01

Идентификация квантовых вихрей в импульсном пространстве

© Н.В. Ларионов, В.М. Молчановский

Санкт-Петербургский государственный морской технический университет,
190121 Санкт-Петербург, Россия

e-mail:larionov.nickolay@gmail.com

Поступила в редакцию 19.05.2023 г.
В окончательной редакции 03.07.2023 г.
Принята к публикации 30.10.2023 г.

Теоретически исследуются квантовые вихри, образующиеся в результате надбарьерной ионизации двумерного атома водорода сверхкоротким лазерным импульсом. Анализируется поток вероятности в импульсном пространстве. При этом используются как стандартное выражение для потока, так и его „симметричный" аналог. Последний вследствие чувствительности к фазе волновой функции позволяет идентифицировать квантовые вихри.

Ключевые слова: квантовый вихрь, импульсное представление, поток вероятности.

DOI: 10.61011/OS.2023.11.56998.5238-23

Введение

Одним из нетривиальных эффектов, возникающих при ионизации атома, является образование квантовых вихрей [1–10]. Эти вихри проявляют себя как возмущения в плотности вероятности для фотоэлектрона. Центр вихря представляет собой запрещенную для фотоэлектрона область, вокруг которой векторное поле потока вероятности имеет спиралевидную структуру.

В [4–6], используя как численный, так и аналитический подходы, мы изучали формирование и эволюцию квантовых вихрей, образующихся при надбарьерной ионизации двумерного атома водорода сверхкоротким лазерным импульсом. Аналитический подход был основан на решении уравнения Шредингера с помощью нестационарной теории возмущений. Была получена волновая функция фотоэлектрона, которая успешно использовалась для идентификации центров квантовых вихрей и дальнейшего сравнения с численными расчетами. Однако векторное поле потока вероятности с ее помощью не анализировалось. Здесь мы восполним этот пробел, при этом будем использовать как стандартное выражение для потока в импульсном пространстве, так и альтернативное выражение, чувствительное к фазе волновой функции. Этот альтернативный „поток" был введен в работе [11] и является величиной, „симметричной" по отношению к потоку, записанному в координатном представлении.

Теоретическая модель

Будем использовать систему атомных единиц, в которой уравнение Шредингера для двумерного атома водорода, взаимодействующего с лазерным импульсом, имеет вид

$$i\,\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle = (\hat{H}_0 + \hat{V})|\Psi(t)\rangle, \tag{1}$$

где $\hat{H}_0$ — гамильтониан свободного атома, $\hat{V} = -\hat{\mathbf{d}}\mathbf{F}(t)$ — оператор взаимодействия атома с электрическим полем лазера $\mathbf{F}(t)$, $\hat{\mathbf{d}} = -\hat{\mathbf{r}}$ — оператор дипольного момента.

Как и в предыдущих работах [4–6], будем искать решение уравнения (1) в приближении сильного поля. Это означает, что в расчетах пренебрежем возбужденными состояниями атома и не будем учитывать кулоновское воздействие на фотоэлектрон. Также будем считать, что изменения населенности основного (начального) состояния атома пренебрежимо малы. Тогда решение уравнения Шредингера (1) может быть записано в виде следующей суперпозиции:

$$|\Psi(t)| = |\Psi^{(0)}_{1,0}\rangle e^{-iE_1 t} + \sum_{m=0,\pm1,\ldots}\int\limits_0^\infty b_{k,m}(t)|\Psi^{(0)}_{k,m}\rangle e^{-iE_k t} k\,dk. \tag{2}$$

Здесь первое слагаемое соответствует основному состоянию атома с энергией $E_1 = -1/2$, характеризуемого вектором $|\Psi^{(0)}_{1,0}\rangle$. Нижние индексы „$1,0$" указывают на значения главного квантового числа $n = 1$ и проекции момента на ось z $m = 0$. Второе слагаемое представлено суперпозицией векторов состояний фотоэлектрона $|\Psi^{(0)}_{k,m}\rangle$, которые будем описывать цилиндрическими волнами. Индексы „k, m" указывают на то, что это состояние характеризуется энергией $E_k = k^2/2 = (k_x^2 + k_y^2)/2$ и проекцией момента $m = 0, \pm1, \pm2, \ldots$.

Так как нашей задачей является идентификация квантовых вихрей в импульсном пространстве, то перепишем (2) в соответствующем представлении:

$$\Psi(\mathbf{k}, t) \equiv \langle\mathbf{k}|\Psi(t)\rangle = \frac{2}{(k^2+1)^{3/2}}\,\Phi_0(\varphi_k)e^{-iE_1 t} + \sum_{m=0,\pm1,\ldots} b_{k,m}(t)(-i)^{|m|}\Phi_m(\varphi_k)e^{-iE_k t}, \tag{3}$$

где $\mathbf{k} = (k, \varphi_k)$ — импульс электрона в полярной системе координат, $\Phi_m(\varphi_k) = e^{im\varphi_k}/\sqrt{2\pi}$ и были использованы явные выражения для волновых функций в импульсном представлении [6]:

$$\Psi^{(0)}_{1,0}(\mathbf{k}) \equiv \langle \mathbf{k}|\Psi^{(0)}_{1,0}\rangle = \frac{2\Phi_0(\varphi_k)}{(k^2+1)^{3/2}},$$

$$\Psi^{(0)}_{k',m}(\mathbf{k}) \equiv \langle \mathbf{k}|\Psi^{(0)}_{k',m}\rangle = (-i)^{|m|}\frac{\delta(k'-k)}{k'}\Phi_m(\varphi_k). \quad (4)$$

Разложение (3) позволяет вывести замкнутое уравнение для неизвестных коэффициентов $b_{k,m}(t)$. Для этого подставим (3) (или (2)) в уравнение Шредингера (1). Тогда, учитывая явный вид оператора взаимодействия в импульсном представлении:

$$\hat{V} = \mathbf{F}(t) i\partial/\partial\mathbf{k},$$

получаем

$$\frac{\partial b_{k,m}(t)}{\partial t} = \frac{(-i)}{2}(\delta_{m,1}+\delta_{m,-1})F_x(t)\frac{6ke^{i\omega_{k1}t}}{(k^2+1)^{5/2}}$$
$$+\frac{(-i)^{|m-1|-|m|}}{2}F_x(t)\left(\frac{\partial}{\partial k} - ikt - \frac{m-1}{k}\right)b_{k,m-1}(t)$$
$$+\frac{(-i)^{|m+1|-|m|}}{2}F_x(t)\left(\frac{\partial}{\partial k} - ikt + \frac{m+1}{k}\right)b_{k,m+1}(t), \quad (5)$$

где $\omega_{k1} = (k^2+1)/2$ и рассмотрено поле, поляризованное вдоль оси x $\mathbf{F}(t) = (F_x(t), 0)$. Система уравнений (5) соответствует системе, полученной нами ранее в работе [6]. Отличие состоит в более удобной записи без введения знаков $\pm$, $\mp$.

Решая систему (5) с помощью теории возмущений, можно получить следующее выражение для части волновой функции (3), соответствующей непрерывному спектру:

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{k}, t) = -i\left[b^{(1)}_{k-1,10}(t)\Phi_{-1}(\varphi_k) + b^{(1)}_{k1,10}(t)\Phi_1(\varphi_k)\right]e^{-iE_kt}$$
$$+ b^{(2)}_{k0,10}(t)\Phi_0(\varphi_k)e^{-iE_kt}$$
$$- \left[b^{(2)}_{k-2,10}(t)\Phi_{-2}(\varphi_k) + b^{(2)}_{k2,10}(t)\Phi_2(\varphi_k)\right]e^{-iE_kt}, \quad (6)$$

где верхний индекс у амплитуд соответствует порядку теории возмущений [5,6], а добавленный нижний индекс „10“ указывает на начальное связанное состояние электрона. Знак тильда над Ψ подчеркивает (в [5,6] было принято обозначение $\tilde{\Psi}(\mathbf{k}.t) = b(\mathbf{k}, t)e^{-iE_kt}$), что связанное состояние опущено, т. е. в дальнейшем рассмотрении интерференцией между начальным и конечными состояниями электрона пренебрегается.

Нашей задачей является идентификация квантовых вихрей в импульсном пространстве. Для этого будем использовать следующие два определения для потока вероятности в импульсном пространстве $\mathbf{k}$:

$$\mathbf{j}(\mathbf{k}, t) = \mathbf{k}|\tilde{\Psi}(\mathbf{k}, t)|^2,$$

$$\bar{\mathbf{j}}(\mathbf{k}, t) = -\frac{1}{2i}\left[\tilde{\Psi}^*(\mathbf{k}, t)\nabla_k\tilde{\Psi}(\mathbf{k}, t) - \tilde{\Psi}(\mathbf{k}, t)\nabla_k\tilde{\Psi}^*(\mathbf{k}, t)\right]. \quad (7)$$

Здесь $\mathbf{j}(\mathbf{k}, t)$ — стандартное выражение для потока вероятности в импульсном пространстве, $\bar{\mathbf{j}}(\mathbf{k}, t)$ — „симметричный“ поток вероятности [11], где $\nabla_k = \partial/\partial\mathbf{k}$.

Как показано ранее [5,6], квантовые вихри, появляющиеся в процессе ионизации атома, обусловлены интерференцией состояний фотоэлектрона. Следовательно, для того чтобы корректно описать эти вихри, необходимо знание о фазе волновой функции. Выделим эту фазу в найденной волновой функции (6):

$$\tilde{\Psi}(\mathbf{k}, t) = |\tilde{\Psi}(\mathbf{k}, t)|e^{i\chi(\mathbf{k},t)},$$

где $\chi(\mathbf{k}, t)$ — фаза. Если подставить $\tilde{\Psi}(\mathbf{k}, t)$ в стандартное определение потока вероятности $\mathbf{j}(\mathbf{k}, t)$, то фаза $\chi(\mathbf{k}, t)$ исчезнет, а идентификация квантового вихря будет возможна в основном по нулям волновой функции. Другая ситуация для альтернативного потока $\bar{\mathbf{j}}(\mathbf{k}, t)$. В самом деле, подставив $\tilde{\Psi}(\mathbf{k}, t)$ в выражение для $\bar{\mathbf{j}}(\mathbf{k}, t)$, получаем

$$\bar{\mathbf{j}}(\mathbf{k}, t) = -|\tilde{\Psi}(\mathbf{k}, t)|^2\nabla_k\chi(\mathbf{k}, t).$$

Результаты расчетов и обсуждения

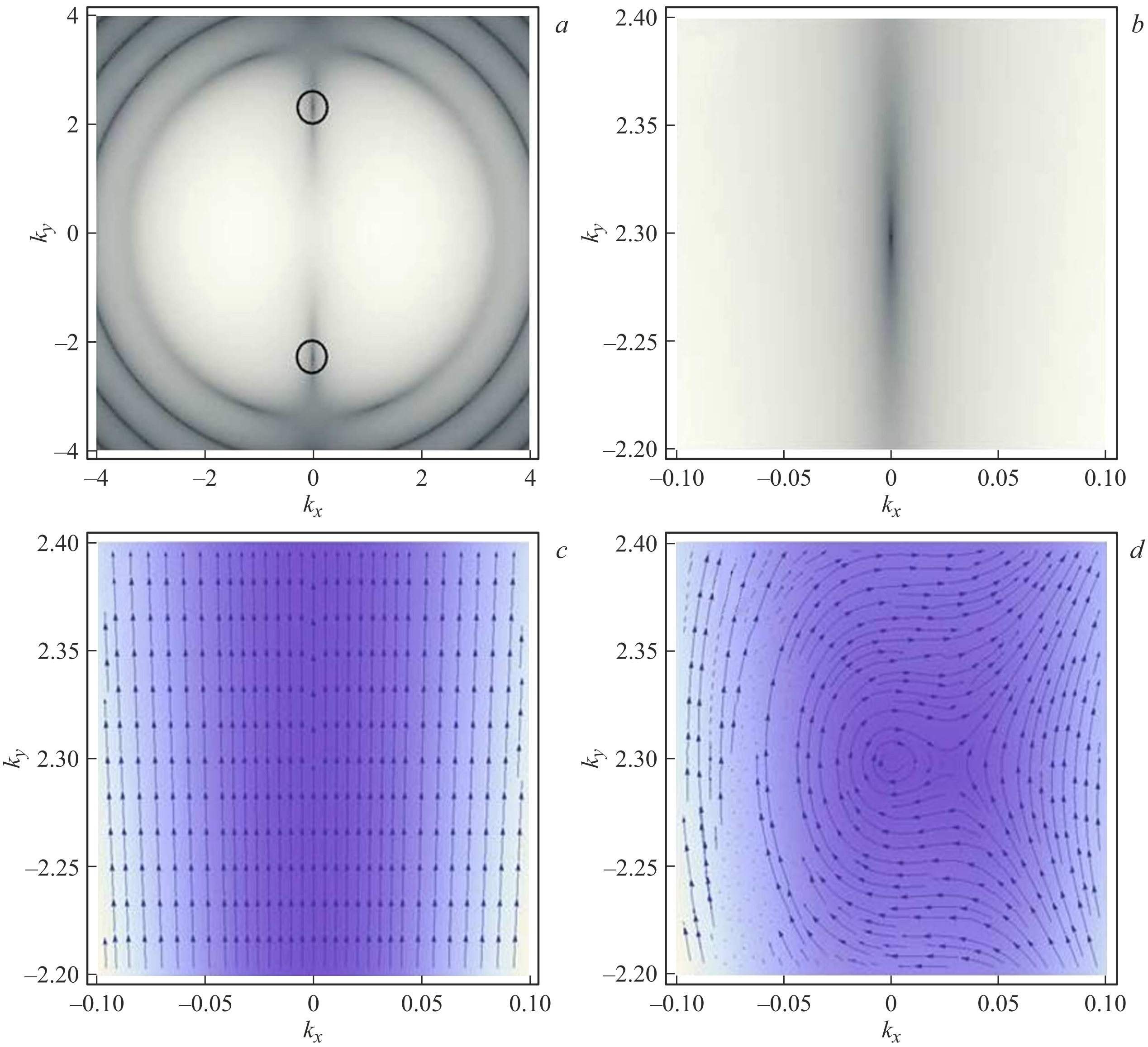
Ненулевую компоненту напряженности поля лазерного импульса промоделируем следующим выражением:

$$F_x(t) = F_0\cos(\omega t)[\theta(T-t) - \theta(-t)], \quad (8)$$

где $\theta(x)$ — функция Хэвисайда, F_0 — постоянная амплитуда, ω — частота, T — длительность импульса. Значения параметров импульса выберем близкими к тем, для которых ранее были идентифицированы квантовые вихри [4–6]: $F_0 = 0.6$, $\omega = \pi$, $T = 2$. Будем интересоваться установившимся решением, т. е. исследовать $\tilde{\Psi}(\mathbf{k}, t)$ (6) на временах $t > T$.

Сделаем несколько замечаний относительно выбранных параметров. Значение амплитуды поля берется таким, чтобы преобладала надбарьерная ионизации, но при этом $F_0 < 1$. Это позволяет оставаться в пределах используемых теоретических приближений. На „масштаб“ вихря сильно влияет продолжительность импульса T [4]. Как показывают расчеты, при $T < 1$ вихрь не успевает сформироваться и его невозможно идентифицировать. При переходе к большим значениям $T > 10$ запрещенная область постепенно „размазывается“, и в конечном счете вихрь теряет свою индивидуальность, а „картина“ становится похожа на ту, которая имеет место при ионизации монохроматическим полем.

На рисунке представлены графики распределения по импульсам фотоэлектрона $|\tilde{\Psi}(k_x, k_y, t > T)|^2$ (a, b) (для более четкого отображения график строится для $\ln|\tilde{\Psi}|^2$) и соответствующие векторные поля для стандартного потока вероятности $\mathbf{j}(k_x, k_y, t > T)$ (c) и „симметричного“ потока $\bar{\mathbf{j}}(k_x, k_y, t > T)$ (d).



Распределение по импульсам фотоэлектрона (a, b), векторные поля для стандартного потока вероятности (c) и „симметричного“ потока (d).

Для выбранных параметров наблюдаются два симметричных вихря с центрами в точках $k_x = 0$, $k_y \approx \pm 2.3$. На рисунке, a эти центры выделены кружками, а на рисунке, b центр вихря с положительной координатой $k_y \approx 2.3$ показан в увеличенном масштабе.

Рисунок, c иллюстрирует векторное поле, соответствующее стандартному току вероятности в импульсном пространстве. Можно видеть, что в окрестности центра вихря $k_x = 0$, $k_y \approx 2.3$ векторное поле никак не выделено и совпадает с усредненным полем скоростей в данной области импульсного пространства. Только более темный фон на графике указывает на наличие запрещенной области для фотоэлектрона.

Совсем по-другому выглядит векторное поле, полученное с помощью „симметричного“ потока, рисунок d. Отчетливо видно, что вокруг нуля волновой функции поле $\bar{\mathbf{j}}(k_x, k_y, t > T)$ имеет вихревую структуру, близкую к соленоидальной.

Заключение

Таким образом, показано, что с помощью „симметричного“ выражения для потока вероятности $\bar{\mathbf{j}}(\mathbf{k}, t)$ (7), введенного в работе [11], возможно идентифицировать квантовые вихри в импульсном пространстве.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

[1] F. Cajiao Véez, LeiGeng, J.Z. Kamiński, Liang-You Peng, K. Krajewska. Phys. Rev. A, **102**, 043102 (2020). DOI: 10.1103/PhysRevA.102.043102
[2] F. Cajiao Vélez. Phys. Rev. A, **104**, 043116 (2021). DOI: 10.1103/PhysRevA.104.043116
[3] Lei Geng, F. Cajiao Vélez, J.Z. Kamiński, Liang-You Peng, K. Krajewska. Phys. Rev. A, **104**, 033111 (2021). DOI: 10.1103/PhysRevA.104.033111
[4] S.Yu. Ovchinnikov, N.V. Larionov, A.A. Smirnovsky, A.A. Schmidt. St.Petersburg Polytechnical St. University J. Phys. Math., **10** (4), 111–121 (2017). DOI: 10.18721/JPM.10409
[5] N.V. Larionov, A.A. Smirnovsky, S.Y. Ovchinnikov, A.A. Schmidt. Tech. Phys., **63** (11), 1569–1575 (2018). DOI: 10.1134/S1063784218110166
[6] N.V. Larionov, A.A. Smirnovsky, D.N. Makarov, S.Y. Ovchinnikov. JETP, **129** (6), 949–955 (2019). DOI: 10.1134/S1063776119110062
[7] J.H. Macek, J.B. Sternberg, S.Y. Ovchinnikov, J.S. Briggs. Phys. Rev. Lett., **104** (3), 033201 (2010). DOI: 10.1103/PhysRevLett.104.033201
[8] F. Navarrete, R. Della Picca, J. Fiol, R.O. Barrachina. J. Phys. B, **46** (11), 115203 (2013). DOI: 10.1088/0953-4075/46/11/115203
[9] F. Navarrete, R.O. Barrachina. Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. B, **369**, 72–76 (2016). DOI: 10.1016/j.nimb.2015.09.073
[10] C.M. DeMars, S.J. Ward, J. Colgan, S. Amami, D.H. Madison. Atoms, **8** (2), 26 (2020). DOI: 10.3390/atoms8020026
[11] R.F. Nalewajski. J. Math. Chem., **53**, 1966–1985 (2015). DOI: 10.1007/s10910-015-0526-2