ЖЭТФ, 1999, том 115, вып. 6, стр. 2014–2019

МНОГОКРАТНАЯ ИОНИЗАЦИЯ ТОМАС-ФЕРМИЕВСКОГО КЛАСТЕРА СИЛЬНЫМ ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМ ПОЛЕМ

*М. Б. Смирнов, В. П. Крайнов**

Московский физико-технический институт
141700, Долгопрудный, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 4 февраля 1999 г.

Развита новая модель томас-фермиевского кластера, описывающая распределение электронов в щелочных кластерах с большим числом атомов. Рассмотрен процесс классической многократной ионизации такого кластера сильным электромагнитным полем. Вычислена степень ионизации как функция напряженности поля.

1. ВВЕДЕНИЕ

Проблема многократной ионизации атома (а также молекулы) Томаса—Ферми сильным низкочастотным полем лазерного излучения рассматривалась теоретически в ряде работ [1-4]. В этих работах многоэлектронный атом моделируется в приближении Томаса—Ферми [5], а лазерное излучение «обдирает» электроны атома, превращая его в ион, начиная с наружных оболочек и вплоть до тех электронов, для которых надбарьерная (классическая) ионизация прекращается. Квантовое туннелирование оставшихся атомных электронов под эффективным потенциальным барьером за время лазерного импульса значительно менее вероятно, чем быстрая надбарьерная ионизация, и им в рамках такой модели пренебрегают. Кроме того, ввиду очень резкой зависимости вероятности ионизации от интенсивности электромагнитного поля процесс ионизации имеет место только в окрестности максимума интенсивности, так что ионизующее электрическое поле можно считать вообще постоянным. Такой квазистатический подход к задаче ионизации справедлив при небольших значениях параметра Келдыша [6], соответствующих высоким значениям интенсивности электромагнитного поля в оптическом диапазоне частот. Поля мощных современных титан-сапфировых лазеров вполне удовлетворяют этим условиям.

Цель данной работы — обобщить модель Томаса—Ферми на случай щелочных кластеров, содержащих большое число атомов, и описать процесс классической (надбарьерной) многократной ионизации таких кластеров в сильном электромагнитном поле. При этом сами щелочные кластеры рассматриваются в традиционной модели «желе» (см. обзор [7]). Эта модель предполагает, что плотность атомарных ионов постоянна и не зависит от радиальной координаты. Кластерные электроны самосогласованно подстраиваются под заданное таким образом ионное распределение. Они заполняют оболочки, аналогичные оболочкам в атоме. При большом числе электронов оболочечная картина заменяется в модели Томаса—Ферми, как и в случае атома, непрерывным распределением электронной плотности.

---

*E-mail: krainov@theory.mipt.ru

2. МОДЕЛЬ ТОМАСА—ФЕРМИ

Уравнение Пуассона для электростатического потенциала φ в кластере имеет простой вид:

$$\Delta\varphi = 4\pi(n_e - n_i). \tag{1}$$

Здесь n_e, n_i — концентрация электронов и ионов, соответственно. Всюду используется атомная система единиц $\hbar = e = m_e = 1$. В модели «желе» концентрация ионов постоянна и имеет вид

$$n_i = \frac{Z\eta(R-r)}{(4\pi/3)R^3}, \tag{2}$$

где Z — число атомов в рассматриваемом кластере, R — радиус ионной подсистемы, $\eta(x)$ — единичная ступенчатая функция Хевисайда.

В соответствии с моделью Томаса—Ферми для ионов [8] потенциал φ связан с концентрацией электронов n_e простым соотношением:

$$n_e = \frac{(2(\varphi - \varphi_e))^{3/2}}{3\pi^2}. \tag{3}$$

Здесь

$$\varphi_e = \varphi(r_e) \tag{4}$$

— электростатический потенциал на границе электронного распределения r_e.

Из (1)–(3) получаем замкнутое уравнение для электростатического потенциала при $r < r_e$:

$$\Delta\varphi = \frac{1}{r}\frac{d^2}{dr^2}(r\varphi) = 4\pi\left[\frac{1}{3\pi^2}(2(\varphi - \varphi_e))^{3/2} - \frac{Z\eta(R-r)}{(4\pi/3)R^3}\right]. \tag{5}$$

Граничные условия для этого дифференциального уравнения второго порядка имеют вид

$$\frac{d\varphi}{dr}(r=0) = 0, \quad \varphi(r=r_e) = \varphi_e. \tag{6}$$

Первое из этих условий соответствует нулевому значению напряженности электрического поля в начале координат сферического кластера (в отличие от томас-фермиевского атома). Второе условие, согласно (3), соответствует границе r_e электронного распределения для заряженного кластерного иона (заряд образуется в процессе его ионизации электрическим полем).

Решение снаружи электронного распределения (при $r > r_e$) зависит от соотношения между радиусом электронного и ионного распределений. Если $r_e > R$, то задача достаточно проста. В этом случае при $r > r_e$ снаружи электронного распределения потенциал кластерного иона определяется кулоновским полем зарядов Z и $-Z'$:

$$\varphi(r) = \frac{Z - Z'}{r}. \tag{7}$$

Умножая (5) на r^2 и интегрируя по радиальной координате, легко проверить, что на границе электронного распределения непрерывен не только потенциал, но и его радиальная производная, т. е.

$$\varphi'(r_e) = -\frac{Z - Z'}{r_e^2}. \tag{8}$$

Это уравнение позволяет определить величину Z' через r_e, так как левая часть (8) известна из решения уравнения (5).

Ситуация обстоит несколько сложнее в случае $r_e < R$. Решение (7) справедливо тогда лишь в области $r > R$. В области $r_e < r < R$ решение для потенциала имеет вид (используется решение электростатической задачи о равномерно заряженном по объему ионном шаре):

$$\varphi(r) = -\frac{Z'}{r} - \frac{Zr^2}{2R^3} + \frac{3Z}{2R}. \tag{9}$$

Сшивка на границе электронного распределения с внутренним решением (5) позволяет выразить число электронов Z' через радиус r_e. Вместо (8) получим

$$\varphi'(r_e) = -\frac{Z(r_e/R)^3 - Z'}{r_e^2}. \tag{10}$$

Уравнение (4) с граничными условиями (5) решалось численно для типичного примера кластера, содержащего $Z = 100$ атомов натрия. Концентрация ионов бралась равной концентрации твердотельного кристаллического натрия [9], т. е. $n_i = 2.652\times \times 10^{22}$ см$^{-3}$. Согласно (2) ионный радиус такого кластера равен $R = 18.25$ а.е.

Типичная потенциальная энергия электрона $-\varphi$ для положительно заряженного кластера (выраженная в атомных единицах) показана на рис. 1 (кривая *1*) в зависимости от радиальной координаты (также в атомных единицах) для случая $Z' = 54$ (примерно наполовину ионизованный кластер). В этом случае $r_e = 16.25$ а.е.$< R = 18.25$ а.е. Видно, что в большей части электронного распределения (заштрихованная область) потенциал постоянен, т. е. электрическое поле отсутствует. Значение $\varphi(0) = 2.82$ а.е.~ 77 эВ дает оценку энергии связи внутренних электронов в таком кластере. Граница Ферми (горизонтальная прямая на рис. 1) соответствует электронам с энергией 2.70 а.е.~ 73 эВ. Отметим, что для нейтрального кластера ($Z = Z'$) энергия связи внутренних электронов гораздо меньше, а именно, $\varphi(0) = 0.12$ а.е.$= 3.26$ эВ.

На рис. 2 показана концентрация ионов n_i (2) (штриховая линия), а также концентрации электронов n_e, вычисленные согласно соотношению (3) через найденный потенциал для различных значений заряда кластерного иона (случай, показанный на рис. 1, соответствует кривой *3* на рис. 2). Видно, что радиус электронного распределения нейтрального кластера (кривая *1* на рис. 2) близок к радиусу ионного распределения. Однако электронное распределение размыто значительно сильнее, чем ионное. В общем случае распределение электронов нормировано на их число Z' в ионизованном кластере:

$$4\pi\int_0^\infty n_e(r)r^2dr = Z' \le 4\pi\int_0^\infty n_i(r)r^2dr = Z. \tag{11}$$

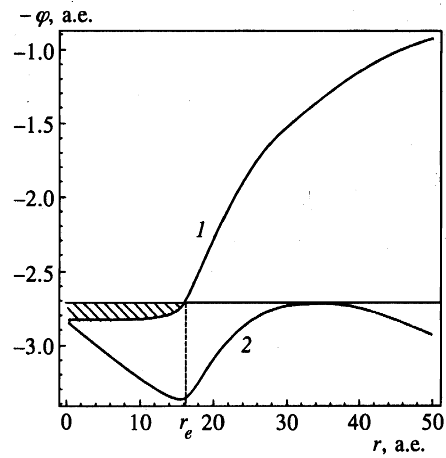

Рис. 1

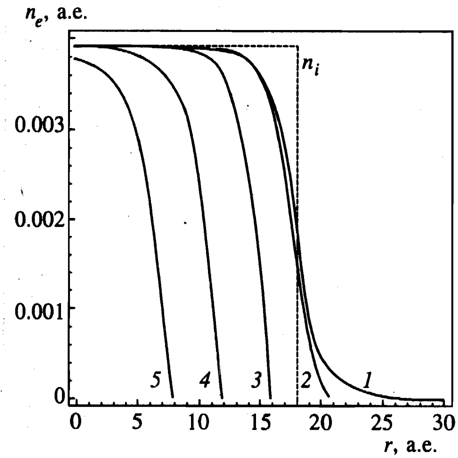

Рис. 2

Рис. 1. Невозмущенная потенциальная энергия $-\varphi(r)$ для кластера из 100 атомов натрия, содержащего 54 электрона (кривая *1*). Заштрихована область, занятая электронами. Эффективная потенциальная энергия (кривая *2*) вычислена по формуле (12) для значения напряженности поля $F = 0.04$ а.е., соответствующей (13). Горизонтальная прямая — граница Ферми для электронов. Вертикальная штриховая прямая соответствует границе электронного распределения

Рис. 2. Концентрация электронов n_e в кластерных ионах из 100 атомов натрия в зависимости от радиальной координаты: *1* — нейтральный кластер ($Z = Z' = 100$); *2* — $Z' = 92.3$; *3* — $Z' = 54.35$; *4* — $Z' = 22.7$; *5* — $Z' = 4.9$. Штриховая кривая — концентрация ионов n_i

Для кривых *1–5* на рис. 2 значениям $r_e = \infty$, 21.2, 16.25, 12.2 и 8 а.е. соответствуют числа электронов $Z' = 100$, 92.3, 54.35, 22.7 и 4.9. Из вида этих кривых можно сделать вывод, что во всех случаях имеется внутренняя область электронного распределения, где концентрация электронов не зависит от радиальной координаты, т. е. на электрон не действует сила притяжения к центру.

Конечно, при небольшом числе электронов кластерный ион представляет собой нестабильное образование из-за сильного взаимного кулоновского отталкивания ионов, и он быстро распадается.

3. МНОГОКРАТНАЯ ИОНИЗАЦИЯ КЛАСТЕРА

До сих пор мы рассматривали кластер в отсутствие внешнего поля. Теперь в соответствии с рассуждениями во Введении о квазистационарности низкочастотного электромагнитного поля включим постоянное электрическое поле напряженностью F. Оно превращает нейтральный кластер в кластерный многократно заряженный ион, отрывая классически определенное число электронов. Величина напряженности F может быть связана с зарядом $Z - Z'$, оставшимся после вылета электронов, соотношением,

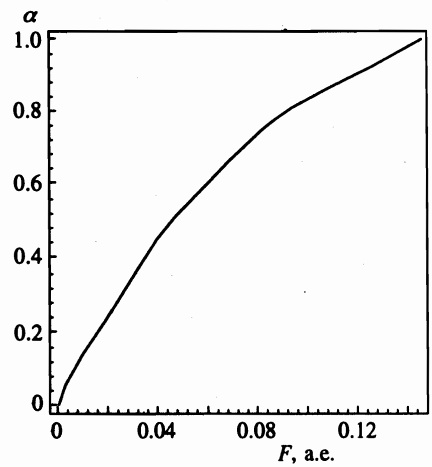

Рис. 3. Степень ионизации кластера из 100 атомов натрия как функция напряженности электрического поля F (в атомных единицах)

вытекающим из выражения для эффективного потенциала (см. кривую *2* на рис. 1)

$$V = -\varphi(r) - Fr \approx -\frac{Z - Z'}{r} - Fr. \tag{12}$$

Находя максимум этого выражения (он лежит в области вне электронного и ионного распределений) и приравнивая максимальное значение эффективного потенциала энергии Ферми φ_e, получим значение напряженности электрического поля F, приводящее к кластеру с данной кратностью ионизации (эта зависимость аналогична формуле Бете для случая ионизации атома [10, формула (54.2)]):

$$F = \frac{(\varphi(r_e))^2}{4(Z - Z')}. \tag{13}$$

Конечно, в действительности электрическое поле направлено вдоль какой-то декартовой оси, а не вдоль радиальной переменной. Мы предполагаем, что при быстрой ионизации (за атомные времена) первых электронов, находящихся на оси, вдоль которой действует внешнее поле, последующие электроны быстро займут их место и будут затем также ионизованы вдоль этой же оси с образованием кластерного многократно заряженного иона. Процесс является самосогласованным, так как потенциал кластерного иона меняется в процессе ионизации.

Для рассматриваемого примера натриевого кластера со 100 атомами степень ионизации, определяемая как $\alpha = (Z - Z')/Z$, рассчитана и показана на рис. 3. Видно, что многократная ионизация кластера имеет место в диапазоне напряженностей электрического поля вплоть до 0.14 а.е. Для масштаба полей, указанных на рис. 3, параметр Келдыша мал по сравнению с единицей, так что процесс ионизации заведомо можно считать квазистатическим (см. Введение). Вылетевшие электроны ориентированы вдоль направления вектора электрического поля (т. е. вдоль направления поляризации линейно поляризованного лазерного излучения) [11].

После окончания лазерного импульса оставшиеся электроны, а также ионы разлетаются сферически-симметрично под действием сил кулоновского отталкивания (кулоновский взрыв кластерного иона).

В заключение отметим, что рассматриваемый здесь численный пример являет достаточно типичным, и все описанные явления будут иметь место и для кластеров и другах атомов и с другим числом частиц.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант № 99-02-17810).

Литература

1. В. П. Крайнов, Э. А. Маныкин, Украинский физ. журнал **25**, 400 (1980).
2. V. Kresin, Phys. Rep. **220**, 1 (1992).
3. M. Brewczyk, K. Rzazewski, and C. W. Clark, Phys. Rev. Lett. **78**, 191 (1997).
4. M. Brewczyk, C. W. Clark, M. Lewenstein, and K. Rzazewski, Phys. Rev. Lett. **80**, 1857 (1998).
5. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Изд. 4-е. Наука, Москва (1989).
6. Л. В. Келдыш, ЖЭТФ **45**, 1945 (1964).
7. Б. М. Смирнов, УФН **162**, 97 (1992).
8. З. Флюгге, *Задачи по квантовой механике*, Мир, Москва (1974), т. 2.
9. Ч. Киттель, *Введение в физику твердого тела*, Наука, Москва (1978).
10. Г. Бете, Э. Солпитер, *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*, Физматгиз, Москва (1960).
11. Н. Б. Делоне, В. П. Крайнов, УФН **168**, 531 (1998).