01

Волновая функция фотоэлектрона вблизи центра квантового вихря

© Н.В. Ларионов [1,2], Ю.Л. Колесников [1], В.М. Молчановский [1]

[1] Санкт-Петербургский государственный морской технический университет,
190121 Санкт-Петербург, Россия
[2] Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
195251 Санкт-Петербург, Россия
e-mail: larionov.nickolay@gmail.com

Поступила в редакцию 13.03.2024 г.
В окончательной редакции 28.05.2024 г.
Принята к публикации 28.05.2024 г.

В двумерном приближении теоретически исследовано поведение фотоэлектрона в области локализации квантового вихря. Полученная волновая функция фотоэлектрона имеет простую структуру, представляющую собой произведение гауссова волнового пакета на полином, содержащий информацию о вихре. С ее помощью анализируются плотность и ток вероятности, как в импульсном, так и координатном пространствах. Также рассмотрено влияние величины напряженности ионизирующего сверхкороткого лазерного импульса на вероятность появления и масштаб квантового вихря.

Ключевые слова: квантовый вихрь, импульсное представление, поток вероятности, сверхкороткий импульс, фотоэлектрон.

DOI: 10.61011/OS.2024.05.58455.6140-24

1. Введение

Ранее нами исследовались квантовые вихри, образующиеся при надбарьерной ионизации двумерного атома водорода сверхкоротким лазерным импульсом [1–4]. Расчеты проводились как с помощью численного решения уравнения Шредингера, так и с помощью аналитического подхода, основанного на применении нестационарной теории возмущений. В рамках последней было получено аналитическое выражение для волновой функции фотоэлектрона в импульсном k-представлении. Эта волновая функция позволила провести идентификацию центров квантовых вихрей, а также анализ „симметричного“ потока вероятности [5] в соответствующем k-пространстве.

Переход из k-пространства в обычное координатное пространство для полученной волновой функции выполнен не был. Причина этому — существенные трудности при двумерном преобразовании Фурье.

В данной работе для случая хорошо локализованных вихрей нам удается упростить упомянутую волновую функцию фотоэлектрона таким образом, что она записывается в виде произведения гауссовой функции от модуля импульса $k = |\mathbf{k}|$ на полином относительно проекций k_x, k_y. Такая упрощенная волновая функция не теряет информацию о квантовом вихре и позволяет легко исследовать его и в координатном пространстве.

В работе используется атомная система единиц ($\hbar = 1$, $m_e = 1$, $e = 1$), где атомная единица электрического поля F_a равна напряженности кулоновского поля на боровском радиусе, а атомная единица времени T_a, умноженная на 2π, представляет собой орбитальный период электрона в той же модели Бора.

2. Теоретическая модель

Рассматриваемая нами модель представлена двумерным атомом водорода [6], находящимся под воздействием сверхкороткого лазерного импульса. Оператор взаимодействия „атом+поле“ записывается в дипольном приближении:

$$\hat{V} = -\hat{\mathbf{d}}\mathbf{F}(t), \qquad 1$$

где $\hat{\mathbf{d}} = -\hat{\mathbf{r}} = -(\mathbf{e}_x\hat{x} + \mathbf{e}_y\hat{y})$ — оператор дипольного момента атома и $\mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_y$ — орты декартовой системы координат. Вектор напряженности электрического поля лазера $\mathbf{F}(t)$ моделируется следующей функцией:

$$\mathbf{F}(t) = (F_x(t), 0) = \mathbf{e}_x F_0 \cos(\omega t - \alpha)\left[\theta(T - t) - \theta(-t)\right], \qquad (2)$$

где ω — частота, $\theta(t)$ — функция Хевисайда, T — длительность импульса, α — начальная фаза. Значения постоянной амплитуды F_0 берутся такими, чтобы преобладала надбарьерная ионизация.

Волновая функция электрона ищется в виде суммы основного (начального) состояния атома и состояния, соответствующего непрерывному спектру [7]. Последнее записывается нами в виде суперпозиции цилиндрических волн с неизвестными амплитудами, которые, в свою очередь, вычисляются с помощью нестационарной теории возмущений.

Опуская промежуточные вычисления, которые подробно разобраны в наших предыдущих работах, выпишем часть волновой функции в импульсном представлении, ответственную за непрерывный спектр электрона (далее фотоэлектрон):

$$\tilde{\Psi}(k, \varphi_k, t) = \sum_m b_{k,m}(t)(-i)^{|m|}\Phi_m(\varphi_k)e^{-iE_k t}. \qquad (3)$$

Здесь (k, φ_k) — полярные компоненты импульса $\mathbf{k}$ фотоэлектрона, $m = 0, \pm1, \pm2, \ldots$ — проекция его момента на ось ось z и $E_k = k^2/2 = (k_x^2 + k_y^2)/2$ — его энергия. $\Phi_m(\varphi_k) = e^{im\varphi_k}/\sqrt{2\pi}$ — угловая часть волновой функции.

Амплитуды $b_{k,m}(t)$ удовлетворяют следующей системе уравнений [4]:

$$\frac{\partial b_{k,m}(t)}{\partial t} = \frac{-i}{2}\,(\delta_{m,+1} + \delta_{m,-1})\frac{6ke^{i\omega_{k1}t}}{(k^2+1)^{5/2}}\,F_x(t)$$
$$+ \frac{(-i)^{|m-1|-|m|}}{2}\,F_x(t)\Big(\frac{\partial}{\partial k} - ikt - \frac{m-1}{k}\Big)b_{k,m-1}(t)$$
$$+ \frac{(-i)^{|m+1|-|m|}}{2}F_x(t)\Big(\frac{\partial}{\partial k} - ikt + \frac{m+1}{k}\Big)b_{k,m+1}(t), \quad (4)$$

где $\omega_{k1} = (k^2+1)/2$ — частота перехода из основного состояния в состояние непрерывного спектра. Начальное условие для неизвестных амплитуд $b_{k,m}(0) = 0$.

Для решения системы (4) применяется нестационарная теория возмущений, т. е. $b_{k,m}(t)$ записывается в виде ряда теории возмущений:

$$b_{k,m}(t) = \sum_{s=1,2,\ldots} b^{(s)}_{k,m,10}(t),$$

где нижний индекс „10“ указывает на начальное связанное состояние электрона и $b^{(s)}_{k,m,10} \sim F_0^s$.

Отметим, что в (3) полностью игнорируется связь с атомным остатком.

3. Волновая функция вблизи центра вихря

Будем рассматривать случай установившегося решения $t > T$ и выберем следующие параметры лазерного импульса: $w = \pi$, $\alpha = 0$ и $T = 3, 4$. Конкретно при этих параметрах нами ранее были идентифицированы хорошо локализованные квантовые вихри [4]. При этом в случае четной длительности T в импульсном пространстве появляется одна пара вихрей, а при нечетной — две пары.

Случай $T = 4$. В данном случае, для полной идентификации квантовых вихрей достаточно решить систему (4) во втором порядке теории возмущений. Проделывая эту несложную процедуру, для выбранных параметров лазера, получаем следующую волновую функцию фотоэлектрона:

$$\tilde{\Psi}_4(k, \varphi_k, t) = A\,\frac{\sin(k^2+1)}{(k^2+1)^{3/2}}\,e^{ik^2 - iE_k t}\Bigg[\frac{k\cos(\varphi_k)}{(k^2+1)^2 - 4\pi^2}$$
$$\times\left(1 + \frac{2iF_0 k\cos(\varphi_k)(7(k^2+1)^2 - 4\pi^2)}{(k^2+1)^2((k^2+1)^2 - 16\pi^2)}\right)$$
$$- \frac{2iF_0}{(k^2+1)((k^2+1)^2 - 16\pi^2)}\Bigg], \quad (5)$$

где A — константа. Здесь члены с F_0 соответствуют второму порядку теории возмущений, а члены свободные от этой амплитуды — первому порядку. Нижний индекс „4“ указывает на длительность возбуждающего импульса лазера.

Центры двух квантовых вихрей, симметричных относительно оси k_x, могут быть найдены из равенства нулю вещественной и мнимой частей волновой функции (5), т. е. $\mathrm{Re}\left(\tilde{\Psi}_4(\mathbf{k}, t)\right) = 0 = \mathrm{Im}\left(\tilde{\Psi}_4(\mathbf{k}, t)\right)$ (сравни с [8–10]). Отсюда декартовы и полярные координаты центров вихрей равны (рис. 1, *a*)

$$k_{x_0} = 0, \quad k_{y_0} = \pm\sqrt{2\pi - 1} \approx 2.3,$$
$$k_0 = \sqrt{2\pi - 1}, \quad \varphi_0 = \pi/2, 3\pi/2. \quad (6)$$

„Симметричный“ поток

$$\bar{\mathbf{j}}(\mathbf{k}, t) = \mathrm{Im}[\tilde{\Psi}^*(\mathbf{k}, t)\nabla_k\tilde{\Psi}(\mathbf{k}, t)], \quad (7)$$

где $\nabla_k \equiv \partial/\partial\mathbf{k}$, построенный для состояния (5), демонстрирует закручивание вокруг оси, проходящей через эти центры [3,4] (рис. 1, *c, d*).

Можно легко убедиться, что в рассматриваемом случае средний импульс фотоэлектрона в состоянии (5) равен нулю:

$$\langle k_{x,y}\rangle_4 = \int k_{x,y}|\tilde{\Psi}_4(\mathbf{k}, t)|^2\,\frac{d^2k}{2\pi} = 0, \quad (8)$$

где $k_x = k\cos(\varphi_k)$, $k_y = k\sin(\varphi_k)$.

Если вспомнить взятые параметры импульса, то этот результат кажется естественным. Однако надо учитывать, что используемая волновая функция (3) получена отбрасыванием связанного состояния электрона и заменой кулоновских волн на цилиндрические.

С математической точки зрения выражение (8) содержит следующие интегралы:

$$\int_0^{2\pi}\cos(\varphi_k)\cos(n\varphi_k)d\varphi_k, \quad \int_0^{2\pi}\sin(\varphi_k)\cos(n\varphi_k)d\varphi_k,$$

которые в нашем случае $n = 0, 2, 4$, обращают его в ноль.

Дисперсия любой из компонент импульса не равна нулю:

$$\langle k^2_{x,y}\rangle_4 = \int k^2_{x,y}|\tilde{\Psi}_4(\mathbf{k}, t)|^2\,\frac{d^2k}{2\pi} \neq 0. \quad (9)$$

Интеграл (9) не удается вычислить аналитически. Ниже сравним численные значения интеграла (9) с значениями, найденными приближенно.

Несмотря на относительно простой вид волновой функции (5), при попытке записать ее в координатном представлении наталкиваешься на существенные трудности при преобразовании Ханкеля [11]. Именно по этой причине исследование вихрей в обычном пространстве проводилось нами ранее только с помощью численного решения уравнения Шредингера.

Далее будем интересоваться поведением фотоэлектрона вблизи центров квантовых вихрей. Для этого разложим волновую функцию (5) в ряд Тейлора вблизи k_0. Так для отдельных функций из (5) имеем

$$\sin(k^2+1) \approx (k^2-k_0^2),$$

$$\frac{1}{(k^2+1)^{3/2}(k^2+(2\pi+1))} = e^{-\ln\left[(k^2+1)^{3/2}(k^2+(2\pi+1))\right]} \approx \frac{1}{8\sqrt{2}\pi^{5/2}} e^{-\frac{k^2-k_0^2}{\pi}},$$

$$\frac{1}{(k^2+1)^{5/2}((k^2+1)^2-16\pi^2)} = e^{-\ln\left[(k^2+1)^{5/2}((k^2+1)^2-16\pi^2)\right]} \approx -\frac{1}{48\sqrt{2}\pi^{9/2}} e^{-\frac{k^2-k_0^2}{\pi}}. \tag{10}$$

Учтем, что $((k^2+1)^2-4\pi^2) = (k^2-k_0^2)(k^2+(2\pi+1))$ и опустим малое слагаемое пропорциональное $\cos^2(\varphi_k)$ $(\varphi_k \approx \varphi_0)$.

Тогда волновая функция фотоэлектрона (5) вблизи центра вихря, примет следующий вид:

$$\tilde{\Psi}_{4,ap}(k,\varphi_k,\tau) = A\, e^{-\frac{a(\tau)}{2\sqrt{\pi}}k^2}\left[k\cos(\varphi_k) + \frac{iF_0(k^2-k_0^2)}{3\pi^2}\right], \tag{11}$$

где $a(\tau) = (2+i\pi\tau)/\sqrt{\pi}$, $\tau = (t-4/2)$.

Полученное выражение (11) представляет собой гауссову функцию умноженную на полином второй степени относительно компонент импульса (добавленный нижний индекс „ap“ есть сокращение от „approximation“). Из структуры этого полинома легко определить нули волновой функции, соответствующие центрам вихрей (k_0, φ_0) (6).

Вычисляя с помощью (11) средний импульс фотоэлектрона, убеждаемся, что как и в случае с „точной“ волновой функцией (5) он равен нулю $\langle k_{x,y}\rangle_{4,ap} = 0$. Для дисперсии получаем следующие выражения:

$$\langle k_x^2\rangle_{4,ap} = \frac{\pi}{4}\,\frac{\left[27\pi^5 + F_0^2(4-8\pi+6\pi^2)\right]}{9\pi^5 + 2F_0^2(2-6\pi+5\pi^2)} \approx \frac{3\pi}{4},$$

$$\langle k_y^2\rangle_{4,ap} = \frac{\pi}{4}\,\frac{\left[9\pi^5 + F_0^2(4-8\pi+6\pi^2)\right]}{9\pi^5 + 2F_0^2(2-6\pi+5\pi^2)} \approx \frac{\pi}{4}. \tag{12}$$

Видно, что зависимость от напряженности поля очень слабая. Если сравнить приближенные значения дисперсии (12) с соответствующими численными значениями, полученными с помощью (5), то последние примерно в 1.2 раза больше приближенных.

Основное преимущество выражения (11) по сравнению с его точным аналогом (5) заключается в том, что его легко можно переписать в координатном представлении. Не вдаваясь в подробности простых вычислений, выпишем ответ:

$$\psi_4(r,\varphi,\tau) = \int_0^\infty\int_0^{2\pi} \tilde{\Psi}_{4,ap}(k,\varphi_k,\tau)e^{ikr\cos(\varphi_k-\varphi)} \times \frac{kdkd\varphi_k}{(2\pi)^2} = \frac{\tilde{A}}{|a(\tau)|^3}\, e^{-\frac{r^2}{|a(\tau)|^2}+i\frac{\pi r^2\tau}{2|a(\tau)|^2}} \times \left[\left(F_0(4(\pi-1)+\pi^2(r^2-k_0^2\tau^2)) - 6\pi^3 r\cos(\varphi)\right) + i\pi\tau\left(2F_0(3\pi-2) - 3\pi^3 r\cos(\varphi)\right)\right], \tag{13}$$

где $\tilde{A}$ — константа, $\mathbf{r} = (r,\varphi)$ — полярные координаты фотоэлектрона и $|a(\tau)|^2 = (4+\pi^2\tau^2)/\pi$.

Используя (13), легко находим средние значения координат фотоэлектрона и их дисперсию:

$$\langle x\rangle_4 \approx -\frac{12k_0^2}{9\pi^5}F_0, \;\; \langle y\rangle_4 = 0.$$

$$\langle(\triangle x)^2\rangle_4 = \langle x^2\rangle_4 - \langle x\rangle_4^2 \approx \frac{3\pi\tau^2}{4},$$

$$\langle(\triangle y)^2\rangle_4 = \langle y^2\rangle_4 - \langle y\rangle_4^2 \approx \frac{\pi\tau^2}{4}. \tag{14}$$

При этом, как и должно быть, $|a(\tau)|^2 \approx \langle(\triangle x)^2\rangle_4 + \langle(\triangle y)^2\rangle_4$.

Полученная волновая функция в координатном представлении (13) имеет сходную структуру с волновой функцией в импульсном представлении (11). Гауссов множитель описывает расплывание образованного волнового пакета. Полином второй степени, относительно координат фотоэлектрона несет информацию о квантовом вихре в обычном пространстве. Приравнивая нулю реальную и мнимую части выражения в квадратных скобках в (13) и решая получившуюся систему уравнений, находим координаты центров вихрей:

$$x_0 = \frac{F_0(6\pi-4)}{3\pi^3},$$

$$y_0 = \pm\sqrt{\frac{k_0^2|a(\tau)|^2}{\pi} - x_0^2} \approx \pm k_0\tau. \tag{15}$$

Из (15) делаем очевидные выводы: вихрь перемещается со скоростью, равной k_0, определяющим ноль волновой функции в импульсном пространстве; для рассмотренного четного T перемещение вихря будет происходить вдоль оси, перпендикулярной направлению линейной поляризации ионизирующего поля. Это косвенно указывает на то, что природа вихрей обусловлена интерференцией состояний, относящихся к встречным волнам.

Случай $T = 3$. В случае нечетной длительности $T = 3$ волновая функция фотоэлектрона, полученная с учетом

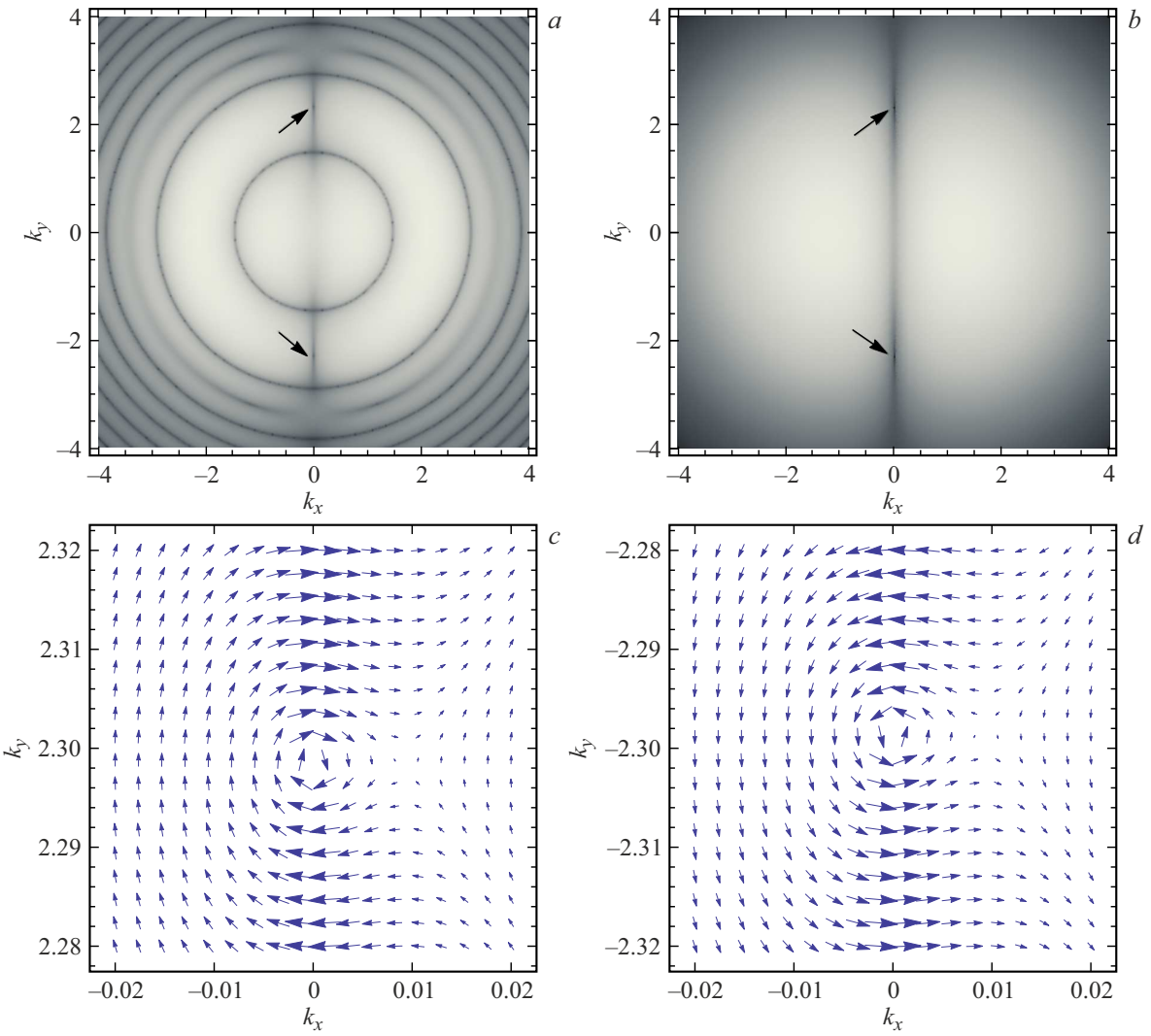

Рис. 1. Распределение по импульсам фотоэлектрона $\ln[\rho(k_x, k_y)]$: a — $\rho(\mathbf{k}) = |\tilde{\Psi}_4(\mathbf{k}, t)|^2$, b — $\rho(\mathbf{k}) = |\tilde{\Psi}_{4,ap}(\mathbf{k}, t)|^2$. c и d — векторное поле $\overline{\mathbf{v}}(k_x, k_y, t)$ вблизи центров квантовых вихрей. Длительность импульса $T = 4$. Напряженность лазерного поля $F_0 = 0.4$ и $t = 5$.

второго порядка теории возмущений, имеет вид

$$\tilde{\Psi}_3'(k, \varphi_k, t) = A\frac{e^{-iE_k t}}{(k^2+1)^{7/2}}$$
$$\times\left[\frac{8i\pi^4 e^{\frac{3}{4}i(k^2+1)}(k^2+1)^2\cos(\frac{3}{4}(k^2+1))k\cos(\varphi_k)}{(k^2+1)^2-4\pi^2}\right.$$
$$-\frac{4\pi^2 F_0}{(k^2+1)^4-20\pi^2(k^2+1)^2+64\pi^4}\Big[k^2\cos(2\varphi_k)$$
$$\times\big(((k^2+1)^2-9\pi^2)(k^2+1)^2+\pi^2 e^{\frac{3}{2}i(k^2+1)}$$
$$\times(4\pi^2-7(k^2+1)^2)-4\pi^4\big)+\Big(4\pi^4k^2-\pi^2e^{\frac{3}{2}i(k^2+1)}$$
$$\times((5k^2-2)(k^2+1)^2+4\pi^2(k^2+2))+(k^2+1)^2$$
$$\left.\times(k^6+2k^4-11\pi^2k^2+k^2-2\pi^2)+8\pi^4\Big)\Big]\right]. \qquad (16)$$

Как и в предыдущем случае, волновая функция (16) позволяет идентифицировать нули, соответствующие центрам вихрей [4]. Таких нулей четыре, декартовы координаты которых

$$k_{x_{01}} = 0,\ \ k_{y_{01}} = \pm\sqrt{4\pi/3-1} \approx \pm 1.79,$$
$$k_{x_{02}} = 0,\ \ k_{y_{02}} = \pm\sqrt{8\pi/3-1} \approx \pm 2.72. \qquad (17)$$

Полярные координаты

$$k_{01} = \sqrt{4\pi/3-1},\ \ \varphi_{01} = \pi/2,\ 3\pi/2,$$
$$k_{02} = \sqrt{8\pi/3-1},\ \ \varphi_{02} = \pi/2,\ 3\pi/2. \qquad (18)$$

То есть имеются две пары квантовых вихрей, симметричных относительно оси k_x.

Однако „симметричный“ поток (7), построенный с помощью (16), не будет демонстрировать вихревое поведение вокруг центров этих вихрей. Здесь для рассматриваемого случая нечетного T необходимо учесть третий

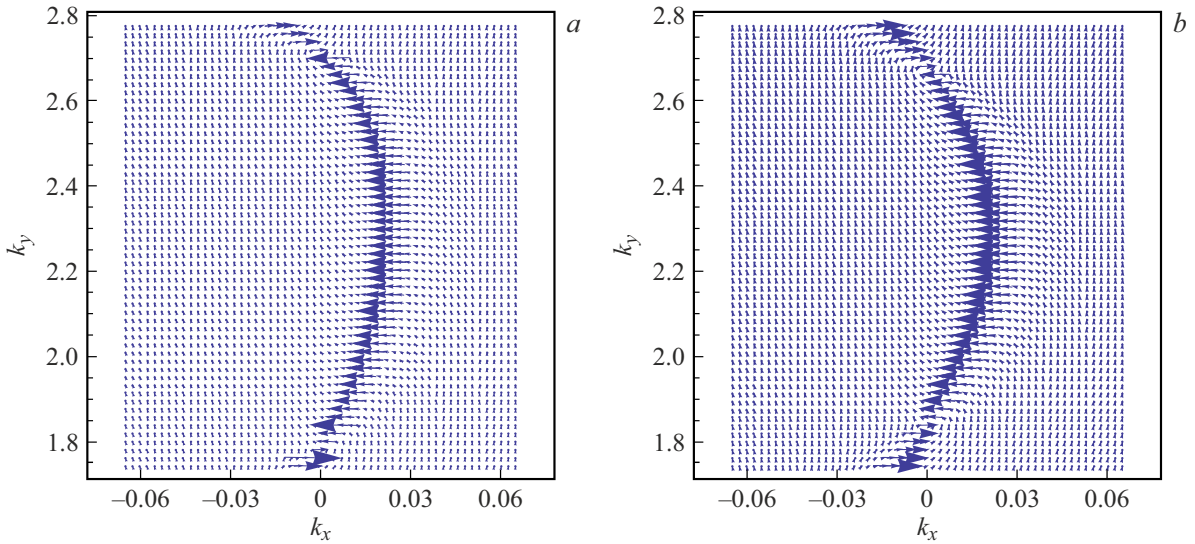

Рис. 2. *a* и *b* — векторное поле $\overline{\mathbf{v}}(k_x, k_y, t)$ вблизи центров квантовых вихрей. Длительность импульса $T = 3$. Напряженность лазерного поля $F_0 = 0.5$ и $t = 4$.

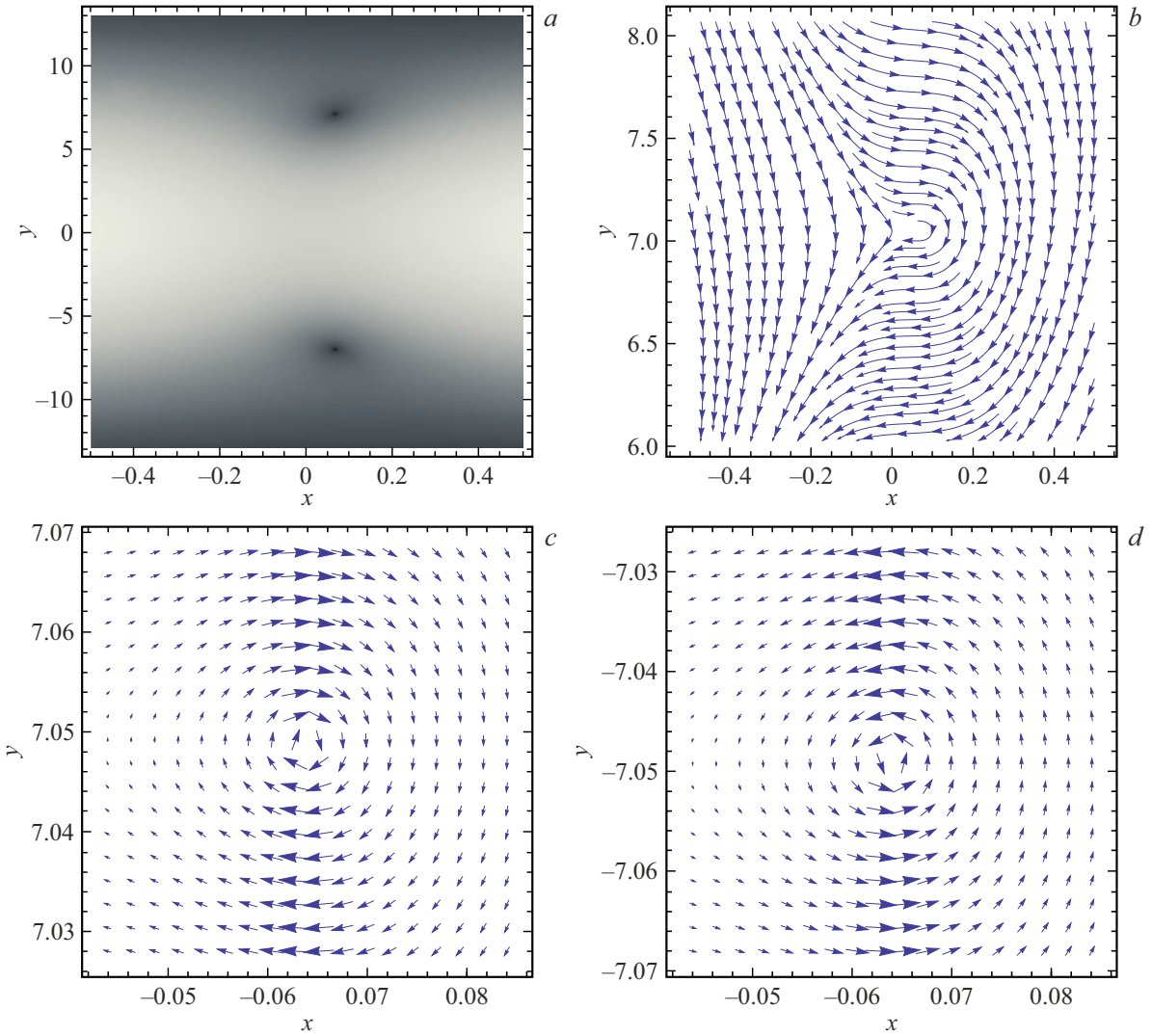

Рис. 3. *a* — распределение по координатам фотоэлектрона $\ln[\rho(x, y, t)]$. *b, c, d* — векторное поле $\mathbf{v}(x, y, t)$ вблизи центров квантовых вихрей. Длительность импульса $T = 4$. Напряженность лазерного поля $F_0 = 0.4$. Момент времени $t = 5$.

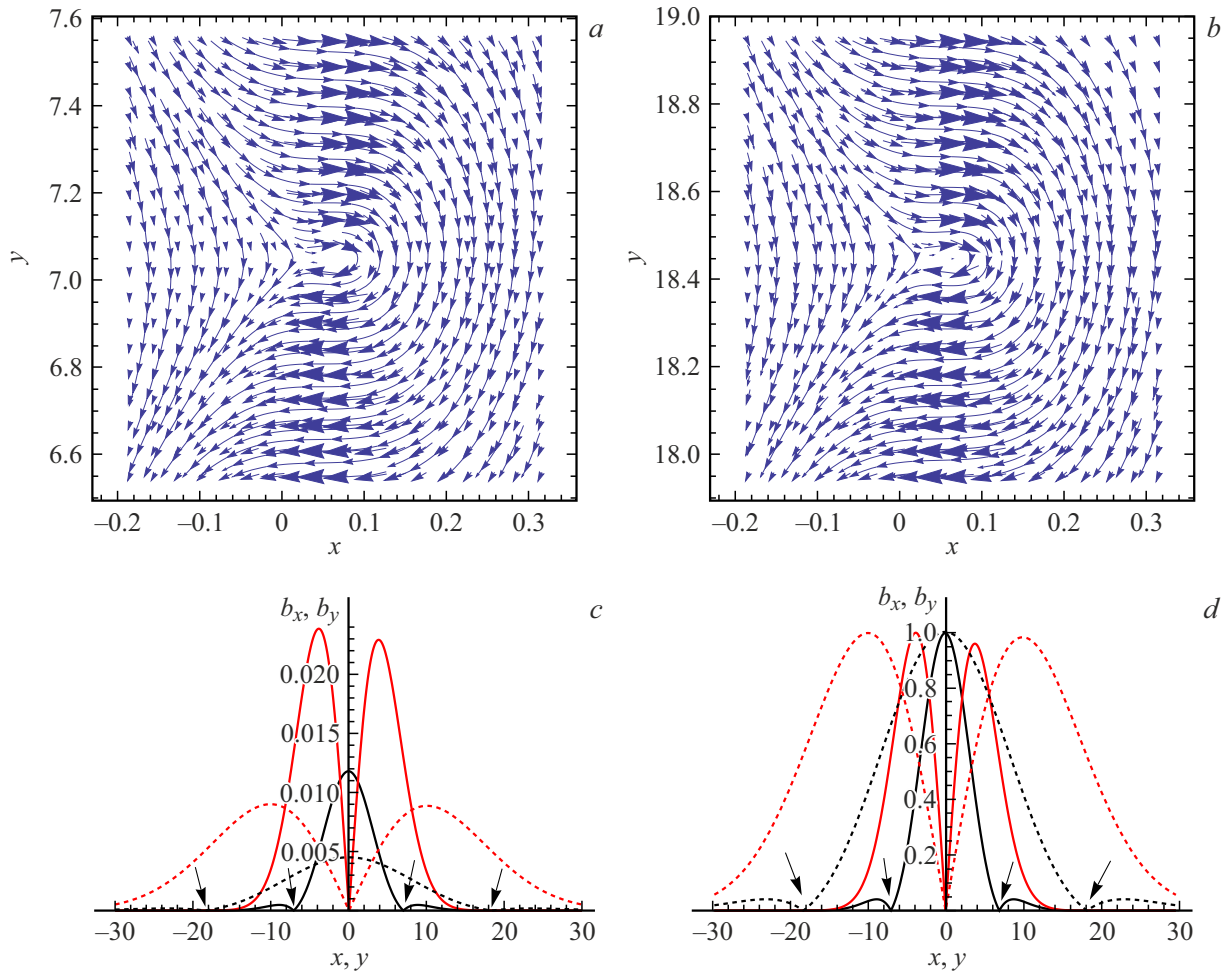

Рис. 4. Векторное поле $\mathbf{v}(x, y, t_i)$ вблизи центров квантовых вихрей в разные моменты времени: a — $t_1 = 5$, b — $t_2 = 10$. c, d — зависимость абсолютных значений волновой функции b_x (красная кривая), b_y (черная кривая) от компонент x, y соответственно: $t_1 = 5$ — сплошная линия, $t_2 = 10$ — пунктирная линия. Стрелками указаны центры вихрей. Длительность импульса $T = 4$. Напряженность лазерного поля $F_0 = 0.4$.

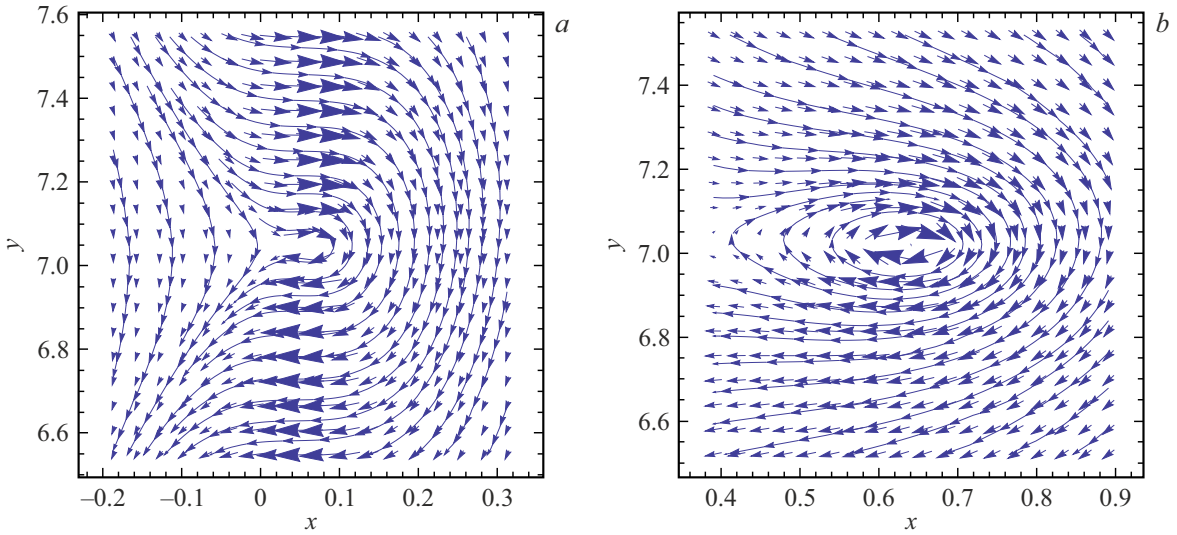

Рис. 5. Векторное поле $\mathbf{v}(x, y, t_i)$ вблизи центра квантового вихря: a — $F_0 = 0.4$, $x_0 = 0.064$, $y_0 = 7.049$; b — $F_0 = 4$, $x_0 = 0.639$, $y_0 = 7.02$. Длительность импульса $T = 4$. Момент времени $t = 5$.

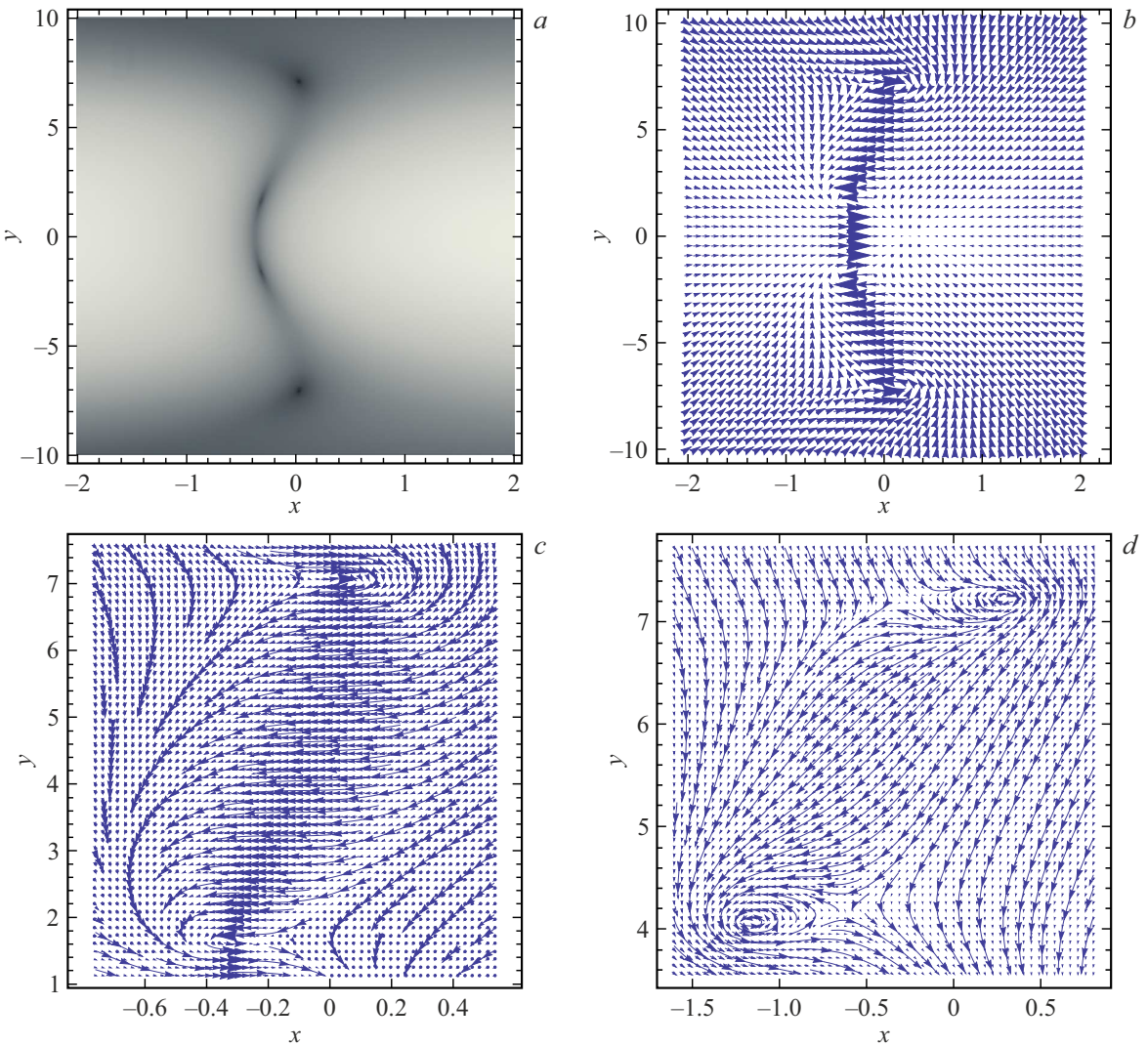

Рис. 6. *a* — распределение по координатам фотоэлектрона $\ln[\rho(x, y, t)]$, *b* — соответствующее векторное поле $\mathbf{v}(x, y, t)$. *c, d* — векторное поле $\mathbf{v}(x, y, t)$ вблизи центров соседних вихрей. *a, b, c* — $F_0 = 0.5$. *d* — $F_0 = 5$. Длительность импульса $T = 3$. Момент времени $t = 4$.

порядок теории возмущений. Чтобы не загромождать текст, поправка третьего порядка $\delta\tilde{\Psi}_3(k, \varphi_k, t)$ к (16) вынесена в Приложение.

Теперь будем интересоваться поведением волновой функции

$$\tilde{\Psi}_3(k, \varphi_k, t) = \tilde{\Psi}'_3(k, \varphi_k, t) + \delta\tilde{\Psi}_3(k, \varphi_k, t) \tag{19}$$

вблизи двух соседних вихрей (рис. 2).

Если мы поступим также как и в случае с $T = 4$, т.е. будем раскладывать волновую функцию в ряд Тейлора вблизи одного из центров, то потеряем информацию о близлежащем втором вихре. Поэтому проведем разложение вблизи резонансного значения $k_r = \sqrt{2\pi - 1}$, которое как раз лежит практически посередине между центрами двух соседних вихрей $\sqrt{4\pi/3 - 1} < k_r < \sqrt{8\pi/3 - 1}$ (для случая $T = 4$ значение k_r совпадало с координатой центра вихря k_0).

Последовательно, так же как и в предыдущем случае, проделывая разложение $\tilde{\Psi}_3(k, \varphi_k, t)$ (19), вблизи k_r приходим к следующему упрощенному выражению:

$$\tilde{\Psi}_{3,ap}(k, \varphi_k, \tau') = A e^{-\frac{a(\tau')}{2\sqrt{\pi}}k^2} \Bigg[\Bigg(1 - \frac{F_0^2}{2\pi^3} - i\left(\frac{4}{9\pi^4} + \frac{3}{8\pi^2}\right) F_0^2 \Bigg) k\cos(\varphi_k) - \frac{4F_0(1 - \frac{9}{32}(k^2 - k_r^2)^2)}{9\pi^2} \Bigg], \tag{20}$$

где слагаемые с F_0^2 соответствуют третьему порядку теории возмущений и $a(\tau') = (2 + i\pi\tau')/\sqrt{\pi}$, $\tau' = t - 3/2$.

Так же как и в случае с $T = 4$, полином при гауссовой функции легко позволяет найти координаты центров вихрей. Однако здесь вследствие выбора точки разложения они немного смещены вдоль оси k_y

$$k'_{01} = \sqrt{k_r^2 - 4\sqrt{2}/3} \approx 1.84 \approx k_{01},$$

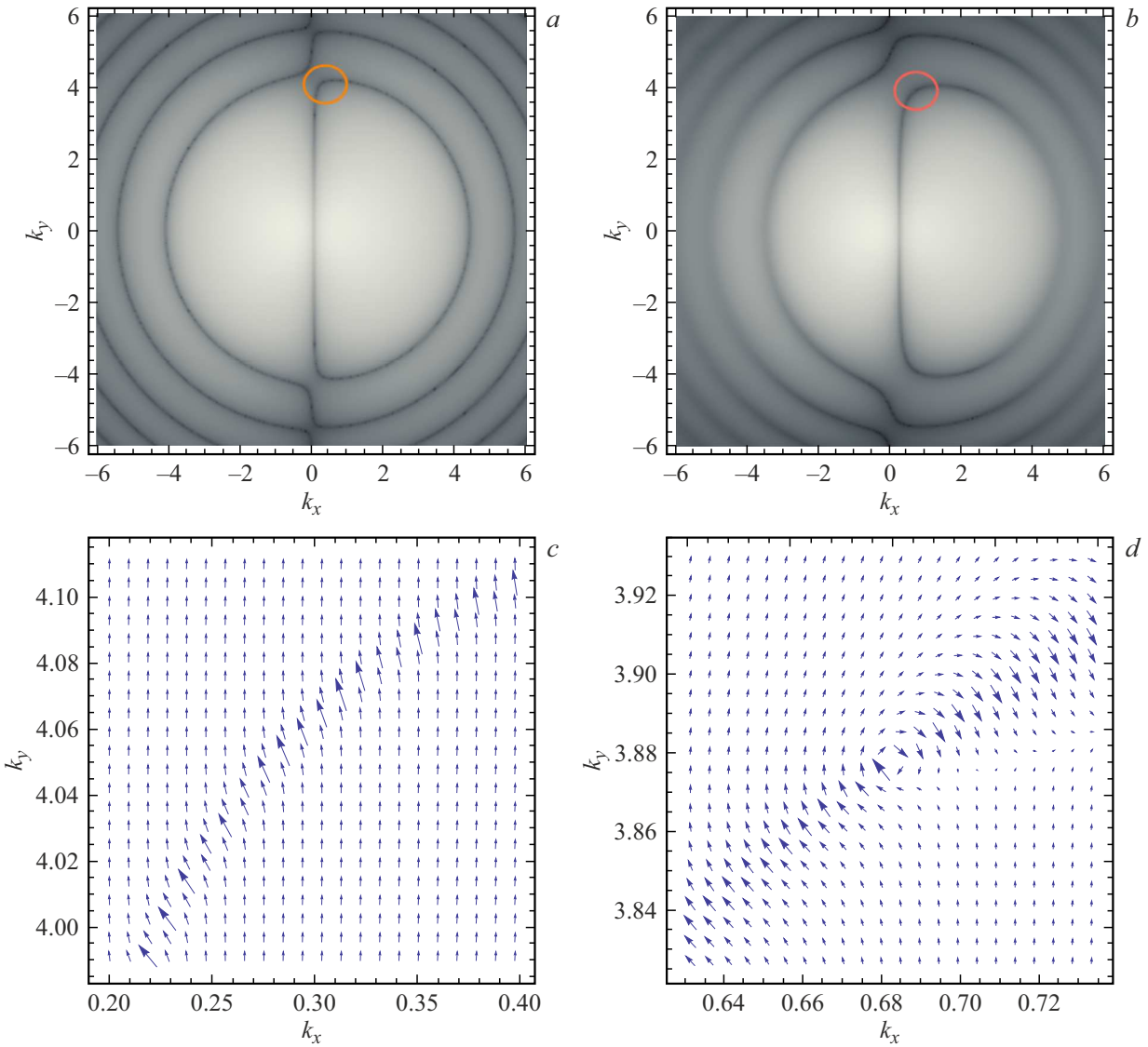

Рис. 7. *a, b* — распределение по импульсам фотоэлектрона $\ln[\rho(k_x, k_y)]$. *c, d* — векторное поле $\mathbf{v}(k_x, k_y, t)$ в области выделенной кружком в *a, b*. *a, c* — $F_0 = 0.5$. *b, d* — $F_0 = 2$. Длительность импульса $T = 1$. Момент времени $t = 2$.

$$k'_{02} = \sqrt{k_r^2 + 4\sqrt{2}/3} \approx 2.68 \approx k_{02}. \qquad (21)$$

Вычисляя наблюдаемые в состоянии (20) (или (19), можно убедиться, что средний импульс фотоэлектрона вдоль направления x не равен нулю, т.е. $\langle k_x \rangle_{3,ap} \neq 0$, $\langle k_y \rangle_{3,ap} = 0$. Что так же, как и в случае, разобранном выше, можно объяснить заданными параметрами импульса.

Выписывать явные выражения для средних $\langle k_x \rangle_{3,ap}$ и $\langle k_{x,y}^2 \rangle_{3,ap}$, вычисленных с помощью (20), не будем из-за их громоздкости. Отметим только то, что эти выражения дают результаты, качественно совпадающие с результатами, вычисленными с помощью „точной“ волновой функции $\tilde{\Psi}_3(k, \varphi_k, t)$ (19).

Применяя преобразование Фурье к (20), получаем соответствующую функцию в координатном представлении:

$$\psi_3(r, \varphi, \tau') = \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \tilde{\Psi}_{3,ap}(k, \varphi_k, \tau') e^{ikr\cos(\varphi_k - \varphi)} \times \frac{k dk d\varphi_k}{(2\pi)^2} = \frac{\tilde{A}}{|a(\tau')|^5} e^{-\frac{r^2}{|a(\tau')|^2} + i\frac{\pi r^2 \tau'}{2|a(\tau')|^2}} \times \left[i a^3(\tau') \left(1 - \frac{F_0^2}{2\pi^3} - i\left(\frac{4}{9\pi^4} + \frac{3}{8\pi^2} \right) F_0^2 \right) r\cos(\varphi) + \frac{F_0}{8\pi^{1/2}} \left(r^4 + c_1(\tau') r^2 + c_2(\tau') \right) \right], \qquad (22)$$

где коэффициенты $c_i(\tau')$ из-за своей громоздкости вынесены в Приложение.

Функция (22) имеет ожидаемую структуру, подобную той, которая имела место при $T = 4$. Однако полином при гауссовой экспоненте, определяющий центры вихрей в обычном пространстве, имеет более сложную конструкцию чем в (13). По этой причине выписывать нули этого полинома не будем.

В следующем разделе с помощью полученных волновых функций (13) и (22) исследуем квантовые вихри в координатном пространстве.

4. Результаты расчетов

Импульсное пространство. Вначале проверим, как изменилась плотность вероятности при разложении волновой функции вблизи центра вихря. Напомним, что везде момент времени t берется таким, что $t > T$.

На рис. 1 для случая $T = 4$ представлены графики распределения по импульсам фотоэлектрона $\rho(\mathbf{k})$ (для более четкого отображения графики строятся для $\ln(\rho)$), построенного с помощью „точной“ волновой функции $\tilde{\Psi}_4(\mathbf{k}, t)$ (5) (рис. 1, *a*) и с помощью ее приближенного выражения $\tilde{\Psi}_{4,ap}(\mathbf{k}, t)$ (11) (рис. 1, *b*).

Разложение (10), примененное к функции $\tilde{\Psi}_4(\mathbf{k}, t)$ (5) привело к потере информации о состояниях фотоэлектрона вдали от центров квантовых вихрей. Однако в непосредственной близости от них эта информация сохранилась, что видно не только по нулям плотности вероятности (стрелки), но и по характеру векторного поля для нормированного „симметричного“ потока (7) (рис. 1, *c, d*)

$$\bar{\mathbf{v}}(\mathbf{k}, t) = \bar{\mathbf{j}}(\mathbf{k}, t)/\rho(\mathbf{k}). \tag{23}$$

Здесь представлено поле $\bar{\mathbf{v}}(\mathbf{k}, t)$, полученное только с помощью приближенной функции (11). Для выбранной области значений k_x, k_x оно ничем не будет отличаться от поля, построенного с использованием „точной“ функции (5) [4].

Заметим, что верхний и нижний вихри абсолютно одинаковы, за исключением того, что направления вращений у них противоположны. Также отметим, что в силу свободного движения фотоэлектрона плотность вероятности $\rho(\mathbf{k})$ записывается без аргумента t. Что касается „симметричного“ потока (7), то в силу его чувствительности к фазе волновой функции [5] временная зависимость сохраняется.

Векторное поле $\bar{\mathbf{v}}(\mathbf{k}, t)$ для случая $T = 3$ представлено на рис. 2. Рассматривается верхняя полуплоскость, где локализована одна пара вихрей.

При использовании „точной“ волновой функции $\tilde{\Psi}_3(\mathbf{k}, t)$ (19) координаты центров вихрей даются формулой (17) или (18) (рис. 2, *a*). Для приближенной функции $\tilde{\Psi}_{3,ap}(\mathbf{k}, t)$ (20) эти координаты немного смещены (21) (рис. 2, *b*).

Плотности $\rho(\mathbf{k})$ построенные с помощью функций (19) и (20) будут отличаться друг от друга также, как это было в случае с $T = 4$ (рис. 1,*a, b*).

Координатное пространство. На рис. 3 для случая $T = 4$ представлены распределение по координатам фотоэлектрона $\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi_4(\mathbf{r}, t)|^2$ (рис. 3, *a*) и поле скоростей фотоэлектрона (рис. 3, *b, c, d*)

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \mathrm{Im}[\psi_4^*(\mathbf{r}, t)\nabla\psi_4(\mathbf{r}, t)]/\rho(\mathbf{r}, t) \tag{24}$$

(термин „поле скоростей“ заимствован из квантовой гидродинамики [12–14]), построенные с помощью найденной волновой функции (13).

Так же, как и в импульсном пространстве, имеются два симметричных вихря с противоположным направлением вращения (рис. 3, *c, d*). Координаты центров вихрей даются формулами (15) и равны $x_0 = 0.064$, $y_0 = \pm 7.049$.

Отметим соответствие найденных вихрей в импульсном и координатном пространствах. Однако реальная структура вихрей в координатном пространстве, соответствующая „точной“ функции (5), будет отличаться от их структуры в импульсном пространстве. Отбрасывание в (5) слагаемого с $\cos^2(\varphi_k)$ и аппроксимация гауссовой функцией рациональных функций от k стирает информацию о поведении фотоэлектрона вне области локализации вихря. В то же время преобразование Фурье затрагивает все возможные значения $\mathbf{k}$.

Теперь проследим временную эволюцию вихрей. На рис. 4 для двух различных моментов времени $t_1 = 5$, $t_2 = 10$ представлено поле $\mathbf{v}(x, y, t_i)$, а также следующие зависимости модуля волновой функции $b_x(t_i) \equiv |\psi(x, y_0, t_i)|$, $b_y(t_i) \equiv |\psi(x_0, y, t_i)|$ от одной из координат (рис. 4, *d* — нормированные на свои максимумы функции $b_{x,y}$).

Видно, что расплывание волнового пакета, отображенное на графиках рис. 4. *c, d*, не изменяет геометрию и масштаба вихря на рис. 4, *a, b*. Вихрь перемещается в пространстве без изменений и координата его центра описывается формулой (15): t_1 — $x_0 = 0.064$, $y_0 = \pm 7.049$; t_2 — $x_0 = 0.064$, $y_0 = \pm 18.446$.

На следующем рис. 5 построено поле скоростей фотоэлектрона $\mathbf{v}(x, y, t)$ при разных значениях напряженности F_0 ионизирующего лазерного импульса. Здесь, учитывая внезапность включения поля (2), мы выходим за пределы малых возмущений [15].

Из графиков видно, что увеличение напряженности поля F_0 приводит к увеличению масштаба вихря. Построенные линии тока отчетливо демонстрируют, что в случае большей напряженности F_0 поле скоростей $\mathbf{v}(x, y, t)$ будет иметь соленоидальную структуру на гораздо больших масштабах, чем в случае малых напряженностей.

На рис. 6 представлены результаты, полученные с помощью волновой функции $\psi_3(x, y, \tau')$ (22). Отчетливо видны нули в распределении по координатам фотоэлектрона (рис. 6, *a*), соответствующие центрам двух пар вихрей. На рис. 6, *b* построено соответствующее поле скоростей $\mathbf{v}(x, y, t)$, закручивающиеся вокруг каждого из этих центров. При этом направление вращения вихрей такое же, как и в импульсном пространстве: пара вихрей в верхней полуплоскости с противоположным направлением вращения и симметричная ей относительно оси x пара в нижней полуплоскости.

Координаты центров вихрей находятся приравниванием нулю действительной и мнимой части полинома в выражении для волновой функции (22). Для случая рассматриваемого на рис. 6 при заданном $t = 4$ имеем: $F_0 = 0.5$: $x_{01} = -0.31$, $y_{01} = \pm 1.63$, $x_{02} = 0.034$, $y_{02} = \pm 7.05$; $F_0 = 5$: $x_{01} = -1.16$, $y_{01} = \pm 4.07$, $x_{02} = 0.3$, $y_{02} = \pm 7.22$.

Так же как и в случае с четным T, увеличение напряженности приводит к увеличению масштаба вихря (рис. 6, *c, d*).

Явная временная зависимость координат центров вихрей, в случае с функцией $\psi_3(x, y, \tau')$ (22), имеет сложный вид и не сводится к простому движению, на подобие (15).

При расплывание волнового пакета, соответствующего $\psi_3(x, y, \tau')$ (22), вихри сохраняются.

Длительность $T = 1$. Как отмечалось ранее [2,3], при длительности импульса равной половине периода, т.е. $T = 1$, для случая $F_0 < 1$ вихри не наблюдаются. С другой стороны, как показано выше, увеличение амплитуды поля F_0, приводит к увеличению масштаба вихря. Поэтому представляет интерес рассмотреть случай с $T = 1$ для разных значений F_0.

На рис. 7 при $T = 1$ и двух разных напряженностей $F_0 = 0.5, 2$ представлены графики плотности вероятности $\rho(\mathbf{k})$ и векторного поля $\overline{\mathbf{v}}(\mathbf{k}, t)$. Видно, что увеличение напряженности поля приводит к образованию вихрей (рис. 7, *d*). Это есть проявление известного факта зависимости вероятности перехода от интенсивности поля и длительности его воздействия на квантовую систему [15].

При $F_0 = 0.5$ длительности импульса $T = 1$ не хватает для перехода электрона из связанного состояния в состояния непрерывного спектра, ответственные за образования вихрей [4]. Увеличение напряженности компенсирует такую малую длительность и вероятность перехода в необходимые состояния возрастает.

Как отмечалось выше, для идентификации вихрей в случае с $T = 3$ (рис. 2) необходимо учитывать третий порядок теории возмущений. Однако, как показывают предварительные вычисления, если взять $F_0 > 1$, то вихри можно увидеть уже и во втором порядке.

5. Заключение

В данной работе для фотоэлектрона, вырванного из двумерного атома водорода предельно коротким лазерным импульсом, была получена волновая функция, описывающая квантовые вихри. Аналитическое выражение этой волновой функции, как в импульсном, так и в координатном представлении имеет простой вид — гауссова функция, умноженная на полином относительно координат фотоэлектрона. Полином несет информацию о центрах квантовых вихрей и отвечает за вихревое поведение поля скоростей фотоэлектрона, а гауссова функция описывает расплывание образованного волнового пакета.

Полученная волновая функция позволила исследовать эволюцию квантового вихря в координатном пространстве: вихрь перемещается в пространстве без искажений со скоростью, определяемой нулем волновой функции в импульсном пространстве, соответствующим центру квантового вихря.

Показано, что масштаб вихря, формально определяемый как область, в которой векторное поле скоростей близко к соленоидальному, может быть изменен варьированием напряженности электрического поля ионизирующего импульса. В частности, малая длительность импульса, при которой вихри не успевают образоваться, может быть скомпенсирована увеличением напряженности поля.

Необходимо отметить, что рассмотренный здесь предел сильного поля $F_0 > 1$ конечно же требует более строго подхода. Более того, используемые изначально приближения по сути свели рассматриваемую задачу о фотоэлектроне к анализу специфического состояния свободной частицы, зависящего от напряженности F_0 как от внешнего параметра.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Приложение

Поправка третьего порядка к волновой функции фотоэлектрона (16):

$$
\begin{aligned}
\delta\tilde{\Psi}_3(k, \varphi_k, t) &= A\,\frac{e^{-iE_k t}}{(k^2+1)^{7/2}} \\
&\times \frac{-iF_0^2 e^{\frac{3}{4}i(k^2+1)} k\cos(\varphi_k)}{((k^2+1)^2-4\pi^2)^2((k^2+1)^4-52\pi^2(k^2+1)^2+576\pi^4)} \\
&\times \Bigg[\cos\Big(\frac{3}{4}(k^2+1)\Big)(16\pi^2-(k^2+1)^2) \\
&\times \Bigg[-4k^2(k^2+1)^6 - i\pi^2(3(k^2+(2+40i))k^2+(3+16i)) \\
&\times (k^2+1)^4 + 24\pi^4(k^2+1)^2(5ik^4-(6-10i)k^2 \\
&+ (12+5i)) - 16i\pi^6(27k^4+(54-4i)k^2+(27-24i)) \\
&- 4k^2\big((k^2+1)^6 - 26\pi^2(k^2+1)^4 + 108\pi^4(k^2+1)^2 \\
&- 80\pi^6\big)\cos(2\varphi_k)\Bigg] - \sin\Big(\frac{3}{4}(k^2+1)\Big)\big((k^2+1)^4 \\
&- 40\pi^2(k^2+1)^2 + 144\pi^4\big)\Bigg[4ik^2(k^2+1)^4 - \pi^2(k^2+1)^2 \\
&\times (3(k^2+(2+8i))k^2+(3+16i)) + 16\pi^4(3k^4 \\
&+ (6+2i)k^2+(3+4i)) + 4ik^2((k^2+1)^4 \\
&- 2\pi^2(k^2+1)^2 - 8\pi^4)\cos(2\varphi_k)\Bigg]\Bigg].
\end{aligned}
\tag{25}
$$

Коэффициенты, входящие в волновую функцию фотоэлектрона в координатном представлении (22):

$$c_1(\tau') = \frac{2k_r^2 a^2(\tau')}{\pi} - \frac{8a(\tau')}{\pi^{1/2}},$$

$$c_2(\tau') = \frac{(36\pi^2 - 36\pi - 23)a^4(\tau')}{9\pi^2} - \frac{4k_r^2 a^3(\tau')}{\pi^{3/2}} + \frac{8a^2(\tau')}{\pi}. \qquad (26)$$

Список литературы

[1] Н.В. Ларионов, Д.Н. Макаров, А.А. Смирновский, С.Ю. Овчинников. ЖЭТФ, **156**, 1035 (2019). DOI: 10.1134/S0044451019120010.

[2] С.Ю. Овчинников, Н.В. Ларионов, А.А. Смирновский, А.А. Шмидт. Научно-технические ведомости Санкт-Петербургского государственного политехнического университета. Физико-математические науки, **10**, 111 (2017). DOI: 10.18721/JPM.10409

[3] Н.В. Ларионов, В.М. Молчановский. Опт. и спектр., **131**, 1449 (2023). DOI: 10.61011/OS.2023.11.56998.5238-23

[4] Н.В. Ларионов. ЖЭТФ, **165**, 317 (2024). DOI: 10.31857/S0044451024030027

[5] R.F. Nalewajski. J. Math. Chem., **53**, 1966 (2015). DOI: 10.1007/s10910-015-0526-2

[6] В.М. Галицкий, Б.М. Карнаков, В.И. Коган. *Задачи по квантовой механике: учебное пособие для вузов* (Наука, Москва, 1992).

[7] М.В. Федоров. ЖЭТФ, **149**, 522 (2016).

[8] S.Y. Ovchinnikov, J. Sternberg, J. Macek, T.-G. Lee, D.R. Schultz. Phys. Rev. Lett., **105**, 203005 (2010). DOI: 10.1103/PhysRevLett.105.203005

[9] F. Navarrete, R. Della Picca, J. Fiol, R.O. Barrachina. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **46**, 115203 (2013). DOI: 10.1088/0953-4075/46/11/115203

[10] S.Y. Ovchinnikov, J.H. Macek, D.R. Schultz. Phys. Rev. A, **90**, 062713 (2014). DOI: 10.1103/PhysRevA.90.062713

[11] В.А. Диткин, А.П. Прудников. *Интегральные преобразования и операционное исчисление* (Физматгиз, Москва, 1961).

[12] E. Madelung. Z. Phys., **40**, 332–326 (1926).

[13] T. Takabayashi. Prog. Theor. Phys., **8**, 143 (1952).

[14] A. Visinescu, D. Grecu, R. Fedele, S. De Nicola. Theor. Math. Phys., **160**, 1066–1074 (2009). DOI: 10.1007/s11232-009-0098-z

[15] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика (нерелятивистская теория)* (Физматлит, Москва, 2004).