

Формула скорости ионизации атома или иона в сильном электромагнитном поле для численного моделирования

А.А.Голованов, И.Ю.Костюков

Предложена формула для расчета скорости полевой ионизации атома или иона, учитывающая как туннельный режим, так и режим «подавления барьера». По сравнению с предыдущей формулой, предложенной в 2018 г., она более точно описывает переходную область между обоими режимами и определяется преимущественно двумя параметрами: ионизационным потенциалом атома или иона и амплитудой внешнего электрического поля. Это делает предложенную формулу пригодной для использования в численных пакетах, моделирующих взаимодействие мощного лазерного излучения с веществом методом частиц в ячейках (particle-in-cell, PIC).

Ключевые слова: полевая ионизация, атомы, ионы, туннельный режим, режим подавления барьера, метод частиц в ячейках.

Ионизация атомов и ионов является одним из ключевых процессов, сопровождающих взаимодействие мощного лазерного излучения с веществом. Механизмы, индуцированные ионизацией, играют важную роль во многих явлениях и приложениях, таких как генерация высоких гармоник [1, 2], генерация терагерцевого излучения [3–5], ионизационная инжекция в лазерно-плазменных ускорителях [6–8], инициация квантовоэлектродинамических каскадов затравочными электронами, образующимися при ионизации атомов с большим зарядовым числом [9, 10], и др. Ионизация в лазерной плазме может быть вызвана столкновением атомов с энергичными частицами (ударная ионизация) или воздействием на них сильного электромагнитного поля (полевая ионизация). В монохроматической электромагнитной волне с произвольной поляризацией полевая ионизация может происходить в трех различных режимах в зависимости от амплитуды колебаний электрического поля и частоты излучения: в режиме многофотонной ионизации (multi-photon ionization, MPI) при $E_{\max} \ll E_K$, в режиме туннельной ионизации (tunnel ionization, TI) при $E_K \ll E_{\max} \ll E_{cr}$ и в режиме «подавления барьера» (barrier suppression ionization, BSI) при $E_{\max} \geq E_{cr}$ (рис.1). Здесь E_{\max} – амплитуда колебаний электромагнитного поля; $E_K = \omega_{las}(2m_e I_i)^{1/2}/e$ – пороговое поле, связанное с параметром Келдыша $\gamma_K = \omega_{las}(2m_e I_i)^{1/2}/e E_{\max} = E_K/E_{\max}$; E_{cr} – критическое поле, при превышении которого подавлен барьер атомного потенциала (количественно определено далее); I_i – потенциал ионизации атома (иона); ω_{las} – частота лазерного излучения; c – скорость света; m_e – масса электрона; $e > 0$ – элементарный заряд.

Скорость ионизации в многофотонном и туннельном режимах можно рассчитать аналитически [11–14]. В то время как для осуществления процесса многофотонной ионизации необходима периодическая модуляция поля,

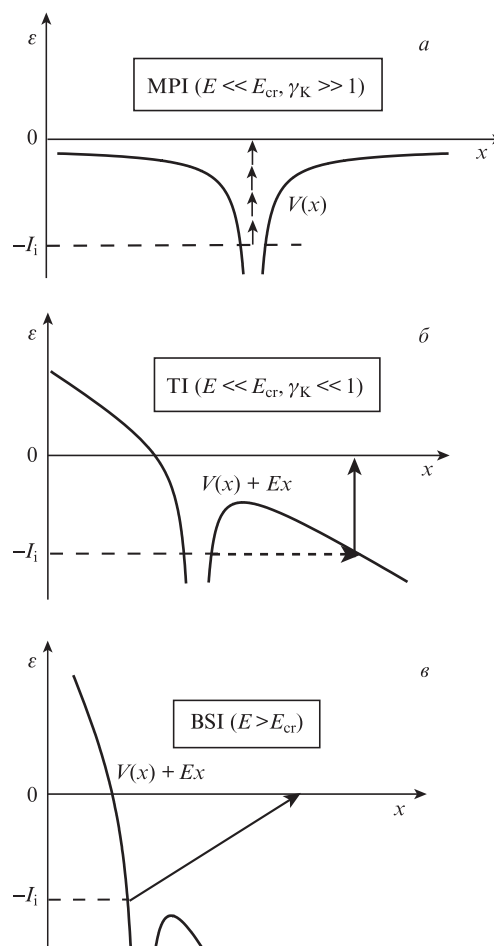


Рис.1. Схематические изображения многофотонного (а) и туннельного (б) режимов, а также режима подавления барьера (в) для ионизации в сильном поле, которые реализуются в зависимости от величины напряженности внешнего поля. Сплошными кривыми показаны атомные потенциалы $V(x)$ или суперпозиции атомного потенциала и потенциала внешнего поля ($V(x) + Ex$). Стрелки демонстрируют электронный переход во время ионизации; ϵ и x – энергия и координата электрона.

А.А.Голованов, И.Ю.Костюков. Федеральный исследовательский центр Институт прикладной физики РАН, Россия, 603950 Н.Новгород, ул. Ульянова, 46; e-mail: agolovanov@appl.sci-nnov.ru

Поступила в редакцию 26 февраля 2020 г.

туннельная ионизация в сильном поле ($\gamma_K \ll 1$) может быть рассчитана в приближении стационарного поля. При этом скорость туннельной ионизации [14–16]

$$w_{\text{ТТ}}(F) = w_a k^2 C_{kl}^2 (2l+1) \left(\frac{2}{F}\right)^{2n^*} \left(\frac{F}{2}\right)^{m+1} \times \frac{(l+m)!}{2^m m! (l-m)!} \exp\left(-\frac{2}{3F}\right), \quad (1)$$

$$C_{kl}^2 = \frac{2^{2n^*}}{n^* \Gamma(n^* + l^* + 1) \Gamma(n^* - l^*)},$$

где $F = E/(k^3 E_a)$ – мгновенная нормированная напряженность электрического поля; $k^2 = I_i/I_H$; $n^* = Z/k$ – эффективное главное квантовое число иона; Z – зарядовое число иона; $l^* = n^* - 1$ – эффективное орбитальное квантовое число; l и m – орбитальное и магнитное квантовые числа соответственно; $I_H = m_e e^4 / (2\hbar^2) \simeq 13.6$ эВ – потенциал ионизации атома водорода; $E_a = m_e^2 e^5 \hbar^{-4} \approx 5.1 \times 10^9$ В/см – атомное электрическое поле; $w_a = m_e e^4 \hbar^{-3} \simeq 4.1 \times 10^{16}$ с⁻¹ – атомная частота; $\Gamma(x)$ – гамма-функция [17]. Для расчета полной вероятности однократной ионизации скорость ионизации необходимо проинтегрировать:

$$W_i(t) = 1 - \exp\left\{-\int_{-\infty}^t w_i[E(t')] dt'\right\}, \quad (2)$$

где w_i – скорость ионизации (в роли которой может выступать как $w_{\text{ТТ}}$, так и другая формула для скорости ионизации, применимая в рассматриваемом случае), в формулу для которой подставляется мгновенное (без усреднения по периоду) значение напряженности внешнего поля $E(t)$.

Когда внешнее поле настолько сильно, что максимум потенциального барьера, образованного в результате суперпозиции атомного и внешнего полей, ниже, чем начальный уровень энергии электрона, ионизация поля развивается в режиме подавления барьера, в котором электрон становится свободным и вместо туннелирования может двигаться над барьером. В режиме подавления барьера амплитуда внешнего поля превышает $E_{\text{cr}} = E_a k^4 / (16Z)$. Например, для атома водорода $E_{\text{cr}} = E_a / 16 \approx 3.2 \times 10^8$ В/см, что соответствует интенсивности лазерного поля 1.4×10^{14} Вт/см².

Из оценок следует [18], что при использовании сфокусированных коротких субпетаваттных лазерных импульсов полная ионизация может достигаться при $E \gtrsim E_{\text{cr}}$, когда формулы для многофотонной и туннельной ионизации неприменимы. Для полевой ионизации при $E \gtrsim E_{\text{cr}}$ было предложено множество эмпирических формул [19–22], однако большинство из них не обеспечивают должную асимптотику в пределе больших полей, соответствующем режиму подавления барьера. Более того, они применимы только к ограниченному набору атомов и ионов. В то же время, предшествующие теоретические расчеты скорости ионизации в режиме подавления барьера [23, 24] также дают результаты, не совпадающие с результатами численного моделирования. Модели полевой ионизации широко используются в РИС-моделировании, которое стало незаменимым инструментом для исследования взаимодействия лазерного излучения с веществом. Некоторые модели учитывают потери энергии, связанные с ионизацией [25, 26], а также могут использоваться

для моделирования множества событий ионизации в пределах одного временного шага основного цикла РИС-кода [10, 26–28]. В идеале формула для РИС-кодов должна быть простой и недорогой в вычислительном отношении, при этом справедливой в широком диапазоне интенсивностей лазерного излучения и применимой ко многим типам атомов и ионов. До недавнего времени модели полевой ионизации, используемые в РИС-кодах, описывали только режим туннельной ионизации или основывались на слишком простых и неточных подходах. Например, одна из моделей основана на использовании формулы туннельной ионизации для $E < E_{\text{cr}}$, а при $E \gtrsim E_{\text{cr}}$ электрон автоматически считается полностью свободным (см., напр., [29]). Эта модель может существенно завышать эффективность ионизации в режиме подавления барьера для мощного электромагнитного поля.

Скорость ионизации в режиме подавления барьера была недавно теоретически рассчитана в классическом [10] и в квантовом [18] подходах в сильнополовом ($E \gg E_{\text{cr}}$) пределе:

$$w_{\text{BSI}}(E) \approx 0.8 w_a \frac{E}{E_a} \sqrt{\frac{I_H}{I_i}}. \quad (3)$$

В этом пределе скорость ионизации линейно зависит от напряженности внешнего поля, в то время как атомная система характеризуется потенциалом ионизации атома или иона. Также была предложена кусочная формула для скорости ионизации в туннельном режиме и в режиме подавления барьера с корректной асимптотикой в пределе сильного поля [18]:

$$w_i(E) \approx \begin{cases} w_{\text{ТТ}}(E), & E \leq E_0, \\ w_{\text{BSI}}(E), & E > E_0, \end{cases} \quad (4)$$

где значение E_0 определяется из соотношения $w_{\text{ТТ}}(E_0) = w_{\text{BSI}}(E_0)$.

Однако точность формулы (4) невелика в переходной области между обоими режимами, соответствующей амплитуде поля $E \gtrsim E_{\text{cr}}$. В настоящей работе мы предлагаем улучшенную формулу, которая включает в себя не только скорость туннельной ионизации для $E \ll E_{\text{cr}}$ и скорость ионизации в режиме подавления барьера в сильнополовом пределе для $E \gg E_{\text{cr}}$, но и скорость ионизации в переходном режиме $E \gtrsim E_{\text{cr}}$. Скорость ионизации вблизи критического поля $E \gtrsim E_{\text{cr}}$ может быть оценена с использованием эмпирической формулы, предложенной Бауэром и Мюлзером для атома водорода [21],

$$w_{\text{BM}} \approx 2.4 w_a \left(\frac{E}{E_a}\right)^2 \left(\frac{I_H}{I_i}\right)^2. \quad (5)$$

В отличие от (3) w_{BM} квадратично зависит от амплитуды лазерного поля (см. рис.6 в работе [21], на котором представлены результаты численного моделирования нестационарного уравнения Шредингера для атома водорода и на котором видны квадратичная зависимость скорости ионизации от E и переход к линейной зависимости). Строго говоря, формула (5) является проверенным приближением только для атома водорода и водородоподобных ионов, имеющих один электрон, зарядовое число Z и потенциал ионизации $I_i = Z^2 I_H$. Тем не менее формула (5) может быть обобщена на случай произвольного атома или иона путем подстановки соответствующего потенциала

ионизации I_i , и мы предполагаем, что она даст разумную оценку для скорости ионизации даже в этом случае. Итоговая формула для скорости ионизации, включающая туннельный режим, режим подавления барьера и переходный режим, может быть записана следующим образом:

$$w_i(E) \approx \begin{cases} w_{\text{TI}}(E), & E \leq E_1, \\ w_{\text{BM}}(E), & E_1 < E \leq E_2, \\ w_{\text{BSI}}(E), & E > E_2, \end{cases} \quad (6)$$

где E_1 и E_2 определяются из соотношений $w_{\text{TI}}(E_1) = w_{\text{BM}}(E_1)$ и $w_{\text{BM}}(E_2) = w_{\text{BSI}}(E_2)$. Предложенная формула хорошо подходит для использования в PIC-кодах, поскольку скорость ионизации зависит от локального мгновенного значения напряженности ионизирующего поля, а также от потенциала ионизации.

Для начала сравним предсказания предложенной формулы (6) для водорода с численными результатами, полученными в работе [21] путем решения нестационарного уравнения Шредингера (рис.2,а). Из сравнения видно, что аналитические и численные результаты находятся в довольно хорошем согласии. Зависимость в сильнопольном пределе действительно линейна в численном моделировании, но коэффициенты пропорциональности различаются, что приводит к небольшому смещению между численной кривой и моделью на рис.2,а в логарифмическом масштабе. Это различие может быть связано с неточным

определением скорости ионизации. В отличие от туннельного режима, зависимость полной вероятности ионизации от времени в режиме подавления барьера не является экспоненциальной даже для статического поля [18], поэтому скорость ионизации зависит не только от мгновенного значения поля, но и от предыстории его воздействия на систему. Тем самым введение функции $w_i(E)$ является приближением, используемым для качественного описания процесса ионизации. Некоторые способы определения численного коэффициента в этой зависимости, которые приводят к несколько иным результатам, обсуждаются в работе [18]. Кроме того, условие ионизации может быть по-разному реализовано в численном моделировании: через корреляционную функцию между волновой функцией электрона и состояниями дискретного спектра, через поток волновой функции электрона через поверхность, окружающую ядро атома или иона на достаточно большом расстоянии, и т. д. Разные условия могут приводить к небольшим различиям в вычисленной скорости ионизации.

Аналогичное сравнение было проведено для нейтральных атомов гелия, неона и аргона (рис.2,б-г). Численные данные получены путем интегрирования уравнения Шредингера в одноэлектронном приближении и приведены в работе [22]. Из сравнения видно, что формула (5) обеспечивает достаточно хорошее приближение для скорости ионизации в переходной области в том числе и для атомов, отличных от атома водорода. Кроме того, получен-

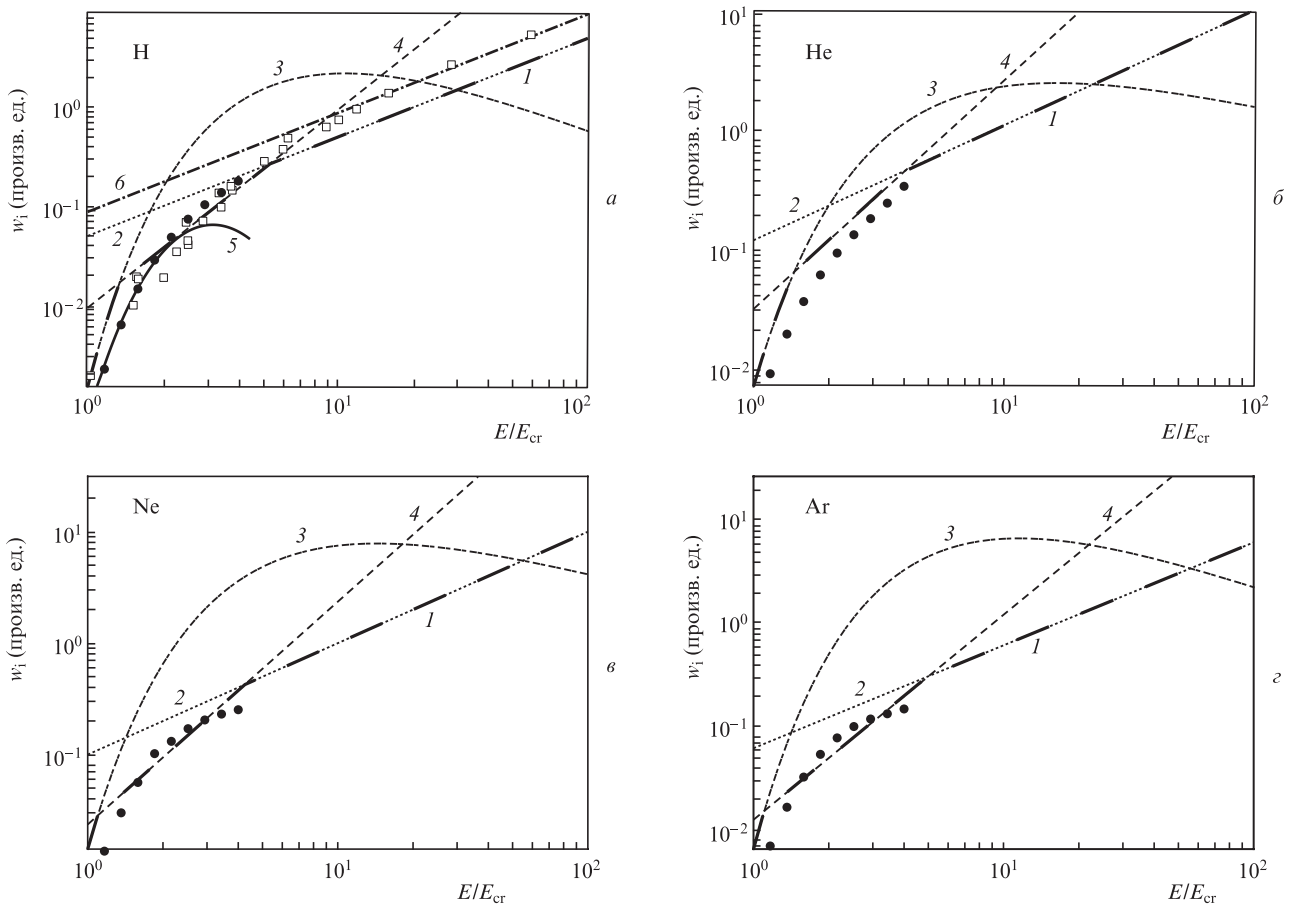


Рис.2. Зависимости скорости ионизации от напряженности внешнего поля для атомов водорода (а), гелия (б), неона (в) и аргона (г) по результатам численных расчетов в работах [21] (□) и [22] (●), а также зависимости, рассчитанные в соответствии с формулой (6) (кривая 1), формулой (3) для ионизации в режиме подавления барьера (2), формулой (1) для туннельного режима (3) и формулой (5) (4), зависимость, предложенная в работе [20] (5), зависимость, соответствующая формуле (3) с численным коэффициентом 1.4 вместо 0.8 (6).

ные в работе [22] данные не распространяются на сильно-полевой предел $E \gg E_{cr}$, что не позволяет численно проверить линейный участок формулы (6), соответствующий формуле (3), для отличных от атома водорода атомов. Такой участок можно заметить в результатах численного моделирования, представленных в работе [21] для атома водорода. Поскольку формула (3) получена из теоретического рассмотрения произвольной атомной системы, линейная асимптотика в сильнополевом пределе должна наблюдаться для произвольного атома или иона.

Таким образом, в настоящей работе предложена общая формула для скорости ионизации атома или иона в сильном электромагнитном поле, охватывающая широкий диапазон интенсивностей излучения лазера – от туннельного режима ионизации до режима подавления барьера. Формула хорошо подходит для PIC-кодов, поскольку содержит зависимости от локального мгновенного значения напряженности ионизирующего поля, а зависимость от типа атомной системы выражается через ее потенциал ионизации. Следовательно, она применима для всех типов атомов и ионов, а также не требует значительных вычислительных ресурсов. Предсказания формулы хорошо согласуются с результатами численного моделирования полевой ионизации для атомов водорода, гелия, неона и аргона, однако для проверки корректности ее использования для других типов атомов и ионов необходимы дополнительные исследования.

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования РФ (госзадание ИПФ РАН, проект №0035-2019-0012), программой Президиума РАН (проект №0035-2018-0023), Фондом развития теоретической физики и математики «БАЗИС» (грант №17-11-101) и РФФИ (гранты №18-32-00943, 18-42-520054).

- Corkum P.B. *Phys. Rev. Lett.*, **71**, 1994 (1993).
- Krausz F., Ivanov M. *Rev. Modern Phys.*, **81**, 163 (2009).
- Mori W.B. *Phys. Rev. A*, **44**, 5118 (1991).
- Gildenburg V.B., Vvedenskii N.V. *Phys. Rev. Lett.*, **98**, 245002 (2007).
- Xie X., Dai J., Zhang X.-C. *Phys. Rev. Lett.*, **96**, 075005 (2006).
- Pak A., Marsh K.A., Martins S.F., Lu W., Mori W.B., Joshi C. *Phys. Rev. Lett.*, **104**, 025003 (2010).
- McGuffey C., Thomas A.G.R., Schumaker W., Matsuoka T., Chvykov V., Dollar F.J., Kalintchenko G., Yanovsky V., Maksimchuk A., Krushelnick K., Bychenkov V.Yu., Glazyrin I.V., Karpeev A.V. *Phys. Rev. Lett.*, **104**, 025004 (2010).
- Clayton C.E., Ralph J.E., Albert F., Fonseca R.A., Glenzer S.H., Joshi C., Lu W., Marsh K.A., Martins S.F., Mori W.B., Pak A., Tsung F.S., Pollock B.B., Ross J.S., Silva L.O., Froula D.H. *Phys. Rev. Lett.*, **105**, 105003 (2010).
- Tamburini M., Di Piazza A., Keitel C.H. *Sci. Rep.*, **7**, 5694 (2017).
- Artemenko I.I., Kostyukov I.Yu. *Phys. Rev. A*, **96**, 032106 (2017).
- Келдыш Л.В. *ЖЭТФ*, **47**, 1945 (1965) [*Sov. Phys. JETP*, **20**, 1307 (1965)].
- Попов В.С. *УФН*, **174**, 921 (2004) [*Phys. Usp.*, **47**, 855 (2004)].
- Делоне Н.Б., Крайнов В.П. *УФН*, **169**, 753 (1999) [*Phys. Usp.*, **42**, 669 (1999)].
- Карнаков Б.М., Мур В.Д., Попруженко С.В., Попов В.С. *УФН*, **185**, 3 (2015) [*Phys. Usp.*, **58**, 3 (2015)].
- Переломов А.М., Попов В.С., Терентьев М.В. *ЖЭТФ*, **50**, 1393 (1966) [*Sov. Phys. JETP*, **23**, 924 (1966)].
- Аммосов М.В., Делоне Н.Б., Крайнов В.П. *ЖЭТФ*, **91**, 2008 (1986) [*Sov. Phys. JETP*, **64**, 1191 (1986)].
- Abramowitz M., Stegun I.A. (Eds) *Handbook of Mathematical Functions* (New York: Dover, 1972).
- Kostyukov I.Yu., Golovanov A.A. *Phys. Rev. A*, **98**, 043407 (2018).
- Posthumus J.H., Thompson M.R., Frasiniski L.F., Codling K., in *Multiphoton Processes 1996*. Ed. by P. Lambropoulos, H. Walther (Bristol: Institute of Physics Publ., 1997, Inst. Phys. Conf. Ser., No. 154, p. 298).
- Tong X.M., Lin C.D. *J. Phys. B*, **38**, 2593 (2005).
- Bauer D., Mulser P. *Phys. Rev. A*, **59**, 569 (1999).
- Zhang Q., Lan P., Lu P. *Phys. Rev. A*, **90**, 043410 (2014).
- Krainov V.P. *J. Opt. Soc. Am. B*, **14**, 425 (1997).
- Делоне Н.Б., Крайнов В.П. *УФН*, **168**, 531 (1998) [*Phys. Usp.*, **41**, 469 (1998)].
- Rae S.C., Burnett K. *Phys. Rev. A*, **46**, 1084 (1992).
- Nuter R., Gremillet L., Lefebvre E., Lévy A., Ceccotti T., Martin P. *Phys. Plasmas*, **18**, 033107 (2011).
- Chen M., Cormier-Michel E., Geddes C.G.R., Bruhwiler D.L., Yu L.L., Esarey E., Schroeder C.B., Leemans W.P. *J. Comp. Phys.*, **236**, 220 (2013).
- Коржиманов А.В., Ефименко Е.С., Ким А.В., Голубев С.В. *Квантовая электроника*, **43** (3), 217 (2013) [*Quantum Electron.*, **43** (3), 217 (2013)].
- Tamburini M., Di Piazza A., Keitel C.H. *Sci. Rep.*, **7**, 5694 (2017).