

САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи



Руднев Владимир Александрович

ИССЛЕДОВАНИЕ НОВЫХ ЭФФЕКТОВ В СТАЦИОНАРНЫХ
И НЕСТАЦИОНАРНЫХ СИСТЕМАХ НЕСКОЛЬКИХ ТЕЛ

01.04.02 — теоретическая физика

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора физико-математических наук

Санкт-Петербург
2018

Работа выполнена в Санкт-Петербургском государственном университете.

Научный консультант: доктор физико-математических наук,
проф. ЯКОВЛЕВ Сергей Леонидович

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук,
проф. ВИНИЦКИЙ Сергей Ильич
Объединенный Институт Ядерных Исследований,
ведущий научный сотрудник;
доктор физико-математических наук,
проф. РОЗАНОВ Николай Николаевич,
Государственный Оптический Институт им. С.И. Вавилова,
начальник отдела теоретических исследований;
доктор физико-математических наук
ПЕНЬКОВ Федор Михайлович,
Институт Ядерной Физики
Министерства энергетики Республики Казахстан,
заведующий лабораторией теоретической ядерной физики.

Ведущая организация: Российский государственный
педагогический университет им. А.И. Герцена
(Санкт-Петербург).

Защита диссертации состоится “31” мая _____ 2018 года в __ часов на заседании совета Д 212.232.24 по защите докторских и кандидатских диссертаций при Санкт-Петербургском государственном университете по адресу: Санкт-Петербург, Средний пр., В.О., д.41/43, ауд. 304.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке Санкт-Петербургского государственного университета по адресу: 199034, Санкт-Петербург, Университетская наб., д. 7/9 и на сайте <https://disser.spbu.ru>

Автореферат разослан “__” _____ 2018 года.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
доктор физико-математических наук



Аксёнова Е.В.

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования

Последние десятилетия в области экспериментального исследования квантовых систем получены новые важные результаты. Так, например, исследование стабильности Бозе-Эйнштейновских конденсатов привело к созданию экспериментальных техник, позволивших пронаблюдать давно предсказанный Ефимовым эффект роста числа связанных состояний - либо аналогичных резонансов - в трёхчастичной системе при ослаблении эффективного парного взаимодействия между компонентами системы. Работы над совершенствованием импульсных лазеров привели к возможности исследовать временную динамику молекулярных систем в процессе их взаимодействия с лазерным импульсом. Такой прогресс в технике эксперимента, открывающий новые возможности получения информации о сложных квантовых системах, позволяет ставить новые научные задачи, связанные с моделированием таких систем, теоретическим описанием и объяснением наблюдаемых явлений. В то же время, численное моделирование квантовых систем в режимах, близких к доступным в экспериментальных условиях, позволяет выявлять новые эффекты, находящиеся на грани доступных для экспериментального наблюдения.

В представленной диссертации описаны именно такие вычислительные эксперименты, которые, с одной стороны, могут рассматриваться как моделирование процессов, наблюдаемых в эксперименте, и, тем самым, обогащают наше понимание процессов, наблюдаемых в современных экспериментах. С другой стороны, эти вычислительные эксперименты ставят важные теоретические и новые экспериментальные задачи. Некоторые из таких теоретических задач решены в представленной работе.

Разработанность темы исследования

Темы, затронутые в исследовании, имеют продолжительную историю. Первой работой по квантовой задаче трёх тел можно считать статью Хиллера 1929 года. Историю работ по взаимодействию квантовых систем с излучением можно, вероятно, вести от классической работы Эйнштейна 1905-го года. За прошедшее столетие обе эти темы получили множественное развитие, поэтому отметим здесь лишь некоторые аспекты этих тем, наиболее близкие к представленному здесь исследованию.

В части работы, касающейся процессов рассеяния в системах нескольких тел, важнейшими представляются следующие аспекты. Прежде всего, отметим эффект Ефимова. В работе 1970 года Ефимовым было показано, что при наличии порогового виртуального состояния в двухчастичной системе, когда длина рассеяния в системе двух частиц стремится к бесконечности, в соответствующей трёхчастичной системе появляется бесконечное число связанных состояний. При этом детали парного взаимодействия в системе трёх частиц не играют роли. В этом отношении, взаимодействие в системе трёх тел носит универсальный, не зависящий от деталей взаимодействия характер. В 1968 году Филлипсом было приведено эмпирическое наблюдение: для разных потенциальных моделей взаимодействия в системах трёх нуклонов наблюдается линейное соотношение между длиной рассеяния нейтрона на дейтроне и энергией тритона. Это наблюдение было подробно рассмотрено в работах Ефимова и Ткаченко, интерпретировавших линию Филлипса с точки зрения модели нулевого радиуса взаимодействия, и показавших, что линейный характер связи является ар-

тефактом более общей нелинейной зависимости, рассмотренной в малом масштабе. В работе автора [7], выполненной на основе высокоточного численного исследования уравнений Фаддеева и уравнений Скорнякова-Тер-Мартиросяна, была выявлена более универсальная связь между двух- и трёхчастичными наблюдаемыми в окрестности двухчастичного порога. Эта связь позволяет идентифицировать универсальный, ефимовский режим взаимодействия в системе трёх тел на основе простого сопоставления данных с предложенной автором диссертации универсальной кривой.

Для проведения высокоточных расчётов был разработан оригинальный подход к решению уравнений Фаддеева. Он опирался на несколько групп работ. Ключевыми идеями явились представление полного момента, метод тензорной факторизации. Представление полного момента для системы нескольких тел разрабатывалось с 1950-х годов. Применение такого представления в рамках адиабатического подхода было рассмотрено в работе Виницкого и Пономарёва. В серии работ Квицинского и др. были рассмотрены уравнения Фаддеева в представлении полного момента, описаны асимптотики решений, проведен ряд вычислений для низкоэнергетического рассеяния и связанных состояний в кулоновских системах. Метод тензорной факторизации был предложен в работах Schellingrhout'a и др. В работах автора метод тензорной факторизации был впервые применен к уравнениям Фаддеева в представлении полного момента. Автором был предложен новый вариант реализации метода тензорной факторизации, приводящий к существенному сокращению размерности возникающих линейных алгебраических задач.

В качестве основного тестового примера в работе используется система из трёх атомов гелия, как один из наиболее хорошо теоретически исследованных квантовых трёхчастичных объектов. Ранние оценки энергии связи тримера гелия можно отнести к началу 1970-х годов. Высказывались предположения о том, что тример гелия может представлять собой пример физической ефимовской системы. В течение 80-х и 90-х годов большая работа была проведена в области разработки модельных потенциалов взаимодействия атомов гелия, как эмпирических, основанных на подгонке экспериментальных данных для вириальных коэффициентов, так и построенных *ab initio*. Эти модельные потенциалы использовались во многих расчётах тримера гелия, а также в расчётах рассеяния атома на димере. Таким образом, систему трёх атомов гелия с одной стороны, можно считать хорошо исследованной системой, с другой стороны - достаточно сложным для численного моделирования объектом, что обусловило её выбор в качестве тестового объекта. При детальном исследовании имеющихся моделей системы трёх атомов гелия, в процессе тестирования компьютерного кода, автором были выявлены некоторые противоречия в данных, приводившихся в литературе разными авторами. Как было показано, эти противоречия происходят не только из систематических либо численных погрешностей вычислений, но и из неточностей использованных в расчётах фундаментальных констант.

Для той части работы, которая относится к исследованию квантовых систем нескольких тел в сильных лазерных полях, можно отметить следующие наиболее важные аспекты тематики. Развитие лазерной техники привело к возможности исследования динамики химических процессов с помощью фемтосекундных лазерных импульсов. Пионерские работы Zewail'a в этой области (Нобелевская премия по химии 1998 года) дали толчок для дальнейшего развития лазерной технологии и тех-

ники эксперимента, связанной со взаимодействием молекулярных систем с короткими интенсивными лазерными импульсами. Многие аспекты такого взаимодействия были выявлены к началу 2000-х годов, включая явления надпороговой диссоциации, механизмы ослабления и усиления молекулярных связей, усиленной ионизации. Значительный вклад в исследование динамики квантовых систем в сильных лазерных полях внесли работы Д. Тельнова и Shih-I Chu. Появление источников сильных коротких электромагнитных импульсов, допускающих контроль фазы, привело к первым наблюдениям фазовых эффектов на конечном состоянии системы в экспериментах по многофотонной ионизации атомов. Автором работы впервые в численном эксперименте была предсказана возможность влияния фазы импульса на процессы диссоциации молекулярных систем. Возникли задачи выявления условий, в которых фаза импульса оказывает влияние на конечное состояние молекулярной системы, выявления условий наблюдаемости таких эффектов. Решению этих задач посвящены последние главы диссертации. В частности, была решена более общая задача о построении теории влияния фазы импульса на конечное состояние системы для произвольных нерелятивистских квантовых систем.

Вычислительные аспекты моделирования взаимодействия молекулярных систем с интенсивными лазерными импульсами связаны с применением техники скалированных координат, впервые предложенной в работе Соловьёва и Виницкого, в модификации, предложенной Sidky и Esry. Автором была выявлена возможность использования этой техники для получения плотности распределения фрагментов реакции по энергии без преобразования волновой функции в импульсное пространство.

Цели и задачи

Целью настоящей работы является теоретическое и численное исследование эффектов и явлений в системах нескольких тел, обнаружение которых стало возможным либо станет возможным в ближайшем будущем благодаря развитию передовых техник эксперимента.

Приведенные в диссертации результаты можно условно разделить на две группы: полученные на основе исследования динамики квантовых систем в стационарной постановке, и полученные в результате прямого моделирования квантовой динамики нестационарной системы. В каждой из описанных групп задач получены новые результаты.

К первой группе задач можно отнести задачи, связанные с исследованием столкновений в системах двух и трёх частиц. В этой группе задач получены описания новых эффектов, экспериментальное наблюдение которых на сегодняшний день находится на границе возможностей современных экспериментальных техник. В этой группе рассмотрены два класса систем: бинарное столкновение точечных диполей и трёхчастичные бинарные столкновения (2+1). В случае диполь-дипольного рассеяния в результате моделирования получено описание серий резонансов, которые не зависят от короткодействующих сил и обладают свойством анизотропии дифференциального сечения рассеяния. В случае бинарных столкновений в трёхчастичных системах получены результаты, позволяющие по-новому взглянуть на вопрос классификации взаимодействий в системах трёх частиц в режимах близких к универсальному. В частности, получено обобщение линии Филлипса, не зависящее от параметров взаимодействия и позволяющее явным образом идентифицировать фи-

зические системы со взаимодействием, близким к ефимовской универсальности. В рамках исследования трёхчастичной задачи выработана и реализована в виде публично доступного кода высокоэффективная методика численного решения уравнений Фаддеева в конфигурационном пространстве, позволившая провести многочисленные серии трёхчастичных расчётов. Поставлена и решена задача автоматического построения асимптотически оптимальных сеток, позволяющих существенно повысить точность численного решения уравнений Фаддеева.

Ко второй группе задач следует отнести исследования квантовых систем, взаимодействующих с интенсивным коротким лазерным импульсом. В результате численного моделирования впервые предсказано влияние фазы между несущей и огибающей на результаты диссоциации молекулярных систем. Возможности экспериментального наблюдения фазовых эффектов детально исследовались, и предсказанный эффект наблюдался в эксперименте. В работе решена и более общая задача построения теории влияния фазы импульса на конечное состояние квантовой системы. Эта теория позволила дать качественное предсказание условий, в которых фазовые эффекты могут наблюдаться, и в которых их наблюдение не представляется возможным.

Научная новизна

Все описанные в диссертации результаты являются новыми, и, как любые новые важные результаты, не только дают ответы на поставленные вопросы, но и порождают новые интересные вопросы, ответы на которые предстоит дать в будущем. Ценным результатом можно считать и описанные отработанные техники вычислительного эксперимента, которые допускают обобщение для других классов квантовых систем нескольких тел. В частности, ведётся работа над использованием описанных в диссертации подходов для решения кулоновских задач, исследуются новые модели взаимодействия квантовых систем с короткими электромагнитными импульсами.

Теоретическая и практическая значимость

Полученные в диссертации результаты имеют высокую научную ценность и могут быть применены в решении квантовых задач нескольких тел, возникающих в атомной, молекулярной, ядерной физике и физике твёрдого тела. Теоретические результаты могут быть использованы для верификации результатов расчётов и теоретических разработок в области задачи нескольких тел. В свете недавних экспериментов, позволивших провести прямые измерения функции плотности малых кластеров гелия, отработанные автором техники численного решения задачи трёх тел могут обрести значение для метрологии. Часть сделанных теоретических предсказаний уже получила экспериментальное подтверждение. Подходы, использованные автором, позволят разрабатывать новые модели взаимодействия между квантовыми системами и сильными импульсными полями.

Методология и методы исследования

Теоретическая часть диссертации опирается на методы нерелятивистской квантовой механики, теории квантовой задачи нескольких тел. Вычислительные результаты получены в основном с использованием методов коллокаций, методов расщепления операторов, тензорной факторизации.

Положения, выносимые на защиту

1. разработан и реализован в виде открытого программного кода новый подход к построению высокоэффективных методов решений уравнений Фаддеева;

2. разработан и реализован метод использования асимптотически оптимальных сеток для решения уравнений Фаддеева;
3. получены новые универсальные закономерности поведения наблюдаемых в окрестности двухчастичного порога для квантовых трёхчастичных систем в ефимовском, универсальном режиме взаимодействия;
4. описаны и классифицированы серии резонансов в низкоэнергетических столкновениях ориентированных полярных молекул;
5. описано влияние резонансов на анизотропию рассеяния в низкоэнергетических столкновениях ориентированных полярных молекул;
6. впервые предсказано на основе вычислительного эксперимента влияние фазы между несущей и огибающей лазерного импульса на результаты фотодиссоциации молекулярных систем;
7. разработан метод получения функции распределения фрагментов реакции фотодиссоциации по скоростям из функции распределения в координатном представлении, не требующий выполнения интегральных преобразований;
8. исследованы вопросы наблюдаемости фазовых эффектов в реалистических сценариях эксперимента;
9. впервые построена общая теория влияния фазы между несущей и огибающей лазерного импульса на конечное состояние взаимодействующей с ним квантовой системы.

Степень достоверности и апробация результатов, соответствие паспорту специальности

Результаты, изложенные в диссертации, были представлены в двадцати пяти докладах на шестнадцати международных конференциях, включая: ICPEAC 2003, Stockholm, Sweden; The 17th International Conference on Few-Body Problems in Physics, Durham, North Carolina, USA, 2003; DAMOP 2004, Tucson, Arizona, USA; DAMOP 2005, Lincoln, Nebraska, USA; APS March meeting, 2006, Baltimore, USA; Fundamental Quantum Processes in Atomic and Molecular Systems, NORFA network 2006 annual meeting, St-Petersburg, Russia; DAMOP 2007, Calgary, Canada; XXV ICPEAC, Freiburg, Germany; DAMOP 2008, College Park, Pennsylvania, USA; DAMOP 2009, Charlottesville, Virginia, USA; Methods of Computational Physics and its Applications in Physics and Engineering, St-Petersburg State University, Russia, 2009; DAMOP 2010, Houston, Texas, USA; DAMOP 2011, Atlanta, Georgia, USA; DAMOP 2012, Orange County, California; LXV International Conference on Nuclear Physics «Nucleus 2015» (St. Petersburg, Russia, 2015); International Workshop on Few-Body Systems, dedicated to the memory of Vladimir Belyaev (Dubna, Russia, 2016); LXVI International Conference on Nuclear Physics «Nucleus 2016» (Sarov, Russia, 2016).

Результаты также докладывались на семинарах в Санкт-Петербургском государственном Университете, Harvard University, Kansas State University, University of California in Long Beach.

Содержание диссертации и полученные в ней результаты отражены в 14 статьях, опубликованных в рецензируемых научных журналах, индексируемых базами данных Web of Science и Scopus, в том числе 3 работы в Physical Review Letters. Работы автора широко цитируются, получив более 400 ссылок за последние 15 лет.

Часть теоретических предсказаний, представленных в настоящей работе, уже получила экспериментальное подтверждение.

Как цель, так и содержание представленного в диссертации исследования удовлетворяют паспорту специальности 01.04.02, теоретическая физика: на основе численных и аналитических вычислений автором обнаружены новые закономерности в квантовых системах нескольких тел, обнаружены и объяснены новые явления во взаимодействии квантовых систем с сильными короткими лазерными импульсами.

Личный вклад автора Диссертация выполнена на базе исследований, проведенных в Санкт-Петербургском Государственном Университете, Университете Южной Африки (UNISA, ЮАР), в Объединенном Институте Ядерных Исследований (ОИЯИ, Дубна, РФ), в Университете штата Канзас (KSU, США), в Университете Кентукки (UK, США). Некоторая часть предварительных результатов, касающихся моделирования молекулярных ионов в сильных внешних полях, основана на использовании вычислительных кодов, предоставленных проф. Эзри и переработанных автором. Подготовка к публикации полученных результатов проводилась совместно с соавторами, причём вклад диссертанта был определяющим. Все представленные в диссертации результаты получены лично автором.

Основное содержание работы

Содержание и основные результаты главы 1

Первая глава посвящена технике численного исследования трёхчастичных систем на основе уравнений Фаддеева, описанию новой эффективной методики численного решения квантовой задачи нескольких тел, а также применению этой методики для исследования пороговых явлений в квантовом бинарном трёхчастичном рассеянии. Подобная методика применялась автором также для исследования столкновений ориентированных дипольных молекул, описанного в главе 3.

В первом разделе главы рассмотрены подходы к численному решению задачи нескольких частиц. Также приводятся основные известные факты, касающиеся уравнений и асимптотики их решений¹.

Во втором разделе приведены базовые сведения о редукции уравнений в представлении полного момента², а также приводится метод постановки граничных условий, предложенный ранее С. Gignoux³, и обобщенный автором для многоканальной задачи.

¹См. С.П. Меркуриев, Л.Д. Фаддеев, Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц, Москва, Наука, 1985

²См. Kostykin V.V., Kvitsinsky A.A., Merkuriev S.P., Faddeev approach to the three-body problem in total-angular-momentum representation // Few-Body Systems. – 1989. – Vol. 6. – P. 97-113.

³См. Carbonell J., Gignoux C., Merkuriev S.P., Faddeev calculations in configuration space with Cartesian coordinates // Few-Body Systems. – 1993. – Vol. 15. – P. 15.

Третий раздел посвящён построению дискретных аналогов уравнений, приводятся основные принципы, позволяющие реализовать процедуру решения на основе быстрых вычислительных операций. К таким принципам следует отнести использование локальных базисов, метода ортогональных коллокаций, представление полного момента, рассмотренное подробнее во втором разделе. В совокупности, благодаря локальной структуре операторов, входящих в уравнения, и локальной структуре базиса, используемого для дискретизации, удаётся построить конечномерные аналоги операторов Фаддеева, представленные разреженными матрицами.

В четвёртом разделе приводится обсуждение правого предобуславливания дискретизованной системы уравнений Фаддеева. Автор предложил переопределить компоненты волновой функции в терминах действия резольвенты кластерного гамилтониана на источники, и тем самым вместо поиска решения в области пространства, где отличаются от нуля компоненты волновой функции, решать уравнения на хорошо локализованные источники. Такое предобуславливание аналогично переходу от уравнения Шредингера к уравнению, сопряженному к уравнению Липпмана-Швингера для волновой функции, и локализация источников в конфигурационном пространстве имеет ту же природу, что и для вайнберговских состояний. Структура оператора Фаддеева, однако, позволяет распространить свойства локализованности решений на случай трёх частиц, чего невозможно добиться при решении уравнений Липпмана-Швингера.

В пятом разделе первой главы обсуждается применение асимптотически оптимальных сеток для решения трёхчастичной задачи на основе уравнений Фаддеева. При решении систем дифференциальных уравнений на основе разложения решений по базисам, определённым в терминах сеток, как, например, в используемой методике поиска решений в форме эрмитова сплайна, приближенное решение определяется путём решения системы линейных алгебраических уравнений на линейные коэффициенты разложения функции по некоторому базису. Однако, такое решение неявно зависит и от набора нелинейных параметров – расположения точек сетки. В практических расчётах неравномерность сетки, как правило, выбирается эмпирически. Однако, такой, эмпирический подбор неравномерной сетки требует не только существенных вычислительных затрат, но и затрат времени квалифицированного исследователя. Автором впервые предложено и опробовано использование асимптотически оптимальных сеток⁴ в решении трёхчастичной задачи. Такие сетки оказываются особенно полезными именно при решении уравнений Фаддеева в силу факторизуемости асимптотики решений. Было показано, что использование асимптотически оптимальных сеток для воспроизведения двухчастичных состояний позволяет существенно – до двух порядков величины – уменьшить численную погрешность решений трёхчастичной задачи. Наглядное представление о преимуществах использования асимптотически оптимальных сеток даёт рисунок 1, на котором приведены графики зависимости энергии связанных состояний тримера ${}^4\text{He}_3$, вычисленных на базисе сплайнов $S_{3,2}$, от числа точек сетки по кластерной координате.

Таким образом, в первой главе диссертации описаны высокоэффективные методы численного решения уравнений Фаддеева, позволившие автору провести широкое ис-

⁴См. Carey G.F., Dinh H.T., Grading functions and mesh redistribution // J. Numer. Anal. – 1985. – Vol. 22. – P. 1028.

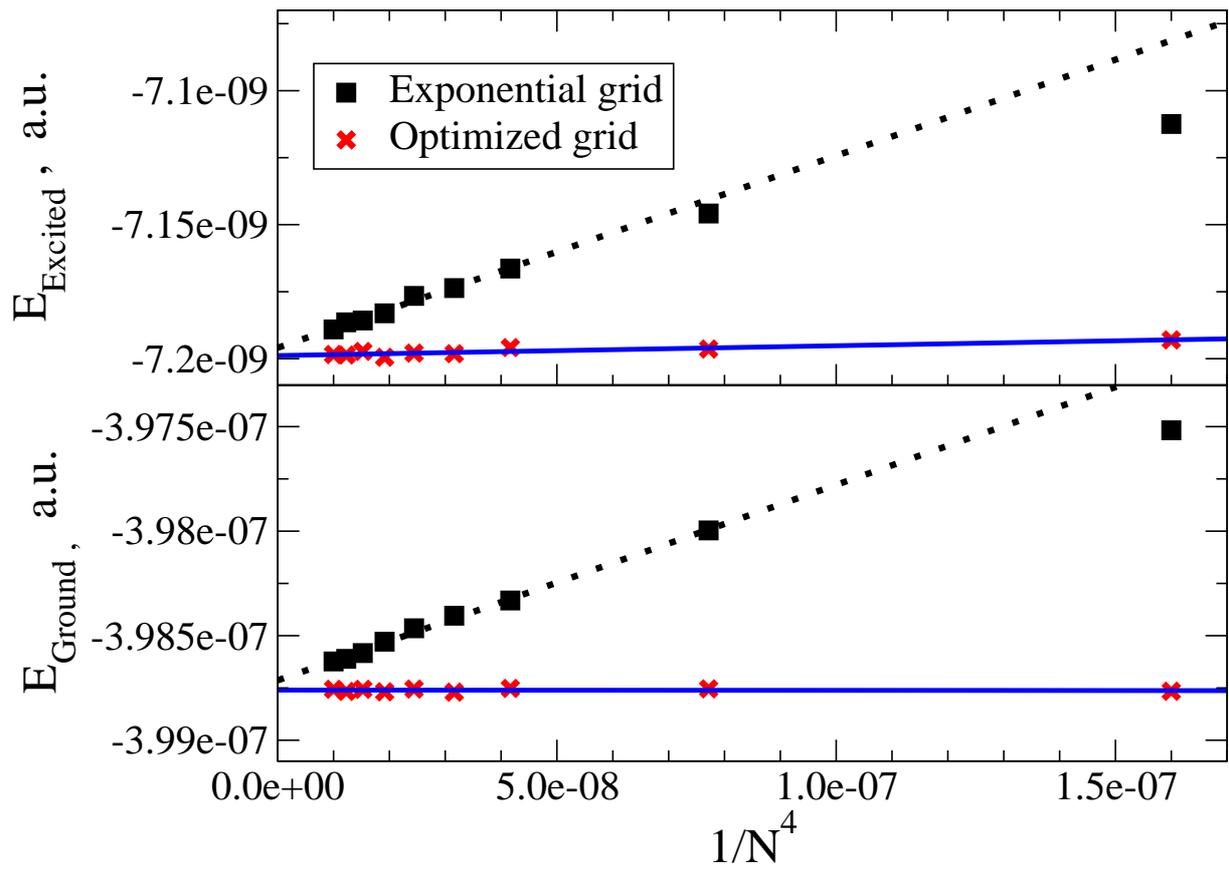


Рис. 1: Энергии связанных состояний He_3 , вычисленных на базисе сплайнов $S_{3,2}$ как функции числа точек сетки по кластерной координате.

следование трёхчастичных квантовых систем в окрестности двухчастичного порога в режиме, близком к универсальному.

Содержание первой главы отражено в работах [1–4]

Содержание и основные результаты главы 2

Реализованная эффективная вычислительная схема должна быть отлажена на достаточно сложном примере. Тщательность проверки такой схемы должна убедить нас в надёжности используемого подхода. При этом необходимо не только сопоставить вновь полученные результаты с известными данными, но и выявить источники возможных расхождений. Этим вопросам посвящен первый раздел второй главы. Во втором разделе описаны результаты широкого численного исследования трёхчастичных систем в режимах, близких к универсальному, которые привели к выявлению связи между двумя важными фактами квантовой задачи нескольких тел: линии Филлипса и эффекта Ефимова.

В первом разделе главы 2 приводится обоснование выбора системы трёх атомов гелия в качестве тестового примера для верификации разработанного программного кода, решающего задачу трёх тел на основе уравнений Фаддеева. Такой выбор обусловлен богатством потенциальных моделей для этой системы, существенным количеством известных вычислительных результатов, а также известными трудностями проведения для неё точных расчётов. Важнейшим вопросом в проведении образцовых вычислений является выяснение физических пределов погрешностей используемой модели: как неопределённость физических констант соотносится с результатами вычислений?

Автором проанализированы погрешности в определении стандартных модельных потенциалов. Показано, что в случае системы двух атомов ${}^4\text{He}$ вариация константы связи в пятой значащей цифре ведёт к изменению энергии связи и длины рассеяния – во второй. Аналогичный анализ проведён для систем трёх атомов гелия. Отмечено, что использование округлённой константы связи $\frac{\hbar^2}{mk_B} \approx 12.12 \text{ K}\text{\AA}^2$ вместо значения $\frac{\hbar^2}{mk_B} = 12.11928 \pm 0.00002 \text{ K}\text{\AA}^2$, вычисленного на основе рекомендованных значений физических констант, во многих предыдущих расчётах ведёт к заметным изменениям результатов трёхчастичных расчётов. Результаты сравнения вычислений приведены в таблице 1. Аналогичные результаты для асимметричного тримера ${}^4\text{He}_2{}^3\text{He}$ приведены в таблице 2.

Таблица 1: Энергии связанных состояний ${}^4\text{He}_3$ и длина рассеяния атома на димере для разных потенциальных моделей, вычисленные с точной и округлённой константами связи. В скобках указано относительное различие между результатами для точной и округлённой константы связи.

Potential	$\frac{\hbar^2}{mk_B} \equiv 12.12 \text{ K}\text{\AA}^2$			$\frac{\hbar^2}{mk_B} \equiv 12.11928 \text{ K}\text{\AA}^2$		
	E_3 , mK	E_3^* , mK	a_{12} , \AA	E_3 , mK	E_3^* , mK	a_{12} , \AA
HFD-B(He)	-132.968 (0.08%)	-2.7342 (0.3%)	121.86 (0.06%)	-133.075	-2.74231	121.93
LM2M2	-126.394 (0.08%)	-2.2711 (0.3%)	115.22 (0.15%)	-126.499	-2.27844	115.39
TTY	-126.431 (0.08%)	-2.2842 (0.3%)	115.70 (0.14%)	-126.537	-2.29159	115.86
HFD-B3-FCII	-131.264 (0.08%)	-2.6164 (0.3%)	120.76 (0.08%)	-131.163	-2.60786	120.86

Таблица 2: Энергия связанного состояния ${}^4\text{He}_2{}^3\text{He}$ и длина рассеяния атома на димере ${}^3\text{He}-{}^4\text{He}_2$. В скобках показаны относительные смещения между результатами, полученными с точной и округлённой константой связи.

Potential	$\frac{\hbar^2}{mk_B} \equiv 12.12 \text{ K}\text{\AA}^2$		$\frac{\hbar^2}{mk_B} \equiv 12.11928 \text{ K}\text{\AA}^2$	
	E_3 , а.у.	a_{12} , а.у.	E_3 , а.у.	a_{12} , а.у.
HFD-B(He)	-5.3815E-8 (0.3%)	36.18 (0.03%)	-5.3958E-8	36.17
LM2M2	-4.5355E-8 (0.3%)	36.91 (0.03%)	-4.5488E-8	36.90
TTY	-4.5270E-8 (0.3%)	37.23 (0.03%)	-4.5404E-8	37.24
HFD-B3-FCII	-5.1442E-8 (0.3%)	36.57 (0.03%)	-5.1582E-8	36.56

Также обнаружено заметное отклонение результатов расчётов для потенциала TTY. Оно объясняется использованием разных значений постоянной Больцмана в различных работах. В частности, авторами потенциала используется значение постоянной Больцмана 3.1669×10^{-6} а.у. K^{-1} , что отличается от рекомендованной константы 3.1668154×10^{-6} а.у. K^{-1} в пятой значащей цифре. Использование разных значений приводит к изменению результатов двух- и трёхчастичных расчётов в третьей значащей цифре.

Представленные результаты демонстрируют сходимость в пределах 5 значащих цифр. Результаты согласуются с ранее опубликованными работами и следуют универсальному, независящему от потенциала взаимодействия, тренду. Можно отметить значительное влияние малых вариаций константы связи на трёхчастичные наблюдаемые: вариация константы связи в пределах 0.006% приводит к сдвигу в 0.5% энергии димера, 0.3% - энергии возбуждённого состояния симметричного тримера и связанного состояния несимметричного тримера, изменение в 0.2% для длины рассеяния двух атомов гелия ${}^4\text{He}-{}^4\text{He}$, 0.06%-0.15% для длины рассеяния атома на димере ${}^4\text{He}-{}^4\text{He}_2$, 0.08% для энергии основного состояния симметричного тримера, и 0.03% для длины рассеяния в столкновениях ${}^3\text{He}-{}^4\text{He}_2$. Важно отметить, что поскольку многие модельные потенциалы определены в единицах температуры, точность константы связи при пересчете в атомные единицы составляет 0.0002%, и физически осмысленный предел точности для вычислений с такими модельными потенциалами составляет 5 значащих цифр. Такая точность была достигнута в представленных вычислениях.

Во втором разделе главы приводятся результаты, касающиеся новых закономерностей, связывающих параметры трёхчастичной системы и двухчастичных подсистем в окрестности двухчастичного порога. Для их понимания необходимо дать некоторые базовые, качественные представления об универсальном, ефимовском режиме взаимодействия в системе трёх тел, а также привести сведения о важном эмпирическом соотношении, известном как линия Филлипса.

Эффект Ефимова, описанный в 1970 году⁵, проявляется в трёхчастичных системах, когда взаимодействие в парных подсистемах настолько ослабляется, что двухчастичное связанное состояние превращается в виртуальный уровень. Ефимов показал, что при таком взаимодействии, в трёхчастичной системе существует бесконеч-

⁵Efimov, V., Energy levels arising from resonant two-body forces in a three-body system // Physics Letters B. – 1970. – Vol. 33. – P. 563-564.

ное число связанных состояний. Действительно, в окрестности такого режима длина рассеяния в парной подсистеме стремится к бесконечности, и при ослаблении взаимодействия волновая функция связанного состояния распространяется далеко за пределы области локализации потенциала. Как показано Ефимовым, эффективное взаимодействие в трёхчастичной системе в этом случае ведёт себя как притягивающий потенциал R^{-2} (R – гиперрадиус системы), поддерживающий бесконечное число связанных состояний. Если длина рассеяния конечна, то действие такого потенциала распространяется приблизительно до расстояний порядка длины двухчастичного рассеяния. Таким образом, длина рассеяния в двухчастичной подсистеме оказывается единственным размерным параметром, качественно влияющим на свойства системы. Детали короткодействующего взаимодействия оказываются существенными для определения абсолютных значений энергий связанных состояний трёхчастичной системы, но не оказывают влияния на их взаимное расположение. Отношение энергий двух последовательных связанных состояний удовлетворяет соотношению $\sqrt{E_i/E_{i+1}} \approx 22.7$. При конечной длине двухчастичного рассеяния, новое состояние в трёхчастичной системе образуется при увеличении парной длины рассеяния в таком же масштабе. В этом отношении можно говорить, что взаимодействие в трёхчастичной системе имеет универсальный, ефимовский характер.

Другим интересным, хотя и более ограниченным, наблюдением, сделанным примерно в то же время, была линия Филлипса⁶: линейная корреляция между длиной рассеяния нейтрона на дейтроне и энергией связанного состояния тритона, получающимися при использовании разных моделей межнуклонного взаимодействия. В работах Ефимова и Ткаченко показано, что наблюдаемая линейность такой корреляции носит случайный характер, обусловленный рассмотрением сложной зависимости в очень малом масштабе.

Выполнение автором диссертации высокоточных расчётов для большого набора взаимодействий, включая близкие к Ефимовскому режимы, позволило выявить связь между линией Филлипса и эффектом Ефимова: длина рассеяния частицы на связанной паре и энергия связанного состояния трёхчастичной системы действительно следуют некоторому новому универсальному закону, модифицированной линии Филлипса, когда взаимодействие в системе близко к универсальному режиму. Такая новая универсальная закономерность позволяет проводить классификацию системы по признаку близости взаимодействия к универсальному режиму на основе единичных расчётов. Это особенно важно при наличии небольшого числа связанных состояний в трёхчастичной системе, что не позволяет судить о близости режима к универсальному непосредственно по анализу спектра.

Введём безразмерные переменные

$$\begin{aligned} \alpha &\equiv a_3 \sqrt{-2m_{12}E_2} \\ \omega &\equiv 1/\sqrt{E_3/E_2 - 1} \end{aligned} \quad (1)$$

где E_2 - энергия связи димера, E_3 - энергия околорогового связанного состояния тримера, a_3 - длина рассеяния атома на димере и m_{12} - приведённая масса системы

⁶Phyllips A. C., Consistency of the low-energy three-nucleon observables and the separable interaction model // Nucl. Phys A . – 1968. – Vol. 107. – P. 209.

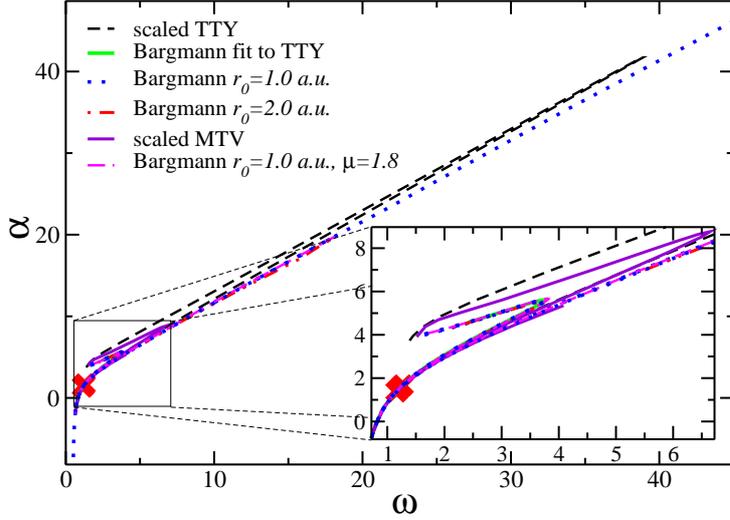


Рис. 2: Модифицированная линия Филлипса для широкого набора двухчастичных параметров и нескольких различных двухчастичных потенциалов. Крестами отмечены результаты для реалистических потенциалов взаимодействия атомов гелия

атом-димер. Переменная α может рассматриваться как обезразмеренная длина рассеяния атома на димере, а ω характеризует энергию связи трёхчастичного состояния. Если трёхчастичное состояние, ближайшее к двухчастичному порогу, сильно связано, величина ω мала; большие значения ω указывают на наличие слабосвязанного трёхчастичного состояния. Для таких значений можно ожидать линейного соотношения $\alpha \approx \omega$. Как показывают многочисленные расчёты, сделанные автором, такое соотношение действительно выполняется. Более того, когда взаимодействие в системе близко к универсальному, ефимовскому режиму, параметры α и ω ложатся на универсальную кривую не только при больших значениях ω , но для всего возможно-го диапазона значений (рисунки 2, 3) Модифицированная линия Филлипса весьма точно описывается полуэмпирическим соотношением

$$\alpha = \frac{\alpha_1}{\frac{1}{\omega} - \frac{1}{\omega_0}} + \omega + \alpha_0 \quad (2)$$

при $\alpha_1 = 5.5$, $\omega_0 = 0.419$ и $\alpha_0 = 4$. Здесь первый член отвечает за описание большой отрицательной длины рассеяния, другие два члена отвечают за режим большой положительной длины рассеяния. Уравнение (2) можно использовать в практических вычислениях для оценки энергии связи тримера по трёхчастичной длине рассеяния и двухчастичным наблюдаемым. Более простая эмпирическая формула $\alpha = \omega + \frac{3}{2}(1 - 1/\omega^2)$ хорошо работает для положительной трёхчастичной длины рассеяния.

Универсальный характер кривой объясняется тем, что в универсальном режиме взаимодействие в системе может быть хорошо аппроксимировано вкладами от двух состояний - околорогового связанного состояния и близкого к порогу ефимовского резонанса. Такая интерпретация позволяет выделить три режима взаимодействия: доминирующим полюсом от связанного состояния (линейная часть, большие значе-

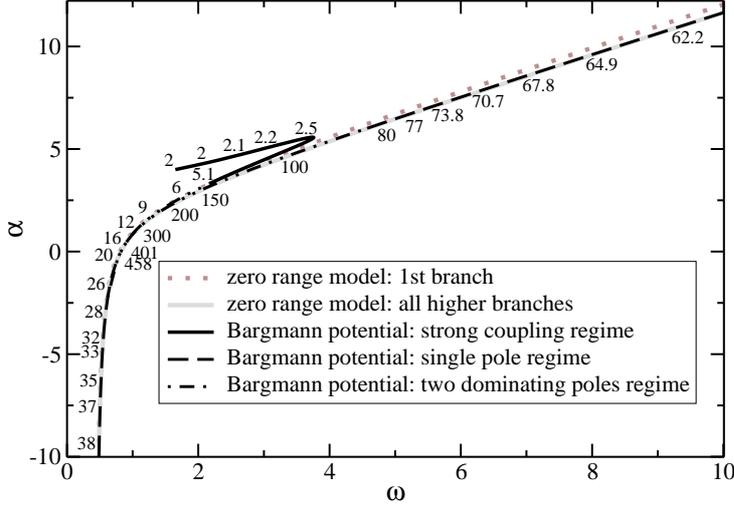


Рис. 3: Модифицированная линия Филлипса для потенциала Баргманна и модели нулевого радиуса взаимодействия. Для потенциала Баргманна эффективный радиус взаимодействия зафиксирован при 1 а.у., длина рассеяния варьируется от 2 до 460 а.у. Соответствующие величины двухчастичной длины рассеяния a_2 отмечены вдоль кривой.

ния ω), доминирующим полюсом околопорогового резонанса (значения $\omega \approx 0.419$), и двухполюсной режим.

Анализ специальных точек на универсальной кривой выявил *новые закономерности* для системы трёх тождественных бозонов для режимов взаимодействия в трёхчастичной системе, близких к ефимовскому: длина рассеяния атома на димере обращается в нуль при отношении между энергиями связи трёхчастичной и двухчастичной системы $E_3/E_2 \approx 2.54$, длина рассеяния частицы на связанной паре стремится к бесконечности при $E_3/E_2 \approx 6.7$.

Содержание главы 2 отражено в работах [5–7].

Содержание и основные результаты главы 3

Глава 3 посвящена исследованию сверхнизкоэнергетических столкновений ориентированных полярных молекул. Предшествующие теоретические исследования показали, что в таких системах имеется большое количество околопороговых резонансов. Автором диссертации был показан универсальный характер расположения подобных резонансов в сверххолодных столкновениях бозонов [8]. Впоследствии была произведена классификация таких резонансов и произведён сравнительный анализ серий резонансов для бозонных и фермионных полярных молекул [9]. Эти, новые результаты и приведены в настоящей главе.

В первом разделе описывается модель взаимодействия ориентированных диполей.

Важным шагом в теоретическом описании взаимодействия ориентированных диполей является введение дипольных единиц (d.u.), позволяющих исключить из уравнений наведённый дипольный момент μ и массу полярной молекулы M

$$\begin{aligned} D &= \mu^2 M / \hbar^2 \\ E_D &= \hbar^6 / (M^3 \mu^4) \end{aligned} \quad .$$

Уравнение Шрёдингера в таких единицах запишется как

$$\left[-\frac{1}{2}\nabla^2 + \frac{1}{r^3} (1 - 3(\hat{r} \cdot \hat{z})^2) \right] \psi(\vec{r}) = E_{\text{rel}}\psi(\vec{r}) \quad .$$

Это уравнение исследовалось в работе на основе численного моделирования с использованием методов, подобных описанным в первой главе диссертации. Сингулярность r^{-3} взаимодействия компенсировалась введением нулевого граничного условия на волновую функцию на поверхности сферы малого радиуса r_0 . Такое граничное условие моделирует взаимодействие диполей на расстояниях порядка нескольких боровских радиусов.

Во втором разделе вводится адиабатическое представление для взаимодействия, в котором диагонализуется угловая часть гамильтониана, а расстояние рассматривается как медленная переменная. Такое представление позволило выявить качественные особенности сверхнизкоэнергетических диполь-дипольных столкновений. Соответствующие адиабатические термы приведены на рисунке 4. Термы классифицируются в соответствии с поведением угловых функций на больших расстояниях: они асимптотически приближаются к сферическим гармоникам. Поведение эффек-

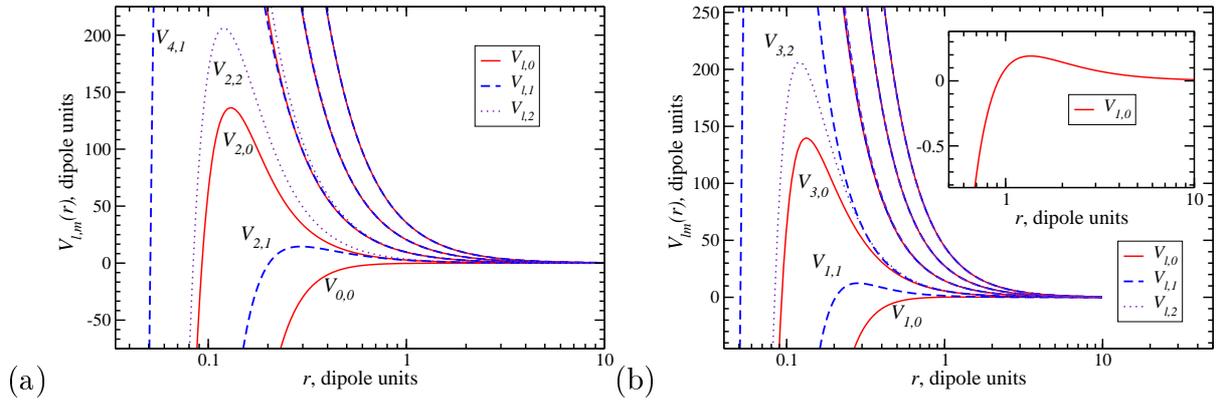


Рис. 4: Адиабатические потенциальные термы для бозонных (а) и фермионных (б) полярных молекул. Термы классифицированы по асимптотическому угловому квантовому числу ℓ и точному магнитному квантовому числу $|m|$. Отметим небольшой потенциальный барьер в нижнем фермионном адиабатическом потенциале $V_{1,0}$.

тивных потенциалов взаимодействия на больших расстояниях для всех каналов определяется центробежным отталкиванием $\sim \frac{1}{r^2}$, кроме бозонного канала $V_{0,0}$. Для этого канала потенциал - всюду притягивающий, убывающий на больших расстояниях как $\frac{1}{r^4}$. Все другие адиабатические термы имеют потенциальный барьер в переходной области между притягивающим короткодействием и отталкивающим дальнодействием. Высота барьера задаёт важную дополнительную энергетическую шкалу в системе. Пока энергия столкновений не превысит барьер во втором адиабатическом канале, первый, нижний терм является определяющим. Это позволяет идентифицировать "пороговый режим" рассеяния как относящийся к энергиям столкновений много меньших чем потенциальные барьеры в адиабатических потенциалах. Другое важное свойство потенциальных термов - в присутствии небольшого, ~ 0.1 д.у., барьера в

Таблица 3: Параметры формулы положения резонансов для радиусов обрезания r_0 в каналах, преобладающих при низких энергиях.

(l, m)	a_0	a_1	a_2
Бозоны			
(0, 0)	0.2447	3.3817	0.711496
(2, 0)	8.17602	13.5762	0.622266
(4, 0)	31.6553	21.2334	0.63889
Фермионы			
(1, 0)	0.3635	3.567	0.6844
(3, 0)	10.873	11.809	0.68644
(5, 0)	32.579	20.671	0.63113

основном фермионном состоянии. Наличие этого барьера приводит к существенному различию в низкоэнергетическом рассеянии фермионов и бозонов, сказывается на резонансном поведении сечения рассеяния.

В третьем разделе обсуждается полуклассический анализ положений резонансов, приводятся простые формулы, позволяющие вычислить положения резонансов в том или ином адиабатическом канале, исследуется присутствие порогового резонанса при изменении параметра r_0 . В частности, s-волновой резонанс появляется при значениях

$$r_0 = \frac{4\alpha^2}{(4\alpha + \beta(\pi n + \phi_0))(\pi n + \phi_0)},$$

где $\phi_0 = 0.0735\pi$, $\alpha = 0.9586$ и $\beta = 0.265$. Подобная параметризация ($r_0^{(l,m)}(n) = \frac{1}{a_0 + a_1 n + a_2 n^2}$) описывает и пороговые резонансы в других каналах. Параметры, описывающие положение описанных выше серий резонансов, приведены в таблице 3.

В четвёртом разделе обсуждается связь резонансов в системе с анизотропией рассеяния. Показано, например, что в окрестности резонанса, на минимуме сечения рассеяния, в целом доминирующий s-волновой канал не даёт вклада в рассеяние бозонных диполей, и как зависимость сечения рассеяния от направления между приложенным полем и направлением столкновения, так и дифференциальное сечение рассеяния становятся анизотропными. Напротив, на пике резонанса вклад s-волны в сечение становится доминирующим. Таким образом, впервые установлена связь между сечением рассеяния и его угловым поведением в столкновениях ориентированных диполей. Подобные эффекты предсказаны и для столкновений фермионных молекул.

В пятом разделе обсуждаются вопросы возможных техник наблюдения описанных резонансных серий. Один из возможных сценариев наблюдения состоит в варьировании величины приложенного поляризуемого поля. При его слабом влиянии на взаимодействия в фиксированном, атомном масштабе, оно определяет величину дипольных единиц, и тем самым позволяет варьировать соотношение масштабов

диполь-дипольных и короткодействующих сил. Тем самым, возможно установить соотношение между параметром модели r_0 и приложенным внешним полем. Предсказанное поведение сечения рассеяния в зависимости от приложенного внешнего поля приведено на рисунке 5.

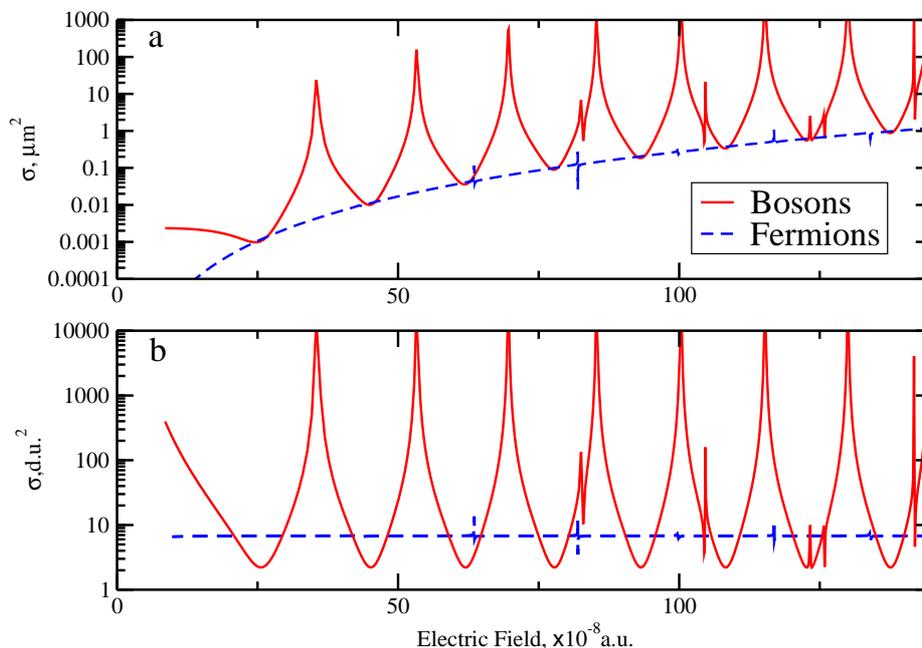


Рис. 5: Зависимость сечения упругого околопорогового рассеяния от электрического поля в абсолютных (а) и дипольных (б) единицах. Минимумы сечения на верхнем рисунке быстро растут с увеличением поля как результат быстрого роста дипольной длины. Сечение рассеяния фермионов демонстрирует более узкие резонансные изменения, демонстрируя при этом ту же картину роста с приложенным полем \mathcal{E}^4 .

В заключении суммируются основные результаты главы.

Содержание главы 3 отражено в работах [8, 9].

Вторая часть диссертации объединяет главы с четвертой по шестую, посвященные взаимодействию квантовых систем с сильными короткими лазерными импульсами. Для исследования таких систем численное решение нестационарного уравнения Шрёдингера является одним из главных инструментов. Основным объектом исследования в главах 4 и 5 является молекулярный ион водорода H_2^+ . Автором впервые было показано на основе численных экспериментов, что процессы диссоциации могут быть чувствительны к фазе между несущей и огибающей лазерного импульса, и основное внимание в главах 4 и 5 уделено оценке наблюдаемости фазовых эффектов в диссоциации молекулярного иона водорода. Глава 6 посвящена построению общей теории влияния фазы лазерного импульса на конечное состояние взаимодействующей с ним квантовой системы.

Содержание и основные результаты главы 4

При рассмотрении процессов, связанных с распадом системы, возникает специфическая проблема: с одной стороны, движение продуктов реакции инфинитно, с дру-

гой стороны, объём конфигурационного пространства, в котором производится поиск численного решения, оказывается конечным. В результате, возникают ограничения на характерное время, для которого могут быть построены численные решения: при приближении волновых пакетов к границам области, в которой ищется численное решение, возникают артефакты, связанные с отражением волновых пакетов от границ. Есть несколько подходов к решению этой проблемы. Один из подходов связан с введением искусственного поглощения волновых пакетов в окрестности границ с помощью маскирующей функции, мнимого потенциала либо внешнего комплексного вращения. Такой подход, однако, имеет важные ограничения: теряется информация о динамике свободно движущихся частей системы, что усложняет анализ конечного состояния. Кроме того, дополнительная сложность возникает из быстрого накопления пространственной фазы, приводящей к быстрым осцилляциям решения, затрудняющим его численное воспроизведение, особенно при необходимости поиска решения для больших временных отрезков.

Четвертая глава посвящена описанию и применению техники скалированных координат, позволяющей разрешить обе упомянутые проблемы⁷.

Первый раздел четвёртой главы посвящен описанию метода скалированных координат. Эта техника включает времязависящее преобразование координат

$$x = R(t)\xi ,$$

где $R(t)$ - некоторая функция с гладкой и плавно меняющейся второй производной. Практически хорошим выбором скалирующей функции можно считать

$$R(t) = \begin{cases} 1 & , \quad t < t_0 \\ [1 + v_x^4(t - t_0)^4]^{1/4} & , \quad t \geq t_0 \end{cases} ,$$

где v_x - асимптотический масштабный коэффициент, имеющий размерность скорости, и t_0 - время включения масштабирования координат. Также выполняется преобразование волновой функции

$$\Psi^S(\xi, t) = \sqrt{R} e^{-i\frac{m}{2}R\dot{R}\xi^2} \Psi(R\xi, t) ,$$

где точка обозначает производную по времени. Такое преобразование позволяет локализовать волновые пакеты, отвечающие свободному движению, внутри ограниченной области, а также снимает проблему воспроизведения кинематических осцилляций.

Автором показано, что такое преобразование позволяет получить распределение скоростей из функции плотности конечного состояния, не прибегая, например, к каким-либо интегральным преобразованиям волновой функции. Это достигается благодаря прямой связи волновой функции в скалированных координатах с волновой функцией в импульсном представлении:

$$\tilde{\Psi}(p, t) = e^{-i\frac{\pi}{4}} \frac{1}{\sqrt{mv_x}} e^{i\frac{p^2}{2m}t} \Psi^S\left(\frac{p}{mv_x}, t\right) + O((mv_x^2 t)^{-3/2}) .$$

⁷Она была предложена – в несколько ином контексте – в работе Soloviev E.A., Vinitzky S.I., Suitable coordinates for the three-body problem in the adiabatic representation // J. Phys. B. – 1985. – Vol. 18. – P. L557

Использование этого соотношения проиллюстрировано примерами.

Исключение кинематических осцилляций существенно упрощает аппроксимацию волновой функции, что сказывается на скорости сходимости наблюдаемых по числу точек сетки, что проиллюстрировано графиком анализа сходимости вероятности ионизации модельной системы по числу точек сетки.

Второй раздел главы 4 посвящён использованию техники скалированных координат для анализа процессов диссоциации молекулярного иона HD^+ в коротком лазерном импульсе. Рассмотрены двумерная и трёхмерная модели молекулярного иона, взаимодействующего с лазерным импульсом продолжительностью 10 фемтосекунд и длиной волны 785 нм. Показано, что использование метода скалированных координат лишь по некоторой части степеней свободы, отвечающих межъядерному расстоянию, приводит к заметным вычислительным преимуществам. Так, например, оценка погрешности вычислений фотодиссоциации уменьшена вдвое благодаря использованию скалированных координат. Отмечены заметные различия в предсказаниях двумерной и трёхмерной модели, обнаружена существенно более высокая чувствительность распределения фрагментов реакции по скоростям к фазе импульса по сравнению с вероятностью диссоциации в заданном канале.

Содержание главы 4 отражено в работах [10, 11].

Содержание и основные результаты главы 5

Пятая глава посвящена детальному исследованию процессов диссоциации молекулярного иона HD^+ в поле сильного короткого лазерного импульса. Главная решаемая задача - оценить возможность наблюдения влияния фазы между несущей и огибающей импульса на результаты диссоциации молекулярного иона в реалистическом сценарии эксперимента.

В первом разделе описывается математическая модель взаимодействия молекулярного иона HD^+ с сильным коротким лазерным импульсом. Предполагается, что молекулы в начальном состоянии ориентированы в плоскости поляризации поля импульса, и за время импульса молекула не испытывает существенных вращений. В таком предположении, предложено рассматривать движение ядер иона одномерным, движение электрона предполагается цилиндрически симметричным, и система описывается тремя координатами: расстоянием между ядерными центрами и двумя координатами электрона. Приведены соответствующие динамические уравнения, учитывающие скалирование координат. Определены каналы реакции, формулы для определения распределения фрагментов реакции по кинетической энергии.

Подробно описан метод численного решения нестационарного уравнения Шрёдингера. Особенность использованного метода в том, что вычисление пропагатора на каждом временном шаге δ требует только $O(N)$ операций (здесь N - число точек сетки). Такой метод основан на формуле расщепления оператора

$$e^{-i(A+B)\delta} = e^{-iA\frac{\delta}{2}} e^{-iB\delta} e^{-iA\frac{\delta}{2}} + O(\delta^3).$$

Операторные экспоненты вычисляются на основе метода Крэнка-Николсона, отвечающего простейшему Паде-аппроксиманту экспоненты:

$$U_A(\delta) = \left(1 + iA\frac{\delta}{2}\right)^{-1} \left(1 - iA\frac{\delta}{2}\right) = e^{-iA\delta} + O(\delta^3). \quad (3)$$

Таблица 4: Энергии связанных состояний для первых десяти уровней HD^+ , использованные в данной работе в сравнении с образцовыми расчётами из работы Esry B.D., Sadeghpour H.R., Adiabatic formulation of heteronuclear hydrogen molecular ion // Phys. Rev. A. – 1999. – Vol. 60. – P. 3604.

v	Образцовый расчёт	Настоящая работа	Относительная разность
0	-0.59803	-0.59723	0.13%
1	-0.58932	-0.58864	0.11%
2	-0.58104	-0.58003	0.17%
3	-0.57319	-0.57252	0.12%
4	-0.56575	-0.56532	0.08%
5	-0.55871	-0.55823	0.09%
6	-0.55207	-0.55158	0.09%
7	-0.54582	-0.54534	0.09%
8	-0.53996	-0.53937	0.11%
9	-0.53447	-0.53396	0.10%

Для достаточно малых шагов по времени δ , оператор эволюции может быть вычислен с необходимой точностью. Все используемые приближенные формулы верны с точностью до $O(\delta^3)$, и все использованные приближенные пропагаторы унитарны. Заметим, что матрицы, отвечающие отдельным членам гамильтониана, имеют ленточную либо диагональную структуру, что позволяет решать систему линейных алгебраических уравнений по каждой из координат за $O(N)$ операций, а приближенный пропагатор в целом имеет структуру тензорного произведения. Это и приводит к быстрой вычислительной схеме.

Задача исследования реалистического сценария эксперимента включает необходимость исследовать процессы диссоциации для каждого начального вибрационного уровня молекулярного иона. Поэтому оказывается значимой задача быстрого, эффективного вычисления таких начальных состояний системы. Для решения такой задачи автором впервые предложено использовать метод эволюции по мнимому времени совместно с алгоритмом Арнольди. Показано, что такая стратегия приводит к более быстрому решению вычислительной задачи по сравнению с методами, известными в литературе. В таблице 4 приведены значения энергий связанных состояний HD^+ , вычисленные на сетке, использованной в расчётах, в сравнении с результатами образцовых вычислений.

Во втором разделе главы 5 оценивается возможность экспериментального наблюдения влияния фазы между несущей и огибающей (ФНО) лазерного импульса на диссоциацию молекулярного иона. Прямое экспериментальное исследование влияния ФНО на диссоциацию молекулярных ионов водорода затруднено несколькими обстоятельствами. В первую очередь, подготовка мишени H_2^+ (либо других изотопов) в фиксированном вибрационном состоянии является технически сложной задачей. Кроме того, в реальном эксперименте мишень испытывает воздействие не только импульса фиксированной интенсивности, но воздействия целого набора импульсов меньшей интенсивности, что связано с неоднородным распределением поля в фокусе

лазерного луча. Таким образом, необходимо исследовать влияние фазовых эффектов на диссоциацию различных начальных состояний, а также провести усреднение эффекта по фокусному объёму. Результаты такого исследования приведены во втором разделе.

В результате обнаружено, что после всех усреднений, необходимых для учёта возможных трудностей эксперимента, фазовый эффект можно наблюдать в плотности распределения фрагментов по кинетической энергии. Зависимость энергетического распределения фрагментов диссоциации от ФНО после усреднения по фокальному объёму, нормализованная на среднюю по фазе величину внутри каждого интервала энергий с шагом 0.1 эВ для канала $D+p$ и разных пиковых интенсивностей, показана на рисунке 6.

В заключительном разделе суммированы результаты исследования наблюдаемости фазовых эффектов в реалистическом сценарии эксперимента.

Для обнаружения эффекта ФНО в угловом распределении фрагментов следует использовать импульсы с пиковой интенсивностью не менее чем $I_0 = 2 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$. Трёхкратная вариация сигнала может быть обнаружена при диссоциации из колебательных состояний $v = 0$ или $v = 1$. Некогерентное начальное состояние молекулы, полученное в результате быстрой ионизации, однако, снизит контраст до уровня 20%, а усреднение по интенсивности поля в фокусе лазера практически сделает эффект ненаблюдаемым. Чтобы обнаружить эффект, необходимо исключить усреднение по фокусному объёму либо путём построения эффективной одномерной геометрии эксперимента, либо применив к данным пост-обработку наподобие измерений дифференциальной интенсивности. При достаточной интенсивности лазера, полная вероятность диссоциации должна быть сравнима с вероятностью ионизации, и не должна – согласно результатам представленного моделирования – превосходить её более чем на 60%.

Измерение распределения фрагментов диссоциации по энергии делает наблюдение эффектов ФНО гораздо более вероятным, поскольку распределение по энергии оказывается гораздо более чувствительным к фазе, чем угловое распределение фрагментов. Если условия эксперимента позволяют гарантировать вклад лишь от небольшого отрезка значений пиковой интенсивности, фазовые эффекты могут наблюдаться при заметно более слабых пиковых полях. Например, можно ожидать хорошо заметного эффекта при интенсивности ниже $I_0 = 10^{14} \text{ W/cm}^2$, при которой не ожидается никакого заметного вклада ионизации. Для всех значений интенсивности свыше $I_0 = 10^{14} \text{ W/cm}^2$ можно ожидать заметной ионизации, которая, как ожидается, сопровождала бы хорошо заметные фазовые эффекты в распределении фрагментов по энергиям. Эти эффекты особенно чётко должны проявляться на хвостах энергетического распределения, при энергиях более 1 eV. Наиболее контрастные значения энергий фрагментов зависят от пиковой интенсивности, и контраст не ведёт себя с изменением интенсивности монотонно. При более слабых полях, отвечающих интенсивности импульса от 5×10^{13} до 10^{14} W/cm^2 , наилучший контраст ожидается для энергий в окрестностях 1 eV и 1.5 eV. Для более сильных полей энергии наилучшего контраста меняются. Например, можно ожидать, что фазовые эффекты будут хорошо проявлены для фрагментов с энергиями между 2 и 2.5 eV.

Если геометрия эксперимента и его эффективность не позволяют выделить сиг-

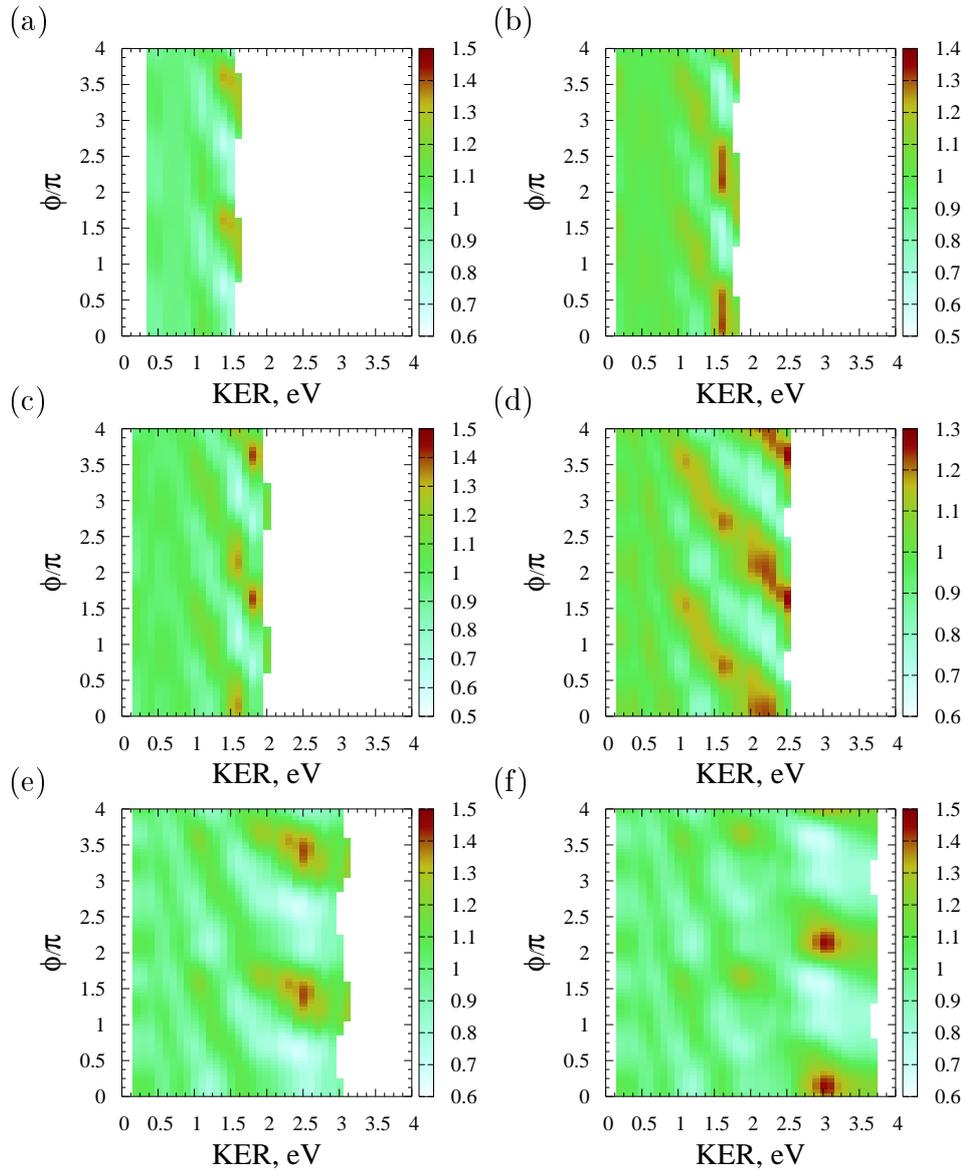


Рис. 6: Зависимость энергетического распределения фрагментов диссоциации после усреднения по фокальному объёму, нормализованного внутри каждого интервала энергий, для канала $D+p$ и разных пиковых интенсивностей: (a) $I_0 = 5 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$; (b) $I_0 = 8 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$; (c) $I_0 = 1 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$; (d) $I_0 = 2 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$; (e) $I_0 = 4 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$; (f) $I_0 = 7 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$. Показаны два периода ФНО. Области, в которых погрешность вычисления превосходит величину эффекта, скрыты. Начальное состояние - некогерентная сумма вибрационных уровней с распределением Фрэнка-Кондона.

налы, отвечающие импульсам фиксированной пиковой интенсивности, фазовые эффекты всё же могут наблюдаться в энергетическом распределении фрагментов после усреднения по фокальному объёму. В этом случае наилучший контраст ожидается на краю энергетического распределения. Поскольку вклад фрагментов с более высокой энергией появляется только при высокой интенсивности импульса, это автоматически гарантирует, что рассматривая хвост энергетического распределения мы одновременно проведём и селекцию по интенсивности импульса. Это позволит сделать фазовые эффекты заметными даже после усреднения сигнала по фокусному объёму.

Содержание главы 5 отражено в работах [10, 12].

Содержание и основные результаты главы 6

Глава 6 посвящена построению теории влияния фазы между несущей и огибающей электромагнитного импульса на конечное состояние взаимодействующей с ним системы. В ней разработана теория, объясняющая любые эффекты влияния фазы, а также позволяющая качественно выявить условия, при которых фаза импульса может оказывать влияние на конечное состояние системы.

В первом разделе главы введён формализм уравнения Шрёдингера с многомерным временем⁸. Рассмотрим нестационарное уравнение Шрёдингера с времязависящим потенциалом

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi = [H_0 + V(t)] \Psi . \quad (4)$$

Здесь Ψ - волновая функция, H_0 - гамильтониан системы при отсутствии внешнего поля, $V(t) = -\mathbf{E}(t) \cdot \mathbf{d} \cos(\omega t + \varphi)$ - потенциал взаимодействия квантовой системы со внешним полем, $\mathbf{E}(t)$ - огибающая поля лазерного импульса, \mathbf{d} - оператор дипольного взаимодействия, ω - несущая частота и φ - фаза между несущей и огибающей (ФНО).

Введём динамику по второму, искусственно введённому времени:

$$(i \frac{\partial}{\partial s} + i \frac{\partial}{\partial t}) \Psi(s, t) = (H_0 + V(s, t; \varphi)) \Psi(s, t) . \quad (5)$$

Не трудно заметить, что если некоторая функция $\Psi(s, t)$ удовлетворяет уравнению (5), то функция $\Psi(t) = \Psi(s, t) |_{s=t}$ будет решением нестационарного уравнения Шрёдингера (4). Действительно, сужая решение на “диагональное” время $s = t$ и подставляя в левую часть уравнения (4), мы получим левую часть уравнения (5)

$$i \frac{\partial}{\partial t} \Psi(t, t) = (i \frac{\partial}{\partial s} + i \frac{\partial}{\partial t}) \Psi(s, t) |_{s=t} .$$

Правые части уравнений (4) и (5) совпадают при $s = t$. Таким образом, как только получено любое решение уравнения с двумерным временем, так сразу ему в соответствие может быть поставлено решение исходного нестационарного уравнения Шрёдингера (4).

Во втором разделе главы предложено разнести временные зависимости потенциала взаимодействия квантовой системы со внешним импульсом, отвечающие периодической зависимости несущей и непериодической зависимости огибающей импульса,

⁸U. Peskin U., Moiseev N., The solution of the time-dependent Schrödinger equation by the (t, t') method: Theory, computational algorithm and applications // J.Chem. Phys. – 1993. – Vol. 99. – P. 4590.

и искать решение уравнения (5) в классе функций, периодических по времени, отвечающему несущей. Для этого будем искать решение в виде разложения в ряд Фурье

$$\Psi(s, t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{in\omega t} \phi_n(s) \quad . \quad (6)$$

Будем называть коэффициенты разложения $\phi_n(s)$ амплитудами n -фотонной эмиссии ($n > 0$) либо абсорбции ($n < 0$).

Вводится вектор n -фотонных амплитуд $\Phi(s; \varphi)$, для которого записывается нестационарное уравнение Шрёдингера

$$i \frac{\partial}{\partial s} \Phi(s; \varphi) = \mathbf{H}(s; \varphi) \Phi(s; \varphi) \quad .$$

При этом, зависимость от фазы в таком представлении можно исключить простым унитарным преобразованием

$$\begin{aligned} [\mathbf{U}(\varphi)]_{mn} &= \delta_{mn} e^{-in\varphi} \quad , \\ \mathbf{H}(\varphi) &= \mathbf{U}^\dagger(\varphi) \mathbf{H}(0) \mathbf{U}(\varphi) \quad , \\ i\partial_s \mathbf{U}(\varphi) \phi(s; \varphi) &= \mathbf{H}(0) \mathbf{U}(\varphi) \phi(s; \varphi) \quad . \end{aligned}$$

Это уравнение позволяет установить главный результат настоящей главы: унитарную эквивалентность решений, отвечающих разным фазам между несущей и огибающей

$$\Phi(s; \varphi) = \mathbf{U}^\dagger(\varphi) \Phi(s; 0) \quad . \quad (7)$$

Это соотношение позволяет *интерпретировать любой эффект ФНО как результат интерференции каналов, отвечающих различным амплитудам n -фотонного обмена.*

Все приведённые результаты получены с использованием весьма общих предположений: допустимость дипольного приближения при описании взаимодействия квантовой системы с полем импульса, и возможностью описания импульса в виде произведения несущей и огибающей. Никаких специальных предположений о физической природе квантовой системы, взаимодействующей с коротким электромагнитным импульсом, не делалось. Это означает, что все эффекты ФНО могут рассматриваться как результат интерференции нескольких n -фотонных каналов.

В третьем разделе главы обсуждается влияние фазы на наблюдаемые, а также вводится величина, позволяющая охарактеризовать степень влияния фазы на наблюдаемую - величина фазового эффекта.

В четвертом и пятом разделах приводится пример применения теории к оценке зависимости вероятности перехода в двухуровневой системе от фазы между несущей и огибающей. Анализ этой модели позволил объяснить важные качественные свойства фазовых эффектов. Результаты такого анализа суммированы в шестом разделе.

Построенная теория базируется на представлении уравнения с двумерным временем, дающим, в рассмотренном случае, возможность разделить части динамики системы, отвечающие периодическим и непериодическим компонентам взаимодействия. Переход к такому представлению дал возможность исключить из уравнений

интересующий нас параметр – фазу – простым линейным преобразованием. Таким образом, появилась возможность указать прямую связь между фазой импульса и волновой функцией конечного состояния.

На примере простой модельной системы показано, что не только длительность импульса, но и его интенсивность оказываются важными для возникновения эффекта. При этом интенсивность импульса играет двоякую роль: с одной стороны, импульс должен быть достаточно интенсивен для возбуждения многофотонных процессов в системе, с другой стороны, он также влияет на вероятность неадиабатических переходов между состояниями, отвечающими различному количеству поглощенных либо испущенных системой фотонов.

Такая интерпретация фазовых эффектов, равно как и качественные результаты, приведённые в главе 5, получили экспериментальное подтверждение в недавней работе⁹

Содержание главы отражено в работе [13].

Заключение

В диссертации представлены результаты, нашедшие применение в широком наборе работ, связанных с квантовыми системами нескольких частиц. На основе оригинальных вычислительных техник и их реализаций автором были проведены численные эксперименты, позволившие выявить новые эффекты и закономерности как для стационарных систем, так и для систем, взаимодействующих с внешними полями. Автору удалось выявить связь, между эффектом Ефимова и линией Филлипса, остававшаяся не обнаруженной в течение почти 50 лет с момента обнаружения этих важных для квантовой задачи нескольких тел эффектов. Автором был предсказан эффект влияния фазы импульса на фотодиссоциацию молекулярных систем, подтвердившийся впоследствии на эксперименте, построена общая теория влияния фазы между несущей и огибающей импульса на конечное состояние квантовой системы. Эта теория позволила выявить общие качественные, касающиеся любых квантовых систем, условия, при которых фаза импульса может влиять на конечное состояние системы, и открыла новые возможности для интерпретации экспериментальных результатов.

Представляются интересными следующие направления развития представленной работы. Техники, использованные для исследования стационарных систем на основе численного решения уравнений Фаддеева допускают многочисленные обобщения. Так, ведётся работа над их применением для кулоновских систем, где получены первые предварительные результаты. Представляет интерес и использование уравнений Фаддеева для исследования нестационарных систем, подобных тем, что были описаны во второй части диссертации. Это позволило бы более полно использовать потенциал методик, представленных автором во второй части, перейти к исследованию более реалистических моделей, исследовать более сложные молекулярные системы. Представленная во второй части теория влияния фазы импульса на конечное со-

⁹Carrier-envelope phase control over fragmentation of H_2^+ and D_2 / Zohrabi M., Berry B., Kling N.G., Jochim B., Severt T., Ablikim U., Betsch K.J., Zeng S., Anis F., Wang Z., Kübel M. // Journal of Physics: Conference Series. – 2015. – Vol. 635. P. 112045.

стояние системы также допускает более широкое применение. Так, представленный формализм позволяет получить нетривиальные результаты в импульсном приближении даже в тех случаях, когда усредненное по времени взаимодействие оказывается равным нулю. Представляет интерес исследование пределов применимости таких моделей. Также представленный анализ позволяет по-новому подойти к результатам обработки численного эксперимента и предложить новые интерпретации процессов взаимодействия квантовых систем с короткими внешними импульсами. Также представляет интерес интерпретация других процессов, связанных с чувствительностью системы к фазе импульса, таких как изомеризация молекул и генерация высоких гармоник.

Работы автора по теме диссертации

- [1] Roudnev V.A., Yakovlev S.L., Sofianos S.A., Bound State Calculations for Three Atoms Without Explicit Partial Wave Decomposition // *Few-Body Systems*. – 2005. – Vol. 37. – P. 179.
- [2] Roudnev V.A., Ultra-low energy elastic scattering in a system of three He atoms // *Chem. Phys. Lett.* – 2003. – Vol. 367. – P. 95.
- [3] Roudnev V.A., Localized component method: application to scattering in a system of three He atoms // *Nucl. Phys. A*. – 2003. – Vol. 737CF. – P. S292.
- [4] Roudnev V., Cavagnero M., Automatic grid construction for few-body quantum-mechanical calculations // *Comp. Phys. Comm.* – 2011. – Vol. 182. – P. 2099.
- [5] Roudnev V., Cavagnero M., Benchmark helium dimer and trimer calculations with a public few-body code // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. – 2011. – Vol. 45. – P. 025101.
- [6] Kolganova E.A., Roudnev V., Cavagnero M., Helium trimer calculations with a public quantum three-body code // *Physics of Atomic Nuclei*. – 2012. – Vol. 75. – P. 1240.
- [7] Roudnev V., Cavagnero M., Approaching universality in weakly bound three-body systems // *Physical Review Letters*. – 2012. – Vol. 108. – P. 110402.
- [8] Roudnev V., Cavagnero M., Universal resonant ultracold molecular scattering // *Physical Review A*. – 2009. – Vol. 79. – P. 014701.
- [9] Roudnev, V. and Cavagnero, M., Resonance phenomena in ultracold dipole-dipole scattering // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. – 2009. – Vol. 42 – P. 044017.
- [10] Roudnev V., Esry B.D., Ben-Itzhak I., Controlling HD^+ and H_2^+ Dissociation with the Carrier-Envelope Phase Difference of an Intense Ultrashort Laser Pulse // *Physical Review Letters*. – 2004. – Vol. 93. – P. 163601.

- [11] Roudnev V., Esry B.D., HD⁺ photodissociation in the scaled coordinate approach // Phys. Rev. A. – 2005. – Vol. 71. – P. 013411.
- [12] Roudnev, V. and Esry, B.D., HD⁺ in a short strong laser pulse: Practical consideration of the observability of carrier-envelope phase effects // Physical Review A. – 2007. – V. 76, p.023403.
- [13] Roudnev, V. and Esry, B.D., General theory of carrier-envelope phase effects // Physical Review Letters. – 2007. – V. 99 – P. 220406.
- [14] Anis, F., Roudnev, V., Cabrera-Trujillo, R. and Esry, B.D., Laser-assisted charge transfer in He²⁺- H collisions // Physical Review A. – 2006. – V. 73. – P. 043414.