ЖЭТФ, 2021, том 160, вып. 2 (8), стр. 155–166 © 2021

ДИНАМИКА ВРЕМЕННОЙ ЭВОЛЮЦИИ ВОЗБУЖДЕНИЯ КВАНТОВОГО ОСЦИЛЛЯТОРА ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫМИ ИМПУЛЬСАМИ

В. А. Астапенко [a*], ***Ф. Б. Розми*** [a,b,c**], ***Е. В. Сахно*** [a]

[a] *Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет)*
141701, Долгопрудный, Московская обл., Россия

[b] *Sorbonne University, Faculty of Sciences and Engineering*
75252, Paris, France

[c] *Ecole Polytechnique, LULI Laboratory*
91128, Palaiseau, France

Поступила в редакцию 11 марта 2021 г.,
после переработки 19 марта 2021 г.
Принята к публикации 22 марта 2021 г.

Теоретически исследуется динамика временной эволюции возбуждения квантового осциллятора электромагнитными импульсами при произвольном значении амплитуды поля в импульсе. Рассматривается гармонический осциллятор без затухания и возбуждение между стационарными состояниями. Общая формула для возбуждения квантовых состояний как функции времени выведена в терминах мгновенной энергии ассоциированного классического осциллятора в поле электромагнитного импульса. С помощью полученного выражения детально исследована зависимость вероятности возбуждения квантового осциллятора от времени вне рамок теории возмущений для различных параметров импульса, включая полное возбуждение из основного состояния, возбуждение из возбужденных состояний и спектры возбуждения.

DOI: 10.31857/S0044451021080010

1. ВВЕДЕНИЕ

Квантовый гармонический осциллятор является уникальной физической системой, поскольку динамику его временной эволюции можно аналитически описать при взаимодействии с возмущением произвольной величины вне рамок теории возмущений [1, 2]. Развитие методов генерации ультракоротких лазерных импульсов (УКИ) [3, 4] делает актуальным рассмотрение взаимодействия таких импульсов с различными мишенями [5–10], включая колебательные системы [11, 12]. Так, в предыдущей работе авторов [12] рассматривалось возбуждение квантового осциллятора за все время действия УКИ в зависимости от длительности импульса и частотной отстройки его несущей частоты от собственной частоты осциллятора при произвольном значении амплитуды электрического поля. Аналитически и численно были проанализированы эволюция спектров возбуждения и зависимость его вероятности от длительности импульса при увеличении амплитуды поля.

В последнее время успешно развиваются экспериментальные методы наблюдения фотопроцессов, индуцируемых УКИ, в реальном времени [13, 14]. Данному вопросу посвящены, например, работы [15, 16], в которых наблюдались возбуждение резонанса Фано в атоме гелия и рождение фотоэлектрона с субфемтосекундным разрешением. В связи с этим становится актуальным адекватное теоретическое описание таких явлений.

Настоящая работа посвящена детальному теоретическому анализу возбуждения квантового осциллятора под действием УКИ в зависимости от времени для различных параметров возбуждающего импульса вне рамок теории возмущений.

2. ОСНОВНЫЕ ФОРМУЛЫ

Зависящая от времени вероятность $W_{mn}(t)$ возбуждения квантового гармонического осциллятора

* E-mail: astval@mail.ru
** F. B. Rosmej

(КО) под действием электромагнитного импульса (ЭМИ) для перехода $n \to m$, $m > n$, определяется формулой (см. Приложение А)

$$W_{mn}(t) = \frac{n!}{m!}\nu(t)^{m-n}\exp(-\nu(t))\left|L_n^{m-n}(\nu(t))\right|^2. \quad (1)$$

Здесь $L_n^k(\nu(t))$ — обобщенный полином Лагерра.

Выражение (1) было получено Швингером [1] в теории квантованных полей для вероятностей переходов между состояниями с различным числом фотонов, индуцированных заданным электронным током. С помощью метода канонического преобразования Хусими получил выражение для вероятности возбуждения квантового осциллятора через полиномы Шарля [2].

В настоящей статье мы рассматриваем осциллятор без затухания. Из (1) видно, что зависимость вероятности возбуждения от времени определяется безразмерной функцией $\nu(t)$. Как показано в Приложении А, функция $\nu(t)$ равна

$$\nu(t) = \frac{\varepsilon_{clas}(t)}{\hbar\omega_0}, \quad (2)$$

где $\varepsilon_{clas}(t)$ — энергия, поглощаемая классическим осциллятором, ассоциированным с квантовым, под действием ЭМИ в момент времени t. Под ассоциированным классическим осциллятором подразумевается осциллятор с одинаковыми значениями параметров: собственной частотой ω_0, массой M и зарядом q.

Отметим, что параметр ν можно интерпретировать как среднее число квантов КО, возбужденных под действием ЭМИ.

Выражение для $\varepsilon_{clas}(t)$ имеет следующий вид (см. Приложение В):

$$\varepsilon_{clas}(t) = \frac{q^2}{2M}\left|\int\limits_{-\infty}^{t} E(t')\exp(i\omega_0 t')\right|^2. \quad (3)$$

Здесь $E(t)$ — напряженность электрического поля в ЭМИ как функция времени. В данной статье положено, что $E(t \to \pm\infty) \to 0$.

Из формулы (3) следует, что мгновенная энергия классического осциллятора определяется неполным преобразованием Фурье (НПФ) от напряженности электрического поля в импульсе на собственной частоте осциллятора.

Далее для определенности рассматривается ЭМИ с гауссовой огибающей:

$$E(t,\omega,\tau) = E_0\exp\left(-\frac{t^2}{2\tau^2}\right)\cos(\omega t), \quad (4)$$

где ω, τ — несущая частота и длительность импульса, E_0 — амплитуда напряженности электрического поля импульса.

Для гауссова импульса (4) НПФ можно представить в виде [17]

$$FG(t,\omega',\omega,\tau) = FGw(t,\omega'+\omega,\tau) + \\ + FGw(t,\omega'-\omega,\tau), \quad (5)$$

$$FGw(t,w,\tau) = \sqrt{\frac{\pi}{8}}\tau E_0 \times \\ \times \exp\left(-\frac{w^2\tau^2}{2}\right)\left\{\mathrm{erf}\left(\frac{t}{\sqrt{2}\tau} - i\frac{w\tau}{\sqrt{2}}\right) + 1\right\}. \quad (6)$$

Здесь $\mathrm{erf}(z)$ — функция ошибки, ω' — текущая частота неполного преобразования Фурье.

Отметим, что в пределе больших времен $t \to \infty$ фурье-образ гауссова импульса дается выражением

$$E(\omega,\omega',\tau) = \sqrt{\frac{\pi}{2}}E_0\tau\left\{\exp\left(-\frac{(\omega'-\omega)^2\tau^2}{2}\right) + \\ + \exp\left(-\frac{(\omega'+\omega)^2\tau^2}{2}\right)\right\}. \quad (7)$$

Для околорезонансных частот $|\omega - \omega_0| \ll \omega_0$ и времен $t \gg \tau$ формула (3) в рассматриваемом случае принимает вид

$$\varepsilon_{clas}(t \gg \tau) \cong \frac{\pi}{4}\,\frac{q^2E_0^2\tau^2}{M}\exp\Big\{-(\omega-\omega_0)^2\tau^2\Big\}. \quad (8)$$

Подставляя (8) в (2) и (1), приходим к выражению для асимптотической (для $t \gg \tau$) вероятности возбуждения КО, которая подробно исследована в статье [12].

На рис. 1 показаны временные зависимости энергии, поглощенной классическим осциллятором (2), нормированной на квант энергии ($\hbar\omega_0$), для различных относительных отстроек несущей частоты импульса от собственной частоты осциллятора $\delta = (\omega - \omega_0)/\omega_0$. Видно, что с увеличением отстройки δ появляется максимум в зависимости $\nu(t)$, а величина этой функции уменьшается.

Еще одна особенность — наличие осцилляций в зависимости поглощенной энергии от времени. Частота этих колебаний равна собственной частоте квантового осциллятора. Математически наличие данных осцилляций следует из формул (5), (6), определяющих неполное преобразование Фурье напряженности электрического поля в импульсе. Как видно из этих формул, осцилляции возникают из-за интерференции вкладов в НПФ от положительной и

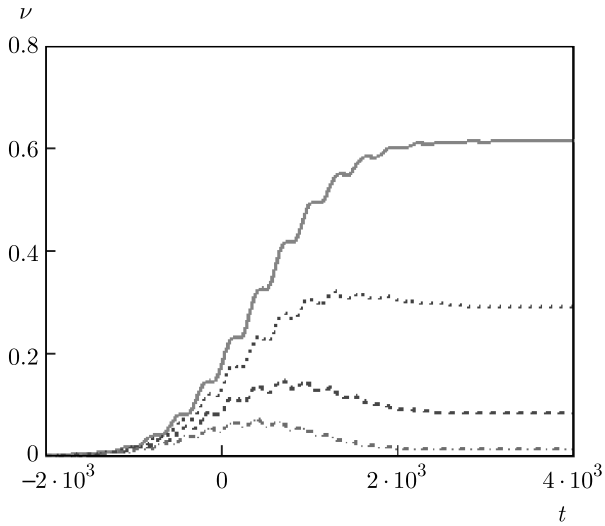

Рис. 1. Временные зависимости нормированной энергии ассоциированного классического осциллятора (2) для различных спектральных отстроек: сплошная кривая — $\delta = 0.05$, пунктирная кривая — $\delta = 0.1$, штриховая кривая — $\delta = 0.15$, штрихпунктирная кривая — $\delta = 0.2$; $\tau = 10^3$ ат. ед., $E_0 = 10^{-2}$ ат. ед., $q = 1$ ат. ед., $M = 10^4$ ат. ед., $\omega_0 = 0.01$ ат. ед.

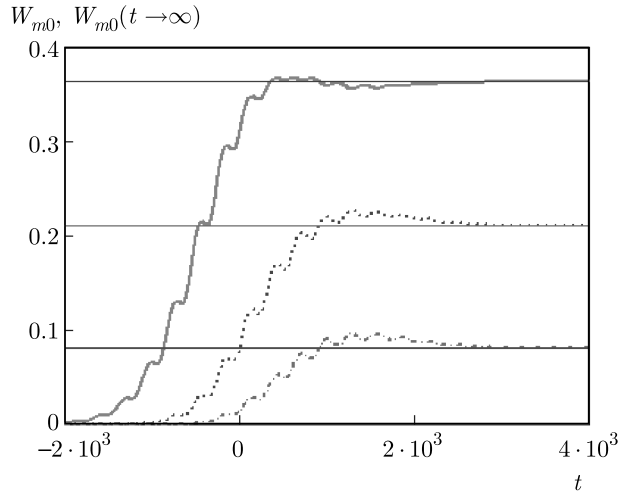

Рис. 2. Временные зависимости вероятности возбуждения КО из основного состояния для $E_0 = 2{\cdot}10^{-2}$ и разных возбужденных состояний: жирная сплошная кривая — $m = 1$, пунктирная кривая — $m = 2$, штрихпунктирная кривая — $m = 3$, тонкие сплошные линии соответствуют асимптотическим значениям вероятности, вычисленным с использованием (8), (9); относительная спектральная отстройка $\delta = 0.1$

отрицательной частотных составляющих напряженности поля в ЭМИ. Таким образом, они имеют другую природу, нежели колебания Раби.

Для возбуждения КО из основного состояния ($n = 0 \to m$) выражение (1) упрощается к виду

$$W_{m0}(t) = \frac{\nu(t)^m}{m!}\exp(-\nu(t)). \qquad (9)$$

Легко получить из (9) формулу для полной вероятности возбуждения КО из основного состояния:

$$W_{tot}(t) = \sum_{m=1}^{\infty} W_{m0}(t) = 1 - \exp(-\nu(t)). \qquad (10)$$

Как следует из рис. 1, функция $W_{tot}(t)$ по-разному зависит от времени при различных значениях параметра δ.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Результаты расчетов временной зависимости вероятности возбуждения КО по полученным формулам представлены на рисунках ниже для $\omega_0 = 0.01$, $q = 1$, $M = 10^4$ и различных значений E_0, τ и δ. Здесь и ниже используются атомные единицы $e = m_e = \hbar = 1$.

На рис. 2–4 показаны зависимости вероятности возбуждения КО от времени из основного состояния

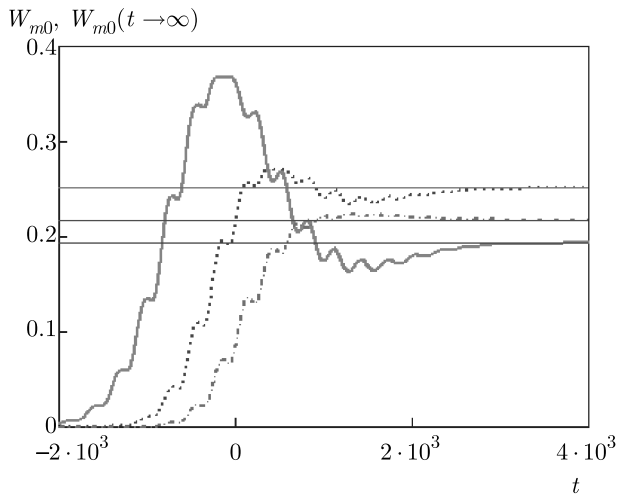

Рис. 3. Временные зависимости вероятности возбуждения КО из основного состояния для $E_0 = 3{\cdot}10^{-2}$ и разных возбужденных состояний: жирная сплошная кривая — $m = 1$, пунктирная кривая — $m = 2$, штрихпунктирная кривая — $m = 3$, тонкие сплошные линии соответствуют асимптотическим значениям вероятности, вычисленным с использованием (8), (9); относительная спектральная отстройка $\delta = 0.1$

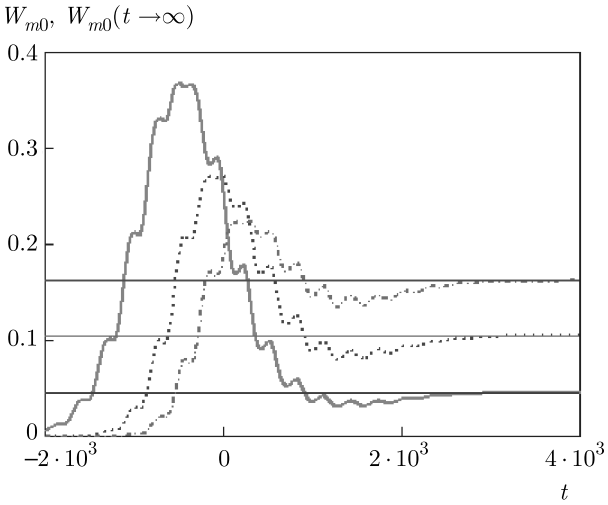

Рис. 4. Временные зависимости вероятности возбуждения КО из основного состояния для $E_0 = 4 \cdot 10^{-2}$ и разных возбужденных состояний: жирная сплошная кривая — $m = 1$, пунктирная кривая — $m = 2$, штрихпунктирная кривая — $m = 3$, тонкие сплошные линии соответствуют асимптотическим значениям вероятности, вычисленным с использованием (8), (9); относительная спектральная отстройка $\delta = 0.1$

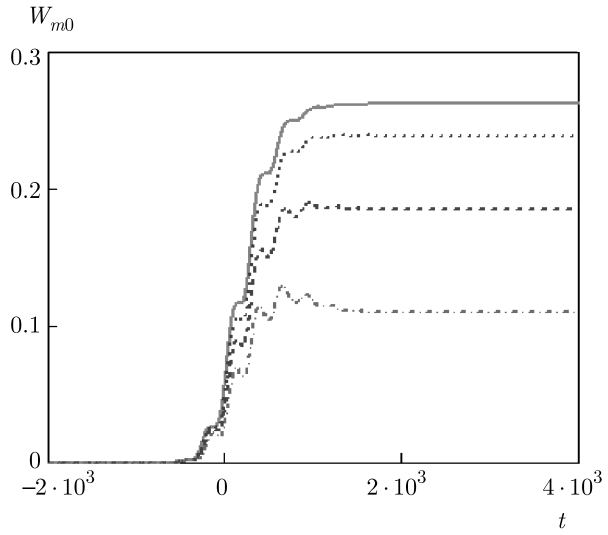

Рис. 5. Временные зависимости вероятности возбуждения КО на переходе $0 \to 2$ для $\tau = 500$ и различных отстроек: сплошная кривая — $\delta = 0.05$, пунктирная кривая — $\delta = 0.1$, штриховая кривая — $\delta = 0.15$, штрихпунктирная кривая — $\delta = 0.2$; $E_0 = 3 \cdot 10^{-2}$

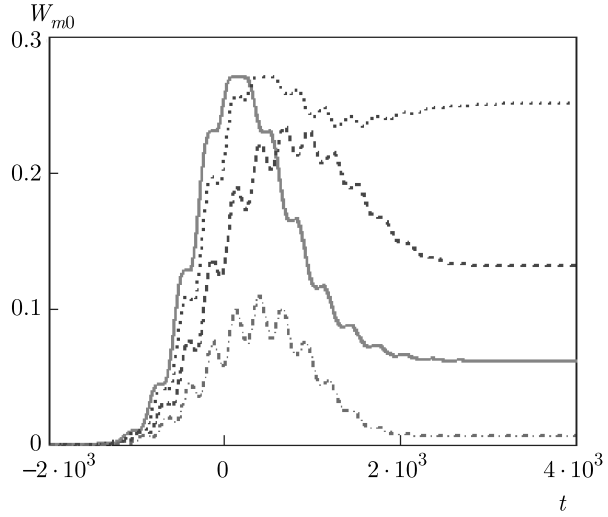

Рис. 6. Временные зависимости вероятности возбуждения КО на переходе $0 \to 2$ для $\tau = 1000$ и различных отстроек: сплошная кривая — $\delta = 0.05$, пунктирная кривая — $\delta = 0.1$, штриховая кривая — $\delta = 0.15$, штрихпунктирная кривая — $\delta = 0.2$; $E_0 = 3 \cdot 10^{-2}$

в ближайшие возбужденные состояния ($m = 1, 2, 3$) для различных значений амплитуды электрического поля в ЭМИ. Асимптотические значения вероятности возбуждения на больших временах, рассчитанные по формулам (2), (8), (B.6), здесь показаны тонкими сплошными линиями.

Из рис. 2–4 следует, что с увеличением амплитуды напряженности электрического поля зависимость $W_{m0}(t)$ из монотонно возрастающей функции превращается в функцию с максимумом, амплитуда которого практически не меняется с увеличением E_0, а положение слабо смещается в область малых времен.

Осцилляции кривых, изображенных на рис. 2–4, возникают из-за осцилляций во временной зависимости поглощенной энергии (см. рис. 1) вследствие указанного выше интерференционного эффекта.

На рис. 5–7 представлены зависимости вероятности возбуждения перехода $0 \to 2$ от времени для различных длительностей импульса и различных спектральных отстроек δ.

Из рис. 5 видно, что при малой длительности импульса вероятность возбуждения увеличивается практически монотонно, достигая значения насыщения при временах $t \geq 2\tau$. В этом случае значение стационарной вероятности возбуждения уменьшается с увеличением спектральной отстройки δ. Такая ситуация характерна для относительно небольших величин ν, когда $\exp(-\nu) \approx 1$, и можно пользоваться теорией возмущений. С увеличением длительности импульса роль нелинейности во взаимодействии ЭМИ с КО возрастает и зависимость вероятности возбуждения от времени становится более сложной, как видно из рис. 6, 7. Одной из характерных особен-

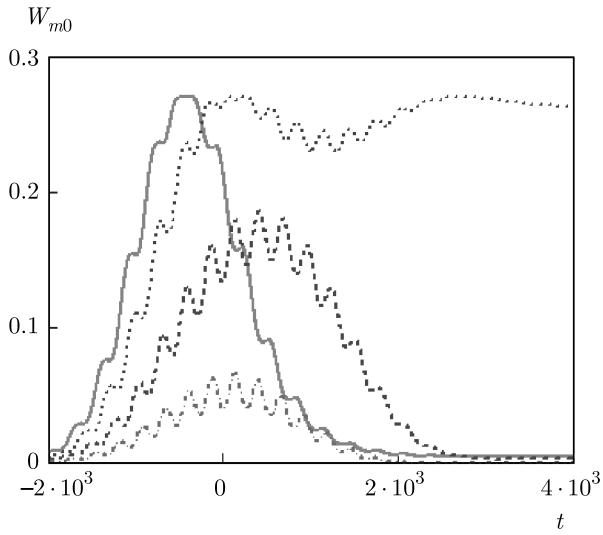

Рис. 7. Временные зависимости вероятности возбуждения КО на переходе $0 \to 2$ для $\tau = 1500$ и различных отстроек: сплошная кривая — $\delta = 0.05$, пунктирная кривая — $\delta = 0.1$, штриховая кривая — $\delta = 0.15$, штрихпунктирная кривая — $\delta = 0.2$; $E_0 = 3 \cdot 10^{-2}$

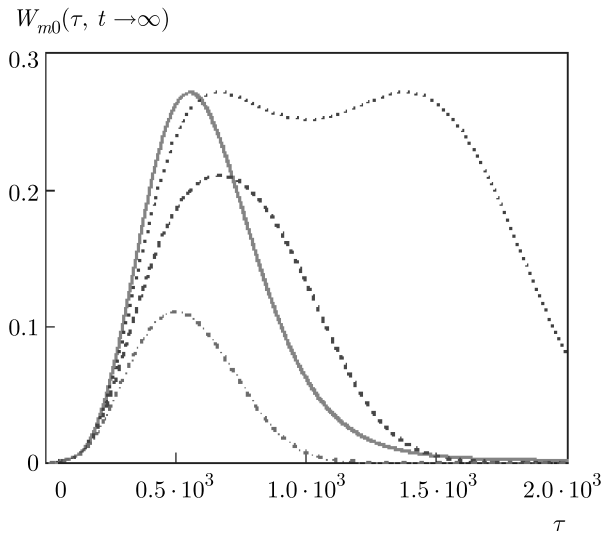

Рис. 8. Асимптотическая вероятность возбуждения КО перехода $0 \to 2$ как функция длительности импульса для различных значений относительной отстройки: сплошная кривая — $\delta = 0.05$, пунктирная кривая — $\delta = 0.1$, штриховая кривая — $\delta = 0.15$, штрихпунктирная кривая — $\delta = 0.2$; $E_0 = 3 \cdot 10^{-2}$

ностей временной зависимости в случае более длинных импульсов является то, что со временем вероятность возбуждения импульсами с большей отстройкой частоты становится больше, чем для импульсов с меньшим δ.

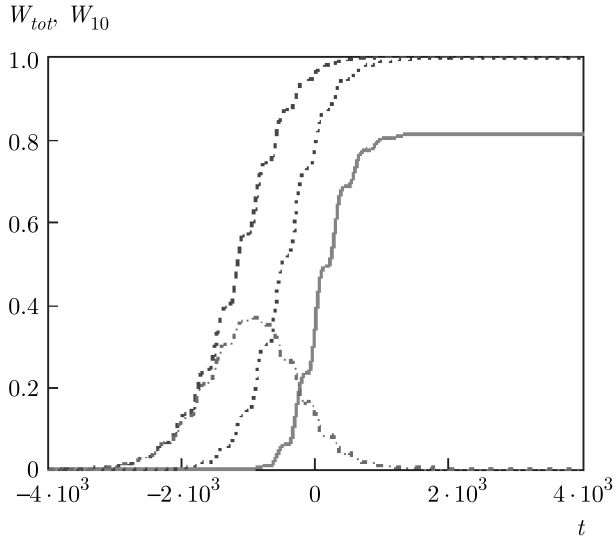

Рис. 9. Полная вероятность возбуждения КО из основного состояния как функция времени для $\delta = 0.05$ и различных длительностей импульса: сплошная кривая — $\tau = 500$, пунктирная кривая — $\tau = 1000$, штриховая кривая — $\tau = 1500$; штрихпунктирная кривая описывает возбуждение перехода $0 \to 1$; $E_0 = 3 \cdot 10^{-2}$

Асимптотические значения вероятности возбуждения также существенно зависят от величины отстройки и длительности импульса. Так, например, в случае, показанном на рис. 5–7, максимальное асимптотическое значение вероятности возбуждения соответствует спектральной отстройке $\delta = 0.1$. Это согласуется с графиками, представленными на рис. 8, где показаны зависимости асимптотической вероятности возбуждения от длительности импульса для различных спектральных отстроек, рассчитанные по формулам (2), (8), (B.6). Отметим, что асимптотическая вероятность возбуждения подробно исследовалась в работе [12], где, в частности, аналитически была рассмотрена зависимость вероятности возбуждения от длительности импульса для различных значений других параметров импульса (см. рис. 4 из цитируемой статьи).

Полная вероятность возбуждения КО из основного состояния как функция времени показана на рис. 9–11 для различных значений δ и τ; $E_0 = 3 \cdot 10^{-2}$. На этих же рисунках представлены временные зависимости вероятности возбуждения перехода $0 \to 1$ для длительности импульса $\tau = 1500$ и различных значений отстройки δ.

Из рисунков следует, что в случае короткого импульса временная зависимость полной вероятности возбуждения КО практически не меняется с увеличением спектральной отстройки. Напротив, для

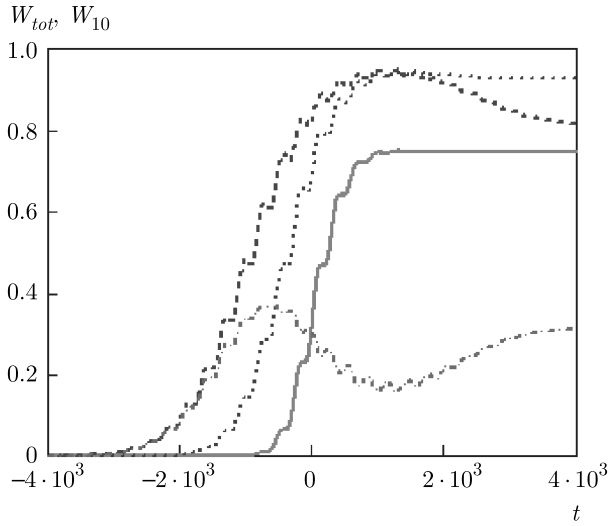

Рис. 10. Полная вероятность возбуждения КО из основного состояния как функция времени для $\delta = 0.1$ и различных длительностей импульса: сплошная кривая — $\tau = 500$, пунктирная кривая — $\tau = 1000$, штриховая кривая — $\tau = 1500$; штрихпунктирная кривая описывает возбуждение перехода 0 → 1; $E_0 = 3 \cdot 10^{-2}$

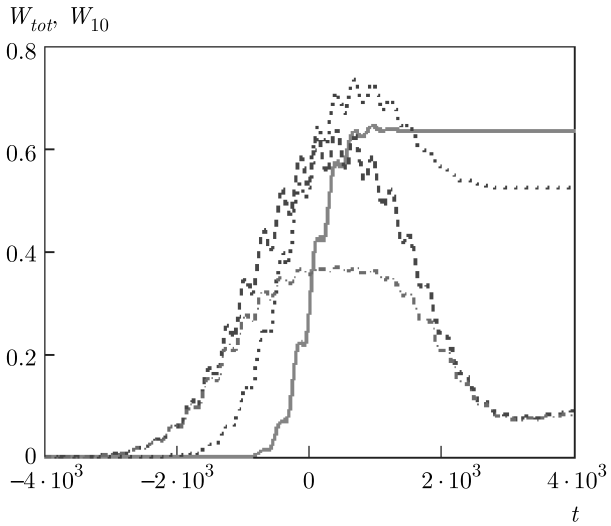

Рис. 11. Полная вероятность возбуждения КО из основного состояния как функция времени для $\delta = 0.15$ и различных длительностей импульса: сплошная кривая — $\tau = 500$, пунктирная кривая — $\tau = 1000$, штриховая кривая — $\tau = 1500$; штрихпунктирная кривая описывает возбуждение перехода 0 → 1; $E_0 = 3 \cdot 10^{-2}$

длинного импульса форма кривой существенно меняется, что хорошо видно на рис. 11.

Еще один вывод, следующий из рис. 9–11, заключается в том, что зависимость полной вероятности возбуждения КО от времени приближается к своему

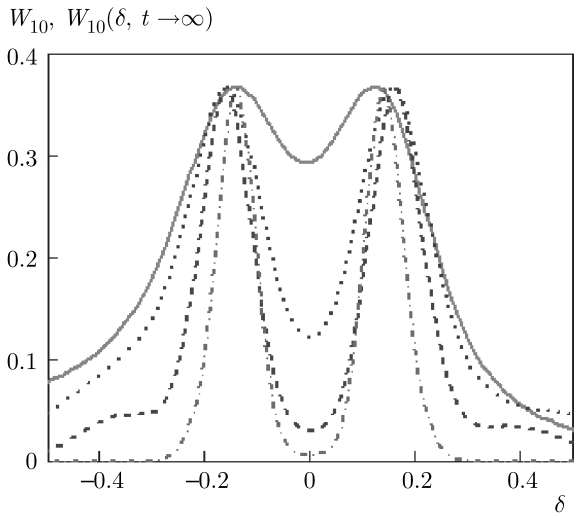

Рис. 12. Временная эволюция спектра вероятностей возбуждения для перехода 0 → 1: сплошная кривая — $t = 10$, пунктирная кривая — $t = 500$, штриховая кривая — $t = 10^3$; $E_0 = 3 \cdot 10^{-2}$, $\tau = 1000$; штрихпунктирная кривая показывает асимптотический спектр для $t \to \infty$

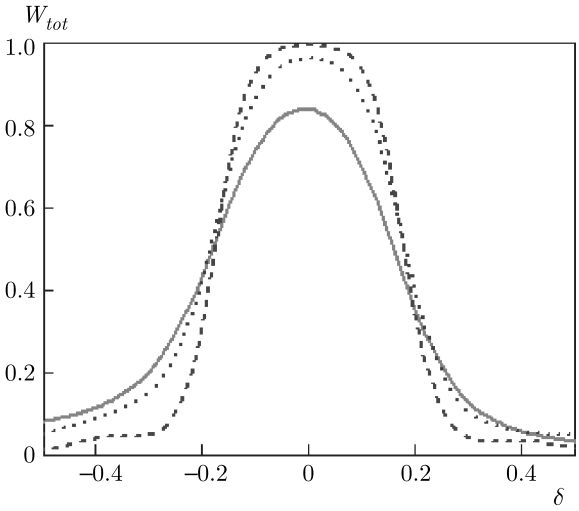

Рис. 13. Временная эволюция спектра вероятностей возбуждения для полного возбуждения КО из основного состояния: сплошная кривая — $t = 10$, пунктирная кривая — $t = 500$, штриховая кривая — $t = 10^3$; $E_0 = 3 \cdot 10^{-2}$, $\tau = 1000$

аналогу для возбуждения перехода 0 → 1 с увеличением спектральной отстройки δ.

Временная эволюция спектра возбуждения КО для перехода 0 → 1 показана на рис. 12, на рис. 13 — для полного возбуждения из основного состояния. Под спектром возбуждения понимается зависимость вероятности возбуждения от относительной отстройки частоты $\delta = (\omega - \omega_0)/\omega_0$.

Как следует из рис. 12, спектр возбуждения перехода $0 \to 1$ для данной амплитуды поля имеет провал в центре при $\delta = 0$. Кроме того, спектр имеет слабо выраженную асимметрию, которая исчезает в пределе больших времен. Расчет показывает, что при меньших значениях амплитуды поля указанный провал отсутствует. Спектр возбуждения в этом случае представляет собой колоколообразную кривую с максимумом при $\delta = 0$. Спектр вероятностей полного возбуждения КО имеет один максимум при $\delta = 0$ для всех значений напряженности поля в импульсе. С увеличением времени форма этого максимума изменяется от колоколообразной до столообразной, как это видно на рис. 13.

Описанные особенности связаны с наличием множителя $\exp(-\nu)$ в выражении для вероятности возбуждения КО. Физически появление спектрального провала при переходе между стационарными состояниями соответствует насыщению этого перехода под действием ЭМИ.

Рассмотрим теперь переходы из возбужденных состояний КО по формулам (A.26), (A.30), которые следуют из выражения (1):

$$W_{mn}(t) = n!m!\nu(t)^{m+n}\exp(-\nu(t)) \times \times \left| \sum_{k=0}^{\min(n,m)} \frac{(-1)^k \nu(t)^k}{k!(m-k)!(n-k)!} \right|^2. \quad (11)$$

Следует отметить, что в отличие от (1) выражение (11) представляет результат в явном виде как функцию параметра ν и квантовых чисел стационарных состояний (m, n).

Результаты расчетов вероятности возбуждения переходов $n \to 3$ $(n = 0, 1, 2)$ для разных значений амплитуды ЭМИ E_0 представлены на рис. 14–16.

Видно, что зависимость вероятности возбуждения от времени наиболее сильно изменяется при переходе между ближайшими энергетическими уровнями (переход $2 \to 3$), так что появляется новый максимум, а зависимость вероятности возбуждения перехода от времени $0 \to 3$ изменяется относительно слабо. Отметим, что для переходов из основного состояния КО при достаточно сильных полях существует только один максимум вероятности возбуждения как функции времени (см. рис. 3, 4).

Временная эволюция спектра возбуждения перехода $1 \to 3$ для разных значений амплитуды ЭМИ показана на рис. 17–19.

Из рисунков видно, что с увеличением амплитуды поля спектр возбуждения становится все более сложным. Вместо одного максимума при малых значениях амплитуды (рис. 17) появляются два максимума с провалом в центре (рис. 18), который при дальнейшем увеличении амплитуды превращается в максимум (рис. 19). Таким образом, с увеличением поля спектр возбуждения расширяется, а количество максимумов и минимумов увеличивается. Существенно, что при больших амплитудах поля зависимость спектра возбуждения со временем меняется сильнее.

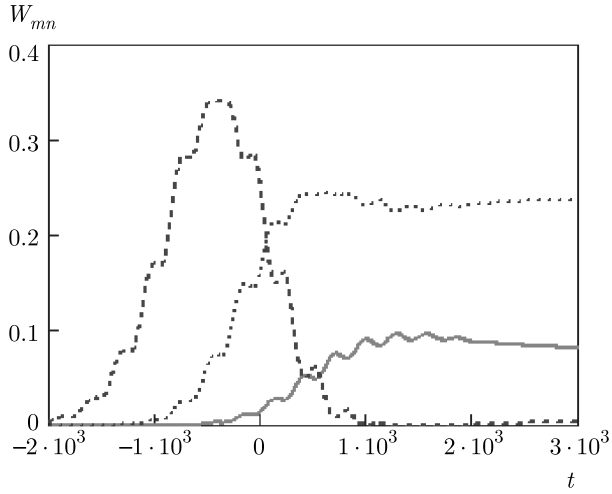

Рис. 14. Зависимости вероятности возбуждения КО под действием ЭМИ от времени с амплитудой поля $E_0 = 2\cdot10^{-2}$ для переходов $n \to 3$: сплошная кривая — $0 \to 3$, пунктирная кривая — $1 \to 3$, штриховая кривая — $2 \to 3$; $\delta = 0.1$; $\tau = 10^3$

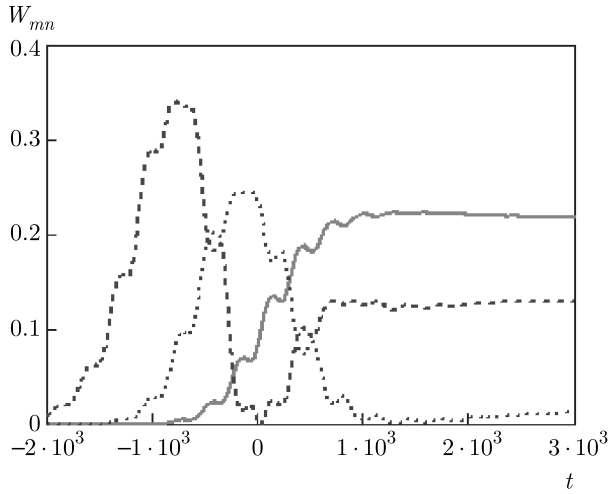

Рис. 15. Зависимости вероятности возбуждения КО под действием ЭМИ от времени с амплитудой поля $E_0 = 3\cdot10^{-2}$ для переходов $n \to 3$: сплошная кривая — $0 \to 3$, пунктирная кривая — $1 \to 3$, штриховая кривая — $2 \to 3$; $\delta = 0.1$; $\tau = 10^3$

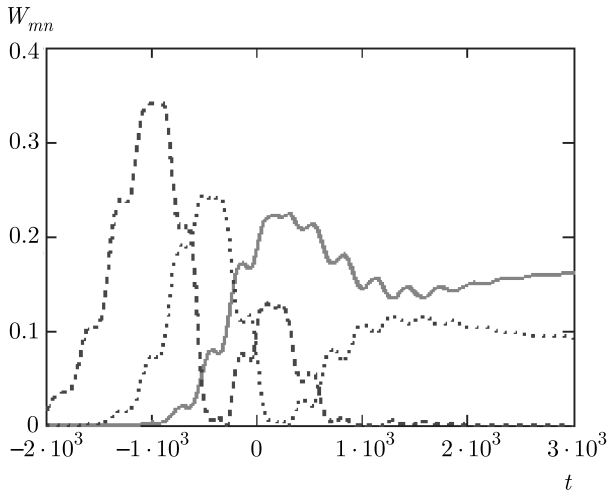

Рис. 16. Зависимости вероятности возбуждения КО под действием ЭМИ от времени с амплитудой поля $E_0 = 4\cdot10^{-2}$ для переходов $n \to 3$: сплошная кривая — $0 \to 3$, пунктирная кривая — $1 \to 3$, штриховая кривая — $2 \to 3$; $\delta = 0.1$; $\tau = 10^3$

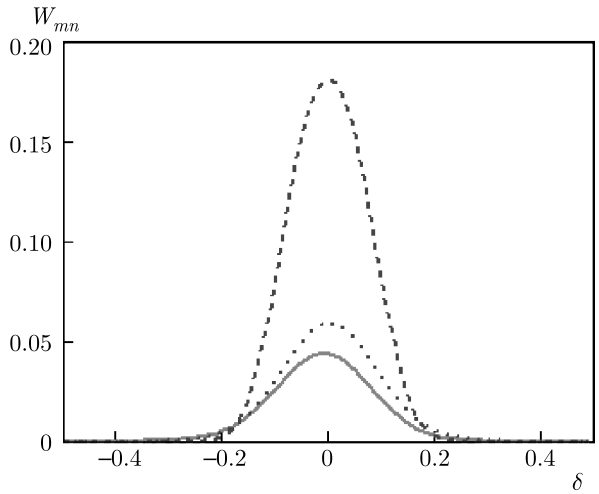

Рис. 17. Временная эволюция спектра возбуждения перехода $1 \to 3$ в КО для амплитуды поля $E_0 = 10^{-2}$: сплошная кривая — $t = 10$, пунктирная кривая — $t = 10^2$, штриховая кривая — $t = 10^3$; длительность импульса $\tau = 10^3$

Примечательно, что значение вероятности возбуждения в максимумах остается неизменным при достаточно большой амплитуде поля и равно для данного перехода одному и тому же значению: $W_{max}(1 \to 3) \approx 0.245$.

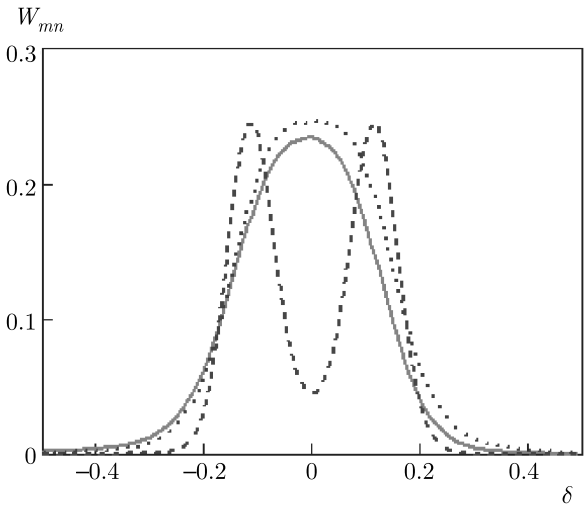

Рис. 18. Временная эволюция спектра возбуждения перехода $1 \to 3$ в КО для амплитуды поля $E_0 = 2\cdot10^{-2}$: сплошная кривая — $t = 10$, пунктирная кривая — $t = 10^2$, штриховая кривая — $t = 10^3$; длительность импульса $\tau = 10^3$

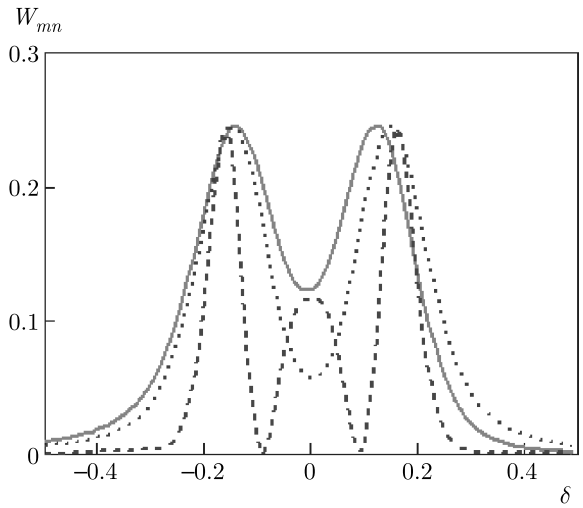

Рис. 19. Временная эволюция спектра возбуждения перехода $1 \to 3$ в КО для амплитуды поля $E_0 = 3\cdot10^{-2}$: сплошная кривая — $t = 10$, пунктирная кривая — $t = 10^2$, штриховая кривая — $t = 10^3$; длительность импульса $\tau = 10^3$

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В статье динамика временной эволюции возбуждения КО под действием ЭМИ детально численно исследована вне рамок теории возмущений. Установлено, что эта зависимость определяется энергией ассоциированного классического осциллятора в данный момент времени.

Показано, что поведение функции $W_{mn}(t)$ сильно зависит от параметров ЭМИ: отстройки несущей

частоты от собственной частоты КО, длительности импульса и амплитуды напряженности электрического поля. Так, с увеличением значений указанных параметров вероятность возбуждения КО, монотонно возрастающая со временем, превращается в функцию, имеющую огибающую с максимумом и осцилляции с частотой, равной собственной частоте КО. Амплитуда этих осцилляций увеличивается с увеличением длительности импульса τ и частотной отстройки несущей частоты от собственной частоты δ. Данные осцилляции имеют иную природу, чем осцилляции Раби. Они возникают в результате интерференции вкладов в процесс положительной и отрицательной частотных составляющих напряженности электрического поля в импульсе.

Полная вероятность возбуждения КО в случае коротких импульсов остается монотонно возрастающей функцией времени при увеличении отстройки δ, а для длинных импульсов вероятность возбуждения достигает максимума с ростом δ.

Исследована временная эволюция спектров возбуждения КО для различных амплитуд электрического поля ЭМИ. В частности, показано, что с увеличением амплитуды поля у спектральной кривой вместо одного максимума при $\delta = 0$ появляются боковые максимумы, положение и форма которых со временем меняются. В случае возбуждения из возбужденного состояния центральный спектральный минимум со временем превращается в максимум (рис. 19). Спектр полного возбуждения КО из основного состояния в пределе сильных полей описывается столообразной кривой, ширина которой со временем уменьшается.

Получено выражение возбуждения КО перехода $n \to m$ (11) с явной зависимостью от квантовых чисел стационарных состояний (m, n). В частности, из этого выражения следует, что вероятности взаимно обратных переходов в квантовом осцилляторе под действием ЭМИ равны между собой в приближении заданного поля.

В заключение отметим, что в данной статье расчеты проведены для гауссовой огибающей импульса и параметров КО, характерных для молекулярных колебаний. В рентгеновском диапазоне длин волн обычно используются лазеры на свободных электронах, импульсы которых состоят из субимпульсов [18]. Тогда нужно пользоваться общей формулой (3) для расчета энергии, поглощаемой классическим осциллятором, ассоциированным с КО. В случае применимости теории возмущений и гауссовых субимпульсов можно получить аналитическое выражение для вероятности в пределе больших времен [19]. Заметим также, что в последние годы появились предложения по генерации одиночных импульсов лазера на свободных электронах [20], а также аттосекундных одноцикловых импульсов [21].

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Московского физико-технического института в рамках Программы 5-топ-100.

5. ПРИЛОЖЕНИЕ А

Полагаем, что до возбуждения ($t \to -\infty$) осциллятор находился в n-м стационарном состоянии с волновой функцией (без временного фактора) [22]

$$\psi_n^{(0)}(x) = \left(\frac{M\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \times \\ \times \exp\left(-\frac{M\omega}{2\hbar}x^2\right) H_n\left(x\sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}}\right), \quad (A.1)$$

где H_n — полиномы Эрмита. Введем безразмерную переменную

$$\widetilde{x} = x\sqrt{\frac{M\omega}{\hbar}} \quad (A.2)$$

и безразмерную функцию

$$\widetilde{\psi} = \left(\frac{\hbar}{M\omega}\right)^{1/4} \psi. \quad (A.3)$$

Под действием ЭМИ исходная функция преобразуется как $\widetilde{\psi}_n^{(0)}(x) \to \widetilde{\psi}_n(x,t)$. Тогда для вероятности перехода между стационарными состояниями квантового осциллятора $n \to m$ получаем (в момент времени t)

$$W_{mn}(t) = \left|\int\limits_{-\infty}^{\infty} d\widetilde{x}\, \widetilde{\psi}_n(\widetilde{x},t)\widetilde{\psi}_m^{(0)}(\widetilde{x})\right|^2, \quad m > n, \quad (A.4)$$

здесь вводится функция (см. [2])

$$\widetilde{\psi}_n(\widetilde{x},t) = \exp(i\varphi t)\widetilde{\psi}_n^{(0)}(\widetilde{x} - \widetilde{\eta}(t)) \exp(i\dot{\widetilde{\eta}}\widetilde{x}), \quad (A.5)$$

которая является аналитическим решением временного уравнения Шредингера для одномерного гармонического осциллятора, на который действует внешняя сила, зависящая от времени. Определим безразмерную функцию:

$$\widetilde{\eta}(t) = \frac{M\omega}{\hbar}\,\eta(t), \quad (A.6)$$

где $\eta(t)$ является решением уравнения для вынужденных колебаний классического осциллятора под действием внешней силы:

$$\ddot{\eta} + \omega^2 \eta = \frac{f(t)}{M}, \tag{A.7}$$

с начальными условиями $\eta(-\infty) = \dot{\eta}(-\infty) = 0$, а также соответствующие производные:

$$\dot{\widetilde{\eta}} = \frac{d\widetilde{\eta}}{\omega dt} = \frac{d\widetilde{\eta}}{d\widetilde{t}}, \tag{A.8}$$

$$\dot{\widetilde{\eta}} = \sqrt{\frac{M}{\hbar\omega}}\,\dot{\eta}. \tag{A.9}$$

С учетом сказанного получаем

$$W_{mn}(t) = \frac{1}{\pi 2^n n! 2^m m!} \left| \int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\widetilde{x} \exp\left(-\frac{(\widetilde{x}-\widetilde{\eta})^2}{2}\right) \times \right.$$
$$\times\, H_n(\widetilde{x} - \widetilde{\eta}(t)) \exp(i\dot{\widetilde{\eta}}\widetilde{x}) \times$$
$$\left. \times\, H_m(\widetilde{x}) \exp\left(-\frac{\widetilde{x}^2}{2}\right) \right|^2. \tag{A.10}$$

Далее необходимо вычислить интеграл:

$$I_1 = \int\limits_{-\infty}^{\infty} du \exp\left[-u^2 + u\widetilde{\eta} - \frac{\widetilde{\eta}^2}{2} + i\dot{\widetilde{\eta}}u\right] \times$$
$$\times\, H_m(u) H_n(u - \widetilde{\eta}). \tag{A.11}$$

Введем переменную

$$y = \frac{i}{2}\dot{\widetilde{\eta}} + \frac{1}{2}\widetilde{\eta}, \tag{A.12}$$

тогда

$$I_1 = \exp\left(\frac{i}{2}\dot{\widetilde{\eta}}\widetilde{\eta} - \frac{\widetilde{\eta}^2}{4} - \frac{\dot{\widetilde{\eta}}^2}{4}\right) I_2(\widetilde{\eta}, y), \tag{A.13}$$

где

$$I_2(\widetilde{\eta}, y) \equiv \int\limits_{-\infty}^{\infty} du e^{-(u-y)^2} H_m(u) H_n(u - \widetilde{\eta}) =$$
$$\overset{(u=x+y)}{=} \int\limits_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-x^2} H_m(x+y) \times$$
$$\times\, H_n(x + y - \widetilde{\eta}). \tag{A.14}$$

Воспользуемся табличным интегралом (7.378) из [23]:

$$\int\limits_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_m(x+w) H_n(x+z) dx =$$
$$= 2^m \sqrt{\pi}\, n! z^{m-n} L_n^{m-n}(-2wz), \quad m > n, \tag{A.15}$$

где L_n^{m-n} — обобщенный полином Лагерра.

Для приведения $I_2(\widetilde{\eta}, y)$ к табличному интегралу (A.15) необходимо сделать замену

$$\begin{aligned} w &= y, \\ z &= y - \widetilde{\eta}. \end{aligned} \tag{A.16}$$

Тогда получаем

$$I_2(\widetilde{\eta}, y) =$$
$$= 2^m \sqrt{\pi}\, n! (y - \widetilde{\eta})^{m-n} L_n^{m-n}(-2y(y - \widetilde{\eta})). \tag{A.17}$$

Введем обозначение: $\arg = -2y(y - \widetilde{\eta})$. Используя (A.16), находим

$$\arg = -2\left(\frac{i}{2}\dot{\widetilde{\eta}} + \frac{1}{2}\widetilde{\eta}\right)\left(\frac{i}{2}\dot{\widetilde{\eta}} + \frac{1}{2}\widetilde{\eta} - \widetilde{\eta}\right) =$$
$$= -2\left(\frac{i}{2}\dot{\widetilde{\eta}} + \frac{1}{2}\widetilde{\eta}\right)\left(\frac{i}{2}\dot{\widetilde{\eta}} - \frac{1}{2}\widetilde{\eta}\right) = \frac{\dot{\widetilde{\eta}}^2 + \widetilde{\eta}^2}{2}, \tag{A.18}$$

или в размерных переменных

$$\arg = \frac{M\dot{\eta}^2 + \omega^2 M \eta^2}{2\hbar\omega} \equiv \frac{\varepsilon(t)}{\hbar\omega} = \frac{A(t)}{\hbar\omega} = \nu(t), \tag{A.19}$$

$$\nu(t) = \frac{A(t)}{\hbar\omega}, \tag{A.20}$$

здесь $A(t)$ — работа над классическим осциллятором $\eta(t)$ под действием ЭМИ. Учитывая, что

$$|y - \widetilde{\eta}|^2 = \frac{\dot{\widetilde{\eta}}^2 + \widetilde{\eta}^2}{4} = \frac{M(\dot{\eta}^2 + \omega^2\eta^2)}{4\hbar\omega} = \frac{\nu}{2}, \tag{A.21}$$

находим

$$|I_2|^2 = 2^{2m} \pi (n!)^2 \frac{\nu^{m-n}}{2^{m-n}} \left|L_n^{m-n}(\nu)\right|^2 =$$
$$= 2^{n+m} \pi (n!)^2 \nu^{m-n} \left|L_n^{m-n}(\nu)\right|^2. \tag{A.22}$$

Так как

$$|I_1|^2 = \exp(-\nu)\, |I_2|^2, \tag{A.23}$$

получаем

$$W_{mn}(t) = \frac{1}{\pi 2^n n! 2^m m!}\, |I_1|^2. \tag{A.24}$$

Окончательно находим вероятность возбуждения КО на переходе $n \to m$, $m > n$:

$$W_{mn}(t) = \widetilde{W}_{mn}[\nu(t)] =$$
$$= \frac{n!}{m!} \nu(t)^{m-n} \exp(-\nu(t)) \left|L_n^{m-n}(\nu(t))\right|^2. \tag{A.25}$$

Для вывода формулы (11) используется следующее представление обобщенного полинома Лагерра [23]:

$$L_n^\alpha(x) = \frac{1}{n!} e^x x^{-\alpha} \frac{d^n}{dx^n}(e^{-x} x^{n+\alpha}). \qquad (A.26)$$

Подстановка (A.26) в (A.25) дает

$$\widetilde{W}_{mn}(\nu) = \frac{1}{n!m!} e^\nu \nu^{n-m} \left| \frac{d^n}{d\nu^n}(e^{-\nu}\nu^m) \right|^2. \qquad (A.27)$$

Учитывая, что

$$\nu^{n-m} \left| \frac{d^n}{d\nu^n}(e^{-\nu}\nu^m) \right|^2 = \\ = \nu^{m+n} e^{-2\nu} \left| \sum_{k=0}^{\min(n,m)} \frac{n!m!(-1)^k \nu^{-k}}{k!(m-k)!(n-k)!} \right|^2, \qquad (A.28)$$

получаем

$$\widetilde{W}_{mn}(\nu) = n!m!\nu^{m+n} e^{-\nu} \times \\ \times \left| \sum_{k=0}^{\min(n,m)} \frac{(-1)^k \nu^{-k}}{k!(m-k)!(n-k)!} \right|^2. \qquad (A.29)$$

Из (A.29), в частности, следует, что

$$\widetilde{W}_{mn}(\nu) = \widetilde{W}_{nm}(\nu). \qquad (A.30)$$

Таким образом, временная зависимость вероятности перехода $n \to m$, $m > n$, совпадает с таковой на обратном переходе $m \to n$.

6. ПРИЛОЖЕНИЕ B

Для энергии ЭМИ, поглощенной заряженным классическим осциллятором к моменту времени t, имеем

$$\varepsilon_{clas}(t) = q \int_{-\infty}^{t} \dot{x}(t') E(t')\, dt'. \qquad (B.1)$$

Решение уравнения для гармонического осциллятора выглядит следующим образом (например, см. [24]):

$$x(t) = \frac{q}{M} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{E(\omega') \exp(-i\omega' t)}{\omega_0^2 - \omega'^2 - 2i\gamma\omega'} \frac{d\omega'}{2\pi}, \qquad (B.2)$$

где γ — константа релаксации. Из формулы (B.1) следует выражение

$$\dot{x}(t) = -i\frac{q}{M} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\omega' E(\omega') \exp(-i\omega' t)}{\omega_0^2 - \omega'^2 - 2i\gamma\omega'} \frac{d\omega'}{2\pi}. \qquad (B.3)$$

Подставляя формулу (B.3) в (B.1), получаем

$$\varepsilon_{clas}(t) = \frac{q^2}{M} \int_{-\infty}^{t} dt' E(t') \times \\ \times \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} E(\omega') \frac{i\omega' \exp(-i\omega' t)}{\omega'^2 - \omega_0^2 + 2i\gamma\omega'}. \qquad (B.4)$$

Частотный интеграл в правой части уравнения (B.4) можно вычислить с помощью теоремы о вычетах. В пределе $\gamma \to 0$ этот интеграл равен

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{i\omega' \exp(-i\omega'(t'-t''))}{\omega'^2 - \omega_0^2 - 2i\gamma\omega'} = \\ = \theta(t'-t'') \cos[\omega_0(t'-t'')], \qquad (B.5)$$

где $\theta(\tau)$ — тета-функция Хевисайда. Подставляя правую часть уравнения (B.5) в формулу (B.4), находим

$$\varepsilon_{clas}(t) = \frac{q^2}{M} \int_{-\infty}^{t} dt' E(t') \int_{-\infty}^{t'} dt'' E(t'') \cos[\omega_0(t'-t'')] = \\ = \frac{q^2}{2M} \int_{-\infty}^{t} dt' E(t') \int_{-\infty}^{t} dt'' E(t'') \cos[\omega_0(t'-t'')] = \\ = \frac{q^2}{2M} \left| \int_{-\infty}^{t} dt' E(t') \exp(i\omega_0 t') \right|^2. \qquad (B.6)$$

При переходе ко второму равенству в (B.6) использован тот факт, что подынтегральная функция симметрична относительно перестановки переменных интегрирования: $t' \leftrightarrow t''$.

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Schwinger, Phys. Rev. **91**, 728 (1953).
2. K. Husimi, Prog. Theor. Phys. **9**, 381 (1953).
3. M. T. Hassan, A. Wirth, I. Grguras et al., Rev. Sci. Instrum. **83**, 111301 (2012).
4. M. Chini, K. Zhao, and Z. Chang, Nat. Photon. **8**, 178 (2014).
5. D. N. Makarov, M. R. Eseev, and K. A. Makarova, Opt. Lett. **44**, 3042 (2019).
6. D. N. Makarov, Opt. Express **27**, 31989 (2019).

7. D. N. Makarov, Sci. Rep. **8**, 8204 (2018).

8. V. A. Astapenko, Appl. Phys. B **126**, 110 (2020).

9. F. B. Rosmej, V. A. Astapenko, and V. S. Lisitsa, J. Phys. B **50**, 235601 (2017).

10. F. B. Rosmej, V. A. Astapenko, and V. S. Lisitsa, Phys. Rev. A **90**, 043421 (2014).

11. Z. Fu and M. Yamaguchi, Sci. Rep. **6**, 38264 (2016).

12. V. A. Astapenko and E. V. Sakhno, Appl. Phys. B **126**, 23 (2020).

13. S. Beaulieu, A. Comby, A. Clergerie et al., Science **358**, 1288 (2017).

14. M. Isinger, R. J. Squibb, D. Busto et al., Science **358**, 893 (2017).

15. A. Kaldun, A. Blättermann, S. Donsa, V. Stooß et al., Science **354**, 738 (2016).

16. V. Gruson, L. Barreau, A. Jiménez-Galan et al., Science **354**, 734 (2016).

17. В. А. Астапенко, ЖЭТФ **157**, 67 (2020).

18. E. Saldin, E. V. Schneidmiller, and M. V. Yurkov, *The Physics of Free Electron Lasers*, Springer, Berlin (1999).

19. F. B. Rosmej, V. A. Astapenko, and E. S. Khramov, Matter Rad. Extrem. Lett. **6**, 034001 (2021).

20. T. Tanaka, Phys. Rev. Lett. **114**, 044801 (2015).

21. A. Mak, G. Shamuilov, P. Salen et al., Rep. Prog. Phys. **82**, 025901 (2019).

22. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Физматлит, Москва (2004).

23. И. С. Градштейн, И. М. Рыжик, *Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений*, Физматгиз, Москва (1963).

24. F. B. Rosmej, V. A. Astapenko, and V. S. Lisitsa, *Plasma Atomic Physics*, Springer Ser. **104** (2021).