ФОТОИОНИЗАЦИЯ ВОДОРОДОПОДОБНОГО АТОМА В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

© 2007 О. Чулуунбаатар[1], А.А. Гусев[1], С.И. Виницкий[1], М.С. Касчиев[2]
В.Л. Дербов[3], Л.А. Мельников[3], В.В. Серов[3]

Аннотация

Представлено краткое описание математической модели, метода, набора символьно-численных алгоритмов и пакета программ для решения краевой задачи дискретного и непрерывного спектра атома водорода в однородном магнитном поле и вычисления сечений фотоионизации. Показано, что немонотонная зависимость сечения фотоионизации от энергии электрона связана с существованием серии квазистационарных состояний, погруженных в непрерывный спектр. Предъявлены эффекты резонансного прохождения и полного отражения разноименно заряженных частиц в однородном магнитном поле.

1. Введение. В недавней работе выявлен новый механизм лазерно-стимулированной рекомбинации антиводорода в холодной антипротон-позитронной плазме в лабораторных магнитных полях через квазистационарные состояния, погруженные в непрерывный спектр [1]. Для исследования оптимальных параметров лазерного и магнитного полей в рассматриваемом случае, когда кулоновская энергия сравнима с энергией магнитного поля, традиционные методы расчета неприменимы [2]. В настоящей работе представлены математическая формулировка задачи, метод, алгоритмы [3] и пакет программ [4, 5] для вычисления сечений оптических переходов между связанными и автоионизационными состояниями (дискретного и непрерывного спектра), которые позволили выявить эффекты резонансного прохождения и полного отражения разноименно заряженных частиц в однородном магнитном поле [6].

2. Формулировка задачи. Уравнение Шредингера для волновой функции $\hat{\Psi}(r,\theta,\varphi)=\Psi(r,\theta)\exp(\imath m\varphi)/\sqrt{2\pi}$ водородоподобного атома с зарядом ядра Z, находящимся в аксиально симметричном магнитном поле $\vec{B}=(0,0,B)$, записанное в сферических координатах (r,θ,φ) при фиксированном значении магнитного квантового числа $m=0,\pm1,\ldots$ и z-четности $\sigma=\pm1$, сводится к эллиптическому уравнению второго порядка в частных производных в области $\Omega=\{0<r<\infty,-1<\eta=\cos\theta<1\}$:

$$\left(-\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\hat{A}^{(0)}}{r^2}-\frac{2Z}{r}-\epsilon\right)\Psi(r,\eta)=0. \tag{1}$$

Здесь $\epsilon=2E$ – удвоенная энергия (в Ридбергах 1Ry=(1/2) a.e.) состояния $|m\sigma\rangle$ при фиксированных значениях m и σ, $\hat{A}^{(0)}=A^{(0)}+\gamma m r^2$– оператор, $A^{(0)}\equiv A^{(0)}(p)$ – оператор квазиуглового уравнения для сплюснутых сфероидальных функций [7],

$$A^{(0)}(r,\eta)=-\frac{\partial}{\partial\eta}(1-\eta^2)\frac{\partial}{\partial\eta}+\frac{m^2}{1-\eta^2}+p^2(1-\eta^2), \tag{2}$$

где слагаемое с параметром $p=\gamma r^2/2$ соответствует потенциальной энергии взаимодействия электрона с магнитным полем в приближении бесконечной массы ядра

[1]Чулуунбаатар Очбадрах, Гусев Александр Александрович, Виницкий Сергей Ильич e-mail: vinitsky@theor.jinr.ru, Объединенный институт ядерных исследований, Дубна, 141980, Россия.

[2]Касчиев Михаил Стефанов, e-mail: kas@math.bas.bg, Институт математики и информатики, БАН, София, Болгария.

[3]Дербов Владимир Леонардович, Мельников Леонид Аркадьевич, Серов Владислав Викторович, e-mail: derbov@sgu.ru, Саратовский государственный университет, Саратов, 410026, Россия.

в атомной системе единиц ($\hbar = m_e = e = 1$). Здесь $\gamma = B/B_0$, $B_0 \cong 2.35 \times 10^9 G$ – безразмерный параметр, характеризующий магнитное поле B.

Волновые функции $\Psi(r,\eta) \equiv \Psi^{m\sigma}(r,\eta)$ в каждом подпространстве $\mathbf{H_{m\sigma}}$ гильбертова пространства удовлетворяют краевым условиям на границе области Ω

$$\lim_{\eta\to\pm 1}(1-\eta^2)\frac{\partial\Psi(r,\eta)}{\partial\eta} = 0, \text{ если } m=0; \quad \Psi(r,\pm 1) = 0, \text{ если } m \neq 0; \tag{3}$$
$$\frac{\partial\Psi(r,0)}{\partial\eta} = 0, \text{ если } \sigma = +1; \quad \Psi(r,0) = 0, \text{ если } \sigma = -1; \quad \lim_{r\to 0} r^2 \frac{\partial\Psi(r,\eta)}{\partial r} = 0.$$

Волновые функции дискретного спектра $\boldsymbol{\epsilon} \equiv \{\epsilon_{i=1,\mathrm{v}}\}_{\mathrm{v}=1}^{\mathrm{v}_{\max}}$ при больших $r = r_{\max}$ подчиняются краевому условию первого рода

$$\lim_{r\to\infty} r^2\Psi(r,\eta) = 0 \ \to \ \Psi(r_{\max},\eta) = 0, \tag{4}$$

и условию нормировки

$$\int_0^{r_{\max}}\int_{-1}^{1} r^2|\Psi(r,\eta)|^2 dr d\eta = 1. \tag{5}$$

Волновые функции непрерывного спектра при больших $r = r_{\max}$ и фиксированном значении энергии $\epsilon = \epsilon_{i_o}$ подчиняются краевому условию третьего рода

$$\frac{\partial\Psi(r,\eta)}{\partial r} - \mu\,\Psi(r,\eta) = 0. \tag{6}$$

Согласно известной теореме, существует функция $\mu \equiv \mu(r_{\max},\epsilon)$ такая, что уравнение (6) удовлетворяется при любом конечном значении r.

2. Метод решения. Решение $\Psi_i^{m\sigma}(r,\eta)$ ищем в виде разложения по набору одномерных базисных функций $\Phi_j(\eta;r) \equiv \Phi_j^{m\sigma}(\eta;r) \in L_2([-1,1])$ при фиксированных значениях m и четности σ:

$$\Psi_i^{m\sigma}(r,\eta) = \sum_{j=1}^{j_{\max}} \Phi_j^{m\sigma}(\eta;r)\chi_j^{(i)}(r). \tag{7}$$

Здесь функции $\Phi_j(\eta;r)$ при каждом фиксированном значении параметра r являются решениями одномерной параметрической задачи на собственные значения

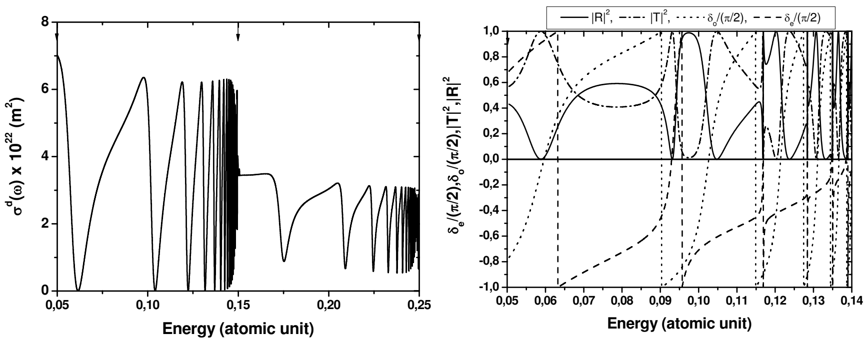
$$\hat{A}^{(0)}(r,\eta)\Phi_j(\eta;r) = E_j(r)\Phi_j(\eta;r), \qquad \int_{-1}^{1}\Phi_i(\eta;r)\Phi_j(\eta;r)d\eta = \delta_{ij}. \tag{8}$$

Подставляя разложение (7) в уравнения (1), (2) с учетом (8), получаем краевую задачу для системы обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка относительно неизвестного вектора $\boldsymbol{\chi}^{(i)}(r) = \{\chi_j^{(i)}(r)\}_{j=1}^{j_{\max}}$:

$$\left(-\mathbf{I}\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}r^2\frac{d}{dr} + \frac{\mathbf{U(r)}}{r^2} + \mathbf{Q}(r)\frac{d}{dr} + \frac{1}{r^2}\frac{dr^2\mathbf{Q}(r)}{dr}\right)\boldsymbol{\chi}^{(i)}(r) = \epsilon_i\,\mathbf{I}\boldsymbol{\chi}^{(i)}(r), \tag{9}$$

где $\mathbf{I}$ – единичная матрица, $\mathbf{U}(r)$ и $\mathbf{Q}(r)$ – матрицы размерности $j_{\max}\times\, j_{\max}$:

$$\begin{aligned} U_{ij}(r) &= \frac{E_i(r)+E_j(r)-4Zr}{2}\delta_{ij} + r^2 H_{ij}(r),\\ H_{ij}(r) &= \int_{-1}^{1}\frac{\partial\Phi_i(\eta;r)}{\partial r}\frac{\partial\Phi_j(\eta;r)}{\partial r}d\eta = H_{ji}(r),\\ Q_{ij}(r) &= -\int_{-1}^{1}\Phi_i(\eta;r)\frac{\partial\Phi_j(\eta;r)}{\partial r}d\eta = -Q_{ji}(r). \end{aligned} \tag{10}$$



(а) (б)

Рис. 1. Сечения фотоионизации из $1s_0$-состояния (а); коэффициенты прохождения $|\hat{\mathbf{T}}|^2$ и отражения $|\hat{\mathbf{R}}|^2$ четные $\mu_1=\delta_e$ и нечетные $\mu_1=\delta_o$ фазовые сдвиги из уравнения (14) (б) в зависимости от энергии E для $\gamma=1\times10^{-1}$ и конечного состояния с $\sigma=-1$, $Z=1$, $m=0$. Стрелки указывают на пороги Ландау $E_{i_o}=\epsilon^{th}_{mi_o}/2$

Ограниченные и регулярные решения $\boldsymbol{\chi}^{(i)}(r)$ подчиняются краевым условиям при $r\to0$:

$$\lim_{r\to0} r^2\left(\frac{d\boldsymbol{\chi}^{(i)}(r)}{dr}-\mathbf{Q}(r)\boldsymbol{\chi}^{(i)}(r)\right)=0. \tag{11}$$

Решения дискретного спектра $\boldsymbol{\epsilon}\equiv\{\epsilon_{i=1,\mathrm{v}}\}_{\mathrm{v}=1}^{\mathrm{v}_{\max}}$, соответствующие неизвестным собственным значениям $\epsilon_{i,\mathrm{v}}$, подчиняются краевым условиям

$$\lim_{r\to\infty} r^2\boldsymbol{\chi}^{(i)}(r)=0\to\boldsymbol{\chi}^{(i)}(r_{\max})=0 \tag{12}$$

и условиям ортонормировки

$$\int_0^{r_{\max}} r^2(\boldsymbol{\chi}^{(i)}(r))^T\boldsymbol{\chi}^{(j)}(r)dr=\delta_{ij}. \tag{13}$$

Для непрерывного спектра при фиксированной энергии $\epsilon=\epsilon_{i_o}$ и переменной $r=r_{\max}$ набор ограниченных решений $\boldsymbol{\chi}(r)=\{\boldsymbol{\chi}^{(i)}(r)\}_{i=1}^{N_o}$, $N_o\le j_{\max}$ подчиняется краевому условию третьего рода с матрицей неизвестных фазовых сдвигов $\boldsymbol{\Lambda}=\{\delta_{ij}\mu_i\}_{i,j=1}^{N_o}$

$$\frac{d\boldsymbol{\chi}(r)}{dr}-\mathbf{Q}(r)\boldsymbol{\chi}(r)=\boldsymbol{\chi}(r)\boldsymbol{\Lambda}, \tag{14}$$

где N_o – число открытых каналов, для которых $p^2_{i_o}=2E-\epsilon^{th}_{mi_o}>0$, $\epsilon^{th}_{mi_o}=$ $=\gamma(2i_o-1+m+|m|)$, или с неизвестной несимметричной матрицей $\mathbf{R}$ размерностью $j_{\max}\times j_{\max}$

$$\frac{d\boldsymbol{\chi}(r)}{dr}=\mathbf{R}\boldsymbol{\chi}(r),\quad r=r_{\max}. \tag{15}$$

3. Алгоритмы решения и пакет программ. Для редукции исходной двумерной задачи к системе радиальных уравнений, решаемой на конечном интервале $r\in(0,r_{\max})$ с краевыми условиями третьего рода, разработан набор символьно-численных алгоритмов [3] решения параметрической задачи на собственные значения и вычисления эффективных потенциалов, включая построение асимптотик

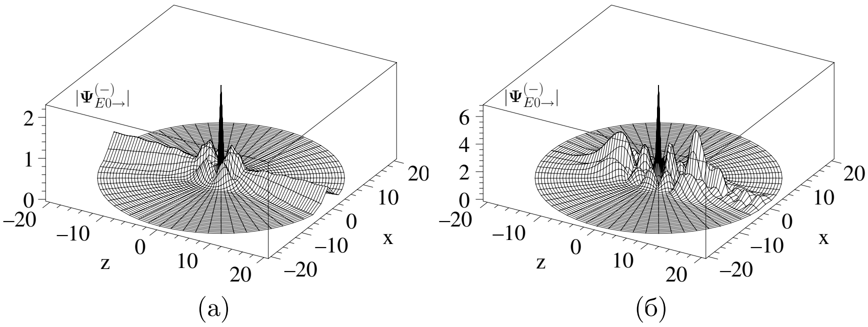


Рис. 2. Профили в плоскости zx волновой функции непрерывного спектра $|\mathbf{\Psi}^{(-)}_{Em\to}|$ с $Z = 1$, $m = 0$ и $\gamma = 1 \times 10^{-1}$. Резонансное прохождение при энергии $E = 0.05885$ а.е. (а) и полное отражение при энергии $E = 0.11692$ а.е (б) соответствуют значениям $|\hat{\mathbf{T}}|^2 = 1$ и $|\hat{\mathbf{R}}|^2 = 1$ при указанных значениях E на рис. 1б

эффективных потенциалов и решений радиальных уравнений при малых и больших значениях параметра r. Структура символьно-численных алгоритмов пакета POTHMF [5], реализованного в среде FORTRAN, следующая:

EIGENF вычисляет численные значения угловых сплюснутых сфероидальных функций $\Phi_i \equiv \mathbf{\Phi}^{m\sigma}(\eta; r)$ по переменной $\eta \in [-1, 1]$, зависящих от параметра r, на сетке значений из конечного интервала $r \in [0, r_{\max}]$.

MATRM вычисляет численные значения матричных элементов $Q_{ij}(r)$, $H_{ij}(r)$ на сетке значений радиальной переменной из конечного интервала $r \in [0, r_{\max}]$.

MATRA вычисляет в аналитическом виде коэффициенты асимптотических разложений матричных элементов $(i, j = 1, \ldots, j_{\max})$ при больших значениях радиальной переменной $r \gg 1$.

ASYMRS вычисляет в аналитическом виде асимптотики фундаментальных решений системы дифференциальных уравнений второго порядка по радиальной переменной при $r > r_{\max}$ и $rp_{i_o} \gg 1$, используемых для построения краевых условий на редуцированном интервале.

KANTBP [4] вычисляет численные значения решения (дискретного или непрерывного спектра) краевых задач (9)–(15) для системы дифференциальных уравнений на сетке значений радиальной переменной из конечного интервала $r \in [0, r_{\max}]$.

DIPPOT вычисляет дипольные матричные элементы оптического перехода, используя решения задач дискретного и непрерывного спектра, полученные с помощью KANTBP.

4. Сечения фотоионизации. Схема расчета сечения фотоионизации с помощью пакета программ KANTBP и POTHMF представлена ниже. Собственные функции непрерывного спектра $\Psi_i^{Em\sigma}(r, \eta)$ при фиксированном $\epsilon = 2E$ имеют вид

$$\Psi_i^{Em\sigma}(r, \eta) = \sum_{j=1}^{j_{\max}} \Phi_j^{m\sigma}(\eta; r)\hat{\chi}_{ji}^{(m\sigma)}(E, r), \quad i = 1, \ldots, N_o, \tag{16}$$

где $\hat{\boldsymbol{\chi}}^{(m\sigma)}(E, r)$ – радиальная компонента волновой функции с заданной четностью σ. Функция $\Psi_i^{Em\sigma}(r,\eta)$ нормирована условием

$$\left\langle \Psi_i^{Em\sigma}(r,\eta) \middle| \Psi_{i'}^{E'm'\sigma'}(r,\eta) \right\rangle = \sum_{j=1}^{j_{\max}} \int_0^\infty r^2 dr \left(\hat{\chi}_{ji}^{(m\sigma)}(E,r)\right)^* \hat{\chi}_{ji'}^{(m'\sigma')}(E',r) =$$
$$= \delta(E-E')\delta_{mm'}\delta_{\sigma\sigma'}\delta_{ii'}. \tag{17}$$

Вещественнозначная радиальная функция $\hat{\boldsymbol{\chi}}^{(m\sigma)}(E,r)$ выражается через $\boldsymbol{\chi}^{(p)}(r)$, решение уравнения (9), удовлетворяющее граничному условию типа "стоячих волн":

$$\hat{\boldsymbol{\chi}}^{(m\sigma)}(E,r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\boldsymbol{\chi}^{(p)}(r)\mathbf{C}\cos\boldsymbol{\delta} \tag{18}$$

и имеет стандартную асимптотическую форму [4]

$$\boldsymbol{\chi}^{(p)}(r) = \boldsymbol{\chi}^s(r) + \boldsymbol{\chi}^c(r)\,\mathbf{K}, \quad \mathbf{K}\,\mathbf{C} = \mathbf{C}\tan\boldsymbol{\delta}, \quad \mathbf{C}\mathbf{C}^T = \mathbf{C}^T\mathbf{C} = \mathbf{I}_{oo}, \tag{19}$$

где $\mathbf{K} \equiv \mathbf{K}_\sigma$ – короткодействующая матрица реакции, $\tan\boldsymbol{\delta}$ – ее собственные значения и $\mathbf{C}$ – ортогональная матрица соответствующих собственных функций, $\mathbf{I}_{oo}$ – единичная матрица размерности $N_o \times N_o$. Функции $\boldsymbol{\chi}^s(r)$ и $\boldsymbol{\chi}^c(r)$, соответствующие регулярным и нерегулярным кулоновским функциям, заданы в виде мнимой $\boldsymbol{\chi}^s(r) = 2\Im(\boldsymbol{\chi}(r))$ и вещественной $\boldsymbol{\chi}^c(r) = 2\Re(\boldsymbol{\chi}(r))$ частей компоненты асимптотического решения со старшим членом

$$\chi_{ji_o}(r\to\infty) = \frac{\exp(\imath\, p_{i_o} r + \imath\,\zeta \ln(2p_{i_o} r) + \imath\,\delta_{i_o}^c)}{2r\sqrt{p_{i_o}}}\delta_{ji_o}, \tag{20}$$

где p_{i_o} – импульс в канале, $\zeta \equiv \zeta_{i_o} = Z/p_{i_o}$ – параметр Зоммерфельда, $\delta_{i_o}^c = \arg\Gamma(1-\imath\zeta)$ – кулоновский фазовый сдвиг [7]. Регулярные и нерегулярные функции при больших r удовлетворяют соотношению с обобщенным Вронскианом [4]

$$\mathbf{Wr}(\mathbf{Q}(r); \boldsymbol{\chi}^c(r), \boldsymbol{\chi}^s(r)) = \mathbf{I}_{oo}. \tag{21}$$

Вычислив $\mathbf{R}$ матрицу [4, 5], получаем уравнения, содержащие матрицу реакции $\mathbf{K}$ при $r = r_{\max}$:

$$\left(\mathbf{R}\boldsymbol{\chi}^c(r) - \frac{d\boldsymbol{\chi}^c(r)}{dr}\right)\mathbf{K} = \left(\frac{d\boldsymbol{\chi}^s(r)}{dr} - \mathbf{R}\boldsymbol{\chi}^s(r)\right). \tag{22}$$

Если есть закрытые каналы, то матрицы, входящие в (22) являются прямоугольными. В этом случае матрица реакции $\mathbf{K}$ может быть представлена в виде

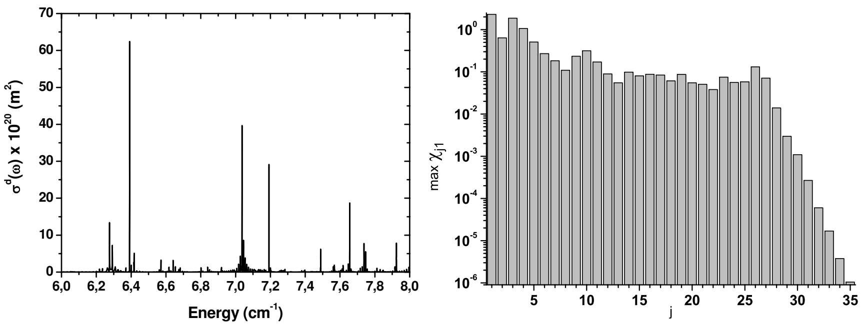
$$\mathbf{K} = -\mathbf{X}^{-1}(r_{\max})\mathbf{Y}(r_{\max}), \tag{23}$$

где $\mathbf{X}(r)$ и $\mathbf{Y}(r)$ – матрицы размерностью $N_o \times N_o$ и определяются соотношениями

$$\mathbf{X}(r) = \left(\frac{d\boldsymbol{\chi}^c(r)}{dr} - \mathbf{R}\boldsymbol{\chi}^c(r)\right)_{oo}, \quad \mathbf{Y}(r) = \left(\frac{d\boldsymbol{\chi}^s(r)}{dr} - \mathbf{R}\boldsymbol{\chi}^s(r)\right)_{oo}. \tag{24}$$

Радиальные компоненты "падающих" волн также выражаются через радиальные компоненты "стоячих" волн и короткодействующие матрицы реакции $\mathbf{K}$:

$$\hat{\boldsymbol{\chi}}^{(m\sigma)}(E,r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\boldsymbol{\chi}^-(r) = \imath\sqrt{\frac{2}{\pi}}\boldsymbol{\chi}^{(p)}(r)(\mathbf{I}_{oo} + \imath\,\mathbf{K})^{-1} \tag{25}$$



(a) (б)

Рис. 3. (a). Сечения фотоионизации из состояний дискретного спектра $3s_0$ в зависимости от энергии E для $\gamma = 2.595 \times 10^{-5}$ и конечного состояния с $\sigma = -1$, $Z = 1$, $m = 0$. (b). Максимумы абсолютных значений компонент радиальных функций $\chi_{j1}(E,r)$ при $E = 6.0cm^{-1}$ и $j_{\max} = 35$ в зависимости от номера компоненты j

и при $r \to \infty$ имеют вид

$$\hat{\boldsymbol{\chi}}^{(m\sigma)}(E,r) = \sqrt{\frac{2}{\pi}}(\boldsymbol{\chi}(r) - \boldsymbol{\chi}^*(r)\mathbf{S}^\dagger). \tag{26}$$

Здесь $\mathbf{S}$ – короткодействующая матрица рассеяния, которая выражается через матрицу рассеяния $\check{\mathbf{S}}_\sigma$ и кулоновский фазовый сдвиг $\boldsymbol{\delta}^c$, а также матрицу реакции $\mathbf{K}$:

$$\mathbf{S} \equiv \mathbf{S}_\sigma = \exp(-\imath\boldsymbol{\delta}^c)\,\check{\mathbf{S}}_\sigma\,\exp(-\imath\boldsymbol{\delta}^c) \qquad \mathbf{S}^\dagger\mathbf{S} = \mathbf{S}\mathbf{S}^\dagger = \mathbf{I}_{oo}, \tag{27}$$

$$\mathbf{K} = \imath(\mathbf{I}_{oo} + \mathbf{S})^{-1}(\mathbf{I}_{oo} - \mathbf{S}),\ \mathbf{S} = (\mathbf{I}_{oo} + \imath\,\mathbf{K})(\mathbf{I}_{oo} - \imath\,\mathbf{K})^{-1}. \tag{28}$$

Полная волновая функция с асимптотикой вида “волны, падающие на центр + исходящая волна” имеет вид

$$\boldsymbol{\Psi}^{(-)}_{Em\hat{v}}(r,\eta) \equiv \boldsymbol{\Psi}^{(-)}_{Em\rightleftarrows}(r,\eta) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\boldsymbol{\Psi}^{Em\sigma=+1}(r,\eta) \pm \boldsymbol{\Psi}^{Em\sigma=-1}(r,\eta)\right)\exp(-\imath\boldsymbol{\delta}^c) \tag{29}$$

и соответствует волновой функции $|E\hat{v}mN_\rho\rangle$ в цилиндрических координатах (ρ,z,φ), описывающей ионизацию атома [6]

$$|E\hat{v}mN_\rho\rangle = \frac{\exp(\imath m\varphi)}{2\pi}\sum_{n'=1}^{j_{\max}}\Phi_{n'}(\rho)\chi^{(-)}_{Em\hat{v}n'n}(z). \tag{30}$$

Здесь $\Phi_{n'}(\rho)$ – собственные функции двумерного осциллятора, $\chi^{(-)}_{Em\hat{v}n'n}(z)$ – продольные компоненты с асимптотикой

$$\boldsymbol{\chi}^{(-)}_{E\hat{v}}(z \to \pm\infty) = \left\{\begin{array}{ll} \left\{\begin{array}{ll} \mathbf{X}^{(+)}(z) + \mathbf{X}^{(-)}(z)\hat{\mathbf{R}}^\dagger, & z > 0, \\ \mathbf{X}^{(+)}(z)\hat{\mathbf{T}}^\dagger, & z < 0, \end{array}\right. & ,\quad \hat{v} = \rightarrow, \\ \left\{\begin{array}{ll} \mathbf{X}^{(-)}(z)\hat{\mathbf{T}}^\dagger, & z > 0, \\ \mathbf{X}^{(-)}(z) + \mathbf{X}^{(+)}(z)\hat{\mathbf{R}}^\dagger, & z < 0, \end{array}\right. & ,\quad \hat{v} = \leftarrow, \end{array}\right. \tag{31}$$

где коэффициенты матрицы $\mathbf{X}^{(\pm)}(z)$ определяются выражением

$$X^{(\pm)}_{n'n}(z) = p_{n'}^{-1/2}\exp\left(\pm\imath p_{n'}z \pm \imath\frac{Z}{p_{n'}}\frac{z}{|z|}\ln(2p_{n'}|z|)\right)\delta_{n'n}. \tag{32}$$

Заметим, что $\boldsymbol{\chi}^{(+)}_{E\leftrightarrows}(z)=\left(\boldsymbol{\chi}^{(-)}_{E\rightleftarrows}(z)\right)^*$. Функции нормированы на

$$\sum_{n''=1}^{j_{\max}}\int_{-\infty}^{\infty}\left(\chi^{(\pm)}_{E'm\hat{v}'n''n'}(z)\right)^*\chi^{(\pm)}_{Em\hat{v}n''n}(z)dz=2\pi\delta(E'-E)\delta_{\hat{v}'\hat{v}}\delta_{n'n}. \tag{33}$$

$\hat{\mathbf{S}}$-матрица составляется из матриц прохождения $\hat{\mathbf{T}}$ и отражения $\hat{\mathbf{R}}$ в виде

$$\hat{\mathbf{S}}=\left(\begin{array}{cc}\hat{\mathbf{T}} & \hat{\mathbf{R}}\\ \hat{\mathbf{R}} & \hat{\mathbf{T}}\end{array}\right). \tag{34}$$

Ее унитарность следует из условий $\hat{\mathbf{T}}^\dagger\hat{\mathbf{T}}+\hat{\mathbf{R}}^\dagger\hat{\mathbf{R}}=\mathbf{I}_{oo}$ и $\hat{\mathbf{R}}^\dagger\hat{\mathbf{T}}+\hat{\mathbf{T}}^\dagger\hat{\mathbf{R}}=\mathbf{0}$. Матрицы прохождения $\hat{\mathbf{T}}$ и отражения $\hat{\mathbf{R}}$ связаны с матрицами рассеяния $\check{\mathbf{S}}_\sigma$ соотношениями

$$\hat{\mathbf{T}}=\frac{1}{2}(-\check{\mathbf{S}}_{+1}+\check{\mathbf{S}}_{-1}),\quad \hat{\mathbf{R}}=\frac{1}{2}(-\check{\mathbf{S}}_{+1}-\check{\mathbf{S}}_{-1}). \tag{35}$$

В случае линейно-поляризованного света сечения фотоионизации $\sigma^d_{m\sigma\sigma'}(\omega)\equiv$ $\equiv\sigma^d_{Nlm}(\omega)$ определялись по формуле

$$\sigma^d_{Nlm}(\omega)=4\pi^2\alpha\omega\sum_{i=1}^{N_o}\left|D^{m\sigma\sigma'}_{i,N,l}(E)\right|^2a_0^2, \tag{36}$$

$$D^{m\sigma\sigma'}_{i,i',\mathrm{v}'}(E)=\left\langle\Psi_i^{Em\sigma=\mp1}(r,\eta)\middle|r\eta\middle|\Psi_{i'\mathrm{v}'}^{m\sigma'=\pm1}(r,\eta)\right\rangle=$$
$$=\sum_{j=1}^{j_{\max}}\int_0^{r_{\max}}r^2dr\hat{\chi}^{(m\sigma=\mp1)}_{ji}(E,r)d^{(m\sigma\sigma')}_{ji'\mathrm{v}'}(r), \tag{37}$$

$$d^{(m\sigma\sigma')}_{ji'\mathrm{v}'}(r)=\sum_{j'=1}^{j_{\max}}\left\langle\Phi_j^{m\sigma=\mp1}(\eta;r)\middle|r\eta\middle|\Phi_{j'}^{m\sigma'=\pm1}(\eta;r)\right\rangle_\eta\chi^{(m\sigma'=\pm1)}_{j'i'\mathrm{v}'}(r). \tag{38}$$

Здесь $\omega=E-E_{Nlm}$ - частота электромагнитной волны, $E_{Nlm}\equiv E_{m\sigma'i'\mathrm{v}'}$ - энергия начального связанного состояния $|Nlm\rangle=\Psi^{m\sigma'}_{i'\mathrm{v}'}(r,\eta)$. Решение непрерывного спектра $\boldsymbol{\chi}^{(p)}(r)$, имеющее асимптотику “стоячей” волны, и матрица реакции $\mathbf{K}$, используемая при вычислении (18) или (26), а также решение дискретного спектра $\boldsymbol{\chi}(r)$ и соответствующее собственное значение $E_{m\sigma'i'=1\mathrm{v}'}$ вычисляются с помощью программы KANTBP. Тестовые результаты работы пакета POTHMF представлены на рис. 1, 2 с необходимыми пояснениями. Как следует из рисунков, имеют место немонотонная зависимость сечения фотоионизации от энергии электрона и эффекты резонансного прохождения и полного отражения разноименно заряженных частиц в однородном магнитном поле, связанные с существованием серии квазистационарных состояний, погруженных в непрерывный спектр, обсуждение которых дано в [6]. Время счета сечения при заданной энергии E непрерывного спектра (при $j_{\max}=10$) на компьютере AMD ATHLON 3GHz, 2GB RAM, WINDOWS XP составляет 18 секунд. На рис. 3 представлены фрагмент сечения фотоионизации выше первого порога $E_1=5.69cm^{-1}$ для лабораторного магнитного поля $B\sim 6\,T$ и линейная скорость сходимости разложения (7) при $j_{\max}=35$ по числу базисных функций с $j\geq 26$.

Заключение. Эффективность работы метода, алгоритмов и пакета программ продемонстрирована на типичных примерах расчета сечений фотоионизации атома водорода в магнитном поле, эффектов резонансного прохождения и полного отражения заряженных частиц в поперечном запирающем потенциале, что позволяет оценить необходимые ресурсы ЭВМ для решения данного класса задач и возможности его применения для расчета лазерно-стимулированной рекомбинации антиводорода [1, 6], ионизации двухчастичных квантовых систем во внешних полях [8] и каналирования легких ядер в тонких пленках с примесями [9].

Работа частично поддержана РФФИ 07-01-00660, CRDF BRHE REC-006, SR-006-X1/B75M06 Y3-P-06-08, БААЭ (2004-2007).

Список литературы

[1] **Серов, В.В.** / В.В. Серов, В.Л. Дербов, С.И. Виницкий // Оптика и Спектроскопия. – 2007. Т. 102. – С. 612.

[2] **Guest, J.R.** / J.L. Guest, J.-H. Choi, G. Raithel // Phys. Rev. A. – 2003. – V. 68. – P. 022509.

[3] **Виницкий, С.И.** / С.И. Виницкий [и др.] // Программирование. – 2007. – Т. 2. – С. 105.

[4] **Chuluunbaatar, O.** / O. Chuluunbaatar [et al.] // Comput. Phys. Commun. – 2007. – V. 177. – P. 649.

[5] **Chuluunbaatar, O.** / O. Chuluunbaatar [et al.] // Comput. Phys. Commun. – 2007. doi:10.1016/j.cpc.2007.09.005.

[6] **Chuluunbaatar, O.** / O. Chuluunbaatar [et al.] // J. Phys. A. – 2007. – V. 40. – P. 11485.

[7] **Абрамовиц М.** Справочник по специальным функциям / М. Абрамович, И. Стиган – Москва: Наука, 1979.

[8] **Serov, V.V.** / V.V. Serov [et al.] // Phys. Rev. A. – 2007. – V. 75. – P. 012715.

[9] **Demkov, Yu.N.** / Yu.N. Demkov, J.D. Meyer // Eur. Phys. J. B. – 2004. – V. 42. – P. 361.

THE PHOTOIONIZATION OF A HYDROGEN LIKE ATOM IN A MAGNETIC FIELD

© 2007 O. Chuluunbaatar[1], A.A. Gusev[1], S.I. Vinitsky[1], M.S. Kaschiev[2], V.L. Derbov[3], L.A. Melnikov[3], V.V. Serov[3]

Abstract

Brief description of the mathematical model, method, set of symbolic-numerical algorithms and program package for solving a boundary problem for discrete and continuous spectra of a hydrogen-like atom in a homogeneous magnetic field and calculation of a photoionization cross-section is presented. It is shown, that a nonmonotonic dependence of the photoionization cross-section is connected with existence of series of quasistationary states embedded in continuum spectrum. Effects of the resonance transmission and total reflection of the opposite charged particles in a homogeneous magnetic field are manifested.

[1]Chuluunbaatar Ochbadrakh, Gusev Alexander Alexandrovich, Vinitsky Sergue Ilyich, e-mail: vinitsky@theor.jinr.ru, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, 141980, Russia.

[2]Michail Kaschiev, e-mail: kaschiev@math.bas.bg, Institute of Mathematics and Informatics, Sofia, Bulgaria.

[3]Derbov Vladimir Leonardovich, Melnikov Leonid Arkadievich, Serov Vladislav Victorovich, e-mail: derbov@sgu.ru, Saratov State University, Saratov, 410026, Russia.