ЖЭТФ, 2025, том 168, вып. 1 (7), стр. 5–13

ЗАКРУЧИВАНИЕ АТОМОВ ЭЛЛИПТИЧЕСКИ ПОЛЯРИЗОВАННЫМИ ЛАЗЕРНЫМИ ПОЛЯМИ

В. С. Мележик [a,b*]**,** ***С. Шадмехри*** [c**]

[a] *Лаборатория теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова,*
Объединенный институт ядерных исследований
141980, Дубна, Московская обл., Россия

[b] *Государственный университет Дубна*
141982, Дубна, Московская обл., Россия

[c] *Лаборатория информационных технологий им. М. Г. Мещерякова,*
Объединенный институт ядерных исследований
141980, Дубна, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 6 марта 2025 г.,
после переработки 6 марта 2025 г.
Принята к публикации 30 марта 2025 г.

Наличие пространственной неоднородности $\mathbf{kr}$ в электромагнитной волне и магнитной компоненты в ней приводит к неразделению переменных электрона и центра масс в атоме водорода, взаимодействующего с лазерным импульсом, и, как следствие, к ускорению атома. Этот эффект был исследован нами ранее для линейной поляризации электромагнитного поля (V. S. Melezhik, S. Shadmehri, Photonics **10**, 1290 (2023)). Здесь мы рассматриваем более общий случай эллиптической поляризации: исследуются влияние поляризации лазера на ускорение атома, а также его возбуждение и ионизацию для лазерных импульсов с интенсивностью 10^{14} Вт/см^2, длительностью около 8 фс в диапазоне частот 0.2 ат. ед.$\lesssim \omega \lesssim$0.7 ат. ед. (5 эВ$\lesssim \hbar\omega \lesssim$20 эВ). Показано, что в рассмотренной области параметров лазера влияние поляризации на возбуждение, ионизацию и ускорение атома водорода незначительно. Однако отклонение от линейной поляризации приводит к закручиванию атома, которое достигает максимального значения для циркулярной поляризации. Этот альтернативный способ закручивания атомов с помощью циркулярно поляризованных электромагнитных полей может открыть новые возможности для получения пучков закрученных атомов по сравнению с традиционными методиками, использующими вилочные дифракционные решетки, разработанные для элементарных частиц (фотонов и электронов), однако требующие существенных доработок для закручивания составных частиц (протонов, нейтронов и атомов).

Статья представлена в рамках публикации материалов конференции «Физика ультрахолодных атомов» (ФУХА-2024), Новосибирск, декабрь 2024 г.

DOI: 10.31857/S0044451025070016

1. ВВЕДЕНИЕ

Возможность управления с помощью лазерного излучения нейтральными атомами (их замедлением и ускорением) обсуждается практически с момента появления лазеров и широко используется в настоящее время. В частности, для получения ультрахолодных атомов необходимым условием является их пленение в оптических ловушках за счет «дипольной силы», возникающей в стоячей электромагнитной волне при ее взаимодействии с дипольным моментом нейтрального атома, индуцируемым удерживающим полем волны. Лазерное охлаждение (торможение атомов при резонансном взаимодействии с лазерным излучением), как известно, играет не менее ключевую роль при получении ультрахолодных атомов. Менее известны пионерские [1, 2] и современные [3, 4] работы по ускорению атомов лазерными импульсами. Природа эффекта ускорения нейтрального атома электромагнитным импуль-

* E-mail: melezhik@theor.jinr.ru
** E-mail: shadmehri@jinr.ru

сом — его взаимодейстрие с дипольным моментом атома, индуцируемым внешним электромагнитным полем, — качественно понятна. Однако количественное описание этого эффекта, даже в случае простейшего атома водорода в поле монохроматической электромагнитной волны с учетом недипольных поправок во взаимодействии, требует решения технически очень сложной вычислительной задачи — интегрирования шестимерного (6D) нестационарного уравнения Шредингера с неразделяющимися переменными центра масс (ЦМ) и электрона относительно протона. Действительно, учет неоднородности $\mathbf{kr}$ в электромагнитной волне приводит к неразделению внутреннего движения электрона относительно протона и, как следствие, к движению атома как целого даже в простейшем случае при его взаимодействии с плоской монохроматической волной [4, 5].

В наших работах [5, 6] предложен и разработан гибридный квантово-квазиклассический подход для количественного описания 6D-динамики атома водорода в сильных линейно поляризованных короткодействующих лазерных полях, который позволяет учитывать недипольные поправки во взаимодействии атома с электромагнитной волной за счет ее пространственной неоднородности $\mathbf{kr}$ и магнитной компоненты в ней. Продемонстрирована возможность и исследованы механизмы ускорения нейтральных атомов такими полями [6].

Здесь мы обобщаем этот подход на случай эллиптической поляризации лазерного излучения. Показано, что отклонение от линейной поляризации незначительно влияет на процессы возбуждения, ионизации и ускорения атома при рассмотренных частотах лазерного излучения 0.18 ат. ед. $(4.9$ эВ$) \le \omega \le 0.7$ ат. ед. $(19$ эВ$)$. Причем эффект влияния поляризациии максимален при малых частотах, с увеличением частоты он ослабевает и становится малозаметным для частот $\omega \gtrsim 0.4$ ат. ед. в рассмотренной нами области короткодействующих импульсов (~ 8 фс) с интенсивностью 10^{14} Вт/см^2. Однако наличие ненулевой эллиптичности приводит к закручиванию ускоряемого атома, причем эффект достигает максимальной величины для циркулярной поляризации. В этой связи следует отметить, что физика закрученных фотонов [7] и электронов [8] в настоящее время является одной из горячих областей исследований из-за потенциально интересных приложений (см. [9, 10] и ссылки в этих работах). Например, электронные вихревые пучки использовались для изучения киральности, для анализа структуры магнитных и нано- и метаматериалов [10]. Есть несколько предложений по созданию вихревых пучков составных частиц (нейтронов, протонов и атомов) [11]. Предполагается, что закручивание составных частиц может быть использовано для изменения фундаментальных взаимодействий таких частиц и зондирования их внутренней структуры. Однако до недавнего времени был успешно реализован лишь один эксперимент по созданию вихревого пучка атомов: в работе [12] был получен пучок закрученных атомов гелия с помощью вилочной дифракционной решетки. Известен ряд неудачных экспериментов в этом направлении, что связано с повышенными техническими требованиями для атомных дифракционных решеток по сравнению с дифракционными решетками для легких частиц (фотонов и электронов). Поэтому исследование альтернативной возможности получения закрученных атомов с использованием эллиптически поляризованных лазерных импульсов нам представляется интересной и актуальной задачей.

В следующем разделе формулируется задача о взаимодействии атома водорода с эллиптически поляризованным лазерным импульсом с учетом недипольных поправок в потенциале взаимодействия с точностью до членов порядка $1/c$ включительно и описана вычислительная квантово-квазиклассическая схема для численного решения задачи. В разд. 3 обсуждаются полученные в рамках разработанного подхода результаты. В последнем разделе приведены заключительные замечания и кратко обсуждаются перспективы дальнейших исследований в этом направлении.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ СХЕМА

Рассмотрим динамику атома водорода, взаимодействующего с эллиптически поляризованным лазерным импульсом, который задается векторным потенциалом (здесь и далее мы используем атомную систему единиц (ат. ед.) за исключением специально оговариваемых случаев, в которой $e^2 = m_e = \hbar = 1$)

$$\mathbf{A} = -\frac{E_0 f(t)}{\omega\sqrt{1+\varepsilon^2}}\left[\hat{\mathbf{x}}\sin(\omega t - \mathbf{kr}) - \varepsilon\hat{\mathbf{y}}\cos(\omega t - \mathbf{kr})\right], \quad (1)$$

где огибающая импульса

$$f(t) = \sin^2\frac{\pi t}{NT}, \quad 0 \le t \le T_{out} = NT,$$

содержит N оптических циклов временных периодов $T = 2\pi/\omega$, определяемых частотой лазера ω.

Напряженность поля E_0 связана с интенсивностью $I = \epsilon_0 c E_0^2/2$ лазерного излучения, где ϵ_0 — электрическая постоянная, $\mathbf{k} = k\hat{\mathbf{z}} = \omega/c\hat{\mathbf{z}}$ и $c = 1/\alpha = 137$ — волновой вектор и скорость света в вакууме соответственно. Определенный таким образом лазерный импульс поляризован в плоскости xy и распространяется вдоль оси z. Предельные случаи $\varepsilon = 0$ и $\varepsilon = 1$ для эллиптичности $0 \le \varepsilon \le 1$ отвечают соответственно линейной и циркулярной поляризациям лазерного поля. В расчетах длительность импульса задавалась величиной $T_{out} = NT \approx 80$–800 ат. ед. $\approx$ ≈ 2–20 фс. Неизменность длительности импульса T_{out} при варьировании частоты лазера ω достигалась изменением числа оптических циклов N [6].

Для векторного потенциала (1) электрическое $\mathbf{E} = -d\mathbf{A}/dt$ и магнитное $\mathbf{B} = [\nabla \times \mathbf{A}]$ поля принимают вид

$$\mathbf{E} = E_0(t)\Big\{\hat{\mathbf{x}}\Big[\cos\big(\omega(t-\frac{z}{c})\big) + \frac{\sqrt{f(2t)}}{2Nf(t)}\sin\big(\omega(t-\frac{z}{c})\big)\Big] + \\ + \varepsilon\hat{\mathbf{y}}\Big[\sin\big(\omega(t-\frac{z}{c})\big) - \frac{\sqrt{f(2t)}}{2Nf(t)}\cos\big(\omega(t-\frac{z}{c})\big)\Big]\Big\}, \quad (2)$$

$$\mathbf{B} = \frac{E_0(t)}{c}\Big[\hat{\mathbf{y}}\cos\big(\omega(t-\frac{z}{c})\big) - \varepsilon\hat{\mathbf{x}}\sin\big(\omega(t-\frac{z}{c})\big)\Big], \quad (3)$$

где общий фактор $E_0(t) = E_0 f(t)/\sqrt{1+\varepsilon^2}$ определяется напряженностью электрического поля E_0, огибающей импульса $f(t)$ и эллиптичностью ε.

Обычно взаимодействие атома водорода с лазерными полями рассматривается в дипольном приближении:

$$V(\mathbf{r},t) = E_0(t)\Big\{\Big[\cos(\omega t) + \frac{\sqrt{f(2t)}}{2Nf(t)}\sin(\omega t)\Big]x + \\ + \varepsilon\Big[\sin(\omega t) - \frac{\sqrt{f(2t)}}{2Nf(t)}\cos(\omega t)\Big]y\Big\}, \quad (4)$$

в котором пренебрегают магнитной составляющей $\mathbf{B}$ ($\sim 1/c = \alpha = 1/137$) (3) и пространственной неоднородностью ($\sim kz = \alpha\omega z$) электромагнитной волны (1) в направлении распространения импульса. Здесь x и y — компоненты относительной переменной $\mathbf{r} = x\hat{\mathbf{x}} + y\hat{\mathbf{y}} + z\hat{\mathbf{z}} = \mathbf{r}_e - \mathbf{r}_p$ между электроном и протоном в атоме водорода, $\mathbf{r}_e$ и $\mathbf{r}_p$ — координаты электрона и протона соответственно.

Выход за рамки дипольного приближения, т. е. учет пространственной неоднородности $\mathbf{kr}$ электромагнитной волны и магнитной компоненты (3) в ней приводит к следующей модификации потенциала взаимодействия:

$$V(\mathbf{r},t) \Rightarrow V(\mathbf{r},t) + V_1(\mathbf{r},t) + V_2(\mathbf{r},\mathbf{R},t), \quad (5)$$

где

$$V_1(\mathbf{r},t) = \frac{E_0(t)}{c}\Big\{\omega\Big[\sin(\omega t) - \frac{\sqrt{f(2t)}}{2Nf(t)}\cos(\omega t)\Big]zx - \\ - \varepsilon\omega\Big[\cos(\omega t) + \frac{\sqrt{f(2t)}}{2Nf(t)}\sin(\omega t)\Big]zy + \\ + \Big[\cos(\omega t)\hat{l}_y - \varepsilon\sin(\omega t)\hat{l}_x\Big]\Big\}, \quad (6)$$

и

$$V_2(\mathbf{r},\mathbf{R},t) = \\ = \frac{E_0(t)}{c}\Big\{\omega\Big[\sin(\omega t) - \frac{\sqrt{f(2t)}}{2Nf(t)}\cos(\omega t)\Big](zX + xZ) - \\ - \varepsilon\omega\Big[\cos(\omega t) + \frac{\sqrt{f(2t)}}{2Nf(t)}\sin(\omega t)\Big](zY + yZ) + \\ + \Big[\cos(\omega t)(Z\hat{p}_x - X\hat{p}_z) + \varepsilon\sin(\omega t)(Z\hat{p}_y - Y\hat{p}_z)\Big]\Big\}. \quad (7)$$

Этот потенциал записан в координатах ЦМ $\mathbf{R} = X\hat{\mathbf{x}} + Y\hat{\mathbf{y}} + Z\hat{\mathbf{z}}$ и электрона относительно протона $\mathbf{r}$, где $\hat{l}_x$ и $\hat{l}_y$ в (6) — x- и y-компоненты оператора орбитального углового момента электрона относительно протона. При выводе этих формул мы пренебрегли членами порядка $1/c^2 = \alpha^2$ и $1/M = 1/(m_e + m_p)$ и более высоких порядков. Таким образом, полный гамильтониан атома водорода в лазерном поле принимает вид

$$H(\mathbf{r},\mathbf{R},t) = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2M} + h_0(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r},t) + \\ + V_1(\mathbf{r},t) + V_2(\mathbf{r},\mathbf{R},t), \quad (8)$$

где гамильтониан

$$h_0(\mathbf{r}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} - \frac{1}{r} \quad (9)$$

описывает движение электрона относительно протона в кулоновском поле между ними. Здесь $\hat{\mathbf{p}}$ — оператор импульса электрона относительно протона, $\hat{\mathbf{P}}$ — импульс ЦМ, $\mu = m_e m_p/(m_e + m_p)$ — приведенная масса атома и $M = m_e + m_p$. Первое слагаемое $V(\mathbf{r},t)$ в (5) описывает взаимодействие атома с электромагнитным импульсом в дипольном приближении (4), а два дополнительных члена, $V_1(\mathbf{r},t)$ и $V_2(\mathbf{r},\mathbf{R},t)$, описывают поправки к дипольному приближению порядка $1/c$ и ω/c. Последнее слагаемое $V_2(\mathbf{r},\mathbf{R},t)$ в полном гамильтониане «перепутывает» переменные ЦМ и электрона и приводит к неразделению переменных в рассматриваемой задаче. Следует отметить, что хотя важность недипольных поправок в сильных лазерных полях была признана довольно давно [13–16], учет влияния движения ЦМ (ядра атома) на атомные процессы в сильных полях до сих пор изучен мало из-за сложности этой проблемы [4, 5].

Следуя схеме, предложенной и разработанной в [5, 6], мы количественно исследуем задачу об атоме водорода в эллиптически поляризованном лазерном поле, описываемом гамильтонианом (8), с помощью квантово-квазиклассического подхода, в котором квантовая динамика электрона относительно протона описывается нестационарным 3D-уравнением Шредингера

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r},t) = [h_0(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r},t) + \\ + V_1(\mathbf{r},t) + V_2(\mathbf{r},\mathbf{R}(t),t)]\psi(\mathbf{r},t)\,, \quad (10)$$

которое интегрируется одновременно с классическими уравнениями Гамильтона

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\mathbf{P} &= -\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} H_{eff}(\mathbf{P},\mathbf{R},t), \\ \frac{d}{dt}\mathbf{R} &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{P}} H_{eff}(\mathbf{P},\mathbf{R},t) \end{aligned} \quad (11)$$

для координаты и импульса ЦМ. С момента включения лазерного импульса ($t = 0$) и до его окончания при $t = T_{out}$ классические уравнения (11) связаны с уравнением Шредингера (10) оператором $V_2(\mathbf{r},\mathbf{R}(t),t)$ в гамильтониане уравнения (10) (который зависит от $\mathbf{R}(t)$ параметрически). Эффективный гамильтониан $H_{eff}(\mathbf{P},\mathbf{R},t)$ в классических уравнениях (11),

$$H_{eff}\,(\mathbf{P},\mathbf{R},t) = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \langle\psi(\mathbf{r},t)|V_2(\mathbf{r},\mathbf{R},t)|\psi(\mathbf{r},t)\rangle, \quad (12)$$

в каждый момент момент времени t определяется усреднением по пространственному распределению электрона, задаваемому в этот момент волновой функцией $\psi(\mathbf{r},t)$ из уравнения Шредингера (10).

Применение квантово-квазиклассической вычислительной схемы (10)–(12) основано в рассматриваемой задаче на следующем обстоятельстве: поскольку в среднем выполняется соотношение $\langle|\mathbf{P}|\rangle = M\langle|V|\rangle \gg \langle|\mathbf{p}|\rangle = \mu\langle|v|\rangle$, можно рассматривать движение массивного атома как движение классической частицы. В то же время динамика легкого электрона относительно протона описывается квантовым уравнением (10). Дополнительным обоснованием применимости такого подхода является известный факт применимости классической модели идеального газа Максвелла – Больцмана для описания газовых законов вплоть до достаточно низких температур. В цикле работ [17–20] квантово-квазиклассический подход был успешно применен для количественного описания различных атомных и мезоатомных квантовых процессов и систем. Основная идея этого подхода восходит к работам [21–23], где он был предложен и использован для задач молекулярной динамики.

Для интегрирования уравнений (10), (11) необходимо задать начальные условия при $t = 0$, определяемые физикой задачи. Мы рассмотрели динамику атома водорода в лазерном поле (1), покоящегося ($\mathbf{P}_0 = 0$) в начале координат ($\mathbf{R}_0 = 0$) в основном состоянии $\phi_{100}(\mathbf{r})$, при включении взаимодействия в момент времени $t = 0$:

$$\psi(\mathbf{r}, t = 0) = \phi_{100}(\mathbf{r})\,, \quad (13)$$

$$\mathbf{R}(t = 0) = \mathbf{R}_0\,, \qquad \mathbf{P}(t = 0) = \mathbf{P}_0\,. \quad (14)$$

Для интергрирования нестационарного уравнения Шредингера (10) применяется вычислительная схема, основанная на использовании двумерного представления дискретной переменной (DVR) [24–26]. Одновременно с уравнением (10) интегрируются уравнения Гамильтона (11) методом Штермера – Верле [27], адаптированным [5, 20] для квантово-квазиклассического случая.

В результате интегрирования гибридной квантово-квазиклассической системы уравнений (10),(11) вычисляется волновой пакет электрона $\psi(\mathbf{r},t)$, траектория движения атома как целого $\mathbf{R}(t)$ и его импульс $\mathbf{P}(t)$ на временном интервале $0 \le t \le T_{max}$. Предел интегрирования T_{max} может превышать время действия импульса T_{out}. Этот подход также позволяет вычислять и другие параметры, характеризующие динамику атома под действием электромагнитного импульса (1): вероятности возбуждения и ионизации атома [26], его ускорение и, как продемонстрировано ниже, проекцию момента импульса атома на направление его движения, которая идентифицирует закручивание атома.

3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

3.1. Возбуждение, ионизация и ускорение атома водорода лазерными импульсами

Принято считать, что в инфракрасной, оптической и ультрафиолетовой областях дипольное приближение хорошо обосновано и с приемлемой точностью описывает возбуждение и ионизацию атома

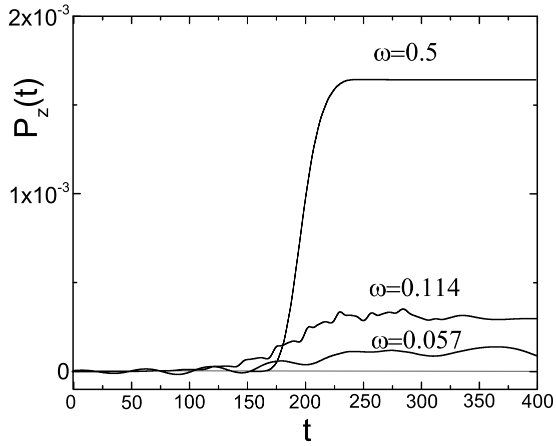

Рис. 1. Зависимости импульса $P_z(t) = MV_z(t)$ атома водорода от времени t и частоты лазера ω (энергия фотона $E_\gamma = \hbar\omega$) при взаимодействии с линейно поляризованными лазерными полями ($\varepsilon = 0$) интенсивности 10^{14} Вт/см^2, рассчитанные для частот $\omega = 0.057$ (1.5 эВ), 0.114 (3 эВ), 0.5 (13.6 эВ). Импульс атома $P_z(t)$, частота лазера ω и время t даны в атомных единицах. Для всех трех частот лазерный импульс содержал N =7.5 оптических циклов, а его продолжительность определялась величиной $T_{out} = NT = 2N\pi/\omega$ и варьировалась в пределах 2.3 фс $\leq T_{out} \leq$ 20 фс

под действием электромагнитного излучения [28]. Однако учет в этом диапазоне частот движения ядра при взаимодействии атома с излучением (вследствие недипольного эффекта неразделения переменных ЦМ и электрона за счет включения оператора $V_2(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t)$ (7) в гамильтониан задачи) приводит к наблюдаемому эффекту ускорения нейтрального атома как целого [6]. На рис. 1 изображена рассчитанная временная эволюция проекции импульса ЦМ атома $P_z(t)$ на направление распространения лазерного луча при взаимодействии атома с линейно поляризованным (ε=0) лазерным импульсом длительности $T_{out} = NT$ ($N = 7.5$) и интенсивности 10^{14} Вт/см^2 для трех частот, перекрывающих весь диапазон от инфракрасного излучения до ультрафиолета: $\omega = 0.057$ ат. ед. (800 нм), 0.114 ат. ед. (400 нм) и 0.5 ат. ед. (90 нм). Выполненный расчет демонстрирует заметный эффект ускорения ЦМ атома уже в инфракрасной области. Причем ускорение атома увеличивается с возрастанием энергии фотона: при увеличении энергии фотона $E_\gamma = \hbar\omega$ от 1.5 до 13.6 эВ атом водорода может быть ускорен до значений порядка $10^{14}g$ при интенсивности 10^{14} Вт/см^2 и длительности лазерного импульса около 2.3 фс (см. рис. 1). Результаты нашего расчета, приведенные на рис. 1, согласуются с имеющимися экспериментальными данными из работы [3], в которой атомы гелия и неона ускорялись до величины порядка $10^{14}g$ в фемтосекундном лазерном импульсе с интенсивностью $8 \cdot 10^{15}$ Вт/см^2 при энергиях фотона 1.0–1.5 эВ. При этом демонстрируемая на рис. 1 пропорциональность между ускорением атома и энергией фотона обусловлена тем, что оператор $V_2(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t)$ (7) в гамильтониане задачи, «запутывающий» переменные электрона и ЦМ во внешнем электромагнитном поле и, как следствие, приводящий атом как целое к ускорению, содержит слагаемое с общим множителем $\omega/c = \omega\alpha = \omega/137$, пропорциональным частоте ω. Таким образом, увеличивая энергию фотона (частоту ω) можно управлять параметром малости ω/c в сторону его увеличения в операторе (7), «запутывающем» переменные электрона и ЦМ, и усиливать эффект ускорения атома лазерным импульсом.

В работе [6] мы детально исследовали зависимость ускорения атома водорода линейно поляризованными лазерными полями от частоты лазера для выяснения механизмов ускорения. Также были рассчитаны вероятности возбуждения $P_{ex}(\omega)$ и ионизации $P_{ion}(\omega)$ атома водорода линейно поляризованными лазерными полями в зависимости от частоты лазера в диапазоне 0.18 ат. ед. $\leq \omega \leq 1.0$ ат. ед. При этом была обнаружена сильная корреляция между скоростью атома $V_z(\omega)$ в конце лазерного импульса и суммарной вероятностью возбуждения и ионизации атома $P_{ex}(\omega) + P_{ion}(\omega)$ (см. рис. 2 в работе [6]) и установлены два резонансных механизма ускорения атома: через однофотонное и двухфотонное возбуждение атома. В прямом расчете зависимости скорости атома в конце импульса от интенсивности было продемонстрировано, что однофотонный резонансный механизм ускорения атома лазерным импульсом приводит к линейной зависимости скорости атома в конце лазерного импульса от интенсивности лазера, а двухфотонный — к квадратичной зависимости (см. рис. 3 в [6]) в полном согласии с пропорциональностью интенсивности лазера $I = \varepsilon c^2 E^2/2$ плотности фотонов в лазерном импульсе. Были найдены оптимальные частоты при заданной интенсивности 10^{14} Вт/см^2 и длительности импульса ~ 8 нм для ускорения атомов. Из результатов расчетов, представленных на рис. 2 (сплошные линии), следует, что наиболее перспективной областью для ускорения атомов водорода лазерным импульсом является область частот $\omega =$ 0.44–0.48 ат. ед., примыкающая снизу к порогу ионизации ω=0.5 ат. ед. В этой области из-за резонансного однофотонного механизма возбуждения

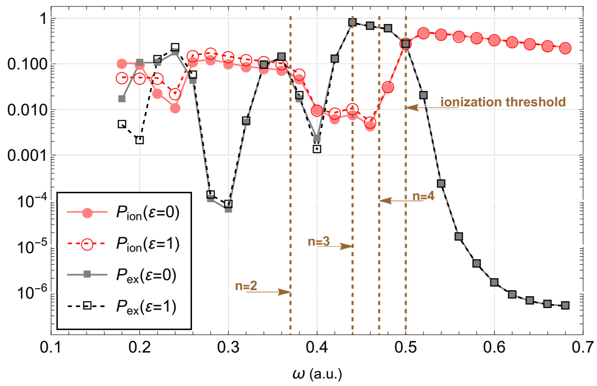

Рис. 2. Рассчитанные сразу после окончания лазерного импульса (при $t = T_{out}$) вероятности возбуждения $P_{ex}(\omega)$ и ионизации $P_{ion}(\omega)$ атомов как функции частоты лазера ω для лазерных импульсов двух различных поляризаций с фиксированной интенсивностью 10^{14} Вт/см^2 и длительностью импульса $T_{out} = 100\pi$ ат. ед. $\simeq 7.6$ фс. Результат для линейной поляризации ($\varepsilon = 0$) взят из нашей предыдущей работы [6]

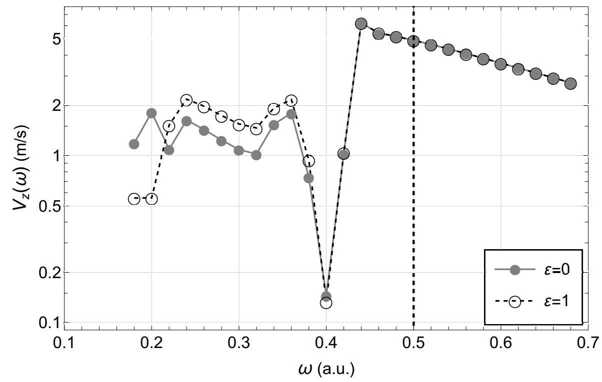

Рис. 3. Рассчитанная зависимость величины скорости атома водорода от частоты лазера и его поляризации в конце импульса интенсивности 10^{14} Вт/см^2 и длительности $T_{out} = 100\pi$ ат. ед. $\simeq 7.6$ фс

$$H_{n=1} + \hbar\omega \rightarrow H_{n'},\ \hbar\omega = \frac{1}{2n^2} - \frac{1}{2n'},\ \ n' = 3,4 \qquad (15)$$

атом приобретает максимальную скорость V_z. В то же время ионизация в этой области сильно подавлена.

3.2. Ускорение и закручивание нейтральных атомов эллиптически поляризованными лазерными импульсами

В рамках квантово-квазиклассического подхода мы исследовали возбуждение, ионизацию и ускорение атома водорода эллиптически поляризованным лазерным полем ($\varepsilon \neq 0$) для фиксированных в работе [6] параметров лазера для линейной поляризации: $I = 10^{14}$ Вт/см^2 и $T_{out} = NT = 100\pi$ ат. ед. $\simeq 7.6$ фм.

Для расчета вероятности возбуждения атома лазерным импульсом, $P_{ex}(\omega) = \sum_{n>1}^{\infty} P_n(\omega)$, применялась следующая вычислительная схема. Заселенности $P_n(\omega)$ состояний $1 \leq n \leq 8$ атома в конце лазерного импульса вычислялись по формуле

$$P_n(\omega) = \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^{l} \mid \langle \psi | \phi_{nlm} \rangle \mid^2 = \sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-l}^{l} \left| \int \psi^*(\mathbf{r}, \omega, T_{out}) \phi_{nlm}(\mathbf{r})\, d\mathbf{r} \right|^2 \qquad (16)$$

с помощью стандартной процедуры проецирования в конце импульса ($t = T_{out}$) рассчитанного волнового пакета электрона $\psi(\mathbf{r}, \omega, t = T_{out})$ на состояние $\phi_{nlm}(\mathbf{r})$ невозмущенного атома. Для учета заселенностей $P_n(\omega)$ состояний от $n = 9$ и выше использовалась процедура «интерполяции», предложенная в нашей работе [26]. Вероятность ионизации атома $P_{ion}(\omega)$ рассчитывалась по формуле

$$P_{ion}(\omega) = 1 - P_1(\omega) - P_{ex}(\omega).$$

На рис. 2 представлены результаты расчетов для циркулярной поляризации ($\varepsilon = 1$) величин $P_{ex}(\omega)$ и $P_{ion}(\omega)$ (светлые символы, соединенные штриховыми линиями), которые демонстрируют слабую зависимость возбуждения и ионизации от поляризации лазера в рассматриваемой области 0.18 ат. ед. $\leq \omega \leq 0.7$ ат. ед. его частот. Причем максимальное влияние поляризации на величины $P_{ex}(\omega)$ и $P_{ion}(\omega)$ наблюдается при миниальных рассмотренных частотах около 0.18 ат. ед. Эффект уменьшается с увеличением частоты лазера и практически пропадает при частотах $\omega \gtrsim 0.4$ ат. ед. для $P_{ex}(\omega)$ и при $\omega \gtrsim 0.47$ ат. ед. для $P_{ion}(\omega)$.

На рис. 3 представлены рассчитанные скорости ЦМ атома, $V_z(\omega)$, достигаемые в конце лазерного импульса $t = T_{out}$, в зависимости от частоты ω для линейной и циркулярной поляризаций. Проведенный расчет демонстрирует слабую зависимость величины ускорения атома от поляризации лазера, аналогично слабой зависимости от поляризации вероятности возбуждения и ионизации атома. Из анализа результатов расчета величин $P_{ex}(\omega)$, $P_{ion}(\omega)$ и $V_z(\omega)$, приведенных на рис. 2 и 3, следует вывод, сделанный в нашей предыдущей работе для линейной поляризации лазерного поля [6] и остающийся справедливым для циркулярной поляризации, что скорость $V_z(\omega)$ сильно скоррелирована с суммарной вероятностью $P_{ex}(\omega) + P_{ion}(\omega)$, определяющей вели-

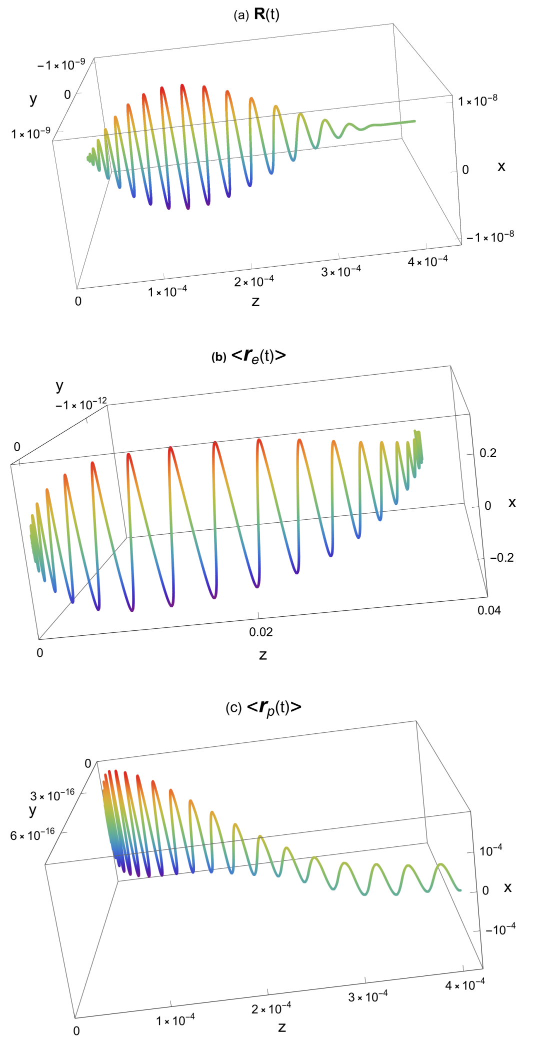

Рис. 4. Рассчитанные траектории ЦМ атома водорода $\mathbf{R}(t)$ (*a*), электронного облака $\langle \mathbf{r}_e(t)\rangle$ (*b*) и протона $\langle \mathbf{r}_p(t)\rangle$ (*c*) в процессе взаимодействия с линейно поляризованным лазерным импульсом ($\varepsilon = 0$) интенсивностью 10^{14} Вт/см^2, с частотой $\omega = 0.48$ ат. ед. и длительностью $T_{out} = 100\pi$ ат. ед. $\simeq 7.6$ фс. Расчет проводился на временном интервале $0 \le t \le T_{max} = 104\pi$ ат. ед. $\simeq 7.9$ фс

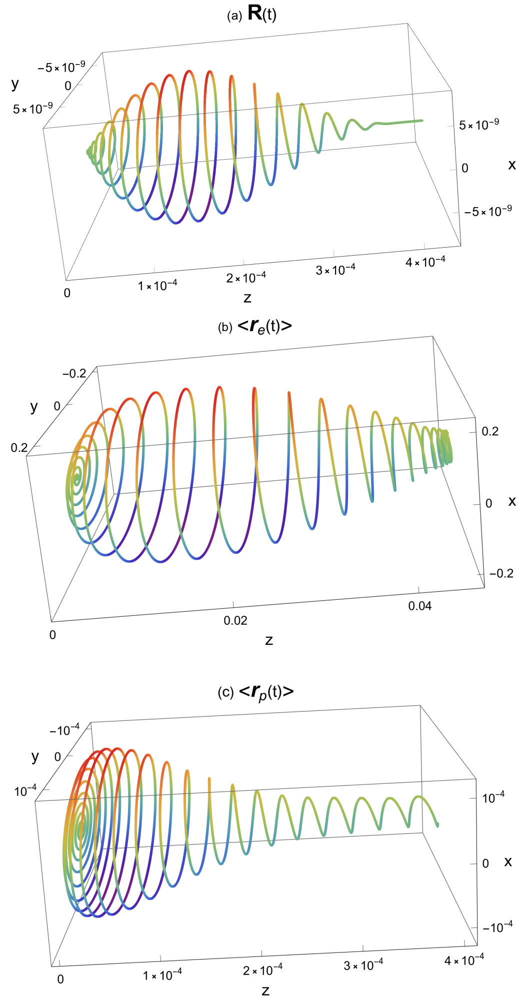

Рис. 5. Рассчитанные траектории ЦМ атома водорода $\mathbf{R}(t)$ (*a*), электронного облака $\langle \mathbf{r}_e(t)\rangle$ (*b*) и протона $\langle \mathbf{r}_p(t)\rangle$ (*c*) в процессе взаимодействия с циркулярно поляризованным лазерным импульсом ($\varepsilon = 1$) 10^{14} Вт/см^2, с частотой $\omega = 0.48$ ат. ед. и длительностью $T_{out} = 100\pi$ ат. ед. $\simeq 7.6$ фс. Расчет проводился на временном интервале $0 \le t \le T_{max} = 104\pi$ ат. ед. $\simeq 7.9$ фс

чину дипольного момента между электронным облаком и протоном. Поляризация слабо влияет на ускорение атома, и для частот $\omega \gtrsim 0.4$ ат. ед. ее влияние становится малозаметным.

Однако переход от линейной к эллиптической поляризации лазера приводит к новому эффекту — закручиванию атома относительно оси z, направленной вдоль распространения лазерного импульса (совпадающей с направлением импульса ускоряемого атома). Это следует из анализа представленных на рис. 4 и 5 рассчитанных траекторий ЦМ атома $\mathbf{R}$, электронного облака

$$\langle \mathbf{r}_e\rangle = \mathbf{R}(t) + \frac{m_p}{M}\langle \mathbf{r}(t)\rangle$$

и протона

$$\langle \mathbf{r}_p\rangle = \mathbf{R}(t) - \frac{m_e}{M}\langle \mathbf{r}(t)\rangle$$

при ускорении атома лазерным импульсом с линейной и циркулярной поляризациями, где

$$\langle \mathbf{r}(t)\rangle = \langle \psi(\mathbf{r},t)|\mathbf{r}|\psi(\mathbf{r},t)\rangle\,.$$

В случае линейной поляризации ($\varepsilon = 0$) траектории ЦМ атома, электронного облака и протона практически не отклоняются от плоскости поляризации xz

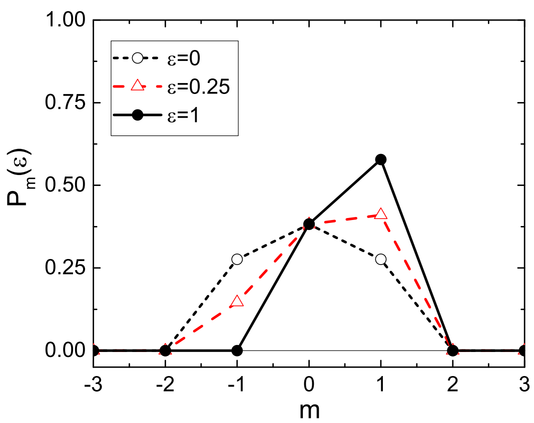

Рис. 6. Рассчитанные зависимости от эллиптичности ε заселенностей $P_m(\varepsilon)$ проекции орбитального углового момента электрона $\hat{l}_z$ на направление распространения лазерного импульса при $T_{max} = 104\pi$ ат. ед. $\simeq 7.9$ фс $> T_{out} = 100\pi$ ат. ед. $\simeq 7.6$ фс для лазера с интенсивностью 10^{14} Вт/см^2 и частотой $\omega = 0.48$ ат. ед.

электромагнитного поля лазера (см. рис. 4). Однако для циркулярной поляризации ($\varepsilon = 1$) траектории ЦМ атома, электронного облака и протона закручиваются лазерным импульсом вокруг направления его распространения (ось z). Причем закрученность электронного облака и протона сохраняется и после затухания лазерного импульса при 100π ат. ед. $< t \le 104\pi$ ат. ед. (см. рис. 5).

Для оценки величины орбитального углового момента, приобретаемого атомом в результате его закручивания лазерным импульсом, мы вычислили заселенности различных состояний проекции орбитального углового момента электрона на направление распространения лазерного импульса (направление ускорения атома) после его затухания:

$$P_m(\varepsilon) = \sum_{n=l+1}^{n_{max}} \sum_{l=|m|}^{n_{max}-1} |\langle \psi(T_{max},\varepsilon) \mid \phi_{nlm}\rangle|^2 = \\ = \sum_{n=l+1}^{n_{max}} \sum_{l=|m|}^{n_{max}-1} \left| \int \psi^*(\mathbf{r}, T_{max},\varepsilon)\phi_{nlm}(\mathbf{r})\, d\mathbf{r}\right|^2. \quad (17)$$

Приведенные на рис. 6 результаты расчета демонстрируют, как лазерный импульс начинает закручивать атом при отклонении от линейной поляризации. Эффект закручивания увеличивается с увеличением эллиптичности и достигает максимального значения для циркулярной поляризации. При этом проекция орбитального углового момента, приобретенного электроном, на направление распространения лазерного импульса достигает своего максимального значения

$$\langle \hat{l}_z \rangle = \sum_m m P_m(\varepsilon) = 0.62\hbar$$

при ε=1.

Расчеты эффектов закручивания атомов, иллюстрируемые на рис. 4–6, выполнены для частоты лазера $\omega = 0.48$ ат. ед. из области, где возбуждение и ускорение атома максимальны, а ионизация подавлена. Дальнейшее изучение возможностей получения ускоренных и закрученных атомов с помощью электромагнитных импульсов требует включения в вычислительную схему механизмов спонтанного и вынужденного излучения, что позволит также рассмотреть эффект закручивания атома при его торможении эллиптически поляризованными лазерными полями.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе исследовано влияние поляризации лазерного излучения на динамику атома водорода при его взаимодействии с эллиптически поляризованным электромагнитным импульсом с учетом недипольных поправок. Расчеты выполнены в рамках гибридного квантово-квазиклассического подхода, в котором нестационарное уравнение Шредингера для электрона интегрируется одновременно с классическими уравнениями Гамильтона для ЦМ атома. Возникающая в этом подходе система связанных уравнений, состоящая из квантового уравнения для электрона и классических уравнений для ЦМ, позволяет описать эффекты ускорения и закручивания атома лазерным полем, являющиеся следствием неразделения переменных в задаче при учете пространственной неоднородности электромагнитной волны и магнитной компоненты в ней.

Расчеты продемонстрировали, что в рассматриваемой области значений параметров лазерного импульса (интенсивность 10^{14} Вт/см^2, длительность ~ 8 фс, частота в интервале 5 эВ $\lesssim \hbar\omega \lesssim 20$ эВ) влияние поляризации лазера на возбуждение, ионизацию и ускорение атома незначительно. Однако отклонение от линейной поляризации приводит к закручиванию атома, которое достигает максимального значения для циркулярной поляризации.

Предложенный в работе альтернативный способ закручивания атомов с помощью циркулярно поляризованных электромагнитных полей может открыть новые возможности для получения пучков закрученных атомов по сравнению с традиционными методиками, использующими вилочные дифракционные решетки, разработанные для закручивания элементарных частиц (фотонов и электронов) [9], однако требующие существенных доработок для закручивания составных частиц (протонов, нейтронов, атомов) [12]. Получение пучков закрученных атомов вызывает интерес в связи с их возможными приложениями. В частности, обсуждаются возможное использование дополнительной степени свободы атома, связанной с орбитальным угловым моментом, для модификации атомных взаимодействий и новые возможности для исследования внутренней структуры атомов и молекул [12, 29, 30].

Разработанный квантово-квазиклассический подход может быть использован в области жесткого рентгеновского и гамма-излучения для расчета сечений фотоионизации атомов [28], а также в задачах ядерной фотоники [31], где дипольное приближение неприменимо и учет движения ядра становится критически важным.

Благодарности. Авторы выражают благодарность за полезные обсуждения и советы Д. В. Карловцу, В. А. Коробову, Ю. В. Попову, О. В. Теряеву и С. Н. Юдину.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 20-11-20257).

ЛИТЕРАТУРА

1. Г. А. Аскарьян, ЖЭТФ **42**,1628 (1962).
2. А. П. Казанцев, УФН **124**, 113 (1978).
3. U. Eichmann, T. Nubbemeyer, H. Rottke, and W. Sandner, Nature **461**, 1261 (2009).
4. A. W. Bray, U. Eichmann, and S. Patchkovskii, Phys. Rev. Lett. **124**, 233202 (2020).
5. V. S. Melezhik, J. Phys A **56**, 154003 (2023).
6. V. S. Melezhik and S. Shadmehri, Photonics **10**, 1290 (2023).
7. L. Allen, M. W. Beijersbergen, R. J. C. Spreeuw, and J. P. Woerdman, Phys. Rev. A **45**, 81 (1992).
8. M. Ucida and A. Tonomura, Nature **464**, 737 (2010).
9. Б. А. Князев, В. Г. Сербо, УФН **188**, 508 (2018).
10. K. Y. Bliokh, I. P. Ivanov, G. Guzzinati, L. Clark, R. Van Boxem, A. Beche, R. Juchtmans, M. A. Alonso, P. Schattschneider, F. Nori, and J. Verbeeck, Phys. Rep. **690**, 1 (2017).
11. C. W. Clarck, Nature **525**, 504 (2015).
12. A. Luski, Y. Segev, R. David, O. Bitton, N. Nadler, A. R. Barnea, A. Gorlach, O. Cheshnovsky, I. Kaminer, and E. Narevicius, Science **373**, 1105 (2011).
13. H. R. Reiss, Phys. Rev. A **42**, 1476 (1990).
14. N. J. Kylstra, R. A. Worthington, A. Patel, R. L. Knight, J. R. Vazquez de Aldana, and L. Roso, Phys. Rev. Lett. **85**, 1835 (2000).
15. O. Hemmers, R. Guillemin, E. P. Kanter et al., Phys. Rev. Lett. **91**, 053002 (2003).
16. M. Forre, J. P. Hansen, L. Kocbach, S. Selsto, and L. B. Madsen, Phys. Rev. Lett. **97**, 043601 (2003).
17. V. S. Melezhik and P. Schmelcher, Phys. Rev. Lett. **84**, 1870 (2000).
18. V. S. Melezhik, Hypefine Int. **138**, 351 (2001).
19. V. S. Melezhik, J. S. Cohen, and C.-Y. Hu, Phys. Rev. A **69**, 032709 (2004).
20. V. S. Melezhik, Phys. Rev. A **103**, 053109 (2021).
21. M. R. Flannery and K. J. McCann, Chem. Phys. Lett. **35**, 124 (1975).
22. M. R. Flannery and K. J. McCann, J. Chem. Phys. **63**, 4695 (1975).
23. G. D. Billing, Chem. Phys. **9**, 359 (1975).
24. V. S. Melezhik, Phys. Lett. A **230**, 203 (1997).
25. V. S. Melezhik, AIP Conf. Proc. **1479**, 1200 (2012).
26. S. Shadmehri and V. S. Melezhik, Laser Phys. **33**, 026001 (2023).
27. F. Hairer, C. Lubich, and G. Wanner, *Geometric Numerical Integration. Structure-Preserving Algorithms for Ordinary Differential Equations*, Springer, Berlin (2006), Ch.I.
28. Ph. V. Demekhin, J. Phys. B **47**, 025602 (2014).
29. V. E. Lembessis, D. Ellinas, M. Babiker, and O. Al-Dossary, Phys. Rev. A **89**, 053616 (2014).
30. I. Madan, G. M. Vanacore, S. Gargiulo, T. LaGrande, and F. Carbone, Appl. Phys. Lett. **116**, 230502 (2020).
31. В. Г. Недорезов, С. Г. Рыкованов, А. Б. Савельев, УФН **191**, 1282 (2021).