

ОПТИКА И СПЕКТРОСКОПИЯ. ЛАЗЕРНАЯ ФИЗИКА

Метод устойчивой вариации в задаче двухфотонной ионизации атомовЕ. И. Старосельская^{1,a}, А. Н. Грум-Гржимайло^{2,b}*Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова,*¹*физический факультет, кафедра общей ядерной физики.*²*Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобелыцина (НИИЯФ МГУ).**Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.**E-mail: ^a k.kuzmina91@gmail.com, ^b grum@sinp.msu.ru*

Статья поступила 26.06.2015, подписана в печать 03.07.2015.

Анализируется метод устойчивой вариации, являющийся одним из редко применяемых подходов к вычислению амплитуд нелинейных фотопроцессов в рамках теории возмущений. На примере двухфотонной ионизации атома водорода и водородоподобных ионов исследуется сходимость метода. Метод впервые применен в расчете угловых распределений фотоэлектронов.

Ключевые слова: фотоионизация атомов и ионов, нелинейные фотопроцессы, многофотонная ионизация, угловые распределения электронов, вакуумно-ультрафиолетовое и рентгеновское излучение, теория возмущений.

УДК: 537.563.5, 539.1.01. PACS: 32.80.Rm.

Введение

Многофотонная ионизация, при которой ион образуется в результате поглощения в одном элементарном акте нескольких фотонов, — один из фундаментальных процессов нелинейной оптики. Теоретические закономерности и экспериментальные аспекты этого процесса являются объектом активного исследования в течение многих лет (см., напр., [1] и цит. лит.). До недавнего времени явление многофотонной атомной ионизации наблюдалось (за единичными исключениями) под действием оптических или инфракрасных лазерных полей, так как для более коротковолновых диапазонов не было источников с достаточной интенсивностью. Наблюдение нелинейных фотопроцессов в диапазоне вакуумного ультрафиолета (ВУФ) и мягкого рентгена недавно стало возможным благодаря запуску в действие рентгеновских лазеров на свободных электронах, интенсивность которых на много порядков превышает интенсивность источников синхротронного излучения предшествующих поколений. В результате возникло быстро развивающееся направление, связанное с изучением многофотонных атомных процессов под действием интенсивных импульсов излучения мягкого рентгеновского и ВУФ диапазонов [2–4]. Примерами таких процессов являются двухфотонная однократная ионизация из внутренних атомных оболочек, последовательная двух- и трехфотонная двойная ионизация, двухчастотная ионизация с изменением относительной поляризации фотонных пучков и другие процессы, экспериментальное изучение которых в ВУФ и рентгеновском диапазоне до недавнего времени было невозможно.

Относительно теоретических исследований необходимо отметить следующее. Для излучения

в диапазоне от инфракрасной области до ультрафиолетовой, т.е. для энергий фотонов до нескольких электронвольт, интенсивностям порядка $10^{13} - 10^{15}$ Вт·см⁻² соответствует сильное поле, при котором происходят процессы, не описываемые теорией возмущений, такие как туннелирование и генерация высоких гармоник. Критерием реализации этого режима является отношение пондеромоторной энергии электрона в лазерном поле к энергии фотона. Поскольку при увеличении энергии фотона это отношение падает как частота фотона в кубе, то в области ВУФ при тех интенсивностях, которые характерны для экспериментов с рентгеновскими лазерами на свободных электронах, низший порядок теории возмущений, как правило, дает адекватную основу для описания процессов. Отсюда следует повышенная значимость теории возмущений для нелинейной оптики в ВУФ и рентгеновском диапазоне. Однако строгий подход к вычислению амплитуд теории возмущений уже во втором порядке подразумевает суммирование по бесконечному набору промежуточных состояний, включая интегрирование по непрерывному спектру. Такие вычисления, которые проводятся прямым суммированием непосредственно или с помощью функций Грина, весьма сложны. Ситуация усугубляется при переходе к теории возмущений третьего и более высоких порядков. Поэтому желательна разработка альтернативных подходов к вычислению амплитуд фотопроцессов по теории возмущений.

В настоящей работе внимание будет сосредоточено на вычислении характеристик процесса двухфотонной ионизации в рамках теории возмущений 2-го порядка на основе вариационного принципа — «метода устойчивой (стабильной) вариации».

ции» (variationally stable method [5]), который был впервые представлен в работах [6, 7]. Этот метод не связан с явным суммированием по промежуточным состояниям системы в вычислениях матричных элементов многофотонных переходов. Вместо такого суммирования применяется вариационная процедура. Метод несколько раз успешно применялся в расчетах полных сечений многофотонной ионизации атомов, отрицательных ионов и молекул [6–12], статической и динамической поляризуемости атомов, ионов и молекул [11–18], дисперсионных (вандерваальсовых) параметров [17–19]. Представленные в работе [9] результаты для семифотонной ионизации атома водорода, полученные методом устойчивой вариации, находятся в отличном согласии с результатами прямого суммирования по промежуточным состояниям методом функции Грина [20] для широкого диапазона длин волн падающего излучения. Таким образом, ряд проведенных расчетов свидетельствует о том, что рассматриваемый метод обладает большим потенциалом при переходе к задачам теории возмущений высокого порядка. Несмотря на это, круг задач, которые решались методом устойчивой вариации, очень узок. Например, он до сих пор не применялся для расчетов угловых распределений фотоэлектронов и других дифференциальных характеристик фотоионизации, а также для фотоионизации в двух- и многочастотных полях. Метод недостаточно апробирован в расчетах двух- и многофотонной ионизации многоэлектронных атомов. В литературе также отсутствуют исследования сходимости метода к точному решению по теории возмущений и критерии выбора класса эффективных состояний.

Расширение практики применения метода устойчивой вариации требует более подробного изучения его возможностей. В настоящей работе мы реализуем метод устойчивой вариации для задачи двухфотонной ионизации атома водорода и водородоподобных ионов в области ВУФ с целью анализа, на этом простом примере с точно известными волновыми функциями атома, пределов применимости метода и его сходимости к точным результатам теории возмущений 2-го порядка. Мы также используем метод устойчивой вариации для расчета угловых распределений фотоэлектронов.

В первом разделе работы представлены основные положения метода устойчивой вариации в приложении к двухфотонной ионизации, обсуждается конкретный способ реализации метода, отмечены его преимущества и недостатки. Во втором разделе приведены результаты расчетов полных сечений двухфотонной ионизации основных состояний атома водорода и водородоподобных ионов в рамках теории возмущений 2-го порядка методом устойчивой вариации. Обсуждается выбор параметров варьируемых функций эффективных состояний. Для анализа применимости метода устойчивой вариации проводится

сравнение с точными результатами теории возмущений 2-го порядка. Метод применен для вычисления угловых распределений фотоэлектронов. В заключении сформулированы выводы из проведенных исследований.

1. Основные положения метода устойчивой вариации

Напомним основные положения метода устойчивой вариации на примере двухфотонной ионизации квантовой системы (атома) [9]. В рамках теории возмущений 2-го порядка формула для амплитуды двухфотонного перехода из состояния i дискретного спектра в состояние f непрерывного спектра имеет вид [21]:

$$T_{i \rightarrow f}^{(2)} = \sum_s \frac{\langle f | \hat{D} | s \rangle \langle s | \hat{D} | i \rangle}{E_i - E_s + \omega}, \quad (1)$$

где $\hat{D} = \sum_n (\epsilon \cdot r_n)$ — оператор взаимодействия электромагнитного излучения с атомной системой (в дипольном приближении), а суммирование производится по всем электронам в атоме; ϵ — вектор поляризации падающего излучения; r_n — радиус-вектор фотоэлектрона; s — промежуточное состояние системы с энергией E_s , E_i — энергия атома в состоянии i ; ω — энергия фотона. В формуле (1) и всех последующих формулах используется атомная система единиц ($\hbar = e = m_e = 1$), если не оговорено другое. Выражение (1) эквивалентно

$$T_{i \rightarrow f}^{(2)} = \langle f | \hat{D} | \lambda \rangle + \langle \mu | \hat{D} | i \rangle - \langle \mu | E_i + \omega - \hat{H} | \lambda \rangle, \quad (2)$$

где

$$|\lambda\rangle = \frac{1}{E_i + \omega - \hat{H}} \hat{D} | i \rangle, \quad \langle \mu | = \langle f | \hat{D} \frac{1}{E_i + \omega - \hat{H}}, \quad (3)$$

а $\hat{H}$ — гамильтониан атома. Если рассматривать (2) как функционал, зависящий от функций λ и μ , то он обладает устойчивостью по отношению к вариациям этих функций. Таким образом, задача нахождения амплитуды (1) сводится к определению неизвестных функций λ и μ , реализующих экстремум функционала (2), а техника применения метода сводится к упрощению функционала (2) и способу нахождения функций λ и μ . Аналогично строятся функционалы от двух функций для амплитуд более высокого порядка [9]. При этом волновые функции начального состояния i и конечного состояния f считаются известными.

Применим метод устойчивой вариации к двухфотонной ионизации водородоподобной системы с зарядом Z . Отделяя угловые переменные электрона и интегрируя в матричных элементах формулы (2) по этим углам, для парциальной амплитуды ионизации в канал с орбитальным угловым моментом электрона l_f получим функционал

$$t_{l_f} = \langle \epsilon_f l_f | r | \lambda_r \rangle + \langle \mu_r | r | n_i l_i \rangle - \langle \mu_r | E_i + \omega - \hat{h}(l) | \lambda_r \rangle. \quad (4)$$

Здесь $\hat{h}(l) = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} - \frac{Z}{r} + \frac{l(l+1)}{2r^2}$ — радиальная часть гамильтониана, n_i, l_i — главное и орбитальное квантовые числа электрона в начальном состоянии, $\varepsilon_f l_f$ — энергия и орбитальный момент электрона в непрерывном спектре, l — орбитальный момент электрона в промежуточном состоянии, λ_r и μ_r — радиальные части искомых функций λ и μ . Интегрирование в матричных элементах формулы (4) проводится по радиальной координате. Рассуждения не изменятся, если вместо кулоновского потенциала $-Z/r$ подставить произвольный сферически-симметричный потенциал $V(r)$. С действительными радиальными функциями $R_{\varepsilon_f l_f}(r)$ состояния $\varepsilon_f l_f$ непрерывного спектра функционал (4) определяет абсолютное значение амплитуды. Этого достаточно для нахождения интегральных по углу электронной эмиссии величин. Для дифференциальных по углу вылета фотоэлектрона величин необходимо в (4) брать волновую функцию конечного состояния с фазой, обеспечивающей асимптотику входящей сферической волны в канале l_f .

Задачу на экстремум функционала (4) можно свести к решению системы уравнений, а при удаче — к системе линейных алгебраических уравнений, если подобающим образом подобрать класс пробных функций λ_r и μ_r , на котором ищется экстремум функционала. Мы последуем работам [5, 6] и ряду других, в которых радиальные функции разлагаются по слэтеровским орбиталим $\Phi_m(r)$:

$$\lambda_r(r) = \sum_{m=1}^M a_m \Phi_m(r), \quad \mu_r(r) = \sum_{m=1}^M b_m \Phi_m(r), \quad (5)$$

где M — число слэтеровских орбиталей; $\Phi_m(r) = N_m r^{l+m} e^{-\chi r}$; χ — произвольная пока константа; N_m — нормировочные множители, основное назначение которых — избежать в расчетах больших чисел и переполнения компьютера. Мы нормируем интеграл от квадрата слэтеровской орбитали на единицу. Мы не закладываем в базис $\Phi_m(r)$ точные волновые функции водородоподобного атома (иона), которые могли бы улучшить сходимость, а для будущих приложений моделируем ситуацию с многоэлектронным атомом, когда волновые функции заранее неизвестны. Для простоты анализа параметр χ берется общим для всех орбиталей.

После подстановки (5) в (4) функционал превращается в функцию неизвестных коэффициентов a_m и b_m и должен удовлетворять условиям на экстремум

$$\frac{\partial t_{il}}{\partial a_m} = \frac{\partial t_{il}}{\partial b_m} = 0. \quad (6)$$

Дифференцируя (4), получаем систему $2M$ линейных алгебраических уравнений для коэффициентов a_m и b_m :

$$\sum_{m=1}^M A_{nm} a_m = c_n; \quad \sum_{n=1}^M b_n A_{nm} = d_m, \quad (7)$$

где $A_{nm} = \langle \Phi_n | E_i + \omega - \hat{h}(l) | \Phi_m \rangle$, $c_n = \langle \Phi_n | r | n_i l_i \rangle$, $d_m = \langle \varepsilon_f l_f | r | \Phi_j \rangle$. Преимущество слэтеровских орбиталей $\Phi_m(r)$ с постоянным параметром χ как раз и проявляется в том, что их использование в качестве базиса для разложений (5) приводит к системе линейных алгебраических уравнений. Подстановка найденных коэффициентов a_m и b_m в формулы (5) определяет искомые функции λ_r и μ_r и, следовательно, парциальные амплитуды двухфотонных переходов (4). Процедура нахождения функций λ_r и μ_r повторяется для каждой частоты фотона и для каждой парциальной амплитуды. Из последних строятся наблюдаемые в двухфотонной ионизации величины.

Перечислим основные преимущества метода устойчивой вариации: отсутствие бесконечной суммы по промежуточным состояниям; отсутствие итерационной процедуры, приводящей к нарастанию ошибок для амплитуд более высокого порядка (как в методе Далгарно–Льюиса [22]); устойчивость выражения для амплитуд вблизи резонансов; отсутствие обращающихся в ноль разностей энергий в знаменателе. Для применения метода достаточно знания волновых функций начального и конечного состояний независимо от порядка амплитуды (числа фотонов). При этом реализация метода сводится к нахождению только двух, но зависящих от энергии эффективных функций. К недостаткам метода устойчивой вариации сейчас можно отнести, пожалуй, лишь его недостаточную апробированность, и как следствие недостаточную информацию об области его применимости.

2. Результаты расчетов и обсуждение

В результате двухфотонной ионизации водородоподобных атомов (ионов) электроны из основного состояния $1s$ ($l_i = 0$) переходят в состояния непрерывного спектра, которым по правилам отбора соответствуют орбитальные числа $l_f = 0$ (s -волна) или $l_f = 2$ (d -волна), при этом $l = 1$. Как было показано в [9, 23], амплитуды многофотонной ионизации водородоподобных ионов подчиняются скейлингу: они могут быть получены из амплитуд для атома водорода путем масштабирования шкалы энергии фотона множителем Z^2 и введения коэффициента пропорциональности Z^4 перед амплитудой. Поэтому расчет амплитуд для разных Z имеет смысл проводить только для исследования численной стабильности метода. Мы провели расчеты для атома водорода ($Z = 1$), водородоподобных ионов He ($Z = 2$) и неона ($Z = 10$) для энергий фотонов ниже порога однофотонной ионизации.

При линейно поляризованном излучении интегральное сечение двухфотонной ионизации имеет вид [21, 23, 24]

$$\sigma = \frac{I}{I_0} \frac{2\pi^2 \alpha \omega}{45} (4|t_d|^2 + 5|t_s|^2), \quad (8)$$

где α — постоянная тонкой структуры, I — интенсивность падающего излучения в $\text{Вт} \cdot \text{см}^{-2}$, $I_0 = 7.019 \cdot 10^{16} \text{ Вт} \cdot \text{см}^{-2}$. Мы ввели обозначения $t_s = t_{l=0, l=1}$, $t_d = t_{l=2, l=1}$. Амплитуды t_s и t_d были рассчитаны методом устойчивой вариации с различными значениями параметров χ и M , а также по точным аналитическим формулам теории возмущений 2-го порядка [25]. Наряду с сечением (8), которое имеет размерность квадрата длины, но зависит от интенсивности поля, широко используются двухфотонные сечения $\tilde{\sigma} = I^{-1}\sigma$, которые зависят только от характеристик мишени, но имеют размерность $\text{Вт}^{-1} \text{ см}^4$.

Рассмотрим сначала сходимость результатов по числу слэтеровских орбиталей M в разложениях (5). На рис. 1 представлены результаты расчетов сечения $\tilde{\sigma}$ двухфотонной ионизации основного состояния атома водорода ($E_i = -1 \text{ Ry}$) при разных значениях параметра M в разложениях (5) и фиксированном параметре $\chi = 0.5$. Для оценки точности метода устойчивой вариации при выбранном классе функций (5) на рисунке показано точное сечение во втором порядке теории возмущений. На верхней панели рис. 1 в увеличенном масштабе представлена область высоковозбужденных состояний атома водорода. Сечения содержат острые ре-

зонансы, соответствующие положению промежуточных np состояний. В области небольших энергий фотонов полное сечение описывается небольшим числом слагаемых M в (5), находясь в отличном согласии с точным результатом. При приближении энергий фотонов к порогу ионизации появляются отклонения от точных результатов. При недостаточно большом M рассчитанное сечение содержит хаотичные выбросы, причем при увеличении M область этих выбросов сдвигается выше по энергии фотонов. Такое поведение сходимости можно связать с тем фактом, что для воспроизведения осциллирующих волновых функций все более высоких состояний np , обладающих к тому же по-разному спадающими асимптотиками при больших расстояниях от ядра, требуется все большее количество слэтеровских орбиталей. Хотя мы привели результаты для сечений, просуммированных по вкладам s - и d -каналов, закономерности в парциальных сечениях ионизации оказались такими же, какие отмечены выше для суммарного сечения.

В качестве численной иллюстрации таблица содержит точные значения сечений двухфотонной ионизации основного состояния атома водорода, полученные в рамках 2-го порядка теории возмущений и рассчитанные нами методом устойчивой вариации

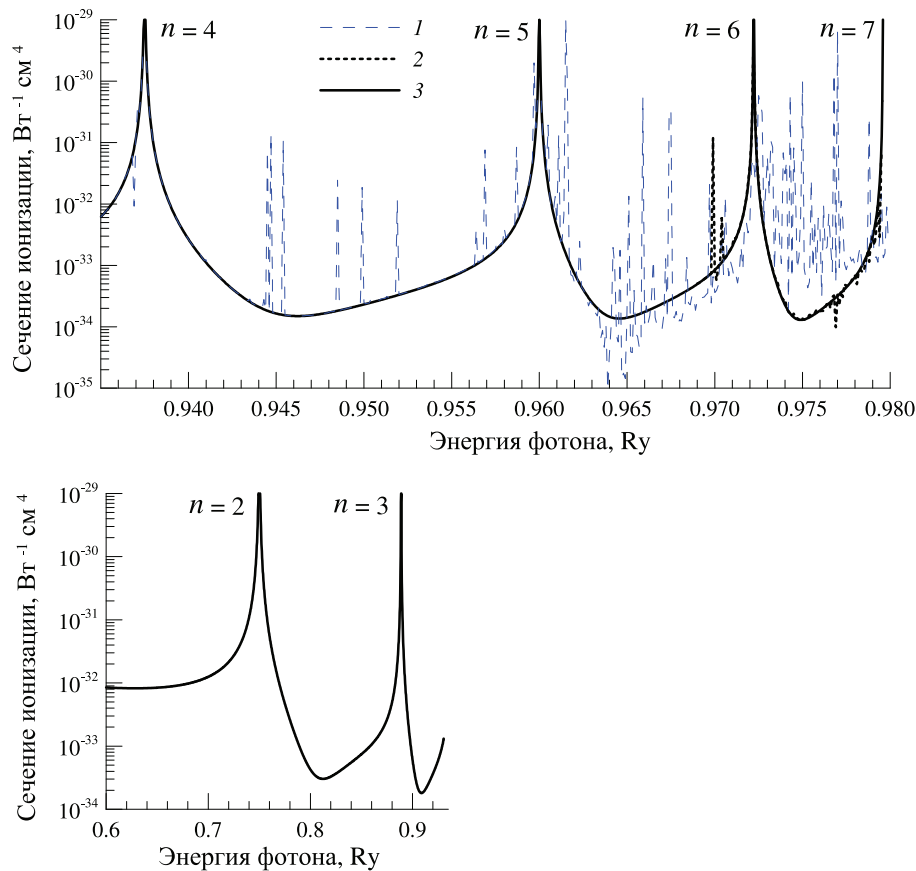


Рис. 1. Сечение двухфотонной ионизации основного состояния атома водорода в зависимости от энергии фотона при $\chi = 0.5$ для двух значений M : Кривая 1 — $M = 20$, 2 — $M = 40$. Кривая 3 — точный результат теории возмущений 2-го порядка. На нижней панели три кривые неразличимы. Указаны главные квантовые числа np резонансов

Сечения двухфотонной ионизации атома водорода
(в единицах $\text{Вт}^{-1} \cdot \text{см}^4$)

Энергия фотона, Ry	Точное значение	Наш расчет
0.770	$9.19319 \cdot 10^{-33}$	$9.19456 \cdot 10^{-33}$
0.760	$5.53081 \cdot 10^{-32}$	$5.53107 \cdot 10^{-32}$
0.751	$7.68385 \cdot 10^{-30}$	$7.68586 \cdot 10^{-30}$
0.749	$8.22946 \cdot 10^{-30}$	$8.23164 \cdot 10^{-30}$
0.740	$1.10103 \cdot 10^{-31}$	$1.10133 \cdot 10^{-31}$
0.730	$3.69455 \cdot 10^{-32}$	$3.69550 \cdot 10^{-32}$

с параметрами $\chi = 0.5$ и $M = 40$. Была выбрана область энергий фотонов вблизи резонанса, соответствующего переходам через промежуточное $2p$ -состояние атома водорода ($\omega = 0.75$ Ry), где величина сечения быстро меняется на несколько порядков. Для всех значений энергий результаты согласуются до 3–4-й значащей цифры.

Теперь обсудим способ выбора параметра χ на примере расчетов сечений ионизации иона гелия ($E_i = -4$ Ry) при фиксированном параметре $M = 50$. На рис. 2 представлены зависимости полных сечений двухфотонной ионизации основного состояния иона гелия от параметра χ при трех фиксированных энергиях фотонов. В некоторой области изменения параметра χ сечения остаются почти неизменными и соответствующими точному сечению. При выходе за пределы этой области результаты теряют стабильность и отличаются от точных значений. Таким образом, стабильность результатов по отношению к изменениям параметра χ на интервале порядка единицы можно заведомо рассматривать как признак правильно найденных амплитуд t_{il} . Для области высоких ридберговских состояний интервал оптимальных значений χ сужается. На рис. 3 представлены зависимости полных сечений ионизации иона гелия от энергии падающих фотонов для $M = 50$ и для разных параметров χ и их сравнение с точным сечением. Параметры χ взяты из найденной выше области стабильности. Верхняя панель показывает в увеличенном масштабе область энергий фотонов, близких к пороговому значению. Для небольших энергий фотонов значения сечений двухфотонной ионизации для всех χ практически одинаковы и согласуются с точными расчетами. Для значения $\chi = 1.15$ сечение находится в согласии с точными значениями для широкого диапазона энергий фотонов, включая область резонансов вплоть до $n = 6$. Даже небольшое изменение χ от 1.15 к 1.35 приводит к заметному ухудшению сходимости.

Аналогичные расчеты методом устойчивой вариации были проведены для иона Ne^{9+} , где наилучшая сходимость достигалась примерно при $\chi = 5.0$. Поскольку в кулоновом поле аргумент волновых функций масштабируется с зарядом ядра как Zr , то обратная пропорциональность заряду ядра параметра χ кажется естественной. Таким образом,

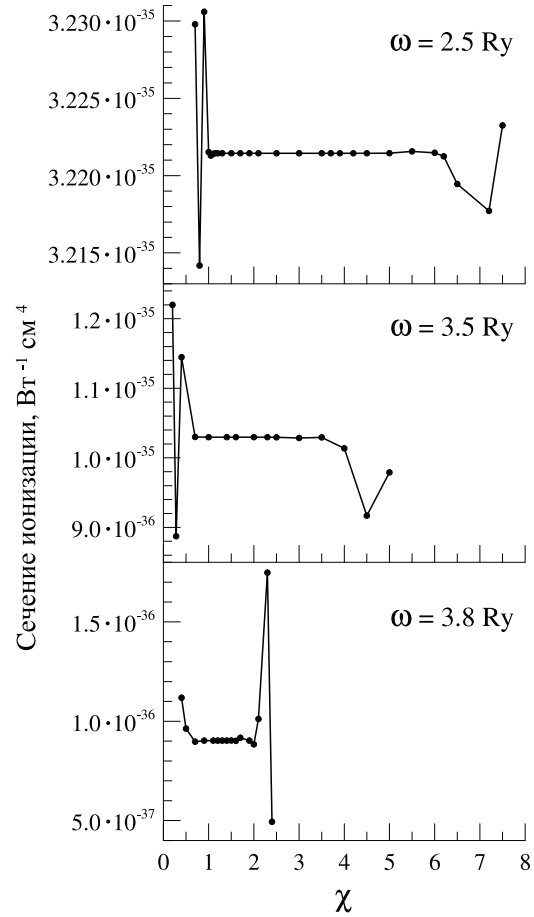


Рис. 2. Сечение двухфотонной ионизации основного состояния иона гелия He^+ , полученное методом устойчивой вариации при $M = 50$ в зависимости от параметра χ при трех энергиях фотона

для оптимального значения χ оказывается справедливым эмпирическое соотношение $\chi \approx Z/2$. При этом с увеличением Z сходимость метода несколько ухудшается.

Угловые распределения фотоэлектронов, в отличие от проинтегрированных по углам сечений, зависят от интерференции между парциальными амплитудами ионизации в s - и d -каналы, т.е. от относительной фазы этих амплитуд. Так, для линейной поляризации излучения угловое распределение фотоэлектронов записывается в виде (см., напр., [26, 27])

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{\sigma}{4\pi} [1 + \beta_2 P_2(\cos \theta) + \beta_4 P_4(\cos \theta)] = A + B \cos^2 \theta + C \cos^4 \theta, \quad (9)$$

где угол θ отсчитывается от направления поляризации; $P_k(x)$ — полиномы Лежандра; A, B, C — коэффициенты, имеющие размерность дифференциального сечения; β_2 и β_4 — безразмерные коэффициенты угловой асимметрии. Последние выражаются через парциальные амплитуды ионизации (4) [28]:

$$\beta_2 = \frac{10}{W^2 + 1} \left[\frac{1}{7} - \frac{W}{\sqrt{5}} \cos \delta \right], \quad (10)$$

$$\beta_4 = \frac{18}{7(W^2 + 1)}. \quad (11)$$

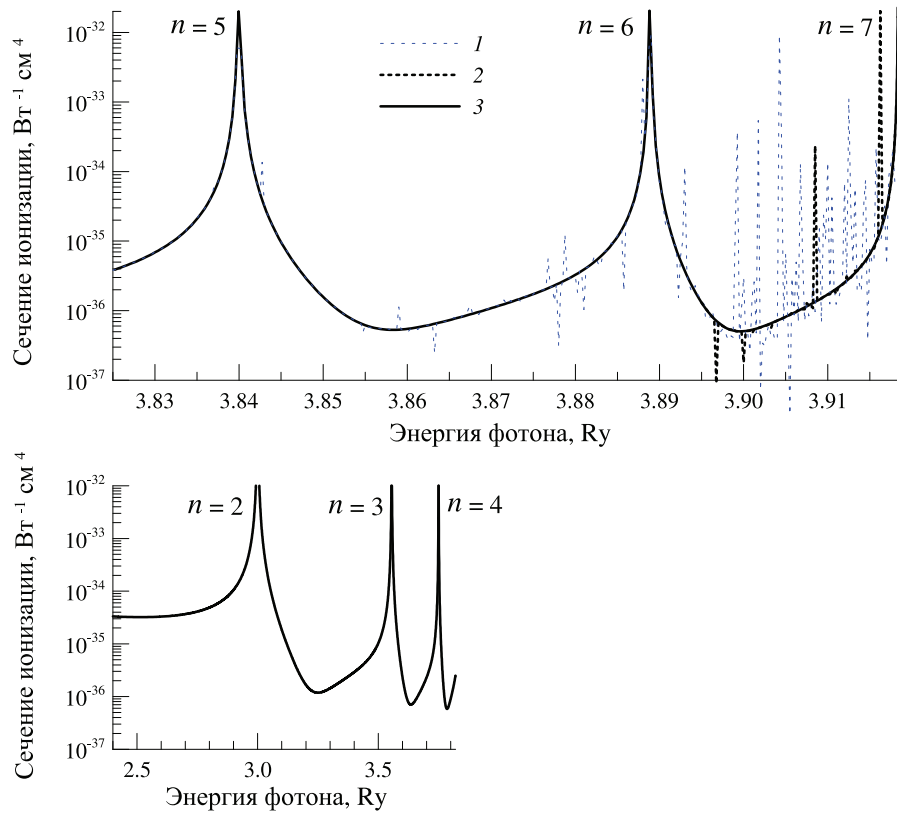


Рис. 3. Сечение двухфотонной ионизации основного состояния иона гелия He^+ в зависимости от энергии фотона при $M = 50$ для двух значений χ : Кривая 1 — $\chi = 1.35$, 2 — $\chi = 1.15$. Кривая 3 — точный результат теории возмущений 2-го порядка. Указаны главные квантовые числа np резонансов

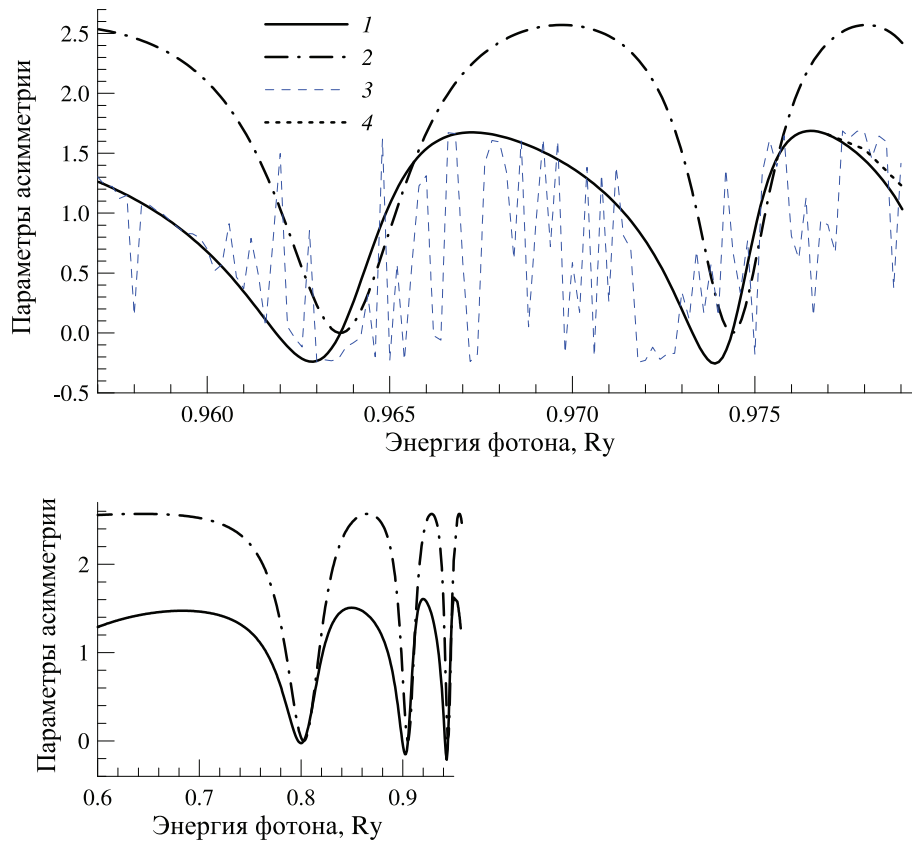


Рис. 4. Параметры угловой анизотропии β_2 и β_4 для двухфотонной ионизации атома водорода в зависимости от энергии фотона. Точные результаты теории возмущений 2-го порядка: Кривая 1 — β_2 , Кривая 2 — β_4 . Расчет β_2 методом устойчивой вариации при $\chi = 0.5$: Кривая 3 — $M = 20$, Кривая 4 — $M = 40$. На нижней панели кривые 1, 3 и 4 неразличимы

Здесь $W = |t_s| \cdot |t_d|^{-1}$ — отношение абсолютных значений парциальных амплитуд двухфотонной ионизации в s - и d -каналы, $\delta = \delta_s - \delta_d$ — разность кулоновских фаз, $\delta_l = \arg \Gamma\left(l + 1 + i \frac{Z}{\sqrt{2\varepsilon_f}}\right)$.

На рис. 4 представлены результаты расчетов параметров угловой анизотропии β_2 и β_4 для двухфотонной ионизации атома водорода. Параметры, полученные нами, находятся в отличном согласии с точными. Последние (в виде коэффициентов A, B, C формулы (9)) были также приведены ранее в [26] для нескольких значений энергии фотона. Кривые 1 и 2 для параметров β_2 и β_4 на рис. 4 универсальны: они пригодны для любой водородоподобной системы (в нерелятивистском приближении), если шкалу энергий фотона приводить в единицах $Z^2 E$. Из формулы (11) следует, что всегда $\beta_4 \geq 0$, а β_2 может принимать отрицательные значения за счет интерференции между амплитудами ионизации в s - и d -каналы. Оба параметра асимметрии обращаются в ноль, если отсутствует ионизация в d -канал. Это естественно, так как одна s -волна может дать только изотропное угловое распределение. В случае когда полностью подавлена ионизация в s -канал, параметр β_4 достигает своего максимального значения $\beta_4 = 18/7$, а β_2 принимает фиксированное значение $\beta_2 = 10/7$. Ход кривых для параметров асимметрии ясно указывает на энергии фотонов, при которых доминирует один или другой канал ионизации.

Сходимость расчетов для угловых распределений с ростом M в области высоко возбужденных состояний демонстрируется на примере параметра асимметрии β_2 на верхней панели рис. 4. Сопоставление рис. 4 и 1 ясно показывает, что большинство хаотичных выбросов в сечениях отсутствует в параметре β_2 . Эти выбросы взаимно сокращаются в отношении амплитуд ионизации в s - и d -каналы, что приводит к намного лучшей сходимости параметра анизотропии, чем сечения.

Заключение

В работе приводятся общие формулы для расчетов характеристик двухфотонной ионизации с помощью метода устойчивой вариации и проанализирован способ подбора параметров варьируемых функций. Приведены результаты расчетов сечений фотоионизации и параметров угловой анизотропии для атома водорода и водородоподобных ионов. Сравнением полученных результатов с точными продемонстрировано, что подбором параметров варьируемых функций можно рассчитать характеристики двухфотонной ионизации атома водорода и водородоподобных ионов с хорошей точностью для широкого диапазона энергий фотонов, включая области резонансов. Достигнутые результаты и созданное программное обеспечение мы планируем после надлежащего обобщения использовать в расчетах характеристик двухчастотных процессов и надпороговой ионизации многоэлектронных атомов в диапазонах ВУФ и мягкого рентгена.

Авторы выражают благодарность ст. науч. сотруднику Е. В. Грызловой и профессору С. И. Страховой за плодотворные обсуждения и полезные замечания.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант 12-02-01123-а).

Список литературы

1. Делоне Н.Б., Крайнов В.П. // Нелинейная ионизация атомов лазерным излучением. М., Физматлит, 2001.
2. Berrah N., Bozek J., Costello J.T. et al. // J. Mod. Opt. 2010. **57**. P. 1015.
3. Feldhaus J., Krikunova M., Meyer M. et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2013. **46**. P. 164002.
4. Bostedt C., Bozek J.D., Bucksbaum P.H. et al. // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2013. **46**. P. 164003.
5. Gao B., Pan C., Liu C.R., Starace A.F. // J. Opt. Soc. Amer. B. 1990. **7**. P. 622.
6. Gao B., Starace A.F. // Phys. Rev. Lett. 1988. **61**. P. 404.
7. Orel A.E., Rescigno T.N. // Chem. Phys. Lett. 1988. **146**, N 5. P. 434.
8. Liu C.-R., Gao B., Starace A.F. // Phys. Rev. A. 1992. **46**. P. 5985.
9. Gao B., Starace A.F. // Phys. Rev. A. 1989. **39**. P. 4550.
10. Pan C., Gao B., Starace A.F. // Phys. Rev. A. 1990. **41**. P. 6271.
11. Masili M., Starace A.F. // Phys. Rev. A. 2000. **62**. P. 012508.
12. Machado M., Masili M. // J. Chem. Phys. 2004. **120**. P. 7505.
13. Masili M., Starace A.F. // Phys. Rev. A. 2003. **68**. P. 033403.
14. Masili M., De Groote J.J. // Phys. Rev. A. 2004. **70**. P. 054501.
15. Cebim A., De Groote J.J. // J. Chem. Phys. 2005. **123**. P. 024305.
16. Cebim A., Masili M., De Groote J.J. // Few-Body Syst. 2009. **46**. P. 75.
17. Huang S.Z., Sun Q.F. // J. Chem. Phys. 2011. **134**. P. 144110.
18. Sun Q.-F., Huang S.-Z. // J. Chem. Phys. 2011. **135**. P. 184106.
19. Masili M., Gentil R.J. // Phys. Rev. A. 2008. **78**. P. 034701.
20. Каруле Э.М. Многофотонная ионизация атома водорода с основного состояния // Атомные процессы / Под ред. Р.К. Петеркопа. Рига, 1977. С. 5.
21. Arnous E., Klarsfeld S., Wane S. // Phys. Rev. A. 1973. **7**. P. 1559.
22. Dalgarno A., Lewis J.T. // Proc. R. Soc. London. Ser. A. 1955. **233**. P. 70.
23. Zernik W. // Phys. Rev. 1964. **135**. P. A51.
24. Klarsfeld S., Maquet A. // Phys. Rev. Lett. 1972. **29**. P. 79.
25. Крыловецкий А.А., Манаков Н.Л., Мармо С.И. // ЖЭТФ. 2001. **119**. № 1 С. 45. (Krylovetsky A.A., Manakov N.L., Marmo S.I. // JETP. 2001. **92**. N 1. P. 37.)
26. Klarsfeld S. // Lett. Nuovo Cimento. 1970. **3**. P. 395.
27. Laplanche G., Jaouen M., Rachman A. // J. Phys. B: At. Mol. Phys. 1986. **19**. P. 79.
28. Ishikawa K.L., Ueda K. // Phys. Rev. Lett. 2012. **108**. P. 033003.

A variationally stable method in the problem of two-photon atomic ionization**E. I. Staroselskaya^{1,a}, A. N. Grum-Grzhimailo^{2,b}**¹ *Department of General Nuclear Physics, Faculty of Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.*² *Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics, Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.**E-mail: ^a k.kuzmina91@gmail.com, ^b grum@sinp.msu.ru.*

A variationally stable method is analyzed; it is one of the rarely used approaches for calculating the amplitudes of nonlinear photoprocesses in the framework of perturbation theory. The convergence of the method is studied based on the example of atomic hydrogen and hydrogenlike ions. The method is used to calculate the angular distributions of photoelectrons for the first time.

Keywords: photoionization of atoms and ions, nonlinear photoprocesses, multiphoton ionization, angular distribution of electrons, VUV and X-ray radiation, perturbation theory.

PACS: 32.80.Rm.

Received 26 June 2015.

English version: *Moscow University Physics Bulletin* 5(2015).

Сведения об авторах

1. Старосельская Екатерина Игоревна — аспирант; тел.: (495) 939-56-35, e-mail: k.kuzmina91@gmail.com.

2. Грум-Гржимайло Алексей Николаевич — доктор физ.-мат. наук, вед. науч. сотрудник; тел.: (495) 939-56-35, e-mail: grum@sinp.msu.ru; algrgr1492@yahoo.com.