Министерство экономического

развития и торговли РФ

Государственный университет -

Высшая школа экономики

Факультет Прикладная Математика и Кибернетика

Кафедра Прикладная Математика

**ВЫПУСКНАЯ КВАЛИФИКАЦИОННАЯ РАБОТА**

На тему

\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_Ионизация низкоразмерных систем в сильном внешнем поле.\_\_\_\_\_\_\_\_ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

Студент группы М-94

Раевский Дмитрий Николаевич

(Ф.И.О.)

Научный руководитель

Профессор, д. ф.-м. н., Эминов Павел Алексеевич

(должность, звание, Ф.И.О.)

Консультант

Профессор, к. ф.-м. н., Сезонов Юрий Иванович

(должность, звание, Ф.И.О.)

Москва 2013

ОГЛАВЛЕНИЕ

§1.Введение…………………………………………………………………….3

§2.Ионизация двумерной квантовой точки полем линейно-поляризованной волны…………………………………………………………………………..12

§3.Вычисление импульсного распределения и вероятности процесса ионизации двумерной и трехмерной квантовой ямы суперпозицией постоянного и переменного электрических полей………………………….27

§4.Вычисление скорости ионизации атома водорода с учетом кулоновского взаимодействия электрона с атомным остовом в туннельном режиме………………………………………………………………………...39

§5.Заключение………………………………………………………….……..50

Список использованной литературы………………………………………...52

1. **Введение.**

В последние годы актуально исследование квантовых эффектов в низкоразмерных наноструктурах. Переход к системам пониженной размерности приводит к новым физическим результатам, которые отличаются как качественно, так и количественно от аналогичных эффектов в трехмерном случае. В связи с этим возрастает потребность детального количественного описания свойств низкоразмерных систем во внешних электромагнитных полях.

Развитие нанотехнологий и успехи в создании мощных источников когерентного излучения стимулируют теоретические и экспериментальные исследования процесса ионизации наноструктур в интенсивных электромагнитных полях [1,2].

Методы теоретического описания явления нелинейной ионизации связанной системы в поле интенсивной электромагнитной волны были предложены в работах [1-4]. На основе этих методов, а также подходов, развитых в [5-7], и в монографиях [8,9], проведены многочисленные теоретические исследования фотоионизации атомов, ионов и полупроводников под действием как сильного лазерного излучения, так и в электромагнитных полях сложной конфигурации (см., например, [1,2,5, 12-14] и цитированную в этих работах литературу).

В работе [1] впервые было показано, что туннельный эффект и многофотонная ионизация в переменном электрическом поле являются двумя предельными случаями процесса нелинейной фотоионизации, характер которой зависит от параметра Келдыша. Этот параметр равен отношению частоты волны к частоте туннелирования электрона :

где - энергия связи электрона, - амплитуда напряженности электрического поля, - приведенное поле, - параметр многоквантовости процесса, определяющий минимальное число фотонов, необходимых для ионизации,

– атомная единица напряженности электрического поля

Далее будем использовать атомную систему единиц, в которой В этой системе единиц - характерный импульс связанного состояния, , , а также параметр Келдыша - безразмерные величины, – энергия связи атома водорода в основном состоянии. В теории Келдыша предполагается выполнение условий и . Эти условия являются необходимыми для применимости квазиклассического приближения.

В работе [1] впервые было получено выражение для вероятности ионизации атома, которое при низких частотах, когда , переходит в обычную формулу для туннельного эффекта, а при описывает многофотонное поглощение. Заметим, что при ионизации атомов и ионов полем интенсивного инфракрасного или оптического лазера параметр Келдыша принимает значения .

В методе Келдыша влиянием кулоновского поля ядра на процесс ионизации пренебрегается, а конечное состояние электрона в амплитуде вероятности перехода из исходного связанного состояния задается точным решением уравнения Шредингера в поле электромагнитной волны.

Полученная Келдышем формула для вероятности ионизации атома в переменном электрическом поле[1] правильно передает основные черты явления: экспоненциальную зависимость вероятности ионизации от амплитуды поля и пороговые особенности при частотах, отвечающих поглощению квантов. Однако, при переходе к постоянному полю

полученное в [1] выражение не совпадало с известной формулой [2] для скорости ионизации атома водорода в постоянном поле.

Для получения правильного предэкспоненциального множителя, как отмечалось уже в самой работе [1], нужно знать волновую функцию конечного состояния электрона, учитывающую также взаимодействие фотоэлектрона с атомным остатком. Здесь следует отметить, что эта задача не потеряла свою актуальность до настоящего времени [14].

Вскоре после появления работы [1] в статье [3] была исследована простая одномерная модель ионизации связанного уровня в потенциале нулевого радиуса действия, допускающая асимптотически точное (при ) решение при любых частотах внешнего поля. Было показано, что формула для вероятности ионизации содержит ту же экспоненту, что и трехмерном случае. Также были получены формулы для вероятности ионизации связанной короткодействующими силами системы в случае линейной () и циркулярной ( поляризации падающей электромагнитной волны в трехмерном случае.

Методы, предложенные в работах [1-5] были использованы при исследовании процесса ионизации одномерной квантовой ямы сильными внешними полями в полупроводниковых гетероструктурах (см.[9] стр. 86).

Однако, как отмечалось выше, для получения правильного предэкспоненциального множителя, в случае ионизации реального нейтрального атома, необходимо учесть кулоновское взаимодействие (–заряд атомного остатка), существенно искажающее волновую функцию электрона на больших расстояниях. Кулоновские поправки на несколько порядков увеличивают скорость ионизации. В работе [10] была получена кулоновская поправка к скорости ионизации атома в случае линейной поляризации электромагнитной волны (электрическое поле направлено по оси ОХ). Было показано, что учет кулоновского взаимодействия фотоэлектрона с атомным остатком приводит к появлению дополнительного члена в предэкспоненциальном множителе

где – характерная величина размерности поля для связанной системы, –эффективное главное квантовое число.

В работе [11] исследован процесс ионизации связанной короткодействующими силами системы суперпозицией постоянного электрического и постоянного магнитного полей.

Для монохроматической электромагнитной волны с линейной поляризацией импульсное распределение вероятности ионизации имеет следующий вид[12]:

где –предэкспоненциальный множитель, а – проекция импульса фотоэлектрона на направление, параллельное (перпендикулярное) напряженности электрического поля волны, – функция Келдыша, впервые полученная в работе [1]:

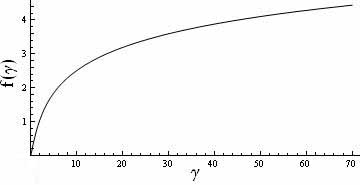


рис.1

На рисунке 1 изображена зависимость функции Келдыша от параметра адиабатичности.

Коэффициенты импульсного распределения фотоэлектронов равны:

В работе [13] вычислена кулоновская поправка к функционалу действия и к скорости многофотонной ионизации атома в интенсивном линейно поляризованном электромагнитном поле при больших значениях параметра адиабатичности .

Задача об ионизации атома в низкочастотном линейно поляризованном электромагнитном поле, когда взаимодействие между электроном и атомным остатком в конечном состоянии непрерывного спектра нельзя рассматривать по теории возмущений, обсуждается в работе [14].

Исследования процессов нелинейной ионизации атомов, ионов и наноструктур актуально в связи с созданием мощных источников когерентного излучения ультрафиолетового и рентгеновского диапазона длин волн. Такие источники имеют в своей основе лазер на свободных электронах (ЛСЭ) – прибор, преобразующий энергию ультрарелятивистских электронов, энергия которых во много раз превышает их энергию покоя , в энергию электромагнитного излучения. Они позволяют получать излучение на любой длине волны в диапазоне от до .

Уникальная установка такого типа FLASH (Free electron LASer in Hamburg)была построена и работает в лаборатории DESY(Гамбург, Германия) [15].В 2002 г. Установка FLASH генерировала импульсы электромагнитного излучения шириной около , длительностью порядка и интенсивностью около . В 2008г. в той же лаборатории DESY совместно с сотрудниками Физико-Технического института им. А.Ф.Иоффе (Санкт-Петербург) [16] проводились эксперименты, в ходе которых был изучен фотоэлектрический эффект в коротковолновой части ультрафиолетового диапазона (длина волны около ) при большой интенсивности излучения. При этом достигалась рекордная для ультрафиолетового диапазона интенсивность - . Была исследована зависимость скорости ионизации от мощности излучения, и наблюдавшаяся в эксперименте степень ионизации оказалось неожиданно высокой – под действием света из атома ксенона вырвалось до 21 электрона, то есть более трети всех у него имеющихся.

В настоящее время строится Европейский рентгеновский лазер на свободных электронах (EuropeanX-rayFEL) –международный проект по строительству самого крупного в мире лазера на свободных электронах при участии 12 стран при руководстве России и Германии. Он будет расположен в Германии между землями Гамбург и Шлезвиг-Гольштейн. Он будет значительно превосходить по своим техническим параметрам аналогичные лазеры в США и Японии.

Целью выпускной квалификационной работы является теоретическое исследование процесса ионизации двумерной квантовой точки и водородоподобного атома в интенсивных внешних полях, когда нельзя пользоваться теорией возмущений и требуется точный учет взаимодействия электронной системы с внешним полем.

Удерживающий потенциал двумерной квантовой точки будем моделировать потенциальной ямой вида [17]

|  |  |
| --- | --- |
|  | (1) |

где - радиус квантовой точки. В зависимости от вида латерального удерживающего потенциала характерный размер квантовой точки меняется от десятков до нескольких сотен нанометров, а число электронов в квантовой точке может контролируемо меняться от единиц до нескольких сотен. Отметим, что другой термин, предлагаемый в литературе для рассматриваемого в работе двумерного объекта – двумерная квантовая яма.

Во 2 параграфе исследован процесс ионизации двумерной квантовой точки полем линейно-поляризованной волны. В 3 параграфе методом мнимого времени (ММВ) получено импульсное распределение вероятности ионизации связанной системы в интенсивном поле образованном суперпозицией постоянного и переменного электрических полей. В 4 параграфе вычислена вероятность туннельной ионизации водородоподобного атома суперпозицией постоянного и переменного электрических полей с учетом кулоновского взаимодействия фотоэлектрона с атомным остатком.

1. **Ионизация двумерной квантовой точки полем линейно-поляризованной волны.**

В настоящем параграфе исследован процесс ионизации двумерной квантовой точки в поле плоской линейно-поляризованной волны.

Расчет вероятности ионизации будет проводиться на основе квантово-механических методов, изложенных в работе [3,4].

Пусть линейно-поляризованная электромагнитная волна распространяется в направлении оси OZ, т.е. перпендикулярно к плоскости квантовой точки, а длина волны много больше радиуса ямы. Тогда электрическое поле можно считать однородным и направленным вдоль оси OX:

,

где – амплитуда напряженности, - частота волны.

Энергию связи электрона в двумерной квантовой точке обозначим через , а действием магнитного поля волны на нерелятивистский электрон будем пренебрегать.

Если напряженность электрического поля волны удовлетворяет условию

|  |  |
| --- | --- |
|  | (2) |

то в первом приближении можно пренебречь влиянием поля волны на движение электрона в потенциальной яме ().

Рассмотрим нестационарное уравнение Шредингера в двумерной потенциальной яме (1) в присутствии переменного электрического поля

|  |  |
| --- | --- |
|  | (3) |

здесь - гамильтониан электрона в свободном случае:

где – двумерный оператор Лапласа:

Пусть в начальный момент времени электрон находился в основном состоянии с энергией . Нестационарное уравнение Шредингера в двумерной потенциальной яме (1) имеет следующий вид:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (4) |

Решение этого уравнения представляется в виде:

где является собственной функцией гамильтониана с собственным значением . Волновая функция стационарного состояния определяется формулой

|  |  |
| --- | --- |
|  | (5) |

где и - функции Бесселя и Макдональда нулевого порядка и приняты обозначения

Из условия непрерывностив точке следует, что , откуда . Из условия нормировки находим постоянную :

|  |  |
| --- | --- |
|  | (6) |

Условия непрерывности волновой функции и ее производной в точке приводят к уравнению

решение которого определяет энергию основного состояния электрона.

Окончательно получаем:

Временная функция Грина определяется, как решение неоднородного дифференциального уравнения в виде

где - эрмитов линейный дифференциальный оператор в координатном представлении. Свертка с функцией Грина дает решение неоднородного дифференциального уравнения: если - функция Грина оператора , тогда решение уравнения задается так:

Таким образом, функция Грина нестационарного уравнения Шредингера в области является решением следующего уравнения:

Для квазистационарного режима уравнение (3) приводится к интегральному уравнению:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (7) |

Функция Грина отвечает движению частицы в однородном поле, зависящем от времени, и легко находится переходом к импульсному представлению:

Здесь - функция Хевисайда,

- обобщенный импульс для движения в однородном электрическом поле, - векторный потенциал электрического поля. В рассматриваемом случае переменного электрического поля, направленного по оси ОХ, имеем:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (8) |

Величина

является классической траекторией частицы в поле .

Уравнение (7) является точным интегральным уравнением для волновой функции . Для наших целей достаточно найти приближенное решение.При выполнении условия (2) отличие точной волновой функции от функции пренебрежимо мало в области , а при (- радиус квантовой точки) функция равна нулю. Тогда в формуле (7) функцию можно в первом приближении заменить на волновую функцию связанного состояния электрона в квантовой точке для свободного случая.

Используя стационарное уравнение Шредингера без учета влияния внешнего поля, выделим произведение :

Подставив полученное выражение в уравнение (7), получаем:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (9) |

Переходя далее к импульсному представлению волновой функции , получаем:

Здесь

Зная явный вид волновой функции в координатном представлении, вычислим

Для вычисления этого интеграла, перейдем к полярным координатам . Чтобы не спутать обобщенный импульс от константы , будем обозначать первый как

С учетом известных соотношений для цилиндрических функций

функция представляется в следующем виде:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (10) |

Здесь , а величина определяется формулой (6).

Подставляя в формулу (9) выражения для векторного потенциала и обобщенного импульса (8), получаем:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (11) |

Уравнение (11) можно записать и в другом, более простом и удобном виде. С учетом формулы (8), а также уравнения, определяющим классическую траекторию частицы в поле получаем:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (12) |

где функция определяется из (10).

Для вычисления вероятности ионизации в единицу времени надо вычислить полный поток частиц через бесконечно удаленныеот центра квантовой точки прямые, перпендикулярные оси ОХ [3], т. е.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (13) |

В (13) черта означает усреднение по периоду волны. Поток

|  |  |
| --- | --- |
|  | (14) |

а плотность потока частиц

|  |  |
| --- | --- |
|  | (15) |

где символ означает комплексное сопряжение. Подставляя (12) в (15) получаем выражение для плотности потока электронов:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (16) |

Обозначим через ту часть плотности потока, которая не зависит от координаты , то есть . Подставив это в формулу (14), получим следующую формулу для потока:

где – дельта-функция Дирака.

Воспользовавшись далее формулой

Где - параметр Келдыша, поток можно представить в следующем виде:

Подынтегральное выражение имеет полюса в точках , где

Величина

определяет порог ионизации – минимальное число квантов, поглощение которых необходимо для ионизации системы. При полюс лежит на мнимой оси, при он находится на вещественной оси. Учитывая соотношение

и устремляя , получаем следующее выражение:

Проинтегрировав это выражение по и по с помощью дельта-функций, получим, что , и . Также учтем, что при суммировании недиагональные члены этой суммы () при быстро осциллируют и взаимно компенсируются; конечный вклад возникает лишь при . Усредняя по периоду поля и домножая полученное выражение на два, находим, что вероятность ионизации имеет вид суммы вероятностей многофотонных процессов:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (17) |

где есть парциальная вероятность ионизации при поглощении квантов волны с частотой :

|  |  |
| --- | --- |
|  | (18) |

При этом выполняется закон сохранения энергии

В этом выражениичлен равен средней кинетической энергии колебательного движения электрона в поле . Для нахождения точной формулы для вероятности ионизации плоской двумерной квантовой точки, остается вычислить интеграл в (18), а значит надо найти Так как являются коэффициентами ряда Фурье, то эту функцию можно представить в виде однократного интеграла:

где , а функция определяется формулой (10), а можно выразить из уравнения для

Сделаем далее замену и перепишем формулу (8) для обобщенного импульса в удобном виде:

Преобразуем подынтегральное выражение:

В результате, имеем:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (19) |

где - параметр многоквантовости процесса ионизации.

В предельном случае , когда для ионизации требуется поглощение большого числа фотонов, интеграл (19) вычисляется методом перевала.

Метод перевала используется при решении интегралов вида

где - большой параметр, а - кривая в комплексной области (в общем случае), и являются голоморфными на .Если - конечный контур, то в первом приближении асимптотическое решение представляется в виде:

достигает своего максимума в единственной точке , , если - простая перевальная точка, то есть . Если функциядостигает максимума на данном контуре в нескольких точках, то определяется как сумма вкладов от всех перевальных точек.

В данном случае

тогда уравнение для перевальных точек принимает вид:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (20) |

Подставим в формулу (10):

|  |  |
| --- | --- |
|  | (21) |

где константа определяется формулой (6), а и – функции Инфельда нулевого и первого порядков соответственно.

При интегрировании в (19) следует учитывать, что эффективные значения и много меньше . Поэтому все величины, входящие в показатель экспоненты, нужно разложить в ряд Тейлора до и включительно.

Перепишем уравнение (20) в следующем виде:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (22) |

где - простая перевальная точка. Раскладывая функции, в которые входят и , до квадратичных членов найдем значения для , :

|  |  |
| --- | --- |
|  | (23) |

|  |  |
| --- | --- |
|  | (24) |

Подставим формулы (23) и (24) в интеграл (19). Следует отметить, что экспоненциальный множитель при разных перевальных точках отличается только знаком в мнимой части, реальная же часть совпадает. Учитывая это, получаем:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (25) |

где функция Келдыша [1]:

и принято обозначение

Выражение (25) надо подставить в (18) и проинтегрировать,перейдя к полярным координатам, при этом можно пренебречь вкладом от члена, содержащего быстро осциллирующий множитель.

В итоге, для вероятности –квантовой ионизации в поле линейно-поляризованной волны нулевого уровня электрона в двумерной квантовой точке с энергией связи получаем формулу

|  |  |
| --- | --- |
|  | (26) |

где приняты обозначения

Быстро растущая в показателе экспонента в формуле (26) величина в поле линейно-поляризованной волны имеет такой же вид, как и в трехмерном и одномерном случаях [2,9], и впервые она была получена в работе [1].

В отличие как от одномерной модельной задачи об ионизации связанного уровня в поле короткодействующих сил [2], так и от аналогичной задачи в трехмерном случае [2,9], в рассматриваемом нами двумерном случае формула (26) допускает точное проведение суммирования по квантовому числу , благодаря чему можно найти вероятность ионизации в единицу времени:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (27) |

Другой характерный только для двумерной задачи результат состоит в том, для вероятности ионизации с поглощением фотонов в квазиклассическом приближении, когда выполнены условия

где - характерная величина размерности поля для связанной системы, также удается получить точное аналитическое представление:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (28) |

Важным частным случаем рассматриваемой задачи является случай адиабатического приближения, когда параметр . В этом случае для вероятности процесса получаем следующую асимптотику:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (29) |

где –приведенное поле.

Зависимость вероятности процесса от параметра в предэкспоненциальном множителе является линейной. Для сравнения, соответствующие расчеты без учета кулоновских поправок дают в одномерном случае [1] и в трехмерном случае для основного состояния электрона [1,3,12].

В другом предельном случае, когдапроцесс ионизации является многофотонным и , вероятность ионизации задается формулой:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (30) |

Сравнивая полученные выражения с полученными ранее результатами для низкоразмерных наноструктурс короткодействующим удерживающим потенциалом, хочется обратить внимание на то, что в адиабатическом приближении в формуле для вероятности ионизациив постоянном электрическом зависимость предэкспоненциального множителя от параметра приведенного поля имеет [1,19,20], в то время как в переменном электрическом поле она имеет вид [1,2,12], где - приведенное поле и - размерность системы.

Таким образом, в настоящем параграфе получены аналитические выражения, описывающие зависимости как скорости ионизации (см. рис.2), так и парциальных вероятностей процесса ионизации двумерной квантовой точки от характерных параметров задачи.

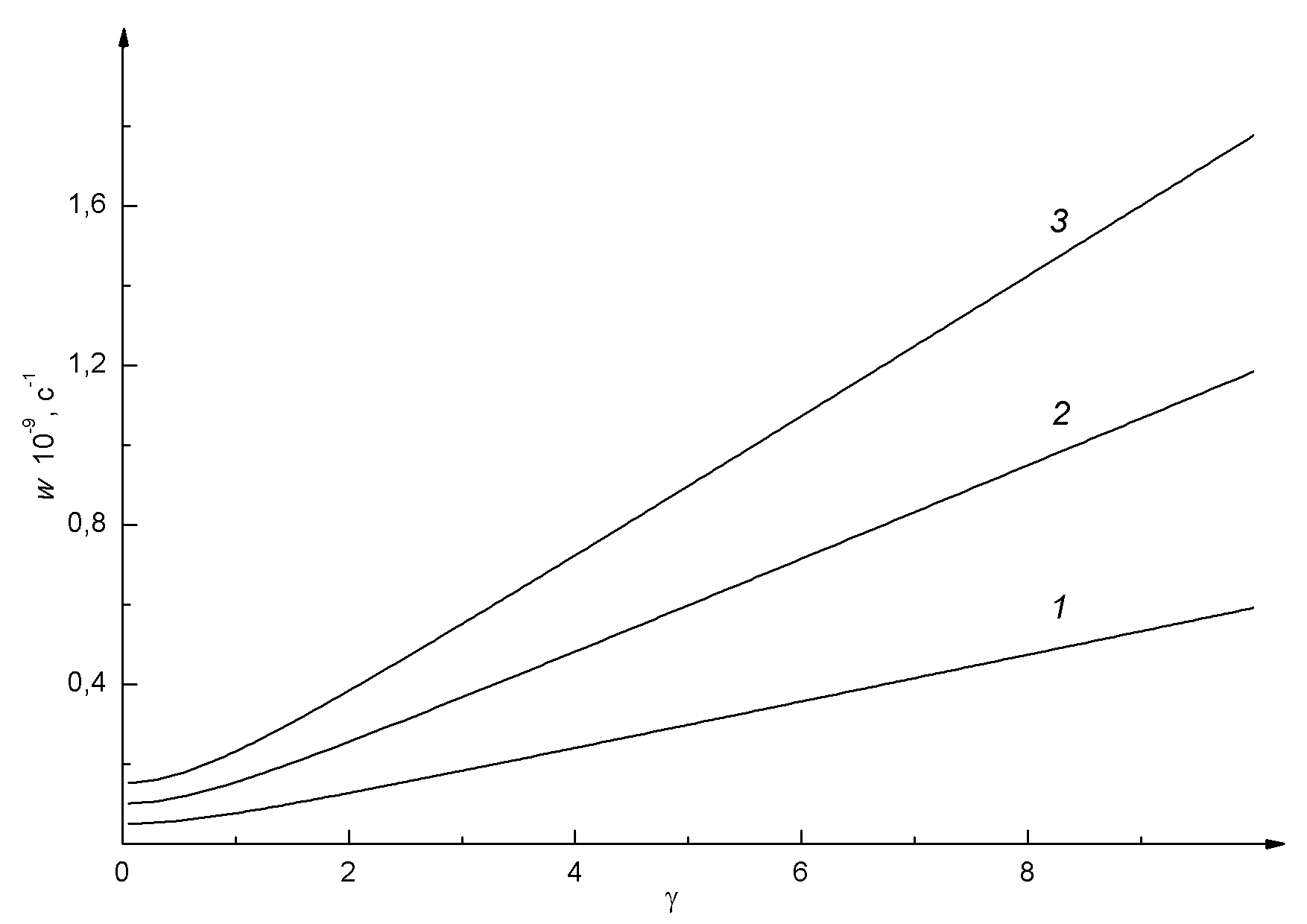


рис. 2

Рисунок 2. Зависимость скорости ионизации от параметра Келдыша, радиуса квантовой точки и глубины ямы:

1. **Вычисление импульсного распределения и вероятности процесса ионизации двумерной и трехмерной квантовой ямы суперпозицией постоянного и переменного электрических полей.**

В работах [21-23] рассматривалась многофотонная ионизация атома в электрическом поле, представляющем суперпозицию постоянного и электрического полей. Эта задача впервые обсуждалась в работе [22].

Количественное рассмотрение явления в случае отрыва электронов, связанных короткодействующими силами, проведено в работе [21] для внешнего поля, векторный потенциал которого задается формулой:

Получена формула для дифференциальной вероятности процесса в общем случае, когда напряженность постоянного поля направлена под произвольным углом к оси, вдоль которой происходят колебания электрического поля линейно-поляризованной волны . Также рассмотрен случай, когда векторный потенциалволны ортогонален напряженности постоянного поля

В работах [21,22] было показано, что в случае относительно слабого переменного поля волны присутствие умеренно сильного постоянного поля может существенно увеличить вероятность ионизации.

Распад связанного короткодействующими силами притяжения мелкого уровня в суперпозиции постоянного электрического поля и поля электромагнитной волны исследовалсяв работе [24]. Вероятность ионизации в этой работе определяется с помощью метода квазиэнергий, и так же, как и в [21], для случая ортогональных полей, то есть исчезает вклад в вероятность ионизации от их интерференции. Анализ, проведенный в [24], также показал, что приложение даже относительно слабого постоянного поля значительно увеличивает вероятность ионизации уровня полем волны. В этой же работе для интерпретации полученных результатов был предложен механизм туннелирования из виртуального состояния: электрон поглощает определенное число квантов волны и с энергией , где - частота волны, туннелирует в постоянном поле. Такой процесс реализуется только в присутствии высокочастотного поля и статического поля и не может происходить при выключении постоянного поля [24].

Влияние переменного поля на туннелирование частицы через потенциальный барьер, межзонное туннелирование в полупроводнике и надбарьерное отражение в наиболее интересном случае коллинеарных полей рассмотрено в работе [23] методом комплексных классических траекторий Ландау. В этой работе использовалась простейшая модель зонной структуры полупроводников для изучения межзонного туннелирования (нелинейный эффект Франца-Келдыша). С экспоненциальной точностью вычислена вероятность подбарьерного прохождения частицы через треугольный потенциал (автоэлектронная эмиссия) в переменном поле. Показывается, что вероятность квазиклассических процессов туннелирования под действием переменного во времени возмущения резко увеличивается и дается анализ того, каким образом с увеличением амплитуды электрического поля волны происходит последовательная смена режимов туннелирования. Полученные в [23] формулы относятся к вероятности ионизации, проинтегрированной по всем значениям энергии вылетающих фотоэлектронов и их направлений. При туннельной ионизации существенную информацию о процессе дают энергетические и угловые распределения образующихся электронов [12], которые в [23] не исследовались. К сожалению, в этой работе не приведены строгие условия применимости полученного результата, которые должны быть получены на основе исходного квантового рассмотрения.

Учитывая, что в указанных выше работах [21-24] предсказано существенное увеличение вероятности классически запрещенных процессов под влиянием электромагнитной волны, актуально дальнейшее исследование процесса ионизации связанных систем в переменном электрическом поле с постоянной составляющей.

В настоящем параграфе будет впервые исследован процесс ионизации в двумерной и трехмерной квантовой точки суперпозицией постоянного и переменного электрических полей одинакового направления.С экспоненциальной точностью найдена также полная вероятность ионизации системы за единицу времени. В расчетах используется метод мнимого времени (ММВ) [3,4,12-14]

Прохождение через потенциальный барьер является примером процесса, который в классической механике вообще невозможен. В квазиклассическом же случае вероятность таких процессов экспоненциально мала, а соответствующий показатель экспоненты может быть найден следующим образом [12].

В комплексной плоскости переменной подбарьерное движение для экстремальной траектории происходит вниз по мнимой оси от до . После выхода из-под барьера, движение продолжается вдоль вещественной оси. Для более удобного описания подбарьерного движения, удобно перейти к вещественному времени .

Точка начала подбарьерного движения находится из уравнения для точки перевала, найденного в предыдущей главе:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (31) |

Где – обобщенный импульс

Далее, вычисляя укороченноедействие , вероятность процесса будет определяться формулой:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (32) |

Как известно, в случае короткодействующего потенциала и переменного электрического поля метод мнимого времени приводит к тому же результату, что и решение уравнения Шредингера с использованием метода перевала лишь на конечном этапе вычислений [12]. Совпадают не только экспоненты в полной вероятности процесса, но и выражения для импульсного и энергетического спектра электронов и предэкспоненциальный множитель .

Для определенности рассмотрим вначале двумерный случай. Обозначим энергию связи электрона через , и пусть в начальный момент времени электрон находился в основном состоянии с энергией . Для определения вероятности ионизации с помощью ММВ необходимо вычислить укороченное действие. Электрическое поле представляет собой суперпозицию постоянногои переменного полей:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (33) |

где – напряженность постоянного поля, - амплитуда переменного поля и - его частота. Векторный потенциал запишется в виде

|  |  |
| --- | --- |
|  | (34) |

и обобщенный импульс

|  |  |
| --- | --- |
|  | (35) |

Вначале рассмотрим траекторию, которая дает наибольший вклад в скорость ионизации. Для этого данная траектория должна минимизировать функцию . Учитывая формулы для обобщенного импульса (35) и для момента времени, отвечающему за начало подбарьерного движения, (31), можно сделать вывод, что функция укороченного действия будет зависеть от и . Случай будет минимизировать укороченное действие.

Экстремальная подбарьерная классическая траектория, минимизирующая мнимую часть укороченного действия , соответствует ситуации, когда частица выходит из-под барьера в момент времени с нулевой скоростью, т.е. . Таким образом,полагая в момент времени координату равной нулю, экстремальная классическая траектория определяется уравнением:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (36) |

а момент времени определяется из уравнения (31):

|  |  |
| --- | --- |
|  | (37) |

Также стоит обратить внимание, что если принять в начальный момент времени координату равной нулю, то эффективная ширина барьера будет равна .

Согласно ММВ, подбарьерное движение происходит в мнимом времени сверху-вниз вдоль мнимой оси от точки до . Удобно перейти к вещественному времени Перепишем операторы дифференцирования для :

Учитывая известные соотношения

уравнения (36),(37) (точкой теперь обозначается дифференцирование по ) запишутся в следующем виде:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (38) |

|  |  |
| --- | --- |
|  | (39) |

К сожалению, в общем случае уравнение (39) решить нельзя. Но при адиабатическом или многофотонном предельных случаях, можно найти приближенное решение. Решая уравнение (38), получаем:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (40) |

Для эффективной ширины барьера имеем следующую формулу:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (41) |

Согласно ММВ, вероятность ионизации в единицу времени с точностью до предэкспоненциального множителя определяется формулой (32):

|  |  |
| --- | --- |
|  | (42) |

где укороченное действие

|  |  |
| --- | --- |
|  | (43) |

В литературе формулы (42),(43) также называются формулами Ландау-Дыхне [12].

В рамках ММВ, перепишем формулу (43), переходя к вещественному времени :

|  |  |
| --- | --- |
|  | (44) |

Вычислим мнимую часть укороченного действия для экстремальных траекторий, когда . В итоге, получаем:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (45) |

где:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (46) |

а – предэкспоненциальный множитель. Для нахождения импульсного распределения электронов, необходимо учесть вклад траекторий, близких к экстремальным, а именно вычислить мнимую часть укороченного действия, раскладывая все величины в ряд Тейлора до и включительно. Перейдя к вещественному времени перепишем уравнение (31) в следующем виде:

Раскладывая левую часть уравнения в ряд Тейлора, получаем

|  |  |
| --- | --- |
|  | (47) |

где – параметр адиабатичности. Введем следующее обозначение:

Тогда решение уравнения (47) можно записать в таком виде:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (48) |

Разложим правую часть в (48) до и включительно.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (49) |

По теореме о производной обратной функции, имеем

|  |  |
| --- | --- |
|  | (50) |

где является решением следующего уравнения

|  |  |
| --- | --- |
|  | (51) |

Учитывая формулу (50), выделяем мнимую часть укороченного действия (44) и находим импульсное распределение вероятности ионизации двумерной квантовой ямы с точностью до предэкспоненциального множителя:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (52) |

где определяется формулой (46), и принято обозначение

|  |  |
| --- | --- |
|  | (53) |

Если в формулах (52),(53) положить , то они будут описывать импульсное распределение вероятности ионизации одномерной квантовой ямы.

Заметим, что с точностью до предэкспоненциального множителя формулы, полученные во втором параграфе, являются частным случаем формул (52),(53), например, формула вероятности отрыва электрона полем линейно-поляризованной волны. Например, при выключении постоянного поля (), из формулы (51) следует

Подставляя это значение в формулы (52),(53), получаем

где

Если вынести общий множитель , получим тот же самый показатель экспоненты, что и для вероятности ионизации при поглощении квантов в поле линейно-поляризованной волны.

Перейдем далее к трехмерному случаю. Трехмерный случай с математической точки зрения мало чем отличается от рассматриваемого до этого процесса ионизации в двумерной квантовой яме, но впоследствии полученная формула более интересна практически, ведь ионизации реальных атомов происходит в трехмерном пространстве. Формулы (33), (34), (35) примут вид:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (54) |

|  |  |
| --- | --- |
|  | (55) |

|  |  |
| --- | --- |
|  | (56) |

Уравнение (31), определяющее начальный момент времени для подбарьерного движения, записывается в виде:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (57) |

а укороченное действие :

|  |  |
| --- | --- |
|  | (58) |

Раскладывая все величины до , и , и проведя аналогичные выкладки, что и для двумерного случая, получаем:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (59) |

Учитывая формулу (59), выделяем мнимую часть укороченного действия (58) и находим импульсное распределение вероятности ионизации трехмерной квантовой ямы:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (60) |

где определяется уравнением (53).

Опять же, предельный случай в формуле (60) дает уже известный показатель экспоненты для импульсного распределения вероятности ионизации в трехмерной квантовой яме.

Далее приведены график зависимости величины от параметра Келдыша (рис.3) и график зависимости от величины (рис.4), построенных для различных значений отношения амплитуды переменного поля к напряженности постоянного поля.

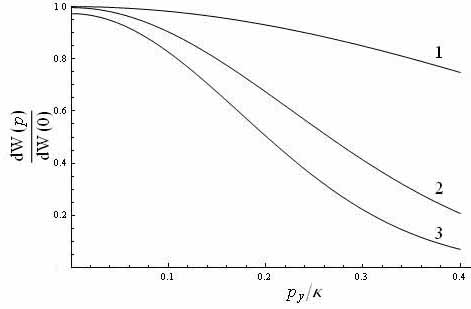


Рисунок 3. Зависимость отношения импульсного распределения электронов к скорости ионизации для экстремальных траекторий отпри значении параметра Келдыша , значении параметра многоквантовости и при фиксированных значениях для различных значений отношения напряженности постоянного поля к амплитуде переменного поля : , ,

*.*

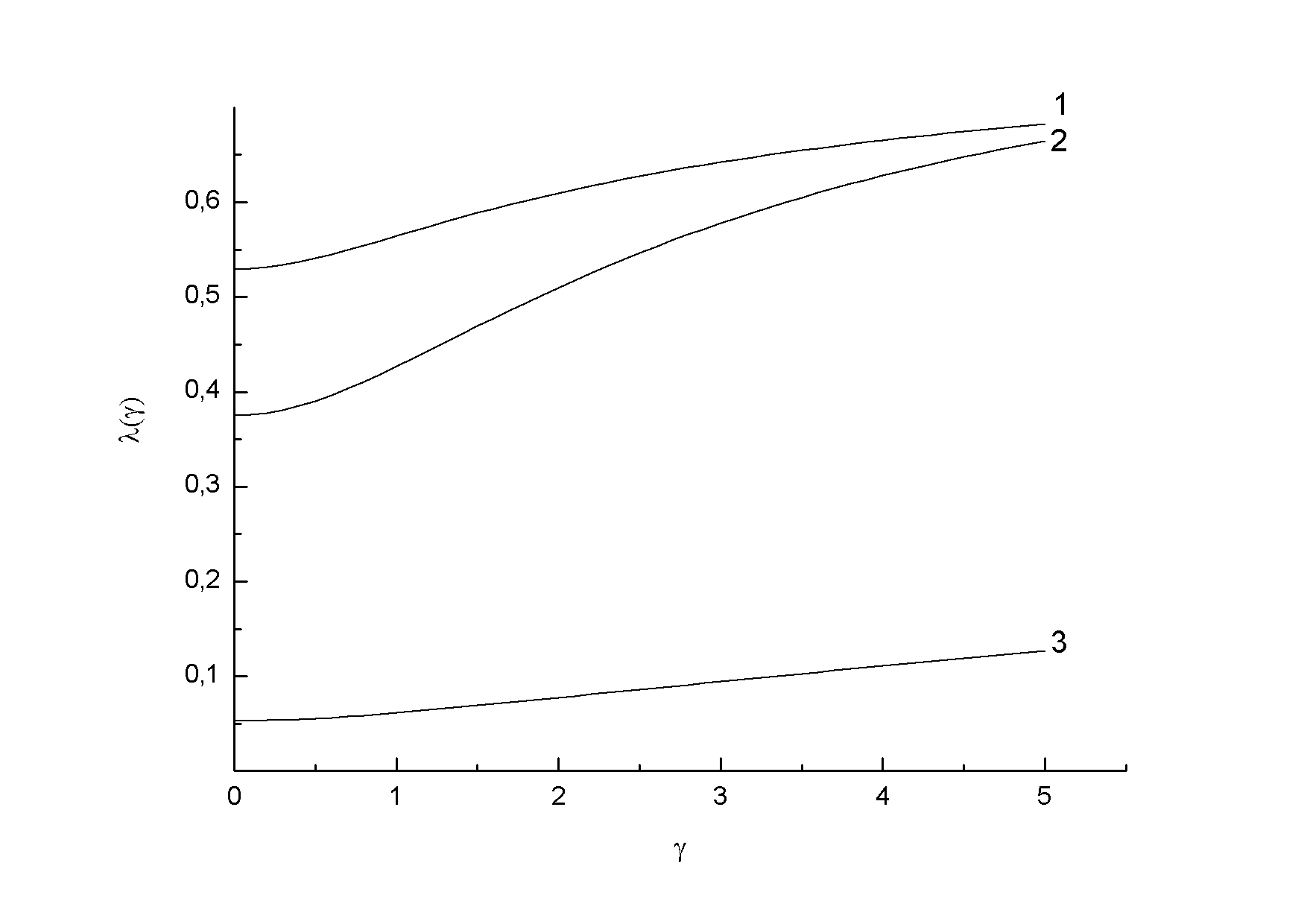


Рисунок 4. Зависимость отношения скорости ионизации в суперпозиции полей к скорости ионизации в переменном электрическом поле от параметра Келдыша, для различных значений отношения напряженности постоянного поля к амплитуде переменного поля : , , .

1. **Вычисление скорости ионизации атома водорода с учетом кулоновского взаимодействия электрона с атомным остовом в туннельном режиме.**

При расчетах многофотонной ионизации атомов под воздействием сильного внешнего поля по теории Келдыша [1] электромагнитное поле волны учитывается точно, а кулоновским взаимодействием вылетающего электрона с атомным остовом пренебрегается. На основе этой теории были получены удобные аналитические формулы для вероятности ионизации и импульсных спектров фотоэлектронов [1,3]. Но в случае нейтральных атомов кулоновское взаимодействие приводит к подавлению потенциального барьера, через который туннелирует электрон, что существенно (на несколько порядков) увеличивает скорость ионизации атома.

Так, в работе [10] было учтено кулоновское взаимодействие,и было установлено, что в случае линейно-поляризованной волны

скорость ионизации для -состояния атома

отличается от аналогичной величины для уровня в короткодействующей яме [3,9] с той же энергией связи следующим множителем:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (61) |

где - приведенное поле, – характерная величина размерности поля для связанной системы, - амплитуда напряженности переменного поля, –эффективное главное квантовое число, а - заряд атомного остова.

Также подробное рассмотрение процесса ионизации частиц в интенсивном линейно-поляризованном электрическом поле при больших значениях параметра Келдыша с учетом кулоновского взаимодействия было проведено в работе [13].

Энергия кулоновского взаимодействия приводит к появлению добавки к действию

|  |  |
| --- | --- |
|  | (62) |

Данная поправка пропорциональна заряду атомного остова , и интеграл можно вычислять вдоль невозмущенной кулоновским полем траектории. На верхнем пределе интеграл логарифмически расходятся, и требует сшивания с асимптотикой волновой функции. Процедура сшивания подробна описана в работах [10,13,25]. В случае линейно-

-поляризованной волны, вычисление этого интеграла дает известный результат (61).Обратим внимание, что поправка (61) оказывается одинаковой для любых значений параметра адиабатичности и формально вообще не зависит от частоты, что, впрочем, характерно только для поля с линейной поляризацией. В туннельном режиме эффект возрастания вероятности ионизации легко интерпретировать, так как кулоновское поле понижает высоту барьера, через который туннелирует электрон.

Эта добавка к укороченному действию учитывается в рамках ММВ следующим образом:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (63) |

причем , как показывают расчеты, является логарифмической функцией.

В настоящее время выражения для скорости туннельной ионизации с учетом кулоновского взаимодействия широко используются для калибровки интенсивных лазерных импульсов. Появились новые электронные приборы, физические характеристики которых определяются взаимодействием электронов с электромагнитными полями различной конфигурации. К числу таких устройств относятся диоды и триоды с резонансным туннелированием электронов, джозефсоновские контакты.

В настоящем параграфе будет рассмотрен процесс ионизации водородоподобного атома суперпозицией постоянного и переменного электрических полей. Учитывая результаты 2 параграфа, а также работ [2,3,10,12,13,19], предэкспоненциальный множитель можно представить в виде

|  |  |
| --- | --- |
|  | (64) |

где:

а) –множитель, возникающий при вычислении скорости ионизации в случае удерживающего потенциала нулевого радиуса (в этом случае удерживающий потенциал представляется в виде ). Таким образом, определяетсяквадратом Фурье-образа волновой функции электрона в исходном связанном состоянии (см. [10]).

б) – множитель, возникающий при интегрировании методом перевала. Его можно записать в явном виде:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (65) |

где - параметр многоквантовости, а точка и функция определяются из следующих выражений:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (66) |

|  |  |
| --- | --- |
|  | (67) |

в) представляет собой множитель, возникающий в результате учета дальнодействующего кулоновского поля. Эта поправка вычисляется по формуле (62).

Найдем . Чтобы вычислить эту константу, необходимо во втором параграфе в формуле (21) осуществить предельный переход . В этом случае удерживающий потенциал двумерной квантовой точки перейдет в потенциал нулевого радиуса . Для получения верного результата, надо полученный результат поделить еще на.

Перепишем формулы (21) и (6):

При предельном переходе к потенциалу нулевого радиуса, . Используя известную формулу:

получаем, что . Так потенциал имеет вид , то выражение для множителя принимает следующий вид:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (68) |

Теперь найдем постоянную . Перепишем формулу для с учетом формулы (66):

|  |  |
| --- | --- |
|  | (69) |

где под подразумевается обобщенный импульс, который раскладывается до нулевого порядка , то есть можно принять . Вычислим значения и :

|  |  |
| --- | --- |
|  | (70) |

|  |  |
| --- | --- |
|  | (71) |

С учетом (70) и (71) уравнение (69) примет вид:

Из уравнения (67) получаем

|  |  |
| --- | --- |
|  | (72) |

К сожалению, найти точное значение невозможно в общем случае произвольного параметра Келдыша . Но в предельных случаях адиабатического и многофотонного процессов ионизации, значение можно найти приближенно. Окончательно, формула для множителя принимает следующий вид:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (73) |

Чтобы найти кулоновскую поправку необходимо учесть, что внешнее поле направлено по оси ОХ, а значит в формуле (62) можно подставить траекторию, определяемую уравнением (40), из третьей главы. Заменяя мнимое время на вещественное , формулу для добавочного действия представим в виде:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (74) |

Для кулоновского потенциала этот интеграл расходится на верхнем пределе, так как при . Поэтому воспользуемся процедурой сшивания с асимптотикой волновой функции электрона для свободного атома, т.е. без учета поля волны:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (75) |

где и – эффективное главное квантовое число. Вводим точку сшивания такую, что , – ширина барьера, определяемая формулой (41).Таким образом, (74) может быть представлено в следующем виде:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (76) |

причем здесь . Первый член в формуле (76) задает ту часть действия, которая набирается на начальном участке подбарьерной траектории электрона, где полем волны можно пренебречь.

В общем случае получить точное выражение для добавочного действия оказывается невозможным. В настоящем параграфе кулоновскую поправку вычислим в туннельном режиме, когда параметр адиабатичности , то есть в случае достаточно медленно меняющихся полей.

Перепишем уравнение (41) для эффективной ширины барьера:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (77) |

В адиабатическом приближении, когда , используя разложение функции в ряд Маклорена, находим следующее приближенное решение уравнения (39):

|  |  |
| --- | --- |
|  | (78) |

Учитывая (78), в том же случае адиабатического приближения, для эффективной ширины барьера получим следующую асимптотику.

|  |  |
| --- | --- |
|  | (79) |

|  |  |
| --- | --- |
|  | (80) |

Переходим к безразмерным переменным и (см. [13,25]), где траектория определяется уравнением (40).В этом случае уравнение (78) в переменной примет вид:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (81) |

Опять же, раскладывая гиперболические функции в ряд Маклорена, получаем:

Окончательно:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (82) |

Введем малый параметр:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (83) |

Этот параметр , определяющий вклад кулоновского поля ядра в силу, действующую на электрон, действительно оказывается мал; в поле титан-сапфирового лазера ( для атома водорода, для атома и для иона , а в поле рентгеновского лазера с энергией фотона для иона [25].

Перепишем уравнение (76) с учетов (81), (82) и (83):

Окончательно:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (84) |

Устремляя и, переходя к старым переменным и ,получаем:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (85) |

где - характерная величина связанной системы. Выражение (63) для кулоновской поправки примет вид:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (86) |

Заметим, что формула (86) не зависит ни от частоты переменного поля, ни от параметра адиабатичности , к тому же формула (61) является частным случаем формулы (86). Так, при выключении постоянного поля формула (86) переходит в формулу (61) для кулоновской поправки в поле линейно-поляризованной волны. Теперь вернемся к формуле (73). В туннельном режиме уравнение (72) можно решить приближенно, раскладывая в ряд Тейлора в точке :

|  |  |
| --- | --- |
|  | (87) |

Уравнение (72) решалось также численно и результат сравнивался с асимптотическим решением (87). Уравнение решалось для значений параметра адиабатичности от до , и максимальная погрешность составляла .

Подставляя (87) в и учитывая связь , получаем, что

|  |  |
| --- | --- |
|  | (88) |

Тогда формула (73) для множителя принимает вид:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (89) |

Обратим внимание, что во втором параграфе аналогичная константа будет выглядеть следующим образом:

В туннельном режиме, в формуле . Из формул (50) и (53) в случае получаем:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (90) |

Окончательно, собирая все предэкспоненциальные множители из формул (89),(86) и (68),учитывая (90) и подставляя все в формулу (60), получаем:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (91) |

Формула (91) описывает импульсное распределение вероятности ионизации нейтрального атома с учетом дальнодействующего кулоновского поля в туннельном режиме.

Вычислим скорость ионизации в единицу времени. Выпишем асимптотическую формулу в адиабатическом приближении для :

|  |  |
| --- | --- |
|  | (92) |

Перейдем далее к интегрированию по . Учитывая (92), вычисления дают следующий результат:

|  |  |
| --- | --- |
|  | (93) |

Следует отметить, что при выключении постоянного поля () формула (93) переходит в результат работ [3,10] для скорости ионизации атома водорода полем электромагнитной волны в адиабатическом приближении:

Из полученных результатов (46) и (93) следует, что имеет место существенное увеличениескорости ионизации квантовой точки и атома водорода в постоянном электрическом поле в присутствии слабого переменного электрического поля, и, наоборот, в суперпозиции переменного электрического поля и относительно слабого постоянного поля (см.также рис.4).

Таким образом, в настоящем параграфе получены формулы, описывающие зависимости от характерных параметров системы импульсного распределения и скорости туннельной ионизации водородоподобного атома суперпозицией постоянного и переменного электрических полей с учетом кулоновского взаимодействия электрона с атомным остатком.

1. **Заключение.**

Подведем общие итоги проведенных в работе теоретических исследований:

1. В квазиклассическом приближении получены аналитические выражения для скорости фотоионизации и парциальных вероятностей процесса ионизации двумерной квантовой точки, справедливые для любых значений параметра Келдыша и параметров удерживающего потенциала.

2.Показано, что вадиабатическом приближении в постоянном электрическом поле зависимость предэкспоненциального множителя от параметра приведенного поля имеет вид , в то время как в переменном электрическом поле она имеет вид , где - размерность системы.

3.Методом мнимого времени получено импульсное распределение вероятности ионизации связанной короткодействующими силами системы суперпозицией постоянного и переменного электрических полей.

4.Вычислена скорость туннельной ионизации водородоподобного атома суперпозицией постоянного и переменного электрических полей с учетом кулоновского взаимодействия фотоэлектрона с атомным остатком.

5.Показано, что имеет место существенное увеличения скорости ионизации связанной системы (квантовая точка, водородоподобный атом) в постоянном электрическом поле в присутствии слабого переменного электрического поля, и, наоборот, в суперпозиции переменного электрического поля и относительно слабого постоянного поля.

Выражаю благодарность своему научному руководителю профессору Эминову Павлу Алексеевичу за постановку задач и помощь в написании дипломной работы, а также консультанту профессору Сезонову Юрию Ивановичу и всем сотрудникам кафедры «Прикладная математика» за поддержку и внимание.

Список литературы.

1. Келдыш Л.В. ЖЭТФ 47 1945, 1964
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая Механика, Физматгиз, 1963
3. Переломов А.М., Попов В.С., М.В. Терентьев 50 1393, 1966
4. Никишов А.И., Ритус В.И. ЖЭТФ 52 223, 1967.
5. АммосовМ.В., Делоне Н.Б., Крайнов В.П. ЖЭТФ 912008,1986.
6. Becker A., Plaja L., Moreno P., Nurhuda M., F.H.M. Fasial, Phys. Rev. A64 023408, 2001
7. Potvliege R.M., Comput. Phys. Comm. 114 42, 1998
8. Bauer D., Koval P., Comput. Phys. Comm. 174 396, 2006
9. Демиховский. В. Я, Вульгатер Г А Физика квантовых низкоразмерных структур, Логос, 2000.
10. Переломов А.М., Попов В.С. ЖЭТФ 52514, 1967.
11. Котова Л.П., Переломов А.М., Попов В.С. ЖЭТФ 54 1151, 1968.
12. Попов В.С. УФН 174 9, 2004.
13. Попруженко С.В., Попов В.С., Мур В.Д., Бауэр Д. ЖЭТФ 135 6 1092, 2009.
14. Крайнов В.П. ЖЭТФ1388196,2010.
15. http://flash.desy.de/
16. http://www.nkj.ru/archive/articles/13308/
17. SikorskyCh., MerktU.,Phys. Rev. Let.62 18 2164, 1987
18. Никишов А.И., Ритус В.И., ЖЭТФ 46 776, 1964
19. Эминов П.А.,Гордеева С.В. Квантовая электроника 42 8 733, 2012.
20. Ритус В. И., Никишов А. И., Квантовая электродинамика явлений в интенсивном поле. Труды ФИАН т.111, Наука, 1979.
21. Никишов А. И. ЖЭТФ 62562,1972.
22. Арутюнян И. Н., Аскарьян Г. А. Письма в ЖЭТФ 12378, 1970.
23. Ивлев Б.И., Мельников В.И. ЖЭТФ 90 2208, 1986.
24. Манаков Н.Л., Файнштейн А.Г. ЖЭТФ79751, 1980.
25. Попруженко С.В., Попов В.С., Мур В.Д.Письма в ЖЭТФ 85 275, 2007.
26. Галицкий В.М., Часть I: Задачи по квантовой механике: Учебное пособие для вузов – 3-е издание, исправленное и дополненное, Едиториал УРСС, 2001.
27. Бейтмен Г, Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции, том II: функции Бесселя, функции параболического цилиндра, ортогональные многочлены, «Наука», 1966.
28. Федорюк М.В., Асимптотические методы для линейных дифференциальных уравнений, «Наука», 1983.