. Москва, г. Троицк, Институт спектроскопии РАН

masalov@lebedev.ru

Проанализирован процесс возбуждения нановолокна при спонтанном распаде атома. В рамках подхода Вигнера-Вайскопфа (см. также [1]) рассчитана вероятность возбуждения мод нановолокна высокого порядка в зависимости от удаления атома от поверхности волокна. Показано, что вероятность возбуждения обратно пропорциональна групповой скорости излучения в актуальной моде:

$$W = W_0 \frac{3c}{4\pi v_{gr}} \lambda^2 |E|^2,$$

где $W_0 = 4\omega^3 d^2 / 3\hbar c^3$ – вероятность спонтанного излучения в свободное пространство, d – дипольный момент перехода, а E – электрическое поле одного фотона в актуальной моде в области волокна, нормированное в поперечном сечении $\iint n^2(r) |E|^2 r dr d\varphi = 1$ (n(r) – показатель преломления поперечного сечения волокна).

На примере мод TE_{01} , TM_{01} , HE_{21} и HE_{11} рассчитаны вероятности возбуждения нановолокна радиуса *а* в зависимости от расстояния до атома (рис. 1).



Рис. 1. Нормированная вероятность возбуждения различных мод; радиус волокна 450 нм, длина волны излучения 780 нм (переход 5P-5S в рубидии). Видно, что вероятность возбуждения мод высокого порядка (TE₀₁, TM₀₁, HE₂₁) превышает таковую основной моды HE₁₁. В частности, превышение вероятности возбуждения моды TM₀₁ достигает одного порядка [2].

Работа выполнена при поддержке Гранта РФФИ №12-02-00867-а.

[1]. F. Le Kien, S. Dutta Gupta, V.I. Balykin, and K. Hakuta, Phys. Rev. A **72**, 032509 (2005).

[2]. A.V. Masalov, V.G. Minogin Laser Phys. Lett. 10, 075203 (2013).

ДИНАМИКА СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИХ ПЕРЕХОДОВ МЕЖДУ ЗАПУТАННЫМИ КВАНТОВЫМИ СОСТОЯНИЯМИ

<u>H.П. Стадная</u>¹, А.Ф. Клинских¹ ¹ 394006, г. Воронеж, Воронежский государственный университет St.hope11@gmail.com

В последние два десятилетия ведутся интенсивные научные исследования в области создания квантовых компьютеров. В связи с этим получили развитие такие направления современной теоретической физики, как квантовая теория информации, теория запутанных состояний и теория декогеренции.

Запутанные состояния являются основным ресурсом, а явление декогеренции, связанное с взаимодействием квантовых систем с окружающей средой, основной проблемой в реализации квантовых компьютеров.

Таким образом, изучение вопросов запутанности и декогеренции имеют, кроме теоретического, ещё и важное практическое значение.

Для выявления вопроса о степени влияния окружающей среды на эволюцию квантовой системы, находящейся в запутанном состоянии, мы исследуем систему двух кубитов в термостате, который представляет собой усреднённый по ансамблю осцилляторов двухуровневый объект. В качестве характерного процесса мы рассматриваем динамику спектроскопических переходов между запутанными квантовыми состояниями.

Базис состояний будет включать элементы вида:

$$\left|\Psi\right\rangle = \left|q_{i}q_{j}'n_{f_{k}}n_{T_{l}}\right\rangle \tag{1}$$

где $q_i=0,1; q'_j=0',1'$ - квантовые числа, характеризующие состояние кубитов; $n_f=0_f, 1_f, 2_f$ — фотоны, которые могут взаимодействовать с кубитами; $n_{TI}=0_T, 1_T$ — квантовые числа, характеризующие состояние термостата.

В ходе расчётов используется формализм матрицы плотности ($\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|$). В основе исследования лежит решение матричного уравнения

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} = \left[\hat{H}, \hat{\rho}\right]$$
 (2)

с различными начальными условиями на элементы матрицы плотности (то есть на начальное состояние рассматриваемой системы «кубит-термостат»).

 \hat{H} в уравнении (2) — это гамильтониан системы, имеющий следующую структуру:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{int} + \hat{H}_{dis}.$$
 (3)

Здесь $\hat{H}_0 = \varepsilon_0 |0\rangle \langle 0| + \varepsilon_1 |1\rangle \langle 1| + \varepsilon_0' |0'\rangle \langle 0'| + \varepsilon_1' |1'\rangle \langle 1'| + \hbar \omega a^+ a$ — гамильтониан невзаимодействующих подсистем,

 $\hat{H}_{int} = \gamma (ab^+ + b^+ a + ab'^+ + b'a^+) + \alpha (ba^+ ab'^+ + b'a^+ ab^+)$ — гамильтониан взаимодействия кубитов с фотонами и кубитов между собой,

 $\hat{H}_{dis} = f(\hat{A}^{+}\hat{T} + \hat{T}^{+}\hat{A})$ — гамильтониан взаимодействия двухкубитовой системы с термостатом; *а* и *a*⁺ — операторы уничтожения и рождения и рождения фотонов; *b*, *b*⁺ и *b* ' *b* '⁺ — операторы уничтожения и рождения в кубитах; $\varepsilon_{0} = \varepsilon'_{0}$ и $\varepsilon_{1} = \varepsilon'_{1}$ — энергии соответственно основного и возбуждённого состояний кубитов; ω — частота внешнего электромагнитного поля; γ — коэффициент, характеризующий квантовые переходы из кубита в поле; α — коэффициент, характеризующий передачу возбуждения между кубитами; *f* — энергия взаимодействия двухкубитовой системы с термостатом.

$$\hat{A}^{+} = \delta |0\rangle \langle 1| + \delta' |0'\rangle \langle 1'|;$$
$$\hat{A} = \delta^{*} |1\rangle \langle 0| + \delta'^{*} |1'\rangle \langle 0'|$$

 \hat{T}, \hat{T}^+ действуют по правилу:

$$\hat{T} | 0_T \rangle = 0; \quad \hat{T}^+ | 0_T \rangle = | 1_T \rangle,$$

$$\hat{T} | 1_T \rangle = | 0_T \rangle; \quad \hat{T}^+ | 1_T \rangle = 0,$$

$$\delta = \delta' = \delta^* = \delta^{**} \propto \varepsilon.$$

Решение системы (2) проводилось с использованием математического пакета Wolfram Mathematica.

Первые апробационные результаты решения системы (1) были получены для случая, когда влияние термостата на эволюцию системы не учитывалось. Для начального состояния:

$$\frac{1}{1+\varepsilon^{2}}\left(\left|01^{\prime}1_{f}\right\rangle\left\langle01^{\prime}1_{f}\right|-\varepsilon\left(\left|01^{\prime}1_{f}\right\rangle\left\langle10^{\prime}1_{f}\right|+\left|10^{\prime}1_{f}\right\rangle\left\langle01^{\prime}1_{f}\right|\right)+\varepsilon^{2}\left|10^{\prime}1_{f}\right\rangle\left\langle10^{\prime}1_{f}\right|\right)$$

(є — коэффициент, определяющий степень запутанности) получены следующие временные зависимости заселённостей уровней кубитов:









Результаты решения системы (1) с учётом декогеренции будут представлены позднее.
ДИНАМИКА НАЧАЛЬНОЙ ИОНИЗАЦИИ В ЛАЗЕРНОЙ ПЛАЗМЕ ПРИ НИЗКИХ ПЛОТНОСТЯХ ГАЗОВОЙ МИШЕНИ

<u>М. В. Петренко¹</u>, В. П. Белик¹, Р. А. Демидов², С. Г. Калмыков¹, А. М. Можаров², М. Э. Сасин¹ ¹ ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН, 194021, Санкт-Петербург, Россия

² СПбГПУ, 199034 Санкт-Петербург, Россия m.petrenko@mail.ioffe.ru

Приводимые в литературе оценки коэффициента конверсии энергии излучения лазера в узкополосное ВУФ излучение в лазерно-плазменных источниках света для фотолитографии показывают, что для равновесных плазм при оптимальной температуре 23.6 eV он может достигать величины 1.5% [1]. Однако, в экспериментах, где использовалась Хе газовая мишень, получались существенно меньшие значения – десятые доли процента или меньше [2]. В настоящей работе исследуется одна из самых очевидных причин этого: длительный период начальной ионизации газовой мишени до того момента, когда в ней появляются ионы с высоким зарядом, способные излучать в ВУФ диапазоне.

Сделана теоретическая оценка длительности первой ионизации газовой мишени до состояния, когда все атомы будут однократно ионизованы. В соответствии с теорией развития лазерной плазмы, появление первых свободных электронов в газовой мишени обусловлено нелинейной многофотонной ионизацией газа в фокусе лазерного луча. В дальнейшем происходит лавинная ионизация электронным ударом. По результатам оценки, в стационарном Хе с плотностями порядка 10^{18} cm⁻³, близкими к тем, которые ожидаются в импульсной струйной мишени, при интенсивности лазерного излучения ($\lambda = 1.06$ µm) в фокусе $I_{las} \approx 0.5$ -1.5 TW/cm², полное время, затрачиваемое на первую ионизацию газа, составляет около 8 ns, т.е. существенную часть полной длительности лазерного импульса.

Результаты этой оценки были сопоставлены с результатами спектроскопических наблюдений лазерной плазмы в стационарном Хе.

Наблюдались В видимом, ультрафиолетовом инфракрасном И диапазонах спектральные линии (Xe I) атомов И первых двух ионизационных состояний (Xe II и Xe III). Получена эволюция во времени контуров 3-х спектральных линий: инфракрасной линии нейтрального Xe I с центральной длиной волны $\lambda = 9923$ Å и лежащих в голубой и фиолетовой частях видимого спектра линий ионов - Xe II, $\lambda = 4844$ Å (рис.1 (a)) и Xe III, $\lambda = 4050$ Å – при двух плотностях газовой мишени, $n = 0.53 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ и n $= 1.1 \cdot 10^{18}$ cm⁻³. На рис.1 (б) приведены осциллограммы свечения плазмы В этих 3-x линиях вместе с осциллограммой возбуждающего плазму лазерного импульса. Задержка первого импульса свечения ионизационного состояния ксенона



Рис. 1. (а) – Поведение во времени контура спектральной линии Xe II ($\lambda = 4844$ Å) при давлении 15 Torr ($n_a = 0.53 \cdot 10^{18}$ cm⁻³); (б) – Осциллограммы излучения спектральных линий ионов Xe в сравнении с лазерным импульсом: 1 – Xe I, $\lambda = 9923$ Å; 2 – Xe II, $\lambda = 4844$ Å; 3 – Xe III, $\lambda = 4050$ Å ($n_a = 0.53 \cdot 10^{18}$ cm⁻³).

(Xe II) по отношению к лазерному импульсу, составляющая 7-8 ns, хорошо коррелирует с теоретической оценкой длительности первой ионизации газовой мишени.

Спектроскопические измерения были дополнены количественным определением среднего заряда ионов плазмы по поглощению излучения лазера, возбуждающего плазму. Выполнены измерения поглощения лазерного излучения в плазме. Из измерений интенсивности излучения, прошедшего через рабочую камеру (рис.2) были определены усредненные по объему плазмы мгновенные значения коэффициента поглощения $\mu(t)$, при этом из экспериментально определенных величин μ , зная концентрацию атомов, можно получить значения комбинации параметров плазмы $Z_{eff}/\sqrt{T_e}$, где Z_{eff} —усредненный ионный заряд, T_e

- усредненная температура электронов. Т.о. имея информацию об электронной температуре, из величины μ можно вывести значение эффективного ионного заряда плазмы. Так, если T_e = 25 eV [1, 3], то в районе максимума лазерного импульса величины ионного заряда составят Z_{eff} = 6.2 при n = $0.85 \cdot 10^{18}$ cm⁻³ и $Z_{eff} = 7.1$ при n = Рис. 2. Осциллограммы излучения лазера, $1.17 \cdot 10^{18}$ cm^{-3} . Это значит, что излучающий в ВУФ диапазоне ион Xe^{+10} 0.85·10¹⁸ cm⁻³; 3 – плазму при концентрации n =появляется поздно, только уже вблизи



прошедшего через: 1 – вакуум в рабочей камере; 2 - плазму при концентрации Хе <math>n = $1.17 \cdot 10^{18} \text{ cm}^{-3}$.

максимума лазерного импульса, и при $n < 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ не является доминирующим.

Из приведенных результатов видно, что замедленная начальная ионизация Хе инфракрасным (ИК) излучением Nd:YAG лазера приводит с существенному уменьшению времени ВУФ высвета и увеличению расхода энергии лазера в первой половине импульса. Устранить эти недостатки можно с помощью эффективной предионизации газа мишени. Одним из способов предионизации является создание плазмы излучением эксимерного KrF лазера с длиной волны λ = 248 nm. Предлагается схема создания и нагрева плазмы двумя лазерами [4, 5]. Ожидается, что при последующем облучении импульсом Nd: YAG лазера плазменной мишени, полученной в результате УФ предионизации, удастся существенно повысить поглощение лазерной энергии и выход ВУФ излучения.

Работа выполнена при поддержке Проекта МНТЦ 3857, Гранта РФФИ 13-08-01327 и Программы Президиума РАН П-02.

[1]. V. Bakshi. EUV Sources for Lithography. SPIE Press, Bellingham, WA, USA, 2006.

[2]. И. В. Домрачева и др. ПЖТФ, 2007, т. 33, вып. 22, с. 9.

[3]. С. Г. Калмыков, М. В. Петренко, М. Э. Сасин. ПЖТФ, 2011, т. 37, вып. 4, с. 23.

[4]. V. Belik, et al. 2011 EUV Sources Workshop Proc., Dublin, Ireland, S 25.

[5]. Р. А. Демидов и др. ПЖТФ, 2012, т. 38, вып. 22, с. 1.

МЕТОД КОМПЛЕКСНОГО МАСШТАБИРОВАНИЯ КООРДИНАТ ВО ВНЕШНЕЙ ОБЛАСТИ В НЕСТАЦИ-ОНАРНОЙ ТЕОРИИ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ. МНОГОФОТОННАЯ ИОНИЗАЦИЯ И ГЕНЕРАЦИЯ ВЫСШИХ ГАРМОНИК АТОМАМИ АРГОНА В СИЛЬ-НОМ ЛАЗЕРНОМ ПОЛЕ

 Д.А. Тельнов¹, <u>К.Е. Соснова</u>¹, Е.Б. Розенбаум¹, Shih-I Chu²
 ¹ 198504, г. Санкт-Петербург, Санкт-Петербургский государственный университет
 ² University of Kansas, Lawrence, Kansas 66045, USA ks.sosnova@gmail.com

Под действием сильного лазерного поля атомы могут быть ионизованы. На большом расстоянии от ядра такому процессу будет соответствовать расходящаяся волна, следовательно, только она должна входить в асимптотику волновой функции. Появляется необходимость в постановке правильных граничных условий на бесконечности. Она может быть осуществлена с помощью метода комплексного масштабирования координат во внешней области (КМВО) [1]. Преимущества этого метода могут проявляться при рассмотрении сложных систем с неаналитическими (или заданными только численно) во внутренней области потенциалами.

В данной работе [2] метод КМВО применяется в рамках нестационарной теории функционала плотности для задачи о многоэлектронном атоме в сильном лазерном поле. Для решения нестационарных уравнений Кона-Шэма используется обобщенный псевдоспектральный метод в сферических координатах, который позволяет аппроксимировать волновую функцию с высокой точностью при использовании умеренного числа точек неравномерной пространственной сетки. Комплексное масштабирование во внешней области осуществляется посредством следующего отображения радиальной координаты:

$$r = R(x) \cdot \exp[i\alpha(x)],$$

где R(x) – вещественная монотонная функция, переводящая отрезок [-1, 1] на отрезок $[0, R_b]$ (R_b – максимальное расстояние от ядра). Фаза $\alpha(x)$ непрерывна вместе со своей первой и второй производными. Во внутренней области (при

 $x < x_0$) фаза $\alpha(x) = 0$; во внешней области (при $x > x_0$) фаза $\alpha(x)$ постепенно возрастает с ростом x и достигает своего максимального значения α_0 в некоторой точке, после чего остается постоянной.

Мы применяем метод комплексного масштабирования координат во внешней области в рамках нестационарной теории функционала плотности для изучения явления генерации высших гармоник и многофотонной ионизации атомов аргона под действием сильного лазерного поля. Рассматривались лазерные импульсы со следующими параметрами: длина волны 800 нм, огибающая имеет форму sin², продолжительность импульса составляет 20 оптических периодов (его полуширина – примерно 27 фс).



Рис. 1. Спектральная плотность энергии излучения при максимальной интенсивности 2·10¹⁴ Вт/см²: (А) КМВО в нестационарной теории функционала плотности; (В) модель замороженного остова.

Также проведены вычисления на основе модели замороженного остова (без учета изменений электронной плотности во времени), чтобы оценить важность многоэлектронных эффектов в генерации высших гармоник. На рис.1 показаны спектры генерации высших гармоник атомами аргона при максимальной интенсивности импульса $2 \cdot 10^{14}$ BT/cm², полученные описанными выше двумя методами. Оба спектра имеют минимум, тесно связанный с куперовским

минимумом, который впервые наблюдался в сечениях фотоионизации аргона [3]. В спектре, полученном с помощью КМВО в нестационарной теории функционала плотности, этот минимум четко виден при энергиях около 51 эВ. В спектре, полученном с помощью модели замороженного остова, минимум менее выражен и сдвинут в область более низких энергий (около 45 эВ).

Расчеты, связанные с многофотонной ионизацией, показывают, что в модели замороженного остова вероятность ионизации оказывается существенно завышенной по сравнению с результатами, полученными В рамках нестационарной теории функционала плотности при тех же параметрах задачи. Из этого следует, что динамические многоэлектронные эффекты играют крайне важную роль как в формировании спектра генерации высших гармоник атомами аргона, так и в расчетах, связанных с многофотонной ионизацией.

Работа выполнена при поддержке исследовательского центра ФАИР-Россия и фонда Дмитрия Зимина «Династия».

Литература:

- [1] B. Simon, Phys. Lett. A 71, 211 (1979).
- [2] D. A. Telnov, K. E. Sosnova, E. Rozenbaum, and S. I. Chu, Phys. Rev. A 87, 053406 (2013).
- [3] J. W. Cooper, Phys. Rev. 128, 681 (1962).

АНАЛИТИЧЕСКАЯ ТЕОРИЯ ГЕНЕРАЦИИ ВЫСШИХ ГАРМОНИК ЭЛ-ЛИПТИЧЕСКИ ПОЛЯРИЗОВАННОГО ЛАЗЕРНОГО ПОЛЯ И ЕЁ ПРИЛОЖЕНИЕ К АТОМНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Н.Л. Манаков¹, <u>Т.С. Саранцева</u>¹, М.В. Фролов¹, А.F. Starace² ¹ 394006, г. Воронеж, Воронежский государственный университет ² The University of Nebraska, Lincoln, Nebraska 685888-0111, USA

sartan86@mail.ru

Важным практическим приложением генерации высших гармоник (ГВГ) является извлечение из спектров ГВГ информации о сечении фоторекомбинации атомной или молекулярной системы [1,2]. Основная идея спектроскопии, основанной на генерации высших гармоник, состоит в факторизации выхода высших гармоник на лазерный параметр (слабо зависящий от структуры атомной или молекулярной мишени) и сечение фоторекомбинации [1,2]. Для линейно поляризованного поля возможность такой факторизации была исследована на основе численного решения нестационарного уравнения Шредингера в [2] и теоретически обоснована в работе [3]. Тем не менее, вопрос о факторизации выхода высших гармоник эллиптически поляризованного поля на лазерный и атомный параметры, а также информация об атомных параметрах, которая может быть извлечена из соответствующих спектров ГВГ, остаются неисследованными.

В настоящей работе представлена аналитическая теория генерации высших гармоник в лазерном поле с небольшой эллиптичностью [4]. На основе развитой теории, показана существенная разница между выходом высших гармоник для атома с оптическим электроном в s- и p- состояниях. В частности: (i) показано, что для атомного электрона с нулевым орбитальным моментом, выход высших гармоник может быть параметризован в виде произведения лазерного параметра и сечения фоторекомбинации, однако, для состояний с ненулевым орбитальным моментом такая параметризация невозможна; (ii) для начального состояния с ненулевым орбитальным моментом такая параметров, полностью характеризующих угловую зависимость сечения фоторекомбинации [4] – полное сечение фоторекомбинации (про-интегрированное по углам налетающего электрона) и параметр асимметрии.

Квазиклассическое выражение для выхода высших гармоник в случае начального состояния с нулевым орбитальным моментом может быть представле-

но в виде произведения трех факторов: туннельного фактора, пропорционального вероятности туннелирования электрона в статическом поле; пропагационного фактора, выраженного через функцию Эйри и её производную; рекомбинационный фактор, определяемый сечением фоторекомбинации электрона в состояние с нулевым орбитальным моментом [4]. Для начального *р*-состояния вероятность выхода гармоник представляется в виде суммы двух слагаемых, каждое из которых определяет вероятность генерации гармоники с линейной поляризацией вдоль главной (R_{-}) и малой (R_{+}) полуоси эллипса поляризации сильного лазерного поля [4]. Как и для случая *s*-состояния, вероятности генерации гармоники с линейной поляризацией вдоль главной и малой полуоси эллипса могут быть параметризованы в виде произведения туннельного, пропагационного и рекомбинационного факторов, однако, в отличии от *s*-состояния, $R_{-}(R_{+})$ определяется сечением фоторекомбинации для электрона, налетающего вдоль главной оси эллипса поляризации сильного светового поля с испусканием фотона с линейной поляризацией вдоль главной (малой) оси эллипса поляризации поля накачки. Отношение вероятностей *R*₋ и *R*₊ пропорционально отношению сечений фоторекомбинации соответствующим различным углам (0 и 90 градусов, соответственно) между вектором поляризации излученного фотона и направлением налетающего электрона. Учитывая параметризацию сечения фоторекомбинации через параметр асимметрии, нетрудно показать, что его значение может быть получено из отношения R_{-} $/R_{+}$, при известных пропагационных факторах, а полное сечение, может быть найденоиз пропорциональности $R_{-}(R_{+})$ сечению фоторекомбинации.

Работа выполнена при поддержки грантов РФФИ №. 12-02-12101-офи_м и № 13-02-00420-а, гранта министерства образования РФ (контракт № 14.В37.21.1937).

[1] J. Itatani et al., Nature **432**, 867 (2004).

[2] T. Morishita, A.-T. Le, Z. Chen, and C. D. Lin, Phys. Rev. Lett. **100**, 013903 (2008).

[3] M.V. Frolov, N.L. Manakov, T.S. Sarantseva, M.Y. Emelin, M.Y. Ryabikin, A.F. Starace, Phys. Rev. Lett. **102**, 243901 (2009).

[4] M.V. Frolov, N.L. Manakov, T.S. Sarantseva, A.F. Starace, Phys. Rev. A 86, 063406 (2012).

ИЗЛУЧЕНИЕ ТУННЕЛЬНОГО ЭЛЕКТРОНА НА ВТО-РИЧНОМ ЦЕНТРЕ РЕКОМБИНАЦИИ

<u>П.А. Головинский</u>^{1,2}, А.А. Дробышев²

¹141700 г. Москва, Московский физико-технический институт (государственный университет)

² 394006 г. Воронеж, Воронежский государственный архитектурно-строительный университет

golovinski@bk.ru

Рассмотрено излучение электрона при туннельной ионизации атома низкочастотным монохроматическим полем $F(t) = F_0 \cos(\omega t)$ (F_0 – амплитуда напряженности электрического поля, ω – частота) на дополнительном центре рекомбинации. Излучение электрона описано как результат трехступенчатого процесса [1, 2]: ионизации, ускорения в лазерном поле и рекомбинации с переходом в связанное состояние.

Полный гамильтониан системы

$$H_t = H + W \tag{1}$$

представляет собой сумму гамильтонана *H* электрона с учетом действия сильного лазерного поля, описываемого классически, и возмущения

$$W(x,t) = W(x)e^{i\Omega t}, W(x) = i\left(\frac{2\pi\Omega}{V}\right)^{1/2}(\mathbf{e}_{\alpha}\mathbf{r}), \qquad (2)$$

отвечающего за спонтанное дипольное излучение фотона с частотой Ω , поляризацией \mathbf{e}_{α} в объеме квантования V ($e = m = \hbar = 1$). Решение можно записать через точную функцию Грина $G(x,t;x_1,t_1)$ [3], а амплитуда перехода в конечное связанное состояние $\psi_f(x,t)$ есть

$$S_{if} = i \int d^3x \, d^3x_1 \psi_f^*(x,t) G(x,t;x_1,t_1) \psi_i(x_1,t_1).$$
(3)

С учетом представления функции Грина в виде разложения по полному набору $\varphi_n(x)$ стационарных волновых функций

$$G_0(x,t;x_2,t_2) = \theta(t-t_2) \sum_{\mu} \exp(-iE_{\mu}(t-t_2)) \varphi_{\mu}(x) \varphi_{\mu}^*(x_2), \qquad (4)$$

имеем

$$S_{if} = i \int d^3 x_2 \, dt_2 \, d^3 x_1 \, \varphi_f^*(x_2) e^{i(E_f + \Omega)t_2} W(x_2) \, G_0(x_2, t_2; x_1, t_1) \psi_i(x_1, t_1) \,.$$
(5)

Волновая функция активного электрона представлена как сумма волновой функции основного состояния и волнового пакета в континууме, который в квазистационарном приближении записан в виде

$$\psi_c(x_2, t_2) = \sqrt{w(F_0)G(x_2, t_2, x_0, 0)}, \qquad (6)$$

где $G(x_2, t_2, x_0, 0)$ – функция Грина электрона в однородном электрическом поле F_0 , x_0 – точка выхода электрона из-под барьера в момент времени t = 0. Вероятность испускания фотона с частотой Ω и произвольной поляризацией \mathbf{e}_{α} в единицу времени в телесном угле *do* составляет

$$dP_{f\mu} = w(F_0) \frac{\Omega^3}{2\pi c^3} |\mathbf{D}_{\Omega}|^2 \sin^2 \theta \, do \,,$$

$$\mathbf{D}_{\Omega} = \sum_{\mu} \left\langle \varphi_f(x) | \mathbf{r} | \widetilde{\varphi}_{\mu}(x) \right\rangle \widetilde{\varphi}_{\mu}^*(x_0) \,.$$
 (7)

 θ – угол между направлением вектором распространения света **Q** и **D**_{Ω}, – матричным элементом радиуса вектора.

Для одномерной задачи, соответствующей излучению на двух открытых квантовых ямах с параболическим дном, функция распространения электрона в однородном электрическом поле

$$G(x, x_1, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dE \exp(-iEt) \psi_E(x) \psi_E(x_1) \, .$$

Сами состояния $\psi_E(x)$ представляют собой волновые функции электрона в однородном электрическом поле, описываемые нормированными функциями Эйри [4]:

$$\varphi_{E}(x) = \frac{\alpha}{\sqrt{F}} \operatorname{Ai}(-q), \operatorname{Ai}(-q) = \frac{1}{\pi} \int_{0}^{\infty} \cos\left(\frac{u^{3}}{3} - uq\right) du, \qquad (8)$$
$$q = (x + E / F_{0}) \alpha, \ \alpha = (2F_{0})^{1/3}.$$

Для величины фурье-компоненты дипольного момента имеем

$$D_{\Omega} = \sqrt{w(F_0)} \Big\langle \varphi_f(x) \big| x \big| \varphi_{\Omega + E_f}(x) \Big\rangle \varphi_{\Omega + E_f}(x_0) \,. \tag{9}$$

В качестве примера рассчитано излучение на двух открытых квантовых ямах с параболическим дном и двух квантовых точках. Установлено наличие оптимального расстояния между ямами и точками, при котором излучение максимально, а для квантовых точек принципиальная зависимость от направления поляризации поля по отношению к вектору, соединяющему притягивающие центры. Полученные результаты могут быть использованы для постановки экспериментов по генерации излучения в наноструктурах под действием поля CO_2 лазера с интенсивностью $10^{11} - 10^{12}$ BT/см².

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 13-07-00270.

[1]. P. B. Corkum, Phys. Rev. Lett. 71, 1994 (1993).

[2]. S. L. Chin, P. A. Golovinski, J. Phys. B.: At. Mol. Opt. Phys. 28, 55 (1995).

[3]. Дж. Д. Бьеркен, С. Д. Дрелл. Релятивистская квантовая теория, Т.1. – Н.: ИО НФМИ, 2000.

[4]. Справочник по специальным функциям / Под редакцией М. Абрамовица и И. Стиган. – М.: Наука, 1979.

ДИНАМИЧЕСКАЯ СТАБИЛИЗАЦИЯ АТОМА В СВЕРХСИЛЬНОМ ПОЛЕ ПРОИЗВОЛЬНОЙ ПОЛЯРИЗАЦИИ: ДОЛГОВРЕМЕННАЯ ЭВОЛЮЦИЯ ЭЛЕКТРОННОГО ВОЛНОВОГО ПАКЕТА И РОЛЬ МАГНИТНОГО ПОЛЯ ЛАЗЕРНОГО ИМПУЛЬСА

<u>М.Ю. Рябикин</u>, М.Ю. Емелин, Л.А. Смирнов 603950, г. Нижний Новгород, Институт прикладной физики РАН mike@ufp.appl.sci-nnov.ru

Хорошо известно, что теория фотоионизации атома в сверхсильном высокочастотном лазерном поле предсказывает необычное явление стабилизации, т.е. насыщения или даже снижения вероятности ионизации с ростом интенсивности лазерного излучения [1, 2]. Хотя основные механизмы и многие аспекты атомной стабилизации довольно хорошо изучены теоретически, остается неразрешенным ряд вопросов. Среди них фундаментальное значение имеет, в частности, вопрос о роли магнитного поля лазерного импульса при интенсивностях, достигающих значений, при которых движение электронов становится слаборелятивистским. С одной стороны, как классические [3], так и квантовомеханические [4, 5] численные эксперименты показали, что магнитное поле, выталкивающее электрон из окрестности ядра в направлении распространения лазерного импульса, препятствует стабилизации, сводя к довольно узкому окну тот интервал интенсивностей, в котором атом относительно устойчив к ионизации. С другой стороны, при использовании релятивистского приближения сильного поля (SFA) [6] для аналитического исследования стабилизации атома водорода в высокоинтенсивном линейно- [7] и циркулярно- [8] поляризованном поле, было показано, что релятивистские эффекты (в том числе влияние магнитного поля лазерного излучения) приводят к повышению устойчивости атомов к ионизации. В настоящем сообщении мы представляем результаты численных расчетов, позволяющих пролить свет на указанное противоречие, впервые отмеченное в [8].

Следует отметить, что большинство численных квантовомеханических расчетов, относящихся к стабилизации атома, до недавнего времени проводилось в

рамках моделей пониженной размерности. Такой подход, требующий значительно меньших вычислительных ресурсов по сравнению с решением полноразмерной задачи, широко используется в физике атомных и молекулярных процессов в сильных полях (в частности, он использовался и в [4, 5], где проведены 2D расчеты вероятности ионизации атома водорода в интенсивном высокочастотном линейно-поляризованном поле за рамками электродипольного приближения).

Подход, использующий модели пониженной размерности, стал одним из объектов критики в [8], где была подвергнута сомнению справедливость перенесения выводов, следующих из двумерных расчетов [4], на случай рассмотрения взаимодействия реального 3D атома с сильным лазерным полем с учетом одновременного действия электрической и магнитной составляющих силы Лоренца. Более того, в случаях эллиптической или циркулярной поляризации лазерного поля исследование стабилизации атома с учетом магнитного поля лазерного импульса неизбежно требует полноразмерного описания, так как движение классического электрона в этих случаях является трехмерным. Такое описание использовалось в работах [9, 10], однако, в значительной мере из-за вычислительных трудностей, рассмотрение ограничивалось очень короткими импульсами (порядка или менее десяти периодов поля) и было проведено лишь для нескольких конкретных значений лазерных параметров.

В данной работе мы представляем результаты детальных 3D численных исследований динамической стабилизации атома водорода в импульсном лазерном поле произвольной поляризации за рамками электродипольного приближения. Использование высокопроизводительных вычислительных систем и развитых нами многопоточных численных кодов на основе библиотек, реализующих стандарт POSIX Threads, позволило рассмотреть долговременную эволюцию электронного волнового пакета в различных режимах взаимодействия атома с электромагнитным излучением, включая слаборелятивистский; исследования проведены для широкого диапазона параметров лазерного излучения.

Расчеты проводились для трапецеидального лазерного импульса с короткими (в несколько периодов поля) интервалами включения и выключения и длинным (до ~800 периодов) интервалом постоянной интенсивности. Полученные результаты демонстрируют, что при любой поляризации высокоинтенсивного лазерного излучения эволюция атома водорода, первоначально находившегося в ос-

новном состоянии, следует однотипному сценарию, включающему этапы (а) быстрой делокализации (в результате «встряхивания» атома) и дрейфа (в результате передачи импульса фотонов электрону) части электронного волнового пакета на фронтах лазерного импульса и (б) медленной депопуляции локализованных «одетых» состояний электрона (интерпретируемой как результат отклонения от высокочастотного приближения Крамерса-Хеннебергера) на интервале постоянной интенсивности лазерного излучения. В соответствии с этим нами вычислялись (а) вероятность «выживания» атома по завершении включения лазерного поля и (б) скорость ионизации на «полке» лазерного импульса для доли атомов, оставшихся нейтральными после включения поля. Результаты проведенных 3D расчетов показывают, что при любой поляризации лазерного излучения (а) зависимость первой из этих величин от пиковой интенсивности лазерного импульса близка к аналогичной зависимости, полученной в 2D ab initio pacчетах [4, 5] для случая линейно-поляризованного лазерного импульса; эта зависимость включает «окно стабильности», сменяющееся быстрым уменьшением вероятности «выживания» при более высоких интенсивностях; (б) вторая из этих величин (скорость ионизации «выживших» атомов) монотонно падает с ростом интенсивности лазерного излучения, демонстрируя поведение, близкое к полученному в рамках SFA [7, 8].

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, соглашения № 11.G34.31.0011 и № 8729, и грантов РФФИ № 12-02-31325 и № 12-01-31270. М.Ю. Емелин благодарит за персональную поддержку некоммерческий фонд "Династия".

- [1]. M. Gavrila, J. Phys. B 35, R147 (2002).
- [2]. A.M. Popov, O.V. Tikhonova and E.A. Volkova, J. Phys. B 36, R125 (2003).
- [3]. C.H. Keitel and P.L. Knight, Phys. Rev. A 51, 1420 (1995).
- [4]. N.J. Kylstra et al., Phys. Rev. Lett. 85, 1835 (2000).
- [5]. M.Yu. Ryabikin and A.M. Sergeev, Opt. Express 7, 417 (2000).
- [6]. H.R. Reiss, J. Opt. Soc. Am. B 7, 355 (1990).
- [7]. D.P. Crawford and H.R. Reiss, Opt. Express 2, 289 (1998).
- [8]. H.R. Reiss, Opt. Express 8, 99 (2001).
- [9]. J.R. Vázquez de Aldana and L. Roso, Laser Part. Beams 20, 185 (2002).
- [10]. M. Forre et al., Phys. Rev. A 76, 033415 (2007).

НЕУПРУГИЙ ТУННЕЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ В АТОМАХ И МОЛЕКУЛАХ

Б.А. Зон, А.С. Корнев

394006, г. Воронеж, Воронежский государственный университет

a-kornev@yandex.ru

Появление мощных лазеров стимулировало исследования образования многозарядных ионов (МЗИ). В настоящее время рекордная кратность для ионизации атомов оптическим излучением составляет 25 [1].

Теоретическое описание процесса образования многозарядных ионов до появления наших работ основывалось на модели Аммосова–Делоне–Крайнова (АДК) [2]. Данная модель является одночастичной, и соответствует туннельному пределу теории Келдыша.

Важность многочастичных эффектов можно проиллюстрировать на простейшем примере. Рассмотрим двукратную туннельную ионизацию атома благородного газа A. Промежуточный ион A^{1+} имеет кон-

фигурацию p^5 и может находиться как в основном $({}^2P_{3/2})$, так и в возбужденном $({}^2P_{1/2})$ состояниях (Рис. 1). В первом случае процесс описывается моделью АДК: в туннелировании участвуют только основные состояния атома и ионов. Во втором случае происходит так называемый неупругий туннельный эффект (НТЭ), когда туннелирование одного из



Рис. 1

электронов сопровождается возбуждением ионного остова. Формула для вероятности неупругого туннельного эффекта выведена в работе [3] в рамках приближения Карлсона [4]. Известное приближение встряски является предельным случаем модели [3], когда энергии возбужденных состояний ионов пренебрежимо малы.

В работах [5] развита кинетическая модель образования МЗИ кратности 1 – 6, в основе которой лежит представление о НТЭ. Для минимизации влияния перерассеяния выбрана циркулярная поляризация излучения. В частности, показана определяющая роль НТЭ в образовании ионов Ne²⁺ [6] в импульсе с длительностью 150 фс, в то время как модель АДК дает более чем на порядок заниженные результаты. Позднее, в Резерфордовской лаборатории (Appleton, Великобритания) для проверки теории [5] был поставлен эксперимент по образованию ионов Ar¹⁺ –

Ar⁶⁺ [7] в импульсе с длительностью 50 фс, который полностью подтвердил теорию неупругого туннельного эффекта.

В работах [8] теория НТЭ позволила воспроизвести экспериментальные данные для ионов более высокой кратности [1]: Ar⁹⁺, Ar¹¹⁺ – Ar¹⁴⁺, Kr¹³⁺ – Kr¹⁷⁺ при длительности импульса 25 фс. Рост интенсивности приводит к подавлению перерассеяния магнитным полем световой волны и позволяет пренебречь перерассеянием даже в случае линейной поляризации. Показана применимость модели НТЭ до кратностей ~20, когда начинают проявляться релятивистские эффекты.

Другим многочастичным эффектом является коллективный туннельный эффект (КТЭ) [9], когда за один полупериод лазерного поля туннелируют сразу 2 и более электронов (рис. 1). Важность КТЭ продемонстрирована в работе [10] на примере атома Rb для коротких импульсов с длительностью менее 5 фс. Важность КТЭ именно для коротких световых импульсов имеет вполне наглядное физическое объяснение. Для коротких импульсов электроны просто «не успевают» туннелировать последовательно друг за другом, что явно следует из кинетических уравнений. Наконец, третьим многочастичным эффектом является быстрая релаксация ионного остова по магнитным квантовым числам, что обусловливает формирование электронных термов между актами туннелирования. Рассмотрение образования МЗИ без учета этого эффекта проведено в работе [11], что привело к некоторым парадоксальным результатам.

В молекулах открываются новые горизонты НТЭ в связи с наличием колебательных степеней свободы. В недавней работе [12] нами был предложен новый механизм «анти-Стоксова усиления» туннельной ионизации молекул. Если в исходной нейтральной молекуле накачать v_i -е колебательное состояние, то ионизация с переходом в основное колебательное состояние иона существенно превышает ионизацию из основного колебательного состояния нейтральной молекулы. Это было продемонстрировано на простейшем примере ионизации молекулы водорода различного от изотопного состава.

Однако лазерная накачка гомоядерных молекул затруднена в связи с дипольными правилами отбора. Поэтому нами обобщен метод, предложенный в [12], на случай гетероядерных молекул с использованием диполь-сферических функций (см. работу [15] и ссылки в ней). При наличии постоянного дипольного момента в радиальном уравнении Шрёдингера появляется эффективный центробежный потенциал, соответствующий нецелому орбитальному моменту. Его кор-

ректный учет позволяет с точностью до ~ 0.1 % определить константы в асимптотической форме волновой функции валентного электрона.

Формула для скорости туннельной ионизации состоит из четырех множителей: 1) квадрат асимптотической константы; 2) туннельный фактор; 3) квадрат интеграла перекрытия между электронными волновыми функциями иона и остова нейтральной молекулы; 4) фактор Франка – Кондона. Последний фактор наиболее важен в теоретическом описании анти-Стоксова усиления ионизации. Поэтому нами учтено также изменение этого фактора в сильном лазерном поле.

Анти-Стоксово усиление туннельной ионизации показано как увеличение отношения ионизационных сигналов из возбужденных колебательных состояний для молекул HF (до 10 раз) и HCl (до 2 раз).

Таким образом, появляется инструмент для диагностики колебательных степеней свободы. Он может быть использован, например, в исследовании кинетики газофазных химических реакций. В принципе, предварительная накачка колебательных состояний позволяет проводить лазерное разделение изотопов, поскольку частоты молекулярных колебаний зависят от масс ядер.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 11-02-00170).

- [1]. K. Yamakawa et al., Phys. Rev. A 68, 065403 (2003).
- [2]. М.В. Аммосов, Н.Б. Делоне, В.П. Крайнов, ЖЭТФ 91, 2008 (1986).
- [3]. Б.А. Зон, ЖЭТФ 118, 1041 (2000).
- [4]. T.A. Carlson, Phys. Rev. 156, 142 (1967).
- [5]. A.S. Kornev, E.B. Tulenko, and B.A. Zon, Phys. Rev. A 68, 043414 (2003); Phys.
 Rev. A 69, 065401 (2004).
- [6]. D.N. Fittinghoff et al., Phys. Rev. A 49, 2174 (1994).
- [7]. W.A. Bryan et al., Nature Phys. 2, 379 (2006).
- [8]. Б.А. Зон, А.С. Корнев, Е.Б. Туленко, ЖЭТФ 138, 1044 (2010); А.S. Kornev,
 Е.В. Tulenko, and В.А. Zon, Phys. Rev. A 84, 053424 (2011).
- [9]. Б.А. Зон, ЖЭТФ 116, 410 (1999).
- [10]. A.S. Kornev, E.B. Tulenko, and B.A. Zon, Phys. Rev. A 79, 063405 (2009).
- [11]. R. Taïeb, V. Véniard, and A. Maquet, Phys. Rev. Lett. 87, 053002 (2001).
- [12]. A.S. Kornev and B.A. Zon, Phys. Rev. A 86, 043401 (2012).
- [16]. V.E. Chernov, I.Yu. Kiyan, H. Helm and B.A. Zon, Phys. Rev. A 71, 033410 (2005).

РЕЗОНАНСНОЕ ТОРМОЗНОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ ЭЛЕК-ТРОНА НА АТОМЕ В СИЛЬНОМ ЛАЗЕРНОМ ПОЛЕ

<u>А.Н. Желтухин</u>¹, М.В. Фролов¹, А.В. Флегель^{1,2}, Н.Л. Манаков¹, А.F. Starace² ¹ 394006, г. Воронеж, Воронежский государственный университет ² The University of Nebraska, Lincoln, Nebraska 685888-0111, USA

zheltukhin@phys.vsu.ru

Спонтанное тормозное излучение (ТИ) с частотой Ω при рассеянии электрона с энергией E на атоме, поддерживающем связанное состояние $\psi_0(\mathbf{r})$ с энергией E_0 , в присутствии сильного лазерного излучения с напряженностью электрического поля $\mathbf{F}(t) = \mathbf{F} \cos \omega t$ может происходить путем перехода электрона в связанное состояние с последующей ионизацией. Мы показываем, что процесс резонансного ТИ (РТИ) приводит к усилению спектральной плотности ТИ на несколько порядков в окрестности резонансных частот тормозного фотона $\Omega_{\mu} = (E + u_p + \mu \hbar \omega + |\text{Re}\varepsilon|)/\hbar$ (μ – целое), где $u_p = e^2 F^2/(4m\omega^2)$ – колебательная энергия электрона в лазерном поле, $\varepsilon = E_0 + \Delta E_0 - i\Gamma/2$ – комплексная квазиэнергия квазистационарного квазиэнергетического состояния (ККЭС) $\Phi_s(\mathbf{r},t)$, в которое переходит связанное состояние $\psi_0(\mathbf{r})$ под действием поля, а ΔE_0 и Γ – штарковский сдвиг и уширение связанного состояния. В соответствии с [1] квазиэнергетическая волновая функция рассеяния (КЭС) $\Phi_{n}(\mathbf{r},t)$ имеет полюсы при комплексных энергиях $E = E_{res} = \varepsilon + v\hbar\omega - u_p$ (v – целое), вычет в которых пропорционален $\Phi_{c}(\mathbf{r},t)$. Поэтому функция КЭС вблизи резонансных энергий электрона $E \approx E_{\nu} = \operatorname{Re}\varepsilon + \nu \hbar \omega - u_{p}$ может быть представлена в виде:

$$\Phi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r},t) = \Phi_{\mathbf{p}}^{(p)}(\mathbf{r},t) - \frac{2\pi\hbar^2}{m} \mathbf{A}_{-\mathbf{p}_v}^{(\mathrm{ion})} \frac{\Phi_{\varepsilon}(\mathbf{r},t)e^{i\nu\omega t}}{E - E_v + i\Gamma/2}, \quad E = \mathbf{p}^2/(2m), \quad (1)$$

где $\Phi_{\mathbf{p}}^{(p)}(\mathbf{r}, \mathbf{t})$ – потенциальная часть, слабо зависящая от энергии *E*. Коэффициент пропорциональности в формуле (1) может быть записан через амплитуду ионизации из ККЭС в КЭС с конечным импульсом электрона \mathbf{p}_{v} ($p_{v} = \sqrt{2mE_{v}}$):

$$A_{\mathbf{p}_{\nu}}^{(\text{ion})} = \frac{-m\omega}{4\pi^{2}\hbar^{2}} \int_{0}^{2\pi/\omega} dt e^{i\nu\omega t} \int d\mathbf{r} \Phi_{\mathbf{p}_{\nu}}^{(V)*}(\mathbf{r},t) U(r) \Phi_{\varepsilon}^{gr}(\mathbf{r},t),$$
где $U(r)$ – атомный потенциал,

 $\Phi_{\mathbf{p}_{\nu}}^{(V)}(\mathbf{r},t)$ – волновая функция свободного электрона в лазерном поле. Используя волновую функцию (1) в качестве конечного состояния, получено выражение для дважды дифференциального сечения ТИ вблизи резонансных частот Ω_{μ} :

$$\frac{d^2 \sigma_n(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_f)}{d\Omega d\Omega_{\mathbf{p}_f}} = \frac{d^2 \sigma_n^{(p)}(\mathbf{p}_i, \mathbf{p}_f)}{d\Omega d\Omega_{\mathbf{p}_f}} + \sigma_\mu^{(rec)}(\mathbf{p}_i) \frac{dR(\mathbf{p}_\nu)}{d\Omega_{\mathbf{p}_\nu}} \frac{2\hbar^2}{\pi\Gamma^2} \frac{1 + \operatorname{Im} q + \delta \operatorname{Re} q}{\delta^2 + 1}, \qquad (2)$$

где \mathbf{p}_i и $\mathbf{p}_f \approx \mathbf{p}_v$ – начальный и конечный импульсы электрона, n – число поглощенных лазерных фотонов в процессе ТИ, $d\Omega_{\mathbf{p}_f}$ – элемент телесного угла конечного импульса, $\sigma_n^{(p)}(\mathbf{p}_i,\mathbf{p}_f)$ – потенциальная часть сечения ТИ, $\sigma_{\mu}^{(rec)}(\mathbf{p}_i)$ – сечение μ -фотонной радиационной рекомбинации в лазерном поле, $dR(\mathbf{p}_v)/d\Omega_{\mathbf{p}_v} = (p_v/m) |A_{\mathbf{p}_v}^{(ion)}|^2$ – дифференциальная скорость ионизации связанного состояния, $\delta = 2\hbar(\Omega_{\mu} - \Omega)/\Gamma$ – расстройка резонанса, $q = 2\mathbf{d}^{(p)^*} \cdot \mathbf{d}^{(r)}/|\mathbf{d}^{(rec)}|^2$ – параметр асимметрии резонансного пика, $\mathbf{d}^{(r)} = -4\pi\hbar^2 A_{\mathbf{p}_v}^{(ion)} \mathbf{d}_{\mu}^{(rec)}(\mathbf{p}_i)$, $\mathbf{d}_{\mu}^{(rec)}(\mathbf{p}_i)$ – дипольный матричный элемент (ДМЭ) μ - фотонной радиационной рекомбинации, $\mathbf{d}^{(p)} \equiv \mathbf{d}_n^{(p)}(\mathbf{p}_i,\mathbf{p}_f)$ – потенциальная часть ДМЭ ТИ.

Как показывает сравнение с результатами численных расчетов в теории эффективного радиуса [2], в низкочастотном случае ($\hbar \omega << |E_0|$) хорошее согласие дают следующие приближения для величин, входящих в формулу (2):

I. Нерезонансное низкочастотное приближение Жоу и Розенберга для потенциальной части сечения ТИ [3]:

$$\mathbf{d}^{(p)} = \mathbf{d}^{(F=0)}(\mathbf{P}_i, \mathbf{P}_f) i^n J_n \left(\frac{e\mathbf{F} \cdot (\mathbf{p}_i - \mathbf{p}_f)}{m\hbar\omega^2} \right),$$
(3)

где $\mathbf{d}^{(F=0)}(\mathbf{P}_i, \mathbf{P}_f)$ – ДМЭ ТИ в отсутствии лазерного поля, но с модифицированными полем импульсами $\mathbf{P}_{i,f} = \mathbf{p}_{i,f} - (e/c)\mathbf{A}(t_0)$, где $\mathbf{A}(t)$ – векторный потенциал лазерного поля, а t_0 определяется из закона сохранения энергии при излучении спонтанного фотона в момент времени $t_0: P_i^2 - P_f^2 = 2m\hbar\Omega$. II. При $|p_{i,\parallel}| > |eF/\omega|$ ДМЭ радиационной рекомбинации в лазерном поле хорошо аппроксимируется выражением:

$$\mathbf{d}_{\mu}^{(rec)}(\mathbf{p}_{i}) = i^{-\mu} J_{\mu} \left(\frac{e \mathbf{F} \cdot \mathbf{p}_{i}}{m \hbar \omega^{2}}, \frac{u_{p}}{2 \hbar \omega} \right) \mathbf{d}^{(F=0)}(\mathbf{P}(t_{0})),$$

где $\mathbf{d}^{(F=0)}(\mathbf{P}(t_0))$ – ДМЭ рекомбинации в отсутствии лазерного поля, $J_{\mu}(u,v)$ – обобщенная функция Бесселя, $\mathbf{P}(t_0) = \mathbf{p}_{i,\perp} + \mathbf{e}_z \sqrt{2m(\hbar\Omega_{\mu} - |E_0|) - p_{i,\perp}^2}$, $\mathbf{e}_z = \mathbf{F}/F$, $p_{i,\parallel} = \mathbf{e}_z \cdot \mathbf{p}_i$, $\mathbf{p}_{i,\perp} = \mathbf{p}_i - \mathbf{e}_z p_{i,\parallel}$.

III. Для амплитуды ионизации можно использовать приближение Келдыша. Результат использования приближений I-III в формуле (2) показан на Рис. 1.



Рис. 1. Сечения е-Н тормозного излучения в теории эффективного радиуса для частоты лазера $\hbar \omega = 0.117$ эВ, интенсивности $I = 2 \times 10^{11}$ Вт/см², начальной энергии электрона $E_i = 5$ эВ и **p**_i || **F**. Толстая (красная) линия – точный численный расчет, тонкая (синяя) линия – формула (2) с использованием приближений I-III, пунктирная линия – формула (3). Панели (а) и (b) – сечения ТИ, проинтегрированные в узком интервале конечных энергий (3.1эВ < E_f < 4.3 эВ) и углов (155° < θ_f < 165°) электрона. Панель (с) – сечение ТИ, проинтегрированное по всем энергиям и углам конечного электрона.

Работа выполнена при поддержке Гранта РФФИ 13-02-00420.

[1] Н. Л. Манаков, А. Г. Файнштейн, ТМФ, 48, 385 (1981).

[2] Н. Л. Манаков, А. Ф. Старас, А. В. Флегель, М. В. Фролов, Письма в ЖЭТФ, **87**, 99 (2008).

[3] F. Zhou and L. Rosenberg, Phys. Rev. A 48, 505 (1993).

МЕТОД ДУАЛЬНОГО КИНЕТИЧЕСКОГО БАЛАНСА ДЛЯ УРАВНЕНИЯ ДИРАКА В АКСИАЛЬНО-СИМ-МЕТРИЧНОМ ПОЛЕ И ЕГО ПРИМЕНЕНИЕ ДЛЯ РАСЧЁТА ВЕРОЯТНОСТИ ИОНИЗАЦИИ ВОДОРО-ДОПОДОБНОГО ИОНА ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ

Е.Б. Розенбаум, В. М. Шабаев, К. Е. Соснова, Д. А. Тельнов

198504, Санкт-Петербург, Санкт-Петербургский Государственный Университет <u>efim.rozenbaum@gmail.com</u>

Решение нестационарного уравнения Дирака необходимо для изучения взаимодействия многозарядных ионов и сильного лазерного поля. Использование конечных базисных наборов для решения уравнения Дирака приводит, вообще говоря, к появлению так называемых шпуриозных состояний, являющихся нефизическими решениями. В общем случае очень сложно отделить физические решения от шпуриозных. Помимо этого, сходимость численных расчётов может ухудшаться из-за наличия ложных решений.

Метод дуального кинетического баланса (ДКБ) позволяет предотвратить появление шпуриозных состояний при использовании конечно-базисных схем решения уравнения Дирака. Метод ДКБ был разработан для радиального уравнения Дирака в работе [1]. В представляемой работе он был обобщён на случай трёхмерных систем с аксиальной симметрией. В частности, этот подход может быть применён к задачам о многозарядном ионе в сильном лазерном поле, включая расчёты вероятностей рождения электрон-позитронных пар.

Ключевой идеей метода ДКБ является специальное преобразование базиса. При этом преобразовании устанавливаются определённые связи между верхним и нижним спинорами, входящими в базисные биспиноры. Эти связи отвечают нерелятивистскому пределу уравнения Дирака.

Введём сферические координаты r, θ и φ . Пусть $\{B_k(r)\}_{k=1}^{N_r}$ и $\{P_l(\theta)\}_{l=1}^{N_{\theta}}$ — наборы однокомпонентных базисных функций. Из них можно по-разному построить базис четырёхкомпонентных функций двух переменных (r и θ ; переменная φ в случае аксиальной симметрии отделяется аналитически). Если построить базис так:

$$W_{kl}^{(u)}(r,\theta) = B_k(r)P_l(\theta)\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{u}}, \qquad u = 1, ..., 4,$$
 (1)

где e_u — стандартные четырёхкомпонентные орты, то в результате решения возникают шпуриозные состояния. Базис, трансформированный в соответствии с методом ДКБ, представляется в следующем виде:

$$W_{kl}^{(u)}(r,\theta) = \begin{pmatrix} \mathbb{I}_{2} & \frac{1}{2mc} D_{m_{j}}^{\dagger} \\ \frac{1}{2mc} D_{m_{j}}^{\dagger} & \mathbb{I}_{2} \end{pmatrix} B_{k}(r) P_{l}(\theta) \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{u}}, \qquad (2)$$
$$u = 1, ..., 4; \ k = 1, ..., N_{r}; \ l = 1, ..., N_{\theta}.$$

Дифференциальный оператор D_{m_j} в формуле (2) получается при исключении азимутального угла φ из уравнения Дирака, записанного в сферической системе координат для определённого значения проекции m_j полного углового момента j.

Расчёты спектров водородоподобных ионов (в том числе, во внешних стационарных электрических и магнитных полях, снимающих сферическую симметрию) подтверждают, что шпуриозные состояния при использовании метода ДКБ не появляются.

Для решения нестационарного уравнения Дирака используется метод сплитоператора [2]. В рамках этого метода волновая функция пошагово развивается во времени. Один шаг по времени на малый интервал Δt осуществляется следующим образом. Пусть гамильтониан (в нашем случае — гамильтониан Дирака) представлен в виде

$$H[\mathbf{r},t] = H_0[\mathbf{r}] + \mathbf{V}[\mathbf{r},t], \tag{3}$$

где H_0 — стационарный гамильтониан иона, V — потенциальная энергия электрона в лазерном поле. Тогда шаг по времени для волновой функции:

$$\Psi(\mathbf{r}, t_0 + \Delta t) =$$

$$= \exp\left[-\frac{i}{2}\Delta t H_0\right] \exp\left(-i \cdot \Delta t \cdot V\left[\mathbf{r}, t_0 + \frac{\Delta t}{2}\right]\right) \exp\left[-\frac{i}{2}\Delta t H_0\right] \Psi(\mathbf{r}, t_0) + O(\Delta t)^3.$$
(4)

Оператор $\exp\left[-\frac{i}{2}\Delta tH_0\right]$ восстанавливается по своему спектральному разложению, найденному при решении стационарной задачи:

$$\exp\left[-\frac{i}{2}\Delta tH_0\right] = \sum_k \exp\left[-\frac{i}{2}\Delta tE_k\right] |\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|.$$
(5)

Метод сплит-оператора обладает высокой точностью и численной эффективностью в случае, если матрица потенциальной энергии во внешнем поле является диагональной. В этой ситуации оператор $\exp\left(-i \cdot \Delta t \cdot V\left[\mathbf{r}, t_0 + \frac{\Delta t}{2}\right]\right)$, который необходимо вычислять на каждом шаге, представляется экспонентой от диагональной матрицы. При использовании базисов (1) или (2) это, вообще говоря, не так. Однако можно перейти (и такой переход производится) к представлению, где соответствующая матрица диагональна.

Для демонстрации эффективности используемых подходов произведён расчёт зависимости полной вероятности ионизации водородоподобного иона олова (Z = 50) лазерным импульсом от длины волны лазера (рис. 1). Параметры импульса: огибающая имеет форму sin² и содержит 20 периодов дёнными в работе [3].



Работа выполнена при поддержке исследовательского центра ФАИР-Россия и фонда Дмитрия Зимина «Династия».

Литература:

- [1] V. M. Shabaev *et al.*, Phys. Rev. Lett. **93**, 130405 (2004).
- [2] J. A. Fleck, J. R. Morris, M. D. Feit, Appl. Phys. 10, 129 (1976).
- [3] Yulian V. Vanne, Alejandro Saenz, Phys. Rev. A 85, 033411 (2012).

РЕЛЯТИВИСТСКИЕ ЭФФЕКТЫ В МНОГОЧАСТИЧНОЙ ТЕОРИИ ОБРАЗОВАНИЯ ИОНОВ РЕКОРДНОЙ КРАТНОСТИ В СВЕРХСИЛЬНОМ ЛАЗЕРНОМ ПОЛЕ

Б.А. Зон, А.С. Корнев, Е.Б. Туленко

394006, г. Воронеж, Воронежский государственный университет

zon@niif.vsu.ru

Многократная ионизация является одним из важнейших эффектов в сильных лазерных полях. В частности, в работе [1] получены ионы Xe^{25+} . Это рекордная кратность для оптических полей. До настоящего времени эти результаты не перекрыты в эксперименте и не интерпретированы в теории. В работах [2] нами предложена нерелятивистская многочастичная модель туннельной ионизации атомов. В ее основе лежит идея неупругого туннельного эффекта (НТЭ) и *LS* связи моментов электронов. Эта модель успешно описывает многие экспериментальные данные, включая образование ионов Ar^{9+} , $Ar^{11+}...Ar^{13+}$ и $Kr^{13+}...Kr^{17+}$ [1]. Для ионов Xe^{21+} , Xe^{22+} теория [2] дает заниженные результаты. Данное расхождение можно частично объяснить релятивистскими эффектами.

Проведенный анализ показывает важность не только НТЭ, но также и следующих релятивистских эффектов: 1) подавления перерассеяния в сверхсильных полях; 2) *jj*-схемы связи моментов в остове. Релятивистская связь между энергией и импульсом туннелирующего электрона, а также искривление подбарьерной траектории магнитной компонентой лазерного поля не оказывают заметного влияния на выход многозарядных ионов. При кратности ионизации выше 20 поляризуемость ионов настолько малы, что *jj*-связь не может быть разрушена лазерным полем.

Полученные численные результаты приведены на Рис. 1. Представлен относительный выход ионов Xe^{20+} .. Xe^{23+} по отношению к выходу ионов Xe^{19+} при интенсивности излучения 2.6×10^{19} Вт/см² в условиях эксперимента [1] (длина волны лазерного излучения 800 нм, длительность лазерного импульса на полувысоте 25 фс).

Таким образом, *jj*-схема связи моментов в многоэлектронной оболочке делает возможным качественное объяснение образования ионов Xe¹⁹⁺... Xe²³⁺. Тем не менее, остающееся расхождение экспериментальных и теоретических данных не может быть устранено в рамках предложенной теории.



Рис. 1. Отношение ионизационных сигналов для ионов Xe^{Z+}. Экспериментальные данные взяты из работы [1].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 11-02-00170).

- [1]. K. Yamakawa et al., Phys. Rev. A 68, 065403 (2003).
- [2]. A.S. Kornev, E.B. Tulenko, and B.A. Zon, Phys. Rev. A 68, 043414 (2003); 79, 063405 (2009); 84, 053424 (2011); 85, 035402 (2012).

ПРИНЦИПЫ ФОРМИРОВАНИЯ ЭКСТРЕМАЛЬНО КОРОТКИХ ИМПУЛЬСОВ ИЗ РЕЗОНАНСНОГО ИЗЛУЧЕНИЯ В АТОМАРНЫХ ГАЗАХ

<u>В.А. Антонов</u>^{1,2,*}, Е.В. Радионычев^{1,2}, М.Ю. Емелин¹, М.Ю. Рябикин¹, О.А. Кочаровская²
¹ 603950, г. Нижний Новгород, Институт прикладной физики РАН,
² Department of Physics & Astronomy, Texas A&M University, College Station, TX 77843-4242, USA,

* antonov@appl.sci-nnov.ru

В последние годы растущий интерес привлекает возможность исследования и управления ходом протекания сверхбыстрых оптических процессов в атомах, облучаемых одновременно интенсивным относительно низкочастотным лазерным полем и высокочастотным излучением, близким к резонансу с переходом между связанными состояниями активного электрона [1–5]. Данные исследования открывают возможность управления вероятностью ионизации и/или возбуждения атома на временах, составляющих доли периода лазерного поля, обеспечивая, тем самым, контроль отклика атома на внешние воздействия с аттосекундным временным разрешением.

До сих пор экспериментальные работы в этой области ограничивались исследованием атомов гелия, обладающих наиболее высоким среди нейтральных атомов потенциалом ионизации и наибольшими частотами переходов из основного в возбуждённые состояния дискретного спектра. Выбор гелия обусловлен возможностью резонансного возбуждения внутриатомных переходов с использованием излучения высоких гармоник и аттосекундных импульсов, сгенерированных в благородных газах.

Недавно был предложен метод формирования экстремально коротких оптических импульсов фемто- и аттосекундной длительности, пригодных для возбуждения резонансных процессов в атомах с меньшими по сравнению с гелием значениями потенциала ионизации [6, 7], рассмотрены различные варианты экспериментальной реализации [8, 9], и показана возможность формирования одиночных

аттосекундных импульсов из резонансного излучения [10]. Метод основывается на резонансном взаимодействии высокочастотного излучения с атомами, одетыми интенсивным низкочастотным лазерным полем, вызывающим осцилляции положения и ширины квазидискретных атомных энергетических уровней во времени и пространстве вслед за осцилляциями лазерного поля вследствие эффекта Штарка и ионизации из возбуждённых атомных состояний, соответственно. В работах [6–10] рассмотрена возможность формирования ультракоротких импульсов, резонансных переходу из основного на первый возбуждённый энергетический уровень атомов водорода и водородоподобных ионов.

В данном докладе на основе представленных аналитических решений проанализированы принципы формирования экстремально коротких импульсов и показана универсальность рассматриваемого метода, а именно, возможность формирования импульсов, резонансных квантовому переходу произвольного атомарного газа. Показано, что общим для атомарных газов механизмом формирования экстремально коротких импульсов является прерывание резонансного рассеяния высокочастотного излучения в окрестности максимумов модуля напряжённости лазерного поля вследствие быстрой ионизации из возбуждённых атомных состояний, приводящей к эффективному исчезновению резонанса, и возобновление резонансного рассеяния в окрестности нулей напряжённости лазерного поля. Специфическим для водородоподобных атомов механизмом формирования ультракоротких импульсов является конструктивная интерференция квантовых переходов с основного энергетического уровня на подуровни первого возбуждённого энергетического уровня, расщеплённые сильным лазерным полем и осциллирующие во времени и пространстве в противофазе друг к другу. Аналитические решения сопоставлены с численными, - как полученными с использованием приближений 2-х и 3-х уровневой среды с зависящими от времени параметрами, так и с решением нестационарного уравнения Шрёдингера. Приведены оценки условий экспериментальной реализации в среде атомарного водорода, гелия и двукратно ионизованного лития. Обсуждаются возможности использования сформированных импульсов для сверхбыстрого резонансного управления квантовым состоянием атомов и молекул и осуществления нелинейной аттосекундной спектроскопии.

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки Российской Федерации, соглашения № 8520, № 11.G34.31.0011 и № 07.514.11.4162,

грантов РФФИ № 12-02-12101, № 12-02-31325, № 12-02-33074, №. 13-02-00831, и гранта NSF № 0855688. В.А. Антонов благодарит за персональную поддержку не-коммерческий фонд "Династия".

- P. Johnsson, J. Mauritsson, T. Remetter, A. L'Huillier, and K. J. Schafer, Phys. Rev. Lett. 99, 233001 (2007).
- [2].X. M. Tong, P. Ranitovic, C. L. Cocke, and N. Toshima, Phys. Rev. A 81, 021404(R) (2010).
- [3].P. Ranitovic, X. M. Tong, C.W. Hogle, X. Zhou, Y. Liu, N. Toshima, M. M. Murnane, and H. C. Kapteyn, Phys. Rev. Lett. **106**, 193008 (2011).
- [4].N. Shivaram, H. Timmers, X.-M. Tong, and A. Sandhu, Phys. Rev. Lett. 108, 193002 (2012).
- [5].M. Chini, B. Zhao, H. Wang, Y. Cheng, S. X. Hu, and Z. Chang, Phys. Rev. Lett. 109, 073601 (2012).
- [6].Y. V. Radeonychev, V. A. Polovinkin, and O. Kocharovskaya, Phys. Rev. Lett. 105, 183902 (2010).
- [7].V. A. Polovinkin, Y. V. Radeonychev, and O. Kocharovskaya, Opt. Lett. 36, 2296– 2298 (2011).
- [8].Y. V. Radeonychev, V. A. Polovinkin, and O. Kocharovskaya, Laser Physics 21, 1243–1251 (2011).
- [9].Y. V. Radeonychev, V. A. Polovinkin, and O. Kocharovskaya, Laser Physics 22, 1547–1552 (2012).
- [10]. V. A. Antonov, Y. V. Radeonychev, and O. Kocharovskaya, Phys. Rev. Lett. 110, 213903 (2013).

НЕУПРУГИЕ ПРОЦЕССЫ ПРИ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ УЛЬТРАКОРОТКИХ ИМПУЛЬСОВ С ЭКЗОТИЧЕСКИМИ АТОМАМИ

М.К. Есеев, В.И. Матвеев

163002, г. Архангельск, САФУ имени М.В. Ломоносова

m_eseev@mail.ru

Значительный генерации прогресс в области И использования ультракоротких импульсов электромагнитного поля [1, 2] стимулирует исследования поведения экзотических атомов в полях ультракоротких импульсов. Рост интереса к физике таких импульсов связан не только с современными тенденциями лазерной физики и возможностями генерации ультракоротких импульсов, но и со значительным прогрессом в технике ускорителей тяжелых ионов, поскольку поля, создаваемые релятивистскими и ультрарелятивистскими заряженными банчами схожи по своим свойствам к полю сжатого светового импульса электромагнитной волны. Например, в экспериментах [3] исследовалась двойная и однократная ионизация атома Не ударом быстрого многозарядного иона U⁹²⁺ (энергия 1 ГэВ/нук.) и моделировался сверхинтенсивный (более 10¹⁹ Вт/см²), и сверхкороткий (~ 1 аттосек.) импульс. Целью данной работы явялется анализ неупругих процессов возбуждения, ионизации, переизлучения экзотических атомов в поле ультракоротких импульсов аттосекундной длительности на примера атома позитрония, антиводорода.

В работе [4] методами прямого численного интегрирования нестационарного уравнения Шредингера расчитана вероятность ионизации позитрония лазерными импульсами фемтосекундной длительности. Модель Келдыша для волковских волновых функций с кулоновскими поправками сопоставлялась в статье [5] с численным решением нестационарного уравнения Шредингера при расчете неупругих процессов в атоме позитрония в поле фемтосекундного лазера. В работе [6] для описания процесса ионизации позитрония наряду с моделью Келдыша численно решались классические частиц с использованием уравнения движения методом Монте-Карло. Длительность импульса при этом составляла порядка ста аттосекунд. Помимо процессов возбуждения И ионизации активно исследуется рассеяние

электромагнитного поля на позитронии. Атом позитрония свободен от релятивистского дрейфа электрона относительно позитрона в поле интенсивной электромагнитной волны, поэтому представляет интерес с точки зрения возможностей генерации высоких гармоник. Сечения комптоновского рассеяния рентгеновских фотонов на позитронии с учетом интерференции на двух центрах было найдено в работе [7]. Процессы же переизлучения ультракоротких импульсов длительностью длительностью порядка аттосекуды и менее на атоме позитрония до настоящего времени не рассматривались, хотя аналогичные процессы при выборе атомов и молекул в качестве мишеней рассмотрены недавно в ряде теоретических работ (см., например, [8] и приведенные там ссылки). В настоящей работе рассмотрены процессы возбуждения, развала и переизлучения взаимодействии атома позитрония с ультракороткими импульсами при электромагнитного поля. Развитая методика позволяет произвести точный учет пространственной неоднородности поля ультракороткого импульса и импульсов фотонов в процессах переизлучения. В рассматриваемых нами случаях длительность ультракоротких импульсов τ и время их взаимодействия с мишенью считаются значительно меньшими по сравнению с характерным атомным временем τ_a . При этом поле ультракороткого импульса учитывается точно в рамках приближения внезапных возмущений, а процесс излучения фотонов описывается по теории возмущений. Получены вероятности возбуждения и развала позитрония в такого рода процессах. Определены вероятности переходов в ридберговских состояниях атомов порзитрония и антиводорода. Развито описание процессов переизлучения позитронием ультракоротких импульсов электромагнитного поля. Получены угловые распределения и спектры переизлучения. Показано, что процессы интерференции амплитуд излучения фотона электроном и позитроном вносят заметный вклад в спектры переизлучения. Развитый подход применим при взаимодействии позитрония и антиводорода с ультракороткими импульсами аттосекундной и меньшей длительности.

Работа выполнена при поддержке ФЦП "Научные и научно-педагогические кадры инновационной России", соглашение № 14.А18.21.1302.

- [1]. Krausz F., Ivanov M. Rev. Mod. Phys., 81, 163 (2009).
- [2]. Zhao K. et. al. Optics Lett., 37, 3891 (2012).
- [3]. Moshammer R., Schmitt W., Ullrich J. et al. Phys. Rev. Lett. 79, 3621 (1997).
- [4]. Madsen L.B. Nucl. Instr. and Meth. B, 221, 174 (2004).
- [5]. Rodriguez V.D. Nucl. Instr. and Meth. B, 247, 105 (2006).
- [6]. Borbely S., Tokesi K., Nagy L. Nucl. Instr. Meth. B, 267, 386 (2009).
- [7]. Kaliman Z., Pisk K., Pratt R.H. Phys. Rev. A, 83, 053406 (2011).
- [8]. Астапенко В.А. ЖЭТФ, 139, 228 (2011).

АНАЛИТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ВЫСОКОЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО ПЛАТО В СПЕКТРАХ ИОНИЗАЦИИ И ГЕНЕРАЦИИ ГАРМОНИК АТОМАМИ В ИНТЕНСИВНОМ КОРОТКОМ ЛАЗЕРНОМ ИМПУЛЬСЕ

<u>H.Л. Манаков</u>¹, М.В. Фролов¹, А.F. Starace² ¹ Воронежский государственный университет, Воронеж ² The University of Nebraska, Lincoln, Nebraska 68588-0299, USA manakov@phys.vsu.ru

Одним из направлений исследования высокоэнергетического спектра электронов при надпороговой ионизации (НПИ) атомов и высокочастотного спектра генерируемого излучения при генерации высших гармоник (ГВГ) интенсивного лазерного поля атомами является извлечение из спектров НПИ и ГВГ информации о динамических параметрах свободного атома (сечения упругого рассеяния электрона на положительном ионе атома при НПИ или сечения фотоионизации из внешней оболочки атома при ГВГ). Эти исследования основаны на факторизации выхода электронов и фотонов в области высокоэнергетического плато на произведение динамического атомного параметра и лазерного параметра («электронный волновой пакет» — ЭВП), слабо зависящего от структуры атомной мишени. Для линейно поляризованного поля такая факторизация предложена эмпирически (на основе численного решения нестационарного уравнения Шредингера) в работе [1] и для случая монохроматического поля теоретически обоснована в работах [2] (для НПИ) и [3,4] (для ГВГ), основываясь на использовании теории квазистационарных квазиэнергетических состояний квантовой системы в периодическом внешнем поле для точно решаемой модельной задачи, позволяющей установить явный вид ЭВП как для НПИ, так и для ГВГ.

В настоящей работе теоретический подход, использованный в [2–4], обобщается на случай коротких и ультракоротких импульсов. Основная идея такого обобщения состоит в рассмотрении вспомогательной задачи о воздействии на квантовую систему периодической (с некоторым большим периодом \mathcal{T}) последовательности коротких импульсов (pulse train) с длительностью τ , содержащих несколько колебаний на несущей оптической частоте импульса ω (см. рис. 1). Для описания такого периодического воздействия применим формальный аппарат квазистационарных квазиэнергетических состояний, позволяющий получить общие выражения для вероятности ионизации и энергии испускаемых гармоник за

период \mathcal{T} , зависящие от длительности τ как от параметра. Результаты же для реального одиночного короткого импульса длительности τ могут быть получены из указанных выражений переходом к пределу $\mathcal{T} = \infty$.



Рис. 1. Периодическая (с периодом *T*) цепочка импульсов с длительностью т. Полученные аналитические результаты показывают, что факторизация выхода гармоник имеет место для импульса произвольной формы и длительности, а в случае НПИ выход электронов факторизуется только для случая ультракороткого импульса, для которого основной вклад дает ионизация на *одном* оптическом периоде импульса. Теоретические результаты хорошо согласуются с результатами численного решения уравнения Шредингера для ГВГ [5,6] и НПИ [7].

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 13-02-00420-а.

- [1]. T. Morishita, A.-T. Le, Z. Chen, and C.D. Lin, Phys. Rev. Lett. 100, 013903 (2008).
- [2]. M.V. Frolov, N.L. Manakov, and A.F. Starace, Phys. Rev. A 79, 033406 (2009).
- [3]. M.V. Frolov, N.L. Manakov, T.S. Sarantseva, M.Yu. Emelin, M.Yu. Ryabikin, and A.F. Starace, Phys. Rev. Lett. **102**, 243901 (2009).
- [4]. M.V. Frolov, N.L. Manakov, T.S. Sarantseva, and A.F. Starace, Phys. Rev. A 83, 043416 (2011).
- [5]. M.V. Frolov, N.L. Manakov, A.A. Silaev, N.V. Vvedenskii, and A.F. Starace, Phys. Rev. A 83, 021405(R) (2011).
- [6]. M.V. Frolov, N.L. Manakov, A. M. Popov, O.V. Tikhonova, E.A. Volkova, A.A. Silaev, N.V. Vvedenskii, and A.F. Starace, Phys. Rev. **85**, 033416 (2012).
- [7]. M.V. Frolov, D.V. Knyazeva, N.L. Manakov, A. M. Popov, O.V. Tikhonova,
 E.A. Volkova, M.-H. Xu, L.-Y. Peng, L.-W. Pi, and A.F. Starace, Phys. Rev. Lett. 108, 213002 (2012).

ИНТЕРФЕРЕНЦИОННЫЕ ЭФФЕКТЫ ПРЕИЗЛУЧЕ-НИЯ УЛЬТРАКОРОТКОГО ИМПУЛЬСА ЭЛЕКТРО-МАГНИТНОГО ПОЛЯ МНОГОАТОМНЫМИ СИСТЕ-МАМИ С УЧЁТОМ ТЕПЛОВЫХ КОЛЕБАНИЙ

Д.Н. Макаров, В.И. Матвеев

163002, г.Архангельск, Северный (Арктический) федеральный университет имени М.В. Ломоносова

makarovd0608@yandex.ru

Недавно в работе [1] на основе теории [2] рассмотрены процессы переизлучения ультракоротких импульсов электромагнитного поля линейными цепочками составленными из изолированных многоэлектронных атомов. Показано, что процессы интерференции амплитуд излучения фотона приводят к появлению характерных "дифракционных" максимумов, которые становятся бесконечно узкими при стремлении к бесконечности числа атомов в цепочке. Обобщение на случай многоатомных систем было проведено в [3]. Кроме того, подобные процессы во всех случаях были рассмотрены с учётом того, что многоатомные системы были жёстко связаны друг с другом и находились в состоянии покоя. В реальности, конечно же, существуют тепловые колебания в многоатомной системе, что может приводить к другой дифракционной картине.

В данной работе будет развита теория по излучению фотона при взаимодействии ультракороткого электромагнитного импульса с многоатомными системами с учётом тепловых колебаний атомов этой системы. Будет показано, что тепловые колебания существенно меняют дифракционную картину при определённых условиях. Кроме того, даже при абсолютном нуле температуры, вследствие нулевых колебаний, спектр переизлучения будет другой. Для линейной цепочки, рассматриваемую задачу можно решить точно (в рамках приближения внезапных возмущений). Подобные эффекты будут существенны не только в рассматриваемом случае, но и при поляризационном тормозном излучении при столкновениях быстрых ионов с многоатомными линейными цепочками [4].

В качестве примера рассмотрим переизлучение фотона при взаимодействии ультракороткого импульса электромагнитного поля с линейной цепочкой, где вы-

ражение для спектра переизлучения будет отличаться от спектра невзаимодействующих атомов фактором $g_N(pd)$ (введённый в работе [1]), отвечающий за дифракцию и этот фактор будет:

$$g_N(pd) = 2\sum_{m=1}^{N} (N-m)\cos(pdm)e^{-\frac{(pi)^2}{M}J(m)}$$
(1)

где

$$J(m) = \frac{1}{\pi} \int_{0}^{\pi} \frac{1}{\omega_k} \frac{1 + \exp(-\omega_k/T)}{1 - \exp(-\omega_k/T)} \sin^2\left(\frac{km}{2}\right) dk$$
(2)

где Т – температура цепочки, М – масса атома в цепочке, N – число атомов в цепочке, $\omega_k = 2\sqrt{\gamma/M} \sin(k/2)$, где γ - коэффициент жёсткости, $p = \omega/c(n-n_0)$, d – межатомное расстояние, ω - частота излучённого фотона, n – направление излучённого фотона, n₀ – направление падающего импульса. Подобный расчёт можно развить и на более сложные многоатомные структуры.

- [1]. В.И. Матвеев, Д.У. Матрасулов, Письма в ЖЭТФ, 96, 700 (2012).
- [2]. В.И. Матвеев ЖЭТФ, 124, 1023 (2003) [V. I. Matveev, JETP 97 (5), 915 (2003).].
- [3]. Д.Н. Макаров, В.И. Матвеев, ЖЭТФ, 2013, т. 144, N 5, с.О. (в печати)
- [4]. М.Я. Амусья, В.И. Матвеев, Письма в ЖЭТФ, 2013, т. 97, N 7, с.443.

РАСЧЕТЫ ЭНДОФУЛЛЕРЕНОВ ДЛЯ ГЕНЕРАЦИИ ВЫСШИХ ГАРМОНИК

П.В. Редькин¹, М.Б. Данаилов², Х. Захариас³, Р.А. Ганеев⁴

¹ 140104, г. Самарканд, Самаркандский государственный университет, Узбекистан ² I-34149, Trieste, Sincrotrone Trieste, Italy

³ 48149, Münster, Westfälische-Wilhelms Universität, Germany
 ⁴ 350-0495, Saitama, Saitama Medical University, Japan

rdkn_pvl@mail.ru

Резонансная генерация высших гармоник (ГВГ) является наиболее доступным путем создания интенсивного лазерного излучения в области вакуумного ультрафиолета. Показано, что она увеличивает эффективность обычной ГВГ почти в 200 раз для 13-й гармоники 800-нм излучения [1] и до 20 раз – для 11-й-15-й гармоник в плазме C_{60} [2]. Поскольку резонансы в этих системах имеют различную природу (в первом случае возбуждается внутренний электрон, а во второмвозбуждается коллективное колебание электронов), интересной представляется возможность одновременного использования этих резонансов. Очевидным подходом является использование молекул эндофуллеренов-то есть молекул фуллерена с имплантированными внутрь ионами. Такие системы были экспериментально получены для многих имплантируемых ионов (Sb, Te [3]), и для еще большего количества показана их стабильность[4]. Вместе с этим, очищенные эндофуллерены достаточно дороги, поэтому их теоретическое исследование актуально.

Полное квантомеханическое моделирование эндофуллеренов затруднено не столько большим количеством моделируемых электронов, что нейтрализуется методом функционала плотности, сколько невозможностью построить самосогласованную систему из фуллереновой оболочки и имплантированного иона в произвольном случае. Вместе с тем, в реальном эксперименте система из фуллерена и имплантированного иона вовсе не обязана быть самосогласованной и тем более - занимать низший уровень энергии, поскольку не требуется ее устойчивость. Поэтому нами в нарушение общепринятой практики моделирования самосогласованное поле строилось отдельно для фуллерена C_{60} и отдельно - для имплантируемого иона, а временные уравнения решать уже для простой суперпозиции этих систем. Это позволило нам провести сравнительный анализ спектров поглощения
и спектров гармоник в системах C_{60} , $In@C_{60}$, $Sb@C_{60}$ [5]. Результаты приведены на рис. 1. Видно, что пики поглощения смещаются к пикам ионных резонансов, но общая эффективность резонансной ГВГ и резонансного поглощения близка к показателям для чистого C_{60} .



Рис. 1. Спектры поглощения (а) и генерации высших гармоник (б) исследуемых систем, энергия - в гармониках накачки с центральной частотой 800 ни

Рассмотрим причины данного явления. По сдвигам спектра ясно, что модель, используемая нами, не экранирует имплантированный ион. Но благодаря общему корреляционному функционалу, две резонирующие системы связаны. Следовательно, сдвиг электронного облака вблизи иона влияет и на электронное облако вблизи поверхности C_{60} , изменяя его энергетическую структуру. Однако электронов в оболочке фуллерена значительно больше, чем в ионе, а оценку отклика системы мы берем из фурье-преобразования диполя по всем электронам. Таким образом, при отсутствии экранирования иона электронами молекулы фуллерена, сложения эффективности двух резонансов наблюдаться не будет, однако возможно использование эндофуллеренов для получения равномерно усиленной группы гармоник в области плато при использовании их в смеси с обычными фуллеренами. Для эксперимента при этом достаточно просто испарять ионы навстречу испарению фуллеренов C_{60} . Работа выполнена при поддержке Гранта Volkswagen Stiftung.

- [1] R. A.Ganeev, H. Singhal, P. A. Naik, V. Arora, U. Chakravarty, J. A. Chakera,
 R. A. Khan, I. A. Kulagin, P. V. Redkin, M. Raghuramaiah, and P. D. Gupta,
 Phys. Rev. A 74, 063824 (2006).
- [2] R. A.Ganeev, L.B.Elouga Bom, J. Abdul-Hadi, M. C. H. Wong, J. P. Brichta, V. R. Bhardwaj, and T. Ozaki, Phys. Rev. Lett. 102, 013903 (2009).
- [3] T. Ohtsuki, K. Ohno, K. Shiga, Y. Kawazoe, Y. Maruyama, K. Shikano, and K. Masumoto, Phys. Rev. B 64, 125402 (2001)
- [4] T. Ohtsuki, K.Ohno , Science and Technology of Advanced Materials 5, 621 (2004)
- [5] P.V. Redkin, M. B. Danailov and R.A. Ganeev, Phys. Rev. A 84, 013407 (2011)

FEATURES OF EXCITATION OF A TWO-LEVEL SYSTEM BY SHORT NONRESONANCE LASER FIELD

V.A. Astapenko, V.A. Bagan

Moscow institute of Physics and Technology, 141700 Dolgoprudny, Moscow

astval@mail.ru

The presentation is devoted to theoretical investigation of characteristic features arising during two-level system (TLS) excitation by short nonresonance laser pulses. The treatment is made within the applicability of perturbation approach. Main attention is given to the dependence of total excitation probability of TLS on the pulse duration for different detuning of carrier laser frequency from eigenfrequency of TLS. Various laser pulse shapes are considered.

The two-level system considered in this paper is an important physical model describing a dipole–allowed transition in the discrete spectrum of a quantum system. So the study of behavior of the TLS in the field of a short laser pulse is rather essential to understand the main regularities of pulse excitation of a substance.



Fig. 1. The normalized probability of TLS excitation with high detunings from resonance as a function of the pulse duration: solid curve — $\delta = 10\%$, dotted curve — $\delta = -10\%$, dashed curve — $\delta = 15\%$.

Here, $\delta = \frac{\omega - \omega_{21}}{\omega_{21}}$, ω is carrier frequency of the pulse, ω_{12} is own frequency of TLS.

The dependence of the excitation probability on the pulse duration at nonzero detuning of the carrier frequency from the TLS eigenfrequency is a curve with a maximum, the position of which (n_{max}) depends on the value and, generally speaking, on the sign of the frequency detuning, δ . In the limit of low relative detunings the dependence of the said maximum on the sign of the parameter δ becomes negligible. In this case the spectral dependence of the photoexcitation probability is described by a symmetric bell-shaped curve, the maximum of which is somewhat shifted in the direction of negative detunings.

For subcycle pulses corresponding to high frequency detunings, the photoexcitation spectrum becomes asymmetric, pulled into the region of positive values δ , with a maximum shifted in the direction of low carrier frequencies (negative values of the parameter δ).

For a Gaussian pulse, both corrected and traditional, an analytical expression was obtained that describes correctly the relationship of the values n_{max} and δ for small enough (in magnitude) values of the relative frequency detuning from the TLS eigenfrequency: $|\delta| < 10\%$, in this case, $n_{\text{max}} \ge 3$.

It is shown that in the considered case of applicability of the perturbation theory a considerable dependence of the probability of TLS excitation on the CE (carrier-envelope) phase takes place only for subcycle pulses with the duration n < 0.3. The phase dependence increases with relative frequency detuning δ , in this case the probability of TLS excitation by a cosine pulse exceeds the analogous value for a cosine pulse.

In fulfillment of the resonant condition $\omega = \omega_{21}$ the function $W_{21}(n)$ in the limit of ultrashort laser pulse durations increases with the parameter *n* nonlinearly. The linear mode of excitation, characteristic for long laser pulses.

The influence of the spectral width of the form of a line in the TLS $(\Delta \omega_{21})$ on the pulse duration dependence of the probability of its excitation was studied. It was shown that the function $W_{21}(n)$ with growing parameter $\Delta \omega_{21}$ changes its behavior. In particular, for large enough values $\Delta \omega_{21}$ the maximum in the dependence $W_{21}(n)$ degenerates into an "arm" followed by linear increase of the probability of TLS excitation with growing number n.

The calculations of the probability of TLS excitation by the formulas derived in the paper have shown that the main qualitative and quantitative regularities obtained in the work hold true also for other shapes of short laser pulses.

This research was carried out under financial support of RFBR (grant no № 13– 07–00270).

ПЕРЕНОС ЗАРЯДА В СТОЛКНОВЕНИЯХ Yb II и Rb I ПРИ ТЕМПЕРАТУРЕ НИЖЕ 1 К

 Э.Р. Сайфутярова¹, С.А. Яковлева², А.К. Беляев², <u>А.А. Бучаченко^{3,4}</u>
 ¹ Department of Chemistry, Frick Laboratory, Princeton University, NJ 08544, USA
 ² Факультет физики и Центр передовых теоретических исследований, РГПУ им. А.И. Герцена, 191186, Санкт-Петербург
 ³ Химический факультет МГУ имени М.В. Ломоносова, 119991, Москва

⁴ Институт проблем химической физики РАН, 143432, Черноголовка <u>alexei.buchachenko@gmail.com</u>

В последнее пятилетие создание гибридных ловушек открыло возможность экспериментальных исследований динамики ион-атомных и ион-молекулярных столкновений при низких энергиях. Наиболее точные на сегодняшний день экспериментальные результаты по низкотемпературному переносу заряда получены для иона Yb⁺, погруженного в конденсат Бозе-Эйнштейна Rb [1].

Для интерпретации этих данных выполнены прецизионные расчеты потенциальных кривых, матричных элементов неадиабатической и спин-орбитальной связи, функций дипольных моментов перехода [2]. В пренебрежении спинорбитальной связью перезарядка осуществляется за счет прямого взаимодействия состояния $A^{1}\Sigma^{+}$, соответствующего входному каналу Yb⁺ + Rb, с $X^{1}\Sigma^{+}$, соответствующим выходному каналу Yb + Rb⁺. Расчеты квантовой динамики методами искаженных волн и оптического потенциала показывают, что при энергиях столкновения ниже 10 см⁻¹ вероятность неадиабатической (безызлучательной) перезарядки пренебрежимо мала. Процесс проходит по радиационному механизму с образованием как колебательно-вращательно возбужденного молекулярного иона YbRb⁺, так и фрагментов Yb + Rb⁺, не способных покинуть ловушку. Несмотря на значительное влияние спин-орбитального взаимодействия на характер потенциальных кривых и функций момента перехода, оно практически не сказывается на вероятностях переноса заряда. Сечения перезарядки демонстрируют развитую резонансную структуру, связанную с захватом центробежным потенциалом и типичную для т.н. «ланжевеновского режима» ион-атомных столкновений [3].



Рис. 1. Коэффициент скорости *R* перезарядки Yb^+ + Rb как функция энергии столкновения *E* (в соответствии с условиями эксперимента). Резонансный контур – результат расчета для ¹⁷⁴Yb⁺, горизонтальные штрих-пунктирная и пунктирная линии – средние значения для ¹⁷⁴Yb⁺ и ¹⁷²Yb⁺. Заштрихованные области – экспериментальные результаты с учетом погрешности [1].

Рассчитанные коэффициенты скорости воспроизводят обратный изотопный эффект для ионов ¹⁷²Yb⁺ и ¹⁷⁴Yb⁺ и хорошо согласуются с данными эксперимента, см. рис. 1. Расхождение в распределениях продуктов (эксперимент дает 65% для выхода заряженных частиц из ловушки, расчет – 70% для образования молекулярного иона) можно объяснить эффективной фотодиссоциацией YbRb⁺ в поле охлаждающих и улавливающих лазеров.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проекты 11-03-00081 и 13-03-00163) и программы фундаментальных исследований Отделения химии и наук о материалах РАН 01, координируемой академиком О.М. Нефедовым.

[1]. C. Zipkes, S. Palzer, C. Sias, and M. Köhl, Nature 464, 388 (2010);
C. Zipkes, S. Palzer, L. Ratschbacher, C. Sias, and M. Köhl, Phys. Rev. Lett. 105, 133201 (2010);

L. Ratschbacher, C. Zipkes, C. Sias, and M. Köhl, Nature Phys. 8, 649 (2012).

- [2]. E. R. Sayfutyarova, A. A. Buchachenko, S. A. Yakovleva, and A. K. Belyaev, Phys. Rev. A 87, 052717 (2013).
- [3]. R. Côté and A. Dalgarno, Phys. Rev. A 62, 012709 (2000).

ЭФФЕКТЫ ДАЛЬНОДЕЙСТВУЮЩЕГО ВЗАИМО-ДЕЙСТВИЯ В ИОННО-КОВАЛЕНТНОЙ СВЯЗИ И ПРОЦЕССАХ ПЕРЕНОСА СЛАБОСВЯЗАННОГО ЭЛЕКТРОНА ПРИ СТОЛКНОВЕНИЯХ РИДБЕРГОВ-СКИХ АТОМОВ И ПОЛЯРНЫХ МОЛЕКУЛ С МАЛОЙ ЭНЕРГИЕЙ СРОДСТВА К ЭЛЕКТРОНУ

В.С. Лебедев^{1,2}, <u>А.А. Нариц</u>^{1,2}

¹ 119991, г. Москва, Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН
 ² 141700, Московская область, г. Долгопрудный, Московский физико-технический институт (Государственный университет)

narits@sci.lebedev.ru

Ряд интенсивно развиваемых направлений атомно-молекулярной физики тесно связан с исследованием механизмов разнообразных столкновительных и радиационных процессов, происходящих при очень больших расстояниях между частицами, а также с изучением эффектов дальнодействующего взаимодействия в слабосвязанных атомарных и молекулярных системах.

Данная работа посвящена исследованию эффектов дальнодействующего взаимодействия в процессах переноса электрона при столкновениях ридберговских атомов с полярными молекулами, имеющими малую энергию сродства к электрону. Для таких возмущающих частиц В одним из возможных результатов столкновения с ридберговским атомом A(nl) является образование ионной пары:

$$A(nl) + B \rightarrow A^+ + B_t^- \rightarrow A^+ + B^- \tag{1}$$

Реакция (1) происходит в результате неадиабатических переходов между ионными и ковалентными термами квазимолекулы, образующейся в ходе столкновения частиц. Образование ионной пары происходит, когда временно образующийся отрицательный ион B_t^- не распадается в результате всех возможных пересечений с ридберговскими ковалентными термами. Неадиабатические переходы с ридберговского ковалентного на ионный терм квазимолекулы рассмотрены в рамках модифицированной теории Ландау-Зинера, дополненной расчетом факторов выживания аниона при его распаде в кулоновском поле положительного ионного остова. С использованием аппарата неприводимых тензорных операторов и импульсного представления волновой функции высоковозбужденного атома получены точные выражения для матричных элементов перехода и параметра ионноковалентной связи. Разработанный подход [1] позволяет выйти за рамки традиционно используемого допущения о малости изменения волновой функции ридберговского атома в окрестности точки пересечения термов в области координат электрона, определяемой характерным радиусом волновой функции аниона. Это дает возможность корректно включить в рассмотрение эффекты дальнодействующего взаимодействия слабосвязанного электрона с нейтральным остовом отрицательного иона в исследуемых процессах.



Рис. 1. Зависимость сечений образования ионной пары при столкновениях атомов Cs(*ns*) с молекулами ацетонитрила, вычисленных различными теоретическими методами, от величины главного квантового числа *n* ридберговского атома. Расчет проводился при скорости относительного движения частиц $v = 5 \times 10^{-3}$ ат.ед.

Разработанная теория была применена нами к изучению процессов образования дипольно-связанных анионов при тепловых столкновениях высоковозбужденных атомов Rb, Xe, Cs с различными полярными молекулами, обладающими малой энергией сродства к электрону. Показано, что стандартный асимптотический подход [2], основанный на доминировании эффектов короткодействующего взаимодействия электрона с возмущающей нейтральной частицей, оказывается неприменимым к расчетам параметра ионно-ковалентной связи и сечений реакции (1) (если не предпринимать специальных мер по модификации величины константы С, определяющей асимптотическое поведение волновой функции отрицательного иона, для достижения согласия результатов расчета и эксперимента) в случае столкновений ридберговских атомов с нейтральными частицами со сродством к электрону 10 ÷ 100 мэВ. В общем случае здесь необходим точный расчет матричных элементов ионно-ковалентной связи, корректно учитывающий изменение волновой функции ридберговского атома на характерном размере отрицательного иона. Используемые ранее в ряде работ для этих целей асимптотические выражения для матричных элементов ионно-ковалентной связи [3] приводят к результатам для сечений образования слабосвязанных молекулярных анионов, которые сильно отличаются от тех, которые получаются при использовании соответствующей точной формулы для параметра связи. В результате проведенных исследований была установлена сильная зависимость сечений и констант скорости реакции (1) не только от главного, но и от орбитального квантового числа. Проведено сравнение полученных в данной работе результатов с экспериментом [3] и расчетами в рамках ряда других теоретических методов [4-6].

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты № 12-02-00713-а и 11-08-00879-а), ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» на 2009-2013 годы (соглашения № 8576 и 8396), а также программы "Фундаментальная оптическая спектроскопия и ее приложения" Отделения физических наук РАН.

- [1] V.S. Lebedev, A.A. Narits, Springer Ser. At. Opt. and Plasma Phys. 68, 211 (2012)
- [2] Б.М. Смирнов, Асимптотические методы в теории атомных столкновений (М.: Атомиздат, 1973).
- [3] R.K. Janev, A. Salin, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 5, 177 (1972)
- [4] C. Desfrançois, H. Abdoul-Carime, N. Khelifa, J.P. Shermann, Phys. Rev. Lett. 73, 2436 (1994).
- [5] C. Desfrançois, Phys. Rev. A 51, 3667 (1995).
- [6] E.Yu. Buslov, B.A. Zon, Phys. Rev. A 85, 042709 (2012)

КОГЕРЕНТНЫЕ ЭФФЕКТЫ ПРИ РАССЕЯНИИ БЫСТРЫХ ЭЛЕКТРОНОВ НА АТОМАХ, МОЛЕКУЛАХ И КЛАСТЕРАХ

Б.А. Зон

394006, г. Воронеж, Воронежский государственный университет zon@niif.vsu.ru

Несмотря на сложность и многообразие процессов, происходящих при рассеянии электронов на квантовых объектах (атомах, молекулах, кластерах), удается установить некоторые общие закономерности, которые, на первый взгляд, кажутся неожиданными. Речь идет об относительных величинах упругого и неупругого рассеяния. Казалось бы, что с увеличением сложности квантового объекта относительная величина сечения неупругого рассеяния должна возрастать, так как увеличивается число возможных неупругих каналов. В действительности, однако, имеет место обратное, и связано это с волновой природой рассеиваемого электрона. Если учесть многочастичную структуру мишени, то упругое рассеяние быстрого электрона на каждой частице мишени когерентно для всех частиц, поскольку состояние частиц мишени в процессе упругого рассеяния не изменяется. В результате для мишени, состоящей из *n* частиц, амплитуда рассеяния будет пропорциональна *n*, а сечение упругого рассеяния, в силу когерентности, пропорционально n^2 . Для неупругого же рассеяния, при котором состояния частиц мишени изменяются, амплитуды рассеяния на разных частицах некогерентны, и сечение неупругого рассеяния пропорционально n. Понятно, что с ростом n сечение упругого рассеяния будет расти быстрее, так что отношение сечений $\sigma_{\text{inel}}/\sigma_{\text{el}} \rightarrow 0$.

В работе [1] были проанализированы литературные данные, экспериментальные и теоретические, об интегральных сечениях упругого и полного рассеяния быстрых электронов более чем на 20 атомах и молекулах, и показано, что указанная выше закономерность действительно имеет место и может быть грубо описана зависимостью

 $\sigma_{\rm el}/(\sigma_{\rm inel} + \sigma_{\rm el}) \approx n/(n + n^*),$

причём $n^* \approx 5$.

Ясно, однако, что зависимость (1) для массивных (макроскопических) мишеней должна нарушаться. Об этом свидетельствуют такие явления, например, как вторичная электронная эмиссия: ионизация атомов, входящих в состав твердого тела, когда мишень содержит практически бесконечное число частиц. Целью данного сообщения является выяснение причины нарушения зависимости типа (1) и получение оценки числа частиц в мишени, начиная с которого эта зависимость нарушается.

Причина нарушения зависимости типа (1) связана с эффектом отдачи. При рассеянии электрона на малых объектах отдачу испытывает весь объект целиком, в результате чего когерентность упругих процессов сохраняется. Если же масса объекта становится достаточно большой, то рассеяние электрона на атоме, скажем, *a*, приводит к отдаче только этого атома. Атом *a* начинает двигаться относительно других атомов мишени, что формально можно описать возбуждением фононов. Аналогично ведет себя и другой атом, *b*. Но поскольку атомы *a* и *b* разные, когерентность исчезает, хотя электрон-атомное рассеяние может оставаться упругим.

Таким образом, существует некая критическая масса мишени, когда упругое рассеяние электрона на разных атомах мишени становится некогерентным. Применительно к кластерам качественная зависимость отношения сечений неупругого и полного рассеяния в зависимости от числа атомов в кластере



N показана на Рисунке. Задачей теории является получение оценки для числа N^{*} .

Очевидна близость рассматриваемой задачи к теории эффекта Мёссбауэра, для которого эффект отдачи также играет определяющую роль. Поэтому естественно использовать тот же математический аппарат, а именно, классическую работу Лэмба [2], посвященную рассеянию нейтронов на ядрах, находящихся в узлах кристаллической решетки, которая в свое время явилась основой и теории эффекта Мёссбауэра. Важное, однако, отличие, связано с невозможностью перехода к пределу бесконечного числа атомов в мишени, которое существенно упрощает как теорию рассеяния нейтронов, так и теорию эффекта Мёссбауэра. Тем не менее, определив N^* как число атомов, при которых вероятность бесфононных переходов (линия Мёссбауэра) становится равной вероятности однофононных переходов, удается получить следующую формулу:

 $N^* \approx AM \langle \omega \rangle / [mE(1 - \cos \theta)].$

Здесь M — масса атома, входящего в кластер, m — масса электрона, E — его энергия, $\langle \omega \rangle$ — средняя частота фонона, θ — угол рассеяния, A — численный фактор, зависящий от структуры кластера. Например, для кубического (чтобы не усложнять выкладки поляризациями фононов) кластера, $A = \pi^6/2^7 \approx 7.51$, и для $M \approx 100$, $N^* \approx 4$ для рассеяния на угол $\pi/2$ и $N^* \approx 1000$ для рассеяния на угол 5°. Поскольку интегральное сечение рассеяния быстрых электронов определяется малыми углами рассеяния, эти оценки прекрасно согласуются с данными, приведенными в [1].

- [1]. V.B. Zon and B.A. Zon, Phys. Scr. 86, 065303 (2012).
- [2]. W.E. Lamb, Phys. Rev. 55, 190 (1939).

РЕЛЯТИВИСТСКИЕ РАСЧЁТЫ ВЕРОЯТНОСТЕЙ ПЕ-РЕЗАРЯДКИ В СТОЛКНОВЕНИЯХ ТЯЖЁЛЫХ ИОНОВ

<u>И.А. Мальцев</u>¹, Г.Б. Дейнека², И.И. Тупицын¹, В.М. Шабаев¹, Ю.С. Кожедуб¹, G.Plunien³, Т. Stoehlker^{4,5,6}

¹198504, г. Санкт-Петербург, Санкт-Петербургский государственный университет

²197101, г. Санкт-Петербург, Санкт-Петербургский национальный исследовательский университет информационных технологий, механики и оптики

³Institute für Theoretische Physik, Mommsenstrasse 13, D-01062 Dresden, Germany

⁴Gesellschaft für Schwerionenforschung, Planckstrasse 1, D-64291 Darmstadt, Germany

⁵Physikalisches Institut, Philosophenweg 12, D-69120 Heidelberg, Germany

⁶Helmholtz-Institut Jena, D-07743 Jena, Germany

ilia.alexm@gmail.com

Столкновения тяжёлых ионов представляют собой мощный инструмент для изучения релятивистских и квантово-электродинамических эффектов в атомной физике. Они также могут предоставить уникальную возможность для проверки квантовой электродинамики в сверхкритических кулоновских полях, если суммарных заряд сталкивающихся ядер больше чем критический Z_C =173 [1,2]. При этом энергия основного состояния образовавшейся квазимолекулы может достичь отрицательно-энергетического континуума Дирака. Для исследования подобных эффектов необходимо в первую очередь разработать методы численного расчёта различных процессов в низкоэнергетических столкновениях тяжелых ионов.

В данной работе представлен новый метод расчёта вероятностей перезарядки в столкновениях голого ядра с одноэлектронным ионом. Метод основан на численном решение нестационарного двуцентрового уравнения Дирака в базисе кубических сплайнов Эрмита на равномерной сетке. Столкновение рассматрива-

ется во вращающейся системе отсчёта, что позволяет использовать двумерную сетку вместо трёхмерной. Начиная с начального состояния, электронная волновая функция вычисляется для всех последующих моментов времени. Конечная волновая функция содержит всё нужную информацию о процессе. С помощью разработанного метода были рассчитаны вероятности перезарядки в столкновении U^{92+} - $U^{91+}(1s)$ при энергии налетающего ядра 6 МэВ на а.е.м. для широкого диапазона прицельных параметров. Полученные значения хорошо согласуются с соответствующими величинами полученными в работе [3], где расчёты производились иным методом.

Ожидается, что развиваемый метод будет востребован для будущих экспериментов в GSI и FAIR (Дармштадт, Германия).

[1] Я.Б. Зельдович, В.С. Попов, УФН 105, 403 (1971).

[2] W. Greiner, B. Mueller, J. Rafelski, Quantum Electrodynamics of Strong Fields, (Springer-Verlag, Berlin, 1985).

[3] I.I. Tupitsyn, Y.S. Kozhedub, V.M. Shabaev, G.B. Deyneka, S. Hagmann, C. Kozhuharov, G. Plunien, and Th. Stoehlker, Phys. Rev A **82**, 042701 (2010).

УГЛОВЫЕ И ПОЛЯРИЗАЦИОННЫЕ КОРРЕЛЯЦИИ В ПРОЦЕССЕ РЕКОМБИНАЦИИ ДВУХ ЭЛЕКТРОНОВ С ТЯЖЕЛЫМ МНОГОЗАРЯДНЫМ ИОНОМ

<u>A.B. Майорова</u>¹, A. Surzhykov², S. Tashenov³, B.M. Шабаев¹ ¹ 198504, г. Санкт-Петербург, Санкт-Петербургский государственный университет ² Helmholtz-Institut Jena, D-07743 Jena, Germany ³ Physikalisches Institut, Philosophenweg 12, D-69120 Heidelberg, Germany <u>maiorova@pcqnt1.phys.spbu.ru</u>

На протяжении последних десятилетий радиационная рекомбинация (PP) тяжелых многозарядных ионов остается объектом интенсивных как теоретических, так и экспериментальных исследований (см. [1] и ссылки в данной работе). Процесс радиационной рекомбинации представляет собой захват свободного (квазисвободного) электрона в связанное состояние иона, сопровождающийся излучением фотона. Радиационная рекомбинация является процессом, обратным фотоионизации, что позволяет использовать PP для исследования данного фундаментального электрон-фотонного взаимодействия в режиме высоких энергий и сильных полей. Кроме того, радиационная рекомбинация привлекает внимание исследователей тем, что этот процесс очень чувствителен по отношению к спиновым, релятивистским и квантовоэлектродинамическим эффектам в структуре и динамике тяжелых атомных систем (см., например, [2, 3]).

До недавнего времени практически во всех исследованиях радиационной рекомбинации использовались неполяризованные ионы и электронные мишени. Однако значительная часть сегодняшних интересов в данной области сосредоточена на столкновениях с участием частиц, поляризованных по спину. Так, например, в целом ряде последних теоретических исследований РР было предложено использовать поляризованные ионы (или электронные мишени) для изучения многочастичных и релятивистских эффектов, а также эффектов несохранения четности в тяжелых ионах [4-6]. Кроме того, в ряде недавних работ обсуждалась возможность использования радиационной рекомбинации в качестве предмета исследования в экспериментах по измерению поляризации водородоподобных ионов в накопительных кольцах [7,8]. Диагностика спинового состояния много-

зарядных ионов необходима для будущих экспериментов по поиску электрического дипольного момента тяжелых ядер и исследованию эффектов несохранения четности в атомных системах с большим зарядом Z. Однако, в связи с отсутствием методов создания и сохранения поляризованных по спину пучков тяжелых ионов, до настоящего момента не было сделано экспериментальных проверок влияния спина иона на рекомбинационное излучение.

В данной работе предложен метод, который может быть использован для исследования процесса захвата электрона в поляризованный по спину водородоподобный ион. Хотя с помощью данного метода невозможно создать поляризацию всего пучка, однако он позволяет "отобрать" из пучка ионы с определенной поляризацией и работать с ними. Такая процедура "отбора" может быть проведена в эксперименте, в котором электроны из двух пространственно разделенных мишеней последовательно захватываются в К-оболочку изначально голого иона, при этом излучаемые в процессе фотоны измеряются на совпадение. Схема такого эксперимента представлена на Рисунке 1.



Рисунок 1. Схема возможного эксперимента.

Так как характеристики первого и второго рекомбинационных фотонов в такой схеме коррелируют через спиновое состояние промежуточного водородоподобного иона, предложенный метод позволяет эмулировать не только создание, но и диагностику поляризованных по спину пучков тяжелых ионов. Для того чтобы проиллюстрировать подобную диагностику, особое внимание в данном исследовании уделяется линейной поляризации второго фотона при условии, что первый фотон излучается в заданном направлении, а его спин не наблюдается. Угловые и поляризационные корреляции такого рода могут быть измерены сегодня в Дармштадте (GSI) и могут служить удобным инструментом для исследования процессов с участием поляризованных по спину тяжелых ионов. Работа выполнена при поддержке фонда «Династия», Гранта РФФИ 12-02-31133.

[1]. J. Eichler, Th. Stöhlkler, Phys. Rep. 439, 1 (2007).

[2]. Th. Stöhlkler et al, Phys. Rev. Lett. 82, 3232 (1999).

[3]. S. Tashenov et al, Phys. Rev. Lett. 97, 223202 (2006).

[4]. A. Surzhykov, S. Fritzsche, Th. Stöhlker, S. Tashenov, Phys. Rev. A 68, 022710 (2003).

[5]. A. E. Klasnikov et al, NIMB 235, 284 (2005).

[6]. A. V. Maiorova et al, J. Phys. B 42, 205002 (2009).

[7]. A. Surzhykov, S. Fritzsche, Th. Stöhlker and S. Tashenov, Phys. Rev. Lett. 94, 203202 (2005).

[8]. A. Surzhykov, A. N. Artemyev, and V. A. Yerokhinv, Phys. Rev. A 83, 062710 (2011).

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ И ТРАНСПОРТНЫЕ СВОЙСТВА РЕАЛЬНЫХ ГАЗОВ ПРИ ПОВЫШЕННЫХ ТЕМПЕРАТУРАХ

<u>А.В. Столяров</u>, В.В.Мешков 119991, г. Москва, Химический факультет, Московский государственный университет avstol@phys.chem.msu.ru

На основе оригинальных и известных из литературы прецизионных адиабатических межатомных потенциалов молекулярного азота и водорода, сходящихся к основному диссоциационному пределу, выполнены систематические квантовые и классические расчеты внутренних статистических сумм и интегралов столкновений в широком интервале поступательных температур. Особое внимание уделено исследованию степени влияния метастабильных (квазисвязанных) ровибронных состояний на термодинамические и транспортные свойства исследуемых реальных газов при повышенных температурах и давлениях. Установлена роль слабосвязанных электронных молекулярных состояний на термодинамические свойства рассматриваемых газов, а также наличие, для молекулы азота, заметного внутримолекулярного спин-орбитального взаимодействия между валентными и ван-дер-ваальсовыми состояниями высокой мультиплетности. Предложены альтернативные схемы расчета статистических сумм в мульти-температурном приближении, основанные на различных способах приближенного разделения колебательного и вращательного видов движения. Показано, что наличие большого числа метастабильных и слабосвязанных колебательно-вращательных состояний, а также отталкивательных электронных состояний высокой мультиплетности существенно влияет на эффективную внутримолекулярную статистическую сумму реального двухатомного газа в условиях высокой неравновесной поступательной температуры.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ №11–03–00307а.

ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ НЕУПРУГИХ СТОЛКНОВЕНИЙ АТОМОВ МАГНИЯ И ВОДОРОДА ПРИ НИЗКИХ ЭНЕРГИЯХ

<u>Д.С. Родионов¹</u>, А.К. Беляев¹, П.С. Барклем², М. Гиту³, А. Спилфидель⁴, Н. Фотриер⁴

¹ 191186, Санкт-Петербург, Российский государственный педагогический университет имени А.И. Герцена, Россия

² Department of Physics and Astronomy, Uppsala University, Box 516, S-75120 Uppsala, Sweden

³ Universite Paris-Est, Laboratoire Modelisation et simulation Multi-Echelle, UMR 8208 CNRS, 5 Bd Descartes, 77454, Marne-la-Vallee, France

⁴ LERMA, Observatoire de Paris, 92195 Meudon Cedex, France

virtonoobne@bk.ru

Процессы, происходящие при столкновениях атомов, молекул или ионов представляют как фундаментальный, так практический интерес. Особый интерес представляют неупругие процессы. В основе механизмов указанных процессов лежат неадиабатические переходы, которые являются фундаментальным природным явлением. Изучение таких переходов расширяет понимание физического мира, и с другой стороны элементарные процессы определяют свойства газовых сред, например, в атмосферах звезд, в газовых лазерах, в атмосфере Земли, в низкотемпературной плазме и так далее. Исследование процессов, происходящих при атомных и молекулярных столкновениях, является одним из актуальных направлений современной теоретической физики. Развитие, как современных методов теоретической физики, так и вычислительной техники позволяет ставить вопросы о более точных подходах в исследованиях неадиабатических переходов, а также о расчетах надежных характеристик элементарных процессов. Теория столкновений может быть применима для изучения атмосфер небесных тел и межзвездных сред.

Водород наиболее распространенный элемент во Вселенной. Процессы столкновения атомов, молекул и ионов водорода с различными элементами являются источником знаний о свойствах газовых сред на уровне микромира. Данные о неупругих низкоэнергетических процессах столкновения атомов требуются во многих областях физики, в частности, для неравновесного

моделирования спектральных линий в атмосферах звезд. Это позволяет измерить химический состав и другие свойства звезд.

Представленная работа является продолжением более ранних работ [1,2]. В работе [1] был произведен расчет сечений с учетом пяти нижних молекулярных состояний MgH (трех ${}^{2}\Sigma^{+}$ и двух ${}^{2}\Pi$ состояний). В результате анализа полученных сечений был сделан вывод о том, что для процессов с участием нижних состояний доминирующим механизмом являются переходы между Σ состояниями. В связи с необходимостью учитывать процессы с участием высоковозбужденных атомных состояний и процессы образования ионных пар и взаимной нейтрализации в работе [2] произведено расширение базиса и произведен расчет с учетом восьми $^{2}\Sigma^{+}$ нижних молекулярных состояний: адиабатических семи нижних молекулярных состояний, асимптотически коррелирующих к ковалентным состояниям, и одного молекулярного состояния, асимптотически (диабатически) коррелирующего к ионному взаимодействию $Mg^+ + H^-$. При этом точность трех верхних термов была не достаточно высока, в связи, с чем квантовохимические данные были скорректированы в асимптотической области на экспериментальные атомные энергии. В работе [2] рассчитаны сечения процессов возбуждения, образования ионной пары и взаимной нейтрализации. Методы расчета подробно описаны в статье [2], результаты хорошо согласуются с результатами работы [1] для нижних молекулярных состояний.

В настоящей работе получены новые квантово-химические данные для девяти ${}^{2}\Sigma^{+}$ состояний (верхнее из которых асимптотически соответствует ионному взаимодействию Mg⁺ + H⁻) и пяти нижних ²П состояний молекулы MgH. Настоящие квантово-химические данные рассчитаны с большей точностью (в связи с чем отсутствует необходимость производить указанную выше коррекцию), а, следовательно, рассчитанные сечения являются более точными. В данной работе представлены расчеты сечений неупругих процессов возбуждения и образования ионной пары и вероятностей неадиабатических переходов с учетом девяти нижних ${}^{2}\Sigma^{+}$ состояний. Также получены сечения неупругих процессов для переходов между ²П состояниями при столкновениях Mg + H. Указанный выше расчет ядерной динамики произведен методом перепроецирования [3] в рамках Борна-Оппенгеймера. стандартного подхода Метод перепроецирования обеспечивает сходимость по отношению к изменению верхнего предела интегрирования системы связанных уравнений и по отношению к числу учитываемых парциальных волн. Метод перепроецирования обеспечивает

физически надежные результаты с учетом ненулевых асимптотических неадиабатических взаимодействий.

Расчеты, проведенные в настоящей работе, подтверждают, что для эндотермических процессов максимальное сечение соответствует процессу образования ионной пары Mg^+ + H⁻ при столкновениях $Mg(3s4s^{-1}S)$ + H с величиной сечения порядка 80 Å² за счет неадиабатических переходов между ${}^{2}\Sigma^{+}$ состояниями. С другой стороны, в настоящей работе показано, что некоторые сечения процесса возбуждения для переходов между высоковозбужденными состояниями атомов магния при столкновениях с атомами водорода в значительной степени могут определяться переходами между ${}^{2}\Pi$ состояниями. Так, например, учет переходов между $MgH({}^{2}\Pi)$ состояниями для возбуждения $Mg(3s3p^{-1}P \rightarrow 3s3d^{-1}D)$ приводит к увеличению значения сечения процесса практически на порядок.

Работа поддержана Российским Фондом Фундаментальных Исследований (РФФИ), грант номер 13-03-00163.

- M. Guitou, A.K. Belyaev, P.S. Barklem, A. Spielfiedel, and N. Feautrier, J. Phys. B 44, 035202, (2011).
- [2]. A.K. Belyaev, P.S. Barklem, A. Spielfiedel, M. Guitou, N. Feautrier, D.S. Rodionov and D.V. Vlasov Phys. Rev. A 85, 032704, (2012).
- [3]. A.K. Belyaev, Phys. Rev. A 82, 060701, (2010).

ОПЕРАТОР ЛЭМБОВСКОГО СДВИГА ДЛЯ РЕЛЯТИВИСТСКОГО АТОМА: ОТ ПЕРВЫХ ПРИНЦИПОВ К МОДЕЛЬНОМУ ПОТЕНЦИАЛУ

В.А. Ерохин¹, И.И. Тупицын², <u>В.М. Шабаев²</u>

¹195251, г. Санкт-Петербург, Санкт-Петербургский государственный политехнический университет

²198504, г. Санкт-Петербург, Санкт-Петербургский государственный университет

shabaev@pcqnt1.phys.spbu.ru

Разработан метод модельного оператора для расчетов квантовоэлектродинамических (КЭД) поправок к уровням энергии релятивисткого атома. Модельный оператор лэмбовского сдвига представлен в виде суммы локального и нелокального потенциалов, параметры которых определяются из расчетов диагональных и недиагональных КЭД поправок с дираковскими водородоподобными волновыми функциями. Построенный модельный оператор может быть легко включен в расчеты, основанные на уравнении Дирака-Кулона-Брейта. Эффективность метода демонстрируется посредством сравнения результатов, полученных с использованием модельного оператора, и точных расчетов лэмбовских сдвигов в многоэлектронных атомах и ионах. Подробное описание метода и результаты расчетов даны в статье [1].

Работа выполнена при поддержке Грантов РФФИ 13-02-00630 и 11-02-00943.

[1]. V.M. Shabaev, I.I. Tupitsyn and V.A. Yerokhin, arxiv.org/abs/1305.6333

Метод Дирака-Фока-Штурма в релятивистских расчетах констант сверхтонкого расщепления и g-факторов многозарядных ионов

И.И. Тупицын¹, К.В. Берсенева¹, А.В.Волотка^{1,2}, Д.А.Глазов¹, В.М.Шабаев¹

¹ Физический факультет, Санкт-Петербургский Государственный Университет, ул. Ульяновская 1, Петродворец, 198504 Санкт-Петербург, Россия

 2 Institut für Theoretische Physik, Technische Universität Dresden, Mommsenstraße 13, D-01062 Dresden, Germany

Теоретические расчеты параметров сверхтонкой структуры (СТС) и g-факторов многозарядных ионов и сравнение полученных результатов с результатами высокоточных экспериментов представляет собой мощный инструмент для проверки квантовой электродинамики (КЭД) и стандартной модели. В теоретические значения СТС и g-факторов наряду с дираковским значением вносят вклад различные поправки, такие как межэлектронное взаимодействие, поправка на конечный размер ядра, КЭД поправки, эффекты отдачи и т.д. [1, 2] Для многоэлектронных многозарядных ионов большой вклад в полное значение СТС и g-фактора вносит межэлектронное взаимодействие, погрешность в вычислении которого во многом определяет точность определения теоретических данных.

В данной работе мы представляем результаты расчетов вклада межэлектронного взаимодействия в величины СТС и g-факторов ряда Li- и B- подобных ионов. Расчеты проводились методом Дирака-Фока-Штурма, который разработан и развивается в нашей группе и с успехом используется в релятивистских расчетах многозарядных ионов и нейтральных атомов.

Метод основан на использовании орбиталей Дирака-Фока (ДФ) и Дирака-Фока-Штурма (ДФШ) в качестве базиса одноэлектронных функций в многоконфигурационных расчетах полной волновой функции системы. Орбитали ДФ и ДФШ получаются путем численного решения интегро-дифференциальных уравнений ДФ и ДФШ, куда может быть добавлен одночастичный потенциал внешнего поля достаточно произвольного вида. В частности, в расчетах gфакторов внешнее магнитное поле может быть включено в полный гамильтониан (Дирака-Кулона-Брейта).

Значительный вклад величину поправки на межэлектронное взаимодействие, особенно для g-факторов вносит отрицательный спектр Дирака. Этот вклад может быть учтен в многоконфигурационных расчетах двумя способами. Один из них состоит в том, что в гамильтониан системы включается внешнее магнитное поле. Другой способ основан на учете вкладов одночастичных возбуждений в область отрицательного континуума в рамках теории возмущений. Эти два способа расчета в принципе эквивалентны, по крайней мере, с точностью высших поправок по (α Z). В данной работе анализируются результаты, полученные этими двумя методами.

В настоящей работе расчеты констант СТС и g-факторов ряда Li- и B- подобных ионов были вычислены с использованием "Large-scale CI" разложения, в котором конфигурационное пространство было значительно увеличино по сравнению с расчетами, выполненными нами ранее [1, 3].

Список литературы

- D.A. Glazov, A.V. Volotka, V.M. Shabaev, I.I. Tupitsyn, and G. Plunien, Phys.Rev.A, 81, p.062112 (2010)
- [2] A.V. Volotka, D.A. Glazov, O.V. Andreev, V.M. Shabaev, I.I. Tupitsyn, and G. Plunien, Phys.Rev.Lett, 108, p.073001 (2012)
- [3] A.V. Volotka, D.A. Glazov, I.I. Tupitsyn, N.S. Oreshkina, G. Plunien, and V.M. Shabaev, Phys.Rev.A, 78, p.062507 (2008)

ЭФФЕКТ ОТДАЧИ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ В БОРОПОДОБНЫХ ИОНАХ

<u>А.А. Щепетнов</u>¹, А.В. Волотка^{1,2}, Д.А. Глазов^{1,2}, В.М. Шабаев¹, Г. Плюниен²

1 198504 г. Санкт-Петербург, Санкт-Петербугский Государственный Университет

² D-01062 Dresden, Germany, Technische Universität Dresden

Apc.mail.box@mail.ru

Прецизионные эксперименты по измерению g-фактора зарекомендовали себя как прекрасный способ проверки физических теорий и уточнения фундаментальных констант [1, 2]. За последние десятилетия были достигнуты значительные успехи для лёгких ионов [3 - 7], в том числе, получено самое точное значение массы электрона [8]. Эксперименты с тяжёлыми ионами позволят изучать КЭД в сильных электрических и магнитных полях. Кроме того, изучение g-фактора тяжёлых водородо- и бороподобных ионов позволит уточнить значение постоянной тонкой структуры [9]. В настоящий момент производится подготовка измерения g-фактора бороподобного аргона (эксперимент ARTEMIS) [10]. На сегодня точность теоретического значения достаточна высока — 10⁻⁶ [11], но значительно отстаёт от предполагаемой экспериментальной точности — 10⁻⁹.

В данной работе изучается вклад эффекта отдачи ядра с учётом межэлектронного взаимодействия для пятиэлектронных ионов В состояниях $[(1s)^{2}(2s)^{2}p]^{2}P_{1/2}$ и $[(1s)^{2}(2s)^{2}p]^{2}P_{3/2}$. Рассмотрение эффекта отдачи ведётся в рамках нерелятивистской теории [12], которая даёт достаточно хорошее приближение в бороподобных ионах для малых и средних Z. Вычисляется поправка на отдачу к g-фактору бороподобных ионов в первом порядке по отношению масс m/M, в нулевом и в первом порядке по 1/Z. Поправка нулевого порядка по 1/Z получена как аналитически для кулонвского потенциала ядра, так и численно для различных экранирующих потенциалов с использованием программы для решения уравнения Дирака с помощью ДКБ-сплайнов. В следующем порядке теории возмущений вычисляется вклад диаграмм однофотонного обмена (Рис. 1). Полученные результаты позволяют улучшить точность поправки на отдачу к g-фактору бороподобных ионов для состояний $^2\mathrm{P}_{1/2}$ и $^2\mathrm{P}_{3/2}.$

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 12-02-31803), DFG (грант VO 1707/1-2) и GSI.



Рис. 1.

- [1] M. Vogel, Contemporary Physics 50, 437 (2009).
- [2] В. М. Шабаев, УФН 178, 1220 (2008).
- [3] H. Häffner et al., Phys. Rev. Lett. 85, 5308 (2000).

- [4] J. L. Verdú et al., Phys. Rev. Lett. 92, 093002 (2004).
- [5] S. Sturm et al., Phys. Rev. Lett. 107, 023002 (2011).
- [6] A. Wagner et al., Phys. Rev. Lett. 110, 033003 (2013).
- [7] S. Sturm et al., Phys. Rev. A 87, 030501(R) (2013).
- [8] P. J. Mohr, B. N. Taylor, and D. B. Newell, Rev. Mod. Phys. 84, 1527 (2012).
- [9] V. M. Shabaev et al., Phys. Rev. Lett. 96, 253002 (2006).
- [10] D. von Lindenfels et al., Phys. Rev. A 87, 023412 (2013).
- [11] D. A. Glazov et al., Phys. Scr. T154 (2013).
- [12] M. Phillips, Phys. Rev. 76, 1803 (1949).

АНАЛИТИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ДИРАКА ДЛЯ МАЛОЭЛЕКТРОННЫХ ИОНОВ ТЯЖЕЛЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

<u>А.С.Ульянов</u>¹, А.А.Садовой¹

¹ 607190, г. Саров, РФЯЦ-ВНИИЭФ

a.s.ulyanov@vniief.ru

В работе изложен аналитический метод решения уравнения Дирака для систем с кулоновским взаимодействием. Возможности метода иллюстрируются на примере расчета свойств ионов трансурановых элементов.

В методе используются многомерные спиноры в (3A-1)-мерном пространстве для системы из A электронов. Конкретные примеры приведены при расчете свойств гелие-, литие-, бериллие- и углеродоподобных ионов трансурановых элементов с Z от 92 до 101.

При решении уравнения Дирака используется техника вычисления матричных элементов операторов, входящих в уравнение Дирака, в 3*А*-мерном пространстве, что позволяет осуществить переход от многомерного уравнения Дирака к системе двух дифференциальных уравнений первого порядка, решение которых найдено аналитически. Полученные аналитические волновые функции используются в данной работе для расчета электронной плотности и моментов атомных радиусов указанных выше ионов, а также могут быть использованы и для описания других свойств.

Предложенный в работе метод является релятивистским обобщением метода многомерных угловых кулоновских функций (МУКФ) [1].

В данной работе на примере литиеподобных ионов тяжелых элементов продемонстрировано построение многомерных угловых функций для решения уравнения Дирака, описывающего высокоионизированные системы, в нулевом приближении метода МУКФ.

В минимальном приближении метода МУКФ волновая функция состояния $\frac{1}{2}^+$ литиеподобных ионов в спинорном представлении, соответствующая электронной конфигурации $(1s^2 2s^1)$, имеет вид

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Phi \\ X \end{pmatrix} = \frac{1}{\rho^4} \begin{pmatrix} M(\rho)U \\ N(\rho)W \end{pmatrix}$$

где $\rho = |\vec{r_1}| + |\vec{r_2}| + |\vec{r_3}|$ – коллективная переменная; $M(\rho)$, $N(\rho)$ – амплитуды разложения ВФ и многомерные угловые функции представляют собой детерминанты Слейтера

$$U = \frac{1}{(-it\rho)} \sqrt{\frac{\Gamma(11)}{3!}} \begin{pmatrix} \psi_1(1) & \psi_1(2) & \psi_1(3) \\ \psi_2(1) & \psi_2(2) & \psi_2(3) \\ \psi_3(1) & \psi_3(2) & \psi_3(3) \end{pmatrix}, \quad W = \frac{1}{(-it\rho)} \sqrt{\frac{\Gamma(11)}{3!}} \begin{pmatrix} \xi_1(1) & \xi_1(2) & \xi_1(3) \\ \xi_2(1) & \xi_2(2) & \xi_2(3) \\ \xi_3(1) & \xi_3(2) & \xi_3(3) \end{pmatrix},$$

где ортогональные базисные функции ψ и ξ имеют вид

$$\begin{split} \psi_{1}(k) &= \frac{\Omega_{\frac{1}{2}0^{-}}(k)}{\sqrt{\Gamma(3)}} L_{0}^{2}(-itr_{k}), \ \psi_{2}(k) = \frac{\Omega_{\frac{1}{2}0^{+}}(k)}{\sqrt{\Gamma(3)}} L_{0}^{2}(-itr_{k}), \ \psi_{3}(k) = \frac{\Omega_{\frac{1}{2}0^{-}}(k)}{\sqrt{\Gamma(4)}} L_{1}^{2}(-itr_{k}), \\ \xi_{1}(k) &= \frac{\Omega_{\frac{1}{2}1^{-}}(k)}{\sqrt{\Gamma(3)}} L_{0}^{2}(-itr_{k}), \ \xi_{2}(k) = \frac{\Omega_{\frac{1}{2}1^{+}}(k)}{\sqrt{\Gamma(3)}} L_{0}^{2}(-itr_{k}), \ \xi_{3}(k) = \frac{\Omega_{\frac{1}{2}0^{-}}(k)}{\sqrt{\Gamma(4)}} L_{1}^{2}(-itr_{k}). \end{split}$$

Индексы у спиноров соответствуют квантовым числам $\{j, l, j_z\}$. Квантовые числа для базисных функций ψ_{ω} выбираются в соответствии с квантовым состоянием системы из трех электронов. Для базисной функции ξ_{ω} квантовые числа j и j_z те же, что и для ψ_{ω} , а l' = 2j - l. Верхний и нижний спиноры являются однородными полиномами одной и той же степени K = 1 для данной электронной конфигурации.

Уравнение Дирака для компонент волновой функции $\Psi\,$ многоэлектронного иона имеет вид

$$\begin{pmatrix} E + \sum_{i=1}^{A} \frac{Z}{r_i} - \sum_{i>j}^{A} \frac{1}{\left|\vec{r_i} - \vec{r_j}\right|} \end{pmatrix} \Phi = \sum_{i=1}^{A} c\vec{\sigma_i} \vec{p}_i \mathbf{X},$$
$$\begin{pmatrix} E + 2A + \sum_{i=1}^{A} \frac{Z}{r_i} - \sum_{i>j}^{A} \frac{1}{\left|\vec{r_i} - \vec{r_j}\right|} \end{pmatrix} \mathbf{X} = \sum_{i=1}^{A} c\vec{\sigma_i} \vec{p}_i \Phi$$

(А – число электронов, Z – заряд ядра, Е – энергия связи).

В результате решения методом МУКФ уравнения Дирака для многоэлектронных ионов были получены аналитические выражения для верхней и нижней компонент ВФ, а также в общем виде записано аналитическое выражение энергии связи

$$E = A \left\{ \left\{ 1 + \frac{(cZ - d)^2 \alpha^2}{\left(An_r + \sqrt{A^2 a^2 - (cZ - d)^2 \alpha^2}\right)^2} \right\}^{-1/2} - 1 \right\},$$
 (1.1)

где А – число электронов, $a, c \, u \, d$ – коэффициенты, полученные при вычислении матричных элементов кинетической энергии, электон-ядерного и электронэлектронного взаимодействия соответственно, n_r – радиальное квантовое число. Рассчитанные по формуле (1.1) значения энергии связи для ионов урана приведены в таблице 1.

	Электронная конфигурация				
	$1s^2$	$1s^1 2s^1$	$1s^2 2s^1$	$1s^2 2s^2$	$1s^2 2s^2 2p_{1/2}^2$
МУКФ	262,45	165,49	281,24	336,52	420,42
[2]	264,14	166,15	298,22	332,29	400,31
ATOM [3]	256,25	159,26	288,34	319,93	380,44
GRASP [4]	262,67	162,61	295,58	328,08	-

Таблица 1 – Энергии (кЭв) связи для многоэлектронных ионов урана

Из приведенных в таблице данных можно сделать вывод, что наблюдается удовлетворительное согласие значений энергий связи, полученных методом МУКФ, со значениями, полученными другими методами.

[1]. Садовой А.А. Методы многомерных угловых функций в теоретической и прикладной физике. – Аразмас-16: ВНИИЭФ, 1994.

[2]. Desclaux J.P. Relativistic Dirac-Fock Expectation Values for Atoms with Z=1 to Z=120 // Atomic Data and Nuclear Data Tables, Vol. 12, N. 4, 1973, pp.311-406.

[3]. A.V. Philippov, V.M. Povyshev, A.A. Sadovoy, V.P.Shevelko, G.D. Shirkov, E.G. Vasina, V.V. Vatulin: Electron-impact ionization cross sections of Ti, Kr, Sn, Ta, U atoms and their ions in the electron energy range from the threshold up to 200 keV. Part 2.JINR Preprint E9-2002-5, 2002.

[4]. Dyall K.G., Grant I.P., Johnson C.T., Parpia F.A., Plummer E.P. GRASP: A general-purpose relativistic atomic structure program. Comp. Phys. Comm., 55, 1989, p. 425-456.

ЭФФЕКТЫ НЕСОХРАНЕНИЯ ЧЕТНОСТИ В ТЯЖЕЛЫХ ЛИТИЕПОДОБНЫХ ИОНАХ

<u>В.А. Зайцев</u>¹, А.В. Майорова¹, В.М. Шабаев¹, А.В. Волотка^{1, 2}, G. Plunien²

¹ Санкт-Петербург, Санкт Петербургский государственный университет

² Institute für Theoretische Physic, Technische Universität Dresden,

Mommsenstraße 13, D-01062 Dresden, Germany

zaytsev@pcqnt1.phys.spbu.ru

Проверка Стандартной Модели (СМ) является одной из наиболее актуальных задач современной физики. Важную роль в такого рода исследованиях играет тестирование электрослабого сегмента СМ, объединяющего электромагнитное и слабое взаимодействия. Эффективным инструментом для тестирования теории электрослабого взаимодействия при низких энергиях является исследование эффектов несохранения четности в атомных системах [1,2]. Наиболее полную на сегодняшний день подобную проверку обеспечивают высокоточные измерения Рнечетного эффекта в амплитуде 6s–7s перехода в нейтральном атоме цезия ¹³³Cs [3,4], а также последние расчеты квантовоэлектродинамических и корреляционных вкладов [5–7]. Однако для нейтральных систем высокоточный расчет эффектов, обусловленных межэлектронными корреляциями, является крайне сложной технической задачей (см. [6] и цитируемые в данной статье работы). В то же время для многозарядных ионов вклады от электронных корреляций подавлены множителем 1/Z (где Z — заряд ядра) и могут быть вычислены с необходимой точностью в рамках теории возмущений.

В данной работе мы изучаем эффект несохранения четности в процессе диэлектронной рекомбинации поляризованного электрона в дважды возбужденные состояния ((1s 2s)₀ $n\kappa$)_{1/2} и ((1s 2p_{1/2})₀ $n\kappa$)_{1/2} литиеподобного иона, где n и κ главное и дираковское квантовые числа. Выбор именно этих состояний обусловлен квазивырожденностью уровней $2^{1}S_{0}$ и $2^{3}P_{0}$ в гелиеподобных ионах с Z = 64 и Z = 90 (см. [8] и ссылки там). При добавлении высоковозбужденного третьего электрона можно ожидать, что близость соответствующих уровней по энергии сохранится. Таким образом, величины n, κ и Z могут быть выбраны так, чтобы состояния противоположной четности ((1s 2s)₀ $n\kappa$)_{1/2} и ((1s 2p_{1/2})₀ $n\kappa$)_{1/2} были бы близки к пересечению. Для таких уровней эффект несохранения четности имел бы усиление.



Рис. 1: Несохраняющее четность сечение для процесса диэлектронной рекомбинации в состояния ((1s 2s)₀ 6s)_{1/2} и ((1s 2p_{1/2})₀ 6s)_{1/2} при Z = 92. Разность $E_i - E((1s 2p_{1/2})_0 6s)_{1/2}$ однозначно определяет энергию налетающего электрона.

Для того чтобы оценить эффект несохранения четности в рассматриваемом процессе, мы вводим полное сечение $\sigma_0 = (\sigma_+ + \sigma_-)/2$, и нарушающий четность вклад $\sigma_{PNC} = (\sigma_+ - \sigma_-)/2$, где σ_+ и σ_- сечения для положительной и отрицательной проекции спина на направления импульса налетающего электрона. Отклонение от нуля величины σ_{PNC} указывает на зависимость сечения от поляризации налетающего электрона и означает нарушение пространственной симметрии.

В рассматриваемом процессе наиболее значимый эффект несохранения четности ожидается для иона урана (Z = 92), для энергии начального состояния, настроенной в резонанс с уровнем ((1s $2p_{1/2})_0$ 6s)_{1/2}. График зависимости σ_{PNC} от энергии налетающего электрона приведен на Рис. 1.

В этом случае асимметрия, |σ_{PNC}| / σ₀, составляет 1.5×10⁻⁵. Аналогичный процесс диэлектронной рекомбинации поляризованного электрона и водородопо-

добного иона при Z < 60 был изучен в работе [9]. Асимметрия в нем составила 5×10^{-9} , что на несколько порядков меньше величины, полученной в настоящем исследовании.

Работа выполнена при поддержке гранта Helmholtz Association IK-RU-002.

[1]. I. B. Khriplovich, Phys. Scr. T112, 52 (2004).

[2]. J. S. M. Ginges and V. V. Flambaum, Phys. Rep. 397, 63 (2004).

[3]. C. S. Wood, S. C. Bennett, D. Cho, B. P. Masterson, J. L. Roberts, C. E. Tanner, and C. E. Wieman, Science 275, 1759 (1997).

[4]. S. C. Bennett and C. E. Wieman, Phys. Rev. Lett. 82, 2484 (1999); Phys. Rev. Lett.83, 889 (1999).

[5]. V. M. Shabaev, K. Pachucki, I. I. Tupitsyn, and V. A. Yerokhin, Phys. Rev. Lett.
94, 213002 (2005); V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, K. Pachucki, G. Plunien, and V. A. Yerokhin, Phys. Rev. A 72, 062105 (2005).

[6]. S. G. Porsev, K. Beloy, and A. Derevianko, Phys. Rev. Lett. 102, 181601 (2009).

[7]. V. A. Dzuba, J. C. Berengut, V. V. Flambaum, and B. Roberts, Phys. Rev. Lett. **109**, 203003 (2012).

[8]. V. M. Shabaev, A. V. Volotka, C. Kozhuharov, G. Plunien, and T. Stöhlker, Phys. Rev. A **81**, 052102 (2010).

[9]. G. F. Gribakin et al., Phys. Rev. A 72, 032109 (2005); Phys. Rev. A 80, 049901(E) (2009).

ЭФФЕКТ НА ОТДАЧУ ЯДРА К УРОВНЯМ ЭНЕРГИИ МНОГОЗАРЯДНЫХ ИОНОВ

<u>Н.А. Зубова¹</u>, В.М. Шабаев¹, И.И. Тупицын¹, G. Plunien²

¹ 198504, г. Санкт-Петербург, Петродворец, Санкт-петербургский государственный университет, физический факультет

² D-01062, Dresden, TU Dresden, Institut fur Theoretische Physik

zubova@pcqnt1.phys.spbu.ru

За последние годы был достигнут значительный прогресс в экспериментальном изучении изотопических сдвигов многозарядных ионов [1,2]. С теоретической точки зрения, для достижения такой высокой экспериментальной точности, необходимо включать в вычисления вклады, связанные с эффектом конечного размера ядра и релятивистской ядерной отдачи. Ранее [1-4] все эти вклады были определены при использовании метода конфигурационного взаимодействия Дирака-Фока-Штурма, В котором, В частности, оператор релятивистской ядерной отдачи усреднялся на многоэлектронных волновых функциях. Однако, известно [3,5,6], что методы конфигурационного взаимодейпри ствия показывают достаточно плохую сходимость вычислении двухэлектронных вкладов оператора ядерной отдачи. Следовательно, имеет смысл проводить вычисления релятивистского эффекта ядерной отдачи, используя теорию возмущений по 1/Z, где Z — заряд ядра.

Основной целью настоящей работы является расчет поправок к энергетическим уровням многозарядных литиеподобных и бороподобных ионов, связанных с эффектом ядерной отдачи, по теории возмущений в первых двух порядках по 1/Z. Вычисления проводятся в рамках приближения Брейта, где эффект ядерной отдачи может быть описан следующим оператором:

$$H = rac{1}{2M}\sum_{i,k} \left[ec{p_i} \cdot ec{p_k} - rac{lpha Z}{r_i} \left(ec{lpha_i} + rac{(ec{lpha_i} \cdot ec{r_i})ec{r_i}}{r_i^2}
ight) \cdot ec{p_k}
ight]$$

Для упрощения вывода формальных выражений по теории возмущений удобно использовать квантово-полевой формализм, в котором замкнутая оболочка отнесена к переопределенному вакууму. При использовании такой техники, мы можем вывести выражения для всех одноэлектронных и двухэлектронных вкладов оператора релятивистской ядерной отдачи для литиеподобных ионов в нулевом и первом порядке по 1/*Z*. Численный расчет таких выражений проводится, используя метод дуального кинетического баланса (DKB) с базисными функциями, построенными из В-сплайнов. Результаты наших вычислений сравниваются с соответствующими значениями, полученными в рамках методов конфигурационного взаимодействия и многоконфигурационного взаимодействия Дирака–Фока [4,7].

Работа выполнена при поддержке Hemholtz Association under grant agreement IK-RU-002, фонда «Династия» и «G-RISC».

[1] R. Soria Orts et al., Phys. Rev. Lett. 97, 103002 (2006)

[2] C. Brandau et al., Phys. Rev. Lett. 100, 073201 (2008)

[3] I. I. Tupitsyn, V. M. Shabaev, J. R. Crespo Lopez-Urrutia, I. Draganic, R. Soria Orts, and J. Ullrich Phys. Rev. A 68, 022511 (2003)

[4] Y. S. Kozhedub, A. V. Volotka, A. N. Artemyev, D. A. Glazov, G. Plunien, V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, and Th. Stohlker, Phys. Rev. A 81, 042513 (2010).

[5] C.F. Fischer, P. Jonsson, and M. Godefroid, Phys. Rev. A 57, 1753 (1998).

[6] E. Gaidamauskas, C. Naze, P. Rynkun, G. Gaigalas, P. Jonsson, and M. Godefroid, J. Phys. B 44, 175003 (2011).

[7] Jiguang Li, Cédric Nazé, Michel Godefroid, Stephan Fritzsche, Paul Indelicato, Per Jönsson, Phys. Rev. A 86, 022518 (2012).

EFFECTIVE RELATIVISTIC POTENTIALS FOR e⁻-Au⁺ AND e⁻-Au SYSTEMS

I. Yurova

Saint-Petersburg State University, Saint-Petersburg 195405, Russia

inna-yurova@rambler.ru

The relativistic *l*-dependent effective potential was developed for the e^- – heavy closed shell atomic ion system,

$$V^{(+)} = \sum_{l} V_{l}^{(+)} |l\rangle \langle l| -\frac{1}{r},$$

and for e^- – neutral atom system,

$$V^{(a)} = \sum_{l} V_{l}^{(a)} \left| l \right\rangle \left\langle l \right|,$$

where radial potentials depend on parameters q_i , q_h , h, C_i , \tilde{C}_i and C_h ,

$$V_{l}^{(+)}(r) = V_{h} + \sum_{i=1}^{3} C_{i} r^{i-2} \exp(-q_{i}r) - \frac{1}{r}, \quad V_{l}^{(a)} = V_{h} + \sum_{i=0}^{2} \tilde{C}_{i} r^{i-1} \exp(-q_{i}r),$$
$$V_{h} = C_{h} \frac{\exp(-q_{h}r)}{r(r+h)}.$$

We established values of parameters from the best agreement of calculated atomic orbital bound averaged relativistic energy values,

$$E_l = \sum_{j=l\pm 1/2} c_j E_{lj},$$

and corresponding averaged experimental data [1]. We applied relativistic Hartree – Fock approach [2] for bound states calculations. We constructed the potential, $V_l^{(a)}$, on the base of $V_l^{(+)}$ by including the terms from the interaction of continuum electron with the bound outer shell atomic one with exchange and polarization — correlation terms. The latter results in the substitution of parameters C_i in $V_l^{(+)}$ by \tilde{C}_i in $V_l^{(a)}$. We considered the example of the electron – Au⁺ ion and electron – neutral atom Au systems. We applied the developed potential $V^{(+)}$ in bound energies, electron densities, spin – orbital splitting and oscillator strengths calculations. Presently proposed potential $V^{(+)}$ provides much more accurate orbital energies than other known effective potentials. Oscillator strengths with dipole perturbation correction agree experimental data. We applied the
potential $V^{(a)}$ in electron – Gold atom differential and integral cross sections calculations in the wide interval of collision energies. Present results agree available theoretical these obtained with other effective potentials in the wide impact energy range except the energies not exceeded hundreds eV.

- [1]. T.A. Carlson, Photoelectron and Auger Spectroscopy: Plenum Press, New York (1975)
- [2]. V.F. Bratsev, G.B. Deyneka, I.I. Tupitsyn, Bull. Acad. Sci. USSR (Russian, Phys. Ser. 41 2655 (1977)

ВРЕМЯРАЗРЕШЕННАЯ ФУРЬЕ-СПЕКТРОСКОПИЯ АТОМНЫХ РИДБЕРГОВСКИХ СОСТОЯНИЙ С ВЫСОКИМ ОРБИТАЛЬНЫМ МОМЕНТОМ

<u>S. Civiš</u>, M. Ferus, B.E. Чернов, Е.М. Занозина J.Heyrovsky Institute of Physical Chemistry AV ČR, Dolejškova 3, Praha 8, Czech Republic

civis@jh-inst.cas.cz

Техника импульсной лазерной абляции и осаждения широко используется в современных экспериментах. Лазерная плазма, индуцированная сравнительно низкими потоками (около 10 Дж/см²) имеет многочисленные приложения, например лазерное парофазное осаждение (PLD) для многоэлементного анализа. Техника спектроскопии лазерной плазмы (LIBS) состоит в анализе спектра, испускаемого плазмой, созданной вблизи поверхности исследуемого образца с помощью лазерного импульса. По сравнению с обычными методами элементного химического анализа LIBS имеет много практических преимуществ, обусловливающих её применение во многих приложениях [1]. Для многих типов абляции используются эксимерные лазеры, работающие в ближнем УФ диапазоне и имеющие плотность энергии около of 1–30 Дж/см².

В данной работе кратко описан анализ времяразрешённых спектров плазмы, созданной в результате абляции поверхностей металлов и их соединений с помощью импульсного ArF-лазера с длиной волны 193 нм в вакууме (10⁻³ торр). Приводятся ИК-спектры нескольких атомов металлов в диапазоне 800–8000 см⁻¹. В используемой технике времяразрешённой ИК фурье-спектроскопии (FTIR) использовался метод синхронного непрерывного сканирования. После каждого переключения ArF-лазера считывались несколько наборов данных в течение периода непрерывного движения зеркала интерферометра. Для сопряжения этой техники с импульсами лазерной абляции использовался специальный подход, основанный на кратной дискретизации [2].

ИК спектры Au, Ag, Cu, Na, K, Rb и Cs, полученные в результате лазерной абляции поверхностей металлов (и их соединений: NaI, NaBr, KCl, KBr, KF, KI, RbCl, CsCl и CsI) в вакууме наблюдались в диапазонах 800–1000, 1000–1200, 1200–1600, 1800–3600, 4100–5000 и 5200–7500 см⁻¹ с разрешением 0.02 см⁻¹.

144

Наблюдались 32 новых линии Au, 12 Ag, 20 Cu, 17 Na, 26 K, 24 Rb и 21 Cs. Измеренные длины волн линий Na и K согласуются со значениями, наблюдаемыми в спектре Солнца в т.н. атмосферном химическом эксперименте (ACE).

Классификация линий проводилась с использованием относительных сил линий, которые выражаются через дипольные матричные элементы переходов; они вычислялись с помощью метода квантового дефекта (QDT) [3]. Приводятся результаты для сил осцилляторов и вероятностей переходов между состояниями атомов исследуемых металлов. Важную роль в классификации наблюдаемых линий играют *f*-, *g*- и *h*-состояния, в т. ч. впервые обнаруженные в данной работе. Для всех рассмотренных элементов наиболее интенсивные линии в диапазонах $800-1000 \text{ см}^{-1}$ и 1200–1600 см⁻¹ вызваны переходами 6g-7h и 5g-6h соответственно.

Исследование атомной эмиссии в нашем LIBS-эксперименте осложняется неравновесностью и нестационарностью лазерной плазмы. Интенсивность эмиссионных спектральных линий немонотонно зависит от времени задержки τ после импульса. Такие кривые — пример сложной динамики заселённостей возбуждённых состояний, которая редко описывается в литературе. Таким образом, времяразрешённая схема является существенной для данного эксперимента.

Из наблюдаемых линий получены обновленные значения энергий более чем 150 атомных уровней (с погрешностью 0.01–0.03 см⁻¹), из которых 8 уровней Au, 3 Ag, 4 Cu, 1 K, 3 Na, 4 Rb и 2 уровня Cs не были известны ранее.

- [1]. D. Babánkova, S. Civiš, L. Juha, Progress in Quantum Electronics 30, 75 (2006).
- [2]. S. Civiš, I. Matulková, J. Cihelka, P.Yu. Buslov, and V.E. Chernov, Phys. Rev. A 81, 012510 (2010).
- [3]. V.E. Chernov, D.L. Dorofeev, I.Yu. Kretinin, and B.A. Zon, Phys. Rev. A 75, 022505, 2005.

ВЛИЯНИЕ ИОНИЗАЦИИ АТОМОВ В СИЛЬНО НАГРЕТОМ ВЕЩЕСТВЕ МАССИВНОЙ ЗВЕЗДЫ НА СКОРОСТЬ ПРОЦЕССА СИНТЕЗА *р*-ИЗОТОПОВ

И.В. Копытин^{*,1}, А.С. Корнев¹, Имад А. Хуссейн^{1,2}

¹ 394006, г. Воронеж, Воронежский государственный университет ² г. Мосул, Мосульский университет, Ирак ^{*} i-kopytin@yandex.ru

Нагрев вещества до "ядерных" температур (выше 2×10^9 K) может сильно повлиять на скорости β -распадных процессов [1, 2]. Это происходит, во-первых, изза заселения возбужденных состояний ядер в тепловом поле и, во-вторых, из-за возможности прямой передачи энергии теплового фотона β -распадному лептону. В первом случае появляются новые каналы ядерного β -распада, которых не было в ненагретой среде (термические β -переходы). Они могут быть намного интенсивнее естественных и даже вызвать β -распад стабильных в обычных условиях ядер. Во втором случае за счет энергии поглощаемого лептоном фотона β -процесс переходит в категорию эндотермического (фотобета-распад). Из-за этого становятся возможными β -переходы из состояний материнского ядра в более высокие по энергии состояния дочернего ядра. Кроме перечисленного, еще ионизация атомов при нагреве вещества может напрямую уменьшить скорость захвата ядром атомного электрона или даже подавить этот процесс полностью [3]. Исследование роли этого эффекта при решении астрофизической проблемы происхождения *р*ядер составляет цель настоящей работы.

p-ядра (их 33, все они в диапазоне массовых чисел от 74 до 196) — это обедненные нейтронами стабильные изотопы (другое название — обойденные изотопы). Их синтезу в *s*-процессе в цепочке β -распадов $(A,Z) \rightleftharpoons (A,Z+1) \rightarrow (A,Z+2)$ препятствует энергетический барьер на первом этапе (A и Z — массовое и зарядовое числа). Здесь (A, Z) и *p*-ядро (A, Z+2) — стабильные в естественных условиях изотопы, (A, Z+1) — мультираспадный нуклид. Его электронный β -распад, который конкурирует с его же позитронным β -распадом и электронным захватом, приводит к *p*-ядру, конечно, если ранее будет преодолен энергетический барьер. В настоящей работе для этой цели используются термические β -переходы и фотобета-распады ядер (A, Z), которые стимулируются тепловым полем звезды. Такого же рода β переходы рассматриваются и в других звеньях указанной β -распадной цепочки.

В эволюции массивной звезды нами был выделен квазиравновесный этап горения кислорода (его длительность $\tau = 5$ мес.), на котором температура вещества достигает $(2-3) \times 10^9$ К. Для цепочки β -распадов $(A,Z) \rightleftharpoons (A,Z+1) \rightarrow (A,Z+2)$, которая считалась изолированной, записывалась система кинетических уравнений

$$\frac{dN_1}{dt} = -\lambda_1 N_1(t) + \lambda_2 N_2(t);$$

$$\frac{dN_2}{dt} = \lambda_1 N_1(t) - (\lambda_2 + \lambda_3) N_2(t);$$

$$\frac{dN_3}{dt} = \lambda_3 N_2(t).$$

Здесь N_1 , N_2 и N_3 — соответственно распространенности изотопов (A, Z), (A, Z+1) и (A, Z+2), λ_1 — суммарная полная скорость термического β -распада и фотобетараспада $(A, Z) \rightarrow (A, Z+1), \lambda_2$ — суммарная полная скорость термического β^+ -распада и электронного захвата для обратного перехода $(A, Z+1) \rightarrow (A, Z), \lambda_3$ — суммарная полная скорость термического β -распада и фотобета-распада $(A, Z+1) \rightarrow (A, Z+2)$. Все скорости β -процессов λ_k зависят от температуры среды. Начальные условия имели вид: $N_1(0) = N_0, N_2(0) = N_3(0) = 0$, где N_0 — распространенность *s*-ядра (A, Z) (для нее бралось наблюдаемое в земных условиях значение). В итоге для распространенности *p*-ядра N_3 за время этапа τ было получено:

$$N_{3}(\tau) = N_{0} \left[1 - \frac{1}{2} \left(e^{-\delta_{+} \tau/2} + e^{-\delta_{-} \tau/2} \right) - \frac{\lambda_{123}}{\delta} \sinh(\delta \tau / 2) e^{-\lambda_{123} \tau/2} \right]$$

Здесь

$$\delta = (\lambda_{123}^2 - 4\lambda_1\lambda_3)^{1/2}; \quad \delta_{\pm} = \lambda_{123} \pm \delta; \quad \lambda_{123} = \lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3.$$

Расчеты скоростей β -распадных процессов, приводящих к *p*-ядрам, проводились для всех 33 триад ядер (*A*, *Z*), (*A*, *Z*+1) и (*A*, *Z*+2). У этих ядер выделялись такие интервалы возбужденных состояний, чтобы было хотя бы несколько наиболее интенсивных β -переходов разрешенного типа. Для ядерных матричных элементов использовалась усредненная оценка, полученная на основе типичных величин приведенного времени жизни разрешенных β -переходов (lgf₀t_{1/2} = 4.0 – 5.5). Электронный захват рассматривался только из *К*-оболочки атома как наиболее интенсивный. Было найдено, что для 20 *p*-ядер предложенная модель их синтеза на квазиравновесном этапе эволюции массивной звезды позволяет получить их наблюдаемые распространенности [2].

При температуре "ядерного" масштаба величины ионизация атомов вещества звезды значительна. Так, уже при температуре 1×10^9 K заполненность Kоболочки, например, даже в относительно тяжелом атоме осмия (Z = 76) в 25 раз меньше, чем при нормальных условиях, и быстро уменьшается с ростом температуры. Для оценки роли ионизации электронных оболочек атомов в нагретой среде в рамках модели были проведены расчеты распространенностей *р*-изотопов без учета вклада электронного К-захвата в суммарную полную скорость λ₂. Подавленность процесса *К*-захвата приводит в β -распаде ядер (*A*, *Z*+1) к росту относительной доли электронного β -распада (A, Z+1) \rightarrow (A, Z+2) и соответственно к увеличению выхода *р*-ядер. В итоге полученный ранее результат для распространенностей 20 *р*-ядер остается в силе, но к этим ядрам добавляются еще 7. Таким образом, из 33 *р*-изотопов только для 6 β-распадный канал их синтеза, повидимому, не является эффективным, по крайней мере, в рамках настоящей модели. Это изотопы ⁷⁸Kr, ⁹²Mo, ⁹⁶Ru, ¹¹²Sn, ¹²⁴Xe и ¹³⁰Ba. Для остальных *р*-ядер термин "обойденные", по сути дела, теряет смысл – их синтез может считаться продолжением *s*-процесса, но на более горячих этапах эволюции звезды и без участия нейтронов. До настоящего времени перспективными считались только модели взрывного синтеза *р*-ядер на стадии сверхновой [4]. Однако и для них остается несколько "проблемных" *р*-изотопов (среди них и "наши" изотопы ⁹²Мо, ⁹⁶Ru), причем для остальных *р*-ядер отличие в три–четыре раза их распространенностей от наблюдаемых считается вполне допустимым [5].

- [1]. И.В. Копытин, Имад А. Хуссейн, Ядерная физика 76, 513 (2013).
- [2]. I.V. Kopytin, A.S. Kornev and Imad A. Hussain, J. Phys. G (in print).
- [3]. J.N. Bahcall, Astrophys. J. 139, 318 (1964).
- [4]. M. Arnold and S. Goriely, Phys. Reports 384, 1 (2003).
- [5]. Э.М. Бабишов, И.В. Копытин, Ядерная физика 71, 1234 (2008).

Некоторые аналитические свойства потенциала поляризации вакуума кулоновским полем

Н.Л. Манаков, А.А. Некипелов

394006, г. Воронеж, Воронежский государственный университет manakov@phys.vsu.ru, nekipelov@phys.vsu.ru

Потенциал, создаваемый точечным ядром с учетом эффекта поляризации вакуума кулоновским полем, можно представить в виде

$$V(r) = \frac{eZ}{r} + V_{pol}, \quad V_{pol} = V^{(1)}(r) + V^{(3+)}(r),$$

где $V^{(1)}$ — хорошо известный потенциал Юлинга, линейный по αZ , а $V^{(3+)}$ содержит нелинейные по αZ слагаемые. Ряд результатов для потенциала $V^{(3+)}(r)$, включая асимптотическое разложение по степеням 1/r, аппроксимационные формулы и таблицы приведен в [1, 2, 3]. В работе [4] получен общий вид разложения $V_{pol}(r)$ по степеням r:

$$-eV_{pol} = \frac{\alpha(\alpha Z)}{3\pi r} (2\ln r + 2\gamma_e + \frac{5}{3}) + a_0 + \sum_{l=0}^{\infty} a_{2l-1}r^{2l-1} + \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} a_{2\lambda_k+n}r^{2\lambda_k+n}, \quad (1)$$

где $\lambda_k = \sqrt{k^2 - (\alpha Z)^2}$, $\gamma_e = 0.577...$ – постоянная Эйлера, а также формулы для расчета коэффициентов a_{-1} , a_1 , $a_{2\lambda_1}$. Выражение для a_0 и более простая, чем в [4], формула для $a_{2\lambda_1}$ получены в [5].

Нами установлено, что остальные коэффициенты в обеих суммах (1) имеют вид

$$a_{i} = \alpha(\alpha Z) \left[a_{i}^{(0)} + \frac{a_{i}^{(-)}}{(\alpha Z)^{2}} + (\alpha Z)^{2} \tilde{a}_{i} \right].$$
(2)

Здесь $a_i^{(0)}$, $a_i^{(-)}$ — константы, $\tilde{a}_i = \tilde{a}_i(\alpha Z)$ — функции, не имеющие особенностей в нуле. Полюсные по αZ слагаемые с коэффициентами $a_{2l-1}^{(-)}$ и $a_{2\lambda_k+n}^{(-)}$ при суммировании в (1) сокращаются, кроме того, коэффициенты $a_{2\lambda_k+n}^{(-)}$ с четными nравны нулю. Отметим, что коэффициенты a_{-1} , a_0 , a_1 , $a_{2\lambda_1}$ как функции αZ не имеют полюсов в нуле. Именно с учетом (2) разложение (1) при малых r и αZ переходит в известные (см. [6]) выражения для $V^{(1)}(r)$ и $V^{(3)}(r)$ — кубичной по αZ части $V^{(3+)}(r)$. После вычитания из (1) линейной по αZ части получается разложение для $V^{(3+)}$ при малых r, которое удобно записать в виде

$$\frac{-eV^{(3+)}}{\alpha(\alpha Z)^3} = \tilde{a}_0 + \sum_{l=0}^{\infty} \tilde{a}_{2l-1} r^{2l-1} + \sum_{k=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} r^{2k+n} \times \left[\tilde{a}_t + \left(a_t^{(0)} + (\alpha Z)^2 \tilde{a}_t \right) \frac{e_1(\varepsilon_k \ln r)}{(\alpha Z)^2} + a_t^{(-)} \frac{e_2(\varepsilon_k \ln r)}{(\alpha Z)^4} - \frac{a_t^{(-)} \ln r}{k(k+\lambda_k)^2} \right].$$
(3)

Здесь $t = 2\lambda_k + n$, $\varepsilon_k = 2(\lambda_k - k) = -\frac{2(\alpha Z)^2}{\lambda_k + k}$, $e_n(x) = e^x - \sum_{m=0}^{n-1} \frac{x^m}{m!} = \sum_{m=n}^{\infty} \frac{x^m}{m!}$. Нами вычислены значения констант:

$$a_{2\lambda_{1}+1}^{(-)} = \frac{1}{6\pi}, \ a_{2\lambda_{1}+1}^{(0)} = \frac{35}{72\pi} - \frac{5\pi}{54} - \frac{\gamma_{e}}{6\pi}, \ a_{3}^{(0)} = \frac{5\pi}{54} - \frac{7}{72\pi}, a_{2\lambda_{2}}^{(0)} = \frac{4}{675}, \ a_{2\lambda_{1}+2}^{(0)} = -\frac{4}{675}, \ a_{2\lambda_{1}+3}^{(-)} = \frac{1}{90\pi}, \ a_{2\lambda_{2}+1}^{(-)} = -\frac{1}{135\pi}.$$
 (4)

Использование разложения (3) с учетом (4) является эффективным способом построения численных аппроксимаций потенциала $V^{(3+)}(r)$ и соответствующей ему плотности, при этом соответствующей перегруппировкой слагаемых в (3) можно также избежать взаимно сокращающихся полюсных особенностей в a_1 и $a_{2\lambda_1}$ при $\sqrt{1 - (\alpha Z)^2} = 1/2$, обсуждаемых в [4].

- [1] Н.Л. Манаков, А.А. Некипелов, А.Г. Файнштейн, ЖЭТФ, 95, в. 4, 1167 (1989)
- [2] A.G. Fainstein, N.L. Manakov and A.A. Nekipelov, J. Phys. B.: At. Mol. Opt. Phys. 23, 559 (1990)
- [3] Н.Л. Манаков, А.А. Некипелов, Вестник Воронежского государственного университета. Серия : физика, математика. 2, 53 (2012)
- [4] L. S. Brown, R. N. Cahn, and L. D. McLerran, Phys. Rev. D 12, 581 (1975).
- [5] А.И. Мильштейн, В.М. Страховенко, ЖЭТФ, т.84, в.4, 1247 (1983)
- [6] J. Blomqvist, Nuclear Physics B 48, 95, (1972)

ПРЕЦИЗИОННАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ АТОМОВ В ОПТИЧЕСКИХ РЕШЕТКАХ

В.Д. Овсянников, С.Н. Мохненко, А.В. Щербаков 394006, г. Воронеж, Воронежский государственный университет ovd@phys.vsu.ru

В настоящем сообщении представлен теоретический анализ влияния нелинейных и ангармонических эффектов на неопределенность частоты оптического стандарта на атомах в оптической решетке с магической длиной волны (МДВ). Численные расчеты соответствующих поляризуемостей и гиперполяризуемостей выполнены для красно- и сине-смещенных магических частот атомов стронция. Изучена возможность создания магической решетки для атомов тулия.

Измерение частоты радиационного перехода с относительной погрешностью менее чем 10^{-17} необходимо для современной метрологии, а также для научных и технологических приложений. В настоящее время идет интенсивный поиск возможностей использования для метрологических целей оптических переходов в нейтральных атомах и положительных ионах. Наиболее перспективными для метрологии являются переходы, имеющие максимальную добротность $D = v_0 / \Delta v$, где v_0 — эталонная частота, Δv — естественная ширина линии эталонного перехода. В частности, строго запрещенные однофотонные переходы между метастабильными ${}^{3}P_{0}$ и основными ${}^{1}S_{0}$ состояниями в атомах группы Па (щелочноземельные элементы), например стронция, Пb, например ртути, обладают добротность $D > 10^{14} \div 10^{15}$, позволяющей на ансамбле из $N = 10^{6}$ атомов довести погрешность измерения частоты эталона до уровня, не превышающего 10^{-18} , за время измерения порядка 1 секунды. Наблюдение этого перехода возможно за счет сверхтонкого, магнито- или свето-индуцированного смешивания ${}^{3}P_{0}$ - и ${}^{3}P_{-}$ -состояний.

Возможность достижения беспрецедентной точности в измерении частоты радиационного перехода в нейтральных атомах основывается на глубоком охлаждении атомов до температуры $T \approx 1$ мкК и последующем захвате штарковским (дипольным) потенциалом оптической решетки. При этом эффект Дике позволяет полностью устранить доплеровское уширение и эффекты отдачи при рассеянии и поглощении

фотонов решетки и пробного излучения в атомах, совершающих вибрационное движение в дипольном потенциале.

Существует два типа решеток — притягивающие длинноволновые или красносмещенные и отталкивающие коротковолновые или сине-смещенные. Обе решетки способны захватить сильно охлажденный атом в состояние гармонического осциллятора, совершающего колебания в окрестности минимума соответствующего потенциала, который для атома в нормальном (g) и возбужденном (e) состоянии можно представить в виде

$$U_{g(e)}^{latt}(X) = U_{g(e)}^{(0)} + U_{g(e)}^{(harm)} X^2 + U_{g(e)}^{(anh)}(X).$$
(1)

Здесь X — расстояние от минимума потенциала вдоль оси решетки, $U_{g(e)}^{(anh)}(X)$ ангармонические поправки к основной, гармонической части потенциала. В притягивающих решетках минимум потенциала, в окрестности которого удерживается атом, $U_{g(e)}^{(0)} = -\alpha_{g(e)}^{E1}(\omega)I - \beta_{g(e)}(\omega)I^2$, достигается в пучности стоячей волны. Здесь значения энергии электродипольного взаимодействия максимальны, как в линейном, так и в квадратичном приближении по интенсивности излучения I лазера, создающего решетку ($\alpha_{g(e)}^{E1}(\omega) > 0$ и $\beta_{g(e)}(\omega)$ — дипольные динамические поляризуемость и гиперполяризуемость).

Для устранения сдвига частоты часового перехода полем решетки необходимо подобрать «магическую» длину волны, на которой штарковские потенциалы для верхнего и нижнего уровней атома максимально идентичны. Тогда сдвиги часовых уровней будут одинаковыми, частота эталонного перехода совпадет с частотой свободного неподвижного атома, а сам атом при переходах между часовыми уровнями в процессе измерения (считывания) не изменит своего вибрационного состояния. Выполнение этого условия требует в первую очередь равенства электродипольных поляризуемостей, определяющих основной (линейный по I) вклад в штарковскую энергию для нормального и возбужденного состояния. При этом необходимо контролировать некомпенсируемые на магической частоте нелинейные и недипольные соответственно эффекты, определяемые гиперполяризуемостью И E2/M1 поляризуемостью $\alpha_{g(e)}^{qm}(\omega) = \alpha_{g(e)}^{E2}(\omega) + \alpha_{g(e)}^{M1}(\omega)$. Таким образом, некомпенсируемый сдвиг эталона частоты полем решетки с магической частотой ω_m можно представить в виде

$$\Delta v_{cl}^{latt}(\omega_m, I, n) = a_{1/2}I^{1/2}(2n+1) + a_1(n)I + a_{3/2}I^{3/2}(2n+1) + a_2I^2, \qquad (2)$$

где коэффициенты $a_{1/2}$ и $a_1(n)$ пропорциональны разности мультипольных поляризуемостей возбужденного и нормального атома на магической частоте $\Delta \alpha_m^{qm} = \alpha_e^{qm}(\omega_m) - \alpha_g^{qm}(\omega_m)$. Зависимость от вибрационного квантового числа в $a_1(n)$ вносят ангармонические составляющие от квадратичных по интенсивности поправок 4го порядка по взаимодействию атома с полем решетки (от гиперполяризуемости). Коэффициенты $a_{3/2}$ и a_2 пропорциональны разности гиперполяризуемостей $\Delta \beta_m = \beta_e(\omega_m) - \beta_g(\omega_m)$. Для магической частоты в поле стоячей волны коэффициент $a_{1/2}$ обращается в нуль (нечувствительная к движению атома МДВ). Выбором МДВ можно также существенно изменить структуру и даже знак коэффициента $a_1(n)$.

В отталкивающих решетках дипольная поляризуемость отрицательна, так что минимуму потенциала $U_{g(e)}^{(0)} = -\alpha_{g(e)}^{qm}(\omega)I$, соответствует узел стоячей волны для электрического поля решетки. При этом электродипольный сдвиг исчезает, а мультипольное взаимодействие достигает максимума. Эффекты гиперполяризуемости в отталкивающей решетке проявляются только в ангармонической части потенциала (1). Аналогичное (2) выражение для некомпенсируемого магической частотой сдвига стандарта частоты полем решетки имеет более простой, чем (2), вид:

$$\Delta v_{cl}^{latt}(\omega_m, I, n) = b_{1/2} I^{1/2} (2n+1) + b_1(n) I$$
(3)

Как и для красно-смещенной решетки, $b_{1/2} = 0$ для нечувствительной к движению атома МДВ, так что сдвиг оказывается пропорциональным интенсивности. Зависимость коэффициента $b_1(n)$ от вибрационного квантового числа вносится ангармоническими эффектами взаимодействия 4-го порядка.

В настоящее время магические длины волн рассчитаны и измерены экспериментально для атомов стронция с относительной погрешностью, не превышающей 10^{-8} , соответствующей неопределенности сдвига частоты стандарта на уровне 10^{-18} . Наряду с атомами щелочноземельных элементов ведется интенсивное исследование возможности использования в качестве частотных стандартов редкоземельных элементов. В частности, у атомов иттербия тоже имеется запрещенный переход ${}^{3}P_{0} - {}^{1}S_{0}$, к которому также можно применить полученные здесь результаты. В последнее время повышенный интерес проявляется также и к атомам тулия, имеющего высокодобротную линию перехода между метастабильным и основным состояниями. Нами выполнен расчет магических частот для этого атома.

СПЕКТРОСКОПИЯ КОГЕРЕНТНОГО ПЛЕНЕНИЯ НАСЕЛЕННОСТЕЙ АТОМА РУБИДИЯ В ЛАЗЕРНЫХ ПОЛЯХ

В.Н. Барышев¹, <u>А.И. Магунов</u>^{2,1}, В.Г. Пальчиков¹

¹ 141570, Менделеево, Московская обл., ФГУП «ВНИИФТРИ»
 ² 119991, г. Москва, Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН magunov@fpl.gpi.ru

Эффект когерентного пленения населенностей (КПН) при взаимодействии атома с бихроматическим лазерным полем (см., например, [1]) в настоящее время предлагается как перспективный способ создания малогабаритных атомных часов в оптическом диапазоне частот. Рассматривается их реализация на газовой ячейке паров рубидия (изотоп 87 Rb со спином ядра *I*=3/2). КПН проявляется в виде узкого резонанса в спектре поглощения на резонансных переходах с подуровней сверхтонкой структуры основного состояния $5^{2}S_{1/2}$ F=1 и F=2 на один из сверхтонких подуровней F' возбужденного состояния $5^2 P_{1/2}$ (D₁ линия) или $5^2 P_{3/2}$ (D₂ линия). Сигнал, стабилизирующий частоты излучения лазеров, определяется по отстройке резонанса в двухфотонном переходе Л-типа между магнитными подуровнями F=1M=0F=2M=0И основного состояния (сверхтонкое расщепление ∆и≈6.83 ГГц).

В работе рассмотрена схема реализации КПН-эффекта при использовании в качестве источников монохроматического излучения боковых полос, получаемых при модуляции частоты излучения диодного лазера ($v_L \approx v_{F'F=1} - v_0/2$) СВЧ полем с частотой $v_m \approx v_0/2$. Теоретически исследуются зависимости характеристик КПН-резонанса (положение, ширина, контраст) от параметров многомодового излучения (интенсивность несущей, глубина и частота модуляции, поляризация). Результаты будут использованы для определения оптимальных условий планируемых экспериментальных исследований.

[1]. E. Arimondo, In: *Progress in Optics*, Vol. 35, ed. E. Wolf, (Elsevier - Amsterdam, 1999) p. 257.

АНИЗОТРОПИЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТИ И МЕЖАТОМНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ АТОМОВ В S-COCTOЯНИЯХ, ИНДУЦИРОВАННАЯ СПИН-ОРБИТАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

А.А. Бучаченко

Химический факультет МГУ имени М.В.Ломоносова, 119991, Москва Институт проблем химической физики РАН, 143432, Черноголовка alexei.buchachenko@gmail.com

Анизотропия межмолекулярного взаимодействия – зависимость потенциальной энергии от взаимной ориентации электронной плотности взаимодействующих частиц – проявляется в спектральных и транспортных характеристиках, скалярных и векторных столкновительных свойствах, структуре конденсированных фаз. При взаимодействии атомов в газовой фазе основным источником анизотропии является отличный от нуля орбитальный угловой момент электронов **L**. Однако, при отличии от нуля спиновых моментов электронов или ядер, анизотропия может возникнуть и за счет тонких и сверхтонких эффектов. Из-за их малости, она важна в случае атомов в **S** состояниях (L = 0). Более того, ее проявления следует ожидать в свойствах и процессах, связанных с наличием внешних полей, в частности, поляризуемости, как отклике на электрическое поле, или в переходах между зеемановскими подуровнями атомов, расщепленных магнитным полем.

Спин-орбитальное взаимодействие (СОВ) индуцирует анизотропию атомных термов $^{2S+1}$ S при S > 1/2, или J = S > 1/2, где S и J – спиновый и полный угловой момент электронов. СОВ второго порядка с возбужденными термами, обладающими ненулевым орбитальным моментом, расщепляет основной терм по проекции **J** на ось поля.

Анизотропия статической дипольной поляризуемости атомов VI группы (N – Bi) в состояниях ${}^{4}S^{o}$, Cr(${}^{7}S, {}^{5}S$), Mn, Tc, Re в состояниях ${}^{6}S$ и Eu(${}^{8}S^{o}$) исследована неэмпирически с использованием метода спин-орбитального конфигурационного взаимодействия в пространстве взаимодействующих состояний в комбинации с приближением конечного поля [1]. Тензорные компоненты поляризуемости α_{2}

рассчитаны для атомов N-Bi, Cr, Mo и Re, тогда как для остальных возмущающие возбужденные термы лежат слишком высоко и не описываются в рамках используемого метода. Рисунок 1 показывает, что для анизотропии поляризуемости, инду-



Рис. 1. Абсолютные величины тензорных поляризуемостей.

цированной СОВ, характерен очень быстрый рост с атомным номером Z, тогда как электростатическая (ненулевой момент L) и сверхтонкая анизотропии изменяются существенно медленнее.

Анизотропия, индуцированная СОВ, является основным препятствием для создания низкотемпературных ансамблей атомов в S состоянии методом загрузки в магнитную ловушку с буферным газом [2]. Она ответственна за зеемановскую релаксацию, изменяющую знак магнитного числа и, следовательно, направление силы, действующей на атом, по отношению к градиенту поля. Динамика этого процесса детально исследована на примере захвата атомов Bi [3] и Sb [4] с гелием.

Проведены прецизионнеэмпирические ные расчеты скалярнорелятивистских потенциалов взаимодействия и матрицы СОВ с гамильтонианом Брейта-Паули для всех состояний, коррелирующих с низшими атомными термами ${}^{4}S^{\circ}$, ${}^{2}P$ и ${}^{2}D$. В адиабатическом пред-



Рис. 2. Расщепления основных состояний комплексов Bi и Sb с атомом гелия, определяющие анизотропию межатомного взаимодействия.

ставлении СОВ приводит расщеплению ΔE_{Σ} основного молекулярного терма ${}^{4}\Sigma^{-}$ на две компоненты, $\Omega = 1/2$ и 3/2. При переходе от Sb к Bi расщепление увеличивается на порядок величины, причем теория возмущений второго порядка, учитывающая лишь прямое СОВ с возбужденными состояниями ${}^{2}\Sigma^{+}$ и ${}^{2}\Pi$, очень хорошо воспроизводит результаты диагонализации матрицы полного спин-орбитального гамильтониана (рис. 2). Механизм расщепления, таким образом, полностью аналогичен механизму появления анизотропной компоненты дипольной поляризуемости. С использованием неэмпирических данных методом сильно-связанных уравнений вычислена константа скорости зеемановской релаксации как функция напряженности магнитного поля. Результаты расчетов находятся в хорошем согласии с данными экспериментов, в которых не удалось получить стабильных ансамблей Sb и Bi [3,4]. Установлено, что вероятности захвата этих и сходных атомов качественно коррелируют с анизотропией дипольной поляризуемости.

Результаты работы свидетельствуют, что анизотропия межатомного взаимодействия, индуцированная СОВ, быстро возрастает с атомным номером. В относительно тяжелых атомах она достаточно велика, чтобы определять динамику низкотемпературных столкновений во внешних полях.

Автор признателен Т. Щербулю (университет Торонто), Р. Кремсу (университет Британской Колумбии) и сотрудникам экспериментальных групп Дж. Дойла (Гарвардский университет) и В. Кеттерле (МИТ) за плодотворное сотрудничество, а также РФФИ за поддержку в рамках проектов 08-03-00414 и 11-03-00081.

[1]. A. A. Buchachenko, Proc. Roy. Soc. A 467, 1310 (2011).

[2]. J. M. Doyle, B. Friederich, and J. Kim, Phys. Rev. A 52, 2515 (1995);

R. V. Krems, G. C. Groenenboom, and A. Dalgarno, J. Phys. Chem. A 108, 8941 (2004).

- [3]. S. E. Maxwell, M. T. Hummon, Y. Wang, A. A. Buchachenko, R. V. Krems, and J. M. Doyle, Phys. Rev. A 78, 042706 (2008).
- [4]. C. B. Connolly, Y. Sh. Au, E. Chae, T. V. Tscherbul, A. A. Buchachenko,W. Ketterle, and J. M. Doyle, Phys. Rev. A, submitted for publication.

ТЕРМОИНДУЦИРОВАННЫЕ СДВИГИ И УШИРЕНИЯ УРОВНЕЙ ЭНЕРГИИ В ИОНАХ II ГРУППЫ

И.Л. Глухов, Е.А. Никитина, В.Д. Овсянников

394006, г. Воронеж, Воронежский государственный университет

GlukhovOfficial@mail.ru

Ионы щелочноземельных элементов привлекают внимание в качестве перспективных кандидатов для проектирования новейших оптических стандартов частоты и квантовых систем обработки информации. Однократно заряженные ионы бериллия Be⁺, магния Mg⁺ и кальция Ca⁺ являются самыми легкими в списке элементов II группы, а также самыми простыми для теоретического и экспериментального изучения. Простая и удобная структура спектра делает эти ионы высокоэффективными партнерами для симпатического охлаждения и захвата в ловушки ионов III группы, в частности Al⁺, обладающих высокодобротной липерехода, представляющейся нией ${}^{3}P_{0} - {}^{1}S_{0}$ полезной лля созлания ультрастабильных оптических часов [1,2].

Структура щелочноземельных ионов подобна структуре щелочных атомов, поэтому в расчетах амплитуд радиационных переходов вполне оправдано использование модельного потенциала Фьюса (МПФ), применявшегося в численных расчетах амплитуд электромагнитных переходов и восприимчивостей паров щелочных металлов [3].

Долгоживущие ридберговские состояния в нейтральных атомах и ионах играют существенную роль в современных исследованиях по квантовой обработке информации [4] и прецизионным измерениям параметров теплового излучения в атомных часах [5]. Термоиндуцированный сдвиг энергии уровня ридберговского состояния при комнатной температуре достигает нескольких килогерц, и может быть измерен при помощи частотной гребенки с точностью до одного милигерца. Следовательно, переходы в ридберговские состояния могут использоваться для создания прецизионного термометра теплового излучения окружающей среды в области локализации эталонного иона. Таким образом, щелочноземельные ионы представляются наиболее подходящими объектами, как для метрологии, так и для квантового моделирования. Мы представляем теоретические расчеты естественных ширин, а также термоиндуцированных сдвигов и уширений в ридберговских состояниях Be⁺, Mg⁺, Ca⁺.

Натуральная ширина Γ_{nl}^{sp} ридберговского состояния $|nl\rangle$ определяется суммарной скоростью спонтанных переходов во все нижележащие состояния

$$\Gamma_{nl}^{\rm sp} = \frac{4}{3c^3(2l+1)} \sum_{n'l'}^{E_{n'l'} < E_{nl}} |M_{nl \to n'l'}|^2$$
(1)

где суммирование проводится по всем дипольно-доступным состояниям с меньшей энергией, $l_{>} = (l + l' + 1)/2$ — больший из угловых моментов l и l', $\omega_{nn'} = E_{nl} - E_{n'l'}$ — частота дипольного перехода. В атомных единицах $e = m = \hbar = 1$, скорость света равна обратной величине постоянной тонкой структуры, $c = \alpha^{-1} = 137.036$; $M_{nl \to n'l'} = \langle n'l' | r | nl \rangle$ — радиальный матричный элемент дипольного перехода, для вычисления которого использовано одноэлектронное приближение МПФ, где радиальная волновая функция представляется в виде обобщенных полиномов Лагерра. Для определения параметров МПФ можно воспользоваться квантовым дефектом μ_{nl} , экстраполированным на ридберговские уровни с произвольным главным квантовым числом:

$$\mu_{nl} = \mu_l^{(0)} + \frac{\mu_l^{(1)}}{m^2} + \frac{\mu_l^{(2)}}{m^4} + \frac{\mu_l^{(3)}}{m^6}, \qquad (2)$$

где $m = n - n_0 + 1$, n_0 – главное квантовое число состояния с минимальной энергией в данной серии состояний с орбитальным моментом l. Численные значения коэффициентов $\mu_l^{(i)}$, i = 0,1,2,3 для *S*-, *P*-, *D*- и *F*-серий состояний в Be⁺, Mg⁺, Ca⁺ были определены при помощи процедуры полиномиальной интерполяции для доступных значений энергий уровней [6].

Ширина уровня (1) обратна его времени жизни, $\tau_{nl} = 1/\Gamma_{nl}^{sp}$. Значения τ_{nl} , вычисленные в приближении МПФ, хорошо согласуются с наиболее достоверными данными, представленными в литературе для некоторых низкоэнергетических состояний [6]. Таким образом, МПФ позволяет оценить время жизни произвольного состояния. Однако с ростом радиального квантового числа вычисления становятся все более сложными. Кроме того, из-за бесконечного числа высоковозбужденных ридберговских уровней не представляется возможным создать подробные таблицы для всех состояния. Вместо этого для определения времени жизни произвольного состояния можно использовать простое аналитическое уравнение с малым числом параметров, основывающееся на асимптотическом поведении τ_{nl} :

$$\tau_{nl} = \tau_l^0 n^3 C_l(n) \,, \tag{3}$$

где τ_l^0 — асимптотическая константа; $C_l(n)$ – гладкая функция, стремящаяся к единице при n >>1, которая может быть представлена в достаточно широкой области своего аргумента как кубический полином по степеням n^{-1} .

$$C_{l}(n) = 1 + t_{1} / n + t_{2} / n^{2} + t_{3} / n^{3}$$
(4)

Численные значения коэффициентов t_1, t_2, t_3 этого полинома и фактора τ_l^0 могут быть определены при помощи процедуры полиномиальной интерполяции. Результаты интерполяции для *nS-*, *nP-*, *nD-* и *nF-*состояний (*l*=0,1,2,3) иона Be⁺ представлены в таблице.

Серия	$ au_l^0$, нс	t_1	t_2	t_3
nS	0.049857	- 0.72863	9.8076	- 17.151
nP	0.071731	- 0.03097	14.655	- 28.123
nD	0.028459	0.046860	4.3348	- 18.248
nF	0.064014	0.12396	7.0608	-36.641

Относительное отклонение аппроксимационных значений от аналитических не превышает 1% в области 7 < n < 2000.

В дополнение к спонтанным переходам, тепловое излучение внешней среды с температурой Т индуцирует переходы как в нижележащие уровни (распады), которые стимулируют эмиссию фотонов, так и в уровни с большей энергией, с поглощением тепловых фотонов. Скорость термоиндуцированных распадов опрескоростью спонтанных распадов. умноженной на количество леляется фотонов задействованных тепловых (для каждого члена ряда), $\overline{n}(\omega,T) = \left\{ \exp[\omega/(kT)] - 1 \right\}^{-1},$ $k = 1 / T_a$ где постоянная Больцмана, T_a = 315780 К — атомная единица температуры. Суммирование по вышележащим состояниям определяет скорость термоиндуцированных возбуждений, интегрироскорость термоиндуцированной ионизации. вание по континууму дает Использование асимптотического представления для сечения фотоионизации [7] позволяет существенно упростить интегрирование по континууму. Простое полиномиальное представление получено на основе вычисленных данных для распадов, возбуждений и скорости ионизации $R_{nl}^{d(e,ion)}(T) = \Gamma_{nl}^{d(e,ion)}(T) / \Gamma_{nl}^{sp}$:

$$R_{nl}^{d(e)}(T) = \frac{a_0^{d(e)} + a_1^{d(e)}x + a_2^{d(e)}x^2}{n^2 \left[\exp\left(\frac{4T_a}{n^3T}\right) - 1 \right]}, \quad x = \frac{1}{nT^{1/3}}, \quad R_{nl}^{ion}(T) = \frac{a_0^{ion} + a_1^{ion}y + a_2^{ion}y^2}{n^{\frac{4}{3}} \left[\exp\left(\frac{2T_a}{n^2T}\right) - 1 \right]}, \quad y = \frac{1}{nT^{1/2}}.$$

Ширина уровня определяется мнимой частью эффекта Штарка на энергетическом уровне под действием теплового излучения, действительная же часть определяет сдвиг уровня [7]. Вычисления демонстрируют существенное отличие в *n*- и *T*-зависимостях сдвигов для *nS*-, *nP*-, *nD*- и *nF*-состояний в ионах Be⁺, Mg⁺, Ca⁺ от соответствующих зависимостей в атомах водорода. Однако все они при $n^2T >> T_a$ стремятся к значениям, независимым от *n*, пропорциональным T^2 [8]. Важная особенность этих асимптотических значений – их зависимость от орбитального числа, которая сильно коррелирует с правилом сумм для сил осцилляторов, как и в случае щелочных атомов [8].

- D.J. Larson et al, "Sympathetic cooling of trapped ions: a laser-cooled two-species nonneutral ion plasma", Phys, Rev. Lett. 57, 70 (1986).
- [2] T. Rosenband et al, "Frequency ratio of Al⁺ and Hg⁺ single-ion optical clocks; Metrology at the 17th decimal place", Science **319**, 1808 (2008).
- [3] N.L. Manakov, V.D. Ovsiannikov, L.P. Rapoport, "Atoms in a laser field", Physics Reports 141, 319 (1986).
- [4] X. L. Zhang, A. T. Gill, L. Isenhower, T. G. Walker and M. Saffman, "Fidelity of a Rydbergblockade quantum gate from simulated quantum process tomography", Phys. Rev. A. 85 (2012) 042310.
- [5] V. D. Ovsiannikov, A. Derevianko and K. Gibble, "Rydberg spectroscopy in an optical lattice", Phys. Rev. Lett. 107 (2011) 093003.
- [6] Information system "Electronic structure of atoms". Novosibirsk State University. Institute of Automation and Electrometry SB RAS. Available: <u>http://grotrian.nsu.ru</u>
- [7] V.D. Ovsiannikov, I.L. Glukhov and E.A. Nekipelov, "Rates of blackbody radiation-induced transitions from Rydberg states of alkali atoms" J. Phys. B 44, 195010 (2011).
- [8] J.W. Farley and W.H. Wing, "Accurate calculation of dynamic Stark shifts and depopulation rates of Rydberg energy levels induced by blackbody radiation. Hydrogen, helium and alkali-metal atoms", Phys.Rev.A, 23, 2397 (1981).

АСИМПТОТИЧЕСКИЕ ФОРМУЛЫ ДЛЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЕЙ РИДБЕРГОВСКИХ СОСТОЯНИЙ АТОМОВ И ИОНОВ

А.А. Каменский, В.Д. Овсянников

394006, г. Воронеж, Воронежский государственный университет

san40@bk.ru

Разложения по степеням эффективного главного квантового числа $v = Z/\sqrt{2|E_{nl}|}$ уже использовались для величин тонкого и сверхтонкого расщепления [1], вероятности спонтанного перехода и сечения пороговой ионизации атомов [2]. Нахождение коэффициентов асимптотических рядов для статических поляризуемостей остается актуальным и в настоящее время [3].

При вычислении поляризуемости состояния |*nLJ*⟩ атома или иона

$$\alpha_{nLJM} = \alpha_{nLJ}^{s} + \alpha_{nLJ}^{t} \frac{3M^2 - J(J+1)}{J(2J-1)}$$

интегрирование по угловым переменным выполняется с применением теории углового момента, а части поляризуемости записываются в виде [4], содержащем коэффициенты Клебша-Гордана и 6-*j* символы:

$$\alpha_{nLJ}^{(p)} = 2(2L+1)C_{1010}^{j0}\sqrt{\frac{(2J+1-p)_{p+1}(2p+1)}{(2J+2)_p}} \times \sum_{J'} (-1)^{J+J'}(2J'+1) \begin{cases} 1 & 1 & p \\ J & JJ' \end{cases} \sum_{L'=L\pm 1} \left(C_{L010}^{L'0} \begin{cases} S & L & J \\ 1 & J' & L' \end{cases} \right)^2 R_{L'J'}.$$
(1)

Здесь $\alpha_{nLJ}^s \equiv \alpha_{nLJ}^{(0)}$, $\alpha_{nLJ}^t \equiv \alpha_{nLJ}^{(2)}$ – скалярная и тензорная поляризуемости соответственно, $(a)_p = a(a+1)...(a+p-1)$ – символ Похгаммера, а радиальная часть функции Грина $g_{L'J'} = g_{L'}(E;r,r')$ входит в матричный элемент

$$R_{L'J'} = \langle nL | rg_{L'J'} r | nL \rangle.$$
⁽²⁾

В расчетах мы используем аналитическое представление волновых функций и функции Грина одноэлектронного приближения модельного потенциала Фьюса (МПФ), [3, 5]. Это позволяет записать радиальный матричный элемент (2) в виде, содержащем гипергеометрическую функцию двух аргументов:

$$R_{L'J'} = \frac{\nu^{3} (2\lambda_{L} + 2)_{n_{r}} [\Gamma(\lambda_{L} + \lambda_{L'} + 4)]^{2}}{16Z^{4} \Gamma(2\lambda_{L} + 2) \Gamma(2\lambda_{L'} + 2)n_{r}!} \times \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(2\lambda_{L'} + 2)_{k}}{k! (k + \lambda_{L'} + 1 - \nu)} [F_{2}(\lambda_{L} + \lambda_{L'} + 4; -n_{r}, -k; 2\lambda_{L} + 2, 2\lambda_{L'} + 2; 1, 1)]^{2}.$$
(3)

Заметим, что в формуле (3) доминирующий вклад суммы дают слагаемые с $k \sim n_r$. Полагая состояния высоковозбужденными, n >> 1 и $n_r >> 1$, для функции F_2 удалось получить асимптотическое выражение и вычислить сумму по k в формуле (3) аналитически. Далее, после соответствующих разложений степенных и Гамма функций представляем радиальный матричный элемент (2) в виде ряда по степеням главного квантового числа:

$$R_{L'J'} = B_{L'J'} n^7 \left(1 + \frac{b_{L'J'}^{(1)}}{n} + \frac{b_{L'J'}^{(2)}}{n^2} \right);$$
(3):

$$B_{L'J'} = \frac{9\pi}{4Z^4} \cot(\pi \,\xi_{LL'}), \qquad b_{L'J'}^{(1)} = \frac{35(\xi_{LL'} \,\eta_{LL'} + 4)}{36\pi} \tan(\pi \,\xi_{LL'}) - 7\delta_L^{(0)}, \quad (4)$$

$$b_{L'J'}^{(2)} = \frac{1}{2} + \frac{2\pi \left(\delta_{L'}^{(2)} - \delta_{L}^{(2)}\right)}{\sin(2\pi\,\xi_{LL'})} - \frac{1}{12} \left(\xi_{LL'}^2 + 2\right) \left(\eta_{LL'}^2 + 2\right) - 21\delta_{L}^{(0)2} - 6\delta_{L}^{(0)}b_{L'J'}^{(1)};$$
(5)

где введены вспомогательные величины

$$\xi_{LL'} = n_{L'} - n_L - \delta_{L'}^{(0)} + \delta_L^{(0)}, \qquad \eta_{LL'} = n_{L'} + n_L - \delta_{L'}^{(0)} - \delta_L^{(0)} - 1.$$

Здесь $n_L = n - n_r$ – главное квантовое число наинизшего *L*-подуровня, которое может быть искусственно изменено на ±1 согласно модификациям метода МПФ. Параметры квантового дефекта $\delta_L^{(0)}$, $\delta_L^{(2)}$ – это коэффициенты формулы Ритца

$$\delta_{nL} = \delta_L^{(0)} + \delta_L^{(2)} / \left(n - \delta_L^{(0)} \right)^2 + \delta_L^{(4)} / \left(n - \delta_L^{(0)} \right)^4 + \dots$$

Результатом данной работы является получение аналитически асимптотического выражения для статических поляризуемостей

$$\alpha_{nLJ}^{s,t} = A_{LJ}^{s,t} n^7 \left(1 + \frac{c_{LJ}^{(1)s,t}}{n} + \frac{c_{LJ}^{(2)s,t}}{n^2} \right).$$
(6)

Коэффициенты формулы (6) легко вычисляются подстановкой коэффициентов (4)–(5) с учетом разложения (3) в поляризуемость (1). В качестве примера приведем случай *S*-состояния с пренебрежением тонким расщеплением соседних *P*-подуровней:

$$\begin{aligned} \alpha_{nS} &\approx \frac{3n^{7}\pi}{2Z^{4}} \cot\left[\pi \left(\delta_{S}^{(0)} - \delta_{P}^{(0)}\right)\right] \times \left\{1 - \frac{7\delta_{S}^{(0)}}{n} + \frac{35\left[\left(n_{P} - n_{S} - \delta_{P}^{(0)} + \delta_{S}^{(0)}\right)\left(n_{P} + n_{S} - \delta_{P}^{(0)} - \delta_{S}^{(0)} - 1\right) + 4\right]}{36\pi n} \tan\left[\pi \left(\delta_{S}^{(0)} - \delta_{P}^{(0)}\right)\right] \right\}. \end{aligned}$$

Заметим, что вышеприведенные формулы универсальны, т.е. применимы к ридберговским состояниям любого атома или иона. Численные же значения коэффициентов поляризуемости $A_{LJ}^{s,t}$, $c_{LJ}^{(1)s,t}$, $c_{LJ}^{(2)s,t}$ (или их произведений), полученные по формулам (1)–(5) хорошо согласуются с имеющимися в литературе данными: для *S*- и *P*- состояния пара- и орто-гелия [6], а также *S*- , *P*-, и *D*подуровней атомов щелочных металлов [3].

Необходимость в простых аппроксимационных формулах для корректных оценок статических характеристик атомов возникает, например, в проектировании приборов квантовой обработки информации для учета отклика атома на внешнее электромагнитное возмущение.

Работа выполнена при поддержке Гранта РФФИ №11-02-152-а.

А. Далгарно, Р.Я. Дамбург и др., Ридберговские состояния атомов и молекул:
 Пер. с англ./Под ред. Р.Стеббингса, Ф.Даннинга. – М.:Мир, 496 с. (1985).

[2]. I L Glukhov, E A Nekipelov and V D Ovsiannikov, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.43, 125002 (2010).

[3]. E. Yu. Il'inova, A. A. Kamenski and V. D. Ovsiannikov, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 42, 145004 (2009).

[4]. I. L. Bolgova, V. D. Ovsyannikov, V. G. Pal'chikov, A. I. Magunov, and G. von Oppen, Journal of Experimental and Theoretical Physics **96**, № 6, 1006 (2003)

[5]. Н.Л. Манаков, В.Д. Овсянников, Л.П. Рапопорт, Опт. и Спектр. **38**, С.206 (1975).

[6] Zong-Chao Yan, Physical Review A. 62, 052502 (2000).

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ: РОЛЬ ПЛАЗМОН-ЭКСИТОННОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ И РАЗМЕРНЫХ ЭФФЕКТОВ

<u>В.С.Лебедев</u>^{1,2}, А.С.Медведев²

¹ 119991, г. Москва, Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН
 ² 141700, г. Долгопрудный, Московский физико-технический институт vlebedev@sci.lebedev.ru

Исследование оптических свойств гибридных наноматериалов представляет интерес для ряда фундаментальных проблем нанооптики и для прикладных исследований и разработок по созданию оптоэлектронных и фотонных устройств нового поколения, таких как светоизлучающие диоды, фотовольтаические элементы, фотонные переключатели и нанолазеры. Продвижение в этих областях требует создания и изучения новых материалов с управляемыми оптическими свойствами. Для решения ряда задач перспективным является использование систем, состоящих из металлических наночастиц и молекул или сложных молекулярных комплексов, в том числе упорядоченных J-агрегатов органических красителей, в которых благодаря трансляционному порядку электронные возбуждения отдельных молекул обобществляются, образуя экситоны Френкеля. В настоящей работе приведены результаты исследований оптических свойств гибридных двухслойных наночастиц металл/J-агрегат [1-3], а также трехслойных наночастиц, которые состоят из металлического ядра, внешней J-агрегатной оболочки красителя и промежуточного пассивного диэлектрического слоя между ними.

Расчеты спектральных характеристик наночастиц сферической формы были проведены нами в рамках обобщенной теории Ми для концентрических сфер с учетом вклада всех поперечно-магнитных (TM) и поперечно-электрических (TE) мод и размерного эффекта для локальной диэлектрической функции металлического ядра. Диэлектрическая функция J-агрегата рассчитывалась в модели ангармонического осциллятора с собственной частотой ω_0 , соответствующей центру Jполосы поглощения с шириной Γ и приведенной силой осциллятора *f*, или определялась непосредственно с помощью экспериментальных данных с использованием соотношения Крамерса-Кронига. Рассматривался широкий диапазон длин волн от УФ до ИК и геометрических параметров системы (радиус ядра частицы варьировался от 5 до 65 нм, толщина оболочки от 1 до 5 нм. В расчетах использовались оптические константы различных материалов ядра (Ag, Au, Cu, Al) и оболочки цианиновых красителей, имеющих пики J-полосы поглощения в различных спектральных интервалах и существенно отличающиеся друг от друга значения силы осциллятора перехода *f*. В качестве пассивного промежуточного диэлектрического слоя выбирался органический материал TMA: N,N,N-trimethyl(11mercaptoundecyl)-ammonium chloride, а в качестве окружающей среды – вода.



Рис. 1. Сечения фотопоглощения, σ_{abs} , частиц Ag/TC в водном растворе в зависимости от длины волны в вакууме, λ , для геометрических параметров: r_1 =30 нм, r_2 =33 нм (**a**); r_1 =65 нм, r_2 =70 нм (**b**). Сплошные кривые – результаты расчета суммарного вклада всех ТМ- и ТЕ-мод. 1 – вклад электродипольной моды (TM, n=1), 2 – магнитодипольной моды (TE, n=1), 3 – электроквадрупольной моды (TM, n=2), 4 – магнитоквадрупольной моды (TE, n=2), 5 – электрооктупольной моды (TM, n=3).

Для двухслойных наночастиц, состоящих из металлического ядра и оболочки J-агрегатов цианиновых красителей, нами было исследовано влияние эффектов взаимодействия экситонов Френкеля с локализованными плазмонами на поведение спектров поглощения и рассеяния света. Были определены собственные частоты гибридных мод системы и интенсивности пиков фотопоглощения; изучены их зависимости от силы осциллятора перехода в J-полосе красителя, радиуса ядра r_1 и толщины оболочки *l*. Продемонстрирован качественно различный характер влияния эффектов взаимодействия экситона с дипольными и мультипольными плазмонами на оптические свойства исследуемых композитных наночастиц (см. рис. 1). Найдены области доминирования процессов поглощения и рассеяния света в спектрах экстинкции. Показано, что при варьировании размеров и оптических констант материалов частицы изменяется общее число спектральных пиков и происходит существенное перераспределение их интенсивностей в максимумах.

При исследовании оптических свойств наночастиц с металлическим ядром, внешней J-агрегатной оболочкой органического красителя и промежуточным пассивным слоем было показано, что в результате появления дополнительных возможностей управления величиной и характером связи экситонов Френкеля с локализованными поверхностными плазмонами в рассматриваемых системах спектральные характеристики трехслойных частиц значительно отличаются от двухслойных частиц металл/Ј-агрегат. Установлено, в частности, что варьирование толщины пассивного промежуточного слоя l_s (который создает пространственное разделение поверхности металлического ядра частицы и молекулярного J-агрегата красителя) приводит к существенной модификации спектров поглощения света. Изменяется не только взаимное расположение пиков и их относительная интенсивность, но и общее количество спектральных максимумов. При малых значениях толщины l_s диэлектрической прокладки (TMA) изменение других геометрических параметров (радиуса металлического ядра r_1 и толщины J-агрегатной оболочки ℓ_J) существенно влияет на спектральные свойства исследуемых систем. При больших значениях толщины промежуточного слоя l_s (т.е. при пространственном разделении активных компонент гибридной наночастицы) сечения поглощения и рассеяния света зависят, в основном, только от размера частицы, слабо реагируя на изменение величин r_1 и ℓ_J при постоянном внешнем радиусе. Это свидетельствует об изменении характера плазмон-экситонного взаимодействия в такого рода гибридных системах при введении дополнительного промежуточного слоя. Таким образом, результаты показывают, что введение промежуточного слоя дает дополнительный способ влияния на оптические свойства композитных наносистем.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 12-02-00713-а) и проектов Минобрнауки в рамках ФЦП (соглашения № 8576 и 8396).

- [1]. V.S. Lebedev, A.G. Vitukhnovsky, A, Yoshida, N. Kometani, Y. Yonezawa, *Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects* **326**, 204 (2008).
- [2]. В.С. Лебедев, А.С. Медведев, Д.Н. Васильев, Д.А. Чубич, А.Г. Витухновский, *Квантовая электроника* **40**, 246 (2010).

[3]. В.С. Лебедев, А.С. Медведев, Квантовая Электроника 42, 701 (2012).

ВЛИЯНИЕ РАЗМЕРА НАНОКРИСТАЛЛОВ CdS НА ПАРАМЕТРЫ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ

Ю.С. Бездетко, В.Г. Клюев

394006, г. Воронеж, ФГБОУ ВПО "Воронежский государственный университет"

e-mail: vgklyuev@rambler.ru, julfiz@yandex.ru

Нанокристаллы сульфида кадмия (HK CdS), синтезированные по золь-гель технологии, обладают достаточно интенсивной фотолюминесценцией в видимой области спектра.

В данной работе представлены результаты, описывающие зависимость интенсивности люминесценции HK CdS и поглощения λ_{max} этой полосы в зависимости от размера HK CdS.

Синтез нанокристаллов осуществлялся двухструйным сливанием в реакторе водных растворов реагентов:

$$CdBr_2 + Na_2S \rightarrow CdS + 2NaBr$$

В качестве полимерной матрицы для пространственного разделения растущих нанокристаллов использовалась нейтральная желатина, расплавленная в воде при температуре 40°С.

В течение синтеза было отобрано 23 образца. Первый образец был отобран через 0,5 минуты после начала подачи реагентов. Второй – через минуту. Далее



Рис.1. Зависимость размера НК CdS от концентрации CdS относительно желатины.

образцы отбирались с интервалом в 2 минуты. Образцы поливались на стеклянные пластинки одинакового размера и формы для измерения спектров поглощения и спектров люминесценции.

Из спектров поглощения по первому длинноволновому максимуму оценивались значения эффективной ширины запрещенной зоны ΔE_g, полученных нанокристаллов сульфида кадмия. Согласно модели сильного квантования, рассмотренной в работе [1], размеры (диаметры) НК CdS вычислялись по формуле

$$d = 2h / (2\mu (\Delta E_g - \Delta E_o))^{1/2}, \qquad (1)$$

где $\mu^* = m^*_e \cdot m^*_h / (m^*_e + m^*_h)$ - приведенная эффективная масса электрона и дырки в кристалле CdS. Значения эффективных масс электрона и дырки выбирались согласно работе [2] и равны $m^*_e = 0.21m_e$, $m^*_h = 0.8m_e$, $\Delta E_g = 2,4$ эВ – ширина запрещенной зоны монокристалла CdS.

На рис. 1 приведена зависимость значения размера НК CdS, вычисленного по формуле (1), от концентрации сульфида кадмия относительно желатины, введенного к моменту отбора очередного образца. Эта величина получена расчетным путем. Из рис. 1 видно, что зависимость диаметра НК от количества реагентов, введенных в желатиновую матрицу в процессе си



Рис.2. Зависимость ширины запрещенной зоны нанокристалла CdS от его размера.

желатиновую матрицу в процессе синтеза состоит из двух квазилинейных



Рис.3. Зависимость интенсивности в максимуме полосы люминесценции и энергии кванта люминесценции в максимуме полосы от размера НК дырки.

участков.

Из рис. 2 видно, что экспериментальные точки (кружки) для всех образцов хорошо аппроксимируются функцией (1) (сплошная линия). Это свидетельствует в пользу того, что для полученных НК CdS модель сильного квантования приемлема и размер НК меньше боровских радиусов электрона и

Из рис. З видно, что интенсивность люминесценции образцов сначала увеличивается при увеличении размера НК от 3,2 нм до 3,4 нм, а затем быстро уменьшается. На такую зависимость влияют два противоположно работающих фактора: с одной стороны при увеличении количества вводимых компонентов

увеличивается количество образующихся нанокристаллов. При этом общая интенсивность люминесценции возрастает. С другой стороны, при увеличении размера кристаллитов увеличивается число дефектов, которым соответствуют центры безызлучательной рекомбинации. Это снижает квантовый выход люминесценции, и ее интенсивность уменьшается. Снижает интенсивность люминесценции и так называемый фильтр-эффект (нижележащие НК экранируются от возбуждающего света вышележащими).

Из зависимости энергии кванта люминесценции в максимуме от диаметра кристалла CdS следует, что в начале роста спектр люминесценции сдвигается в коротковолновую область, в то время как эффективная ширина запрещенной зоны уменьшается. Так как при этом уширяется в эту же сторону вся полоса люминесценции, то такое поведение свидетельствует о том, что на ранних стадиях роста нанокристаллов центры люминесценции формируются не одновременно. И первым возникают дефекты, имеющие полосу люминесценции в длинноволновой области спектра с $hv_{max} = 1.9$ эВ. Далее по мере роста НК начинают формироваться дефекты, полосы люминесценции которых, лежат в более коротковолновой области спектра вплоть до $hv_{max} = 2.3$ эВ. При последующем росте НК полосы люминесценции уже сформированых дефектов сдвигаются в длинноволновую область спектра синхронно с дальнейшим уменьшением ΔE_g .

[1]. Эфрос Ал.Л., Эфрос А.Л. Межзонное поглощения света в полупроводниковом шаре. // Физика и техника полупроводников. – 1982. – Т. 16, № 7. – С. 1209-1214. [2]. A.D. Yoffe. Low – dimensional systems: quantum size effects and electronic properties of semiconductor microcrystallites (zero – dimensional systems). // Adv. Phys. – 1993. – V. 42. – P. 173.

169

СПЕКТРАЛЬНЫЕ СВОЙСТВА КОЛЛОИДНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК Аg₂S

А.С. Перепелица, О.В. Овчинников, М.С. Смирнов, Т.С. Шатских,

Г.С. Кузнецова, С.Н. Иванников

394006, г. Воронеж, ФГБОУ ВПО "Воронежский государственный университет" a-perepelitsa@yandex.ru

Полупроводниковые коллоидные квантовые точки (КТ) Ag_2S представляют большой практический интерес с точки зрения биомедицинских приложений, фотокатализа и фотовольтаики [1,2], вследствие наличия у них таких особых свойств (узкая ширина запрещенной зоны, низкая токсичность, высокая реакционная способность, низкая водорастворимость и пр.). Однако спектральные свойства КТ Ag_2S остаются малоизученными в части проявлений квантовой размерности в спектрах поглощения и люминесценции, а также природы резкой зависимости положения края поглощения и максимума свечения от условий их приготовления.

Данная работа посвящена анализу спектров поглощения и люминесценции коллоидных КТ Ag₂S, приготовленных в различных условиях, обеспечивающих вариацию концентрации собственных и примесных дефектов.

Объектами исследования служили диспергированные в желатину коллоидные КТ Ag_2S различных средних размеров, синтезированные золь–гель методом. Оценка среднего размера по данным просвечивающей электронной микроскопии (LEO⁹¹² AB^{OMEGA}) показала, что избранный подход синтеза позволяет варьировать размерами КТ Ag_2S от 1.5 нм до 20 нм с разбросом 30–50% (рис. 1). Обнаружено, что использование различных стабилизаторов оказывает значительное влияние на средний размер КТ и взаимное расположение КТ в ансамбле. Так, введение ста-соли смещает максимум распределения по размеру к 4 нм с разбросом в 40-50% (рис. 1, б), тогда как для КТ в желатине без дополнительных стабилизаторов средний диаметр составлял 2.4 нм с разбросом 40% (рис. 1, а). Образцы КТ Ag_2S , выращенные путем медленного освобождения ионов серы изменением уровня рН до 10.8, обладали средним размером 12 нм, а вариация соотношения ($2Ag^+$):S²⁻= 10:1; 1:10 приводила к изменению максимума размерного распределения в пределах от 10 до 20 нм, соответственно.



Рис. 1 Электронные фотографии КТ Ag_2S и гистограммы распределения по размеру: *a* – без стабилизатора, *б* – стабилизированные ста-солью, *в* – в зависимости от соотношения ($2Ag^+$): S^2 : *I* – 1; *2* – 10:1; *3* – 1:10.



Рис. 2 Спектры: а) поглощения коллоидных КТ Ag₂S синтезированных в желатине: без добавок и комплексообразователей – 1; в присутствии ста-соли – 2; б) поглощения коллоидных КТ Ag₂S синтезированных в желатине в присутствии агента серы CH₄N₂S в разном соотношении компонентов: Ag⁺:S²⁻=1:1 – 1; Ag⁺:S²⁻=10:1 – 2; Ag⁺:S²⁻=1:10 – 3; в) поглощения коллоидных КТ Ag₂S в разном соотношении компонентов: Ag⁺:S²⁻=1:1 – 1; 1:10 – 2; 10:1 – 3; г) люминесценции коллоидных КТ Ag₂S в разном соотношении компонентов: Ag⁺:S²⁻=1:1 – 1; 1:10 – 2; 10:1 – 3; г) люминесценции коллоидных КТ Ag₂S в разном соотношении компонентов со детехтры поглощения которых даны на рис. 2 в при возбуждении излучением с λ = 532 нм при T=77K, кривые со штрихами соответствуют образцам КТ Ag₂S, выдержанным при температуре 90 °C в течение 3-х часов.

Анализ спектров поглощения света желатиновыми слоями приготовленных образцов (рис. 2), записанных на спектрофотометре Shimadzu BioSpec-mini (Япония), показал, что в спектрах поглощения всех образцов обнаружен существенный сдвиг края поглощения относительно края фундаментальной полосы поликристалла Ag_2S , составляющий от 1.5 до 2 эВ в зависимости от среднего размера КТ. Диффузные бесструктурные края в спектрах поглощения коллоидных КТ Ag_2S обусловлены как разбросом по размеру, так и существованием локализованных состояний. Оптические переходы с участием последних дают вклад в длинноволновой области спектра. Обнаружено, что четкий максимум в области 2.8 эВ, соответствующий поглощению в области первого наиболее вероятного оптического перехода, наблюдается при выдержке золя в реакторе при температуре 90 °C в течение 3-х часов, приводящей к уменьшению дисперсии КТ по размерам (рис. 2а, *I*). Для таких КТ Ag_2S наблюдается интенсивное свечение с максимумом

1074 нм (рис. 2 г, I'). Столь значительный стоксов сдвиг указывает на рекомбинационный характер наблюдаемой люминесценции. Применение дополнительных стабилизаторов приводит к значительной трансформации спектров поглощения и люминесценции. Спектры поглощения для коллоидных КТ Ag₂S, полученных медленным освобождением серы за счет увеличения pH, имеют широкое плато в районе 2.5 – 4.0 эВ с тремя особенностями в 2.55 эВ, 3.5 эВ, 4.4 эВ (рис. 26, I-3). Расшифровка данных особенностей усложнена дисперсией по размеру. Особенности во всех спектрах в области 4.4 эВ принадлежат желатину. Для таких КТ люминесценция отсутствовала. Данный факт объяснен особенностью структуры КТ Ag₂S, полученных таким методом, так как согласно данным обратного электронного рассеяния КТ этого типа представляли собой аморфное образование с кристаллическим зародышем в центре (рис. 1в).

Обнаружено, что изменение соотношения меду концентрацией ионов серы и серебра влияет на параметры спектров поглощения и люминесценции коллоидных КТ Ag_2S (рис. 2в и 2г). Избыток ионов серебра приводит к коротковолновому смещению края поглощения КТ Ag_2S (рис. 2в, 3) и уменьшению интенсивности люминесценции по всему спектру. В свою очередь избыток ионов серы способствует практически полному исчезновению поглощения в длинноволновой области спектра (рис. 2в, 2). В спектре люминесценции при этом наблюдается сдвиг максимума свечения в длинноволновую область и смещению максимумов свечения к 1140 нм и 1210 нм. Таким образом, предположено, что в состав центров рекомбинационной люминесценции коллоидных КТ Ag_2S входят дефекты, обусловленные примесными серебряными центрами и возникающими вакансиями.

Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ 11–02–00698–а; РФФИ 12– 02–31735 и ФЦП (мероприятие 1.2.1, соглашение №14В37.21.1071).

N.P. Bhola, Y. Ghosh, S. Brovelli, R. Laocharoensuk, V.I. Klimov,
 J.A. Hollingsworth, and H. Htoon, Nano Lett. 12, 331 (2012).

[2]. K.R. Choudhury, F. So, Z. Kafaf, Comprehensive Nanoscience and Techn. Chapter 4.07, 183 (2011).

АНТИСТОКСОВСКОЕ РЕКОМБИНАЦИОННОЕ ИЗЛУЧЕНИЕ В ПРИСУТСТВИИ МЕТАЛЛИЧЕСКИХ НАНОЧАСТИЦ

<u>Е.А. Егорушина</u>, Е.А. Струкова, А.Н. Латышев, О.В. Овчинников, М.А. Ефимова 394006, г. Воронеж, Воронежский государственный университет

anlat@rambler.ru; eelena29@mail.ru

В работе [1] наблюдалось заметное усиление антистоксового свечения микрокристаллов AgCl(I) в присутствии наночастиц серебра. Этим было показано, что эффект Парселла [2,3], заключающийся в увеличении вероятности спонтанных переходов вблизи резонаторов, распространяется на рекомбинационные переходы в кристаллах. Наночастицы формировались в самих микрокристаллах при достаточно больших интенсивностях ультрафиолетового излучения при комнатных температурах за счёт фотолиза. При этом возрастала концентрация примесных состояний микрокристаллов, которые способны играть роль промежуточных уровней при двухквантовом антистоксовом возбуждении свечения. В связи с этим усиление интенсивности рекомбинационного свечения могло происходить частично из-за этого фактора. В данной работе с целью исключения указанного искажения результатов серебряные наночастицы, изготовленные отдельно, добавлялись в образцы, содержащие микрокристаллы хлориодида серебра, в такой концентрации, чтобы на каждый микрокристалл в среднем приходилось по одной наночастице.

Исследуемые образцы представляли собой микрокристаллы AgCl(I) и серебряные наночастицы в желатиновой матрице. Образцы сравнения не содержали наночастиц. Образцы изготавливались следующим способом. Сначала синтезировалась исходная мелкозернистая эмульсия микрокристаллов хлороиодида серебра. Для этого смешивались подогретые до 40°С желатиновые растворы, содержащие в определённой концентрации хлористый и иодистый калий, с раствором AgNO₃. Полученная эмульсия делилась на несколько частей. В одну часть добавляли равное количество раствора желатины. В последующем первоначального ИЗ этой эмульсии приготавливались образцы сравнения. Другую часть засвечивали ультрафиолетовым фотолиза микрокристаллов. излучением до глубокого После обработки гипосульфитом натрия эту часть добавляли в исходную эмульсию для приготовления исследуемых образцов. Во всех случаях одинаковое количество эмульсии поливалось на стеклянные пластинки равной площади. Образовавшиеся слои промывались и сушились в стандартных условиях. Во всех случаях толщина слоёв получалась равной 37±2 мкм. Размер микрокристаллов хлориодида серебра составлял в среднем 75 – 100 нм. Диаметр наночастиц серебра – около 50 нм. Отношение концентраций микрокристаллов и наночастиц составляло 1:1.

Ha рис.1 представлены спектры рекомбинационного микрокристаллов свечения образцов сравнения (кривая 1) и тех же микрокристаллов в присутствии серебряных наночастиц (кривая 2), измеренные при азотных температурах. На врезке этого рисунка показан спектр



и исследуемых образцов (2); на врезке спектр ослабления желатиновых слоев с серебряными наночастицами

ослабления желатиновых слоёв, содержащих только серебряные наночастицы. Положение максимума на этой кривой при 475 нм соответствует размеру наночастиц, равному 50 нм. Резкое уменьшение интенсивности полосы свечения микрокристаллов в образцах с наночастицами нельзя объяснить только эффектами экранировки серебряными наночастицами ввиду малости оптической плотности их спектра (см. врезку рис. 1). Можно предположить, что падение интенсивности свечения происходит из-за уменьшения квантового выхода, обусловленного возникновением мощного канала безызлучательных переходов, что в свою очередь для исследуемых образцов определяется непосредственным контактом значительной части микрокристаллов с наночастицами. Безызлучательные переходы маскируют эффект Парселла для стационарной люминесценции. Вместе с тем этот эффект может проявляться и как увеличение вероятности безызлучательных переходов. На рис. 2 представлены спектры фотостимулированной вспышки рекомбинационного свечения образцов сравнения (кривая 1) и исследуемых образцов (кривая 2). Кривая 2 проходит значительно ниже кривой 1, что, видимо, связано с уменьшением квантового выхода.

Если учесть это и умножить обстоятельство ординаты кривой 2 на коэффициент, равный отношению интенсивностей в максимуме кривых 1 и 2 рис.1, то полученная кривая 3 проходит близко от кривой 1 рис. 2. Это говорит о том, что добавление наночастиц серебра практически не увеличивает концентрацию



Кривая 3 построена с учетом снижения квантового выхода

локальных примесных состояний микрокристаллов.

После этих предварительных исследований были проведены измерения спектра антистоксового возбуждения исследуемых образцов и образцов сравнения также при азотных температурах. Возбуждение осуществлялось излучением лампы накаливания, из которого монохроматором выделялись световые потоки в диапазоне 0,6 – 2, 0 эВ.

Результат представлен на рис. 3. Следует обратить внимание на TO, что исходные образцы сравнения имели очень незначительную интенсивность антистоксового свечения (кривая 1). Заметное свечение этих образцов после их появляется лишь облучения ультрафиолетовым излучением при низких 2). температурах (кривая которое происходит во время



Рис.3. Спектры возбуждения антистоксового свечения образцов сравнения (1); засвеченных при 77 К образцов сравнения (2); исследуемых образцов (3); исследуемых образцов с учетом снижения квантового выхода (4)

измерения спектра рекомбинационного свечения, представленного на рис.1. Кривая 3 представляет собой спектр возбуждения исследуемых образцов, содержащих наночастицы. Видно, что, несмотря на малый квантовый выход для этих образцов, свечение при антистоксовом возбуждении значительно превосходит свечение образцов сравнения. Учёт снижения квантового выхода приводит к ещё большему отличию этих спектров (кривая 4). Поскольку данные рис. 2 не дают возможность объяснить это изменением концентрации промежуточных уровней, существенных для антистоксового двухквантового возбуждения, следует считать, что усиление интенсивности свечения в присутствии наночастиц серебра происходит за счёт их влияния на вероятность двухфотонного возбуждения кристаллов. Следовательно, эффект Парселла распространяется и на этот случай.

1. Нгуен Тхи Ким Чунг. Увеличение интенсивности антистоксовой сенсибилизированной люминесценции кристаллов AgCl(I) в присутствии серебряных наночастиц /Нгуен Тхи Ким Чунг, Е.А. Егорушина, А.Н.Латышев, О.В.Овчинников, М.С.Смирнов, Т.И.Суворова // Ж. прикл. спектроскопии. – 2011. – Т.78, № 6. – С. 969 -972.

2. Parcell E.M. Spontaneous emission probabilities at radio frequencies / Phys. Rev. – 1946. – V.69. – P.681.

3. Ораевский А.Н. Спонтанное излучение в резонаторе / УФН. – 1994. – Т. 164, № 4. – С.415 – 427.



Тезисы стендовых докладов в рамках научной школы для молодых ученых


ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ОПИСАНИЕ ДВОЙНОЙ ТРЁХ-ФОТОННОЙ ИОНИЗАЦИИ АТОМОВ В ДИАПАЗОНЕ ВУФ

<u>А.С. Четверкина</u>^{1,2}, А.Н. Грум-Гржимайло², Е.В. Грызлова²

¹ 119991, Москва, Ленинские горы, МГУ имени М.В. Ломоносова, Физический факультет

² 119991, Москва, Ленинские горы, МГУ имени М.В. Ломоносова, НИИЯФ имени Д.И. Скобельцына asybit@yandex.ru

Одной из наиболее актуальных тем современных фундаментальных исследований является изучение взаимодействия интенсивных коротковолновых лазерных импульсов с веществом [1]. Лазеры на свободных электронах (ЛСЭ) служат уникальным инструментом для исследования взаимодействия сильных когерентных импульсов диапазона вакуумного ультрафиолета (ВУФ) с атомами, молекулами и кластерами. Простейшим нелинейным явлением в ВУФ, изучение которого стало возможным с появлением ЛСЭ, является последовательная кратная ионизация (ПДДИ) атомов несколькими фотонами. В данной работе мы рассмотрели последовательную двойную трёхфотонную ионизацию (ПДТИ) атомов. Этот процесс идёт в два этапа. На первой ступени один фотон ионизирует нейтральный атом, формируя промежуточный ион. На следующей ступени происходит ионизация промежуточного иона двумя фотонами того же импульса ЛСЭ. Если энергии фотонов ЛСЭ перекрываются с энергией одного или нескольких возбуждённых состояний промежуточного иона, то говорят о резонансной ПДТИ. Последняя наблюдалась экспериментально и описана теоретически [2] на примере атома аргона. Нерезонансная ПДТИ также имеет экспериментальное подтверждение [3], а предварительные теоретические результаты для этого случая обсуждались нами в [4].

В данной работе излагается формализм описания нерезонансной ПДТИ атомов. Рассматривается линейно поляризованное излучение ЛСЭ, вследствие чего промежуточный ион оказывается выстроенным (приобретает поляризацию). В отличие от резонансной ПДТИ, для теоретического вычисления угловых распределений и функций угловых корреляций, помимо амплитуд фотоионизации требуются вероятности электромагнитных переходов в континууме. Переход между состояниями непрерывного спектра представляет отдельную задачу, так как дипольные матричные элементы такого перехода содержат сингулярность, которая не позволяет провести вычисления напрямую. Для решения этой проблемы мы используем метод, предложенный в [5].

Нами получены новые количественные результаты: параметры угловой асимметрии, которые характеризуют угловое распределение фотоэлектронов, и сечение процесса нерезонансной ПДТИ атома неона. Эти результаты могут быть использованы для оценки и выбора необходимых условий соответствующих экспериментов на ЛСЭ. Рассмотренные нами энергии фотонов хорошо отвечают диапазону, в котором проводятся эксперименты на ЛСЭ FERMI [6].

Работа выполнена при поддержке гранта Российского Фонда Фундаментальных Исследований 12-02-01123 и гранта Президента Российской Федерации МК-6509.2012.2.

[1]. K. Yamanouchi, S.L. Chin, P. Agostini and G. Ferrante, Progress in Ultrafast Intense Laser Science, Berlin, Springer (2006).

[2]. Fukuzawa et al., J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 43, 111001 (2010).

[3]. M. Braune et al., XXV Int. Conf. on Photonic, Electronic and Atomic Collisions (ICPEAC), abstracts, Fr034 (2007).

[4]. A.S. Bityutskaya et al., Joint German-Russian Workshop "XUV Photoionization Phenomena of Dilute Species", abstracts (2011).

[5]. T. Mercouris et al., Phys. Rev. A 50, 4109 (1994).

[6]. http://www.elettra.trieste.it/FERMI/index.php?n=Main.HomePage.

ОБ ИДЕНТИФИКАЦИИ РЕЗОНАНСНОЙ СТРУКТУРЫ СПЕКТРОВ ТРЕХФОТОННОЙ ИОНИЗАЦИИ АТОМА САМАРИЯ

А.И. Гомонай, Е.Ю. Ремета

88017, г. Ужгород, Институт электронной физики НАН Украины gomonai@rambler.ru

Резонансная структура спектров трехфотонной ионизации атома самария представляет собой совокупность максимумов, обусловленных переходами (в основном двухфотонными) со всех семи уровней основного терма ${}^7F_{0-6}$ [1]. Одним из методов истолкования таких спектров является объединение наблюдаемых максимумов в группы, связанные с возбуждением одних и тех же верхних состояний с различных начальных уровней основного терма [2]. Основным ограничивающим фактором, влияющим на однозначную идентификацию наблюдаемых максимумов, при использовании этого метода является высокая плотность резонансной структуры, что проявляется в наложении максимумов, связанных с разными переходами, а также в случайном совпадении положения наблюдаемых максимумов с частотами предполагаемых переходов.

Критерием того, какому именно переходу соответствует тот или иной наблюдаемый максимум, может служить поведение максимума при изменении напряженности поля лазерного излучения. Причина различного поведения максимумов, обусловленных разными переходами, связана с разной вероятностью соответствующих переходов. С ростом напряженности поля насыщение в выходе ионов, проявляющееся в замедлении скорости возрастания ионного сигнала, наступает скорее в случае переходов, имеющих большую вероятность. Это приводит к изменению соотношения амплитуд максимумов, обусловленных переходами, имеющими разную вероятность. При этом граничное значение, к которому стремится отношение амплитуд двух максимумов при максимальных величинах напряженности поля, определяется заселенностями соответствующих начальных уровней. Таким образом, исследование поведения резонансных максимумов с изменением напряженности поля лазерного излучения может быть использовано для их идентификации.

181

Мы предлагаем метод идентификации резонансных максимумов, наблюдаемых в спектрах трехфотонной ионизации атома самария, основанный на экспериментальном и теоретическом исследовании зависимости отношения амплитуд двух максимумов от напряженности поля лазерного излучения $N_x(\varepsilon)/N_i(\varepsilon)$. Здесь N_x и N_i – амплитуды соответственно максимума, который необходимо идентифицировать, и максимума, который надежно идентифицируется. Экспериментальная зависимость $N_x^e(\varepsilon)/N_i^e(\varepsilon)$ определяется из зависимостей выхода ионов самария от частоты лазерного излучения $N_x(\omega)$ и $N_i(\omega)$ в области выбранных резонансных максимумов, измеряемых при нескольких значениях напряженности поля ε . Теоретическая зависимость $N_x^e(\varepsilon)/N_i^e(\varepsilon)$ рассчитывается следующим образом:

$$N_x^c / N_i^c = \left(n_x \int_0^\infty P_x(\varepsilon(r), t) r \, dr \right) / \left(n_i \int_0^\infty P_i(\varepsilon(r), t) r \, dr \right), \tag{1}$$

где *n* – относительная заселенность начального уровня. Область сфокусированного лазерного излучения для упрощения расчета представляется цилиндром с Гауссовым распределением интенсивности поперечному по сечению $\varepsilon^2(r) = \varepsilon_0^2 \exp[-(r/r_0)^2]$ ($r_0 \approx 5 \times 10^{-3}$ см). Полная вероятность трехфотонной ионизации $P(z_{12}^{(2)}, \sigma, t)$ $(z_{12}^{(2)} - \text{составной матричный элемент двухфотонного перехода}$ с основного состояния 1 в возбужденное 2, σ – сечение фотоионизации резонансного уровня 2) в каждой точке поперечного сечения ($r \le r_0$) определяется путем решения системы дифференциальных уравнений, описывающих двухуровневую систему с ионизацией [3]. В ходе расчета находятся значения матричных элементов $(z_{12}^{(2)})_x$, $(z_{12}^{(2)})_i$, сечений фотоионизации σ_x , σ_i и относительной заселенности n_x , при которых рассчитанные зависимости $N_x^c(\varepsilon)/N_i^c(\varepsilon)$ максимально согласуются с экспериментально наблюдаемыми зависимостями $N_x^e(\varepsilon)/N_i^e(\varepsilon)$.

На рис. 1 приведены экспериментально измеренные (точки) и теоретически рассчитанные (сплошные линии) зависимости отношения амплитуд резонансных максимумов, связанных с двухфотонными переходами $4f^{6}6s^{2} {}^{7}F_{1} \rightarrow (34812.0)_{3}$ (максимум *I*), $4f^{6}6s^{2} {}^{7}F_{3} \rightarrow (36007.5)_{3}$ (максимум *2*) и $4f^{6}6s^{2} {}^{7}F_{5} \rightarrow (37641.6)_{3}$

(максимум 3), от напряженности поля. Зависимость $N_1(\varepsilon)/N_2(\varepsilon)$ представляет



Рис. 1 Зависимости $N_1(\varepsilon)/N_2(\varepsilon)$ (заполненные кружки и кривая 1) и $N_3(\varepsilon)/N_2(\varepsilon)$ (пустые кружки и кривая 2).

собой монотонно возрастающую с увеличением напряженности поля кривую. Монотонный характер этой зависимости объясняется тем, что максимумы *1* и *2* являются одиночными, т. е. каждый из них связан лишь с одним переходом. Увеличение отношения N_1/N_2 с возрастанием напряженности поля связано с тем, что полная вероятность трехфотонной ионизации на частоте двухфотонного перехода с уровня 7F_1 в отсутствие насыщения ионного сигнала меньше полной вероятности трехфотонной ионизации на частоте двухфотонного перехода с уровня 7F_3 . Изменение отношения амплитуд максимумов с $N_1/N_2 < 1$ на $N_1/N_2 > 1$ с увеличением величины ε является следствием

большей заселенности начального уровня ${}^{7}F_{1}$ (0.35) по сравнению с уровнем ${}^{7}F_{3}$ (0.13).

Немонотонный ход зависимости $N_3(\varepsilon)/N_2(\varepsilon)$ (с минимумом при $\varepsilon \approx 2.2 \times 10^5$ B/cм), как показывает расчет, объясняется тем, что максимум *3*, в отличие от максимумов *1* и *2*, представляет собой не одиночный максимум, а два неразделяемых максимума. Один из этих максимумов связан с двухфотонным возбуждением известного состояния с энергией $E \approx 37641.6$ см⁻¹ и полным угловым моментом J = 3 с начального уровня 7F_5 , а второй – с двухфотонным возбуждением ранее не наблюдавшегося состояния с энергией $E \approx 36789.1$ см⁻¹ с начального уровня 7F_4 . Предполагаемые значения полного углового момента этого состояния J = 5, 6.

[1]. A. Gomonai, O. Plekan, J. Phys. B. 36, 4155 (2003).

[2]. А.И. Гомонай, Е.Ю. Ремета, Опт. и спектр. 112, 17 (2011).

[3]. А.И. Гомонай, Е.Ю. Ремета, Опт. и спектр. 114, 9 (2013).

ДВУХЭЛЕКТРОННЫЕ ПОПРАВКИ НА ПОЛЯРИЗАЦИЮ ВАКУУМА К СВЕРХТОНКОЙ СТРУКТУРЕ В ЛИТИЕПОДОБНОМ ВИСМУТЕ

<u>О.В. Андреев¹</u>, Д.А. Глазов¹, А.В. Волотка², В.М. Шабаев¹ и G. Plunien²

¹ СПбГУ, Физический Факультет, Ул. Ульяновская д.1, Петродворец, 198504 Санкт-Петербург

² Institut für Theoretische Physik, Technische Universität Dresden,

Mommsenstraße 13, D-01062 Dresden, Germany

andreev@pcqnt1.phys.spbu.ru

Расчеты сверхтонкого расщепления в многозарядных ионах представляют возможность тестирования квантовой электродинамики (КЭД) в самых сильных электромагнитных полях, доступных экспериментально. Одновременное изучение сверхтонкой структуры водородо- и литиеподобных ионов позволяет почти полностью сократить эффект Бора-Вайскопфа в специальной разности значений сверхтонкого расщепления [1]. Точные расчеты экранированных КЭД-поправок необходимы для уменьшения погрешности теоретического предсказания этой специальной разности. Недавно сверхтонкое расщепление в литиеподобном висмуте было впервые напрямую обнаружено на экспериментальном накопительном кольце (ESR) в институте физики тяжелых ионов (GSI) в Дармштадте.

В ходе работы были улучшены результаты расчетов [2, 3] экранированных поправок на поляризацию вакуума к сверхтонкой структуре в литиеподобном висмуте. Двухэлектронные диаграммы, содержащие электрическую и магнитную вакуумно-поляризационные петли, были вычислены во всех порядках по αZ, включая вклады Юлинга и Вичманна-Кролла [4, 5]. Вклады, содержащие так называемые внутренние петли поляризации вакуума, сейчас находятся в процессе расчета.



Рис. 1 Диаграммы, дающие вклад в экранированную поправку на поляризацию вакуума к сверхтонкой структуре в литиеподобных ионах.

В результате расчета была значительно улучшена точность теоретического предсказания специальной разности значений сверхтонкого расщепления водородо- и литиеподобного висмута.

[1] Vladimir M. Shabaev, Anton N. Artemyev, Vladimir A. Yerokhin, Oleg M. Zherebtsov, and Gerhard Soff, Phys. Rev. Lett. **86**, 3959 (2001).

[2] Andrey V. Volotka, Dmitry A. Glazov, Vladimir M. Shabaev, Ilya I. Tupitsyn, and Günter Plunien, Phys. Rev. Lett. **103**, 033005 (2009).

[3] Dmitry A. Glazov, Andrey V. Volotka, Vladimir M. Shabaev, Ilya I. Tupitsyn, and Günter Plunien, Phys. Rev. A **81**, 062112 (2010).

[4] Andrey V. Volotka, Dmitry A. Glazov, Oleg V. Andreev, Vladimir M. Shabaev, Ilya I. Tupitsyn, and Günter Plunien, Physical Review Letters **108**, 073001 (2012).

[5] Oleg V. Andreev, Dmitry A. Glazov, Anadrey V. Volotka, Vladimir M. Shabaev, and Günter Plunien, Physical Review A 85, 022510 (2012).

КЭД расчет энергий ионизации $1s^22s^22p_{1/2}$ и $1s^22s^22p_{3/2}$ состояний бороподобных ионов

<u>А.В. Малышев</u>¹, А.В. Волотка^{1,2}, Д.А. Глазов¹, И.И. Тупицын¹, В.М. Шабаев¹, Г. Плюниен²

 Санкт-Петербургский государственный университет, Санкт-Петербург
 ² Технический университет Дрездена, Дрезден, Германия malyshev@pcqnt1.phys.spbu.ru

В рамках нерелятивистской квантовой механики уровни $2p_{1/2}$ и $2p_{3/2}$ являются вырожденными, поэтому различие между этими состояниями определяется исключительно релятивистскими и квантовоэлектродинамическими (КЭД) эффектами. Следовательно, исследование данных уровней позволяет проверять с высокой точностью как многоэлектронные КЭД эффекты, так и релятивистские эффекты корреляции электронов.

В данной работе произведен расчет энергий ионизации состояний $1s^22s^22p_{1/2}$ и $1s^22s^22p_{3/2}$ бороподобных ионов в широком диапазоне Z = 18 - 92. Для по-



Рис. 1: Диаграммы межэлектронного взаимодействия. Пунктирная линия, оканчивающаяся треугольником, представляет взаимодействие с экранирующим потенциалом, взятым с противоположным знаком. Волнистая линия соответствует фотонному пропагатору. Двойная линия обозначает электронный пропагатор в эффективном потенциале.



Рис. 2: Диаграммы собственной энергии и вакуумной поляризации, экранированной собственной энергии и экранированной вакуумной поляризации.

строения КЭД теории возмущений применяется метод двухвременной функции Грина [1]. Взамен обычного представления Фарри, в котором только ядро рассматривается как источник внешнего поля, здесь используется расширенная его версия. Под этим понимается включение в гамильтониан в нулевом приближении экранирующего потенциала, частично учитывающего межэлектронное взаимодействие. Теория возмущений строится по степеням разности полного КЭД гамильтониана взаимодействия и экранирующего потенциала. Это ускоряет сходимость рядов теории возмущений.

Для осуществления поставленной цели в рамках КЭД были рассчитаны диаграммы, изображенные на Рис. 1 и Рис. 2. Кроме того, в брейтовском приближении методом наложения конфигураций в базисе орбиталей Дирака-Фока-Штурма были оценены вклады межэлектронного взаимодействия третьего и более высоких порядков.

В качестве основного экранирующего потенциала был выбран локальный потенциал Дирака-Фока. Расчеты на других потенциалах (Хартри, Кона-Шэма, Слейтера) позволили оценить погрешность использования экранирующего потенциала. В отличие от работы [2], для каждого из рассматриваемых состояний $(1s^22s^22p_{1/2}$ и $1s^22s^22p_{3/2})$, а также для основного состояния бериллиеподобных ионов $(1s^22s^2)$, применялся свой экранирующий потенциал, поскольку использование единого потенциала для всех состояний заметно ухудшает сходимость.

Для проверки калибровочной инвариантности расчет проводился одновременно в кулоновской и фейнмановской калибровках. Плотность заряда ядра описывалась распределением Ферми. При построении конечного базисного набора решений уравнения Дирака применялся метод дуального кинетического баланса [3].

Работа выполнена при поддержке Немецко-Российского Междисциплинарного Научного Центра (G-RISC).

Список литературы

- [1] V. M. Shabaev, Phys. Rep. **356**, 119 (2002).
- [2] A. N. Artemyev, V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, G. Plunien, and V. A. Yerokhin, Phys. Rev. Lett. 98, 173004 (2007).
- [3] V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, V. A. Yerokhin, G. Plunien, and G. Soff, Phys. Rev. Lett. 93, 130405 (2004).

Релятивистские энергии и критические расстояния многозарядных двухатомных квазимолекул

Д.В. Миронова¹, И.И. Тупицын ¹, В.М. Шабаев¹, G. Plunien²

¹ Физический факультет, Санкт-Петербургский Государственный Университет, ул.

Ульяновская 1, Петродворец, 198504 Санкт-Петербург, Россия

 2 Institut für Theoretische Physik, Technische Universität Dresden, Mommsenstraße 13,

D-01062 Dresden, Germany

darvlmir@gmail.com

Изучение столкновений тяжелых ионов дает возможность проверить квантовую электродинамику в сверхсильных внешних кулоновских полях. Особый интерес вызывает случай, когда суммарный заряд сталкивающихся ионов $Z = Z_A + Z_B$ больше величины $Z_c \approx 173$. При столкновении тяжелых ионов, когда наименьшее межъядерное расстояние R меньше критического значения R_c уровень, отвечающий основному состоянию квазимолекулы погружается в отрицательный континуум Дирака.

В данной работе волновая функция двухцентрового стационарного уравнения Дирака представлялась в виде разложения по базисным волновым функциям Дирака и Дирака-Штурма центрального поля, центрированых на обоих ионах. Радиальные части базисных функций были получены в результате численного решения одноцентровых радиальных уравнений Дирака и Дирака-Штурма. Численное решение уравнений центрального поля при определении базисных функций на каждом из центров позволяет включать центрально-симметричный потенциал произвольного вида. В частности, для лучшей сходимости метода в уравнение центрального поля на каждом центре был включен кулоновский потенциал ядра соседнего иона в так называемом монопольном приближении.

По итогам работы можно сделать следующие выводы.

- Были получены значения критических расстояний для ряда одноэлектронных и двухэлектронных квазимолекул с зарядом 88 ≤ Z ≤ 102 в приближении точечных размеров ядер. Проведено сравнение с результатами других работ [1-4]
- 2. В расчетах впервые достаточно точно был учтен конечный размер ядра в рамках модели Ферми и модели равномерно заряженного шара.
- 3. Для проверки точности двухцентрового разложения были рассчитаны энергии основного состояния для одноэлектронных и двухэлектронных квазимолекул на "химическом" расстоянии R = 2/Z (a.e.) для всех рассмотренных квазимолекул.
- 4. Были получены высокоточные значения релятивистских энергий основного состояния одноэлектронных квазимолекул H₂⁺ и Th₂¹⁷⁹⁺ на "химических" расстояниях R = 2/Z (a.e.). Проведено сравнение с имеющимися в литературе данными [4]. Для ряда других одноэлектронных и двухэлектронных квазимолекул, содержащих тяжелые

атомы, значения релятивистских энергий основного состояния на "химических" расстояниях были рассчитаны впервые.

Список литературы

- I. I. Tupitsyn, Y. S. Kozhedub, V. M. Shabaev, G. B. Deyneka, S. Hagmann, C. Kozhuharov G. Plunien and Th. Stöhlker Phys. Rev. A 82, 042701 (2010)
- [2] A. N. Artemyev, A. Surzhykov, P. Indelicato, G. Plunien and Th. Stöhlker. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 43 (2010) 235207 (8pp)
- [3] V. I. Lisin, M. S. Marinov and V. S. Popov Phys. Letters, Vol.91B 1 (1980)
- [4] O. Kullie, and D. Kolb, Eur. Phys. J. D 17,

Квантовоэлектродинамические поправки к квадратичному эффекту Зеемана в многозарядных ионах

В. А. Агабабаев

Санкт-Петербургский государственный университет

С тех пор как в 1930-х годах Дженкинсом и Сегре был открыт квадратичный вклад в эффект Зеемана [1, 2], были проведены многочисленные экспериментальные и теоретические исследования поправок высших порядков в атомах и молекулах, как лабораторные, так и астрофизические. Однако, в многозарядных ионах нелинейный эффект Зеемана до сих пор экспериментально не наблюдался. В настоящее время в GSI идёт подготовка эксперимента ARTEMIS с бороподобным ионом аргона ${}^{40}\mathrm{Ar}^{13+}$ в ловушке Пеннинга, который совмещает точную спектроскопию оптических переходов тонкой структуры и микроволновых переходов зеемановского расщепления [3]. Эксперимент нацелен на прецизионные измерения магнитного момента связанного электрона с относительной погрешностью в 10⁻⁹ и даже лучше. Предшествующие эксперименты с водородо- и литиеподобными ионами дали самое точное значение массы электрона [4] и самую точную проверку многоэлектронных КЭД эффектов [5]. В будущем аналогичные измерения для тяжёлых водородо-, литие- и бороподобных ионов откроют доступ к проверке КЭД в сильных полях [6], прецизионному определению постоянной тонкой структуры [7], а также параметров ядер [8, 9].

Простые оценки показывают, что в бороподобном аргоне Ar^{13+} в магнитном поле порядка Тесла нелинейные эффекты по магнитному полю играют значительную роль и должны приниматься во внимание с учётом экспериментальной погрешности. Причиной усиления нелинейных эффектов в бороподобных ионах является смешивание магнитным полем близко расположенных уровней тонкой структуры $2p_{1/2}$ и $2p_{3/2}$. Так как расстояние между уровнями зеемановского расщепления много меньше тонкой структуры, энергию отдельного уровня можно вычислять по теории возмущений:

$$E(\mathcal{H}) = E^{(0)} + \Delta E^{(1)}(\mathcal{H}) + \Delta E^{(2)}(\mathcal{H}) + \dots, \qquad (1)$$

где $E^{(0)}$ — энергия в отсутствие поля, $\Delta E^{(1)}(\mathcal{H})$ и $\Delta E^{(2)}(\mathcal{H})$ — липейный и квадратичный по полю вклады,

$$\Delta E^{(1)}(\mathcal{H}) = g M_J \mu_0 \mathcal{H} \,, \tag{2}$$

$$\Delta E^{(2)}(\mathcal{H}) = g^{(2)}(M_J)(\mu_0 \mathcal{H})^2 / (mc^2), \qquad (3)$$

где $\mu_0 = |e|\hbar/(2mc)$ — магнетон Бора, а M_J — проекция полного момента на направление поля.

Наиболее точные значения g-фактора для состояний $2p_J$ бороподобного аргона получены в работе [10]. Соответствующие коэффициенты $g^{(2)}$ вычислены в статье [3] в приближении невзаимодействующих электронов в экранирующем потенциале. В данной работе в рамках нерелятивистской теории получены простые аналитические формулы для коэффициента $g^{(2)}$ для бороподобных ионов, согласующиеся с результатами полученными ранее [3, 11, 12, 13]. Более того, получена формула для КЭД поправки к $g^{(2)}$,

$$\Delta g_{\rm QED}^{(2)} = 2(g_{\rm free} - 2)g^{(2)},\tag{4}$$

где g_{free} g-фактор свободного электрона. Для строгого вычисления этой поправки в рамках релятивистской теории мы рассматриваем диаграммы, представленные на Рис. 1. Выведены общие формулы для этих диаграмм, продемонстрировано сокращение ультрафиолетовых расходимостей, выполнен численный расчёт для диаграмм A и B. Диаграммы поляризации вакуума, непредставленные на Рис. 1, дают значительно меньший вклад для *p*-состояний.



Рис. 1: Диаграммы собственной энергии для квадратичного эффекта Зеемана.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 12-02-31803).

Список литературы

[1] F. A. Jenkins and E. Segre, Phys. Rev. 55, 52 (1939).

- [2] L. I. Schiff and H. Snyder, Phys. Rev. 55, 59 (1939).
- [3] D. von Lindenfels *et al.*, Phys. Rev. A **87**, 023412 (2013).
- [4] P. J. Mohr, B. N. Taylor, and D. B. Newell, Rev. Mod. Phys. 84, 1527 (2012).
- [5] A. Wagner *et al.*, Phys. Rev. Lett. **110**, 033003 (2013).
- [6] V. M. Shabaev *et al.*, Phys. Rev. A **65**, 062104 (2002).
- [7] V. M. Shabaev *et al.*, Phys. Rev. Lett. **96**, 253002 (2006).
- [8] W. Quint *et al.*, Phys. Rev. A **78**, 032517 (2008).
- [9] V. A. Yerokhin *et al.*, Phys. Rev. Lett. **107**, 043004 (2011).
- [10] D. A. Glazov *et al.*, Phys. Scr. **T154** (2013).
- [11] N. L. Manakov, L. P. Rapoport, and S. A. Zapryagaev, J. Phys. B 7, 1076 (1974).
- [12] N. L. Manakov, S. A. Zapryagaev, Phys. Lett. A 58, 23 (1976).
- [13] С. А. Запрягаев, Оптика и спектроскопия 47, 18 (1979).

КОЛЛЕКТИВНЫЕ ЭФФЕКТЫ В АТОМНЫХ СПЕКТРАХ

В.С. Лисица ¹, В.С. Астапенко ², <u>Л.А. Буреева</u> ³, М.В. Кадомцев¹, В.А. Шурыгин¹ ¹РНЦ «Курчатовский институт»

² Московский физико-технический институт

³ Институт спектроскопии РАН

bureyeva@sci.lebedev.ru

В последние годы проведены измерения спектров излучения тяжелых ионов вольфрама в горячей плазме. Были обнаружены спектры сложной структуры, состоящие из большого количества индивидуальных линий, многие из которых не поддаются идентификации – т.н. квазиконтинуум. В настоящей работе дана интерпретация таких спектров на основе статистической (плазменной) модели атома, позволяющей предсказать основные характеристики таких спектров. Следует отметить, что наблюдаемые спектры относятся к связанносвязанным переходам, для которых энергии переходов малы по сравнению с энергией ионизации ионов. Именно этим обстоятельством спектры тяжелых ионов отличаются от спектров поглощения тяжелых нейтральных атомов, соответствующие резонансам при ионизации.

В основе рассмотрения лежит модель локальной плазменной частоты, согласно которой распределение электронной плотности в сложном атоме (или ионе) определяет плазменную частоту согласно стандартному соотношению

$$\omega_p(r) = \sqrt{\frac{4\pi e^2 n(r)}{m}} \tag{1}$$

Именно эта частота определяет положение резонанса при взаимодействии атома с периодическим внешним возмущением.

Спектральные функции, определяющие вид спектра поглощения (излучения атома) в дипольном приближении имеют вид:

$$g(\omega) = \sum_{n} f_{in} \delta(\omega - \omega_n)$$
⁽²⁾

где f_{in} - силы осцилляторов переходов в атоме с частотами переходов ω_n .

В рамках плазменной модели атомных оболочек этой спектральной функции ставится в соответствие спектральная функция вида:

$$g(\omega) = \int n(r)\delta(\omega - \omega_p(r))d^3r$$
(3)

Нормировки этих спектральных функций очевидно совпадают с учетом теоремы сумм для сил осцилляторов, равной числу электронов как при суммировании квантовых выражений, так и при интегрировании по пространству электронной плотности в статистической модели.

Спектры тяжелых ионов в плазме образуются в результате возбуждения атомных переходов при столкновениях с электронами. В режиме коронального равновесия (мгновенного высвечивания) распределение интенсивностей переходов по спектру определяется этими сечениями (скоростями) электронных возбуждений. Основная идея настоящего рассмотрения состоит в том, что усредненные по многим переходам спектры возбуждения в ионах соответствуют спектру возбуждения плазменных колебаний их атомных оболочек с частотами, отвечающими формуле (1).

В рамках упрощенной статистической модели атома рассмотрим процесс возбуждения атомных плазменных колебаний на основе метода эквивалентных фотонов Э. Ферми.

Сечение фотопоглощения атома в рамках статистической модели локальной плазменной частоты определятся простым выражением, следующим из формулы (3):

$$\sigma(\omega) = 2\pi^2 \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right) a_0 v_0 \int d^3 r n(r) \delta\left[\omega - \omega_p(r)\right]$$
(4)

что после интегрирования приводит к результату:

$$\sigma_{ph}(\omega) = \frac{4\pi^2 \omega}{c} r_{\omega}^2 \frac{n(r_{\omega})}{|n'(r_{\omega})|}; \omega_p(r_{\omega}) = \omega$$
(5)

Таким образом, сечение фотопоглощения является простым функционалом от плотности электронов в атоме на расстоянии, определяемой условием плазменного резонанса.

Дальнейший расчет состоит в подстановке в выражение (5) реальных распределений электронной плотности.

Модель Томаса-Ферми, оперирующая усредненным распределением плотности, является слишком грубым приближением. Более реалистичным является распределения, учитывающие оболочечную структуру тяжелых ионов. В

качестве простейшего распределения такого типа рассматривается плотность электронов в атоме, описываемую слэтеровской орбиталью типа:

$$n(r) = n_0 \left| R_n(r) \right|^2 = n_0 r^{2\kappa} \exp\left(-2\gamma r\right)$$
(6)

Здесь параметр $\gamma = \sqrt{2I}$ определяется потенциалом ионизации рассматриваемого иона, параметр κ зависит от структуры атомного остова иона и может быть определен на основе более точных численных расчетов атомной структуры; ниже он в определенной мере является подгоночным и определяется из условия близости плазменной частоты к частоте наблюдаемых переходов в ионе (для рассматриваемых ионов вольфрама его значение равно 4,5); постоянная n_0 определяется из условия нормировки – числу электронов на данной оболочке. Характерной особенностью слэторовской орбитали является наличие максимума вблизи точки $r_{\text{max}} \approx \frac{\kappa}{\gamma}$. Это обстоятельство определяет характер спектров: условие резонанса (5) не выполняется при частотах, больших плазменной частоты – спектры обладают резкой отсечкой при больших частотах (малых длинах волн). Типичный вид сечения поглощения для слэтеровской орбитали приведен на рисунке.



Здесь сечение поглощения усреднено с инструментальной гауссовой функцией, ширина которой порядка 10⁻² от плазменной частоты.

Работа выполнена при поддержке Гранта РФФИ 13-02-00812.

Ридберговские состояния полярных молекул: границы применимости прямого и обратного приближений Борна-Оппенгеймера

<u>С.В. Елфимов</u>, Д.Л. Дорофеев, Б.А. Зон 394006, г. Воронеж, Воронежский государственный университет ElfimovSerg@gmail.com

Работа посвящена разработке общего теоретического подхода к непроникающим ридберговским состояниям полярных молекул. Предлагается метод оценки точности расчета их волновых функций и квантовых дефектов. Этот метод позволяет определить точность прямого и обратного приближений Борна-Оппенгеймера (ВО и ІВО, соответственно) [1] для данных состояний и определить тем самым пространственные и энергетические области, где указанные приближения выполняются. Положение и величина этих областей зависит от взаимодействия между "*l*-связыванием" (преимущественно благодаря воздействию дипольного потенциала остова) и "*l*-отвязыванием" (из-за вращения остова). Далее мы рассматриваем промежуточную область, где оба указанных приближения (ВО и ІВО) не выполняются. Для этой области мы предлагаем новый вариант многоканального метода квантового дефекта (MQDT) и показываем, что он дает в ней более надежные результаты. Полученные результаты демонстрируются на примере молекулы SO.

[1] D. L. Dorofeev, S. V. Elfimov, and B. A. Zon, Phys. Rev. A 85, 039902 (2012).

КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЕЙ ОСНОВНЫХ И ВОЗБУЖДЕННЫХ СОСТОЯНИЙ АТОМОВ Еремкин И.Н., МалыхановЮ.Б.* АНО "Центр профессиональной подготовки", Саранск, Россия *Мордовский государственный педагогический институт им. М.Е. Евсевьева, Саранск, Россия

В рамках алгебраического варианта метода Хартри–Фока получены уравнения нестационарной "связанной" теории возмущений для атомов с заполненными и открытыми электронными оболочками. Для атомов He–Ni, Sr, Xe рассчитаны частоты и силы осцилляторов дипольных переходов, а с их помощью – дипольная динамическая поляризуемость.

Свойства атомов во внешних электромагнитных полях являются предметом интенсивных экспериментальных И теоретических исследований [1–9]. Отклик многоэлектронной системы внешнее воздействие описывается c помощью на поляризуемостей, восприимчивостей и других параметров, наблюдаемых на опыте. Поляризуемость атомов представляет интерес как с фундаментальной точки зрения (например, поиски электрического дипольного момента атома и других следствий несохранения пространственной (P) и временной (T) четности [10]), так и для ряда приложений атомной физики, таких как физика холодного атома, захваченного потенциалом оптической решетки, на основе которого строятся современные оптические стандарты частоты ("атомные оптические часы") [11].

Изучение поведения атомов при очень низких температурах в магнитооптических ловушках является одной из наиболее актуальных проблем современной атомной физики. Появление мощных перестраиваемых лазеров, развитие методов лазерного охлаждения и удержания атомов в магнитооптических ловушках и дипольных оптических решетках открывают новые возможности для более глубокого изучения как отдельных атомов, так и их ансамблей, в том числе, наноразмерных структур. В нанодиапазоне существенную роль приобретают слабые межатомные взаимодействия (силы Ван-дер-Ваальса). Такие взаимодействия атомов, а также взаимодействия атомов в холодной ловушке при больших коэффициентами межатомных расстояниях описываются дисперсионными [3]. выражающимися через дипольные динамические поляризуемости. Таким образом, расчеты поляризуемостей основных и возбужденных состояний атомов являются очень важными для анализа различных проблем современной атомной и нанофизике.

Экспериментальное измерение поляризуемости представляет собой известные трудности. Достоверность полученных на опыте данных требует теоретической оценки. В свою очередь появление физики холодного атома стимулирует в последние годы интенсивное развитие все более точных методов теоретического расчета атомных поляризуемостей. Наиболее полный список работ, посвященных теории и применению атомных и ионных поляризуемостей представлен в недавнем актуальном обзоре [1]. Следует отметить, что при всем многообразии современных квантовомеханических методов [1-3] (в том числе и самых точных, таких как метод Хиллерааса [2], дающий для Li наилучшее согласие с экспериментом) на сегодняшний день нет универсального метода, одновременно дающего высокую точность и в равной степени применимого для любого атома. Все расчеты, как правило, ограничиваются рассмотрением достаточно простых атомных систем с заполненными и одной s¹-открытой оболочкой [2, 3]. При этом до сих пор имеют место расхождения между теоретическими предсказаниями поляризуемости и ланными экспериментальных исследований для возбужденных состояний. Поэтому теоретические вычисления атомной поляризуемости по-прежнему остаются весьма актуальными.

Расчет параметров отклика многоэлектронной системы на приложенное электромагнитное поле можно выполнить в рамках квантовомеханической теории возмущений. В работах [4–9] получены уравнения нестационарной "связанной" теории

возмущений в алгебраическом методе Хартри–Фока и выполнены расчеты оптических характеристик основных и возбужденных состояний атомов He–Ni, Sr, Xe с заполненными, одной и двумя открытыми электронными оболочками: статическая поляризуемость $\alpha(0)$; динамическая поляризуемость при фиксированной частоте $\omega=\omega_0$ и как явная функция частоты падающего излучения $\alpha(\omega)$; моменты Коши динамической поляризуемости; частоты переходов ω_i и силы осцилляторов f_i . В этих работах детально изучены методы решения полученных уравнений, подробно описана схема нахождения оптимального базисного набора атомных орбиталей, рассмотрены критерии, позволяющие в рамках метода оценить точность полученных результатов, которые в свою очередь хорошо согласуются с расчетами других авторов и экспериментом (где таковые имеются). Отметим, что полученные уравнения теории возмущений решаются точно путем чисто алгебраических вычислений, что избавляет от необходимости использовать какие-либо итерационные процессы и заботиться о выполнении условий сходимости.

Развитый в [4–9] метод расчета спектроскопических характеристик атомов не сопряжен с какими-либо принципиальными трудностями вычислительного характера, может быть обобщен для любых атомов с еще более сложными электронными конфигурациями, а полученные на его основе результаты могут служить ориентиром для активно развивающихся теоретических методов и дальнейших экспериментальных исследований.

1. J. Mitroy, M.S. Safronova, Ch.W. Clark, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., 43, 202001, 1-38, (2010).

2. L.Y. Tang, Z.C. Yan, T.Y. Shi, J. Mitroy, Phys. Rev. A, 81, 042521, 1-11 (2010).

3. A. Derevianko, S.G. Porsev, J.F. Babb, At. Date and Nucl. Data Tables, 96, 323-331, (2010).

4. И.Н. Еремкин, Ю.Б. Малыханов, Журн. прикл. спектр., 78, №3, 325-332, (2011). 5. И.Н. Еремкин, Ю.Б. Малыханов, Тр. средневолжск. матем. об-ва, 11, №1, 105-

5. И.Н. Еремкин, Ю.Б. Малыханов, 1р. средневолжск. матем. оо-ва, 11, №1, 105-110, (2009).

6. Ю.Б. Малыханов, И.Н. Еремкин, Журн. прикл. спектр., 75, №4, 458-462, (2008).

7. Ю.Б. Малыханов, Р.М. Чадин, Журн. прикл. спектр., 72, №1, 5-12, (2005).

8. М.Н. Адамов, Ю.Б. Малыханов, В.В. Мешков, Р.М. Чадин, Опт. и спектр., 96, №2, 226-228, (2004).

9. Ю.Б. Малыханов, Р.Н. Правосудов, Журн. прикл. спектр., 67, №1, 5-10, (2000). 172 10. И.И. Собельман, В.Н. Сорокин, Успехи физических наук, 175, №9, 979-993, (2005).

11. M. Takamoto, T. Takano, H. Katori, Nature Photon, 5, 288-292, (2011).

Штарк-эффект для 5D уровня атома рубидия

А.А. Головизин^{1,2,3}, С.А. Снигирев^{1,2,3}, Д.Д. Сукачев^{1,2,3}, А.В. Акимов^{1,2,3}, Н.Н. Колачевский^{1,2,3}, В.Н. Сорокин^{1,2,3}

 ¹ Московский физико-технический институт (государственный университет), Институтский переулок, 9, Долгопрудный, Московская область
 ² Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН, Ленинский проспект, 53, Москва
 ³ Международный центр квантовой оптики и квантовых технологий, Москва e-mail: artem.golovizin@gmail.com

Знание точных значений скалярной поляризуемости атомных уровней имеет большое значение для выбора репера стандарта частоты в ультрастабильных атомных часах, так как одним из факторов, ограничивающих точность таких часов, является учет эффекта Штарка: статический, динамический, а также влияние излучения черного тела.

Поляризуемости основных состояний таких атомов, как Cs, Rb, Sr и др., измерены с высокой точностью, а для ридберговских атомных состояний имеется хорошо разработанная теория. Однако построение правильной модели для вычисления скалярной и тензорной поляризуемостей промежуточных уровней в щелочных атомах до сих пор является актуальной задачей. В разных группах [1-3] теоретически полученные значения скалярной поляризуемости для 5D уровня в атоме рубидия расходятся на 20%. В связи с этим знание точного экспериментального значения



Рис. 1. Кювета магнитооптической ловушки. Шесть широких стрелок показывают распространение световых пучков охлаждающего лазера

поляризуемости для этого уровня позволит также проверить точность теоретических методов.

В нашем эксперименте поляризуемости уровней $5D_{3/2}$ и $5D_{5/2}$ определялись из смещения спектральной линии перехода $5P_{3/2} \leftrightarrow 5D$ в зависимости от приложенного постоянного электрического поля. Это смещение зависит от значения полного момента атома, а также от значения магнитного квантового числа и определяется следующим выражением:

$$\Delta E_{J,I,F,m_F} = -\frac{1}{2} \alpha_J^s \mathbb{E}^2 - \frac{1}{2} \alpha_J^t \mathbb{E}^2 \frac{[3m_F^2 - F(F+1)][3X(X-1) - 4F(F+1)J(J+1)]}{(2F+3)(2F+2)F(2F-1)J(2J-1)}$$
(1)

где X = F(F+1)+J(J+1)-I(I+1), \mathbb{E} - приложенное постоянное электрическое поле. Измерения проводились с атомами рубидия-87, предварительно охлажденными и захваченными в магнитооптическую ловушку [4]. Количество атомов в ловушке ~ 10⁶, температура облака - несколько сотен мкК. Для получения однородного постоянного электрического поля в области локализации атомов в вакуумную кювету был установлен плоский конденсатор с прозрачными металлическими сеточками (T=80%) в роли обкладок. Для возбуждения конкретного подуровня 5D уровня использовалась



Рис. 2. Типичный вид зависимости смещения линии от приложенного электрического поля, точки - экспериментальные данные, сплошная красная линия - смещение для уровня J = 5/2, пунктирная синяя линия - для J = 3/2.

следующая схема: после выключения охлаждающих пучков, длительным (500 нс) лазерным импульсом "накачки $1"\sigma^+$ -поляризации атомы оптически накачивались на $5S_{1/2}m_F = 2$ и $5P_{3/2}m_F = 3$, а затем, устанавливая необходимую поляризацию импульса $5P \rightarrow 5D$ "накачки 2"возбуждался уже конкретный магнитный подуровень

5D уровня. С 5D уровня с вероятностью 38% атомы распадаются на 6P уровень, сигнал люминесценции с которого на длине волны 420 нм наблюдался при помощи ФЭУ в режиме счета фотонов и из этого определялась населенность 5D уровня.

Сканируя частоту излучения, соответствующего переходу $5P \to 5D$, записывался контур линии при различных напряжениях на конденсаторе.

Характерный вид зависимости смещения центра линии от приложенного напряжения приведен на рис. 2. Зная значение поляризуемостей для различный магнитных подуровней, можно получить значение скалярной и тензорной поляризуемости по формуле (1). В таблице 1 приведены результаты.

Уровень		Эксп. значение, а.е	Погрешность,%	[1]	[2]	[3]
$5D_{3/2}$	α^s	18200	1	16600	21110	22679
	α^t	-740	10	-1060	-2871	-2007
$5D_{5/2}$	α^s	18360	1	16200	20670	22289
	α^t	-1290	10	-909	-3387	-2193

Таблица 1. Значения поляризуемостей двух подуровней 5D уровня атома рубидия

Как видно из таблицы 1, значения поляризуемостей, полученные из экспериментальных измерений, находятся между теоретически предсказанными. Точность определения скалярной поляризуемости составила 1%.

 D.A. Kondrat'ev, I.L. Beigman, L.A. Vainshtein, J. of Russian Las. Res. 31, 294 (2010).

[2]. A. A. Kamenski and V. D. Ovsiannikov, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 39, 2247 (2006).

[3]. Б.А. Зон, В.А. Давыдкин. Радиационные и поляризационные характеристики ридберговских состояний атомов. Оптика и спектроскопия, 52, 4, 1982

[4] Терещенко Е. О. ЛАЗЕРНОЕ ОХЛАЖДЕНИЕ АТОМОВ РУБИДИЯ.

Эмулированный метод контроля чистых веществ

¹ Казаков В.В., ¹ Казаков В.Г., ¹Ковалев В.С., ² Яценко А.С.

¹630090, г. Новосибирск, Пирогова, д. 2, НГУ.

² 630090, г. Новосибирск, Ак. Коптюга, д.1, ИАиЭ СО РАН.

vkazakov@phys.nsu.ru

Проблема получения и контроля чистых (ЧВ) и сверхчистых веществ (СВЧ) всегда были под пристальным вниманием многих исследователей. Становление и развитие дальнейшее областей как таких металлургия, атомная, микроэлектроника, авиакосмическая и др. тесно связано с получением ЧВ и СВЧ веществ [1]. При получении ЧВ и СВЧ важным является контроль примесных элементов. Для этого используют различные методы. Атомная спектроскопия уже давно нашла широкое применение при анализе веществ [2]. Такие установки состоят ИЗ: источника света (ИС), спектрального прибора (CП), И регистрирующего устройства (РУ). Схема установки выглядит таким образом: ИС $\leftrightarrow \mathbf{C} \mathbf{\Pi} \leftrightarrow \mathbf{P} \mathbf{Y}.$

В такой спектрограмме кроме линий основного вещества присутствуют линии примесных элементов. Для качественного анализа, исследователи сравнивали полученный спектр с эталоном, путем совмещения спектрограмм с известными атласами спектров в виде набора карт [3], определяя элементный состав анализируемого вещества.

Компьютерная техника позволяет проводить спектральный анализ с возможностью записи спектрограмм в цифровой форме. Пример тому – использование эталонных спектрограмм в составе программной компоненты автоматизированных спектрометров с последующим сопоставлением с полученным образцом. Блок-схема установки из работы [4] в таком случае выглядит следующим образом: ИС ↔ СП ↔ РУ ↔ ПК. Здесь блоки ИС, СП и РУ повторяют общепринятую схему. Разработанный авторами МАЭС (многоканальный атомно-эмиссионный спектрометр) по своим техническим возможностям заменяет блоки СП и РУ. При спектральном анализе (программная компонента) ПК выполняет операцию совместно с базой данных (БД). Основной

203

состав эталонного вещества известен и содержится в БД ПК «Атом». По запросу ПК извлекает спектр известного вещества и сравнивает с экспериментальным результатом.

В данной работе предлагается устройство, позволяющее получать эталонные беспримесные спектрограммы для любого элемента, а также проводить ускоренный процесс сравнения с исследуемым веществом и повысить точность получаемого результата. Поставленная задача решена за счет того, что в известном устройстве работы [4] вместо блоков ИС и СП, введен блок данных (БД), представляющий собой устройство для занесения, хранения и извлечения данных. В частности, БД содержит массив данных о спектральных линиях, имеющихся в спектрах эталонных элементов в атомарном состоянии, которые по запросу ПК могут быть переведены в требуемую область спектра и в дальнейшем отображены на устройстве вывода **УВ** в виде спектрограммы. Блок-схема такого устройства может быть представлена как БД \leftrightarrow ПК \leftrightarrow **УВ**.

Предлагаемый анализатор оптического спектра [5] является неотъемлемой частью информационной системы (ИС) по спектрам атомов и ионов «Электронная структура атомов» (ЭСА), разработанная специалистами НГУ и ИАиЭ СО РАН и доступная в Интернет [7]. БД ЭСА содержит массив данных по атомным линиям, которые с помощью ПК переводятся в спектрограммы различных элементов. Такое устройство позволяет смоделировать оптический спектр любого элемента. Смоделированные спектрограммы могут быть использованы в качестве эталонного спектра при сравнении со спектром исследуемого вещества. В отличие от ПК «Атом» система ЭСА содержит постоянно пополняемый массив данных о спектральных линиях. На сегодняшний день в БД представлено около 125 тыс. линий для нейтральных атомов и однократных ионов. Система ЭСА в отличие от работы [4] использует преимущества векторной графики для отображения спектральных линий [6]. Предлагаемое устройство может работать как автономно, так и на действующей экспериментальной установке.

Пример выполнения. Для исследования была взята спектрограмма атома олова Sn I из [7], на которой вместе с линиями олова присутствуют и линии примесных атомов Au I, Cu I, W I (рис. а). Чтобы проверить наличие примесей, сопоставляет данную спектрограмму со спектрограммой атома олова из ЭСА

204



Таким образом, в современных задачах контроля чистых веществ использование спектрограмм в цифровой форме обладает рядом преимуществ. При этом построение спектрограмм по имеющимся данным для любого вещества более предпочтительно по сравнению с их получением в экспериментальных установках.

Работа выполнена при поддержке Гранта РФФИ № 12-07-31127 мол.

[1]. Ажажа В.М., Лавриненко С.Д., Полипенко Н.Н. Чистые и особочистые металлы в атомной знергетике. // Вопросы атомной науки и техники, 2007, № 4, С.
 3-12 (серия: вакуум, чистые материалы, сверхпроводник.

[2]. Беков Г.И., Бойцов А.А., Большов М.А. и другие. Спектральный анализ чистых веществ. – СПб., Химия, 1994.

[3]. Спектральный анализ чистых веществ (под ред. Х.И. Зильберштейна) – СПб, Химия, 1994.

[4]. Калинин С.К., Мадин М.И., Перевертук В.М. Атлас спектральных линий ионизованных атомов. – Алма-Ата, Каз. АН ССР, 1983.

[5]. Гаранин В.Г., Неклюдов О.А., Петроченко Д.В. Программное обеспечение для автоматизации атомно-эмиссионного спектрального анализа- пакет программ «Атом». // Заводская лаборатория. Диагностика материалов. Специальный выпуск. – 2007, Т. 73, С. 18-25.

[6]. Казаков В.В., Яценко А.С., Казаков В.Г., Ковалев В.С. Цифровая эмуляция спектрографа. // Вестник НГУ, серия информационные технологии. – 2011 – Т. 9, № 3 – С. 30-36.

[7]. Казаков В.Г., Яценко А.С., Казаков В.В. и др. Информационная система. «Электронная структура атомов». URL: <u>http://grotrian.nsu.ru</u>

ЛАЗЕРНАЯ СЕЛЕКТИВНАЯ НАКАЧКА МАГНИТНЫХ ПОДУРОВНЕЙ СВЕРХТОНКОЙ СТРУКТУРЫ АТОМА ЦЕЗИЯ

В.Н. Барышев¹, <u>А.И. Магунов</u>^{2,1}, В.Г. Пальчиков¹

¹ 141570, Менделеево, Московская обл., ФГУП «ВНИИФТРИ»
 ² 119991, г. Москва, Институт общей физики им. А.М. Прохорова РАН magunov@fpl.gpi.ru

В работе исследована возможность повышения эффективности оптической накачки заселенностей магнитных подуровней сверхтонкой структуры атома ¹³³Сs резонансным лазерным полем в пучке холодных атомов в стандарте частоты фонтанного типа. Рассмотрены переходы между различными компонентами сверхтонкой структуры при взаимодействии атома с линейно поляризованными лазерными полями. С использованием кинетических уравнений матрицы плотности определено время выхода заселенностей на стационарный режим в зависимости от интенсивности и частоты излучения. При интенсивности лазера 40 мкВт/см² время выхода на стационарные значения заселенностей достаточно мало (примерно 20 мкс) и сокращается до 1.5 мкс при интенсивности 1 мВт/см². Получены точные значения стационарных заселенностей магнитных подуровней и эффективности накачки $F_g = 3M = 0$ подуровня π -поляризованным полем на основном переходе $F_g = 3 \leftrightarrow F_e = 3$ и при предварительном перезаселении подуровней $F_g=3M$ на переходе $F_g=3 \leftrightarrow F_e=2$ под действием $\sigma^{(\pm)}$ -поляризованного поля. Двухступенчатая накачка повышает заселенность подуровня F_g =3 M=0 в четыре раза относительно равновероятных начальных заселенностей подуровней F_g = 3 и $F_f = 4.$

Установлена возможность существенного повышения плотности атомов в пучке в состоянии $F_g = 3 M = 0$ в результате перевода начальных заселенностей с подуровней $F_f = 4M$ на подуровни $F_g = 3M$ при последовательном воздействии лазерными полями с одинаковой линейной поляризацией на переходах $F_f = 4 \leftrightarrow F_e = 4$ и $F_f = 4 \leftrightarrow F_e = 3$.

РАСЧЕТ ЭНЕРГИИ АТОМОВ И ИОНОВ В АЛГЕБРАИЧЕСКОМ ПРИБЛИЖЕНИИ МЕТОДА ХАРТРИ-ФОКА

Ю.Б. Малыханов, М.В. Горшунов

430007, г. Саранск, ФГБОУ ВПО «Мордовский государственный педагогический институт имени М.Е. Евсевьева»

Экспериментально энергия основного состояния атомов, а также их ионов может быть найдена, если измерить все, вплоть до водородоподобного атома, потенциалы ионизации, что представляет сложную задачу атомной спектроскопии [1-4]. В связи с этим актуальной задачей является теоретический расчет энергии атомов и ионов на основе того или иного приближенного квантовомеханического метода, наиболее оптимальным из которых является метод Хартри-Фока (ХФ). Нами выполнены расчеты в алгебраическом приближении ХФ энергии первых двадцати атомов периодической системы и всех их ионов до водородоподобного атома включительно. Подробные математические выкладки и особенности выполнения расчетов можно найти в работах [5, 6]. Выполнено сравнение вычисленных нами в приближении ХФ значений энергии атомов и ионов с экспериментальными данными. Это позволило оценить точность, которую дает метод ХФ для энергии атомов и ионов.

Сравнение рассчитанных в рамках метода ХФ значений энергии с экспериментальными данными позволяет оценить степень обоснованности приближений, лежащих в основе метода ХФ. Для нахождения экспериментальных значений энергии нейтральных атомов и их ионов мы использовали данные для потенциалов ионизации (в единицах см⁻¹), взятые из [3, 4].

В таблице по определенным причинам мы не стали приводить значения всех ионов первых двадцати атомов. Приведены лишь значения основных состояний атомов, а также первых двух ионов изоэлектронных рядов в сравнении с экспериментальными значениями. Традиционно такое сравнение проводится на примере легких атомов, начиная с атома гелия. Метод ХФ для водородоподобных атомов дает точное нерелятивистское значение энергии, равное $-Z^2/2$ а.е. Поэтому из таблицы можно оценить точность, которую дает эксперимент для энергии водородоподобных атомов. Эта точность далеко не идеальна. В частности, опытные

207

значения энергии H и He⁺ оказались выше рассчитанных. По-видимому, такая точность характерна и для остальных потенциалов ионизации. Заметное расхождение рассчитанных значений энергии с опытными данными для малых атомов объясняется тем, что в таких атомах заметную роль играет пространственная корреляция электронов, которая в тяжелых атомах становится несущественной.

Таблица. Энергии (a.e.) основных состояний нейтральных атомов от водорода до кальция и некоторых их ионов, рассчитанные в алгебраическом приближении метода Хартри-Фока, в сравнении с экспериментальными значениями

n	Терм	Атом	E^*	Ион+	E^*	Ион ²⁺	E^*
	_		Ε		Ε		E
1	$^2\mathbf{c}$	Н	-0,499733*	He ⁺	-1,999815*	Li ²⁺	-4,500110*
	3		-0,500000		-2,000000		-4,500000
2 ^{1}S	¹ c	He	-2,903385*	Li^+	-7,279834*	Be ²⁺	-13,656602*
	3		-2,8616799		-7,236415		-13,611299
2	$2 \mathbf{c}$	Li	-7,477976*	Be^+	-14,325849*	B^{2+}	-23,428843*
3	3 -5		-7,432726		-14,277394		-23,375990
4	¹ c	Be	-14,668449*	B^+	-24,353265*	C ²⁺	-36,54579*
4	3		-14,573023		-24,237575		-36,408495
5 ² D	$2 \mathbf{p}$	В	-24,658211*	\mathbf{C}^{+}	-37,44186*	N^{2+}	-52,98995*
3	Р		-24,529060		-37,292223		-52,815792
6	3 D	С	-37,855668*	\mathbf{N}^+	-54,077777*	O ²⁺	-73,319001*
0	P		-37,688618		-53,888004		-73,100193
7	4 c	Ν	-54,611893*	\mathbf{O}^+	-74,609537*	F^{2+}	-97,878459*
/ 5	3		-54,400934		-74,372605		-97,608977
0	³ D	0	-75,109991*	F^+	-99,163612*	Ne ²⁺	-126,752828*
8	P	0	-74,809398		-98,831720		-126,372113
0	² D	F	-99,803888*	Ne ⁺	-128,037981*	Na ²⁺	-160,501601*
9	P		-99,409349		-127,817814		-159,997399
10 ^{1}S	¹ c	Ne	-128,830462*	Na ⁺	-162,239364*	${\rm Mg}^{2+}$	-199,476407*
	3		-128,547098		-161,676962		-198,830810
11	$2 \mathbf{G}$	N.	-162,428221*	Mg^+	-200,028942*	Al^{2+}	-241,800133*
11	3	INa	-161,858911		-199,371809		-241,030706
10	¹ c	Mg	-200,309935*	Al^{+}	-242,492059*	Si^{2+}	-288,967989*
12	3		-199,614636		-241,674670		-287,995897
13 ^{2}P	$2 \mathbf{p}$	A 1	-242,712031*	Si^+	-289,568688*	P^{2+}	-340,835933*
	Р	AI	-241,876707		-288,573130		-339,644994
14 ³ P	³ D	Si	-289,868255*	\mathbf{P}^+	-341,560845*	S^{2+}	-397,796703*
	Р		-288,854362		-340,349775		-396,332719
15	4 c	Р	-341,946219*	\mathbf{S}^+	-398,654205*	Cl^{2+}	-460,029537*
	3		-340,718780		-397,173182		-458,226462
16	³ P	S	-399,034923*	Cl^+	-460,904672*	Ar^{2+}	-527,517483*
			-397,504895		-459,048590		-525,304386
17	^{2}P	Cl	-461,381223*	Ar^+	-528,532854*	K ²⁺	-600,645765*
			-459,482072		-526,274533		-597,891609
18	^{I}S	Ar	-529,112009*	\mathbf{K}^+	-601,807976*	Ca ²⁺	-679,441041*
			-526,817512		-599,017578		-676,154352
19	$2 \mathbf{c}$	Κ	-601,967492*	Ca ⁺	-679,877318*		
	-2		-599,164786		-676,570011		
20	^{I}S	Ca	-680,101971*				
			-676,758185				

Примечание. n – число электронов в атоме или ионе; E – значение энергии, вычисленное в алгебраическом приближении метода ХФ (наш расчет); E^* – экспериментальное значение энергии, полученное из опытных данных для потенциалов ионизации [3].

Из таблицы следует, что для атомов от С до Са завышение рассчитанных значений энергии атомов и ионов по сравнению с экспериментальными в большинстве случаев практически одинаково и составляет всего 0,3%-0,5%. Это дает основания надеяться, что и для более тяжелых атомов метод ХФ дает такую же высокую точность, вполне достаточную для целого ряда приложений.

[1]. С.Э.Фриш. Оптические спектры атомов (1963).

[2]. D.R.Lide. Handbook of Chemistry and Physics (2003).

[3]. C.E.Moore. Natl. Stand. Ref. Data Ser. 34 (1970).

[4]. А.Р.Стриганов, Г.А.Одинцова. Таблицы спектральных линий атомов и ионов (справочник) (1982).

[5]. Ю.Б.Малыханов, М.В.Горшунов, С.В.Евсеев, И.Н.Еремкин, Р.М.Чадин. Оптика и спектр. **114**, № 3 (2013).

[6]. Ю.Б.Малыханов, С.В.Евсеев, М.В.Горшунов. Журн. прикл. спектр., **79**, № 1 (2012).

Стандарты частоты нового поколения

на основе ионов алюминия и магния

<u>В.В. Чернушкин</u>, Е.А. Никитина, С.Н. Мохненко, В.Д. Овсянников 394006, г. Воронеж, Воронежский государственный университет

v_tchern@list.ru

Стандарты частоты-времени на ионах алюминия достигли рекордных показателей точности с относительной погрешностью измерений на уровне 10-17 -10⁻¹⁸. Для удержания ионов в ограниченной области пространства в течение длительного периода времени, необходимого для сверхточных измерений, используются ловушки Пеннинга и Пауля. Ионные ловушки находят применение во многих областях атомной и молекулярной физики, квантовых вычислений, фундаментальной спектроскопии [1-3]. Благодаря возможности долгосрочного хранения, сильной изоляции ионов, позволяющей практически исключить воздействие окружающей среды, а также механизмам симпатического охлаждения, ионные ловушки являются наиболее перспективной средой для создания фундаментальных стандартов частоты и времени, а также для осуществления квантовых вычислений. Движение заряженных частиц можно ограничить в определенной области пространства путем соответствующего подбора электрических и магнитных полей. Локализовать частицы таким способом можно в очень малом объеме пространства. Согласно теореме Ирншоу, не существует конфигурации статического электрического поля, позволяющей удерживать электрически заряженную частицу в определенной точке пространства. Поэтому для удержания ионов в ловушке используется подбор полей, включающий наряду с электростатическим полем переменное монохроматическое поле (в ловушке Пауля) или постоянное магнитное поле (в ловушке Пеннинга). Благодаря наличию заряда, напряженности полей, удерживающих предварительно охлажденный ион, могут быть достаточно малыми, так что их влиянием на частоту часового перехода можно пренебречь.

Загрузка иона возможна только при достаточно малой его скорости относительно ловушки. Поэтому перед загрузкой необходимо понизить тепловую скорость иона до скоростей, соответствующих сверхнизким температурам. Структура и оптические свойства энергетических уровней ионов Al⁺ не позволяют охлаждать их напрямую до температуры порядка 1 мкК. Поэтому здесь используется метод симпатического охлаждения за счет передачи тепловой энергии сильно охлажденным ионам элементов группы II периодической системы.

Заряженную частицу невозможно удерживать в ловушке Пауля с помощью одного только статического потенциала. Однако псевдопотенциал, служащий для захвата заряженных частиц, может быть создан при помощи осциллирующего потенциала. Необходимо, чтобы сила, действующая на заряженную частицу, была направлена к центру ловушки.

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = e\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -e\nabla\Phi(\mathbf{r}) \tag{1}$$

где $\mathbf{E}(\mathbf{r})$ – электрическое поле, которое задается потенциалом $\Phi(\mathbf{r})$ внутри объема ловушки, взаимодействующее с ионом, обладающим зарядом q = +e. Соответствующий потенциал $\Phi(x, y, z)$ должен иметь квадратичную зависимость от координат:

$$\Phi(x, y, z) = C(ax^{2} + by^{2} + cz^{2}), \qquad (2)$$

здесь C = const.

Используя уравнение Лапласа $\Delta \Phi = 0$ для пространства, свободного от зарядов, получаем связь между коэффициентами, определяющими форму потенциала:

$$a+b+c=0\tag{3}$$

Далее рассмотрим два частных случая решения этого уравнения:

линейная квадрупольная конфигурация

$$a=1; b=-1; c=0$$
 (4)

и трехмерная квадрупольная конфигурация

$$a = 1; \quad b = 1; \quad c = -2$$
 (5)

Решение (4) описывает ловушку с конфигурацией, в которой потенциал не зависит от координаты z:

$$\Phi(x, y, z) = C(x^2 - y^2)$$
(6)

т.е. представляет собой двумерный квадрупольный седловой потенциал.

На рисунке 1 показано удержание заряженной частицы при помощи седлового потенциала, вращающегося вокруг оси z с частотой ω . В центре неподвижного седлового потенциала частица находится в состоянии неустойчивого равно-

весия, и любое возмущение может привести к вылету частицы. В случае вращения седлового потенциала на частицу действует результирующая сила, называемая пондеромоторной силой, которая направлена к центру ловушки.



Рис. 1. Удержание иона во вращающемся седловом потенциале.

Основные свойства и количественные характеристики процессов, рассмотренных в данном докладе, дают возможность проектирования и разработки новейшего стандарта частоты и времени на основе сильно запрещенного перехода ${}^{1}S_{0}-{}^{3}P_{0}$ в ионах Al⁺.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант №11-02-00152)

- [1] Paul, W. Ein neues Massenspektrometer ohne Magnetfeld. / W. Paul and H. Steinwedel // R Zeitschrift f
 ür Naturforschung A. 1953. Vol. 8, № 7. P. 448-450.
- [2] Paul, W. Verfahren zur Trennung bzw. zum getrennten Nachweis von Ionen verschiedener spezifischer Ladung / W. Paul and H. Steinwedel // DE 9449nb00 filed on December 24, 1953, priority December 23, 1953.
- [3] Molhave, K. Construction and experiments with a linear Paul trap/ K.Molhave. Inst. of phys. and astronomy University of Aarhus, 2000. – 106 p.

ВЫСОКОТОЧНЫЙ МЕТОД ЧИСЛЕННОГО РАСЧЕТА ФАЗОВОГО СДВИГА ДЛЯ РАДИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

В.В. Мешков, А.В. Столяров

119991, г. Москва, Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова, Химический факультет meshkov@laser.chem.msu.ru

Одной из важных характеристик взаимодействующих атомов в квантовой теории рассеяния является фазовый сдвиг. Данная величина может быть использована для расчета метастабильных состояний молекул, длины рассеяния, а также термодинамических и транспортных свойств газов. Существующие методы расчета фазового сдвига имеют ряд недостатков, в частности, зависимость точности расчета от энергии взаимодействующих частиц.

В настоящей работе предложен новый метод численного расчета фазового сдвига. Фазовый сдвиг η_l определяется из асимптотического поведения волновой функции $\psi(r)$ радиального уравнения Шредингера. При $r \to \infty$ волновая функция имеет следующую асимптотику $\psi(r) \approx A \sin(kr + \eta_l - \pi l/2)$, где k – волновое число, l – вращательное квантовое число. В работе показано, что если представить волновую функцию $\psi(r)$ в виде $\psi(r) = f(r) \sin(kr) + g(r) \cos(kr)$, где функция $f(r) \approx f_0 + f_1/r + K$, а функция $g(r) \approx g_0 + g_1/r + K$, при $r \to \infty$, тогда при замене радиальной переменной r = x/(1-x) функции f(x) и g(x) могут быть найдены путем численного решения системы дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} -\frac{d^2}{dx^2}f(x) - \frac{2}{x}\frac{d}{dx}f(x) - \frac{2k}{x^2}\frac{d}{dx}g(x) + \left[\frac{l(l+1)}{x^2} + \frac{2\mu}{h^2}\frac{V(x)}{x^4}\right]f(x) = 0\\ -\frac{d^2}{dx^2}g(x) - \frac{2}{x}\frac{d}{dx}g(x) + \frac{2k}{x^2}\frac{d}{dx}f(x) + \left[\frac{l(l+1)}{x^2} + \frac{2\mu}{h^2}\frac{V(x)}{x^4}\right]g(x) = 0\end{cases}$$

методом полиномиальной коллокации (V(r) – потенциал взаимодействия частиц). При этом $f(1) = f_0$ и $g(1) = g_0$, а фазовый сдвиг выражается как $\operatorname{arctg}(g(1)/f(1))$.

Следует отметить, что разработанный метод расчета имеет экспоненциальную сходимость, что позволяет вычислять фазовые сдвиги с высокой точностью. При этом в отличие от других методов, сходимость практически не зависит от энергии взаимодействующих частиц.

Работа выполнена при поддержке Гранта РФФИ 12-08-31407-мол_а.

ДИНАМИЧЕСКАЯ ПОЛЯРИЗУЕМОСТЬ И СЕЧЕНИЕ ФОТООТРЫВА СЛАБОСВЯЗАННОГО ЭЛЕКТРОНА В ПОЛЕ ДВУХ **6**-ПОТЕНЦИАЛОВ

<u>С.В. Борзунов</u>¹, М.В. Фролов¹, М.Ю. Иванов^{2, 1}, Н.Л. Манаков¹, С.С. Мармо¹, А.F. Starace³

¹ 394006, г. Воронеж, Воронежский государственный университет
 ² Max-Born Institute, Max-Born-Strasse 2A, D-12489 Berlin, Germany
 ³ The University of Nebraska, Lincoln NE 68588-0111, USA

manakov@phys.vsu.ru

В работе рассматривается простейшая молекулярная модель — электрон в системе двух притягивающих трёхмерных потенциалов нулевого радиуса (в общем случае, не идентичных), взаимодействующий с интенсивным линейно поляризованным лазерным полем. В рамках формализма квазистационарных квазиэнергетических состояний [1] получены точные уравнения для комплексной квазиэнергии и амплитуды п-фотонной ионизации, а также выполнен анализ уравнений на комплексную квазиэнергию в низшем порядке теории возмущений по напряжённости лазерного поля. Динамическая поляризуемость и сечение фотоотрыва основного и возбужденного состояний электрона представлены в замкнутом аналитическом виде для случая двух неодинаковых б-центров при произвольной ориентации вектора поляризации лазерного поля относительно «молекулярной» оси. Для выяснения роли «молекулярного» потенциала выполнен аналитический анализ поляризуемости и сечения фотоионизации в приближении плоских волн (ППВ). Сравнение точных результатов и результатов ППВ показывает: (1) поляризуемость в ППВ не описывает резонансные особенности, возникающие вследствие однофотонного резонанса между основным И возбужденным состоянием двухцентровой системы; (2) ППВ не описывает пороговое поведение сечение фотоотрыва; (3) ППВ не описывает асимметрию в угловых распределениях фотоэлектронов для случая неидентичных центров. Полученные аналитические результаты указывают также на изменение характера обменного взаимодействия в двухцентровой системе в присутствии переменного электрического поля и особенности эффекта Штарка в двухцентровой системе в низкочастотном поле и постоянном электрическом поле (ср. [2]).

Интерференционные явления, возникающие при однофотонном фотоотрыве или ионизации гомоядерных молекул (в нашем случае, для идентичных δцентров) хорошо известны [3,4]: два атомных центра испускают две когерентные
волны, интерференция которых приводит к появлению интерференционных максимумов и минимумов в дифференциальном и полном сечении фотоотрыва. Такая интерференция становится менее выраженной в случае неидентичных центров, поскольку одна из волн сильно подавлена по сравнению с другой. Наши результаты показывают, что существует другой механизм возникновения интерференции: один из центров является источником двух волн: «опорной», распространяющейся после однофотонного поглощения в направлении к детектору без дополнительного взаимодействия с молекулярным остовом, и «рассеянной», которая распространяется к соседнему атомному центру и упруго рассеивается на нём, после чего этот центр излучает вторичную волну, которая интерферирует с «опорной». Указанный механизм интерференции позволяет объяснить асимметрию в угловом распределении фотоэлектронов, наблюдаемую в случае двух неэквивалентных центров.

Работа выполнена при частичной поддержке РФФИ (гранты № 12–02– 12101–офи_м и № 13–02–00447–а), NSF гранта № РНУ-1208059, Министерства образования и науки Российской Федерации (контракт № 14.В37.21.1937) и Фонда "Династия" (М.В.Ф.).

- N.L. Manakov, V.D. Ovsiannikov, and L.P. Rapoport, Phys. Rep. 141, 319 (1986).
- [2]. С.В. Борзунов, Н.Л. Манаков, А.Ф. Старас, М. В. Фролов, ЖЭТФ **139**, 835 (2011).
- [3]. H.D. Cohen and U. Fano, Phys. Rev. 150, 30 (1966).
- [4]. И.Г. Каплан, А.П. Маркин, Докл. Акад. наук СССР 184, 669 (1969).

ПОЛНАЯ СПИНОВАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ ЭЛЕКТРОНОВ УПРУГО РАССЕЯННЫХ АТОМАМИ

В.И. Келемен, Е.Ю. Ремета

88017, г. Ужгород, Институт электронной физики НАН Украины vlad.kelemen@gmail.com, remetov@inbox.ru

Метод релятивистского комплексного оптического потенциала (ОП) используется для исследования процесса потенциального рассеяния электрона на многоэлектронном атоме. Релятивистский потенциал для описания рассеяния методом ОП получен переходом от уравнения Дирака к уравнению Шредингера. Он содержит релятивистскую скалярную часть и потенциал спин-орбитального взаимодействия [1-4].

Оптический потенциал состоит из следующих потенциалов: статического $V_s(r)$, обменного (с релятивистской поправкой), поляризационного, скалярной части релятивистского $V_R(r, E) = -\alpha^2 V_s^2 / 2 + (\chi \cdot d^2 V_s / dr^2) / 4 + [3\chi^2 (dV_s / dr)^2] / 8$ ($\chi = \alpha^2 / \{2 + \alpha^2 [E - V_s]\}$, $\alpha = 1/137$) потенциала, спин-орбитального взаимодействия $V_{so}^{\pm}(r) \sim dV_s / rdr$ и поглощения [3-5]. Спин-орбитальное взаимодействие приводит к тому, что процесс упругого рассеяния на бесспиновой мишени становится спин-зависимым и определяется прямой $f(\theta, E)$ и переворота спина $g(\theta, E)$ амплитудами рассеяния [6]. С целью согласованного описания процесса потенциального рассеяния, указанные потенциалы и атомные характеристики, используемые в ОП, определяются в локальном приближении стационарной и нестационарной теории функционала плотности (ТФП) с определенным учетом релятивистских эффектов (см. также [3-5] и ссылки там).

Исследованы характеристики критических минимумов (КМ) в дифференциальных сечениях (ДС) – $|f|^2 + |g|^2$ – и особенности функции спиновой поляризации – $S(\theta, E) = i(fg^* - f^*g)/(|f|^2 + |g|^2)$ – при рассеянии неполяризованных электронов на бесспиновом атоме. В этом случае поляризация пучка электронов после рассеяния прямо связана с функцией Шермана $S(\theta, E)$ [6]. Указанные минимумы ДС изучаются экспериментально и теоретически, например, для рассеяния на атомах инертных газов. Это наиболее глубокие, по величине от ~ 10^{-22} до 10^{-25} m^2/sr , минимумы. В их угловых и энергетических окрестностях поляризация рассеянных электронов может быть полной, 100 процентной.

Для поляризационного потенциала рассеяния используется безпараметрическое выражение потенциала корреляционно-поляризационного взаимодействия электронов в локальном неоднородном электронном газе (см. [3-5]). Потенциал состоит из двух частей, описывающих взаимодействие на малых, во внутренней области атома-мишени, и на больших, асимптотических, расстояниях. Последняя часть потенциала связана с дипольной статической поляризуемостью, которая вычисляется в локальном приближении времязависящей ТФП с релятивистским эффективным локальным потенциалом атома. При этом для индуцированного обменного потенциала также учтена релятивистская поправка (см. [3-5] и ссылки там).

Для атомов Ar, Kr, Xe, Hg вычислены положения $[E_c, \theta_c]$ 6-ти, 8-ми, 17-ти и 13-ти KM в ДС, соответственно. Для атома ртути использование релятивистского приближения для энергий столкновения больше 100 эВ привело к систематическому увеличению энергий минимумов (например, на 222 эВ для наиболее высокоэнергетического KM) и только к небольшому изменению их угловых положений [3-5]. Для энергий меньше 100 эВ изменилось число минимумов в ДС для атома Hg [3-5]. В окрестности указанных KM вычислены положения 7-ми, 12-ти, 30-ти, 23-х точек полной поляризации электронов при их рассеянии атомами Ar, Kr, Xe, Hg, соответственно. Для этих точек рассчитаны энергетические и угловые ширины окрестностей большой поляризации: 50%-ой для атомов Ar и Kr; 90%-ой для атомов Xe и Hg (для случая атома ртути см., например, [3,4]).

Для исследования потенциального рассеяния поляризованных электронов поляризованными многоэлектронными атомными системами, имеющими одну $(n\ell)^{2\ell+1} - s^1, p^3, d^5, f^7$ – валентную или субвалентную полузаполненную подоболочку, используется спин-поляризованное приближение нерелятивистского и релятивистского комплексного ОП [7,8]. В этом приближении потенциалы обменного и поляризационного взаимодействия, потенциал поглощения, а также амплитуды рассеяния определяются взаимной ориентацией спинов налетающего

электрона и атома-мишени [9]. При малых, несколько электронвольт, энергиях столкновения учет такой спиновой зависимости потенциалов является существенным. Спиновая обменная асимметрия [6], определяемая через ДС рассеяния с антипаралельной (а) и параллельной (р) ориентациями спинов может достигать достаточно больших значений. Угловая зависимость вычисленной асимметрии показывает важную роль спиновой структуры атома-мишени, а вклады от поляризационного и обменного взаимодействий являються сравнимыми по величине.

Релятивистская форма оптического потенциала сильно влияет на характеристики рассеяния, приводит к существенному сближению вычисленных интегральных сечений с экспериментальными, дает количественное уточнение энергий и углов критических минимумов ДС и точек полной спиновой поляризации. Теоретическое определение сечений рассеяния, параметров спиновой поляризации, спиновой обменной асимметрии и предсказание положений их особенностей, при рассеянии электронов на различных атомах, может быть использовано для их экспериментального обнаружения и широкого практического применения.

- [1]. В.А. Фок, Начала квантовой механики. Москва: Наука, 1976, 376 с.
- [2]. L.T. Sin Fai Lam, J. Phys. B 5, 119 (1982).
- [3]. В.И. Келемен, Е.Ю. Ремета, Доп. Нац. Акад. наук України. №1, 65 (2013).
- [4]. V.I. Kelemen and E.Yu. Remeta, J. Phys. B 45, 185202 (2012).
- [5]. Е.Ю. Ремета, В.И. Келемен, Доп. Нац. Акад. наук України. №11, 84 (2011).
- [6]. J. Kessler, Advanc. Atom. Mol. Opt. Phys. 27, 81 (1991).
- [7]. E.Yu. Remeta and V.I. Kelemen, J. Phys. B 43, 045202 (2010).
- [8]. Е.Ю. Ремета, В.И. Келемен, Доп. Нац. Акад. наук України. №1, 77 (2010).
- [9]. Е.Ю. Ремета, В.И. Келемен, ЖТФ. 80, вып. 12, 18 (2010).

О ВОЗБУЖДЕНИИ ВУФ СПЕКТРОВ ИОНА КАЛИЯ ПРИ ЭЛЕКТРОН-АТОМНЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ

<u>Г.Г. Богачёв</u>¹, Р.В. Тымчик¹

¹ Институт электронной физики НАН Украины, г. Ужгород, 88000, Украина

bogach_gen@inbox.ru

Однозарядный ион калия принадлежит изоэлектронному ряду атома аргона. Его основное состояние $1s^22s^22p^63s^23p^6$ 1S_0 . Как и у всех атомов инертных газов, у иона K⁺ первое возбужденное состояние лежит сравнительно близко к потенциалу ионизации. Из-за этого резонансные линии K II попадают в коротковолновую ВУФ область, тогда как переходы внутри системы возбужденных уровней дают линии в ближней ВУФ, УФ и видимой областях.

Исследования спектра К II начаты сравнительно давно [1, 2]. В [1] фотографическим методом был исследован искровой спектр калия в области 2000-7700 Å. Это позволило установить уровни нижних возбужденных конфигураций К II, отсчитанные от самого нижнего возбужденного уровня. В [2] наблюдались резонансные линии в короьковолновой ВУФ области, благодаря чему возбужденные уровни, найденные в [1], были связаны с основным состоянием иона. Совсем недавно получены новые данные по спектрам К II (в скользящей искре в областях 495-612 и 1247-2150 Å) [3]. Были уточнены значения длин волн ранее наблюдавшихся и найдено около 120 новых линий. Выполнена идентификация наблюдавшихся спектров, что позволило установить ряд новых возбужденных уровней К II. Уточнено значение потенциала ионизации К⁺ (31.625 эВ). Все ранее полученные данные по спектрам и энергетическим уровням К II стали основой для аналитической компиляции NIST [4].

В настоящей работе приводятся результаты исследования эмиссионных спектров калия (область спектра 1250 – 2540 Å), возбуждаемых в электронатомных столкновениях. Работа выполнена на установке с пересекающимися электронным и атомным пучками, подобной описанной в [5]. В вакуумном монохроматоре (схема Сейа-Намиока) диспергирующим элементом была реплика вогнутой дифракционной решетки с радиусом кривизны R=500 мм (1200 штр/мм). Она была покрыта слоем алюминия и защищена слоем фтористого магния. Детектором излучения служил солнечно-слепой фотоэлектронный умножитель с окном из фтористого магния (ФЭУ-142). Концентрация атомов в области столкновений была $\leq 10^{12}$ см⁻³, а плотность тока пучка электронов – $\leq 10^{-2}$ A/см² при энергиях электронов до 300 эВ. Процесс измерения был автоматизирован с помощью персонального компьютера.

Рис.1 представляет полученный нами спектр, возбуждаемый при энергии электронов 60 эВ. Точность определения длин волн не превышала 1.5 – 2 Å. При

этой энергии в исследованном диапазоне длин волн присутствуют только линии К II. На рисунке вертикальными отрезками нанесены также положения спектральных линий К II, собранных в компиляции [4]. Длины этих отрезков пропорциональны величинам интенсивностей, приведенным в [4]. Сравнение нашего спектра с данными [4] позволяет связать наиболее интенсивные из наблюдаемых эмиссий с определенными линиями К II. Так эмиссия при 1723 Å может быть отнесена к группе близких по длинам волн линий, соответствующих переходам с уровней конфигурации $3p^55f$, а эмиссия при 1749 Å – переходам с уровней конфигурации $3p^54f$. Более слабые эмиссии с меньшими длинами волн 1275, 1377, 1602 и 1649 Å могут быть отнесены к переходам с уровней конфигураций $3p^56f$, $3p^55f$,



Рис.1. Эмиссионные спектры калия при энергии электронов 60 эВ

Стоит отметить, что компиляция [4] содержит и все ранние данные [1]. Авторы же [3] включили в таблицу наблюдавшихся переходов только часть длин волн (2777-6595 Å) из [1]. Из таблиц длин волн в [3] и [4] можно заметить наличие довольно значительного интервала длин волн (~1790-1990 Å), не содержащего каких-либо линий. Однако по нашим данным (см. рис.1) в нем наблюдается ряд достаточно интенсивных эмиссий.

Дополнительную информацию для идентификации наблюдаемых эмиссий могут дать их функции возбуждения (ФВ). Мы измерили ФВ для некоторых эмиссий (см. рис.2), в том числе и для эмиссий из «пустого» (по данным [3] и [4]) интервала. Заметим, что ранние данные [6] для ФВ спектральных линий К II в видимой области в целом обнаруживают подобие по форме с ФВ, полученными в нашей работе.

Как видно из рис.2, припороговые подъемы всех измеренных ФВ начинаются при энергиях больше 30 эВ. Это относится как к эмиссии при 1899 Å, которая попала в интервал 1790-1990 Å, так и к эмиссиям при 2185 и 2266 Å, которые наблюдались в [1], но остались неидентифицированными. Данное обстоятельство недвузначно указывает на принадлежность по крайней мере тех эмиссий, для которых измерены ФВ, к однозарядному иону калия. Таким образом можно утверждать, что в отождествлении линий К II по-прежнему остаются неразрешенные вопросы.



Рис.2. Функции возбуждения некоторых эмиссий калия

- [1]. T.L. de Bruin, Z. Phys. 38, 94 (1926).
- [2]. I.S. Bowen, Phys. Rev. **31**, 497 (1928).
- [3]. K. Pettersen, J.O. Ekberg, I. Martinson and J. Reader, Phys. Scr. 75, 702 (2007).
- [4]. J.E. Sansonetti, J. Phys. Chem. Ref. Data 37, 34, (2008).
- [5]. Г.Г. Богачев, Опт. и спектр. 110, 718 (2011).
- [6]. Е.Н. Постой, И.С. Алексахин, П.Г. Иванчов, Опт. и спектр. 38, 465 (1975).

ВОЗБУЖДЕНИЕ МЕТАСТАБИЛЬНЫХ АВТОИОНИЗАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ АТОМА РУБИДИЯ ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ

В.В. Грицко¹, В.И. Роман¹, А.В. Куплиаускиене², <u>А.А. Боровик</u>¹ ¹ Институт электронной физики НАН Украины, Ужгород, 88017, Украина ² Институт теоретической физики и астрономии, Вильнюсский университет, Вильнюс, LT-01108, Литва sasha@aborovik.uzhgorod.ua

Энергетическая структура автоионизационных и квазиметастабильных состояний $4p^5n_1l_1n_2l_2$ в атоме рубидия в настоящее время известна достаточно хорошо (см. например работу [1] и ссылки в ней), однако спектроскопическая классификация установлена только для десяти уровней, принадлежащих самым низколежащим конфигурациям $4p^55s^2$, $4p^55s6s$ и $4p^55s5p$ [2]. Что касается метастабильных автоионизационных состояний, то имеюшиеся злесь немногочисленные теоретические [3] и экспериментальные [4,5] данные противоречат друг другу как относительно их энергетических порогов возбуждения, так и классификации. С целью выяснения этой ситуации, в данной работе исследованы в одном эксперименте и для одного значения энергии соударений энергетические спектры автоионизационных и рассеянных электронов, образующихся при возбуждении оболочки 4p⁶ атома рубидия электронным ударом.

Измерения электронных спектров проведены под углом наблюдения 54.7° на установке [1], которая включала в себя монохроматор первичного электронного энергий рассеянных пучка И анализатор электронов (оба 127° электростатического типа) с энергетическим разрешением не хуже 0.12 эВ и 0.04 эВ, соответственно. Источник нейтральных атомов с резистивным нагревом работал при температуре не более 130°С, что обеспечивало минимальную концентрацию димеров рубидия в атомном пучке. Необходимым условием одновременной регистрации различных по типу электронных спектров при общей энергетической развертке является близкое взаимное расположение их

222

энергетических диапазонов. Для атомов рубидия этому условию удовлетворяет значение энергии столкновений 25.5 эВ.

Для оценки энергетического положения и классификации уровней $4p^5n_1l_1n_2l_2$ проведены расчеты их порогов, скоростей распада и сечений возбуждения с учетом конфигурационного взаимодействия в базисе релятивистских радиальных орбиталей Дирака-Фока-Слэтера [6].



Рис. 1 Эпергетические спектры автоиопизациоппых (а) и рассеянных (б) электронов при возбуждении оболочки $4p^6$ атома рубидия электронами с начальной эпергией 25.5 эВ.

На рис.1 приведено сравнение полученных при энергии столкновений 25.5 эВ энергетических спектров автоионизационных (a) и рассеянных (δ) электронов атома рубидия. Вертикальными линиями показано положение известных автоионизационных уровней [7]. Отметим, что если первый тип спектров отражает возбуждение и распад только короткоживущих автоионизационных состояний, то второй показывает эффективность возбуждения всех уровней $4p^5n_1l_1n_2l_2$, включая квазиметастабильные И метастабильные уровни. Сравнительный анализ представленных спектров обнаруживает интересную особенность – в автоионизационном спектре (а) участкам с минимальной интенсивностью (заштрихованы) В спектре энергетических потерь *(б)*

соответствуют области с высокой интенсивностью линий (см. линии "а-в"). Причиной такого отличия может быть эффективное припороговое возбуждение квартетных метастабильных состояний, распад которых не может быть обнаружен в автоионизационном спектре вследствие больших времен жизни (>10⁻⁶ с.).

В работе [4] наиболее низколежащее метастабильное состояние атома рубидия было идентифицировано как уровень $4d({}^{3}F)5s {}^{4}F_{9/2}$ с порогом возбуждения при 15.8±0.3 эВ. Однако в последующих исследованиях [5] этот порог был установлен при энергии 16.77 эВ и связан с возбуждением уровня $5s({}^{3}P)5p {}^{4}D_{7/2}$. Как показывают проведенные в данной работе расчеты, в спектре (δ) на рис. 1 этому уровню соответствует линия "а" при энергии 16.82±0.05 эВ. Линии "б" и "в", расположенные при энергиях 17.13 эВ и 19.07 эВ, идентифицированы как соответствующие возбуждению более высоколежащих метастабильных уровней $4d({}^{3}F)5s {}^{4}F_{9/2}$ и $5s({}^{3}P)5d {}^{4}F_{9/2}$, соответственно. Данные по параметрам и классификации метастабильных автоионизационных уровней атома рубидия приведены в таблице 1.

Таблица 1. Экспериментальные E_{exp} и рассчитанные E_{cal} энергии возбуждения (эВ) и автоионизационные времена жизни τ_a (×10⁻⁶ с) метастабильных уровней атома рубидия.

Линия	E_{exp}	E_{cal}	τ_a	Классификация
а	16.82; 16.77 ^[5]	16.463	0.35	$5s(^{3}P)5p ^{4}D_{7/2}$
б	17.13; 15.8 ^[4]	17.097	0.21	$4d({}^{3}F)5s {}^{4}F_{9/2}$
В	19.07	18.957	1.4	$5s(^{3}P)5d^{4}F_{9/2}$

Следует отметить, что представленные результаты являются частью работы по общей классификации уровней $4p^5n_1l_1n_2l_2$ в атоме рубидия, проводимой в нашей лаборатории.

[1]. A. Borovik, V. Roman, A. Kupliauskiene, J. Phys. B 45, 045204 (2012).

- [2]. J. E. Sansonetti, J. Phys. Chem. Ref. Data 35, 301 (2006).
- [3]. M. W. D. Mansfield, Proc. R. Soc. Lond. A 364, 135 (1978).
- [4]. P. Feldman and R. Novick, Phys. Rev. A 160, 143 (1967).
- [5]. R. Novick, G. Sprott, and T. Lucatorto, Phys. Rev. A 14, 273 (1976).
- [6]. M. F. Gu, http://kipc-tree-stanfort.edu/fac (2009).
- [7]. V. Pejcev, D. Rassi, K. J. Ross and T. W. Ottley J. Phys. B 10, 165 (1977).

РОЛЬ АВТОИОНИЗАЦИОННЫХ СОСТОЯНИЙ В ВОЗБУЖДЕНИИ ИНТЕРКОМБИНАЦИОННЫХ ПЕРЕХОДОВ ИОНОВ In⁺ И TI⁺ ЭЛЕКТРОННЫМ УДАРОМ

А.Н. Гомонай

88017, г. Ужгород, Институт электронной физики НАН Украины annagomonai@rambler.ru

За последние десятилетия в атомной физике наблюдается большой интерес к изучению многоэлектронных взаимодействий и их проявлению в различных элементарных процессах, происходящих при электрон-ионных столкновениях. В этих процессах важную роль играют квазистационарные (автоионизационные) состояния (АИС) системы "ион + налетающий электрон", электронный распад которых приводит к сложной резонансной структуре сечений. Информация о роли АИС в динамике процессов столкновений электронов с ионами является, с одной стороны, источником сведений о структуре сложных атомных систем, позволяющих осуществлять более тщательный отбор теоретических моделей, а с другой – имеет важное прикладное значение.

В данной работе представлены результаты исследований энергетических зависимостей эффективных сечений возбуждения интеркомбинационных переходов $(n-1)d^{10}nsnp {}^{3}P^{o}_{1} \rightarrow (n-1)d^{10}ns^{2} {}^{1}S_{0}$ ионов In⁺ (n=5) и Tl⁺ (n=6) электронным ударом.

Эксперименты выполнены на установке с пересекающимися электронным и ионным пучками, основные узлы которой подробно описаны в [1, 2]. Методика определения относительной спектральной чувствительности установки в области 100-200 нм описана в [1], а в области 190-300 нм – в [2, 3]. Абсолютное значение эффективного сечения возбуждения электронным ударом линии 5s5p ${}^{3}P^{o}_{1} \rightarrow 5s^{2} {}^{1}S_{0}$ ($\lambda 230.6$ нм) иона In⁺ получено путем нормировки экспериментальных данных при энергии 100 эВ на результаты теоретического расчета с использованием таблиц борновских сечений в приближении Бейтса-Дамгаард [4]. В случае иона TI⁺ абсолютное значение эффективного сечения возбуждения электронным ударом интеркомбинационной линии $\lambda 190.8$ нм определено на основе сравнения интенсивностей с резонансной 6s6p ${}^{1}P^{o}_{1} \rightarrow 6s^{2} {}^{1}S_{0}$ ($\lambda 132.2$ нм) линией. Сечение возбуждения последней получено путем нормировки экспериментальной кривой при энергии

100 эВ на теоретический расчет [5] по методу сильной связи двух состояний. Расчет сечения возбуждения 6s6p ${}^{3}P_{1}^{o}$ уровня иона Tl⁺ выполнен по той же методике с учетом (95% ${}^{3}P_{1}^{o} + 5\% {}^{1}P_{1}^{o}$) и без учета конфигурационного смешивания (см.

рис.1). Как видно, учет 5% смешивания с 6s6p ${}^{1}P_{1}^{o}$ уровнем приводит к изменению хода и величины сечения возбуждения интеркомбинационной линии. Ошибка определения абсолютных эффективных сечений исследуемых линий составляла ~80% и, в основном, определялась ошибками относительных измерений, определения относительной спектральной чувствительности и неточностью расчета.

Как видно из рис.1, на обеих функциях возбуждения обнаружена четкая структура. Проведенный анализ позволяет утверждать, что ее природа преимущественно связана с резонансным вкладом атомарных АИС.



Рис.1. Энергетические зависимости эффективных сечений возбуждения интеркомбинационных линий ионов In^+ (230.6 нм) и Tl^+ (190.8 нм) электронным ударом

В обоих случаях эффективным резонансным каналом заселения nsnp ${}^{3}P_{1}^{o}$ уровня являются переходы с АИС в процессе Костера-Кронига. Этот вклад доминирует в припороговой области энергий электронов и проявляется в виде четких резонансных максимумов структуры. Однако, если для иона In⁺ основной вклад в сечение дают как АИС $5s5p({}^{1}P_{1}^{o})$ nl, так и АИС $5s5p({}^{3}P_{2}^{o})$ nl конфигурации, то в случае более тяжелого иона TI⁺ намного эффективнее оказался вклад АИС, энергетически расположенных между уровнями расщепления одного состояния (6s6p ${}^{3}P_{j}^{o}$). Следует отметить, что существенную роль в припороговом резонансном возбуждении интеркомбинационной линии иона TI⁺ могут играть также АИС

 $5d^{9}(^{2}D)6s^{2}6p^{2}(^{3}P)$ конфигурации, которые размещены вблизи порога возбуждения, начиная с энергии 6,8 эВ [6]. В то же время в случае иона In⁺ AUC $4d^{9}(^{2}D)5s^{2}5p^{2}(^{3}P)$ конфигурации размещены значительно дальше от порога возбуждения, начиная с энергии 11,6 эВ [7].

Структура выше порога возбуждения $n^1 P^o_1$ уровня обусловлена вкладом АИС, границей сходимости которых являются обычные $nsn_1l_1^{1,3}L_j$, смещённые $np^2({}^{3}P_{0,1,2}, {}^{1}D_2, {}^{1}S_0)$ и бейтлеровские $(n-1)d^9ns^2np$, $(n-1)d^9nsnp^2$ уровни иона. Начиная с энергии возбуждения $(n+1)^3S_1$ уровня, открываются дополнительные каналы заселения $n^3P^o_1$ уровня за счет каскадных переходов с вышележащих уровней.

Таким образом, механизм возбуждения интеркомбинационных линий ионов In⁺ и Tl⁺ медленными электронами усложняется одновременным протеканием как минимум трёх процессов: прямым возбуждением иона с основного состояния в возбужденный с изменением спина, что связано с нарушением связи Рассел-Саундерса вследствие существенного возрастания роли релятивистских и корреляционных процессов; резонансным возбуждением иона, связанным с диэлектронным захватом электрона, образованием и Оже-распадом АИС, а также каскадными эффектами.

- [1]. E.V. Ovcharenko, A.I. Imre, A.N. Gomonai, Yu.I. Hutych, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 43, 175206 (2010).
- [2]. А.Н. Гомонай, А.И. Имре, Укр. физ. журнал. 41, 1032 (1996).
- [3]. А.Н. Гомонай, Ю.И. Гутич, Е.В. Овчаренко, А.И. Имре, Письма в ЖЭТФ 94, 456 (2011).
- [4]. Л.А. Вайнштейн, И.И. Собельман, Е.А. Юков Возбуждение атомов и уширение спектральных линий. М.: Наука. Главная редакция физикоматематической литературы, 1979.
- [5]. A.I. Imre, A.N. Gomonai, A.I. Zapesochny, J.E. Kontros, I.P. Zapesochny, O.I. Zatsarinny, Abstracts of Contributed Papers XVI ICPEAC (New-York, USA, 1989) p.876.
- [6]. Back C., Pejcev V., Ross K.J., Wilson M., J. Phys. B: At. Mol. Phys. 16, 2413 (1983).
- [7]. G.K. James, D. Rassi, K.J. Ross, M. Wilson, J. Phys. B: At. Mol. Phys. 15, 275 (1982).

ДИЭЛЕКТРОННАЯ РЕКОМБИНАЦИЯ ИОНА In⁺

А.Н. Гомонай, Ю.И. Гутич, А.И. Гомонай

88017, г. Ужгород, Институт электронной физики НАН Украины

annagomonai@rambler.ru

Диэлектронная рекомбинация (ДР) занимает особое место среди элементарных процессов при столкновениях электронов с ионами. Это связано с тем, что она затрагивает сразу несколько энергетических состояний иона. При ДР происходит захват свободного электрона в связанное состояние с одновременным возбуждением электрона остова. Образовавшееся дважды возбужденное состояние имеет два канала распада – автоионизацию, т.е. возврат системы к первоначальному состоянию, и непосредственно саму ДР, при которой электрон остова спонтанным образом, испуская фотон, возвращается в основное состояние.

Для многих ионов ДР является доминирующим рекомбинационным процессом и, следовательно, наиболее важным механизмом охлаждения в плазме. Это вызвало повышенный интерес к изучению самого процесса ДР, о чем свидетельствует появление большого числа работ как экспериментальных, так и теоретических, посвященных исследованию этого процесса.

В настоящей работе впервые наблюдалась ДР иона In^+ ($4d^{10}5s^{2}{}^1S_0$), при которой налетающий электрон захватывается ионом с образованием АИС $4d^{10}5s5p^2$ конфигурации атома In (при одновременном возбуждении валентного 5s электрона), а затем происходит радиационная стабилизация этого состояния в $4d^{10}5s^25p {}^2P^{o}_{1/2}$ состояние атома In.

Энергетическое положение и идентификация состояний $4d^{10}5s5p^2$ конфигурации взяты из работы [1]. Конфигурации $5s5p^2$ отвечает группа из восьми уровней ${}^4P_{1/2,3/2,5/2}$, ${}^2D_{3/2,5/2}$, ${}^2P_{1/2,3/2}$ и ${}^2S_{1/2}$, которые расположены



Рис.1. Схема уровней In I и In II

как ниже, так и выше первого потенциала ионизации атома. Все дублетные уровни конфигурации 5s5p² попадают в континуум, и таким образом имеют еще один канал распада – с испусканием электрона, то есть путем автоионизации. Три квартетных уровня конфигурации 5s5p² находятся ниже потенциала ионизации атома индия и являются связанными состояниями.

Нами исследованы энергетические зависимости интенсивности спектральных переходов в процессе ДР иона In⁺ согласно реакций:

$$In^{**}(4d^{10}5s^{5}p^{2})^{2}P_{3/2} \rightarrow In(4d^{10}5s^{2}5p)^{2}P_{1/2}^{o} + h\nu \ (\lambda 164.8 \text{ HM})$$

$$In^{**}(4d^{10}5s^{5}p^{2})^{2}P_{1/2} \rightarrow In(4d^{10}5s^{2}5p)^{2}P_{1/2}^{o} + h\nu \ (\lambda 167.6 \text{ HM})$$

$$In^{**}(4d^{10}5s^{5}p^{2})^{2}S_{1/2} \rightarrow In(4d^{10}5s^{2}5p)^{2}P_{1/2}^{o} + h\nu \ (\lambda 175.7 \text{ HM})$$

Эксперимент выполнен на установке с пересекающимися электронным и ионным пучками, основные узлы которой подробно описаны в [2]. Ионный источник обеспечивал стабильный пучок ионов In⁺ в основном состоянии при энергии 700 эВ с током 1.5×10⁻⁶ А. Электронная пушка формировала пучок электронов с током 5×10⁻⁵ А и энергетической неоднородностью на полувысоте кривой распределения электронов по энергии $\Delta E_{1/2}=0.4$ эВ в интервале энергий (0.8÷1.8) эВ. Точность калибровки энергетической шкалы составляла ±0.05 эВ. Спектральное разделение излучения осуществлялось вакуумным монохроматором, изготовленным по схеме Сейя-Намиока (с решеткой, обратная линейная дисперсия которой dλ/dl~1.7 нм/мм). В качестве детектора излучения использовался охлаждаемый "солнечно-слепой" фотоэлектронный умножитель ФЭУ-142. Величина отношения сигнала к фону составляла 1/5÷1/20. Среднеквадратичная ошибка относительных измерений не превышала ±20 %. Относительная спектральная чувствительность установки в области 100-200 нм определялась при энергии электронов 100 эВ, токе 4×10^{-3} А и давлении в камере столкновений ~ 10^{-5} Тор по сечениям возбуждения атомарного азота электронным ударом в соответствии с методикой, описанной в [2]. Абсолютное значение спектральной чувствительности было определено на длине волны $\lambda 158.6$ нм резонансной линии $5s5p {}^{1}P_{1}^{0} \rightarrow 5s^{2} {}^{1}S_{0}$ иона In^{+} . Эффективное сечение возбуждения электронным ударом этой линии получено путем нормировки экспериментальных данных при энергии 100 эВ на результаты теоретического полурелятивистского расчета с использованием Лос-Аламос кодов [3]. Ошибка определения абсолютных эффективных сечений исследуемых линий составляла ~50% и, в основном, определялась ошибками относительных измерений, определения относительной спектральной чувствительности и неточностью расчета.

На рис. 2 представлена энергетическая зависимость эффективного сечения ДР иона In⁺ $\sigma(E)$ в случае излучательного перехода на длине волны λ =175.7 нм, который оказался наиболее интенсивным из исследованных. Как видно, зависимость носит резонансный характер с максимумом в пороге энергии возбуждения 5s5p² ²S_{1/2} уровня (~1.3 эВ) и шириной на половине высоты, равной величине энергетической неоднородности электронов в пучке (0.4 эВ). Излучение наблюдалось в узком диапазоне энергий (~0.8 эВ). Это есть прямым подтверждением того, что АИС 5s5p² ²S_{1/2} образуется в результате резонансного процесса ДР.



Рис.2. Сечение ДР иона In⁺ (λ 175.7 нм). *Точки* – эксперимент, *сплошная линия* – аппроксимация экспериментальных измерений Гауссовским распределением с $\Delta E_{1/2}$ =0.4 эВ.

Абсолютные величины сечений ДР оказались равными ~ 10^{-16} см² и по порядку величины сравнимыми с эффективным сечением возбуждения резонансной линии $\lambda 158.6$ нм (5s5p ${}^{1}\text{P}^{o}_{1} \rightarrow 5\text{s}^{2} {}^{1}\text{S}_{0}$) иона In⁺ [4]. Это свидетельствует о большой вероятности как электронного захвата электрона в АИС 5s5p² конфигурации, так и радиационного распада этих АИС.

- [1]. M. A. Baig, I. Ahmed, J.P. Connerade, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 21, 35 (1988).
- [2]. E.V. Ovcharenko, A.I. Imre, A.N. Gomonai, Yu.I. Hutych, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 43, 175206 (2010).
- [3]. Los Alamos [http://aphysics2.lanl.gov/cgi-bin/ION/runlanl08d.pl].
- [4]. A. Gomonai, E. Ovcharenko, A. Imre and Yu. Hutych, Nucl. Instr. and Meth. in Phys. Res. B 233, 250 (2005).

РЕЛЯТИВИСТСКИЙ РАСЧЕТ ПРОЦЕССОВ ОБРАЗОВАНИЯ ВАКАНСИЙ ВО ВНУТРЕННИХ ОБОЛОЧКАХ АТОМОВ В НИЗКОЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ИОН-АТОМНЫХ СТОЛКНОВЕНИЯХ

<u>Ю.С. Кожедуб</u>¹, И.И. Тупицын¹, В.М. Шабаев¹, G. Plunien², S. Hagmann³,

Th. Stölker³

¹ 198504, Санкт-Петербург, Петродворец, Ульяновская 1, СПБГУ ² Institut für Theoretische Physik, Technische Universität Dresden,

Mommsenstrasse 13, D-01062 Dresden, Germany

³ Gesellschaft für Schwerionenforschung, Planckstrasse 1, D-64291 Darmstadt,

Germany

kozhedub@pcqnt1.phys.spbu.ru

Ранее развитый нами релятивистский метод расчета процессов перезарядки и возбуждения в низкоэнергетических ион-атомных столкновениях [1,2], оснванный на приближении активного электрона, обобщен для описания многоэлектронных процессов. Метод опирается на модель независимых частиц, в которой эффективный многочастичный гамильтониан системы приближенно заменяется суммой одночастичных операторов. Такое представление позволяется свести задачу к набору одночастичных уравнений для всех частиц системы, участвующих в столкновении. В качестве эффективных одночастичных операторов использовался гамильтониан Дирака-Кона-Шэма с корреляционно-обменным потенциалом в параметризации Педью-Цунгера. Нестационарные одночастичные уравнения решались методом связанных каналов в базисе орбиталей Дирака-Фока-Штурма, локализованных на сталкивающихся ионах (атомах). Вероятности многочастичных процессов получены в формализме инклюзивных вероятностей [3,4]. Разработанный метод применен для расчета вероятностей образования Квакансий в столкновении Ne-F⁶⁺(1s²2s) при энергиях налетающего иона 230 кэВ/а.е.м. и 530 кэВ/а.е.м. Результаты вычислений сравниваются с экспериментальными данными и данными, полученными в приближении активного электрона [1]. Вероятность образования К-вакансии также вычислена для столкновения Pb-Pb⁷⁹⁺(1s²2s). Исследована роль релятивистских эффектов.

- [1]. I.I. Tupitsyn, Y.S. Kozhedub, V.M. Shabaev, A.I. Bondarev, G.B. Deyneka,
 I.A. Maltsev, S. Hagmann, G.Plunien, and Th. Stuhlker, Phys. Rev. A 85, 032712 (2012).
- [2]. Y.S. Kozhedub, I.I. Tupitsyn, V.M. Shabaev, S. Hagmann, G.Plunien, and Th. Stöhlker, Phys. Scr., in press.
- [3]. H.J. Lüdde and R.M. Dreizler, J. Phys. B 18, 107 (1985).
- [4]. P. Kürpick, H.J. Lüdde, Comput. Phys. Commun. 75, 127 (1993).

Релятивистские расчеты вероятностей ионизации в низкоэнергетических столкновениях тяжелых ионов

А. И. Бондарев¹, Ю.С. Кожедуб¹, И. И. Тупицын¹, В. М. Шабаев¹, G. Plunien²

¹Физический факультет, Санкт-Петербургский государственный университет, Ульяновская ул., д. 1, Петродворец, 198504 Санкт-Петербург, Россия ²Institut für Theoretische Physik, Technische Universität Dresden, Mommsenstrasse 13, D-01062 Dresden, Germany

bondarev@pcqnt1.phys.spbu.ru

Столкновения многозарядных ионов позволяют исследовать динамику релятивистских и квантовоэлектродинамических эффектов в атомных процессах. Особый интерес представляет столкновение двух тяжелых ионов, суммарный заряд ядер которых превышает критическое значение $Z_c = 173$ [1]. Изучение возникающих при этом процессов дает уникальную возможность проверки квантовой электродинамики в сверхкритическом кулоновском поле. При малых межъядерных расстояниях нижний уровень объединенной квазимолекулярной системы должен погружаться в отрицательно-энергетический дираковский континуум. Если уровень не был полностью занят электронами, то такое погружение должно приводить к спонтанному рождению электрон-позитронных пар. Однако прямое экспериментальное наблюдение этого эффекта является чрезвычайно сложной задачей. Тем не менее, ожидается, что погружение уровня в нижний континуум можно обнаружить косвенным образом, посредством наблюдения других эффектов, происходящих в процессе столкновения.

В данной работе вычислены вероятности ионизации водородоподобного иона в низкоэнергетическом столкновении с нейтральным атомом. В расчетах используется приближение активного электрона, согласно которому только электрон водородоподобного иона может принимать участие в процессах возбужения и ионизации, а электроны нейтрального атома создают экранирующий потенциал [2]. Зависящая от времени волновая функция активного электрона находится путем решения нестационарного уравнения Дирака в виде разложения по волновым функциям стационарной задачи, полученными в базисе В-сплайнов с использованием метода дуального кинетического баланса [3]. Временное матричное уравнение Дирака решается сеточным методом, на каждом шаге которого используется экспоненциальный оператор эволюции [4].

- [1] Я. Б. Зельдович, В. С. Попов, УФН 105, 403 (1971).
- [2] C. D. Lin, P. Richard, Inner Shell Vacancy Production in Ion-Atom Collisions, Advances in Atomic and Molecular Physics, edited by D. Bates and B. Bederson (Academic, New York, 1981), Vol. 17, p. 275.
- [3] V. M. Shabaev, I. I. Tupitsyn, V. A. Yerokhin, G. Plunien, G. Soff, Phys. Rev. Lett. 93, 130405 (2004).
- [4] I. I. Tupitsyn, Y. S. Kozhedub, V. M. Shabaev, A. I. Bondarev, G. B. Deyneka, I. A. Maltsev, S. Hagmann, G. Plunien, and Th. Stöhlker, Phys. Rev. A 85, 032712 (2012).

Образование ионной пары и столкновительное тушение ридберговских уровней атомов щелочных металлов атомами щелочноземельных элементов Ca, Sr и Ba

А.А. Нариц^{1,2}, <u>Е.С. Мирончук</u>², В.С. Лебедев^{1,2}

 ¹ 119991, г. Москва, Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН
 ² 141700, г. Долгопрудный, Московская обл., Московский физико-технический институт (государственный университет) туроlena@yandex.ru

Исследования радиационных и столкновительных процессов с участием ридберговских атомов, а также эффектов их взаимодействия с нейтральными и заряженными частицами и внешними полями представляют интерес для ряда фундаментальных направлений атомно-молекулярной физики, квантовой оптики и квантовой информатики, для многочисленных приложений к спектроскопии и кинетике газов и плазмы, астрофизике и радиоастрономии. Особенностью столкновений ридберговских атомов с нейтральными частицами является многообразие возможных физических механизмов взаимодействия в таких системах, приводящих к различным типам неупругих и квазиупругих переходов между высоковозбужденными уровнями, а также к процессам ионизации и переноса электрона [1].

В данной работе представлены результаты расчетов и анализа поведения сечений процессов образования ионной пары и резонансного тушения

$$A(nl) + B \to \begin{cases} A^+ + B^- & (1a) \\ A(n'l') + B & (16) \end{cases}$$

ридберговских *nl*-уровней атомов Li, Rb и Cs при тепловых столкновениях с атомами щелочноземельных элементов Ca(4s²), Sr(5s²) и Ba(6s²), способными к образованию отрицательных ионов с малой энергией связи ($|\varepsilon| = 19 - 144$ мэB). Расчеты выполнены как для случая селективно возбужденных *nl*-состояний с малыми значениями орбитального углового момента ридберговского атома (*l*<<*n*), так и для состояний с большими значениями *l* = *n*-2, *n*-1. Неадиабатические переходы с ридберговского ковалентного на ионный терм квазимолекулы рассмотрены в рамках модифицированной теории Ландау-Зинера, дополненной расчетом факторов выживания аниона при его распаде в кулоновском поле положительного ионного остова (см. [2, 3]). Для расчета параметра ионно-ковалентной связи использованы полученные недавно в работе [4] точные выражения для матричных элементов перехода между ионным и ридберговскими ковалентными термами квазимолекулы, образующейся в ходе столкновения высоковозбужденного и возмущающего атомов A(nl) и В. Это дает возможность корректно включить в рассмотрение эффекты дальнодействующего (поляризационного) взаимодействия слабосвязанного электрона с возмущающим атомом щелочноземельного элемента в исследуемых процессах (1а) и (1б), а также позволяет точным образом учесть изменение волновой функции ридберговского атома в области координат электрона, определяемой характерным размером волновой функции внешнего *p*-электрона в анионе.

В результате проведенного рассмотрения наряду с резонансным характером зависимости сечений образования ионной пары (канал реакции (1а)) от главного квантового числа *n* установлена сильная зависимость результатов от орбитального момента *l* ридберговского атома. Обнаружены большие отличия в величинах $\sigma_{max}^{(i)}$ и положениях n_{max} максимумов сечений образования ионной пары для атомов Ba, Sr и Ca с различными значениями энергии сродства к электрону. Изучены зависимости сечений реакции (1а) от скорости относительного движения атомов. Для процесса резонансного тушения ридберговских уровней атома (канал реакции (1б)) так же, как и для канала реакции (1а) продемонстрирована сильная зависимость результатов для величин $\sigma_{max}^{(q)}$ и положений n_{max} максимумов сечений тушения от энергии |є| сродства щелочноземельного атома к электрону. Установлена также сильная зависимость результатов от орбитального момента *l* ридберговского атома. В частности, показано, что в случае ридберговских атомов в состояниях с большими значениями *l* ~ *n*-1 скорости процессов образования ионной пары и столкновительного тушения значительно ниже, чем для nl-уровней с $l \ll n$. Так, при столкновениях Rb(nl)+Sr значения сечений образования ионной пары в окрестности максимумов $n \approx n_{\text{max}}$ отличаются в 22 раза для состояний с l=0 и l=n-1.

Установлена также относительная роль процессов резонансного тушения и образования ионной пары в опустошении ридберговских состояний. Показано, что в области относительно невысоких значений *n* преобладает вклад резонансного тушения. В то же время, при увеличении главного квантового числа определяющий вклад в опустошение ридберговских уровней вносит процесс образова-

235

ния ионной пары (рис. 1). Конкретные значения n, в которых доминирующим является тот или иной канал реакции (1) зависят от энергии связи щелочноземельного аниона, орбитального момента l и величины δ_l квантового дефекта nl-уровня.



Рис. 1. Относительные вклады процессов резонансного тушения, $\sigma_{ns}^{(q)} / (\sigma_{ns}^{(i)} + \sigma_{ns}^{(q)})$, (белые значки) и образования ионной пары, $\sigma_{ns}^{(i)} / (\sigma_{ns}^{(i)} + \sigma_{ns}^{(q)})$, (чёрные значки) в полное сечение реакции (1) для столкновений атомов Rb(*ns*) с атомами Ca(4s²), Sr(5s²), Ba(6s²). Относительная скорость столкновения атомов: $v=10^{-3}$ ат. ед.

В работе было проведено сравнение результатов по образованию ионной пары с имеющимися экспериментальными данными для случая столкновения атомов Ne(*nl*)+Ca. Результаты для сечений резонансного тушения ридберговских уровней сравнивались также с сечениями, рассчитанными в рамках традиционной модели квазиупругих и неупругих переходов, обусловленных рассеянием слабосвязанного электрона на возмущающих атомах (см., например, [3]). Для парциальных фаз рассеяния ультрамедленных электронов на атомах Ca, Sr и Ba при этом использовались результаты численных расчетов [5] из первых принципов.

- [1]. V.S. Lebedev, *Collision Processes Involving Highly Excited Atoms and Neutral Particles* (Cambridge Scientific Publishers, Cambridge, 2004), 304 pages.
- [2]. I.I. Fabrikant, J. Phys. B 31, 2921 (1998).
- [3]. I.I. Fabrikant, V.S. Lebedev, J. Phys. B 33, 1521 (2000).
- [4]. V.S. Lebedev, A.A. Narits, Springer Ser. At. Opt. and Plasma Phys. 68, 211 (2012).
- [5]. K. Bartschat, H.R. Sadeghpour, J. Phys. B 36, L9 (2003).

НОВЫЕ ВОЗМОЖНОСТИ ДЛЯ РЕНТГЕНОВСКОЙ И ВУФ СПЕКТРОСКОПИИ ПЛАЗМЫ

А.П. Шевелько

ФГБУН Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН, Ленинский пр. 53, Москва, 119991, Россия. <u>shevelko@rambler.ru</u>

В работе рассматриваются несколько аспектов, которые могут существенно расширить возможности для рентгеновской и ВУФ спектроскопии плазмы:

1) Новый метод сравнения для диагностики плазмы тяжелых элементов;

2) Использование новых многослойных структур в фокусирующих спектрометрах;

3) Возможность варьирования параметрами плазмы при взаимодействии лазерной плазмы с поверхностью твердого тела.

Рентгеновские спектры плазмы тяжелых элементов (элементов с большим атомным весом A_z) обычно имеют сложную структуру и содержат огромное количество спектральных линий, принадлежащих ионам с различной кратностью ионизации. Переналожение множества линий в спектре приводит к появлению квазиконтинуума. Это значительно затрудняет проведение спектроскопической диагностики такой плазмы. Однако именно эти спектры зачастую представляют огромный интерес для научных исследований, например, спектры Мо и W в плазме токамаков (материал диверторов), спектры W в плазме мощных Z-пинчей проволочных сборок), спектры Sn в плазменных источниках, (материал предназначенных проекционной ΒУΦ литографии. Для измерения для температуры плазмы тяжелых элементов предложен новый метод [1], который основан на сравнении исследуемых спектров co спектрами хорошо диагностируемой лазерной плазмы. Метод успешно использовался для диагностики плазмы Fe, образующейся в конечном анод-катодном промежутке сильноточного импульсного генератора "Z-Machine" (Национальная лаборатория Сандиа, США) [2]. Рассмотрены условия и границы применимости метода. Для применения метода к диагностике плазмы вольфрама проведен детальный анализ спектров лазерной плазмы, который включал в себя определение особенностей в

237

спектрах и измерение температуры электронов. Получены количественные данные для определения температуры плазмы вольфрама по относительным интенсивностям спектральных пиков в области спектра $\lambda=3\div6$ нм. Приводятся предварительные результаты по диагностике плазмы мощных Z-пинчей, основанных на многопроволочных W сборках (установка Ангара-5-1) [3].

Разработаны светосильные спектрометры с цилиндрической и конической геометрией на основе новых фокусирующих многослойных структур (МС) [4-6]. Использование фокусирующих МС в качестве дисперсионных элементов с различными межплоскостными расстояниями (d = 1 - 15 нм) позволяет проводить исследования как в мягкой рентгеновской, так и в ВУФ областях спектра, где отсутствуют естественные кристаллы. Так, представляет большой интерес проведение исследований источников излучения в спектральной области "окна воды" (λ =2,3-4,4 нм) и источников для прозрачности проекционной коротковолновой нанолитографии (λ = 6,6 и 13,5 нм). При умеренном спектральном разрешении ($\lambda/\delta\lambda \sim 100$) спектрометры на основе MC благодаря своим фокусирующим свойствам обладают очень большой эффективностью, что особенно важно для диагностики слабоинтенсивных источников, например, фемтосекундной лазерной плазмы. Применение новых спектрометров позволит измерять температуру электронов в диапазоне Te ~ 20 -100 эВ, реализуемом в плазменных установках для проекционной ВУФ литографии и микроскопии. К преимуществу модификации спектрометра с коническим кристаллом относится возможность установки прибора на большом и заранее заданном расстоянии от источника (~10 см – 1 м), что позволяет использовать спектрометр для диагностики и мониторинга плазмы в установках для проекционной ЭУФ нанолитографии, а также для проведения исследований на мощных плазменных установках: Z-пинчей, плазменного фокуса и лазерной плазмы для инерционного термоядерного синтеза.

Рассматриваются различные аспекты взаимодействия лазерной плазмы, содержащей многозарядные ионы, с поверхностью твердого тела (преградой). Экспериментально показано, что при этом взаимодействии возникает интенсивное излучение в линиях многозарядных ионов. Исследованы динамика взаимодействия (пространственно-временная структура излучения в видимом и рентгеновском

238

диапазонах). спектры многозарядных ионов, выполнена диагностика приповерхностной плазмы. Показано, что с помощью преграды, устанавливаемой на пути разлета плазмы, можно эффективно и целенаправленно изменять параметры плазмы. Ответственными за это излучение могут быть как процессы возбуждения (малые расстояния лазерная мишень – преграда), так и трехчастичная рекомбинация (большие расстояния лазерная мишень – преграда). В последнем случае реализуется уникальная ситуация, когда многозарядные ионы, зарядовый состав (Z~10) которых формируется в горячем ядре (Te~0,5 ÷ 1 кэВ) лазерной плазмы, излучают в плотной { $N_e = (1 \div 4) \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$ } и холодной { $T_e = 50-100 \text{ эB}$ } плазме приповерхностного слоя. Этот новый интенсивный источник рентгеновского излучения обладает новыми радиационными характеристиками и новым видом рентгеновского спектра. Изучение этого источника является интересным как для фундаментальной физики, так и для многочисленных практических приложений. Особый интерес представляет взаимодействие пикосекундной лазерной плазмы с преградами. Рассматриваются условия прямого взаимодействия многозарядных ионов с поверхностью, приводящего к процессам перезарядки и образованию полых ионов, а также условия образования неидеальной плазмы в приповерхностном слое.

Работа поддержана грантом Программы целевых расходов Президиума РАН "Поддержка инноваций и разработок" и грантом РФФИ № 12-02-00369а.

- [1]. Шевелько А.П. Квантовая электроника 41, 726 (2011).
- [2]. Шевелько А.П., Д.Е. Блисс, Е.Д. Казаков, и др. Физика плазмы 34, 1021 (2008).
- [3]. Александров В.В., Грабовский Е.В., Грицук А.Н., и др. Материалы XXXIX Международной (Звенигородской) конференции по физике плазмы и УТС, 2012, С. И-08.
- [4]. Ю.Э. Бороздин, Е.Д. Казаков, В.И. Лучин, и др. *Письма в ЖЭТФ* 87, 33 (2008).
- [5]. М.С. Бибишкин, Е.Д. Казаков, В.И. Лучин, и др. *Квантовая электроника* **38**, 169 (2008).
- [6]. А.Я. Лопатин, В.И. Лучин, Н.Н. Салащенко, и др. ЖТФ 80, 105 (2010).

НАУЧНОЕ ОБОРУДОВАНИЕ ДЛЯ РЕНТГЕНО-СПЕКТРАЛЬНОЙ ДИАГНОСТИКИ ПЛАЗМЫ

А.П. Шевелько

РнД-ИСАН, РнД-ЭКСМЕТР; ФГБУН Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН, Ленинский пр. 53, Москва, 119991, Россия. <u>shevelko@rambler.ru</u>

В настоящее время при исследовании плазмы методами рентгеновской и ВУФ спектроскопии особый интерес представляет проведение количественных (абсолютных) измерений интенсивности и выхода излучения на различных длинах волн, а также регистрация спектров с временным и пространственным разрешением. Это требует использования специальных схем спектрометров и детекторов излучения. Для исследования плазменных источников излучения в спектральном диапазоне $\lambda = 0,1 - 100$ нм разработаны рентгеновские кристаллические фокусирующие спектрометры, различные модификации компактных многоцелевых дифракционных спектрометров скользящего падения, различные модификации ПЗС и МКП детекторов [1].

Фокусирующая геометрия спектрометра с цилиндрическим кристаллом (схема Гамоша, Рис. 1) приводит к очень высокой светосиле в широком диапазоне спектра: эффективность спектрометра может превышать эффективность схемы с плоским кристаллом в 10^2 - 10^3 раз [2, 3]. В схеме Гамоша спектр формируется на оси спектрометра, что позволяет использовать ПЗС линейку в качестве детектора излучения [3]. Большая длина этого детектора (в нашем случае 30 мм) дает возможность регистрировать спектр в широком диапазоне длин волн. Спектрометр использовался для проведения абсолютных рентгеновских спектральных измерений и для определения параметров лазерной плазмы [2, 3], в т.ч. фемтосекундной лазерной плазмы [4]. Этот компактный прибор очень эффективен при исследовании источников рентгеновского излучения с малой интенсивностью и использоваться приложениях может в многочисленных практических (рентгеновский флуоресцентный анализ. EXAFS спектроскопия, И др.). Использование в этом спектрометре в качестве дисперсионных элементов фокусирующих многослойных структур с различным межплоскостным расстоянием d=1-13 нм позволяет проводить исследования как в мягкой

240

рентгеновской, так и в ВУФ областях спектра [5]. При умеренном спектральном разрешении $\lambda/\delta\lambda \sim 100$ такие спектрометры благодаря своим фокусирующим ПЗС свойствам И применению новых детекторов обладают большой эффективностью, которая на ~ 3÷4 порядка величины превышает эффективность традиционных спектрометров скользящего падения. Применение таких спектрометров позволит измерять температуру электронов в диапазоне T_e<100 эВ [6], реализуемом, например, в плазменных установках для проекционной ВУФ литографии и микроскопии. В настоящее время разработаны спектрометры с коническими кристаллами. Наряду с фокусирующими свойствами, такие спектрометры могут устанавливаться на большом, заранее заданном расстоянии от источника излучения.



В спектрометрах скользящего падения (GIS) используется внероуландовская спектры регистрируются схема регистрации спектров: на плоскости, перпендикулярной к дифрагируемым лучам. Настройка спектрометра на различные длины волн осуществляется изменением расстояния между решеткой и плоскостью регистрации. В улучшенном варианте спектрометра (модификация GIMS) сканирование длин волн осуществляется прецизионным поворотом дифракционной решетки [7]. К преимуществам используемых схем относятся простота конструкции, отсутствие необходимости сложной юстировки элементов на круге Роуланда и высокая светосила на центральной длине волны λ_0 . В спектрометрах GIS используются сменные сферические дифракционные решетки, спектральный диапазон регистрации составляет величину $\lambda = 2 - 80$ нм. В качестве детекторов используется ПЗС линейка, фотопленка или детектор на основе микроканальных пластин (МКП). В зависимости от установки в вакуумную камеру (внутри и вне вакуумной камеры) и высоты спектров (от 20 мм до 40 мм) используются три

модификации спектрографов: GIS-1, GIS-2, GIS-3 (**Рис.2**). Большая высота спектров позволяет использовать МКП детекторы для записи спектров с пространственным и временным разрешением [1, 8]. Спектрометры использовались для регистрации спектров лазерной плазмы, используемой для проекционной ВУФ литографии [9], и для записи спектров плазмы капиллярных разрядов [7].

Разработанные спектрометры и детекторы излучения позволяют проводить спектральные исследования с пространственным и временным разрешением. Уникальной чертой этого универсального оборудования является возможность его абсолютной калибровки по чувствительности, что позволяет проводить метрологию различных плазменных источников излучения. Для калибровки элементов спектрометров и детекторов излучения применяются специальные методы, а также рефлектометр на основе капиллярного разряда и монохроматора скользящего падения [7]. Эти калиброванные приборы использовались для диагностики и абсолютных измерений интенсивности излучения лазерной плазмы [2-4, 9], плазмы Z- пинчей, включая плазму мощных Z-пинчей [10,11], плазмы капиллярного разряда [7], ЭУФ источников излучения, используемых в проекционной литографии [9].

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 12-02-00369а.

1. www.rnd-isan.ru

- 2. A.P. Shevelko, Proc. SPIE 3406, 91(1998).
- 3. A.P.Shevelko, Yu.S.Kasyanov, O.F.Yakushev, et al. Rev. Sci. Instr. 73, 3458 (2002).
- 4. М.Б. Агранат, Н.Е. Андреев, С.И. Ашитков, и др., *Письма ЖЭТФ* 83, 80 (2006).
- 5. А.Я. Лопатин, В.И. Лучин, Н.Н. Салащенко, и др. ЖТФ 80, 105 (2010).
- 6. Ю.Э. Бороздин, Е.Д. Казаков, В.И. Лучин, и др. *Письма в ЖЭТФ* 87, 33 (2008).
- 7. И.И.Собельман, А.П.Шевелько, О.Ф.Якушев, и др., Квант. электр. 33, 3 (2003).
- 8. P.S. Antsiferov, L.A. Dorokhin, K.N. Koshelev, J. Appl. Phys. 107, 103306 (2010).
- 9. A.P. Shevelko, L.A. Shmaenok, S.S. Churilov, et al., Physica Scripta 57, 276 (1998).
- 10. Шевелько А.П., Д.Е. Блисс, Е.Д. Казаков, и др. Физика плазмы 34, 1021 (2008).
- 11. К.Н.Митрофанов, Е.В.Грабовский, А.Н.Грицук, и др. Физ. плазмы 39, 51 (2013).

ТЕОРИЯ КЕЛДЫША ДЛЯ ТУННЕЛЬНОЙ ИОНИЗАЦИИ АТОМА МАЛОПЕРИОДНЫМ ЛАЗЕРНЫМ ИМПУЛЬСОМ

Б.А. Зон, А.С. Корнев, И.М. Семилетов

394006, г. Воронеж, Воронежский государственный университет someone127@yandex.ru

Предложена простая модификация теории Келдыша для ионизации атома в поле малопериодного лазерного импульса. В соответствии с нашей теорией [1], мгновенная скорость туннельной ионизации из основного состояния нейтрального атома A в *j*-е возбужденное состояние иона A^+ под действием прямоугольного лазерного импульса дается выражением:

$$W_{i}(F,t) = |Q_{i}|^{2} W_{\text{S-Ch}}(E_{i} + \Delta_{i}, F | \sin \omega t |).$$
(1)

Здесь F — амплитуда лазерного поля, ω — его частота, $W_{S-Ch}(E_i, F)$ — скорость туннельной ионизации атома в постоянном поле F в соответствии с формулой Смирнова – Чибисова, E_i — потенциал ионизации нейтрального атома. Возбуждение ионного остова (неупругое туннелирование) учитывается введением энергии возбуждения Δ_j , а также интеграла перекрытия Q_j между волновыми функциями остова в начальном и конечном состояниях.

Результаты, полученные для ионной заселенности в момент времени t на основе формулы (1), хорошо согласуются с результатами численного интегрирования зависящего от времени уравнения Шрёдингера в работе [2] для ионов Ne⁺, находящихся как в основном (J = 3/2), так и в первом возбужденном состоянии (J = 3/2). Это подтверждает модель Карлсона – Зона [3] для неупругого туннельного эффекта, который является одним из важнейших многочастичных эффектов в теории туннельной ионизации.

Непосредственное использование модифицированной теории Келдыша для описания ионизации нейтрального атома ксенона не позволяет воспроизвести результаты, полученные в расчетах *ab initio* [2] даже качественно. Тем не менее, дополнительный учет штарковского сдвига энергии валентного электрона позволяет приблизить наши результаты к полученным в [2]. Такое согласие может быть достигнуто только при учете и поляризуемости, и гиперполяризуемости нейтрального атома ксенона. Численные результаты представлены на рис. 1.



Рис. 1. Зависимость заселенности дублетных термов ионов Ne⁺, Xe⁺ от времени. Сплошные линии соответствуют результатам модифицированной теории Келдыша [1], штриховые — расчетам *ab initio* [2]. Пунктирная линия показывает напряженность электрического поля в импульсе. Интенсивность излучения 2.1×10^{15} BT/cm² (для Ne⁺) и 2.8×10^{14} BT/cm² (для Xe⁺), оптический период 2.67 фс ($\lambda = 800$ нм).

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 11-02-00170).

- [1]. A.S. Kornev and B.A. Zon, Phys. Rev. A 85, 035402 (2012).
- [2]. N. Rohringer and R. Santra, Phys. Rev. A 79, 053402 (2009).
- [3]. Т.А. Carlson, Phys. Rev. 156, 147 (1967); Б.А. Зон, ЖЭТФ 118, 1041 (2000).

НАМАГНИЧЕНИЕ АНИЗОТРОПНОЙ СРЕДЫ ЛИНЕЙНО ПОЛЯРИЗОВАННЫМ СВЕТОВЫМ ИМПУЛЬСОМ

Н. Л. Манаков, С. С. Мармо, М. В. Фролов

Воронежский государственный университет sergey.marmo@gmail.com

Обратный эффект Фарадея состоит в намагничении среды распространяющейся в ней электромагнитной волной. Так, монохроматическая волна с электрическим вектором

$$\mathbf{F}(\mathbf{r},t) = F \operatorname{Re} \left\{ \mathbf{e} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r}-\omega t)} \right\}$$
(1)

(F-амплитуда, $\omega-$ частота,
к-волновой вектор, е-единичный комплексный вектор поляризации волны) наводит в единице объема среды магнитный момент

$$\boldsymbol{\mu} = \xi \chi(\omega) F^2 \hat{\mathbf{k}},\tag{2}$$

где $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/k$ — единичный вектор в направлении распространения волны, $\xi = i(\hat{\mathbf{k}}[\mathbf{ee}^*])$ — степень циркулярной поляризации волны, $\chi(\omega)$ — восприимчивость, описывающая эффект Фарадея (постоянная Верде). Как видно из (2), эффект намагничения исчезает в линейно поляризованном поле: при $\xi = 0$ вектор намагничения $\boldsymbol{\mu} = 0$. С точки зрения пространственно-временной симметрии, анализ которой проведен в [1], обращение ξ в нуль в линейном поле означает, что в задаче исчезает псевдоскалярный параметр, а из оставшихся параметров невозможно скомбинировать *T*-нечётный аксиальный вектор, каким является вектор намагничения $\boldsymbol{\mu}$ (хотя в задаче имеется *T*-нечётный вектор **k**). Однако, как показано в [1], намагничение в линейном поле становится возможным, если рассматриваются анизотропные среды и учитывается немонохроматичность световой волны. Например, если среда, через которую распространяется линейно поляризованный световой импульс с огибающей F = F(t), помещена в постоянное электрическое поле с напряжённостью \mathbf{F}_0 (задающей направление оси анизотропии), то, как показывает феноменологический анализ, в среде на-

водится магнитный момент

$$\boldsymbol{\mu} = \lambda \eta F^2(\mathbf{F}_0 \mathbf{e})[\mathbf{F}_0 \mathbf{e}],\tag{3}$$

где крутизна огибающей светового импульса $\lambda = \frac{1}{F} \frac{dF}{dt}$ является *T*-нечётным параметром (точнее, выражение (3) определяет медленно — как $\lambda(t)$ — меняющуюся компоненту наводимого магнитного момента). Действительно, выражение (3) для намагничения удовлетворяет всем требованиям пространственновременной симметрии. Таким образом, анизотропная среда намагничивается линейно поляризованным световым импульсом.

Механизм, приводящий к наведению медленно меняющегося магнитного момента при прохождении светового импульса через среду, по своей природе классичен и может быть выяснен на простейшей модели осциллятора. Считая, что постоянное поле \mathbf{F}_0 наводит анизотропию в среде из осцилляторов, так что при колебаниях вдоль \mathbf{F}_0 осцилляторы имеют частоту ω_{\parallel} , а при колебаниях поперек \mathbf{F}_0 — частоту ω_{\perp} , и решая классические уравнения движения, можно найти магнитный момент $\boldsymbol{\mu} = \frac{e}{2c} [\mathbf{rv}]$ для световых импульсов различной формы. Например, в случае воздействия на среду амплитудно-модулированной волны $\mathbf{F} \cos \omega t = \mathcal{F} \cos \Omega t \cos \omega t \ C \ \Omega \ll \omega$, наведенный магнитный момент, в соответствии с феноменологическим результатом (3), будет иметь составляющую на удвоенной частоте модуляции:

$$\boldsymbol{\mu} = \lambda \eta(\boldsymbol{\nu} \mathbf{F})[\boldsymbol{\nu} \mathbf{F}], \tag{4}$$

где $\lambda = \lambda(t) = F^{-1} \frac{dF}{dt} = -\Omega \operatorname{tg} \Omega t$, $\boldsymbol{\nu} = \mathbf{F}_0 / F_0$, $\eta = \eta(\omega, \Omega, \omega_{\parallel}, \omega_{\perp})$. Полученный результат показывает, что намагничение среды в нестационарном поле дает принципиальную возможность генерировать излучение в диапазоне частот порядка частоты модуляции.

В работе также проведен квантовый расчет эффекта намагничения анизотропной среды сильным линейно поляризованным световым импульсом для модели потенциала нулевого радиуса.

^[1] Н.Л. Манаков, А.Г. Файнштейн, ЖЭТФ 87 1562 (1984).

СПЕКТРОСКОПИЧЕСКИЕ ПРОЯВЛЕНИЯ ЭФФЕКТА ААРОНОВА-БОМА

<u>П.А. Мелешенко</u>¹, Hang T.T. Nguyen², А.Ф. Клинских¹ ¹ 394006, г. Воронеж, Воронежский государственный университет ² Vietnam National University Ho Chi Minh City, 268 Ly Thuong Kiet Street, District 10, Ho Chi Minh City, Vietnam

melechp@yandex.ru

Одним из интересных эффектов, имеющих двумерную природу, является эффект Ааронова-Бома [1,2], исследования которого сохраняют свою актуальность на протяжении уже более пятидесяти лет, о чем свидетельствует обширный список литературы по данному вопросу. Суть данного эффекта состоит в том факте, что электромагнитное поле, сосредоточенное в области недоступной для заряженной частицы, тем не менее, влияет на ее квантовое состояние. В случае свободного двумерного электрона соответствующее влияние определяет рассеяние, амплитуда которого была впервые получена в [1]. В случае систем обладающих дискретным спектром присутствие потока Ааронова-Бома приводит к перестройке спектра [3], и, как следствие, к изменению спектроскопических характеристик таких систем.

В данной работе представлены численные результаты для сил осцилляторов переходов между состояниями дискретного спектра, а также поляризуемости основного состояния электрона в двумерном кулоновском потенциале в присутствие потока Ааронова-Бома.

Уравнение Шредингера для комбинации двумерного кулоновского потенциала и потока Ааронова-Бома имеет вид:

$$\left[\frac{1}{M}\left(-i\hbar\nabla -\frac{e}{c}\vec{A}_{AB}\right)^{2} + \frac{\beta}{\sqrt{x^{2}+y^{2}}} - E\right]\psi(x,y) = 0, \qquad (1)$$

где векторный потенциал \tilde{A}_{AB} определен следующим образом:

$$\vec{A}_{AB} = \frac{\Phi}{2\pi r} \vec{e}_{\theta}$$

Здесь *M* - масса электрона, $\beta = \pm e^2$, *e* - заряд электрона, Φ – поток Ааронова-Бома. Как показано в [3] уравнение (1) может быть решено точно. С использованием этого точного решения, а также найденного спектра дискретных состояний могут быть рассчитаны такие важные спектроскопические характеристики, как силы осцилляторов переходов (определяющие интенсивности спектральных линий) и динамическая поляризуемость связанных состояний (которая определяет частотную зависимость диэлектрической проницаемости и коэффициента преломления) в рассматриваемой системе.

На рис. 1 представлены численные результаты для сил осцилляторов переходов как функций безразмерного потока Ааронова-Бома *ξ* (в единицах кванта магнитного потока).



Рис.1 Зависимость силы осцилляторов переходов от безразмерного потока Ааронова-Бома ξ . (сплошные линии – переход $|10\rangle \rightarrow |n1\rangle$, пунктирные линии – переход $|n1\rangle \rightarrow |10\rangle$; тонкие линии – n = 2, жирные линии – n = 3).

Из представленных результатов видно, что сила осциллятора перехода (а вместе с ней и интенсивность спектральной линии) может обращаться в нуль при определенных значениях потока Ааронова-Бома. Данный факт (именно, исчезновение спектральной линии) может рассматриваться как наблюдаемое проявление эффекта Ааронова-Бома в рассматриваемой системе. Следует отметить, что в основном эффект Ааронова-Бома проявляется в различных интерференционных экспериментах. В представленном случае имеет место спектроскопическое проявление эффекта Ааронова-Бома.

На рис.2 представлены зависимость динамической поляризуемости основного состояния электрона в рассматриваемой системе (используется атомная система единиц). В частности, зависимость динамической поляризуемости от энер-

248

гии фотона w (фактически, частотная зависимость), а также зависимость от величины безразмерного потока ξ .



Рис.2 Динамическая поляризуемость основного состояния электрона в рассматриваемой системе (левая картинка – зависимость от энергии фотона внешнего поля *w* (полые кружки – *ξ* = 0, сплошные кружки – *ξ* = 0.1); правая картинка - зависимость от безразмерного потока Ааронова-Бома *ξ* (полые кружки – *w* = 1 at.un., сплошные кружки – *w* = 1.5 at.un.)).

Положения резонансов на данном графике отвечают энергиям перехода электрона из основного состояния в возбужденные (на правой картинке, резонансы также отвечают переходам электрона в возбужденные состояния, однако в данном случае частота электромагнитной волны является фиксированной, а изменяется только величина магнитного потока). Отметим, кроме того, «сильную» зависимость значений динамической поляризуемости от величины потока Ааронова-Бома (данный факт более отчетливо виден из правой картинки, где значения динамической поляризуемости меняются на порядок при малом изменении потока). Таким образом, можно сделать вывод, что в представленной системе поток Ааронова-Бома может выступать в качестве управляющего параметра для величины динамической поляризуемости при фиксированном значении частоты внешнего поля.

[1]. Y. Aharonov and D. Bohm, Phys. Rev. 115, 485 (1959).

[2]. S. Olariu and I.I. Popescu, Rev. Mod. Phys. 57, 339 (1985).

[3]. H.T.T. Nguyen, P.A. Meleshenko, A.V. Dolgikh and A.F. Klinskikh, Eur. Phys. J. D 62, 361 (2011).

ГЕНЕРАЦИЯ ВЫСШИХ ГАРМОНИК В ДВУХЧАСТОТНОМ ПОЛЕ: ПРИЛОЖЕНИЕ К АТОМНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

М.В. Фролов¹, Н.Л. Манаков¹, <u>Т.С. Саранцева</u>¹, А.F. Starace² ¹ 394006, г. Воронеж, Воронежский государственный университет ² The University of Nebraska, Lincoln, Nebraska 685888-0111, USA

Методы спектроскопии внешних атомных и молекулярных оболочек, основанные на анализе спектров генерации высших гармоник (ГВГ), в последнее время вызывают значительный интерес. Идея указанных методов состоит в том, что выход высших гармоник пропорционален сечению фоторекомбинации (СФР) во внешнюю атомную оболочку [которое связано с сечением фотоионизации (СФИ) принципом детального равновесия] и это позволяет использовать спектры ГВГ для извлечения энергетической зависимости СФИ для невозмущенного лазерным полем атома или молекулы. Для случая линейной поляризации лазерного поля возможность факторизации вероятности ГВГ в виде произведения СФР и множителя, слабо зависящего от вида атомной мишени (лазерного фактора), подтверждается как численно на основе точного решения нестационарного уравнения Шредингера [1], так и теоретически на основе использования точно решаемых моделей [2,3]. В этом случае вероятность ГВГ пропорциональна дифференциальному СФР ($\sigma(E, 0^{\circ})$), которое описывает излучение жесткого фотона, линейно поляризованного в направлении импульса налетающего электрона. [См. также работу [4], в которой аналогичный результат был получен для случая двухчастотного лазерного поля, компоненты которого линейно поляризованы в одном направлении]. В результате, эксперименты по ГВГ в линейно поляризованном поле не позволяют извлекать из спектров ГВГ информацию о *двух* независимых параметрах, определяющих параметризацию дифференциального СФР с излучением линейно поляризованного фотона, вектор поляризации которого составляет угол α с импульсом налетающего электрона:

$$\sigma(E,\alpha) = \frac{\sigma_0}{4\pi} \left[1 + \beta \frac{(3\cos^2 \alpha - 1)}{2}\right],\tag{1}$$

где σ_0 — полное СФР, а β — параметр асимметрии (β = 2 при рекомбинации электрона в s-оболочку).

В недавней работе [5] было показано, что использование эллиптически поляризованного поля в экспериментах по ГВГ позволяет реализовать схему «полного эксперимента» по измерению как полного СФР σ_0 , так и параметра асиммет-
рии β . В настоящей работе мы предлагаем альтернативный метод измерения параметра β , основанный на использовании двухчастотного лазерного поля, компоненты которого линейно поляризованы в ортогональных направлениях: $\mathbf{F}(t)=\mathbf{F}_1\cos(\omega t)\mathbf{e}_x + \mathbf{F}_2\cos(2\omega t+\phi)\mathbf{e}_y$. В таком поле спектр ГВГ содержит как нечетные, так и четные гармоники, выходы которых для случая валентного рэлектрона при слабой напряженности поля второй гармоники могут быть параметризованы в виде:

$$R_o \approx W^o \sigma(E,0^\circ), \qquad R_e \approx W^e \sigma(E,90^\circ),$$
 (2)

где $R_o(R_e)$ и $W^o(W^e)$ — вероятность ГВГ и лазерный фактор для нечетных (четных) гармоник. Измеряя отношение интенсивностей нечетных и четных гармоник R_e/R_o и вычисляя отношение $\mathcal{G} \equiv W^o R_e/W^e R_o = \sigma(E,90^\circ)/\sigma(E,0^\circ)$, можно получить значения σ_0 и β :

$$\beta = \frac{(1-9)}{(9+1/2)} , \qquad \sigma_0 = \frac{4\pi\sigma(E,0^\circ)}{1+\beta} = \frac{4\pi R_o}{(1+\beta)W^o} . \tag{3}$$

По сравнению со случаем эллиптически поляризованного лазерного поля в двухчастотном поле с ортогональной геометрией имеется дополнительный параметр φ (фазовый сдвиг между основным полем и его второй гармоникой). Его варьирование приводит к существенной модификации отношения интенсивностей четных и нечетных гармоник, что позволяет выбрать параметры двухчастотного лазерного поля, минимизирующие ошибку при извлечении σ_0 и β .

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ № 12-02-12101-офи_м, № 13-02-00420-а и гранта Министерства образования и науки РФ (госконтракт № 14.В37.21.1937).

- [1] T. Morishita, A.-T. Le, Z. Chen, and C. D. Lin, Phys. Rev. Lett. 100, 013903 (2008).
- [2] M.V. Frolov, N.L. Manakov, T.S. Sarantseva, and A.F. Starace, J. Phys. B 42, 035601 (2009).
- [3] M.V. Frolov, N.L. Manakov, T.S. Sarantseva, and A.F. Starace, Phys. Rev. A 83, 043416 (2011).
- [4] M.V. Frolov, N.L. Manakov, A.A. Silaev, and N.V. Vvedenskii, Phys. Rev. A 81, 063407 (2010).
- [5] M.V. Frolov, N.L. Manakov, T.S. Sarantseva, and A.F. Starace, Phys. Rev. A 86, 063406 (2012).

ИОНИЗАЦИЯ АТОМОВ В СИЛЬНОМ ЛАЗЕРНОМ ПОЛЕ КОРОТКОЙ ДЛИТЕЛЬНОСТИ

<u>Д.В. Князева¹</u>, Н.Л. Манаков¹, М.В. Фролов¹, Liang-You Peng², Ji-Wei Geng², A.F. Starace³

¹Воронежский государственный университет, Воронеж 394006, Россия ² State Key Laboratory for Mesoscopic Physics and Department of Physics, Peking University, Beijing 100871, China

³ The University of Nebraska, Lincoln, Nebraska 685888-0111, USA

knazeva_daria@mail.ru

В последние годы для интерпретации экспериментов широко используется установленная на основе численного анализа уравнения Шредингера эмпирическая параметризация вероятностей основных процессов в сильном поле – генерация высших гармоник, надпороговая ионизация [1]. Эта параметризация состоит в факторизации вероятности нелинейного процесса в виде произведения двух сомножителей: электронного волнового пакета (ЭВП), описывающего движение свободного электрона в сильном лазерном поле и слабо зависящего от свойств атома или молекулы, и параметра, целиком зависящего от электронной структуры конкретного атома или молекулы (например, сечение упругого рассеяния электрона на атомном остове в случае надпороговой ионизации (НПИ)). Должное теоретическое обоснование указанной параметризации и границ ее применимости было дано в работах [2-5] на основе точно решаемой квантовой модели взаимодействия связанного электрона с сильным световым полем [6,7]. Существенной особенностью результатов, полученных в [2-5], является их простой аналитический вид, позволяющий не только достаточно точно оценивать вероятности нелинейных процессов в сильном лазерном поле, но и предсказать ряд новых особенностей во взаимодействии сильного лазерного поля с атомными системами, например, проявление многоэлектронной динамики в спектрах генерации высших гармоник [3].

В настоящей работе мы развили аналитический подход для описания высокоэнергетической части спектра НПИ атома, взаимодействующего с мощным лазерным импульсом короткой длительности. Основная идея этого подхода состоит в следующем: вначале рассматривается вспомогательная задача о взаимодействии атомной системы с периодической последовательностью коротких импульсов с длительностью τ , следующих друг за другом через интервал T. Для описания взаимодействия периодической последовательности коротких лазерных импульсов с атомной системой используется формализм квазитационарных квазиэнергетических состояний, в рамках которого возможно самосогласовано определить амплитуду n – фотонной ионизации атомной системы в световом поле с частотой $2\pi/T$. Переход к одиночному лазерному импульсу осуществляется предельным переходом $T \rightarrow \infty$ в известном выражении для n – фотонной ионизации (Γ), определяемой квадратом модуля амплитуды НПИ [5].



Рис. 1 Спектр надпороговой ионизации атома гелия, помещенного в лазерное поле с интенсивностью $I = 2 \times 10^{14}$ BT/см², $\hbar \omega = 0.83$ эВ и длительностью 30 фсек. Огибающая лазерного импульса sin², относительная фаза в импульсе равна нулю. Красные линии –аналитическая теория, сини линии –результаты численного интегрирования уравнения Шредингера. (а) Спектр надпороговой ионизации для фотоэлектронов вылетающих под углом Θ =0 градусов к вектору поляризации лазерного импульса. (b) Детали спектра надпороговой ионизации на панели (a) в интервале энергий 12.5ат.е.-13.5 ат.е. (c) Тоже, что и на панели (a), но для угла Θ =180 градусов.

В настоящей работе, в рамках метода эффективного радиуса, в квазиклассическом приближении получены явные аналитические выражения для вероятности фотоотрыва слабосвязанного электрона, взаимодействующего с сильным световым импульсом длительностью в несколько оптических периодов. Полученное выражение может быть выражено через вероятность туннельной ионизации, функцию Эйри и амплитуду рассеяния. Прозрачный физический смысл факторов, определяющих вероятность фотоотрыва, позволяет обобщить результаты метода эффективного радиуса на случай нейтральных атомных систем путем замены вероятности туннельной ионизации и амплитуды рассеяния на соответствующие атомные аналоги. Для проверки точности указанного обобщения мы приводим сравнение аналитических результатов с результатами численного интегрирования уравнения Шредингера для атомов Не и Аг. Как показывает численный анализ, выполненный для низкочастотных лазерных полей ($\hbar \omega < 1$ эВ), полученные аналитические результаты с высокой точностью воспроизводят высокоэнергетическую часть спектров НПИ, полученных из численного интегрирования уравнения Шрёдингера (см. рис. 1).

Представленный аналитический результат описывает все основные особенности спектров надпороговой ионизации атомов в коротком лазерном импульсе, а именно: асимметрия в вероятности выхода электронов влево–вправо (см. рис. 1(a), (c)); образование многоступенчатой структуры в спектре НПИ (см. рис. 1(a)); возникновение высокочастотных осцилляций, вызванных интерференцией парциальных амплитуд, определяющих ионизацию атома на различных полупериодах лазерного импульса (см. рис. 2(b)). Наши аналитические и численные результаты показывают, что факторизация вероятности выхода высокоэнергетических электронов на лазерный и атомный параметры, возможна только тогда, когда интерференция между различными парциальными амплитудами ионизации несущественна, например, в случае сверхкороткого лазерного импульса.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 13-02-00420 и гранта министерства образования РФ (контракт № 14.В37.21.1937).

- [1] C.D. Lin, A.-T. Le, Z. Chen, T. Morishita, R. Lucchese, J. Phys. B 43, 122001 (2010).
- [2] M.V. Frolov, N.L. Manakov, T.S. Sarantseva, A.F.Starace, J. Phys. B 42, 035601 (2009).
- [3] M.V. Frolov, N.L. Manakov, T.S. Sarantseva, M.Yu. Emelin, M.Yu. Ryabikin, A.F. Starace, Phys. Rev. Lett. 102, 243901 (2009).
- [4] M.V. Frolov, N.L. Manakov, A.F. Starace, Phys. Rev. A 79, 033406 (2009).
- [5] M.V. Frolov, N.L. Manakov, A.M. Popov, O.V. Tikhonova, T.A. Volkova,A.A. Silaev, N.V. Vvedenskii, A.F. Starace, Phys. Rev. A 85, 033416 (2012).
- [6] M.V. Frolov, N.L. Manakov, E.A. Pronin, A.F. Starace, Phys. Rev. Lett. 91, 053003 (2003).
- [7] M.V. Frolov, N. L. Manakov, A. F. Starace, Phys. Rev. A 78, 063418 (2008).
- [8] M.V. Frolov, D.V. Knyazeva, N.L. Manakov, A.M. Popov, O.V. Tikhonova, T.A. Volkova, M.-H. Xu, L.-Y. Peng, L.-W. Pi, A.F. Starace, Phys. Rev. Lett. 108, 213002 (2012).

Нелинейные по магнитному полю вклады в эффект Зеемана в многозарядных ионах

М. М. Соколов¹

¹ Санкт-Петербургский Государственный Университет, г. Санкт-Петербург, Россия

pbo-ii@yandex.ru

Развитие экспериментальных методов захвата и охлаждения отдельных заряженных частиц позволило провести измерения зеемановского расщепления и, соответственно, g-фактора в лёгких водородоподобных ионах с относительной точностью 10^{-9} [1,2,3]. Соответствующие теоретические расчёты для многозарядных ионов являются достаточно точными, что в совокупности с экспериментальными данными даёт возможность выполнять строгую проверку квантовой электродинамики в области сильных полей, а также изучать свойства атомных ядер и уточнять значения некоторых фундаментальных констант, таких как масса электрона [4] и постоянная тонкой структуры [5]. При этом, наряду с одноэлектронными системами необходимо изучать и многоэлектронные [5,6].

Недавний высокоточный эксперимент для литиеподобного иона кремния показал прекрасное согласие с предсказанным теорией значением [7]. Эксперимент ARTEMIS [8] с бороподобным ионом аргона ⁴⁰Ar¹³⁺ проводится сейчас в Институте физики тяжёлых ионов (GSI, Дармштадт, Германия). Особенность бороподбных ионов состоит в том, что нелинейные по магнитному полю вклады в сдвиг энергии основного состояния существенно больше чем в водородо- и литиеподобных ионах, что обусловлено сильным смешиванием уровней тонкой структуры $2p_{1/2}$ и $2p_{3/2}$ внешним магнитным полем. Для аргона в поле 7 Тесла относительные величины вкладов квадратичного и кубического эффектов составляют, соответственно, 10^{-4} и 10^{-8} . Эти эффекты напрямую зависят от величины интервала тонкой структуры [9], на которую, в свою очередь, сильно влияет межэлектронное взаимодействие.

Целью представляемой работы является вычисление коэффициентов при квадратичном и кубическом по магнитному полю членах в разложении поправки к энергии основного (2p_{1/2}) и первого возбужденного (2p_{3/2}) состояний,

$$\Delta E_A(B) = g_J M_J \mu_B \mathcal{H} + g_J^{(2)}(M_J) \frac{(\mu_B \mathcal{H})^2}{mc^2} + g_J^{(3)}(M_J) \frac{(\mu_B \mathcal{H})^3}{(mc^2)^2},$$

с учетом межэлектронного взаимодействия. В работах [8,10] коэффициенты $g_J^{(2)}$ и $g_J^{(3)}$ были вычислены в приближении невзаимодействующих электронов в экранирующем потенциале, точность такого расчета оценивается в 10%. В данной работе для этого используется метод наложения конфигураций в подпространстве нескольких близко лежащих состояний (7 состояний с тем же главным квантовым числом и чётностью). Полный гамильтониан включает сумму одноэлектронных гамильтонианов Дирака в магнитном поле и межэлектронное взаимодействие в приближении Брейта. Кроме того, выполняется строгий квантовоэлектродинамический расчет диаграмм однофотонного обмена для квадратичного эффекта (Рис.1).





Мы рассчитываем, что применение этих методов в сочетании с оценкой других вкладов позволит улучшить точность теоретических значений $g_J^{(2)}$ на порядок величины.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант 12-02-31803).

[1] H. Häffner et al., Phys. Rev. Lett. 85, 5308 (2000).

[2] J.L. Verdú et al., Phys. Rev. Lett. 92, 093002 (2004).

- [3] S. Sturm et al., Phys. Rev. Lett. 107, 023002 (2011).
- [4] P.J. Mohr, B.N. Taylor, and D.B. Newell, Rev. Mod. Phys. 84, 1527 (2012).
- [5] V.M. Shabaev et al., Phys. Rev. Lett. 96, 253002 (2006).
- [6] V.M. Shabaev et al., Phys. Rev. A 65, 062104 (2002).
- [7] A. Wagner et al., Phys. Rev. Lett. 110, 033003 (2013).
- [8] D. von Lindenfels et al., Phys. Rev. A 87, 023412 (2013).
- [9] С.А. Запрягаев, Оптика и спектроскопия 47, 18 (1979).
- [10] D.A. Glazov et al., Phys. Scr. T154 (2013).

МАГНИТО-ОПТИЧЕСКИЙ РЕЗОНАНС ДЛЯ ОТКРЫТОЙ V-КОНФИГУРАЦИИ АТМНЫХ ПЕРЕХОДОВ В БИХРОМАТИЧЕСКОМ ПОЛЕ

<u>А.А. Жуков¹</u>, В.П. Яковлев¹, С.А. Зибров², В.Л. Величанский²

¹ 115409, г. Москва, Национальный исследовательский ядерный университет (МИФИ)

² 119991, г. Москва, Физический институт имени П.Н. Лебедева Российской ака-

демии наук

zugazoid@gmail.com

Магнитооптические свойства атомарных газов исследуются уже много лет. Явления светоиндуцированной прозрачности (СИПр) и светоиндуцированного поглощения наблюдаются в оптических свойствах атомов с многокомпонентной структурой нижних рабочих уровней и имеют форму узких резонансов в коэффициенте прохождения (поглощения) световой волны. Эффект СИПр тесно связан с такими важными процессами как оптическая накачка [1] и когерентное пленение населенности [2] и имеет ряд интересных физических приложений, например в лазерном охлаждении [3], атомных часах [4,5] и магнитометрах [6].

Для атомов с вырожденным основным состоянием резонанс СИПр наблюдается, если момент F_g этого состояния больше или равен моменту F_e возбужденного состояния. Если же $F_e = F_g + 1$, то наблюдается эффект [7], получивший название светоиндуцированного поглощения.

В работах [8,9] резонанс СИП в ячейке с парами рубидия, помещенной в продольное магнитное поле, наблюдался с помощью двух лазеров, настроенных на Vобразную конфигурацию циклического перехода D_2 -линии и открытого перехода D_1 -линии с общим основным состоянием. На экспериментальных кривых, показанных на Рис 1, резонанс поглощения пробной волны на циклическом переходе имеет вид узкой структуры в окрестности нулевого магнитного поля. Амплитуда и форма резонанса существенно зависят не только от интенсивности волны накачки на D_1 -линии, но и от взаимной ориентации поляризаций световых полей.



Рис. 1. Экспериментальные данные по прохождению пробной волны для разных интенсивностей второй волны: а) случай параллельных поляризаций, б) случай ортогональных поляризаций.

В настоящей работе дается общее теоретическое описание поведения резонанса поглощения пробной волны в широком диапазоне интенсивностей волны накачки, действующей на открытом переходе $F_g = 1 \Leftrightarrow F_{e'} = 1$.

Теоретическое описание интересующих нас эффектов основано на решении оптических уравнений Блоха(ОУБ) для матрицы плотности атома, взаимодействующего со встречными световыми волнами, которые распространяются вдоль постоянного магнитного поля (базис Ханле).

Коэффициент поглощения линейно поляризованной слабой, пробной волны пропорционален населенности возбужденного состояния, которая выражается через элементы матрицы плотности основного состояния в базисе Ханле с осью квантования по направлению магнитного поля, следующим образом:

$$W_e = \left\langle \frac{7}{15} S_p \left(Sp \rho^{gg} - \frac{1}{7} \rho_{00}^{gg} \mp \frac{2}{7} \operatorname{Re} \rho_{1-1}^{gg} \right) \right\rangle$$
(1)

Здесь $S_p = \Omega_p^2 / [(kv)^2 + \gamma_e^2 / 4] <<1$ параметр насыщения пробной волны; kv - доплеровский сдвиг, зависящий от продольной скорости атома, которая в базисе Ханле направлена по магнитному полю, Ω_p -частота Раби пробного поля, γ_e -ширина возбужденного состояния. Знаки \mp относятся к случаям, когда поляризация пробной волны параллельна или ортогональна поляризации волны накачки. Выражение для поглощения при произвольном угле между поляризациями может быть получено вращением матрицы плотности на произвольный угол при выборе соотвествующей оси квантования.

Решение ОУБ для данной модели позволяет получить выражение для поглощения пробной волны. Окончательное выражения для поглощения слишком громоздко и сложно для анализа. Анализ приближенного выражения для поглощения в интересующих нас областях параметров дает понимание того, что результирующие ширина и знак резонанса поглощения определяются совместным воздействием и конкуренцией двух различных факторов с различными ширинами которые по-разному зависят от интенсивности $I \sim \Omega^2$ волны накачки (Ω -частота Раби волны накачки): первая пропорциональна \sqrt{I} , а вторая $\sim I$. Происхождение факторов так же различно и связано как со скоростью релаксации когерентности, так и с пролетным временем атома.

В данной работе мы обобщили предыдущие результаты [8,9] теории светоиндуцированного поглощения бихроматического лазерного на широкий диапазон интенсивностей волны накачки для различных поляризаций волн. На основе модели открытой V-конфигурации атомных переходов дана адекватная интерпретация экспериментально наблюдаемого в парах рубидия поведения резонанса СИП при увеличении интенсивности накачки для параллельных и ортогональных поляризаций световых лучей.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ, государственный контракт 12.527.12.5007 от 14.06.2012 г.

- [1]. Happer W. Optical Pumping // Rev. of Mod. Phys. 1972. № 44, P. 179.
- [2]. G. Alzetta, et al. An experimental Method for the Observation of RF Transitions and Laser Beat Resonances in Oriented Na Vapour // Nuovo Cimento. 1976. B. 36, S. 5.
- [3]. Harold J. Metcalf and Peter van der Straten, Laser Cooling and Trapping // Springer-Verlag, New-York, 1999.
- [4]. S. Knappe, P. D. D. Schwindt, V. Shah, L. Hollberg, J. Kitching, L. Liew and J. Moreland, A chip-scale atomic clock based on 87Rb with improved frequency stability // Opt. Exp. 2005. № 13, P. 1249.
- [5]. P. D. D. Schwindt, S. Knappe, V. Shah, L. Hollberg, J. Kitching, L. Liew and J. Moreland, A microfabricated atomic clock // Appl. Phys. Lett. 2004. №85, P. 6409.
- [6]. С.А. Зибров, Я.О. Дудин, В.В. Васильев и др., XVIII Конференция по фундаментальной атомной спектроскопии, 22-26 октября 2007, Звенигород, Тезисы докладов, С. 145-176.
- [7]. A.M. Akulshin, S. Barreiro, and A. Lezamo, Electromagnetically Induced Absorption and Transparency Due to Resonant Two-field Excitation of Quasidegenerate Levels in Rb Vapor // Phys. Rev. A. 1998. № 57, P. 2996.
- [8]. A.A. Zhukov et al, Electromagnetically induced absorption in a bichromatic laser field // Phys. Rev. A. 2009. № 80, P. 033830.
- [9]. В.В. Васильев и др. Светоиндуцированые прозрачность и поглощение атомным ансамблем в Ханле-конфигурации // Вестник Поморского университета 2010. № 1. С.110.

ИСКАЖЕНИЕ ДОПЛЕРОВСКОГО КОНТУРА D₁ и D₂ ЛИНИЙ Cs В ЯЧЕЙКЕ С АНТИРЕЛАКСАЦИОННЫМ ПОКРЫТИЕМ

Д.И. Севостьянов¹, В.П. Яковлев¹, А.Н. Козлов^{2,3},

В.В. Васильев⁴, С.А. Зибров⁴, В.Л. Величанский^{1,3,4}

¹115405, г. Москва, НИЯУ МИФИ

² 142190, г. Москва, г. Троицк, ИЗМИРАН им. Пушкова

³ 119602, г. Москва, ООО «Энергоцентр»

⁴ 119991, г. Москва, ФИАН им. Лебедева

vlvlab@okb.lpi.troitsk.ru

Переходы между сверхтонкими (СТ) и магнитными подуровнями основного состояния атомов щелочных металлов уже более 50 лет используются в стандартах частоты и квантовой магнитометрии [1,2]. Метрологическая ценность радиочастотных или СВЧ резонансов в этих атомах определяется малостью их ширин. Один из вариантов сужения линии заключается в нанесении на стенки ячейки антирелаксационного покрытия (АРП), при столкновениях с которым вероятность релаксации внутреннего состояния атомов мала. Ячейки с покрытием применяются в квантовых магнитометрах с оптической накачкой [3,4].

В работе использовались цезиевые ячейки с АРП и контрольная ячейка без покрытия. Ширина линии генерации применявшихся лазеров с внешним резонатором (\approx 1 МГц) на два порядка меньше доплеровской ширины лини ¹³³Cs при комнатной температуре (\approx 380 МГц). Поэтому лазерное излучение фиксированной частоты эффективно взаимодействует с малой, по сравнению со всем ансамблем, группой атомов с определенной продольной скоростью. Однако, за счет столкновений со стенками, сохраняющих внутреннее состояние атомов, но меняющих их скорости, нелинейность, вызванная оптической накачкой в другое непоглощающее сверхтонкое состояние, распространяется на все продольные скорости. В ре-

зультате в определенном диапазоне скоростей сканирования частоты лазера степень просветления определяется не только накачкой в данный момент, но и в



предыдущие моменты, что и деформирует доплеровский контур.

Рис.1 Спектры пропускания на переходе $F_g = 3 \rightarrow F_e = 4$ для ячейки с покрытием в стоячей волне и контрольной ячейки без покрытия в бегущей волне.

На Рис. 1 сопоставлены сигналы пропускания пробной волны для ячейки с

покрытием в стоячей волне и для контрольной ячейки в случае бегущей волны для уединенного СТ перехода D_1 линии. Видно, что в ячейке с покрытием: 1) минимум пропускания пробной волны наблюдается раньше, чем для ячейки без покрытия; 2) регистрируется внутридоплеровский резонанс с высоким контрастом, несмотря на то, что селективность накачки по продольной скорости теряется при столкновениях со стенкой.



Рис.2 Спектр пропускания длинноволновой компоненты D₂ линии (переходы F_g=4 → F_e=3,4,5) для ячейки с покрытием в стоячей волне, прописанный при повышении (а) и понижении (б) частоты излучения.

Искажения спектров пропускания, обусловленные АРП, наглядно про-

являются в длинноволновой компоненте D_2 линии ($F_g=4 \rightarrow F_e=3,4,5$), Рис.2. При уменьшении частоты, когда сначала доминирует поглощение на циклическом переходе, максимально достигаемое поглощение больше, чем при увеличении частоты, когда сначала работают открытые переходы, вызывающие СТ накачку. Отметим, что и здесь все внутридоплеровкие резонансы разрешены. Обнаруженные свойства важны для квантовых магнитометров с лазерной накачкой, использующих ячейки с покрытием. В докладе дается качественное объяснение искажений, теория опубликована в [5].

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ, государственный контракт 12.527.12.5007 от 14.06.2012г.

- [1]. Pappas P.G., Burns M.M., Hinshelwood D.D., Feld M.S. Phys. Rev. A, 21 (1980)
- [2]. Помернацев Н. М., Рыжов В. М., Скроцкий Г. В. Физические основы квантвой магнитометрии, (М.: Наука, 1972).
- [3]. Budker D., Romalis M. Nature physics, **3**, 227 (2007).
- [4]. Александров Е.Б., Вершовский А.К. Успехи Физических Наук, 179, 605–637 (2009).
- [5]. Севостьянов Д.И., Яковлев В.П., Козлов А.Н., Васильев.В.В., Зибров С.А., Величанский В.Л. Квантовая электроника, принято в печать (июль 2013).

МОДЕЛЬ ФИЗИЧЕСКОЙ ПРИРОДЫ ЦЕНТРОВ ЛЮМИНЕСЦЕНЦИИ В НАНОКРИСТАЛЛАХ CdS

Ю.С. Бездетко, В.Г. Клюев

394006, г. Воронеж, ФГБОУ ВПО "Воронежский государственный

университет"

e-mail: vgklyuev@rambler.ru, julfiz@yandex.ru

В настоящее время в научно-исследовательских работах большое внимание уделяется изучению физических свойств наноструктур и нанокристаллов. Особый интерес представляет изучение оптических свойств нанокристаллов. По спектрам поглощения можно оценить как размеры нанокристаллов, так и энергии квантовых переходов вблизи края запрещенной зоны. Оказалось, что нанокристаллы имеют довольно высокий квантовый выход люминесценции. Поэтом имеется реальная перспектива использовать такие структуры в качестве излучателей с контролируемой длиной волны, а так же в элементах оптоэлектроники. В связи с имеющимися важными прикладными возможностями, при исследовании широкозонных нанокристаллов возникает ряд научных задач.

- Какова физическая природа центров люминесценции?

- Какие собственные дефекты кристаллической решетки создают полосы люминесценции?

- На каком этапе формирования нанокристаллов появляются эти дефекты?

- Какие полосы люминесценции создаются примесными дефектами решетки?

- Что влияет на квантовый выход люминесценции нанокристаллов?

Ответы на эти вопросы будут способствовать пониманию процессов возникновения центров излучательной рекомбинации в нанокристаллах, их физической природы, а так же позволят грамотно управлять спектром люминесценции и ее квантовым выходом для таких структур.

В известной нам литературе мало внимания уделяется вопросам, перечисленным выше. В основном, авторы ограничиваются общими словами о дефектной природе наблюдаемых полос люминесценции.

С помощью золь-гель технологии получены четыре пленочных образца на стеклянной подложке. Образцы представляют собой нанокристаллы сульфида кадмия (НК CdS), синтезированные в желатиновой матрице. Размеры (диаметры)



Рис.1. Диаграмма энергетических уровней дефектов для объемного кристалла (левая часть) и для образца № 1 HK CdS.

образцов следующие: 3,2 нм (обр. № 1), 3,4 нм (обр. № 2), 3,6 нм (обр. № 3), 3,8 нм (обр. № 4). Диаметры оценивались по спектрам поглощения.

Спектры люминесценции представляют собой широкие полосы в видимой области спектра от 450 нм до 800 нм. Полуширины полос для всех четырех образцов меняются в интервале от 120 нм до 150 нм. Это говорит о том, что

полосы не элементарны и состоят из нескольких более узких полос, за которые ответственны разные центры люминесценции.



Рис. 2. Разложение спектров люминесценции НК CdS: \mathbb{N} 1 (a), \mathbb{N} 2 (б), \mathbb{N} 3 (в), \mathbb{N} 4 (г) на четыре элементарные составляющие.

Для объемного безпримесного монокристалла CdS известны собственные точечные дефекты, coответствующие им уровни запрещенной В зоне И механизмы излучательной рекомбинации на них. Зонная диаграмма для монокристалла приведена на рис. 1 слева. Дефектами, определяющими собственную люминесценцию, являются вакансии кадмия

(одиночные, в комплексе с вакансиями серы или с кислородом на месте серы) и межузельные атомы кадмия.

В данной работе предполагается, что и для нанокристаллов их люминесцению определяют аналогичные дефекты решетки. Экспериментальные спектры люми-

несценции были разложены на четыре составляющие элементарные полосы. Результаты разложения для четырех образцов приведены на рис. 2. При разложении полуширина элементарных составляющих выбиралась равной 60 нм, чтобы учесть разброс размеров нанокристаллов из-за немонодисперсности.

На рис. 1 справа приведена зонная диаграмма для образца № 1. На этой диаграмме положение уровней относительно уровней E_e^0 и E_h^0 получено расчетом. В основу расчета положены следующие предположения. Изменение электронного ΔE_e и дырочного ΔE_h уровней при переходе от моно- к нанокристаллу происходит пропорционально эффективным массам электрона и дырки (m*_e=0.21m_e, m*_h=0.8m_e) в CdS. Предполагается, что и уровни в запрещенной зоне сдвигаются от середины зоны согласно такой же пропорциональности.

Результаты расчета для уровней четырех дефектов для четырех образцов содержатся в таблице в столбцах, обозначенных римской цифрой I. Результаты разложения экспериментальных спектров люминесценции помещены в столбцы, обозначенные римской цифром II. В столбцах, обозначенных %, приведена разность между числами столбцов I и II, выраженная в процентах по отношению к числам, стоящим в столбцах I.

Табл. Значения энергии в эВ для максимумов полос люминесценции в HK CdS, полученные по предложенной модели (I), при разложении экспериментальных кривых люминесценции (II) и разность между ними, выраженная в процентах.

	E ₁			E ₂			E ₃			E ₄		
	Ι	II	%									
CdS № 1	2,53	2,53	0	2,25	2,34	3,8	2,04	2,09	2,4	1,70	1,71	0,6
CdS № 2	2,49	2,48	0,4	2,21	2,25	1,8	2,00	2,03	1,5	1,66	1,67	0,6
CdS № 3	2,33	2,3	1,3	2,04	2,14	4,7	1,83	1,93	5,2	1,50	1,57	4,5
CdS № 4	2,25	2,2	2,2	1,94	2,03	4,4	1,73	1,83	5,5	1,41	1,5	6

Из таблицы следует, что разница между значениями энергии для максимумов полос люминесценции вычисленной и экспериментальной не превосходит 6%. Эта величина сравнима с точностью, даваемой технологией по синтезу нанокристаллов.

ЗАВИСИМОСТЬ ОПТИЧЕСКИХ СВОЙСТВ СИСМЕМЫ НАНОКРИСТАЛЛОВ CdS-Ag₂S

<u>Ю.С. Бездетко</u>, В.Г. Клюев, А.Г. Беляев, А.А. Седых 394006, г. Воронеж, ФГБОУ ВПО "Воронежский государственный университет"

e-mail: vgklyuev@rambler.ru, julfiz@yandex.ru

Нанокристаллы (НК) классических люминофоров, в частности сульфида кадмия, в видимой области спектра имеют собственную люминесценцию со сравнительно большим квантовым выходом. В то время как у моно- и микрокристаллов этого соединения самоактивированная люминесценция весьма слаба, высокая интенсивность классических люминофоров обеспечивается введением в объем примесей таких металлов, как серебро, медь, алюминий, марганец и т.д. Причем, во-первых, эти примеси вводятся в концентрациях порядка $10^{-6} \div 10^{-4}$ мольных долей относительно основного вещества, а, вовторых, это осуществляется методом термодиффузии при температурах, превышающих 10^3 К. Так как метод термодиффузии для НК пока не разработан, то в данной работе приведен синтез НК CdS в присутствии атомов серебра различном отношении мольных концентраций серебра и кадмия $C_v = v_{Ag}/v_{Cd}$.

Синтез производился по технологии. В золь-гель реактор, содержащий расплавленную желатину, трехканальным перистальтическим насосом подавались волные растворы растворимых солей CdBr₂, Na_2S AgNO₃. И Образовавшаяся эмульсия поливалась на стеклянные подложки И высушивалась.



Рис. 1. Спектры люминесценции синтезированных образцов. Кривые обозначены значениями С_v согласно ряду (1).

Получено восемь образцов со следующими значениями С_v:

$$C_v = 0$$
 (6e3 Ag); 10^{-2} ; 2,2·10⁻²; 4,6·10⁻²; 10^{-1} ; 2,2·10⁻¹; 4,6·10⁻¹; 1. (1)

На рис. 1 приведены спектры люминесценции синтезированных образцов в видимой области спектра. При введеннии в эмульсию раствора азотнокислого серебра ширина спектра люминесценции не изменяется. При значении $C_v = 10^{-1}$ и более максимум спектра сдвигается с $\lambda_{max1} = 560$ нм к $\lambda_{max2} = 610$ нм.



Рис. 2. Спектры люминесценции образцов в ближней ИК области спектра. Кривые обозначены значениями C_v согласно ряду (1).

Анализ спектров поглощения показал, что размер образующихся НК CdS при увеличении C_v практически не изменяется и равен ~3 нм. При увеличении C_v в спектре поглощения появляется немонотонность в области 1,6 ÷ 2,8 эВ.

На рис. 2 приведены спектры люминесценции образцов в ближней инфракрасной (ИК) области

спектра. Видно, что с увеличением количества вводимого в эмульсию серебра возрастает интенсивность ИК люминесценции при $\lambda = 1170$ нм. Для сравнения на этом рисунке приведен спектр НК Ag₂S, синтезированных этим же методом^{*)} (кривая, обозначенная Ag₂S).



Рис. 3. Зависимость интенсивности в максимуме спектра люминесценции от lgC_{ν} в видимой области спектра (1) и в ИК области для λ =1170 нм (2).

Кривая 2 на рис. 3 показывает, что по мере увеличения количества серебра v_{Ag} максимум при 1170 HM, соответствующий НК Ag₂S, постепенно увеличивается. А при увеличении С_v от 10⁻¹ до 1 в десять раз, интенсивность ИК люминесценции увеличивается

более чем в 20 раз.

Перечисленные экспериментальные факты позволяют описать процесс образования НК в желатиновой эмульсии следующим образом. При появлении в реакторе одновременно ионов кадмия и серебра протекают несколько процессов. Во-первых, ионы серебра могут попадать в объем растущих НК CdS и в виде примеси образовывать точечные дефекты. Во-вторых, они могут вступить в конкуренцию с ионами кадмия в борьбе за соединение с ионами серы. В результате этой конкуренции в эмульсии образуется два вида нанокристаллов CdS и Ag_2S . Твердый раствор они образовать не могут, так как их кристаллические решетки принципиально разные (гексагональная у CdS и моноклинная у Ag_2S).

Интересен факт увеличения люминесценции НК CdS при увеличении C_v от 10^{-2} до $2,2\cdot10^{-1}$ при сдвиге максимума интенсивности люминесценции в длинноволновую область спектра на 50 нм без изменения ширины всего спектра люминесценции. Это может свидетельствовать о том, что атомы серебра, попадая в HK CdS в виде точечных дефектов, могут, во-первых, блокировать безызлучательные каналы рекомбинации, повышая интенсивность люминесценции в основной полосе. Во-вторых, они, по-видимому, влияют на центры люминесценции, чьи элементарные полосы обеспечивают левый (коротковолновый) край основной полосы люминесценции, уменьшая ее интенсивность.

Обнаруженная возможность увеличить интенсивность люминесценции НК CdS в несколько раз с помощью введения в реактор при синтезе небольших концентраций серебра может иметь практический интерес при создании излучателей нанометровых размеров.

^{*)} Выражаем благодарность Кузнецовой Г. За предоставленный спектр люминесценции Ag₂S.

269

ЗАВИСИМОСТЬ РАСПАДНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ЯДЕР ОТ ЗАПОЛНЕННОСТИ *К*-ОБОЛОЧЕК ИХ АТОМОВ В СИЛЬНО НАГРЕТОМ ВЕЩЕСТВЕ

И.В. Копытин^{*,1}, Имад А. Хуссейн^{1,2}

¹ 394006, г. Воронеж, Воронежский государственный университет ² г. Мосул, Мосульский университет, Ирак ^{*} i-kopytin@yandex.ru

Существует категория атомных ядер, которые можно назвать мультибетараспадными. В цепочке β -распадов $(A,Z) \rightleftharpoons (A,Z+1) \rightarrow (A,Z+2)$ (A и Z – массовое и зарядовое числа), где (A, Z) и (A, Z+2) – стабильные ядра, нуклид (A, Z+2)Z+1) – мультибета-распадный. В полную скорость его распада дают вклад как электронный β -переход (A, Z+1) \rightarrow (A, Z+2), так и позитронный β -переход (в сумме с электронным захватом) (A, Z+1) \rightarrow (A, Z). В земных условиях в сравнении с β^+ распадом нередко электронный захват более интенсивен, а иногда по энергетическим правилам отбора вообще может остаться только он один. В таблицах изотопов для мультибета-распадных ядер (их всего 33), кроме полного периода полураспада, обычно приводятся доли (в процентах) β -переходов (A, $Z+1) \rightarrow (A, Z)$ и $(A, Z+1) \rightarrow (A, Z+2)$. Указанные выше β -распадные цепочки рассматриваются в моделях процесса синтеза *р*-ядер в звездах на квазиравновесных этапах их эволюции.

В нагретой до "ядерных" температур внутризвездной среде для мультибетараспадных ядер мы исследовали зависимость относительной доли их β -распада δ от степени ионизации *K*-оболочки атомов. Рассматривался этап горения кислорода в массивной звезде при температуре вещества 3×10^9 K (около 300 кэВ в энергетических единицах). При таких температурах скорости β -процессов сильно отличаются от наблюдаемых в земных условиях [1]. Кроме того, из-за практически полной ионизации атомных оболочек даже у относительно тяжелых атомов электронный захват подавлен [2]. Мы учитывали только *K*-захват как наиболее интенсивный. Расчеты коэффициента δ проводились как с учетом *K*захвата при максимальной заполненности *K*-оболочки, так и без него (случай полной ионизации атомной *K*-оболочки). При расчете скоростей термических β - переходов и фотобета-распада отбирались только *β*-переходы разрешенного типа (опять-таки как самые интенсивные). Результаты расчетов коэффициента δ представлены в таблице.

Коэффициент б (доля электронного В-распада в абсолютных единицах) для мультибета-распадных ядер. Экспериментальные значения приведены для земных условий(они взяты из [3]), теоретические рассчитаны при температуре среды $3 \times 10^9 K$

Ядро	δ	δ te	eop.	Ядро	δ	δ теор.	
	экспер.	1	2		экспер.	1	2
⁷⁴ ₃₃ As	0.34	0.719	0.844	$^{130}_{55}$ Cs	0.016	0.010	0.109
$^{78}_{35}{ m Br}$	<10 ⁻⁴	0.014	0.028	$^{132}_{55}$ Cs	0.019	0.201	0.998
$^{80}_{35}{ m Br}$	0.917	0.941	0.994	¹³⁶ ₅₇ La	0	2.4×10^{-3}	0.964
⁸⁴ ₃₇ Rb	0.038	0.369	0.606	¹³⁸ ₅₇ La	0.336	0.443	1.0
⁹² ₄₁ Nb	$< 5.0 \times 10^{-4}$	0.082	0.441	¹⁴⁴ ₆₁ Pm	0	4.4×10^{-4}	0.908
⁹⁴ ₄₁ Nb	0.986	0.982	1.0	¹⁵² ₆₃ Eu	0.279	0.873	1.0
⁹⁶ ₄₃ Tc	0	6.1×10^{-5}	5.7×10^{-3}	¹⁵⁶ ₆₅ Tb	0	6.7×10^{-4}	0.180
⁹⁸ ₄₃ Tc	1.0	0.776	1.0	¹⁵⁸ ₆₅ Tb	0.166	0.672	1.0
$^{102}_{45}$ Rh	0.2	0.112	0.841	¹⁶² ₆₇ Ho	0	4.2×10^{-3}	0.537
$^{106}_{47}\mathrm{Ag}$	< 0.01	2.0×10^{-3}	0.015	¹⁶⁴ ₆₇ Ho	0.4	0.389	1.0
$^{108}_{47}\mathrm{Ag}$	0.972	0.709	0.990	¹⁶⁸ ₆₉ Tm	10-4	0.017	0.853
¹¹⁰ ₄₇ Ag	0.997	0.993	1.0	$^{174}_{71}$ Lu	0	0.078	0.997
$^{112}_{49}$ In	0.44	0.188	0.583	¹⁸⁰ ₇₃ Ta	0.14	0.532	1.0
$^{114}_{49}$ In	0.995	0.822	1.0	$^{184}_{75}$ Re	0	6.3×10^{-6}	0.124
$^{120}_{51}{ m Sb}$	0	0.169	0.773	$^{190}_{77}$ Ir	0	1.0×10^{-4}	0.770
¹²⁴ ₅₃ I	0	7.6×10^{-4}	0.025	¹⁹⁶ ₇₉ Au	0.075	1.3×10^{-3}	1.0
$^{126}_{52}$ I	0.437	0.640	0.975				

(1 – с учетом электронного К-захвата, 2 – без него)

Анализ результатов, приведенных в таблице, позволяет сделать следующие выводы. Во-первых, сильный нагрев среды изменяет не только скорости βпроцессов, но даже и отношения этих скоростей, причем коэффициент δ может и уменьшаться, и увеличиваться. Это зависит от конкретной структуры возбужденных состояний материнского (A, Z+1) и дочерних (A, Z) и (A, Z+2) ядер. В ряде случаев нагрев вещества звезды вообще открывает канал β -распада (A, Z+1) \rightarrow (*A*, *Z*+2), который отсутствовал в земных условиях (изотопы ⁹⁶Tc, ¹²⁰Sb, ¹²⁴I, ¹³⁶La, ¹⁴⁴Pm, ¹⁵⁶Tb, ¹⁶²Ho, ¹⁷⁴Lu, ¹⁸⁴Re и ¹⁹⁰Ir). Во-вторых, полная ионизация

атомной К-оболочки увеличивает электронного β -распада долю V мультираспадных ядер (A, Z+1), причем в ряде случаев очень сильно (на несколько порядков). Это обстоятельство оказывается решающим для модели синтеза *р*-элементов по цепочке *β*-распадов с участием относительно тяжелых мультираспадных изотопов ¹³⁶La, ¹⁴⁴Pm, ¹⁵⁶Tb, ¹⁶²Ho, ¹⁸⁴Re, ¹⁹⁰Ir и ¹⁹⁶Au. Благодаря ионизации их К-оболочек и полному подавлению К-захвата удается получить наблюдаемые распространенности 7 *р*-изотопов ¹³⁶Ce, ¹⁴⁴Sm, ¹⁵⁶Dy, ¹⁶²Er, ¹⁸⁴Os, ¹⁹⁰Рt и ¹⁹⁶Нg. Это в дополнение к тем 20 *р*-изотопам, наблюдаемые распространенности которых уже были получены ранее в той же модели, но без учета ионизации мультираспадных атомов. Для этих 20 р-ядер увеличение коэффициента δ при учете эффекта ионизации результат не ухудшало [4].

- [1]. И.В. Копытин, Имад А. Хуссейн, Ядерная физика 76 №11 (2013) (в печати).
- [2]. J.N. Bahcall, Astrophys. J. 139, 318 (1964).
- [3]. R.B. Firestone *et al.*, Tables of Isotopes, 8th ed. (JohnWiley & Sons, New York, 1996).
- [4]. И.В. Копытин, А.С. Корнев, Имад А. Хуссейн, Настоящий сборник тезисов докладов.

РОЛЬ ПРИМЕСНЫХ АТОМОВ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛ-ЛОВ В РЕКОМБИНАЦИОННЫХ ПРОЦЕССАХ В ПЛЕ-НОЧНЫХ НАНОСТРУКТУРАХ СУЛЬФИДА КАДМИЯ

<u>Т.Л. Майорова</u>², В.Г. Клюев¹, Ю.С. Бездетко¹

¹394006, г. Воронеж, Воронежский государственный университет ²394613, г. Воронеж, Воронежская государственная лесотехническая академия mtl084@yandex.ru

Предметом наших исследований является изучение фотоэлектрических свойств тонких поликристаллических пленок CdS. В данной работе представлены результаты изучения влияния примесных атомов щелочных металлов на поведение неравновесных носителей заряда в течение возбуждения и релаксации фотовозбужденной проводимости сульфида кадмия.

Исследуемые структуры получены методом пиролиза водных растворов тиомочевинных координационных соединений на нагретую ситалловую подложку. В качестве легирующих примесей использовались хлориды щелочных металлов (Li, Na, K, Rb, Cs). По результатам рентгеноструктурного анализа установлено, что пленки кристаллизуются в термически более устойчивую структуру вюрцита и имеют выраженную поликристаллическую структуру. На электронном микроскопе получены снимки поверхности исследуемых образцов. Размер зерна составляет 100 – 500 нм. Пленки CdS независимо от условий синтеза кристаллизуются в слои толщиной 1 – 3 мкм.

Исследования фотопроводимости проводились при комнатной температуре. Образцы возбуждались светодиодом ($\lambda = 465$ нм), интенсивность которого изменялась от 0,72 кд до 2 кд. Предварительно на образцы термическим испарением наносились плёночные индиевые контакты.

Полученные структуры обладают проводимостью n-типа, что обусловлено недостатком серы по отношению к стехиометрическому составу. Доминирующими электроактивными дефектами в CdS являются внедренные в междоузлия атомы кадмия, которые и обеспечивают n-тип проводимости [1-2]. Темновой ток в исследуемых пленках, как чистых, так и легированных щелочными металлами, составляет 0.6 нА. Кинетические зависимости тока исследуемых структур в процессе фотовоз-



Рис. 1 Кривые возбуждения фототока пленок CdS:Na для разных интенсивностей возбуждения:

буждения представлены на рис.1 на примере пленок CdS, легированных Na. Для данных структур как чистых, так и легированных, наблюдается медленное нарастание фототока. Время увеличения фототока до стационарного значения варьируется от нескольких минут до десятков минут. В некоторых случаях на кривых возбуждения фототока можно выделить «пороги» (рис.1 кривые 2 и 3). Такой эффект может быть следствием про-

1-2 кд, 2-1.62 кд, 3-1.28 кд, 4-0.98 кд, 5-0.72 эффект может облъ следствием процессов захвата электронов на ловушки. При большой концентрации пустых ловушек почти каждый возбужденный носитель заряда может быть немедленно захвачен, и только спустя значительное время, когда квазиуровень Ферми под действием возбуждения поднимется достаточно высоко, будет обеспечена необходимая для стационарного состояния концентрация свободных электронов. Наличие нескольких перегибов (порогов) на кривой увеличения фототока свидетельствует о наличии нескольких ловушек с различной глубиной и сечением захвата. Ранее было показано, что введение примеси щелочного металла обуславливает наличие дефектов типа Me⁺_{sur}.

На рис.2 представлены зависимо-0.8 сти стационарного значения фототока от 0.7 интенсивности возбуждения для пленок 0.6 CdS, чистых и легированных щелочны-0.5 0.4 0.4 0.3 нелинейной. При приближении этой зависимости степенной функцией показависимости степенной функцией показа-0.1 до 0.3. Такой характер зависимости рим свидетельствует о существенном вкладе нескольких процессов кинетики 2-го поряди



Рис.2 Зависимости стационарного фототока от интенсивности возбуждения для пленок 1-CdS, 2-CdS:Li, 3-CdS:Na, 4-CdS:K, 5-CdS:Rb

нескольких процессов кинетики 2-го порядка, обусловленных наличием центров

прилипания нескольких типов. В пользу этого свидетельствует также сложная неэкспоненциальная кинетика релаксации фототока, длительность которой $\sim 10^2$ с. Для начальных и конечных стадий релаксации были получены энергии активации $E_a=0.2$ эВ и 0.3 эВ, соответственно.

Следует отметить, что введение щелочных металлов в пленочные структуры



Рис. З Зависимость стационарного фототока пленок CdS от легирующего металла для разных интенсивностей возбуждения: 1- 0.72 кд, 2- 0.98 кд, 3-1.28 кд, 4- 1.62 кд, 5- 2 кд

сульфида кадмия приводит к увеличению стационарной величины фототока (рис.3). Как уже отмечалось при легировании CdS щелочными металлами образуются неглубокие донорные уровни Me_i⁺, которые выполняют роль центров прилипания. Величина фототока, в частности, определяется вероятностью освобождения электронов с ловушек - Р. Последняя связана с характе-

ристиками ловушки следующим образом:

 $P=N_{3\phi}vS_texp(-E_t/kT),$

2- 0.98 кд, 3-1.28 кд, 4- 1.62 кд, 5- 2 кд где $N_{3\phi}$ – эффективная плотность состояний в зоне проводимости, v – тепловая скорость электрона, S_t – сечение захвата ловушки, E_t – энергетический уровень ловушки. Таким образом, можно ожидать, что при прочих постоянных параметрах с увеличением сечения захвата центров прилипания будет увеличиваться стационарная величина фототока.

Таким образом, наблюдаемые особенности кинетики фототока в пиролитических пленках CdS указывают на существенную роль центров прилипания, создаваемых внедренными в междоузлия атомами щелочных металлов.

[1]. Я.А. Угай, О.Б. Яценко, В.Н. Семенов, Е.М. Авербах. В кн.: Электроника Воронеж, ВПИ, 1972) с. 247.

[2]. М.Н. Левин, В.Н. Семенов, О.В. Остапенко. Письма в ЖТФ, 28, 10 (2002).

Спектральные характеристики металлических нанооболочек с диэлектрическим или полупроводниковым ядром, покрытых молекулярными J-агрегатами красителей

<u>А.С. Медведев</u>², В.С. Лебедев^{1,2}

 ¹ 119991, г. Москва, Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН
 ² 141700, г. Долгопрудный, Московская обл., Московский физико-технический институт (государственный университет) primefc@gmail.com

Для разработки элементной базы фотонных и оптоэлектронных и устройств будущего поколения требуется создание новых композитных наноматериалов, обладающих заданными оптическими свойствами. В качестве таких материалов рассматриваются, в том числе и композитные материалы, созданные на основе гибридных наночастиц, содержащих металлическую компоненту и упорядоченные молекулярные J-агрегаты цианиновых красителей. Изучение оптических свойств таких гибридных частиц представляет большой интерес и с фундаментальной точки зрения, поскольку в них уникальным образом проявляются эффекты плазмон-экситонного взаимодействия и разнообразные размерные явления.

В ряде экспериментальных и теоретических работ [1-4] исследовались двухслойные гибридные частицы с металлическим ядром и оболочкой цианинового красителя в J-агрегатном состоянии. В работе [4] было показано, что изменение геометрических параметров металлоорганических наночастиц позволяет эффективно управлять величиной и характером взаимодействия локализованных поверхностных плазмонов с экситонами Френкеля. Наряду с сильной зависимостью спектральных характеристик подобного рода частиц от диэлектрических констант составляющих их материалов (в том числе от величины силы осциллятора перехода в J-полосе красителя и от взаимного расположения максимумов пиков плазмонного резонанса и полосы поглощения J-агрегата) это дает возможность создавать металлорганические наноструктуры с заданными оптическими свойствами.

В данной работе исследуются трехслойные металлоорганические наночастицы другого типа, которые представляют собою так называемую металличе-

276

скую нанооболочку [5], покрытую внешним слоем молекулярного J-агрегата цианинового красителя. Нами рассматриваются два типа подобного рода металлических нанооболочек: 1) частицы с кварцевым ядром, покрытые слоем благородного металла (Ag или Au) и 2) частицы с полупроводниковым ядром (Si, GaN, GaP, GaAs), покрытые слоем благородного металла. Как известно [5], характерной особенностью металлических нанооболочек является возможность изменять значение частоты плазмонного резонанса в чрезвычайно широком диапазоне при изменении отношения толщины ее металлического слоя к радиусу ядра частицы. Это создает уникальную возможность изучать эффекты взаимодействия локализованных плазмонов с экситонами Френкеля в указанных трехслойных наночастицах в режиме сильной связи, который реализуется при близких значениях частоты плазмонного резонанса нанооболочки и центральной частоты перехода в J-полосе красителя.



Рис. 1. Схематическое изображение исследуемых частиц, представляющих из себя металлическую нанооболочку с диэлектрическим или полупроводниковым ядром, покрытую Jагрегатом цианинового красителя.

Численные расчеты сечений поглощения и рассеяния света исследуемыми частицами проведены в рамках обобщенной теории Ми в области длин волн от ИК до УФ для широкого набора геометрических параметров (радиус ядра: $r_1 = 3$ – 100 нм; толщина промежуточного слоя: $r_2 - r_1 = 1$ –10 нм; толщина внешней оболочки: $r_3 - r_2 = 1$ –10 нм). При описании диэлектрических свойств промежуточного металлического слоя учтено влияние размерного эффекта [6], заключающегося в увеличении коэффициента затухания свободных электронов при малых значениях его толщины по сравнению с длиной свободного пробега электрона в объемном металлическом образце. Наряду с расчетами сечений поглощения и рассеяния

света нами детально исследовано поведение оптических полей в ближней зоне для различных значений длины волны падающего на частицу света.

Особое внимание уделено изучению поведения спектров фотопоглощения трехслойных частиц диэлектрик/металл/Ј-агрегат в условиях совмещения частот плазмонного резонанса ее металлической нанооболочки и максимума поглощения J-агрегатной оболочки. Показано, что в окрестности совпадающих резонансных частот в спектре поглощения гибридной частицы появляется ярко выраженный минимум между двумя приблизительно равными по величине спектральными пиками. Для наночастиц с полупроводниковым ядром обнаружено, что плазмонные пики поглощения смещаются в длинноволновую область спектра по сравнению со случаем аналогичных частиц с кварцевым ядром. Характер трансформации спектров при варьировании оптических констант внешней оболочки (в т.ч. приведенной силы осциллятора, f, в J-полосе красителя) существенно зависит от соотношения между частотами резонансного поглощения нанооболочки ω_{res} и J-агрегата. Если частота ω_{res} плазмонного резонанса больше частоты ω_0 экситонного возбуждения J-агрегата, то при увеличении f плазмонный пик гибридной частицы смещается в коротковолновую область спектра. Если же $\omega_{res} < \omega_0$, то этот пик поглощения смещается в область больших длин волн. Для частиц субмикронных размеров, ядро которых обладает большим значением диэлектрической проницаемости (Si), продемонстрировано наличие характерных особенностей в спектрах поглощения света, связанных с возбуждением резонансов Ми и смещением положений частот плазмонных максимумов поглощения в ИК-область.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 12-02-00713-а) и проектов Минобрнауки в рамках ФЦП (соглашения № 8576 и 8396).

- [1] G.P. Wiederrecht, G.A. Wurtz, A. Bouhelier, Chem. Phys. Lett. 461, 171 (2008).
- [2] V.S. Lebedev, A.G. Vitukhnovsky, A. Yoshida, N. Kometani, Y. Yonezawa, Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects, 326, 204 (2008).
- [3] A. Yoshida, N. Kometani, J. Phys. Chem. C 114, 2867 (2010).
- [4] В.С. Лебедев, А.С. Медведев, Квантовая электроника 42, 701 (2012).
- [5] N.J. Halas, S. Lal, W.-S. Chang, S. Link, P. Nordlander, *Chem. Rev.* 111, 3913 (2011).
- [6] A. Moroz, J. Phys. Chem. C 112, 10641 (2008).

Влияние формы композитной металлоорганической наноструктуры на характер связи локализованного плазмона с экситоном Френкеля и спектры поглощения и рассеяния света

А.Д. Кондорский^{1,2}, <u>А.С. Медведев</u>², В.В. Воробьев², В.С. Лебедев^{1,2}

¹ 119991, г. Москва, Физический институт им. П.Н. Лебедева РАН
 ² 141700, г. Долгопрудный, Московская обл., Московский физико-технический институт (государственный университет)

primefc@gmail.com

Создание материалов с управляемыми оптическими свойствами является одной из наиболее актуальных прикладных задач современной нанооптики и наноплазмоники. С этой точки зрения значительный интерес представляют многослойные композитные наноструктуры различной формы и размеров и созданные на их основе композитные материалы. В ряде недавних работ были синтезированы трехслойные наноструктуры сферической [1,2], стержнеобразной [3,4] и гантелеобразной [5] формы, состоящие из металлического ядра, внешней оболочки цианинового красителя в J-агрегатном состоянии и промежуточного пассивного диэлектрической формы были установлены основные закономерности в спектрах поглощения и рассеяния ими излучения видимого диапазона. Было также теоретически показано, каким образом спектральные характеристики подобного рода сферических частиц зависят от их геометрических параметров, а также от конкретных значений диэлектрических констант составляющих частицу материалов, в том числе металлов (Ag, Au, Cu, Al) и органической компоненты частицы [6].

Основная задача данной работы состоит в том, чтобы теоретически исследовать влияние эффектов формы металлоорганических наночастиц на характер электромагнитной связи локализованных поверхностных плазмонов в металлической компоненте частицы с экситонами Френкеля в органической оболочке, а также на спектры поглощения и рассеяния ими света. С этой целью нами были рассмотрены разнообразные двухкомпонентные и трехкомпонентные металлорганические наноструктуры сфероидальной, цилиндрической, гантелеообразной и более сложной формы. В частности, изучались двухкомпонентные и трехкомпонентные наноструктуры различных размеров с сердцевиной из благородного металла (Ag, Au) и внешним слоем цианинового красителя в J-агрегатном состоянии. В случае трехслойных наночастиц между ядром и внешней оболочкой был расположен промежуточный пассивный органический слой (TMA), который дополнительно позволяет варьировать эффективность плазмон-экситонного взаимодействия в подобного рода наносистемах. При проведении численного моделирования оптических свойств таких наноструктур нами был использован Метод Конечных Разностей во Временной Области (FDTD) [7].

В результате в широком спектральном диапазоне были получены обширные данные по мультипольным поляризуемостям металлоорганических наноструктур различной формы и состава, а также по сечениям рассеяния и поглощения ими оптического излучения. Особое внимание было уделено при этом изучению режимов слабой и сильной плазмон-экситонной связи в подобного рода системах, а также выявлению факторов, которые оказывают наибольшее влияние на спектральные характеристики наноструктур сложной формы.

Было установлено, что спектральные особенности рассеяния и поглощения света можно классифицировать в соответствии с тем, как влияет на них изменение того или иного геометрического параметра системы. При этом было показано, что из-за электромагнитного плазмон-экситонного взаимодействия между металлическим ядром и внешней органической оболочкой изменение отдельного геометрического параметра, как правило, приводит к модификации сразу группы спектральных особенностей.

В частности, было показано, что при вытягивании сферической частицы в сфероид, помимо разделения плазмонного пика на продольный и поперечный, модифицируется и максимум, соответствующий возбуждению оболочки молекулярного J-агрегата красителя. При этом оказывается, что при вытягивании сферической частицы вдоль одной из осей, пики фотопоглощения и рассеяния света смещаются в длинноволновую область спектра, если поляризация падающего излучения совпадает с длинной осью сфероида. В случае же, когда падающая электромагнитная волна поляризована перпендикулярно длинной оси сфероида, спек-

280

тральные максимумы смещаются в коротковолновую область. Указанные закономерности проявляются даже при относительно небольшой толщине внешней органической оболочки по сравнению с характерными размерами ядра частицы.

Аналогичные явления наблюдаются и для наноструктур более сложной формы (стержнеобразной и гантелеобразной). При этом по мере усложнения формы наноструктуры число групп спектральных особенностей, связанных с отдельными геометрическими характеристиками системы увеличивается. Изменение формы наноструктуры приводит также к существенному изменению характерных величин мультипольных поляризуемостей различного порядка.

В заключение отметим, что возможность управления спектральными характеристиками металлоорганических наноструктур и характером плазмонэкситонной связи в системе за счет дополнительного изменения не только размеров, состава, но и формы структуры представляет значительный интерес для решения для целого ряда фундаментальных и прикладных проблем наноплазмоники. В целом этот круг вопросов представляет несомненный интерес для создания новых композитных наноматериалов с целью их потенциального использования для разработки новых принципов функционирования нанофотонных и оптоэлектронных устройств будущего поколения.

- [1] A. Yoshida, Y. Yonezawa, N. Kometani, Langmuir 25, 6683 (2009).
- [2] A. Yoshida, N. Kometani, J. Phys. Chem. C 114, 2867 (2010).
- [3] G.A. Wurtz, P.R. Evans, W. Hendren, R. Atkinson, W. Dickson, R.J. Pollard, A.V. Zayats, *Nano Lett.* 7, 1297 (2007).
- [4] A.Yoshida, N. Uchida, N. Kometani, *Langmuir* 25, 11802 (2009).
- [5] Б.И. Шапиро, Е.С. Кольцова, А.Г. Витухновский, Д.А. Чубич, А.И. Толмачев, Российские нанотехнологии **6**, 83 (2011).
- [6] В.С. Лебедев, А.С. Медведев, Квантовая электроника 42, 701 (2012).
- [7] A. Taflove, S.C. Hagnes Computational Electrodynamics: The Finite-Difference Time Domain Method, 3rd ed. (Artech House, Boston, 2005).

Научное издание

Сборник тезисов докладов конференции и школы молодых учёных по фундаментальной атомной спектроскопии ФАС – XX (Воронеж, 23-27 сентября 2013 г.)

Компьютерная верстка С.Н. Мохненко

Подписано в печать 11.09.2013г. Формат 60х84/16. Объем 17,7 п.л. Бумага офсетная. Тираж 50 экз. Заказ № 335

Издательство ООО «Цифровая полиграфия» 394036, Россия, г. Воронеж, ул. Ф. Энгельса, 52 Тел.: (473) 261-03-61, e-mail: <u>zakaz@print36.ru</u> <u>http://www.print36.ru</u>

Отпечатано с готового оригинал-макета в ООО «Цифровая полиграфия» 394036, Россия, г. Воронеж, ул. Ф. Энгельса, 52 Тел.: (473) 261-03-61