

# ДИНАМІЧНА ПОЛЯРИЗОВАНІСТЬ НИЖЧИХ РІВНІВ АТОМІВ МАГНІЮ ТА КАЛЬЦІЮ

Л.О. Бандуріна, М.І. Гайсак, О.І. Зацаринний

Інститут електронної фізики НАН України, 294016 Ужгород, вул. Університетська, 21

Проведені розрахунки динамічних поляризованостей нижчих рівнів атомів Mg та Ca у широкому інтервалі частот. Знайдені величини зсувів рівнів 3s4p <sup>1</sup>P<sub>1</sub> для атома Mg та 4s9p <sup>1</sup>P<sub>1</sub> для атома Ca і проводяться порівняння з експериментальними даними. Врахування кореляційного руху валентних електронів проведено в рамках методу накладання конфігурацій.

Впровадження потужних лазерів видимої та ультрафіолетової частини спектру у наукові дослідження відкрило широкі перспективи експериментальних та теоретичних досліджень багатофотонних процесів збудження та іонізації атомних систем [1]. Зручним формалізмом для вивчення поведінки атомних систем у зовнішньому періодичному полі є метод квазіенергій [2]. Амплітуда переходу із початкового стану  $|i\rangle$  в кінцевий стан  $|f\rangle$  задається інтегральним зображенням [3]

$$A_{fi}(t) = \frac{1}{2\pi i} \int \frac{e^{-iEt} R_{fi}(E)}{(E - \epsilon_f)(E - \epsilon_i - R_{ii}(E))} dE, \quad (1)$$

де  $R(E)$  – оператор зсуву, який можна записати у вигляді ряду

$$R = W(t) \frac{1}{1 - G_E^R W(t)} = W(t) + W(t) G_E^R W(t) + W(t) G_E^R W(t) G_E^R W(t) + \dots \quad (2)$$

$W(t) = \vec{d} \vec{E}_0 \cos \omega t$  – оператор взаємодії атома із зовнішнім електричним полем частотою  $\omega$  та модулем амплітуди  $E_0$ ,  $G_E^R$  – редукована функція Гріна вільного квазіенергетичного рівняння Шредінгера [2,3].

При дослідженнях резонансних багатофотонних процесів збудження та іонізації важливу роль відіграє зсув енергетичних рівнів атомів під дією

лазерного випромінювання. Величина зсуву  $i$ -го енергетичного рівня визначається тензором динамічної поляризованості, який у першому незникаючому порядку методу збурень задається формулою

$$\alpha_{rs}^{(2)}(\omega) = \sum_n \langle i | d_r | n \rangle \langle n | d_s | i \rangle \times \left( \frac{1}{\epsilon_n - \epsilon_i - \omega} + \frac{1}{\epsilon_n - \epsilon_i + \omega} \right), \quad (3)$$

де  $\omega$  – частота зовнішнього поля,  $d_k$  –  $k$ -ва компонента оператора дипольного моменту атома,  $\epsilon_k$ ,  $|k\rangle$  – енергія та хвильова функція  $k$ -го атомного стану. Сумування у (3) означає також і інтегрування по неперервній частині атомного спектру.

Величина зсуву  $i$ -го енергетичного рівня у лінійно поляризованому полі визначається наступним виразом, який впливає із (2)

$$\Delta E = -\frac{1}{4} \alpha(\omega) E_0^2, \quad (4)$$

де  $\alpha(\omega) = \alpha_{zz}^{(2)}(\omega)$  – динамічна поляризованість атома. Для достатньо великих напруженостей зовнішнього поля при розрахунках зсуву енергетичних рівнів слід враховувати і вищі порядки теорії збурень по зовнішньому полю. У цьому випадку одержуємо так звані гіперполяризованості [2].

У теоретичних дослідженнях багатофотонних процесів у лужних елементах для енергій, що відповідають переходам валентного електрона, використовують одночастинкове наближення, згідно якого валентний електрон рухається у модельному потенціалі [2]. У цьому випадку функцію Гріна, яка входить у складові матричні елементи, через які виражаються амплітуди багатофотонних процесів збудження та іонізації вдається записати в аналітичному вигляді.

Вивчення багатофотонних процесів у лужно-земельних елементах вимагає враховувати кореляційний рух валентних електронів. Знаходження енергій та хвильових функцій атома можна здійснити лише при чисельному розв'язанні рівняння Шредінгера. Найбільш просто і ефективно врахувати кореляційний рух електронів можна на шляху використання методу накладання конфігурацій [4]. Конфігурації будуються із одночастинкових хвильових функцій, які являються розв'язками наступної крайової задачі:

$$\left( -\frac{1}{2}\Delta + V_{core} \right) \chi_n(\vec{r}) = \varepsilon_n^0 \chi_n(\vec{r}), \quad (5)$$

де  $\Delta$  - оператор Лапласа,  $V_{core} = V^{HF} + V_{pol}$ ,  $V^{HF}$  - потенціал Хартрі-Фока,  $V_{pol}$  - поляризаційний потенціал. У даній роботі поляризаційний потенціал виберемо у вигляді [4]:

$$V_{pol} = -\frac{\alpha_0}{2r^4} \left\{ 1 - \exp \left[ -\left( \frac{r}{\rho} \right)^6 \right] \right\}, \quad (6)$$

де  $\alpha_0$  - статична поляризованість двократного іона,  $\rho$  - припасовочний параметр, який визначається із умови відтворення експериментальних значень енергій нижчих рівнів однократного іона розглядуваного атома. Так, наприклад, для атома магнію ці параметри становлять:  $\rho(3s)=1.0499$  а.о.,  $\rho(3p)=1.144$  а.о.,  $\rho(3d)=1.365$  а.о., а для атома кальцію -  $\rho(4s)=1.692$  а.о.,  $\rho(4p)=1.630$  а.о.,

$\rho(4f)=1.909$  а.о.. Точність визначення енергій одночастинкових іонів складала  $10^{-4}$  Ry. Експериментальні значення статичних поляризованостей для двократних іонів атомів магнію і кальцію запозичені із [5], причому  $Mg^{++} - 0.491$  а<sub>0</sub>,  $Ca^{++} - 3.45$  а<sub>0</sub>. Модельний поляризаційний потенціал широко використовується у науковій літературі [6]. Основна мета при цьому полягає у врахуванні кореляційних поправок і частково - релятивістських ефектів, які пов'язані із взаємодією валентних електронів з кістяком.

Результати розрахунків динамічних поляризованостей для основних та збуджених рівнів наведені у таблицях 1-2.

Чисельні розрахунки дипольних матричних елементів проводились як у формі довжини, так і у формі швидкості. Близкість цих величин вказує на хорошу точність отриманих хвильових функцій атомів магнію та кальцію. Слід відмітити, що статичні поляризованості ( $\omega=0$ ) добре узгоджуються з експериментальними даними, оскільки для атома магнію  $\alpha(0) = 72$  а.о., а для кальцію -  $\alpha(0)=172$  а.о. [5].

Для більш широкого інтервалу частот зовнішнього поля динамічні поляризованості резонансних рівнів приведені на рисунках 1-2. Як видно із рисунків, динамічні поляризованості змінюються у досить значному інтервалі. При певних частотах значення величини зсуву резонансного рівня можуть коливатись в межах від десятих долей  $см^{-1}$  до сотень  $см^{-1}$  уже для напруженості зовнішнього поля порядку  $10^5 - 10^6$  В/см. Із рисунків також видно, що існують області частот, де спостерігається як нормальна, так і аномальна дисперсія.

Відмітимо, що у роботі [7] при вимірюванні залежності величини ефективного перерізу чотирифотонної іонізації атома магнію від частоти лазерного випромінювання у діапазоні  $16330-18000$   $см^{-1}$  спостерігався резонансний максимум на частоті  $16450$   $см^{-1}$ , ширина якого дорівнювала  $\Gamma \approx 20$   $см^{-1}$ . Цей максимум відповідає трифотонному збудженню зв'язаного стану  $3s4p \ ^1P_1^0$

(16449  $\text{cm}^{-1}$ ). Величина напруженості зовнішнього поля при цьому дорівнювала  $E_0 = 10^6$  В/см. При зменшенні напруженості зовнішнього поля положення максимуму не змінювалось. Цей ефект пояснюється тим, що динамічна поляризованість рівня  $3s4p$  на частоті  $16450 \text{ cm}^{-1}$  дорівнює  $-118.23$  а.о.. Така величина динамічної поляризованості, згідно (5), приводить до зсуву енергетичного рівня на величину, що

дорівнює  $0.98 \text{ cm}^{-1}$ . Приблизно на таку ж величину зсувається і енергія основного рівня, але у протилежному напрямку, оскільки динамічна поляризованість основного рівня дорівнює  $92.42$  а.о.. Тому в умовах експерименту зсув не перевищує двох  $\text{cm}^{-1}$ . Таку величину зсуву у наведеному експерименті зафіксувати не можливо, оскільки ширина лінії генерації складала  $\Delta\omega \approx 2-3 \text{ cm}^{-1}$ .

Таблиця 1. Динамічна поляризованість основного ( $3s^2$ ) та збудженого ( $3s4p$ ) рівнів атому Mg

$\omega$ (eV)	$\alpha_{3s^2}(\omega)$ (у формі довж. а.о.)	$\alpha_{3s^2}(\omega)$ (у формі швид. а.о.)	$\omega$ (eV)	$\alpha_{3s4p}(\omega)$ (у формі довж. а.о.)	$\alpha_{3s4p}(\omega)$ (у формі швид. а.о.)
.00000E+00	.72132E+02	.70888E+02	.00000E+00	.29012E+04	.29137E+04
.10000E+00	.72170E+02	.70926E+02	.01000E+00	.29026E+04	.29151E+04
.10000E+01	.76141E+02	.74830E+02	.10000E+00	.30533E+04	.30695E+04
.15000E+01	.81836E+02	.80428E+02	.15000E+00	.32637E+04	.32763E+04
.20000E+01	.91431E+02	.89862E+02	.20000E+00	.36010E+04	.36132E+04
.23000E+01	.10010E+03	.98390E+02	.30000E+00	.36010E+04	.47572E+04
.30000E+01	.13794E+03	.13559E+03	.32000E+00	.48051E+04	.47951E+04
.35000E+01	.20723E+03	.20372E+03	.35000E+00	.85742E+03	.77071E+03
.40000E+01	.50300E+03	.49458E+03	.36000E+00	.36754E+03	.36336E+03
.43000E+01	.14896E+05	.14649E+05	.37000E+00	.13759E+06	.13874E+06
.43100E+01	.38023E+10	.37392E+10	.38000E+00	.50981E+05	.51163E+05
.43200E+01	-.14850E+05	-.14604E+05	.39000E+00	.11585E+06	.11564E+06
.50000E+01	-.19053E+03	-.18751E+03	.39500E+00	-.12022E+06	-.11941E+06
.55000E+01	-.94167E+02	-.92829E+02	.40000E+00	-.19833E+05	-.19469E+05
.59500E+01	-.32104E+01	-.41328E+01	.50000E+00	-.19294E+05	-.19341E+05
.60600E+01	-.10856E+04	-.10544E+04	.60000E+00	-.70707E+04	-.70870E+04
.64900E+01	-.61315E+02	-.60282E+02	.10000E+01	-.27140E+03	-.28120E+03
.65000E+01	-.60287E+02	-.59282E+02	.14000E+01	-.29596E+03	-.29788E+03
.66800E+01	.62874E-01	-.98502E+00	.16000E+01	-.19894E+03	-.20071E+03
.67200E+01	-.16154E+03	-.15674E+03	.20000E+01	-.12316E+03	-.12423E+03
.70000E+01	-.96603E+01	-.10328E+02	.25000E+01	-.78153E+02	-.78858E+02
.70100E+01	.13051E+03	.12440E+03	.25000E+01	-.78153E+02	-.78858E+02
.71800E+01	-.23395E+08	-.22408E+08	.30000E+01	-.54344E+02	-.54817E+02

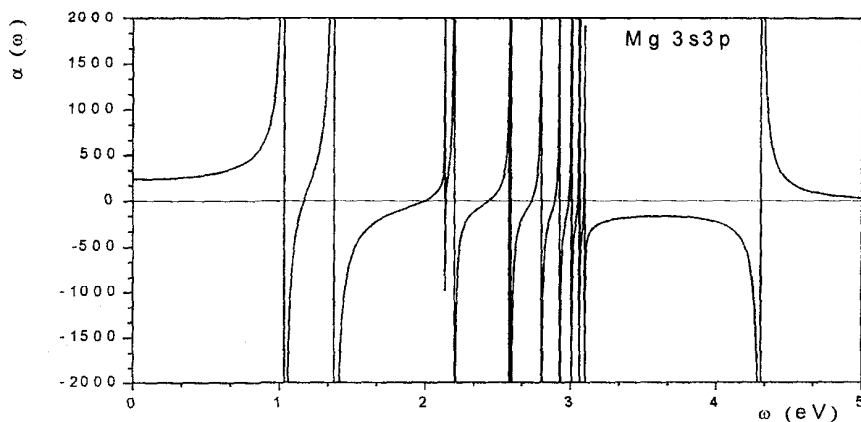


Рис.1. Залежність динамічної поляризованості від частоти зовнішнього поля для стану  $3s3p$  атому Mg

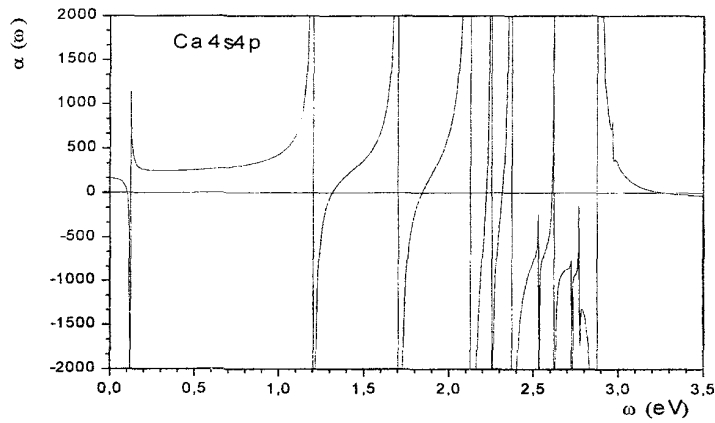


Рис.2. Залежність динамічної поляризованості від частоти зовнішнього поля для стану 4s4p атому Ca

Таблиця 2. Динамічна поляризованість основного та резонансного рівнів атому Ca

$\omega$ (eV)	$\alpha_{4s^2}(\omega)$ (у формі довж. а.о.)	$\alpha_{4s^2}(\omega)$ (у формі швид. а.о.)	$\omega$ (eV)	$\alpha_{4s4p}(\omega)$ (у формі довж. а.о.)	$\alpha_{4s4p}(\omega)$ (у формі швид. а.о.)
.00000E+00	.15943E+03	.14906E+03	.00000E+00	.16419E+03	.20577E+03
.10000E+01	.18088E+03	.16901E+03	.10000E+01	.43584E+03	.41487E+03
.13000E+01	.19945E+03	.18628E+03	.12000E+01	.38826E+05	.37948E+05
.14000E+01	.20781E+03	.19406E+03	.12050E+01	-.93406E+04	-.91448E+04
.15000E+01	.21762E+03	.20319E+03	.13000E+01	-.58648E+02	-.70321E+02
.20000E+01	.30494E+03	.28435E+03	.13150E+01	-.44357E-01	-.13139E+02
.26000E+01	.84908E+03	.78983E+03	.15000E+01	.37267E+03	.35002E+03
.28000E+01	.29061E+04	.27004E+04	.17000E+01	.137005+05	.13606E+05
.28600E+01	.12442E+05	.11557E+05	.17050E+01	-.53613E+05	-.53390E+05
.28800E+01	-.11153E+06	-.10359E+06	.17700E+01	-.51493E+03	-.54846E+03
.30000E+01	-.17849E+04	-.16563E+04	.18450E+01	.69133E+01	-.37808E+02
.32000E+01	-.64963E+03	-.60182E+03	.18500E+01	.27265E+02	-.18293E+02
.35000E+01	-.31632E+03	-.29210E+03	.20500E+01	.11934E+04	.10381E+04
.40000E+01	-.15683E+03	-.14354E+03	.21250E+01	.30268E+09	.26543E+09
.50700E+01	.55829E+01	.34981E+02	.21300E+01	-.17166E+05	-.15056E+05
.50800E+01	.29265E+02	.66920E+02	.21400E+01	-.55940E+04	-.49052E+04
.50900E+01	.83246E+02	.14010E+03	.21700E+01	-.16370E+04	-.14252E+04
.51000E+01	.34916E+03	.50173E+03	.21900E+01	-.93319E+03	-.79792E+03
.53900E+01	.18246E+04	.22012E+04	.22050E+01	-.54952E+03	-.44892E+03
.54000E+01	-.51006E+03	-.59827E+03	.22100E+01	-.42255E+03	-.33148E+03
.55000E+01	-.45596E+02	-.43916E+02	.22150E+01	-.28690E+03	-.20478E+03
.56000E+01	-.12448E+03	-.13323E+03	.22200E+01	-.133700+03	-.60288E+02
.58500E+01	-.53429E+01	-.55277E+01	.22250E+01	.51559E+02	.11635E+03
.60000E+01	-.80235E+02	-.80200E+02	.22350E+01	.66805E+03	.71273E+03
.65000E+01	-.49524E+02	-.48381E+02	.22400E+01	.13565E+04	.13855E+04

Дещо протилежна картина спостерігається у роботі [8] при вимірюванні абсолютної величини ефективного перерізу шестифотонної іонізації атома кальцію в області частот 9390-9470  $\text{см}^{-1}$ . Експеримент проводився

при трьох значеннях напруженості зовнішнього поля, а саме  $E_0 \approx 8.0 \cdot 10^5$ ;  $1.4 \cdot 10^6$  та  $5.3 \cdot 10^6$  В/см. У всіх трьох випадках спостерігалась однакова частотна залежність ймовірності іонізації. Цікаво, що у даній області частот не

спостерігались ніякі максимуми, навіть ті два, які відповідають станам  $4s7f\ ^1F_1$  та  $4s9p\ ^1P_0$  і лежать у даній області частот. Для пояснення своїх результатів автори припустили, що динамічні поляризованості цих рівнів сягають такої величини, яка забезпечує величину зсуву більше сотні  $\text{см}^{-1}$ . Наші розрахунки показали, що динамічна поляризованість рівня  $4s9p\ ^1P_0$

на частоті  $9437\ \text{см}^{-1}$  становить  $349.75\ \text{а.о.}$ . Тому така величина динамічної поляризованості не може забезпечити такого великого зсуву цього рівня. Отже причини відсутності резонансів у досліджуваній області частот не до кінця виявлені.

1. N.B. Delone and V.P. Krainov, *Multiphoton Processes in Atoms*, Springer, Berlin (1994) 345.
2. Л.П. Рапопорт, Б.А. Зон, Н.Л. Манаков, Теория многофотонных процессов в атомах, Энергоатомиздат, Москва (1978) 182.
3. V.I. Lengyel, M.I. Haysak, *Adv. Atom.Mol.Opt.Phys.*, 27, 245 (1990).
4. О.И. Зацаринный, В.И. Лендбел, Э.А. Масалович, *Опт. и спектр.*, 67, вып.1, 20 (1989).
5. А.А. Радциг, Б.М. Смирнов, *Параметры атомов и атомных ионов*, Энергоатомиздат, Москва (1986) 344.
6. М.Аумар, *Phys. Rev.A*, 6, 2203 (1973).
7. И.И. Бондарь, В.В. Суран, *Опт. и спектр.*, 61, вып.1, 24 (1986).
8. И.И. Бондарь, В.В. Суран, *Опт. и спектр.*, 68, вып.2, 265 (1990).

## DYNAMIC POLARIZABILITY OF LOWER LEVELS OF MAGNESIUM AND CALCIUM ATOMS

**L.A.Bandurina, M.I. Haysak, O.I. Zatsarinny**

Institute of Electron Physics Ukraine Academy of Science,

294016 Universitetska str.,21, Ukraine

Calculations of dynamic polarizabilities of lower levels for Mg and Ca atoms have been performed in wide interval of frequencies. Values of  $3s4p\ ^1P_1$  levels shift for Mg atom and  $4s9p\ ^1P_1$  for Ca atom were found. The obtained results were compared with experimental data. Account of correlation movement of valence electrons has been conducted in the framework of configuration interaction method.