

DOI: 10.18721/JPM.10409

УДК 530.145

**ОБРАЗОВАНИЕ КВАНТОВЫХ ВИХРЕЙ ПРИ ИОНИЗАЦИИ АТОМА
ИМПУЛЬСОМ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОГО ПОЛЯ****С.Ю. Овчинников¹, Н.В. Ларионов²,
А.А. Смирновский^{1,2}, А.А. Шмидт¹**¹Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Российская Федерация;²Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого,
Санкт-Петербург, Российская Федерация

Проведено численное и аналитическое исследование пространственно-временной эволюции квантовой системы, образованной в результате взаимодействия электромагнитного поля с водородоподобным атомом в двумерном приближении. Характерной особенностью полученного решения является наличие особых точек (квантовых вихрей), анализ которых проведен путем введения плотности вероятности и плотности потока вероятности. Образующиеся в процессе ионизации вихри могут распространяться на макроскопические расстояния и проявляться в виде запрещенных областей в спектре волновых чисел. Для численного моделирования такой задачи используется специальное преобразование переменных – метод расширяющегося пространства. Проведен численный анализ зависимости количества квантовых вихрей и их положений от параметров электромагнитного импульса. Численное решение сравнивается с аналитическим, полученным в рамках борновского приближения.

Ключевые слова: квантовый вихрь; ионизация атома; уравнение Шрёдингера; численное моделирование; борновское приближение

Ссылка при цитировании: Овчинников С.Ю., Ларионов Н.В., Смирновский А.А., Шмидт А.А. Образование квантовых вихрей при ионизации атома импульсом электромагнитного поля // Научно-технические ведомости СПбГПУ. Физико-математические науки. 2017. Т. 10. № 4. С. 111–123. DOI: 10.18721/JPM.10409

**FORMATION OF QUANTUM VORTICES UPON ATOM IONIZATION
BY A PULSE OF ELECTROMAGNETIC WAVES****S.Yu. Ovchinnikov¹, N.V. Larionov²,
A.A. Smirnovsky^{1,2}, A.A. Schmidt¹**¹Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Russian Federation;²Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation

A numerical and analytical study of the space-time evolution of a quantum system formed as a result of the interaction of an electromagnetic pulse with a hydrogen-like atom in the two-dimensional approximation has been carried out. A characteristic

feature of the obtained solution is the presence of singular points, the analysis of them was carried out through a probability density and a probability flux density. The vortices formed during the ionization can propagate to macroscopic distances and manifest themselves as forbidden domains in the spectrum of wave numbers. For numerical simulation of such a problem, a special transformation of variables (method of expanding space) was used. The numerical analysis of the quantum vortices number and its position was performed depending on electromagnetic field parameters. The numerical solution was compared with the analytical one obtained in the framework of the Born approximation.

Key words: quantum vortex; atom ionization; Schrödinger equation; numerical simulation; Born approximation

Citation: S.Yu. Ovchinnikov, N.V. Larionov, A.A. Smirnovsky, A.A. Schmidt, Formation of quantum vortices upon atom ionization by a pulse of electromagnetic waves, St. Petersburg Polytechnical State University Journal. Physics and Mathematics. 10 (4) (2017) 111–123. DOI: 10.18721/JPM.10409

Введение

Многочисленные исследования указывают на наличие в квантовых системах образований, которые могут трактоваться как вихри [1 – 6]. Недавно была обнаружена вихреподобная структура в конденсате Бозе – Эйнштейна, возникающая при воздействии на него лазерным оптическим излучением [1]. Эта структура аналогична хорошо известной в гидродинамике вихревой дорожке Кармана [7]. Есть основания считать, что при определенных воздействиях аналогичные структуры могут появляться и в простых одноэлектронных квантовых системах. В частности, в работах [5, 6] отмечается возникновение в распределениях плотности вероятности вихреподобных структур, которые соответствуют изолированным нулям волновой функции.

Вихревые структуры могут наблюдаться и в экспериментах как локальные (запрещенные) области, в которых электроны не могут быть обнаружены. Знание о распределении этих вихрей и их траекторий в пространстве координат и импульсов представляет несомненный интерес при исследовании фундаментальных проблем эволюции квантовых систем, а также для решения прикладных задач.

Анализ возникновения вихрей и их эволюции удобно проводить на примере хорошо известной задачи об ионизации атома водорода при воздействии на него кратковременного импульса лазерного излучения. Существующие приближенные подходы к решению таких задач, (см., например, ра-

боты [10, 11]), как правило, не позволяют проводить анализ возникающих вихревых структур и особенностей их эволюции. В решениях, получаемых в рамках квазиклассических подходов, вихревые структуры отсутствуют, поскольку их появление определяется сингулярностью квантового давления, которое отбрасывается в силу малости величины \hbar^2 .

Тем не менее, эта информация может быть получена путем решения нестационарного уравнения Шрёдингера [4]. С другой стороны, наглядная интерпретация решения задачи об эволюции квантовых вихрей обеспечивается в рамках гидродинамического представления на основе уравнений Маделунга [8]. Еще одним положительным моментом такого подхода является возможность введения в рассмотрение квантового давления [9], которое, как отмечено выше, определяет траектории вихрей и может служить индикатором эволюции всей квантовой системы. Однако сингулярности, возникающие из-за стремления к нулю плотности вероятности, приводят к проблемам использования уравнений Маделунга в расчетах эволюции этих вихреподобных структур. Природа последних сходна с природой потенциальных вихрей в теории движения невязкой среды [7].

С другой стороны, решение нестационарного уравнения Шрёдингера также сопряжено с определенными трудностями, которые связаны с наличием у волновой функции ионизированного электрона осциллирующего множителя вида

$$\exp\left(i \frac{m r^2}{2\hbar t}\right)$$

(m, r – масса и координата электрона, t – время), приводящего к расходимости при больших значениях r и t .

Одним из способов устранения этой проблемы является удаление сильно осциллирующих фаз при помощи перехода к расширяющемуся пространству и масштабированию времени [12, 13]. Отметим, что возникающие вихревые структуры могут распространяться в неизменном виде также и на макроскопические расстояния [4], где возможно их детектировать в эксперименте.

В настоящей работе предлагается гибридный подход к анализу динамики квантовых систем, который состоит из двух этапов:

решение нестационарного уравнения Шрёдингера в расширяющемся пространстве, позволяющее получить квантовые вихревые структуры;

гидродинамическая интерпретация с переходом к рассмотрению распределений таких полевых величин, как плотность вероятности, поток плотности вероятности и квантовое давление.

На основе этого гибридного подхода рассматривается ионизация двумерного водородоподобного атома коротким импульсом электромагнитного поля.

Целью исследования является анализ возникновения и эволюции квантовых вихрей. В работе также проводится сравнение данных численного моделирования с аналитическими результатами, полученными в борновском приближении.

Полученная информация может быть полезной при постановке соответствующих экспериментальных исследований.

Постановка задачи

В настоящей работе рассматривается пространственно-временная эволюция квантовой системы, образованной в результате взаимодействия электрического поля с водородоподобным атомом в двумерном приближении. Допущение о двумерности справедливо, в частности, если движе-

ние электрона в атоме некоторым образом ограничено двумя степенями свободы, например, как при движении объектов в полупроводниковой квантовой яме [14, 15].

Кроме того, такая упрощенная постановка задачи хорошо подходит для апробации численного алгоритма и выявления закономерностей возникновения вихревых структур, поскольку в двумерном случае их идентификация не представляет сложности. Отметим, что эволюция квантовой системы в двумерном приближении отражает эволюцию для трехмерного атома водорода, если в качестве заряда ядра брать $1/2$ от заряда электрона.

Гамильтониан рассматриваемой системы имеет следующий вид:

$$\begin{cases} \hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \\ \hat{H}_0 = \frac{1}{2} \hat{p}^2 + U(\mathbf{r}) = \\ = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) - \frac{1}{2\rho}, \\ \hat{V} = -\hat{\mathbf{d}}\vec{E}(t) = -\rho \cos(\varphi) \vec{E}(t), \end{cases} \quad (1)$$

где \hat{H}_0 – гамильтониан свободного атома; ρ, φ – полярные координаты; \hat{V} – оператор взаимодействия, в котором $\hat{\mathbf{d}}$ – оператор дипольного момента атома, $\vec{E}(t) = \mathbf{e}_x \vec{E}(t)$ – внешнее переменное электрическое поле, поляризованное вдоль оси x .

Здесь мы сразу записали Гамильтониан в атомных единицах $\hbar = 1, m_e = 1, e = 1$, а также (как отмечено выше) выбрали потенциал

$$U = U_C / 2,$$

где $U_C = -1/\rho$ – обычный кулоновский потенциал.

Численный метод

Для описания эволюции рассматриваемой квантовой системы использовался подход, основанный на численном решении нестационарного уравнения Шрёдингера. Используемая расчетная программа состоит из нескольких модулей.

Первый предназначен для численного решения уравнения Шрёдингера в координатном и импульсном представлениях во

время действия электрического поля. При этом для продвижения по времени используется стандартный алгоритм, основанный на вычислении пропагатора волновой функции (метод расщепления оператора, см., например, работу [16]):

$$\Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) = \exp(-i\hat{H}\Delta t)\Psi(\mathbf{r}, t). \quad (2)$$

Данный пропагатор делится на три составляющих, зависящих только от оператора координаты и только от оператора импульса, следующим образом:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}, t + \Delta t) = & \exp\left(-i\frac{\hat{p}^2}{2}\frac{\Delta t}{2}\right) \times \\ & \times \exp\left[-i\left(U(\mathbf{r}) + \hat{V}\left(t + \frac{\Delta t}{2}\right)\right)\Delta t\right] \times \\ & \times \exp\left(-i\frac{\hat{p}^2}{2}\frac{\Delta t}{2}\right)\Psi(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (3)$$

Эволюция волновой функции на полушагах $\Delta t/2$ осуществляется в импульсном пространстве, для чего при помощи быстрого преобразования Фурье происходит преобразование волновой функции в импульсное представление. Центральная часть пропагатора вычисляется в координатном представлении на шаг Δt , для чего осуществляется обратное преобразование Фурье.

Второй программный модуль предназначен для преобразования волновой функции, полученной после воздействия внешнего импульса, путем перехода к так называемому расширяющемуся (масштабированному) пространству, при помощи преобразования переменных Соловьёва и Виницкого [17]. Подробно данный метод описан в статье [13]. Отметим, что при указанном преобразовании момент времени $t \rightarrow \infty$ соответствует масштабированному $\tau \rightarrow -0$, при этом кулоновский потенциал обращается в δ -функцию. Это приводит к невозможности численно рассчитать уравнение вплоть до $\tau=0$ и к возрастанию погрешностей расчета вблизи начала координат.

Также стоит отметить, что при $\tau \rightarrow -0$ квадрат модуля преобразованной волновой функции представляет собой распределение по волновым числам, т. е. спектр ио-

низированных электронов (все связанные состояния дискретного спектра коллапсируют). Таким образом можно определить энергетический спектр ионизированных электронов.

Для уменьшения влияния дискретного спектра на решение при расчете в расширяющемся пространстве, а также для сравнения с аналитическими данными, перед преобразованием волновой функции в масштабированное пространство из нее вычиталось несколько первых дискретных уровней. Поскольку в задачах ионизации основной интерес представляет энергетический спектр ионизированных электронов, в представляемых ниже расчетах эволюция квантовой системы проводилась до момента времени $\tau = 0,001$ (в атомных единицах); при этом было установлено, что решение уже практически перестает зависеть от масштабированного времени τ .

Результаты расчетов

Численное моделирование эволюции квантовой системы было проведено для следующей временной зависимости импульса электрического поля:

$$\tilde{E}(t) = \begin{cases} E_0 \cos(\omega t), & 0 < t < T, \\ 0, & t > T. \end{cases} \quad (4)$$

Амплитуда поля бралась равной $E_0 = 0,5$, частота $\omega = \pi$, длительность импульса T варьировалась в диапазоне целых чисел от 1 до 9. Таким образом, импульс представляет собой четное или нечетное число полупериодов колебаний.

В начальный момент времени предполагается, что атом находится в основном состоянии с волновой функцией

$$\Psi_{1,0}^{(0)}(\rho) = \sqrt{2/\pi} \exp(-\rho).$$

Численное решение нестационарного уравнения Шрёдингера осуществлялось при следующих параметрах: расчетная область в координатном пространстве представляет собой квадрат размером 60×60 (а.е.)², покрытый равномерной структурированной сеткой размером 2048×2048 ячеек; шаг по времени равен $\Delta t = 10^{-3}$ а.е. Такие параметры выбирались исходя из предварительного исследования точности получаемого

решения и сеточной сходимости, и обеспечивают приемлемое качество разрешения волновой функции.

Рассмотрим сначала вариант с $T = 4$. На рис. 1, *a* приведено распределение модуля волновой функции

$$|\Psi(x, y, T)| \equiv |\Psi|$$

(шкала логарифмическая) в момент времени окончания действия импульса. Локальные области низких значений $|\Psi|$ (белые «пятна» на рис. 1, *a*) представляют собой вихревые структуры.

На рис. 1, *b* показан увеличенный фрагмент поля $|\Psi|$ с векторами плотности потока вероятности

$$\mathbf{J} = 1 / 2i(\Psi^* \nabla \Psi - \Psi \nabla \Psi^*)$$

(на указанном рисунке векторы прорезаны в два раза и их длина одинакова для большей наглядности). Видно, что в указанной области наблюдается два вихря, вращающихся в противоположных направлениях. Отметим также наличие вихревой структуры, располагающейся дальше от центра, но хуже разрешаемой из-за крайне малых значений $|\Psi|$ в этой области. Возможно наличие и других вихревых структур, которые не разрешаются на данной сетке. Все эти вихревые структуры с течением времени могут рождаться, перемещаться и аннигилировать друг с другом. На рис. 1, *b* как

раз показан момент возникновения пары вихрей.

Поскольку основной интерес в данной работе представляют те вихревые структуры, которые удаляются от центра системы «на бесконечность» и могут проявляться для непрерывного спектра, в дальнейшем будем рассматривать распределения по импульсам на больших временах, которые получаются при использовании метода расширяющегося пространства при $\tau \rightarrow -0$.

На рис. 2, *a* представлено распределение модуля волновой функции в импульсном представлении:

$$|\Psi(k_x, k_y, t \rightarrow \infty)| \equiv |b|$$

(используется логарифмическая шкала) на больших временах. Здесь отчетливо видно два вихря, расположенных на оси k_y симметрично относительно начала координат; увеличенный фрагмент поля с векторами скорости показан на рис. 2, *b*. Таким образом, в результате ионизации атома импульсом электромагнитного поля возникает пара симметричных вихрей. Отметим также наличие на рис. 2, *b* седловой точки при $k_x = -0,4, k_y = 2,2$.

Рассмотрим теперь картины распределения по волновым числам при малых значениях T . На рис. 3 представлено поле $|b|$ для $T = 1$ и 2. Видно, что при $T = 1$ вихре-

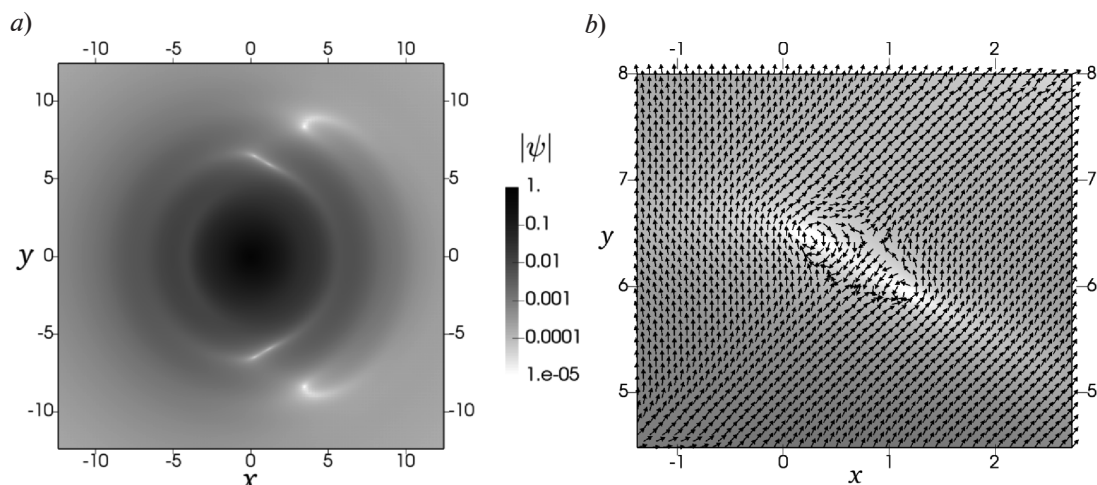


Рис. 1. Расчетное распределение модуля волновой функции $|\Psi(x, y, T)|$ в момент окончания действия импульса (*a*) и его увеличенный фрагмент с векторами плотности потока вероятности вблизи вихревой структуры (*b*); показан момент возникновения пары вихрей

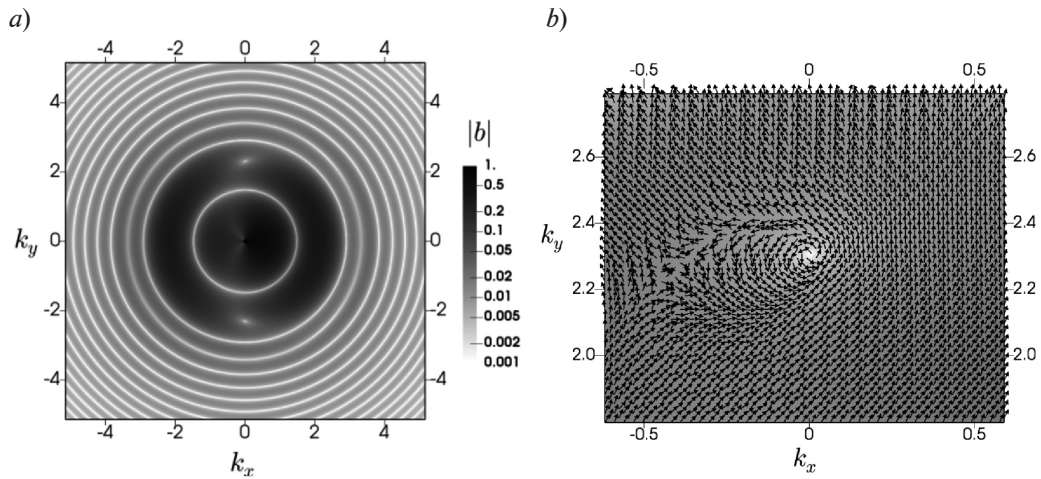


Рис. 2. Распределение модуля волновой функции в импульсном представлении $|\Psi(k_x, k_y, t \rightarrow \infty)| \equiv |b|$ на больших временах (a) и векторы плотности потока вероятности вблизи квантового вихря (b); $T = 4$

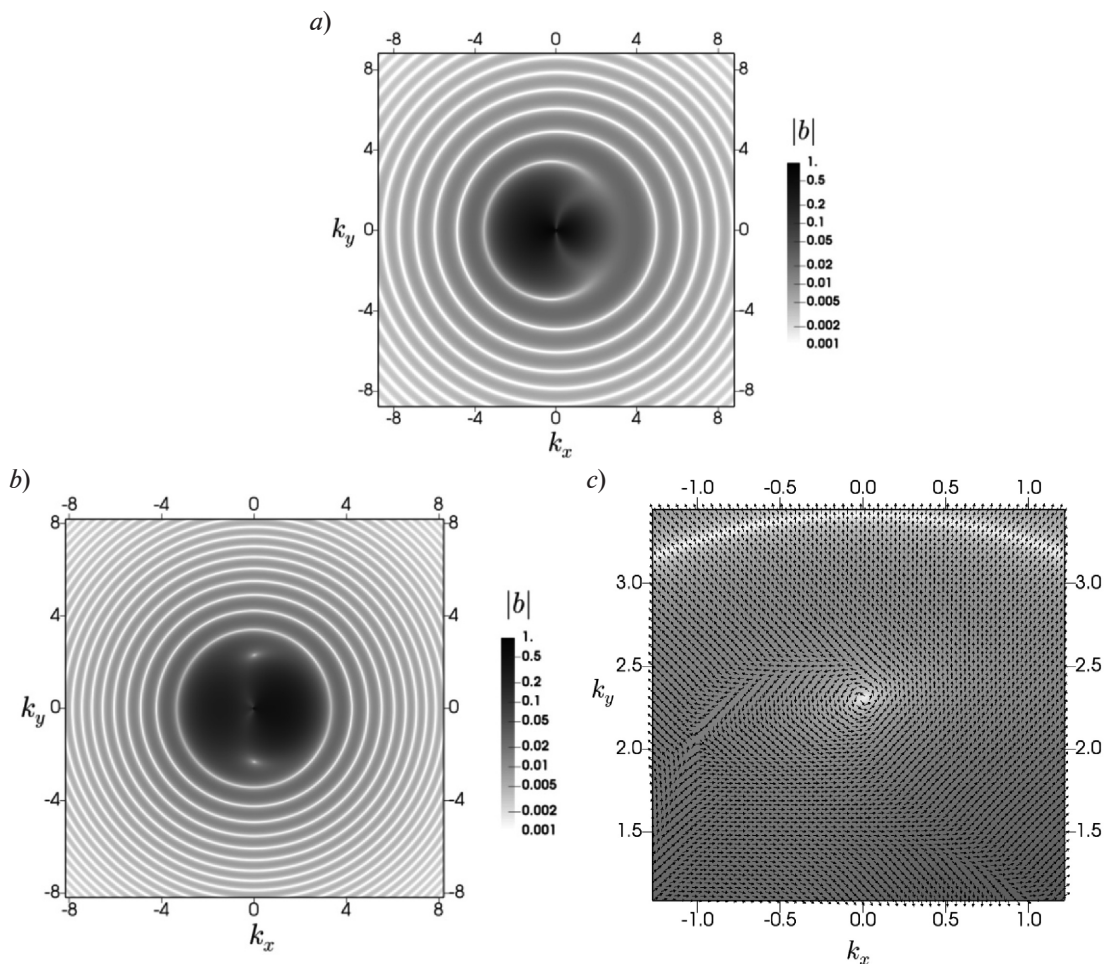


Рис. 3. Зависимости от длительности импульса: распределение $|b|$ при $T = 1$, квантовые вихри не наблюдаются (a); распределение $|b|$ (b) и его увеличенный фрагмент с векторами плотности потока вероятности вблизи квантового вихря (c) при $T = 2$ (b, c)

вые структуры отсутствуют (возможно, из-за недостаточного сеточного разрешения), а распределение $|b|$ оказывается сильно несимметричным при малых значениях k_x (см. рис. 3, *a*).

Для увеличенной длительности импульса ($T = 2$) уже явно возникает пара симметрично расположенных вихрей (см. рис. 3, *b*), причем их положение с большой степенью точности соответствует положению вихрей в случае с $T = 4$. Увеличенный фрагмент поля с векторами скорости вблизи вихря показан на рис. 3, *c*. Видно, что вихрь с хорошей точностью прописывается на используемой сетке.

Оказывается, что в случае четного числа полупериодов импульсного воздействия (при $T = 2, 4, 6, 8$) пара возникающих вихрей расположена в одной и той же области с координатами $k_x \approx 0$, $k_y \approx \pm 2,3$. При этом других отчетливо различимых вихрей в спектре ионизированного электрона не наблюдается.

Противоположная ситуация имеет место при нечетном числе полупериодов импульсного воздействия (при $T = 3, 5, 7, 9$). Здесь положение четко различимого вихря меняется при изменении T . В качестве иллюстрации на рис. 4 представлены распределение $|b|$ и векторы скорости при $T = 3$. Видно, что образуется несколько вихревых структур, но наилучшим образом разреша-

ется только та пара, которая расположена ближе к началу координат. Отметим, что координаты положения вихря при увеличении T приближаются к началу координат.

На рис. 5 приведены графики распределений

$$|\Psi(k_x, k_y = 0, t \rightarrow \infty)| \equiv |b(k_x)|$$

для нескольких значений T . Отметим, что при увеличении T начинает формироваться узкий пик, соответствующий резонансной ионизации при $T \rightarrow \infty$, центрированный на значении

$$k_x = \pm\sqrt{2(\omega + E_1)} \approx \pm 2,3,$$

где $E_1 = -0,5$ – энергия основного состояния атома водорода.

В распределении $|b(k_x)|$ относительно начала координат, при нечетных T наблюдается явная несимметричность пиков при $k_x \approx \pm 2,3$, тогда как при $T = 8$ высота этих пиков почти одинакова. Здесь также следует отметить, что в связи с особенностями метода расчета в расширяющемся пространстве (в частности, из-за стремления кулоновского потенциала к δ -функции) численный расчет дает осцилляции и резкое возрастание величины $|b(k_x)|$ при $k_x \rightarrow 0$.

Численный расчет на основе нестационарного уравнения Шрёдингера включает в себя весь спектр процессов в эволюции ис-

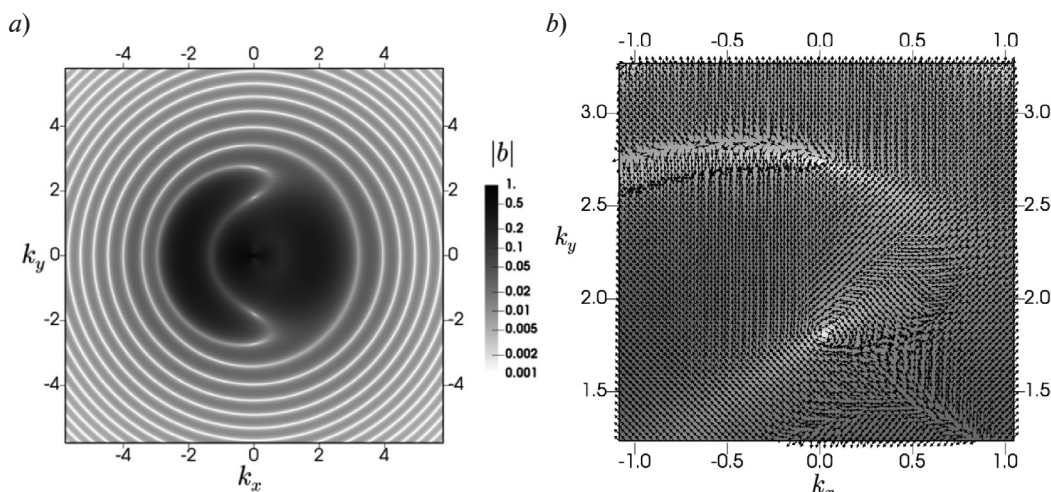


Рис. 4. Распределение $|b|$ (*a*) и фрагмент с векторами плотности потока вероятности вблизи двух вихрей (*b*) в импульсном пространстве при нечетном числе полупериодов действия импульса ($T = 3$)

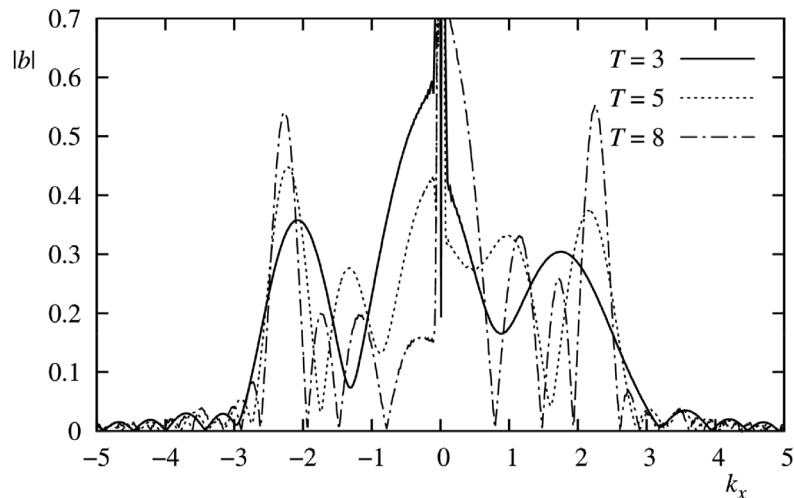


Рис. 5. Зависимость распределения $|b(k_x)|$ от длительности импульса

следуемой квантовой системы, но не всегда позволяет выявить физические механизмы рассматриваемых явлений. В этой связи особый интерес представляет отыскание приближенных аналитических решений задачи, позволяющих получить наглядную физическую интерпретацию процесса. В данной работе оценивается применимость борновского приближения к решению рассматриваемой задачи.

Решение нестационарного уравнения Шрёдингера представим в виде разложения по собственным волновым функциям $\Psi^{(0)}$ невозмущенного гамильтониана [14]:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{n,m} a_{n,m}(t) e^{-iE_n t} \Psi_{n,m}^{(0)}(\mathbf{r}) + \sum_m \int_0^\infty b_{E,m}(t) e^{-iEt} \Psi_{E,m}^{(0)}(\mathbf{r}) dE, \quad (5)$$

где $\Psi_{n,m}^{(0)}$ – волновая функция дискретного спектра; $n = 1, 2, \dots$ – главное квантовое число; $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm(n-1)$ – магнитное квантовое число; энергия дискретного спектра:

$$E_n = -\frac{1}{8(n-1/2)^2};$$

$\Psi_{E,m}^{(0)}$ – волновая функция непрерывного спектра (кулоновская волна) и соответствующая энергия

$$E = k^2 / 2 = E_x + E_y = (k_x^2 + k_y^2) / 2, \\ m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Разлагая амплитуды в ряд по степеням малости приложенного возмущения и оставляя только члены до первого порядка включительно, получаем:

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi^{(0)}(\mathbf{r}, t) + \Psi_d^{(1)}(\mathbf{r}, t) + \Psi_c^{(1)}(\mathbf{r}, t) = \\ = e^{-iE_1 t} \Psi_{1,0}^{(0)}(\mathbf{r}) + \sum_{n,m} a_{n,m;1,0}^{(1)}(t) e^{-iE_n t} \Psi_{n,m}^{(0)}(\mathbf{r}) + \\ + \sum_m \int_0^\infty b_{E,m;1,0}^{(1)}(t) e^{-iEt} \Psi_{E,m}^{(0)}(\mathbf{r}) dE, \quad (6)$$

где предполагается, что в начальный момент времени атом находится в основном состоянии (отмечено нижними дополнительными индексами (1,0)); верхние индексы у волновых функций и амплитуд означают порядок малости. Функция $\Psi_d^{(1)}$ соответствует переходу в возбужденное состояние дискретного спектра (второе слагаемое в формуле (6)), а $\Psi_c^{(1)}$ – в возбужденное состояние непрерывного спектра (последнее слагаемое в (6)).

Нас будут интересовать распределения по импульсам $b(k_x, t)$ и $b(k_y, t)$ ионизированного электрона. Для их нахождения запишем $\Psi_c^{(1)}$ в k_x - и k_y -представлениях, при этом заменим кулоновскую волну, стоящую под интегралом, на цилиндрическую волну

$$\tilde{\Psi}_{E,m}^{(0)}(\mathbf{r}) = J_{|m|}(\sqrt{2E}\rho) \exp(im\phi) / \sqrt{2\pi}$$

(волновая функция свободного электрона).

Получим следующие распределения:

$$\left\{ \begin{aligned} b^{(1)}(k_x, t) &= e^{iE_x t} \langle k_x | \Psi_c^{(1)}(t) \rangle = \\ &= \sum_m [i \cdot \text{sgn}(k_x)]^{|m|} b_{E_x, m, 1, 0}^{(1)}(t), \\ b^{(1)}(k_y, t) &= e^{iE_y t} \langle k_y | \Psi_c^{(1)}(t) \rangle = \\ &= \sum_m [\pm \text{sgn}(k_y)]^{|m|} b_{E_y, m, 1, 0}^{(1)}(t), \end{aligned} \right. \quad (7)$$

где для $b^{(1)}(k_y, t)$ знак плюс относится к случаю $m > 0$, знак минус — к случаю $m < 0$. Вектор $|k_x\rangle$ соответствует состоянию частицы с определенным импульсом и в координатном представлении имеет вид

$$\langle x | k_x \rangle \equiv \varphi_{k_x}(x) = \exp(ik_x x) / \sqrt{2\pi}$$

(аналогично для вектора $|k_y\rangle$).

При получении распределений (7) были использованы следующие свойства и представления функций Бесселя:

$$\int_0^\infty J_m(k\rho) J_m(k'\rho) \rho d\rho = \delta(k - k') / k,$$

$$J_m(x) = (i^m / 2\pi) \int_0^{2\pi} \exp(-ix \cos \varphi + im\varphi) d\varphi, \quad (8)$$

$$J_m(x) = (1 / 2\pi) \int_0^{2\pi} \exp(-ix \sin \varphi + im\varphi) d\varphi.$$

Для нахождения $b_{E, m}^{(1)}(t)$ подставим разложение (6) в уравнение Шрёдингера; по-

лучим следующее выражение:

$$\begin{aligned} b_{E, m, 1, 0}^{(1)}(t) &= -i \int_0^t e^{i\omega_{E1} t'} \langle \tilde{\Psi}_{E, m}^{(0)} | \hat{V} | \Psi_{1, 0}^{(0)} \rangle dt' = \\ &= i(\delta_{m, 1} + \delta_{m, -1}) \cdot \frac{3\sqrt{2E}}{(1 + 2E)^{5/2}} \int_0^t \tilde{E}(t') e^{i\omega_{E1} t'} dt', \end{aligned} \quad (9)$$

где $\omega_{E1} = E - E_1$.

В итоге $b^{(1)}(k_x, t)$ и $b^{(1)}(k_y, t)$ примут следующий, окончательный вид:

$$\left\{ \begin{aligned} b^{(1)}(k_x, t) &= \text{sgn}(k_x) \frac{6|k_x|}{(1 + k_x^2)^{5/2}} \times \\ &\times \int_0^t \tilde{E}(t') e^{i\omega_{E_x 1} t'} dt', \\ b^{(1)}(k_y, t) &= 0. \end{aligned} \right. \quad (10)$$

На рис. 6, для импульса $\tilde{E}(t)$, заданного формулой (4), аналитический результат (10) сравнивается с результатом численного моделирования.

Отметим некоторые наблюдаемые особенности. В области малых волновых чисел ($k_x \approx 0$) численный результат и аналитическое решение сильно расходятся. Это связано с несколькими факторами:

большая «погрешность» численного расчета в этой области. Она вызвана вышеупомянутой спецификой расчета в мас-

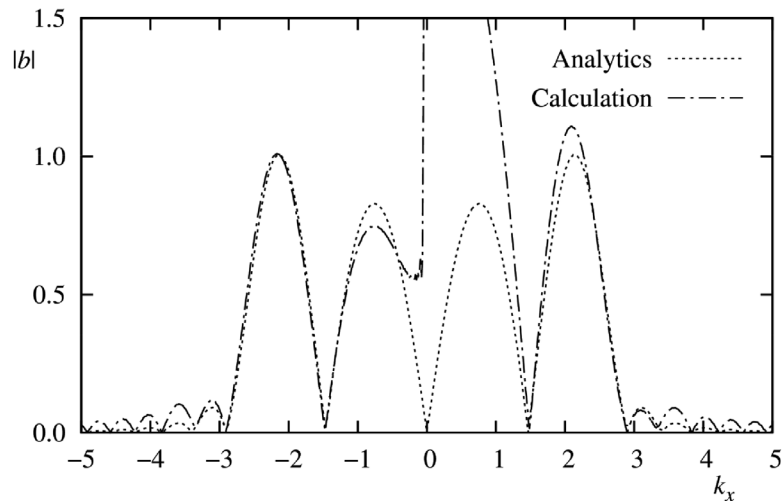


Рис. 6. Сравнение результатов аналитического расчета и численного решения для $|b(k_x)|$ при $T = 4$ (распределения нормированы на левый резонансный пик)

штабированном пространстве, что не позволяет говорить о результате, полученном для малых k_x , как близком к истинному;

известные ограничения борновского приближения, подразумевающего в нашем случае замену кулоновской волны в (5) на цилиндрическую волну.

Тем не менее, в области резонансных значений

$$k_x \approx \pm \sqrt{2(\omega + E_1)}$$

согласие численного расчета и аналитического решения довольно хорошее, хотя борновское приближение и не описывает асимметрию распределения относительно $k_x = 0$. Наличие такой асимметрии вполне естественно (см. также рис. 1), поскольку эволюция волновой функции электрона, изначально находящегося в связанном состоянии, никак не может иметь такую же симметрию, несмотря на «симметричное» действие импульса электрического поля во времени.

Образование вихревых структур, которые можно было бы идентифицировать при анализе распределения $|b(k_y, T)|$, не описывается борновским приближением, так как $|b^{(1)}(k_y, T)| = 0$ (см. формулу (10)).

Таким образом, естественно предположить, что второй порядок теории возмущений, содержащий переходы через промежуточные состояния, позволит выявить вихри, которые, скорее всего, связаны с деструктивной интерференцией таких переходов.

Заключение

Проведены численные исследования пространственно-временной эволюции квантовой системы, образованной в результате взаимодействия импульса электромагнитного поля с водородоподобным атомом в двумерном дипольном приближении. На основе численного решения нестационарного уравнения Шрёдингера показано, что в процессе воздействия на систему возникают особые точки (изолированные нули волновой функции), которые в гидродинамической интерпретации могут трактоваться как квантовые вихри, идентифицированные нами при анализе пространственного

распределения электронной плотности и плотности потока вероятности для ионизированного электрона.

Путем преобразования переменных и перехода к эволюции в расширяющемся пространстве проанализирована электронная плотность в сопряженном импульсном пространстве, где также возникают вихревые структуры.

Анализ влияния длительности T действия электромагнитного импульса показал, что при $T = 1$ вихревых структур не возникает. При четном количестве полупериодов ($T = 2, 4, 6, 8$) явно идентифицируется один вихрь, положение которого в импульсном пространстве (для случая ионизированного электрона) не зависит от T . При нечетном количестве полупериодов ($T = 3, 5, 7, 9$) центр вихря сдвигается к началу координат с увеличением T и образуются новые вихревые структуры.

Также установлено, что при увеличении длительности импульса T , в распределении $|b(k_x)|$ начинает проявляться узкий резонанс, соответствующий случаю ионизации бесконечно длительным импульсом монохроматического излучения.

Для оценки применимости теории возмущений к рассматриваемой задаче, в борновском приближении были получены аналитические выражения для $b^{(1)}(k_x, t)$ и $b^{(1)}(k_y, t)$ (см. формулу (10)). Решение $b^{(1)}(k_x, T)$ хорошо согласуется с результатом численного расчета, хотя и не описывает естественную асимметрию распределения относительно $k_x = 0$, обусловленную начальным связанным состоянием электрона. В области $k_x \approx 0$ наблюдается сильное расхождение $b^{(1)}(k_x, T)$ с результатом численного расчета, что обусловлено как численными погрешностями в этой области, так и используемыми приближениями при выводе аналитического решения. Для анализа квантовых вихрей необходимо было проанализировать распределение $b^{(1)}(k_y, T)$, которое для данной геометрии ионизации не чувствительно к приложенному возмущению и равно нулю. Этот результат указывает на то, что квантовые вихри образуются посредством

деструктивной интерференции переходов через различные промежуточные состояния дискретного или непрерывного спектров, которые могут быть учтены во втором порядке теории возмущений. Вторым порядком также позволит описать несимметричность распределения $b^{(1)}(k_x, T)$ относительно $k_x = 0$ и, возможно, объяснит зависимость вихрей от длительности импульса.

Более детальное исследование этого вопроса, которое предполагается провести посредством анализа рядов теории возму-

щений, будет изложено нами в отдельной статье.

Благодарности

Авторы выражают искреннюю признательность доцентам кафедры теоретической физики Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого С.В. Божокину и К.Ю. Платонову за ценные замечания и обсуждение полученных авторами результатов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ, грант №15-02-07794.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wilson R.M. An obstacle dragged through a Bose–Einstein condensate can leave a well-known pattern of vortices in its wake // *Physics Today*. 2017. Vol. 70. No. 1. P. 19. <http://dx.doi.org/10.1063/PT.3.3416>
2. Krstulovic G., Brachet N., Tirapegui E. Radiation and vortex dynamics in the nonlinear Schrödinger equation // *Phys. Rev. E*. 2008. Vol. 78. No. 2. P. 026601.
3. Ngoko Djikap J.M., Meremianin A.V., Manakov N.L., Hu S.X., Madsen L.B., Starace A.F. Multistart spiral electron vortices in ionization by circularly polarized UV pulses // *Phys. Rev. A*. 2016. Vol. 94. No. 1. P. 013408.
4. Ovchinnikov S.Y., Macek J.H., Schultz D.R. Hydrodynamical interpretation of angular momentum and energy transfer in atomic processes // *Phys. Rev. A*. 2014. Vol. 90. No. 6. P. 062713.
5. Ngoko Djikap J.M., Hu S.X., Madsen L.B., Manakov N.L., Meremianin A.V., Starace A.F. Electron vortices in photoionization by circularly polarized attosecond pulses // *Phys. Rev. Lett.* 2015. Vol. 115. No. 11. P. 113004.
6. Schmidt L.Ph.H., Goihl C., Metz D., Schmidt-Böcking H., Dörner R., Ovchinnikov S.Yu., Macek J.H., Schultz D.R. Vortices associated with the wavefunction of a single electron emitted in slow ion-atom collisions // *Phys. Rev. Lett.* 2014. Vol. 112. No. 8. P. 083201.
7. Лойцянский Л.Г. Механика жидкости и газа. М.: Дрофа, 2003. 600 с.
8. Madelung E. Quantentheorie in hydrodynamischer Form // *Z. Physik*. 1926. Vol. 40. Pp. 332–326.
9. Takabayashi T. On the formulation of quantum mechanics associated with classical pictures // *Prog. Theor. Phys.* 1952. Vol. 8. No. 2. Pp. 143–182.
10. Федоров М.В. Работа Л.В. Келдыша «Ионизация в поле сильной электромагнитной волны» и современная физика взаимодействия атомов с сильным лазерным полем // *ЖЭТФ*. 2016. Т. 149. Вып. 3. С. 522–529.
11. Делоне Н.Б., Крайнев В.П. Нелинейная ионизация атомов лазерным излучением. М.: Физматлит, 2001. 320 с.
12. Ovchinnikov S.Yu., Ogurtsov G.N., Macek J.H., Gordeev Yu.S. Dynamics of ionization in atomic collisions // *Phys. Rep.* 2004. Vol. 389. No. 3. Pp. 119–159.
13. Овчинников С.Ю., Смирновский А.А., Шмидт А.А. Разработка алгоритма гидродинамического анализа эволюции квантовых систем в расширяющемся пространстве // *Письма в ЖТФ*. 2016. Т. 42. № 8. С. 37–44.
14. Yang X.L., S.H. Guo, F.T. Chan, K.W. Wong, W.Y. Ching. Analytic solution of a two-dimensional hydrogen atom. I. Nonrelativistic theory // *Phys. Rev. A*. 1991. Vol. 43. No. 3. Pp. 1186–1196.
15. Parfitt D.G.W., Portnoi M.E. The two-dimensional hydrogen atom revisited // *Journal of Mathematical Physics*. 2002. Vol. 43. No. 10. Pp. 4681–4691.
16. Bandrauk A.D., Shen H. Higher order exponential split operator method for solving time-dependent Schrödinger equations // *Canadian Journal of Chemistry*. 1992. Vol. 70. No. 2. Pp. 555–559.
17. Soloviev E.A., Vinitzky S.I. Suitable coordinates for the three-body problem in the adiabatic representation // *Journal of Physics*. B. 1985. Vol. 18. No. 16. Pp. L557–L562.

Статья поступила в редакцию 21.09.2017, принята к публикации 18.10.2017.

СВЕДЕНИЯ ОБ АВТОРАХ

ОВЧИННИКОВ Сергей Юрьевич — доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

194021, Российская Федерация, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
sovichin@utk.edu

ЛАРИОНОВ Николай Владимирович — кандидат физико-математических наук, научный сотрудник Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
larionov.nickolay@gmail.com

СМИРНОВСКИЙ Александр Андреевич — кандидат физико-математических наук, доцент Санкт-Петербургского политехнического университета Петра Великого, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

195251, Российская Федерация, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29
smirta@mail.ru

ШМИДТ Александр Александрович — кандидат физико-математических наук, заведующий сектором Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе РАН, Санкт-Петербург, Российская Федерация.

194021, Российская Федерация, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 26
alexander.schmidt@mail.ioffe.ru

REFERENCES

- [1] **R.M. Wilson**, An obstacle dragged through a Bose–Einstein condensate can leave a well-known pattern of vortices in its wake, *Physics Today*. 70 (1) (2017) 19, <http://dx.doi.org/10.1063/PT.3.3416>
- [2] **G. Krstulovic, N. Brachet, E. Tirapogui**, Radiation and vortex dynamics in the nonlinear Schrödinger equation, *Phys. Rev. E*. 78 (2) (2008) 026601.
- [3] **J.M. Ngoko Djiokap, A.V. Meremianin, et al.**, Multistart spiral electron vortices in ionization by circularly polarized UV pulses, *Phys. Rev. A*. 94 (1) (2016) 013408.
- [4] **S.Y. Ovchinnikov, J.H. Macek, D.R. Schultz**, Hydrodynamical interpretation of angular momentum and energy transfer in atomic processes, *Phys. Rev. A*. 90 (6) (2014) 062713.
- [5] **J.M. Ngoko Djiokap, S.X. Hu, L.B. Madsen, et al.**, Electron vortices in photoionization by circularly polarized attosecond pulses, *Phys. Rev. Lett.* 115 (11) (2015) 113004.
- [6] **L.Ph.H. Schmidt, C. Goihl, D. Metz, et al.**, Vortices associated with the wavefunction of a single electron emitted in slow ion-atom collisions, *Phys. Rev. Lett.* 112 (8) (2014) 083201.
- [7] **L.G. Loitsyanskiy**, *Mechanics of liquids and gases*, New York, Begell House, 1995.
- [8] **E. Madelung**, Quantentheorie in hydrodynamischer Form, *Z. Physik*. 40 (1926) 332–326.
- [9] **T. Takabayasi**, On the formulation of quantum mechanics associated with classical pictures, *Prog. Theor. Phys.* 8 (2) (1952) 143–182.
- [10] **M.V. Fedorov, L.V. Keldysh's** “Ionization in the field of a strong electromagnetic wave” and modern physics of interaction of atoms with a strong laser field, *JETP*. 2016, 122 (3) (2016) 449–455.
- [11] **N.B. Delone, V.P. Krainev**, *Nelineynaya ionizatsiya atomov lazernym izlucheniem* [Nonlinear ionization of atoms by laser radiation], Moscow, Physmatlit, 2001.
- [12] **S.Yu. Ovchinnikov, G.N. Ogurtsov, J.H. Macek, Yu.S. Gordeev**, Dynamics of ionization in atomic collisions, *Phys. Rep.* 389 (3) (2004) 119–159.
- [13] **S.Yu. Ovchinnikov, A.A. Smirnovsky, A.A. Schmidt**, Development of an algorithm of hydrodynamic analysis of quantum system evolution in expanding space, *Tech. Phys. Lett.* 42 (4) (2016) 407–410.
- [14] **X.L. Yang, S.H. Guo, F.T. Chan, et al.**, Analytic solution of a two-dimensional hydrogen atom. I. Nonrelativistic theory, *Phys. Rev. A*. 43 (3) (1991) 1186–1196.
- [15] **D.G.W. Parfitt, M.E. Portnoi**, The two-dimensional hydrogen atom revisited, *Journal of Mathematical Physics*. 43 (10) (2002) 4681–4691.
- [16] **A.D. Bandrauk, H. Shen**, Higher order exponential split operator method for solving time-

dependent Schrödinger equations, Canadian Journal of Chemistry. 70 (2) (1992) 555–559.

[17] E.A. Soloviev, S.I. Vinitzky, Suitable

coordinates for the three-body problem in the adiabatic representation, Journal of Physics. B. 18 (16) (1985) L557– L562.

Received 21.09.2017, accepted 18.10.2017.

THE AUTHORS

OVCHINNIKOV Sergey Yu.

Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Russian Federation.
26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
sovichin@utk.edu

LARIONOV Nikolay V.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation.
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
larionov.nickolay@gmail.com

SMIRNOVSKY Alexander A.

Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, St. Petersburg, Russian Federation.
29 Politechnicheskaya St., St. Petersburg, 195251, Russian Federation
smirta@mail.ru

SCHMIDT Alexander A.

Ioffe Institute of the Russian Academy of Sciences, St. Petersburg, Russian Federation.
26 Polytekhnicheskaya St., St. Petersburg, 194021, Russian Federation
alexander.schmidt@mail.ioffe.ru