Квантово-квазиклассический метод в физике малочастичных систем

В.С. Мележик

Лаборатория теоретической физики им. Н.Н. Боголюбова ОИЯИ, Дубна



Работа поддержана РНФ, грант 075-10-2020-117

FBS 2024, 30 September — 4 October 2024, Khabarovsk, Russian Federation

quantum-quasiclassical approach -> FBS

VOLUME 84, NUMBER 9

PHYSICAL REVIEW LETTERS

28 February 2000

Quantum Energy Flow in Atomic Ions Moving in Magnetic Fields

V.S. Melezhik^{1,*} and P. Schmelcher²

PHYSICAL REVIEW A 69, 032709 (2004)

Stripping and excitation in collisions between p and He⁺($n \le 3$) calculated by a quantum time-dependent approach with semiclassical trajectories

Vladimir S. Melezhik,^{1,*} James S. Cohen,² and Chi-Yu Hu¹

Hyperfine Interactions 138: 351–354, 2001. Recent Progress in Treatment of Sticking and Stripping with Time-Dependent Approach VLADIMIR S. MELEZHIK^{1,2}

PHYSICAL REVIEW A 103, 053109 (2021)

Improving efficiency of sympathetic cooling in atom-ion and atom-atom confined collisions

Vladimir S. Melezhik^{®*}

Eur. Phys. J. A (2022) 58:34	THE EUROPEAN
https://doi.org/10.1140/epja/s10050-022-00684-z	Physical Journal
Investigation of low-lying resonances in breakup of halo nuclei within the time-dependent approach	
Investigation of low-lying resonar	nces in breakup of halo nuclei
within the time-dependent approx	ach

hydrogen atom + EM pulse

- Nondipole effects (NDE) in interaction of atoms with short-wave EM radiation
- NDE nonseparability of CM and electron variables _____ acceleration
- Mechanisms for acceleration of neutral atoms by EM pulses
- Acceleration and «twisting» of atoms by circularly polarized EM pulse

hydrogen atom + EM pulse

- Nondipole effects (NDE) in interaction of atoms with short-wave EM radiation
- NDE nonseparability of CM and electron variables
 acceleration
- Mechanisms for acceleration of neutral atoms by EM pulses
- Acceleration and «twisting» of atoms by circularly polarized EM pulse

 Image: Constraint of a study: chirality, magnetization mapping, transpher of angular momentum to nanoparticls ...

hydrogen atom + EM pulse

- Nondipole effects (NDE) in interaction of atoms with short-wave EM radiation
- NDE nonseparability of CM and electron variables
 acceleration
- Mechanisms for acceleration of neutral atoms by EM pulses
- Acceleration and «twisting» of atoms by circularly polarized EM pulse

electron vortex beams to study: chirality, magnetization mapping, transpher of angular momentum to nanoparticls ...

several proposals to create vortex beams of composite particles (neutrons, protons and atoms)

- Nondipole effects (NDE) in interaction of atoms with short-wave EM radiation
- NDE nonseparability of CM and electron variables
 acceleration
- Mechanisms for acceleration of neutral atoms by EM pulses
- Acceleration and «twisting» of atoms by circularly polarized EM pulse

electron vortex beams to study: chirality, magnetization mapping, transpher of angular momentum to nanoparticls ...

several proposals to create vortex beams of composite particles (neutrons, protons and atoms)

Conclusion & perspectives

Электромагнитная волна + атом

$$\mathbf{x} = E_0 \cos(\omega t - kz) = E_0 \cos(\omega t - \frac{\omega}{c}z)$$

$$\mathbf{k} = z$$

$$\mathbf{x} = B(\omega t, z) = \frac{1}{c}E(\omega t, z)$$

$$\frac{1}{c} = \alpha = \frac{1}{137}$$

оптический диапазон $\lambda \sim 500 \mathrm{nm}$ $\omega \sim 10^{-1} a.u.$

$$\frac{\omega}{c} \simeq \frac{10^{-1}}{137} \to 0$$

Электромагнитная волна + атом

$$\mathbf{x} \quad E(\omega t, z) = E_0 \cos(\omega t - kz) = E_0 \cos(\omega t - \frac{\omega}{c}z)$$

$$\mathbf{k} \quad z$$

$$\mathbf{y} \quad B(\omega t, z) = \frac{1}{c}E(\omega t, z) \qquad \frac{1}{c} = \alpha = \frac{1}{137}$$

оптический диапазон $\lambda \sim 500 \mathrm{nm}$ $\omega \sim 10^{-1} a.u.$

$$rac{\omega}{c} \simeq rac{10^{-1}}{137} o 0$$
 дипольное приближение

Электромагнитная волна + атом

$$\mathbf{x} \quad E(\omega t, z) = E_0 \cos(\omega t - kz) = E_0 \cos(\omega t - \frac{\omega}{c}z)$$

$$\mathbf{k} \quad z$$

$$\mathbf{y} \quad B(\omega t, z) = \frac{1}{c}E(\omega t, z) \qquad \frac{1}{c} = \alpha = \frac{1}{137}$$

оптический диапазон $\lambda \sim 500 \mathrm{nm}$ $\omega \sim 10^{-1} a.u.$

$$\frac{\omega}{c} \simeq \frac{10^{-1}}{137} \to 0$$

дипольное приближение

рентген
$$\lambda \sim (10^2 - 10^{-3})nm$$
 $\omega \sim (1 - 10^4)a.u.$ $\frac{\omega}{c} \sim \frac{1}{137} - 10^2$

Электромагнитная волна + атом

$$\mathbf{x} \quad E(\omega t, z) = E_0 \cos(\omega t - kz) = E_0 \cos(\omega t - \frac{\omega}{c}z)$$

$$\mathbf{k} \quad \mathbf{z}$$

$$\mathbf{y} \quad B(\omega t, z) = \frac{1}{c}E(\omega t, z) \qquad \frac{1}{c} = \alpha = \frac{1}{137}$$

оптический диапазон $\lambda \sim 500 \text{nm}$ $\omega \sim 10^{-1}a.u.$ $\frac{\omega}{c} \simeq \frac{10^{-1}}{137} \to 0$ дипольное приближение рентген $\lambda \sim (10^2 - 10^{-3}) nm$ $\omega \sim (1 - 10^4) a.u.$ $\frac{\omega}{c} \sim \frac{1}{137} - 10^2$



$$V_2(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \frac{1}{c} E_0 f(t) \{ \cos(\omega t) [Z\hat{p}_x - X\hat{p}_z] + \omega \sin(\omega t) [xZ + zX] \}$$



$$V_2(\mathbf{r},\mathbf{R}) = \frac{1}{c} E_0 f(t) \{\cos(\omega t) [Z\hat{p}_x - X\hat{p}_z] + \omega \sin(\omega t) [xZ + zX]\}$$



$$V_2(\mathbf{r},\mathbf{R}) = \frac{1}{c} E_0 f(t) \{\cos(\omega t) [Z\hat{p}_x - X\hat{p}_z] + \omega \sin(\omega t) [xZ + zX]\}$$





$$H(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t) = \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + h_0(\mathbf{r}) + V_1(\mathbf{r}, t) + \frac{V_2(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t)}{h_0(\mathbf{r})} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2\mu} - \frac{1}{r}$$

PHYSICAL REVIEW LETTERS 124, 233202 (2020)

Dissecting Strong-Field Excitation Dynamics with Atomic-Momentum Spectroscopy

A. W. Bray,^{1,2,*} U. Eichmann,^{2,†} and S. Patchkovskii^{2,‡} ¹Australian National University, Canberra ACT 2601, Australia ²Max-Born-Institute, 12489 Berlin, Germany

$$H(\mathbf{r}, \mathbf{R}, t) \rightarrow H_{eff}(\mathbf{r}, t) = h_0(\mathbf{r}) + V_{eff}(\mathbf{r}, t)$$
 3D !!

We propose using the c.m. degrees of freedom of atoms and molecules as a "built-in" monitoring device for observing their internal dynamics in nonperturbative laser fields.

detection of the internal electron quantum dynamics with CM-velocity spectroscopy.

 $\mathbf{P} = \mathbf{M}\mathbf{V} \gg \mathbf{p} = \mathbf{m}\mathbf{v}$

Атом водорода в сильном лазерном поле (квантово-квазиклассический метод)



 $\mathbf{P}=\mathbf{M}\mathbf{V}\gg\mathbf{p}=\mathbf{m}\mathbf{v}$

classical ideal gas perfectly describes gas laws

$$\lambda_{dB} = \frac{h}{MV} \to 0$$

$$\begin{split} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(\mathbf{r},t)\rangle &= [H_0(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r},\mathbf{R}(t))] |\psi(\mathbf{r},t)\rangle \\ H_{cl}(\mathbf{P},\mathbf{R},t) &= \frac{\mathbf{P}^2}{2M} + \langle \psi(\mathbf{r},t) | V(\mathbf{r},\mathbf{R}(t)) |\psi(\mathbf{r},t)\rangle \\ &\frac{d}{dt} \mathbf{P} = -\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} H_{cl}(\mathbf{P},\mathbf{R},t) \\ &\frac{d}{dt} \mathbf{R} = \frac{\partial}{\partial \mathbf{P}} H_{cl}(\mathbf{P},\mathbf{R},t) \end{split}$$

$$\psi(\mathbf{r}, t = -n_T T/2) = \phi_{nlm}(\mathbf{r}),$$

 $\mathbf{R}(t = -n_T T/2) = \mathbf{R}_0, \ \mathbf{P}(t = -n_T T/2) = \mathbf{P}_0,$

J. Phys. A: Math. Theor. 56 (2023) 154003 (15pp)

https://doi.org/10.1088/1751-8121/acc0e9

Quantum-quasiclassical analysis of center-of-mass nonseparability in hydrogen atom stimulated by strong laser fields*

Vladimir S Melezhik

Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Moscow Region 141980, Russia Dubna State University, 19 Universitetskaya St., Moscow Region 141982, Russia

E-mail: melezhik@theor.jinr.ru

Received 23 November 2022; revised 5 February 2023 Accepted for publication 1 March 2023 Published 22 March 2023



Abstract

We have developed a quantum-quasiclassical computational scheme for quantitative treating of the nonseparable quantum-classical dynamics of the 6D hydrogen atom in a strong laser pulse. In this approach, the electron is treated

Атом водорода в сильном лазерном поле (результаты расчетов)



 $\lambda = 800 \text{ nm} (\omega = 0.057 \text{ a.u.})$

 $10^{14} \frac{W}{cm^2}$

Атом водорода в сильном лазерном поле (результаты расчетов)

 $\lambda = 800 \text{ nm} (\omega = 0.057 \text{ a.u.})$

$$\langle E_{kin} \rangle = \frac{1}{T_{out} - T_{in}} \int_{T_{in}}^{T_{out}} \frac{\boldsymbol{P}^2(t)}{2M} dt \sim \int_{-\infty}^{\infty} \left[\sum_{s=x,y,z} |\boldsymbol{P}_s(\omega)|^2 \right] d\omega,$$

$$\langle E_{kin}^{(el)} \rangle = \frac{1}{T_{out} - T_{in}} \int_{T_{in}}^{T_{out}} \frac{\boldsymbol{p}^2(t)}{2\mu} dt \sim \int_{-\infty}^{\infty} \left[\sum_{s=x,y,z} |p_s(\omega)|^2 \right] d\omega$$

$$P_s(\omega) = \int_{T_{in}}^{T_{out}} P_s(t) e^{i\omega t} dt$$

$$p_s(\omega) = \int_{T_{in}}^{T_{out}} \langle |p_s(t)| \rangle e^{i\omega t} dt$$

$$\langle |p_s(t)| \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r},t) \hat{p}_s \psi(\mathbf{r},t) d\mathbf{r}.$$



Атом водорода в сильном лазерном поле (результаты расчетов)



 $\lambda = 400 \text{ nm} (\omega = 0.114 \text{ a.u.})$

Перспективные задачи: ускорение атомов ИКИ



Vol 461 29 October 2009 doi:10.1038/nature08481

nature

Acceleration of neutral atoms in strong short-pulse laser fields

U. Eichmann^{1,2}, T. Nubbemeyer¹, H. Rottke¹ & W. Sandner^{1,2}

 $a_{exp} \sim 10^{14} q$

 $8 \times 10^{15} \frac{W}{cm^2}$, (700 - 1100) nm, (40 - 100) fs, He, Ne atoms

Механизмы ускорения атомов ЭМ импульсами





Article

Acceleration of Neutral Atoms by Strong Short-Wavelength Short-Range Electromagnetic Pulses

Vladimir S. Melezhik ^{1,2,*} and Sara Shadmehri ^{1,*}

- Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Moscow Region 141980, Russian Federation
- ² Dubna State University, 19 Universitetskaya Street, Dubna, Moscow Region 141982, Russian Federation
- * Correspondence: melezhik@theor.jinr.ru (V.S.M.); shadmehri@theor.jinr.ru (S.S.)

Citation: Melezhik, V.S.; Shadmehri,

S. Acceleration of Neutral Atoms by

Strong Short-Wavelength

Short-Range Electromagnetic Pulses.

Photonics 2023, 10, 1290. https://

doi.org/10.3390/photonics10121290



$$P_g(\omega) = |\langle \psi | \phi_{100} \rangle|^2 = |\int \psi(\mathbf{r}, \omega, T_{out}) \phi_{100}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}|^2$$

$$P_{ex} = \sum_{n=2}^{\infty} P_n = \sum_{n=2}^{N'} P_n + \sum_{n=N'+1}^{\infty} P_n$$
$$P_{ion} = \int_0^{+\infty} \frac{dP}{dE} dE$$

$$\sum_{n=1}^{\infty} P_n + \int_0^{+\infty} \frac{dP}{dE} dE = 1$$

Shadmehri, S.; Melezhik, V.S. *Laser Phys.* **2023**, *33*, 026001.





$$\hbar\omega = \frac{1}{2n^2} - \frac{1}{2n'^2}$$
 $\omega = 0.38, 0.44, 0.47$ (a.u.)

 $P_n(\omega,t) \xrightarrow{t \to T_{out}} P_n(\omega)$



 $P_n(\omega,t) \xrightarrow{t \to T_{out}} P_n(\omega)$



 $H_{n=1} + \hbar \omega \rightarrow H_{n'}$, n' = 2,

 $P_n(\omega,t) \xrightarrow{t \to T_{out}} P_n(\omega)$





 $H_{n=1} + \hbar \omega \rightarrow H_{n'}$ n' = 3.

 $P_n(\omega,t) \xrightarrow{t \to T_{out}} P_n(\omega)$



 $H_{n=1} + \hbar \omega \rightarrow H_{n'}$ n' = 4





two-photon transition $2\hbar\omega \approx 0.47$ a.u. for n = 1 and n' = 4peak in $P_{ex}(\omega)$ at $\omega = 0.24$ a.u.

 $P_n(\omega,t) \xrightarrow{t \to T_{out}} P_n(\omega)$



two-photon transition $2\hbar\omega \approx 0.47$ a.u. for n = 1 and n' = 4



 $P_n(\omega,t) \xrightarrow{t \to T_{out}} P_n(\omega)$



 $P_n(\omega,t) \xrightarrow{t \to T_{out}} P_n(\omega)$



non-resonant mechanism







strong correlation between $P_{ex} + P_{ion}$ and V_y (CM momentum = MV_y)



strong correlation between $P_{ex} + P_{ion}$ and V_y (CM momentum = MV_y)

mechanism of CM acceleration:

generation of nonzero dipole between proton and electron cloud transferred either to excited states of atom or to its continuum



 $\omega = 0.48$ a.u. one-photon resonant transition $n = 1 \rightarrow n' = 4$

 $\omega = 0.24$ a.u. two-photon resonant transition $n = 1 \rightarrow n' = 4$

 $\omega=0.8a.u.$ non-resonant mechanism









области перспективные для ускорения атомов, где подавлена ионизация

Vortex beams of atoms and molecules

Alon Luski¹[†], Yair Segev¹[†][‡], Rea David¹, Ora Bitton¹, Hila Nadler¹, A. Ronny Barnea², Alexey Gorlach³, Ori Cheshnovsky², Ido Kaminer³, Edvardas Narevicius¹*

SCIENCE • 1 Sep 2021 • Vol 373, Issue 6559 • pp. 1105-1109



ig. 2. Experimental setup for the production and detection of atomic and molecular vortex beams.



Fig. 4. Comparison of intensity measured in the experiment to theory, with simulated contribution of only the atoms.





 10^{14} BT/CM^2 , ~10¢c, $hv \sim 133B \sim 0.48a.u.$

Линейная поляризация (є=0)







 10^{14} BT/CM^2 , ~10 c, $hv \sim 133 \text{ B} \sim 0.48 \text{ a.u.}$

Линейная поляризация (є=0)









 10^{14} BT/CM^2 , ~10¢c, $hv \sim 133B \sim 0.48a.u.$

циркулярная поляризация (є=1)





 10^{14} BT/CM^2 , ~10 c, $hv \sim 133 \text{ B} \sim 0.48 \text{ a.u.}$

циркулярная поляризация (є=1)











 10^{14} BT/CM^2 , ~10 cpc, $hv \sim 133 \text{ B} \sim 0.48 \text{ a.u.}$

эллиптическая поляризация (є=0-1)



 10^{14} BT/CM^2 , ~10 cpc, $hv \sim 133 \text{ B} \sim 0.48 \text{ a.u.}$

эллиптическая поляризация (є=0-1)



 10^{14} BT/CM^2 , ~10 c, $hv \sim 133B \sim 0.48 \text{ a.u.}$

циркулярная поляризация (є=1)



10¹⁴ вт/см², ~10фс, hv ~13эВ~ 0.48а.u.

```
циркулярная поляризация (є=1)
```



- исследовано ускорение атома за счет недипольных поправок kr в ЭМ волне и магнитной компоненты B/с в ней
- обнаружена сильная корреляция между V (MV) и P_{ex}+ P_{ion}
- установлены два резонансных механизма ускорения:
 через однофотонное и двухфотонное возбуждение атома

однофотонный V ~ I

двухфотонный V ~ I²

- исследовано ускорение атома за счет недипольных поправок kr в ЭМ волне и магнитной компоненты B/с в ней
- обнаружена сильная корреляция между V (MV) и P_{ex}+ P_{ion}
- установлены два резонансных механизма ускорения:
 через однофотонное и двухфотонное возбуждение атома

однофотонный V ~ I

двухфотонный V ~ I²

трехфотонный V~I³ ?

- исследовано ускорение атома за счет недипольных поправок kr в ЭМ волне и магнитной компоненты B/с в ней
- обнаружена сильная корреляция между V (MV) и P_{ex}+ P_{ion}
- установлены два резонансных механизма ускорения:
 через однофотонное и двухфотонное возбуждение атома

<u>потенциальные приложения:</u>

ускоренные атомы — литография микро-чипов для микро-электроники, диагностика плазмы в ТОКАМАК, ... «закрученные» атомы — модификация фундаментальных взаимодействий, новый «инструмент» для исследования атомных столкновений, ...

- исследовано ускорение атома за счет недипольных поправок kr в ЭМ волне и магнитной компоненты B/с в ней
- обнаружена сильная корреляция между V (MV) и P_{ex}+ P_{ion}
- установлены два резонансных механизма ускорения:
 через однофотонное и двухфотонное возбуждение атома
- недипольные эффекты (учет движения ядер) во взаимод. атомов с ИКИ V₂(r, R, t) = ^w_c E₀(....): + генерация высоких гармоник, влияние на стабилизацию атомов, ... создан задел для исследования недипольных эффектов: различные атомы, учет пространственной неоднородности ЭМ импульса, различные поляризации, закрученные атомы, ...

гибридный квантово-квазиклассический метод + DVR

- S Shadmehri, V S Melezhik, Laser Phys. 33, 026001 (2023)
- V Melezhik, J. Phys. A56, 154003 (2023)
- V S Melezhik, S Shadmehri, Photonics 10(12), 1290 (2023)
- V S Melezhik, S Shadmehri, arXiv: 2408.08613