

УНИВЕРЗИТЕТ У КРАГУЈЕВЦУ

ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

Јасна Стевановић

КОРИГОВАНА БРЗИНА ПРЕЛАЗА У АДК ТЕОРИЈИ У ПРОЦЕСУ ТУНЕЛНЕ ЈОНИЗАЦИЈЕ

Докторска дисертација

Крагујевац, 2014.

I Аутор		
Име и презиме:	Јасна Стевановић	
Датум и место рођења:	15.10.1979. године, Крагујевац	
Садашње запослење:	Асистент на ПМФ-у у Крагујевцу, група физика	

II Докторска дисертација

Наслов:	Коригована брзина прелаза у АДК теорији у процесу тунелне јонизације
Број страница:	140
Број слика:	38
Број библиографских података:	140
Установа и место где је рад израђен:	ПМФ, Крагујевац
Научна област (УДК):	537.531:539.186
Ментор:	Др Владимир Ристић, ПМФ Крагујевац

III Оцена и одбрана

Датум пријаве теме:	10.09.2009. године
Број одлуке и датум прихватања докторске дисертације:	

Комисија за оцену подобности теме и кандидата:

• Др Владимир Ристић, ванредни професор Природно-математичког факултета

Универзитета у Крагујевцу, ужа научна област: Атомска, молекулска и оптичка физика;

• Др Наташа Недељковић, редовни професор Физичког факултета

Универзитета у Београду, ужа научна област: Физика атома и молекула;

• Др Бранислав Чабрић, редовни професор Природно-математичког факултета

Универзитета у Крагујевцу, ужа научна област: Физика кондензоване материје.

Комисија за оцену и одбрану докторске дисертације:

• Др Владимир Ристић, редовни професор Природно-математичког факултета

Универзитета у Крагујевцу, ужа научна област: Атомска, молекулска и оптичка физика;

• Др Наташа Недељковић, редовни професор Физичког факултета

Универзитета у Београду, ужа научна област: Физика атома и молекула;

Др Мирко Радуловић, доцент Природно-математичког факултета

Универзитета у Крагујевцу, ужа научна област: Атомска, молекулска и оптичка физика.

Датум одбране дисертације:

Захвалнице

Ова докторска дисертација урађена је на Институту за физику Природноматематичког факултета Универзитета у Крагујевцу под руководством проф. др Владимира Ристића.

Прво бих желела да се најискреније захвалим ментору проф. др Владимиру Ристићу за несебичну помоћ, стрпљење и корисне савете током рада на докторској дисертацији. Без његове подршке овај рад не би био могућ.

Такође се захваљујем члановима комисије, проф. др Наташи Недељковић и доц. др Мирку Радуловићу, који су својим интересовањем и корисним сугестијама допринели успешном завршетку ове дисертације.

Захвалност дугујем свим колегиницама и колегама са Института за физику, који су ми пружили подршку и помоћ.

Велику захвалност дугујем породици и мом Горану на разумевању, стрпљењу и безрезервној подршци током израде дисертације.

Списак најважнијих физичких величина

- γ Келдишов параметар адијабатичности
- *E*_i енергија јонизације
- *F* јачина електричног поља ласера
- S(t) временски зависни део дејства
- *w_{if}* брзина тунелне јонизације
- $au_{\scriptscriptstyle 0}\,$ повратна тачка
- au коригована повратна тачка

САДРЖАЈ

Увод	6
1. О ласерима	12
1.1. Принцип рада ласера	12
1.2. Компоненте ласерског система	15
1.3. Кинетичке једначине насељености нивоа и шема прелаза CO ₂ ласера	16
1.4. Интензитет ласерског зрачења	21
2. Интеракција атома и ласерског поља и унитарне трансформације	26
2.1. О атомима	
2.2. Теоријски опис интеракције атома и ласерског поља	34
2.2.1. Калибрационе трансформације	
2.3. Прелазак на квазикласичан опис интеракције атома и ласерског поља	
3. Апроксимативне методе	39
3.1. Једноелектронска апроксимација	39
3.2. Апроксимација јаког поља	40
3.2.1. С-матрична теорија	41
3.2.2. Амплитуда прелаза у апроксимацији јаког поља	42
4. Механизми јонизације атома	46
4.1. Мултифотонска јонизација	46
4.2. Јонизација изнад прага	49
4.3. Тунелна јонизација	50
4.4. Јонизација преко баријере – Надбаријерна јонизација	55
4.5. Параметар адијабатичности ү	58
5. АДК теорија	61
5.1. Теорија Келдиша	61
5.1.2. Примена Ландау – Дихнеове адијабатске апроксимације на теорију Келдиша	63

5.1.3. Гранични случајеви Келдишове теорије
5.1.3.1. Мултифотонска јонизација 67
5.1.3.2. Тунелна јонизација
5.2. АДК теорија – основе и примена 70
5. 2. 1. Корекција повратне тачке у оквиру АДК теорије при тунелној јонизацији атома 77
5.2.2. Утицај коригованог облика повратне тачке на брзину прелаза у АДК теорији 83
6. Модификација члана за јонизациони потенцијал93
6.1. Промена енергије јонизације у интензивним ласерским пољима
6.2. Поређење формула за модификовани јонизациони потенцијал E_{imod} и E_{iAD} корекције 101
7. Анализа формула за брзину јонизације у АДК теорији у зависности од параметара $E_{ m i}$ и $E_{ m imod}$ 110
7.1. Брзина јонизације за линеарно поларизовано ласерско поље $w_{\rm ADK}^{\rm lin}$ у зависности од $E_{\rm i}$ и $E_{\rm imod}$
7.2. Брзина јонизације за циркуларно поларизовано ласерско поље w_{ADK}^{cir} у зависности од E_i , E_{imod} и почетног импулса избаченог електрона p
7.3. Анализа формуле <i>w_{сADK}</i> у зависности од релација за <i>E</i> _i и <i>E</i> _{imod} у процесу тунелне јонизације атома
ЗАКЉУЧАК 127
ЛИТЕРАТУРА

Увод

Једна од појава која је поставила темеље квантној физици јесте фотоелектрични ефекат, који је давне 1887. године открио немачки физичар Херц [1]. Фотоелектрични ефекат је појава да метали емитују електроне када се осветле ултраљубичастим зрачењем и представља једноставан пример интеракције електромагнетног зрачења са материјом, који се може објаснити Ајнштајновом теоријом фотоефекта, која је заснована на Планковој хипотези о квантима енергије: електрони у металу апсорбују по један фотон из упадног снопа електромагнетног зрачења и при томе добију довољно енергије да напусте метал.

Почетком 1930-их Гоперт Мајер [2] предлаже теорију према којој електрони не морају увек апсорбовати по један фотон, него је могућа и истовремена апсорпција два фотона. Ова идеја је била веома плодоносна, јер је омогућила разумевање проблема везаних за интеракцију електромагнетног зрачења са материјом, а представља и почетак развоја теорије мултифотонске јонизације. Први ласер конструисан је почетком 1960–их од стране Мајнмана [3] и од тада до данас ласер представља основни извор јаких поља у лабораторијским експериментима.

Наравно, проналаском ласера и његовом употребом у експериментима, јавила се сасвим нова врста проблема везаних за интеракцију електромагнетног зрачења и електрона, било да је реч о везаним или слободним електронима. Једно од експерименталних запажање процеса мултифотонске јонизације је у раду Делонеа и Воронова из 1965. године [4], где је коришћен рубински ласер (енергије фотона ~ 2 eV) за јонизацију атома аргона и ксенона чији су јонизациони потенцијали већи од 10 eV. У овим експериментима не само да су детектовани јони, него и нелинеарна зависност броја јона од интензитета ласера. У ствари, сам изум ласера узроковао је развој нове гране теоријске и експерименталне физике која се данас назива физика јаког поља.

Међу првим триковима које су експерименталци савладали била је продукција варница помоћу ласера, користећи се методом Q-прекидача [5]. Појава варница у гасовима представљала је директан доказ да се десила јонизација [6]. Поставило се питање: како може рубински ласер који емитује фотоне енергије око 2eV да јонизује атом чији је јонизациони потенцијал већи од 10eV, пошто је ова чињеница у

супротности са Ајнштајновим законом фотоелектричног ефекта? Један од првих покушаја да се ова појава објасни налазимо у раду [7], укључујући и проширење теорије двофотонске јонизације коју је 1931. године предложила Гоперт-Мајерова, као и применом теорија базираних на временски зависној теорији пертурбације. Након интензивног рада, како експерименталног тако и теоријског, закључено је да варнице у гасу настају у тзв. процесу јонизацијетри корака:

1. Мултифотонском јонизацијом нечистоћа у ваздуху које имају знатно мањи јонизациони потенцијал него молекули ваздуха (кисеоник 12,1eV, азот 15,6eV) добијамо неколико слободних електрона.

 Ови слободни електрони у ласерском пољу могу да апсорбују *n* фотона за време судара са тежим честицама ваздуха које одржавају укупан импулс при интеракцији.
 Након неколико оваквих судара, слободни електрони добијају већу енергију од енергије јонизације молекула/атома ваздуха. На овај начин се добија додатни електрон. Процес се наставља све док се гас у потпуности не јонизује. Овај феномен зове се *каскадна* или *лавинска* јонизација.

У првом кораку каскадне јонизације одвија се мултифотонска јонизација – везани електрон апсорбује најмање n фотона из ласерског поља како би савладао јонизациони потенцијал атома E_i . Први експерименти МФЈ успешно су моделирани применом најнижег реда теорије пертурбације која је предвиђала да је вероватноћа јонизације директно пропорционална n-том степену интензитета ласерског поља [8]. Интензивно изучавање МФЈ у пертурбационом режиму наставља се и током 1970-их; посебно се могу истаћи открића као што су резонантни ефекат, ефекат кохеренције и утицај дужине пулса [8], што је даље резултирало открићем процеса јонизације изнад прага [9] и генерације хармоника вишег реда [10, 11].

Уопштенији приступ решавању проблема јонизације је формулисао Келдиш у раду из 1964. године, у коме предлаже нову теорију јонизације која се разликује од предвиђања за МФЈ [12]. Према Келдишу, атом у јаком ласерском може да се јонизује тако што електрон тунеловањем кроз потенцијалну баријеру прелази из везаног стања у континуум (детаљније о овоме у поглављима о механизмима јонизације и о АДК теорији). Келдиш је такође предложио и коришћење апроксимације јаког поља у теоријској анализи: на електрон везан у атому делује само Кулоново поље, док се након јонизације електрон креће само под утицајем ласерског поља, тако да се утицај матичног јона заменарује.

7

На пољу теорије мултифотонске јонизације нарочито се издвајају два рада: Фајсалов рад [13] из 1973. и Рајсов рад [14] из 1980. године. Заједно са Келдишовим радом, ова три рада чине тзв. Келдиш-Фајсал-Рајс теорију (КФР). Важно је напоменути да сва тројица аутора имају различите приступе процесу јонизације ласерским пољем: наиме, Келдиш предлаже теорију тунеловања под условом да је $U_p >> E_i$ (U_p је пондеромоторни потенцијал атома) и примену апроксимације јаког поља; Фајсалова теорија важи у случају високих фреквенција, тј. када је испуњено $U_p >> E_i$ и $\omega >> E_i / \hbar$, док Рајсова теорија захтева само услов $U_p >> E_i$. И поред јасне разлике између ових теорија, уобичајен је заједнички назив за све три теорије као КФР теорија. Рајсов рад је остао непримећен у научној заједници тако да је тек 1988. године извршено прво поређење са експерименталним мерењима што је представљало прекретницу у изучавању ласером индукованих појава у непертурбованом режиму јер је по први пут показано слагање између експеримента и теорије [15].

Такође, употребом CO₂ ласера у експериментима, створени су услови за јонизацију тунеловањем. Средином 1980-их експериментално је уочена јонизација тунеловањем [16], двадесет година након објављивања Келдишовог рада, те су тако отклоњене сумње у исправност јонизације тунеловањем. Од тада је тунеловање један од основних механизама јонизације атома и молекула јаким ласерским пољима.

Пошто теорија пертурбација није могла успешно да објасни појаву тунелне јонизације, постојали су бројни покушаји да се то уради у оквиру Келдишове теорије, при чему се јонизациони процес представља као подрхтавање електрона у деформисаном потенцијалу "обученог" атома, са извесном могућношћу да изађе напоље уз помоћ тунелирања. Један од успешних покушаја описа тог процеса јесте АДК (Амосов–Делоне–Крајнов) теорија [17], која је заснована на теорији тунеловања Ландау-Лифшица [18], Смирнова-Чибисова [19], Переломова, Попова и Терентјева (ППТ теорија) [20].

АДК теорија јесте теорија тунелне јонизације комплексних атома интензивним ласерским пољем. У оквиру ове теорије, по аналогији са Келдишовом теоријом [12], атом се третира квантно-механички, а његова таласна функција се апроксимира асимптотским изразом таласне функције валентног електрона, на великим удаљеностима од атомског језгра. Идеја је да се спољашње поље види као статично електрично поље, тако да се електрон везан у атому, суочава са потенцијалном баријером коначне ширине, кроз коју може да тунелује и да пређе у континуум. У

8

случају комплексних атома, више-електронски ефекат је урачунат увођењем ефективног квантног броја [17]. Показало се да АДК формула сасвим добро интерпретира експерименталне резултате [21, 22].

Апроксимација јаког поља је једини практични приступ разматрања процеса јонизације у интензивним пољима [23-25] осим егзактне нумеричке интеграције Шредингерове једначине. Пошто комплетно аналитичко решење Шредингерове једначине, које укључује и атомски потенцијал и ласерско поље још увек не постоји, рачун се изводи или преко атомских таласних функција или преко Волковљевих таласних фукнкција [20, 26, 27].

Стандардна теорија пертурбација користи атомски базис као референтна стања, јер се претпоставља да је интеракција услед присуства ласерског поља слаба у поређењу са Кулоновим пољем. Међутим, кад је ласерско поље јако, број атомских стања која учествују у процесу јонизације се знатно повећа и теорија пертурбација више не може успешно да објасни експерименталне резултате. Због тога је постало неопходно формулусати нове приступе у опису процеса јонизације, а један од њих је и АДК теорија на чијим прорачунима и корекцијама се заснива ова дисертација.

У оквиру АДК теорије [28, 29], коригује се важан предекспонент у изразу за вероватноћу јонизације, укључивањем Кулонове интеракције као апроксимације првог реда у повратну тачку, што је побољшало раније развијен метод.

У првом делу дисертације су дефинисани појмови и основне карактеристике ласерског поља и атома, као и теорије које описују интеракцију између њих (поглавља 1 и 2). У експериментима, приликом проучавања процеса тунелне јонизације, користе се најчешће CO_2 ласери, те су због тога и додатно анализирани (поглавље 1). Пошто се за опис интеракције система атом-ласер овде користи квазикласичан приступ, у коме се ласерско поље описује класично, док се атом третира квантно-механички, у поглављу 2 дефинисане су основне особине атома битне за анализу и разумевање ефеката у јаком ласерском пољу.

Увођење у проблематику даље се наставља формулацијом апроксимативних метода за решавање проблема јонизације у поглављу 3, а то су једноелектронска апроксимација и апроксимација јаког поља. У наставку се дефинишу основни механизми јонизације: мултифотонска јонизација, јонизација изнад прага, тунелна јонизација и надбаријерна јонизација, као и неке важне карактеристике ових процеса. У оквиру овог поглавља дата је и дефиниција параметра адијабатичности , који одређује у ком режиму се одвија процес јонизације (поглавље 4).

У поглављу 5, као основа АДК теорије је описана теорија Келдиша, са посебним освртом на процесе мултифотонске јонизације и тунелне јонизације, као два гранична случаја Келдишове теорије. У делу 5.2. се говори искључиво о коригованој АДК теорији, при чему се повратна тачка τ коригује укључивањем Кулонове интеракције као поправке првог реда у све фазе формулације АДК теорије. Наиме, при стварању теорије поменута интеракција је била потпуно занемарена када је одређивана повратна тачка. Повратна тачка је појам који у АДК теорију улази преко Ландау-Дихнеове адијабатске апроксимације [30, 31] и одређује се из услова једнакости енергија почетног и крајњег стања електрона. Формула за брзину прелаза у адијабатској апроксимацији се добија преко имагинарног дела дејства $S(\tau)$, а коригована повратна тачка значајно утиче на ове величине, што ће се видети у поглављу које говори о АДК теорији.

У поглављу 6 приказано је извођење модификованог члана за јонизациони потенцијал атома $E_{\rm imod}$. У складу са сталним повећањем интензитета ласера у експериментима, очекује се да ће модификовање израза за јонизациони потенцијал допринети бољем разумевању процеса тунелне јонизације у оквирима АДК теорије, а у складу са условима савремених експеримената. Добијена корекција јонизационог потенцијала биће упоређена са резултатима других аутора, а потом ће бити размотрено која корекција даје бољи резултат.

Поглавље 7 у дисертацији бави се проблематиком увођења модификованог (додатног) члана за јонизациони потенцијал E_{imod} у формулу за брзину прелаза w_{ADK} , као и у кориговану формулу w_{cADK} ; раније коригованом у смислу увођења Кулонове интеракције у повратну тачку. Испитаће се утицај E_{imod} на брзину прелаза w_{ADK} у случају линеарног и циркуларног поља, као и зависност w_{cADK} од E_{imod} , за различите атоме и за различите интензитете ласерског поља. Такође, дискутоваће се могућност експерименталне провере важења АДК теорије и кориговане брзине прелаза у том процесу.

У закључку ће бити дат сажет преглед резултата и достигнућа рада. Дискутоваће се добијени резултати у светлу постојећих експерименталних података у процесима тунелне јонизације атома.

Такође треба нагласити да се за прорачуне у овој дисертацији користи Атомски систем јединица (енг. *Atomic units*) у општем случају, пошто је за теоријске прорачуне у

10

оквиру атомске физике СИ систем ипак непрактичан. На пример, у случају атома водоника карактеристично растојање од електрона до језгра атома је реда величине Боровог радијуса прве орбите, тј реда 10^{-11} m, што значи да је метар као јединица за дужину у атомској физици превелика, те је природно узети да јединица дужине одговара Боровом радијусу a_0 . Због тога се у атомској физици дефинише нов систем јединица, у коме важи да су фундаменталне константе као: редукована Планкова константа \hbar , елементарно наелектрисање електрона eи маса електрона m_e једнаке јединици:

 $\hbar = 1$, e = 1, $m_e = 1$.

Фундаменталне константе дефинисане на овај начин омогућавају нам да дефинишемо и основне атомске јединице као што су: дужина, брзина, време, енергија итд. што ће бити посебно наглашено у тексту дисертације (тамо где је атомски систем јединица коришћен у прорачунима).

1. О ласерима

1.1. Принцип рада ласера

Реч ласер је скраћеница од *Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation* и преводи се као – појачање светлости помоћу стимулисане емисије зрачења. У односу на видљиву светлост, ласерско зрачење је монохроматско, кохерентно (просторно и временски) и изузетно високе снаге. У основи процеса ласерског зрачења је процес стимулисане, принудно индуковане емисије светлости.

Да би се у потпуности разумео физички принцип ласерског зрачења потребно је присетити се Боровог модела атома. Атом се састоји од атомског језгра и електронског омотача, а његова унутрашња енергија је квантована тј. може имати само одређене, строго дефинисане вредности. По природним законима сваки атом тежи да буде у стању минималне унутрашње енергије, односно да се налази у основном стању. У случају када се и налази у побуђеном стању, атом тежи да се врати у основно стање. Енергија атома је, у суштини, садржана у његовом електронском омотачу. Електрони из тог омотача могу да заузимају само тачно одређене орбите, које одређују енергијски ниво атома као целине. У основном стању, електрони се у атому налазе на најнижим енергијским орбитама; у побуђеном стању, један или више електрона у атому се налазе на вишим енергијским орбитама. Сваки побуђени атом тежи да пређе са вишег енергијског нивоа на нижи енергијски ниво, тако што ће електрон да се спусти са више енергијске орбите на нижу, емитујући при томе фотон чија је енергија једнака разлици енергија посматраних орбита.

Други битан ефекат за разумевање рада ласера је стимулисана емисија зрачења, коју је описао Алберт Ајнштајн (*A. Einstein* 1879-1955) 1917. године [32]. Ако на атом падне фотон довољно високе енергије, тада атом може да апсорбује тај фотон и да пређе у побуђено стање (стање са већом енергијом). Атом тежи да се врати у стање са нижом енергијом (које не мора нужно да буде основно стање) помоћу емисије фотона на један од два могућа начина (**слика** 1.1): спонтаним емитовањем фотона (спонтана

12

емисија, слика 1.1а) или емитовањем фотона на основу присуства електромагнетног зрачења одговарајуће фреквенције (стимулисана емисија, слика 1.16).



Слика 1.1. Шематски дијаграм процеса: а) спонтане емисије, б) стимулисане емисије, ц) апсорпције

Процеси спонтане и стимулисане емисије и апсорпције, до којих долази при интеракцији електромагнетних таласа са материјом су три фундаменталне појаве које се користе у ласерима (слика 1.1). Енергија фотона која се емитује једнака је разлици енергија вишег и нижег енергијског нивоа са кога се одиграва прелаз:

$$E_2 - E_1 = h v_{21}, \tag{1.1.1}$$

при чему је h Планкова константа (*Max K. E. L. Planck* 1858 –1947), а v_{21} је фреквенција емитованог фотона.

Насељеност (популација) нивоа у термодинамичкој равнотежи описује се Болцмановом (*L. Boltzmann* 1844-1906) формулом статистичке расподеле:

$$\left(\frac{N_2}{N_1}\right)_{tdr} = e^{-\frac{E_2 - E_1}{k_B T}}$$
(1.1.2)

где су N_1 , N_2 насељености за нивое 1, 2 респективно; $k_B = 1.381 \cdot 10^{-23}$ J/K је Болцманова константа, док је *T* је апсолутна температура средине. Под појмом *средина* подразумева се систем атома или молекула, који се карактерише скупом квантних стања и њима одговарајућих енергија. У случају термодинамичке равнотеже је $N_2 < N_1$ (јер је T > 0), број атома на неком енергијском нивоу експоненцијално опада са порастом енергије и то се назива нормалном насељеношћу енергијских нивоа (**слика 1.2а**.). У системима са нормалном насељеношћу број атома у нижем стању увек је већи од броја атома у вишем енергијском стању, па је и апсорпција израженија од стимулисане емисије; такав систем апсорбује зрачење фреквенције *v*.

У случају када је $N_2 > N_1$, средина делује као појачавач, остварена је инверзна насељеност (случај када у неком побуђеном енергетском нивоу има више атома него у неком нижем нивоу, слика 1.26), а таква средина се назива активна средина. Ако би се на неки начин велики број фотона довео у побуђено стање (самим тим мали број фотона би остао у основном стању), тада би емитовани фотон са одговарајућом фреквенцијом изазвао појаву већег броја фотона који би били у фази са њим. То је тзв. *ефекат лавине*, где један фотон изазива појаву стимулисане емисије већег броја фотона. Енергијски нивои на које побуђени електрони прелазе бирају се тако да буду метастабилни $\tau \sim 10^{-5}$ s, како се сви атоми (односно њихови побуђени електрони) не би деексцитовали истовремено. Ако је могуће довођењем спољашње енергије одржавати стање популационе инверзије, тада ће стимулисана емисија фотона бити све снажнија, и у једном тренутку, формираће се сноп монохроматске, кохерентне и поларизоване светлости – ласерске светлости.



Слика 1.2. Насељеност нивоа: а) нормална насељеност енергијских нивоа, б) инверзна насељеност енергијских нивоа.

Шематски је тај процес представљен на слици 1.26: атоми апсорбују енергију од неког јаког спољашњег извора и прелазе из основног, стабилног стања енергије E_0 у нестабилно стање E_2 , $\tau_{E_2} \sim 10^{-8}$ s. У том стању се задржавају врло кратко и прелазе у метастабилно стање E_1 . Ту остају релативно дуго, а потом прелазе у основно стање E_0 . Ниво E_1 се брзо пуни, а споро празни, па се његова насељеност повећава. Ниво E_0 се брзо празни, а споро пуни, па се након неког времена дешава да је насељеност нивоа E_1 већа од насељености нивоа E_0 , $N_1 > N_0$. У таквим условима светлост која се добија преласком са другог на први ниво се може појачати стимулисаним емисијама, а сам процес побуђивања атома активне средине назива се пумпање ласера.

Ласери су уређаји у којима процес стимулисане емисије доминира у односу на процес апсорпције зрачења. Стимулисано зрачење добијено помоћу ласера назива се ласерско зрачење. Сви фотони ласерског зрачења имају исту фреквенцију, фазу, поларизацију, правац и смер кретања, који се поклапају са карактеристикама фотона упадног зрачења које индукује ласерско зрачење. Све то омогућава огромне концентрације светлосне снаге на врло малим површинама, што је веома корисно у разним практичним применама у индустрији, медицини итд.

1.2. Компоненте ласерског система

Основне компоненте ласерског система (слика 1.3) су:

- 1. радно тело активна средина
- 2. систем за побуђивање активне средине
- 3. систем за појачање стимулисаног зрачења оптички резонатор
- 4. систем за хлађење

Улога радног тела је да генерише велики број фотона помоћу стимулисане емисије, који ће бити у фази и кретаће се у истом смеру. Радно тело може бити направљено од елемената у сва три агрегатна стања, а најчешће има облик цилиндра.

Улога система за побуђивање је пумпање енергије у активну средину и њено довођење у метастабилно стање са популационом инверзијом. Систем за побуђивање може бити: оптички, струјни и високофреквентни. СО₂ ласер је гасни молекуларни ласер који се побуђује електричним пумпањем, односно пропуштањем струје кроз гас, при чему се у гасу формирају јони и слободни електрони. Тако настали јони и електрони убрзавају се спољашњим електричним пољем па им се повећава кинетичка енергија; приликом судара они преводе неутрални атом у побуђено стање.

Резонаторски систем се састоји од две рефлектујуће површине између којих се налази активна средина. Његова улога је да појача емисију фотона, формирањем позитивне повратне спреге. Ови системи се најчешће праве од огледала која рефлектују фотоне, те их враћају у активну средину, која потом помоћу стимулисане емисије генерише нове фотоне. Резонаторски системи се деле на: планпаралелне, концентричне (сферне), конфокалне, хемисферичне и резонаторе великог полупречника. У ласерском резонатору електромагнетни талас се шири између два огледала резонатора. Под одређеним условима може се успоставити стационарна конфигурација електромагнетног поља која у ствари представља светлосни стојећи талас, који се у отвореном резонатору појављује након великог броја пролазака таласа кроз материјалну средину. Оваква једна конфигурација електромагнетног поља назива се мод. Модови електромагнетног поља могу бити трансверзални или лонгитудинални. Трансверзални модови одређују расподелу електричног поља у равни која је нормална на осу резонатора, док лонгитудинални одређују расподелу поља у равни која је паралелна са осом резонатора.



Слика 1.3. Приказ основних делова ласера

Приликом рада ласера, загрева се активна средина. Пошто топлота неповољно утиче на рад ласера, конструкцијом ласера предвиђен је и систем за хлађење ласера.

1.3. Кинетичке једначине насељености нивоа и шема прелаза CO₂ ласера

Квантни прелази између енергијских стања могу се апроксимативно описати кинетичким једначинама, које се још називају једначине брзине или једначине баланса. Кинетичке једначине описују временску промену средње вредности броја фотона и насељености енергијских нивоа. При анализи услова остваривања инверзне насељености методом кинетичких једначина, разматра се само неколико битних квантних стања између којих се одвијају прелази. У зависности од броја таквих стања, говори се о шеми са 2, 3 или више нивоа. Претпоставимо да имамо m таквих нивоа. Тада су, у општем случају, кинетичке једначине дате са m-1 диференцијалних једначина:

$$\frac{dN_j}{dt} = \sum_{k=1}^{j-1} B_{kj}^* N_k + \sum_{k=1+j}^m P_{kj} N_k - N_j \left(\sum_{k=1+j}^m B_{jk}^* + \sum_{k=1}^{j-1} P_{jk} \right), \quad j = 2, ..., m$$
(1.3.1a)

и условом константности укупног броја честица у систему N_t .

$$\sum_{i=1}^{m} N_i = N_i.$$
(1.3.16)

Једначина (1.3.1а) описује временску промену насељености побуђених стања N_i . N_{j} се повећава преласком атома са нижих нивоа k = 1, ..., j - 1 на ниво j, при чему долази до апсорпције фотона фреквенције $v_{jk} = (E_j - E_k) / h$, са вероватноћом $B_{kj}^{*} = \rho(v_{jk})B_{kj}$ (први члан на десној страни једначине; $\rho(v_{jk})$ је густина енергије спољашњег зрачења). Насељеност N_i повећава се и приликом преласка атома са виших нивоа k = j + 1, ..., m на нижи ниво j, са вероватноћом $P_{kj} = A_{kj} + B_{kj}^* + S_{kj}$, где је A_{kj} вероватноћа спонтане емисије (Ајнштајнов коефицијент за спонтану емисију), а $B_{kj}^* = \rho(v_{jk})B_{kj}$ вероватноћа стимулисане емисије фотона фреквенције $v_{kj} = (E_k - E_j)/h$. Члан S_{kj} је вероватноћа прелаза $k \to j$ без емисије фотона, при чему се енергија ослобођена при квантном прелазу најчешће претвара у топлотну енергију. Аналогно, N_i се смањује при прелазу на више нивое који су узроковани апсорпцијама (вероватноћа B_{jk}^*), као и при прелазу на ниже нивое, са вероватноћом P_{jk} . Треба напоменути да су могући су и релаксациони прелази без емисије фотона са нивоа ј на више нивоа, који дају допринос уз B_{jk}^* , као и релаксациони прелази са нижих нивоа на ниво j, који дају допринос уз B_{kj}^* ; сви ти прелази су занемарљиви у оптичком дијапазону фреквенција која се овде разматра, јер је тада $\left|E_{k}-E_{j}\right|>>k_{B}T$.

Систем једначина (1.3.1) решава се у стационарном режиму, када је $dN_j / dt = 0$, а једначине (1.3.1) се тада називају једначинама баланса; при даљој анализи тих једначина врше се поједностављења. Обично се претпоставља да пумпање делује само на један прелаз, најчешће $1 \rightarrow m$. То се постиже избором таквог спектралног састава емисије извора пумпања и апсорпционих нивоа активне средине за који је вероватноћа прелаза из основног стања у горње побуђено стање знатно већа од вероватноће свих других квантних прелаза у активној средини. Стања квантног система обично се

представљају идеализованим бесконачно уским недегенерисаним енергијским нивоима (важи услов једнакости Ајнштајнових коефицијената за апсорпцију, односно спонтану емисију: $B_{kj} = B_{jk}$). Такође, неки од чланова B_{kj}^* и P_{kj} система (1.3.1) једнаки су нули, јер су могући само они прелази $j \leftrightarrow k$ који су дозвољени изборним правилима (која опет зависе од карактеристика активне средине). На **слици 1.4**. је представљена шема ласера са 4 нивоа, пошто је CO₂ четворостепени ласер. Овде ће бити наведене кинетичке једначине насељености нивоа за дати ласер и изведен израз за фактор појачања Δn .



Слика 1.4. Шема ласера са 4 нивоа, уз назначене вероватноће прелаза које се разматрају. Прелазом између 2. и 1. нивоа генерише се ласерско зрачење.

Стимулисана емисија у оваквом систему настаје приликом преласка атома из стања $E_2 \rightarrow E_1$; метастабилни ниво је енергијски ниво E_2 , а разлика $E_1 - E_0 >> k_B T$, како би се онемогућио прелаз са основног стања на E_1 под утицајем топлотних флуктуација. Због овога се ласери са четири нивоа морају хладити. Када је услов $E_1 - E_0 >> k_B T$ испуњен, у термодинамичкој равнотежи насељеност нивоа E_1 је незнатна.

Циљ је одредити фактор појачања

$$\Delta n = \frac{N_2 - N_1}{N_t},$$
 (1.3.2)

уз услов да су брзине нерадијативних прелаза S_{32} , S_{10} велике.

Кинетичке једначине насељености нивоа за систем приказан на слици 1.4. облика су:

$$\frac{dN_3}{dt} = N_0 B_{03}^* - N_3 \left(\underline{A_{30} + B_{30}^* + S_{30}} + S_{32} \right)$$

$$\frac{dN_2}{dt} = N_1 B_{12}^* + N_3 S_{32} - N_2 \left(\underline{B_{21}^* + A_{21} + S_{21}} \right)$$

$$\frac{dN_1}{dt} = N_2 \left(\underline{B_{21}^* + A_{21} + S_{21}} \right) - N_1 \left(B_{12}^* + A_{10} + S_{10} \right)$$

$$N_0 + N_1 + N_2 + N_3 = N_t$$
(1.3.3)

Из услова стационарности $dN_j / dt = 0$, j = 1, 2, 3. а користећи краћи запис $P_{kj} = A_{kj} + B_{kj}^* + S_{kj}$ даље следи:

$$N_{0}B_{03}^{*} = N_{3}(P_{30} + S_{32}) \qquad N_{0}B_{03}^{*} = N_{3}(P_{30} + S_{32}) N_{1}B_{12}^{*} + N_{3}S_{32} = N_{2}P_{21} \qquad N_{1}B_{12}^{*} + N_{3}S_{32} = N_{1}(B_{12}^{*} + A_{10} + S_{10}) N_{2}P_{21} = N_{1}(B_{12}^{*} + A_{10} + S_{10}) \qquad \rightarrow N_{2}P_{21} = N_{1}(B_{12}^{*} + A_{10} + S_{10})$$
(1.3.4)
$$N_{0} + N_{1} + N_{2} + N_{3} = N_{t} \qquad N_{0} + N_{1} + N_{2} + N_{3} = N_{t}$$

$$N_{0}B_{03}^{*} = N_{3}(P_{30} + S_{32})$$

$$N_{0}B_{03}^{*} = N_{3}(P_{30} + S_{32})$$

$$N_{3}S_{32} = N_{1}(B_{12}^{*} + A_{10} + S_{10} - B_{12}^{*})$$

$$N_{2}P_{21} = N_{1}(B_{12}^{*} + A_{10} + S_{10}) \rightarrow$$

$$N_{0} + N_{1} + N_{2} + N_{3} = N_{t}$$

$$N_{0} = N_{3}\frac{(P_{30} + S_{32})}{B_{03}^{*}}$$

$$N_{2} = N_{1}\frac{(B_{12}^{*} + A_{10} + S_{10})}{P_{21}}$$

$$N_{3} = N_{1}\frac{(A_{10} + S_{10})}{S_{32}}$$

$$N_{0} + N_{1} + N_{2} + N_{3} = N_{t}$$

$$(1.3.5)$$

$$N_{0} = N_{1} \frac{\left(A_{10} + S_{10}\right)}{S_{32}} \frac{\left(P_{30} + S_{32}\right)}{B_{03}^{*}}$$

$$N_{2} = N_{1} \frac{\left(B_{12}^{*} + A_{10} + S_{10}\right)}{P_{21}}$$

$$N_{3} = N_{1} \frac{\left(A_{10} + S_{10}\right)}{S_{32}}$$

$$N_{0} + N_{1} + N_{2} + N_{3} = N_{t}$$
(1.3.6)

Друга једначина по реду из система једначина (1.3.6) :

$$N_2 = N_1 \frac{\left(B_{12}^* + A_{10} + S_{10}\right)}{P_{21}}$$

биће написана у нешто другачијој форми, како би се добио облик погодан за израчунавање фактора појачања тј. израза (1.3.2):

$$\frac{N_2 - N_1}{N_1} = \frac{B_{12}^* + A_{10} + S_{10} - P_{21}}{P_{21}}.$$
(1.3.7)

Дакле, пошто су све три насељености нивоа: N_0, N_2, N_3 изражене преко N_1 , а у имениоцу за фактор појачања стоји укупна популација нивоа N_t , даљим трансформацијама добија се:

$$N_{1} \frac{\left(A_{10} + S_{10}\right)}{S_{32}} \frac{\left(P_{30} + S_{32}\right)}{B_{03}^{*}} + N_{1} + N_{1} \frac{\left(B_{12}^{*} + A_{10} + S_{10}\right)}{P_{21}} + N_{1} \frac{\left(A_{10} + S_{10}\right)}{S_{32}} = N_{t}, \quad (1.3.8)$$

односно

$$N_{1}\left(\frac{\left(A_{10}+S_{10}\right)}{S_{32}}\frac{\left(P_{30}+S_{32}\right)}{B_{03}^{*}}+1+\frac{\left(B_{12}^{*}+A_{10}+S_{10}\right)}{P_{21}}+\frac{\left(A_{10}+S_{10}\right)}{S_{32}}\right)=N_{t}$$
(1.3.9)

ИЛИ

$$N_{1} = \frac{N_{t}S_{32}B_{03}^{*}P_{21}}{\left(A_{10} + S_{10}\right)\left(P_{30} + S_{32}\right)P_{21} + S_{32}B_{03}^{*}P_{21} + \left(B_{12}^{*} + A_{10} + S_{10}\right)B_{03}^{*}S_{32} + \left(A_{10} + S_{10}\right)B_{03}^{*}P_{21}} (1.3.10)$$

Комбинацијом са једначином (1.3.7) и сређивањем израза (уз подсећање да су брзине нерадијативних прелаза S_{32} , S_{10} велике, те дељењем најпре са S_{32}), уз напомену да је $B_{12}^* = B_{21}^*$ добија се:

$$\frac{N_2 - N_1}{N_t} = \frac{B_{03}^* \left(A_{10} - S_{10} - A_{21} - S_{21}\right)}{P_{21} \left(A_{10} + S_{10}\right) \left[1 + \frac{P_{30} + B_{03}^*}{S_{32}}\right] + B_{03}^* \left(P_{21} + B_{12}^* + A_{10} + S_{10}\right)}.$$
 (1.3.11)

Даљим апроксимацијама, које следе из почетних услова:

$$\begin{split} S_{32} >> P_{30} + B_{03}^*, \\ S_{10} >> P_{21} + B_{12}^* + A_{10} \end{split}$$

добија се коначан израз за фактор појачања:

$$\Delta n \approx \frac{B_{03}^*}{P_{21} + B_{03}^*} . \tag{1.3.12}$$

Из добијеног односа видимо да је фактор појачања Δn управо пропорционалан са вероватноћом апсорпције B_{03}^* фотона фреквенције $v_{30} = (E_3 - E_0)/h$. Код ласерских система са четири нивоа, нижи активни ниво није основни ниво и ненасељен је, тако да се инверзна насељеност може постићи са знатно мањим снагама пумпања, односно превођењем малог броја атома у побуђено стање; у случају система са три нивоа, инверзна насељеност се постиже само ако се више од половине активних честица налази у побуђеном стању. На основу тога, закључује се да је овакав ласерски систем ефикасан, пошто ради у режиму са мањим снагама пумпања.

1.4. Интензитет ласерског зрачења

За време дугог истраживања у оптици уопштено је претпостављано да су сви оптички процеси линеарни. Међутим, након проналаска и развоја ласера, испоставило се да се могу јавити и нелинеарни ефекти приликом интеракције светлости са супстанцијом. Разлог појаве нелинеарних ефеката је висок интензитет, постигнут ласерским пољем, који је потребан да би се посматрало нелинеарно понашање. За нелинеарно понашање потребно је средство као катализатор; нелинеарност је својство средине, а не својство поља.

Линеарна оптика важи за интензитете светлости ~ 10^8 W/cm², и уз помоћ ње могу се описати свакодневне оптичке појаве, од дуге и плавог неба, до холограма и оптичких влакана. Ако се светлост посматра као честица, у међуделовању светлост-средина, ради се о расејању или апсорпцији појединачних фотона, што у великој мери зависи од флукса: броја фотона који прођу поред средине (атома) у јединици времена по јединици површине.

Нелинеарна оптика је област која се бави прочавањем феномена који настају модификацијом оптичких особина дате средине под утицајем оптичког поља. Назив "нелинеарна", потиче од тога што промене на средини зависе од нелинеарног односа јачине електричног поља и вектора поларизације, а ласер је управо довољно јак извор светлости да нелинеарне феномене индукује. На тај начин, бројни ефекти које је било немогуће открити коришћењем конвенционалних извора светлости, постали су видљиви уз помоћ интензивних ласерских поља. Нелинеарна оптика важи за интензитете ласера од 10^8 W/cm² – 10^{12} W/cm².

Нелинеарност се постиже на следећи начин: за слабија електрична поља атомски диполни моменат се повећава се линеарно са задатим пољем. Нелинеарност долази до изражаја када амплитуда спољашњег електричног поља достигне вредност ~10¹¹ V/m, односно вредност упоредиву са унутар-атомским пољем, што је данас лако постићи коришћењем интензивног ласерског поља.

Ширење светлости у нелинеарној средини описано је нелинеарном таласном једначином, која се изводи из Максвелових једначина и која представља основну једначину нелинеарне оптике:

$$\nabla^2 \vec{F} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \vec{F}}{\partial t^2} = \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{P}}{\partial t^2}$$
(1.4.1)

овде је \vec{P} поларизабилност, \vec{F} електрично поље, c брзина светлости у вакууму и μ_0 је пермеабилност вакуума. За линеарну средину однос између \vec{P} и \vec{F} је:

$$\vec{P} = \varepsilon_0 \chi \vec{F}$$

где су: ε_0 диелектрична константа вакуума, а χ је електрична сусцептибилност која је повезана са индексом преламања средине релацијом $n^2 = 1 + \chi = \varepsilon / \varepsilon_0$, ε је пермитивност диелектрика. У случају нелинеарности, функција поларизабилности \vec{P} развија се у Тејлоров ред:

$$\vec{P} = a_1 \vec{F} + \frac{1}{2} a_2 \vec{F}^2 + \frac{1}{6} a_3 \vec{F}^3 + \frac{1}{24} a_4 \vec{F}^4 + \dots$$
(1.4.2)

где је први члан линеаран, док су остали чланови нелинеарни. Тејлорови коефицијенти *a*_i карактеристичне су константе материје.

Интеракција зрачење-материја може да се анализира у квазикласичној слици, све док је број фотона у сваком моду електромагнетног зрачења много већи од 1. У делу 2.3, једначина 2.3.1, показано је да се ласерско зрачење интензитета 10⁹ W/cm² карактерише великим бројем фотона, те је квазикласичан приступ готово увек адекватан. Квантизација и средине и ласерског поља неопходна је само у случају када је број фотона по моду електромагнетног зрачења реда јединице.

Пошто се овде ради о нелинеарним ефектима (тј. о јонизацији атома у јаком електромагнетном пољу – ласерском пољу), погодније је да се то спољашње зрачење

окарактерише интензитетом зрачења, а не бројем фотона, јер се ласерско поље третира класично, а атом се схвата као квантни објект.

У случају ласера, електрична поља израчена појединим атомима кохерентно се суперпонирају у резултантно ненулто поље $\vec{F}(\vec{r},t)$, док би код некохерентних извора светлости, резултатно поље било једнако нули у датој тачки простора и у датом тренутку времена. Због тога је могуће ласерско зрачење представити равним монохроматским таласом

$$\vec{F}(\vec{r},t) = \vec{F}_0 \cos\left(\vec{k}\,\vec{r} - \omega t + \varphi\right) \tag{1.4.3}$$

где је \vec{F}_0 амплитуда таласа, \vec{k} таласни вектор, φ -фазни фактор, ω фреквенција повезана са таласним вектором изразом $\omega = ck$.

Вектор \vec{F}_0 заједно са фазом φ дефинише поларизацију таласа, у случају (1.4.3) талас је линеарно поларизован. У равном таласу електрично поље \vec{F} и магнетно поље \vec{H} имају једнаке апсолутне вредности, леже у равни ортогоналној на \vec{n} и узајамно су ортогонални. Орт \vec{n} дефинише правац пропагације таласа и једнак је $\vec{n} = \vec{k} / k$.

Као што је опште познато, ласерски интензитет дефинише се као усредњени модул Поинтиговог вектора [33]:

$$I = c^2 \varepsilon_0 \overline{\left| F(t) \times B(t) \right|} = \frac{1}{2} c \varepsilon_0 F^2$$
(1.4.4)

Овде смо користили релацију између електричног и магнетног поља за електромагнетни талас у вакууму $F = c \cdot B$ [33], где је c брзина светлости, а електрично поље ласерског импулса изражено је као $F = F_0 \cdot \cos(\omega t)$, уз чињеницу да је $\left|\overline{\cos^2(\omega t)}\right| = 1/2$.

Јединица за интензитет ласера *I* је енергетски флукс, односно [W/cm²]; то је количина енергије која у јединици времена прође кроз јединицу површине, ортогоналне на правац кретања таласа.

Такође (у атомском систему јединица $\hbar = 1, e = 1, m_e = 1$) може се израчинати атомска јачина поља, односно поље водониковог атома за прву Борову орбиту:

$$F_{\rm at} = \frac{e}{a_0^2} = 5, 2 \cdot 10^9 \, \frac{\rm V}{\rm cm},$$

где је величина a_0 Боров радијус (атомска јединица дужине) и има вредност $a_0 = 4\pi\varepsilon_0 / \mu e^2 = 0.529 \cdot 10^{-10} \,\mathrm{m}$.

Поређење конкретне јачине спољашњег поља (на пример ласерског поља) са атомском јачином поља, омогућава нам да изведемо непосредан закључак о карактеру датог поља. Услов $F \ll F_{at}$ означава да је јачина спољашњег поља мали параметар у односу на атомску јачину поља и то је управо оно што нам математички олакшава решавање проблема, јер су тада дозвољене одређене апроксимације.

Интензитет ласера који одговара атомској јачини поља F_{at} је на основу (1.4.4), ако се узме у обзир да је и $1/4\pi\epsilon_0 = 1$ (атомски систем јединица):

$$I_{at} = \frac{c}{8\pi} F_{at}^2$$

$$I_{at} = 3.51 \cdot 10^{16} \frac{W}{cm^2}$$
(1.4.5)

У експериментима који су у вези са нашим теоријским истраживањем процеса јонизације [16, 34, 35], користе се CO₂ ласери, јер углавном раде у тунелном режиму. Општа карактеристика тзв. тунелног режима јесте да је параметар адијабатичности $\gamma \ll 1$, фотони овог типа ласера имају велике таласне дужине (и мању енергију ω од енергије коју имају фотони ласера који раде у блиској инфрацрвеној и видљивој области), што значи да је потребан велики број CO₂ фотона да би се јонизовао један једини атом. Због тога је у случају јонизације атома CO₂ ласером, главни тип јонизације тунелна јонизација, док је допринос мултифотонских процеса занемарљив. Такође, фреквенција ласера ω , у области спектра интересантној за нас (CO₂ ласер, $\lambda \sim 9 \mu$ m), је реда 10^{14} s⁻¹. CO₂ ласер један је од најраније развијених гасних ласера (1964. године) [36] и један је од најчешће коришћених у медицини и индустрији [37, 38] због своје ефикасности. Ови ласери стварају зрак инфрацрвене светлости у границама таласних дужина $\lambda = 9, 4 - 10, 6 \mu$ m, што одговара тзв. термалној инфрацрвеној области. Снага ових ласера може да варира у широком опсегу, у зависности од потребе експеримента. У индустрији, најчешће се користе у обради материјала.

У нашим теоријским разматрањима претпостављено је да се ради о ласерима чији се интензитети могу сматрати малим у поређењу са атомским интензитетом. Дакле, јачина поља коју производи ласер много је мања од атомске јачине поља тј. $F \ll F_{at}$. У каснијем излагању биће јасно да управо овај услов омогућава коришћење квазикласичне апроксимације.

24

У општем случају, ласерско зрачење може да се емитује путем два различита режима рада ласера: стационарног и импулсног [39, 40]. У стационарном режиму светлост се емитује непрекидно од тренутка када се ласер укључи све до његовог искључења. У импулсном режиму светлост се емитује у тачно одређеним временским интервалима, једном или више пута са задатом фреквенцијом понављања. Уколико је дужина трајања једног ласерског импулса реда величине једне фемтосекунде $(1 \text{fs} = 10^{-15} \text{s})$, онда је реч о ултракратким ласерским импулсима, који садрже неколико оптичких циклуса (осцилација вектора електричног поља).

Оно што ласер као експериметално средство чини посебно интересантним јесте могућност контролисања великог броја параметара који одређују својства светлости као што су: интензитет, поларизација, фреквенција, правац ширења и дужина трајања импулса. Од посебног значаја за примене у науци јесте ласерско зрачење које се емитује у виду низа импулса чија је дужина трајања реда величине једне фемтосекунде – ултракратки импулси. Концентрисањем целокупне снаге импулса у веома кратки временски интервал и добрим фокусирањем ласерског снопа, могу се и при релативно малим енергијама постићи енормно високи интензитети зрачења, а великом временском резолуцијом омогућено је посматрање ултрабрзих динамичких процеса у молекуларним и атомским системима. Пред тога, развој ултракратких ласерских система омогућио је контролу различитих процеса и нихово циљано управљање. Наиме, променом спектралне фазе и амплитуде појединих компоненти ласерског импулса добија се зрачење којим је могуће један квантно-механички систем превести у жељено коначно стање [41]. Осим у науци, ови ласери се користе и у индустрији (приликом обраде материјала), медицини (дијагностика и терапија), разним гранама технике (телекомуникације, нанотехнологије, оптоелектроника итд.). Карактеристично за ултракратке ласерске импулсе јесте промена релативног положаја максимума носећег таласа и врха обвојнице таласа. Овај положај је одређен величином која се зове апсолутна фаза, а управо је за примену ултракратких импулса у науци, од великог значаја могућност контролисања и мерења апсолутне фазе. У физици и хемији је посебно интересантно понашање атомских и молекулских система у ласерском пољу високог интензитета. Тако се нпр. у интеракцији ултракратких ласерских импулса и атома гаса може генерисати Х-зрачење дужине трајања од неколико стотина атосекунди $(1as = 10^{-18}s)$, што отвара једно ново подручје истраживања (*attoscience*) у којем је могуће проучавати унутаратомску динамику [42, 43].

2. Интеракција атома и ласерског поља и унитарне трансформације

У овом раду користи се квазикласичан приступ у коме се ласерско поље описује класично, а атомски систем квантно-механички. Пошто је у претходном поглављу већ дискутовано ласерско поље са више аспеката, пре него што пређемо на опис интеракције система атом-ласер, дефинисаћемо и неке карактеристике атома. У уводу овог поглавља истакнуто је да се атом посматра као квантно-механички систем, те ће најпре сажето бити описано решавање временски независне Шредингерове једначине за атом водоника. Такође, биће наведене поједине основне особине атома које су битне за разматрање ефеката који се јављају у јаком светлосном пољу, односно у ласерском пољу, а самим тим и за наше истраживање.

2.1. О атомима

Проучавање структуре атома водоника било је веома значајно у развоју физичких теорија о атомима и молекулима. Боров модел атома успешно је објаснио општу структуру спектра атома водоника и њему сличних јона, али не и фину структуру спектралних линија овог атома. Шредингерова једначина може егзактно да се реши (што подразумева одређивање дозвољених енергија и таласних функција) само за једноелектронске системе, као што су: атом водоника, јонизовани атоми и молекули који у свом омотачу имају само један електрон (H, He⁺, Li²⁺) тј. водоников изоелектронски низ. Решавањем Шредингерове једначине за атом водоника (и једноелектронске системе) доказано је да је Шредингерова једначина тачна и створен је концепт, тј. основа за одређивање структуре вишеелектронских атома (као и структуре молекула), методама приближног решавања диференцијалних једначина.

Најпре ће бити разматран општи проблем честице у централном (сферносиметричном) потенцијалу, који зависи од удаљености честице од фиксираног почетка, а такав је управо Кулонов потенцијал. У складу са тим, приликом решавања диференцијалних једначина, могу се увести сферне координате [30]. Шредингерова једначина описује како се квантно стање неког физичког система мења са временом, а функција $\Psi(\vec{r},t)$ је таласна функција квантног система. Шредингерова једначина за честицу масе *m* у потенцијалу $V(\vec{r},t)$ је облика:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\Psi + V\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$
(2.1.1)

где је ∇^2 је Лапласов оператор, а $i = \sqrt{-1}$. Пошто су у једначини (2.1.1) заступљени специфични диференцијални оператори, она је линеарна парцијална диференцијална једначина другог реда. Као што је познато из квантне механике, само Ψ нема посебан физички значај, али $\Psi^*\Psi$ (реалан број) је значајно јер описује вероватноћу налажења физичког система (честице) у одређеном стању тј. у реалном стању.

Најпре треба раздвојити просторну и временску зависност таласне функције на следећи начин:

$$\Psi(\vec{r},t) = \psi(\vec{r})f(t), \qquad (2.1.2)$$

па се претпостави да се разматра физички систем са статичким потенцијалом

$$V(\vec{r},t) = V(\vec{r}).$$
 (2.1.3)

Заменом релације (2.1.3) у (2.1.1), те дељењем са $\Psi(\vec{r},t)$ долази се до просторно и временски раздвојене Шредингерове једначине облика:

$$\frac{1}{\psi(\vec{r})} \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \right] = E = \frac{1}{f(t)} \left(i\hbar \frac{\partial f(t)}{\partial t} \right)$$
(2.1.4)

где је *E* сепарациона константа изједначена са енергијом честице. Решавајући десну страну једначине (2.1.4), добија се диференцијална једначина облика:

$$\frac{d}{dt}f(t) + i\frac{E}{\hbar}f(t) = 0$$

чије је решење

$$f(t) = \operatorname{A} \exp\left(-\frac{i E t}{\hbar}\right).$$
(2.1.5)

Аналогно, на левој страни једначине (2.1.4) остаје временски независна Шредингерова једначина облика:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\vec{r}) + V(\vec{r})\psi(\vec{r}) = E\psi(\vec{r}).$$
(2.1.6)

27

Да би се решила Шредингерова једначина за атом водоника, најпре треба да се моделује дати атом. Електрон масе m_e , се креће око језгра атома, односно протона масе m_p ; како би се математички поједноставио проблем, сматра се да језгро атома водоника има бесконачно већу масу од електрона, па се уместо проблема два тела решава проблем кретања електрона око непомичног језгра и уводи се редукована маса:

$$\mu = \frac{m_e m_p}{m_e + m_p} \,. \tag{2.1.7}$$

Електрон у атому водоника кружи око протона (језгра) на удаљености *r*, под утицајем централног потенцијала

$$V(\vec{r}) = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r}.$$
(2.1.8)

Увођењем нових релација (2.1.7, 2.1.8) у (2.1.6), добија се временски независна Шредингерова једначина за атом водоника облика:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\nabla^2\psi(\vec{r}) - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_o r}\,\psi(\vec{r}) = E\,\psi(\vec{r})$$
(2.1.9)

Због особине централног потенцијала, (2.1.9) може да се напише у сферним поларним координатама (r, θ, φ) , тако да је r из једначине (2.1.9) једна од тих координата, у границама [30]:

$$r \ge 0,$$

$$\pi > \theta \ge 0,$$

$$2\pi > \phi \ge 0.$$

(2.1.10)

Ако се Лапласов оператор ∇^2 напише у сферним координатама [30], временски независна Шредингерова једначина за атом водоника сада постаје:

$$-\frac{\hbar^{2}}{2\mu}\frac{1}{r^{2}\sin\theta}\left[\sin\theta\frac{\partial}{\partial r}\left(r^{2}\frac{\partial\psi(r,\theta,\varphi)}{\partial r}\right)+\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi(r,\theta,\varphi)}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial^{2}\psi(r,\theta,\varphi)}{\partial\phi^{2}}\right]-\frac{e^{2}}{4\pi\varepsilon_{0}r}\psi(r,\theta,\varphi)=E\psi(r,\theta,\varphi)$$
(2.1.11)

За решавање једначине (2.1.11) користи се метод раздвајања променљивих, увођењем производа три независне функције од по једне променљиве:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi) \tag{2.1.12}$$

при чему су R(r), $\Theta(\theta)$, $\Phi(\varphi)$ решења једначине (2.1.11) и испуњавају услове једнозначности, непрекидности и коначности при одређеним условима.

Једначина (2.1.11) користећи уведене функције (2.1.12) даље се решава тако што се издвоје одговарајући парцијални изводи (који потом прелазе у тотални диференцијал, јер су функције само од по једне променљиве) и цео израз (2.1.11) се подели са производом функција $R(r)\Theta(\theta)\Phi(\varphi)$:

$$-\frac{\hbar^{2}}{2\mu}\frac{1}{r^{2}\sin\theta}\left[\frac{1}{R(r)}\sin\theta\frac{d}{dr}\left(r^{2}\frac{dR(r)}{dr}\right)+\right.\\\left.+\frac{1}{\Theta(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}\right)+\right.\\\left.+\frac{1}{\sin\theta}\frac{1}{\Phi(\varphi)}\frac{d^{2}\Phi(\varphi)}{d\phi^{2}}\right]-\left.-\frac{e^{2}}{4\pi\varepsilon_{0}r}-E=0\right]$$

Даљим сређивањем, односно груписањем појединачних зависности од координата r, θ, φ добијају се три одвојене диференцијалне једначине за водоников атом:

$$\frac{d^2 \Phi(\phi)}{d\phi^2} + m_l^2 \Phi(\phi) = 0, \qquad (2.1.13)$$

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin\theta \frac{d\Theta(\theta)}{d\theta} \right) + \left(l(l+1) - \frac{m_l^2}{\sin^2\theta} \right) \Theta(\theta) = 0, \qquad (2.1.14)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR(r)}{dr} \right) + \left(\frac{\hbar^2 l(l+1)}{2\mu r^2} + V(r) \right) R(r) = ER(r) .$$
(2.1.15)

Функције R(r), $\Theta(\theta)$, $\Phi(\varphi)$ су решења једначине (2.1.11) и испуњавају услове једнозначности, непрекидности и коначности, онда када параметри m_l , l, E у горњим једначинама (2.1.13-15) имају одређене вредности условљене правилима квантне механике – дискретне вредности.

На овај начин се временски независна Шредингерова једначина (2.1.11), која је парцијална диференцијална једначина од три променљиве, своди на три диференцијалне једначине, које зависе само од по једне променљиве и могу се независно решавати.

Физички прихватљива решења једначина (2.1.13-15) су одређена следећим условима: функције угла $\Theta(\theta)$ и $\Phi(\varphi)$ морају да буду коначне за све релевантне вредности углова θ , φ . Таласна функција $\psi(r, \theta, \varphi)$ мора да буде једнозначна у свакој тачки; пошто су $\varphi = \varphi_0$ и $\varphi = \varphi_0 + 2\pi$, иста физичка тачка за произвољно φ_0 , тако да

важи $\Phi(\varphi) = \Phi(\varphi + 2\pi)$, за свако φ – услов периодичности функције $\Phi(\varphi)$. Решење диференцијалне једначине (2.1.13) за функцију $\Phi(\varphi)$ је облика:

$$\Phi_{m_l}(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im_l \varphi} \,. \tag{2.1.16}$$

при чему m_l мора да буде цео број (следи из услова периодичности функције $\Phi(\varphi)$), а могуће вредности за m_l – магнетни орбитални квантни број су : $m_l = 0, \pm 1, \pm 2...$

Диференцијална једначина за $\Theta(\theta)$, односно једначина (2.1.14) се решава увођењем смене $\alpha = \cos \theta$, па је нормирано решење за $\Theta(\theta)$ [44-46]:

$$\Theta_{lm_{l}}(\theta) = \sqrt{\frac{(l-m_{l})!}{(l+m_{l})!}} \frac{2l+1}{2} P_{l}^{m_{l}}(\cos\theta)$$
(2.1.17)

У једначини (2.1.17) члан $P_l^{m_l}(\cos\theta)$ представља придружене (асоциране) Лежандрове полиноме; они се дефинишу преко Лежандрових полинома $P_l(x)$:

$$P_l^{m_l}(\cos\theta) = (1 - x^2)^{\frac{|m_l|}{2}} (\frac{d}{dx})^{|m_l|} P_l(x) .$$
(2.1.18)

У теорији специјалних функција, Лежандрови полиноми су дефинисани Родригезовом формулом:

$$P_{l}(x) = \frac{1}{2^{l} l!} \left(\frac{d}{dx}\right)^{l} \left(x^{2} - 1\right)^{l}$$
(2.1.19)

Наравно, да би Родригезова формула (2.1.19) имала смисла, l мора да буде ненегативан и цео број l = 0, 1, 2, ...; за дато l постоји (2l+1) могућих вредности m_l . На овај начин смо дефинисали могуће вредности за l – орбитални квантни број, док су вредности за m_l сада из скупа $m_l = -l, ..., l$.

Радијална функција R(r) добија се решавањем диференцијалне једначине (2.1.15) под условом да се потенцијална енергија електрона поништава када $r \to \infty$, јер у бесконачности протон нема никаквог физичког утицаја на електрон; да би електрон кружио око протона, мора да буде испуњено $r \neq \infty$. Ако се диференцијална једначина (2.1.15) помножи са $-2\mu r^2/\hbar^2$ и другачије се групишу чланови, добија се једначина облика:

$$\frac{d}{dr}\left(r^{2}\frac{dR(r)}{dr}\right) - \frac{2\mu r^{2}}{\hbar^{2}}\left(V(r) - E\right)R(r) = l(l+1)R(r).$$
(2.1.20)

Увођењем смене u(r) = r R(r) горња једначина се поједностављује, те налажењем одговарајућих извода :

$$dR(r) / dr = \left[r(du(r) / dr) - u(r) \right] / r^{2}, \ (d / dr) \left[r^{2} (dR(r) / dr) \right] = rd^{2}u(r) / dr^{2}$$

и њиховом заменом у (2.1.20), као и заменом познатог облика потенцијала (2.1.8) следи израз за радијалну једначину за атом водоника, у облику:

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{d^2u(r)}{dr^2} + \left[-\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r} + \frac{\hbar^2}{2\mu}\frac{l(l+1)}{r^2}\right]u(r) = Eu(r).$$
(2.1.21)

Једначина (2.1.21) се решава на следећи начин: ако се (2.1.21) подели са *E*, уз услов $r \to \infty$ и дефинише се константа $\beta = \sqrt{-2\mu E} / \hbar$ (за везана стања E < 0, па је β реално), једначина (2.1.21) постаје:

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \beta^2 u = 0 \tag{2.1.22}$$

Стандардна решења диференцијалне једначине (2.1.22) су облика:

$$u_{1} = \exp\left(\frac{\sqrt{-2\mu E}}{\hbar}r\right) = e^{\beta r} (a)$$

$$u_{2} = \exp\left(-\frac{\sqrt{-2\mu E}}{\hbar}r\right) = e^{-\beta r} (b)$$
(2.1.23)

Због услова да $r \to \infty$, бира се решење u_2 (2.1.23 b), јер прво решење дивергира, што значи да није испуњен услов нормираности функције u(r) а самим тим ни R(r). Како би решење $u_2(r)$ важило за неко коначно r множи се полиномом P(r) [44], те се добија $u(r) = P(r)e^{-\beta r}$ и то решење се сада мења у диференцијалну једначину (2.1.21):

$$\frac{d^2 \left[P(r) \mathrm{e}^{-\beta r} \right]}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d \left[P(r) \mathrm{e}^{-\beta r} \right]}{dr} + \left[-\beta^2 - \frac{\beta^2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 Er} - \frac{l\left(l+1\right)}{r^2} \right] P(r) \mathrm{e}^{-\beta r} = 0 \quad (2.1.24)$$

Диференцирањем претходног израза, знајући да због услова нормирања *P*(*r*) мора да садржи чланове највишег реда *r^k*; груписањем чланова одговарајућих степена [45-47] и даљим сређивањем израза добија се да је највиши члан полинома члан

$$-\left(2\beta k+2\beta+\frac{\beta^2 e^2}{4\pi\varepsilon_0 E}\right)r^{k-1}$$

Овај члан не може да се занемари тј. замени неким чланом нижег реда из полинома, јер су сви реда мањег од r, зато коефицијент уз r^{k-1} треба да је једнак нули, одакле се добија:

$$k+1 = -\frac{\beta e^2}{8\pi\varepsilon_0 E} = -\frac{e^2}{8\pi\varepsilon_0 \hbar} \sqrt{-\frac{2\mu}{E}} = n,$$

$$n = k+1.$$
(2.1.25)

Пошто је k цео број, онда је и (k+1) такође цео број, те је и n цео број – главни квантни број. На основу друге релације из (2.1.25), следи да је k = n-1, тако да је члан највишег реда у полиному P(r) управо члан r^{n-1} .

Ако се сада изабере да је g ред члана најнижег реда у уведеном полиному P(r) и тај услов се врати у једначину (2.1.21), те истим поступком као у претходном случају [45, 46] члан најнижег реда r^{g-2} , односно коефицијент уз њега изједначи са нулом, долази се до релације облика:

$$g(g+1)-l(l+1) = 0 \Longrightarrow \begin{cases} g = l \\ g = -(l+1) \end{cases}$$
(2.1.26)

Када је g = -(l+1), био би негативан степен од r, што имплицира да би $r \to 0$, а $P(r) \to \infty$, тј. полином би дивергирао, а самим тим и таласна функција (због R(r)). Зато се користи услов да је g = l одакле следи да је члан најнижег реда у полиному P(r) члан r^{l} , а из (2.1.19) види се да важи услов $0 \le l \le n-1$.

Комбинацијом добијених услова за степен полинома (2.1.25, 2.1.26) и (2.1.236) долази се до решења диференцијалне једначине за R(r) у следећем облику:

$$R_{n,l}(r) = \frac{1}{r} (\beta r)^{l+1} e^{-\beta r} L_{n-l-1}^{2l+1}(2\beta r) . \qquad (2.1.27)$$

Члан $L_{n-l-1}^{2l+1}(2\beta r)$ који се јавља у (2.1.27) је асоциран (придружен) Лагеров полином, у општем случају дефинисан као[45]:

$$L_{q-p}^{p}(x) = (-1)^{p} \left(\frac{d}{dx}\right)^{p} L_{q}(x)$$

Из првог услова (2.1.25) следи да је $\beta = 1/a_0 n$; величина a_0 је Боров радијус. Заменом свих β са $1/a_0 n$ у (2.1.27) и нормирањем функције R(r) коначно се добија [46]:

$$R_{nl}(r) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3}} \exp\left[-\frac{r}{na_0}\right] \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right).$$
(2.1.28)

Остало је још да се обједине решења за $R(r), \Theta(\theta), \Phi(\phi)$ у решење за $\psi(r, \theta, \phi)$ дато релацијом (2.1.12), што значи да се добијена решења диференцијалних једначина (2.1.16, 2.1.17 и 2.1.28) мењају у (2.1.12):

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = \sqrt{\left(\frac{2}{na_0}\right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!} \frac{2l+1}{4\pi}} \exp\left[-\frac{r}{na_0}\right]} \times \left(\frac{2r}{na_0}\right)^l L_{n-l-1}^{2l+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right) P_l^m(\cos\theta) e^{im\varphi}}$$
(2.1.29)

Израз (2.1.29) представља нормирану таласну функцију за атом водоника.

Као што је познато, из (2.1.25) могу се дефинисати дискретне вредности енергије *E*_n за произвољни атом (*Z* – атомски број) [46]:

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{\mu \cdot e^4}{(4\pi\varepsilon_0)^2 \hbar^2} \frac{Z^2}{n^2}, \ n = 1, 2, 3....$$
(2.1.30)

У квантној механици, да би се потпуно дефинисала стања електрона у произвољном атому (атому типа водоника и у вишеелектронском атому), потребно ја да се знају вредности сва четири квантна броја: n, l, m_l и m_s , односно, поред главног квантног броја n, потребно је знати и вредности орбиталног квантног броја l, магнетног квантног броја m_l и спинског квантног броја m_s .

Енергијски ниво на коме се налази електрон и који одређује његову путању (орбиту) дефинише се помоћу главног квантног броја n. За дато n, орбитални квантни број l може да узме вредности из скупа l = 0,1,...n-1; вредност l одређује број могућих поднивоа датог енергијског нивоа, односно одређује s, p, d, f... орбитале. Магнетни квантни број m_l може да има 2l+1 могућих вредности за дато l, а спински квантни број m_s може да има вредности $\pm 1/2$. На основу ових услова, следи да је могући број стања (уједно и максималан број електрона у датом стању) за исте вредности квантних бројева n и l једнак 2(2l+1). Стања са истим вредностима n и l се зову еквивалентна стања; ако је број електрона у атому датог нивоа једнак $2n^2$, тај ниво тј. електронска љуска је попуњена. У складу са Паулијевим принципом искључења, немогуће је додати још један електрон у такву љуску, јер би имао све исте вредности квантних бројева. За водоников атом важи да енергија не зависи од магнетног квантног броја m_l , јер су у централном пољу сви правци еквивалентни, па енергија не зависи од просторне оријентације ангуларног момента, већ само од вредности главног квантног броја n.

Највећу вредност енергије има ниво са n = 1, који се назива основно стање атома водоника или њему сличног јона. Разлика од те енергије до вредности енергије E = 0, тј. до континуума, назива се енергија везе електрона у основном енергијском стању атома – енергија јонизације E_i . Она за атом водоника (Z=1) износи приближно 13.8 eV. Сви остали енергијски нивои, који се у односу на основно енергијско стање називају побуђени енергијски нивои, имају мању вредност енергије везе у атому. На пример, први побуђени ниво, најближи основном нивоу се обично назива резонантни ниво; енергија потребна за побуђење овог нивоа се назива резонантни потенцијал и обележава се са E_r . За атом водоника, $E_r = \frac{3}{4}E_i$, односно $E_r \approx 10.15 \text{eV}$.

Са порастом енергије побуђених стања, односно са смањењем енергије везе у атому, стања се све мање међусобно разликују и нивои се згушњавају. Само се у случају атома водоника енергија дискретних стања описује простом релацијом, односно Ридберговом формулом, из чијег облика се види да са приближавањем граници континуалног спектра густина нивоа расте као n^3 при чему је n главни квантни број.

Вероватноћа јонизације различитих атома зависи како од вредности јонизационих потенцијала, тако и од јачине спољашњег поља којим се делује на посматрани систем. У случају дејства слабијих поља, највероватније је да ће се атом јонизовати процесом једнофотонске јонизације. Зато се у случају слабих поља мултифотонски прелази могу занемарити. Са друге стране, ако на атом делујемо јаким спољашњим пољем, биће доминантан процес мултифотонске јонизације или тунелне јонизације. Наравно, практичну реализацију јаког светлосног поља и експериментално проучавање ових процеса, омогућило је откриће ласера и његове особине (поглавље 1).

2.2. Теоријски опис интеракције атома и ласерског поља

Полазна основа за квантно-механички опис интеракције атома и ласерског поља је Шредингерова једначина

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}\right)\Psi = 0 \tag{2.2.1}$$

при чему је тотални хамилтонијан \hat{H} система атом + поље дат као

$$\hat{H} = \hat{H}_{em} + \frac{1}{2m_e} \sum_{i=1}^{Z} \left[\hat{\vec{p}}_i + e\hat{\vec{A}}(\vec{r}_{ei}, t) \right]^2 + \frac{1}{2M} \left[\hat{\vec{p}}_n - Ze\hat{\vec{A}}(\vec{r}_n, t) \right]^2 + V(\vec{r}_{e1}, ..., \vec{r}_{eZ}, \vec{r}_{en}) \quad (2.2.2)$$

Први члан представља хамилтонијан слободног електромагнетног поља, који се добија сумирањем по свим модовима поља, $m_e, e > 0$ су маса електрона и наелектрисање електрона, M је маса атомског језгра, $\hat{\vec{p}}_i$ оператор импулса *i*-тог електрона, $\hat{\vec{r}}_{ei}$ радијус вектор положаја *i*-тог електрона, $\hat{\vec{p}}_n$ оператор импулса језгра, \vec{r}_n је радијус вектор положаја језгра. Члан $V(\vec{r}_{e1},...,\vec{r}_{eZ},\vec{r}_{en})$ је потенцијал који укључује интеракцију електрон-електрон и интеракцију електрона са језгром, члан $\hat{\vec{A}}(\vec{r},t)$ је оператор векторског потенцијала [47].

У циљу даљег поједностављења проблема, уводе се координате центра маса:

$$\vec{r}_{CM} = \frac{M\vec{r}_n + \sum_{i=1}^{Z} m_e \vec{r}_{ei}}{M + Zm_e},$$
(2.2.3)

$$\vec{r}_i = \vec{r}_{ei} - \vec{r}_n \tag{2.2.4}$$

Пошто је маса језгра приближно једнака маси атома $M_a = M + Zm_e$ (јер је $M >> m_e$) може се написати $\vec{r}_{ei} \approx \vec{r}_i + \vec{r}_{CM}$. Оператор векторског потенцијала $\hat{\vec{A}}(\vec{r},t)$ зато постаје функција нових координата \vec{r}_{CM} и \vec{r}_i , тј. $\hat{\vec{A}}(\vec{r}_{ei},t) \propto \exp\left(\pm i\vec{k}\cdot(\vec{r}_{CM}+\vec{r}_i)\right)$.

Релативне координате су обично ограничене величином атома, тако да је (у подручју оптичких фреквенција) $\langle \vec{k} \cdot \vec{r_i} \rangle \ll 1$ и може се увести диполна апроксимација:

$$\exp(i\vec{k}\cdot\vec{r_i}) = 1 + i\vec{k}\cdot\vec{r_i} + \dots \approx 1$$

Узимајући у обзир ову апроксимацију и занемарујући чланове који су m_e/M пута мањи од водећих чланова, тотални (укупни) хамилтонијан може се написати у облику:

$$\hat{H} = \hat{H}_{em} + \frac{\hat{\vec{p}}_{\vec{r}_{CM}}}{2M} + \frac{1}{2m_e} \sum_{i=1}^{Z} \left[\hat{\vec{p}}_i + e\hat{\vec{A}}(\vec{r}_{CM}, t) \right]^2 + V(\vec{r}_1, ..., \vec{r}_Z, \vec{r}_{CM}) .$$
(2.2.5)

Под претпоставком да је утицај електромагнетног поља на кретање атома као целине занемарљив, јер је маса атома велика, може се занемарити и други члан у изразу (2.2.5) који представља кинетичку енергију центра маса. Такође, ако се пређе на систем центра
маса у коме се атом налази у координатном почетку, тада је $\vec{r}_{CM} = \vec{0}$, па важи да је $\hat{\vec{A}}(\vec{r}_{CM},t) = \hat{\vec{A}}(t)$, тако да укупни хамилтонијан постаје:

$$\hat{H} = \hat{H}_{\rm em} + \frac{1}{2m_e} \sum_{i=1}^{Z} \left[\hat{\vec{p}}_i + e\hat{\vec{A}}(t) \right]^2 + V(\vec{r}_1, ..., \vec{r}_Z)$$
(2.2.6)

2.2.1. Калибрационе трансформације

Облик хамилтонијана дат са (2.2.6) у претходном одељку, може се показати непрактичним при конкретним прорачунима физичких величина. Зато се често помоћу калибрационих трансформација (глобалне фазне трансформације) прелази на другачије облике хамилтонијана који су еквивалентни полазном. Наиме, ради се о унитарним трансформацијама, односно то су трансформације симетрије, при којима физичке величине остају непромењене. У литератури (о интеракцији ласерског поља и атома) ове унитарне трансформације често се називају "gauge" трансформацијама [48 - 51].

У општем случају, таласна функција се трансформише помоћу релације:

$$\Psi' = \exp(i\Phi)\Psi, \qquad (2.2.7)$$

где је Ф произвољна, диференцијабилна и реална функција. Трансформисани хамилтонијан је:

$$\hat{H}' = \exp(i\Phi)\,\hat{H}\exp(-i\Phi)-\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial t} \ . \tag{2.2.8}$$

Примењујући трансформацију $\Psi' = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_{em}t\right)\Psi$ добија се хамилтонијан у интеракционој слици:

$$\hat{H}_{I} = \frac{1}{2m_{e}} \sum_{i=1}^{Z} \left[\hat{\vec{p}}_{i} + e\hat{\vec{A}}(t) \right]^{2} + V(\vec{r}_{1}, ..., \vec{r}_{Z})$$
(2.2.9)

Најчешће трансформације које се користе у теоријским разматрањима [49, 52, 53, 54] су следеће:

1. Калибрацијом $\vec{p} \cdot \vec{A}$ (velocity gauge) се постиже да у хамилтонијану (2.2.6) нестају чланови који садрже $\hat{\vec{A}}^2$, па је функција у датој калибрацији облика Јасна Стевановић: Коригована брзина прелаза у АДК теорији у процесу тунелне јонизације

$$\Phi^{\nu} = \frac{Ze^2}{2m_e \hbar} \int_{-\infty}^{t} \hat{\vec{A}}^2(t') dt', \qquad (2.2.10)$$

а хамилтонијан после ове трансформације постаје:

$$\hat{H}'_{v} = \frac{1}{2m_{e}} \sum_{i=1}^{Z} \hat{\vec{p}}_{i}^{2} + \frac{e}{m_{e}} \sum_{i=1}^{Z} \hat{\vec{A}}(t) \cdot \hat{\vec{p}}_{i} + V(\vec{r}_{1},...,\vec{r}_{Z})$$
(2.2.11)

2. Калибрација $\vec{r} \cdot \vec{F}$ (*length gauge*) се добија помоћу функције Φ^l

$$\Phi^{l} = \frac{e}{\hbar} \sum_{i=1}^{Z} \vec{r}_{i} \cdot \hat{\vec{A}}(t)$$
(2.2.12)

па је хамилтонијан (2.2.6) у датој калибрацији је облика

$$\hat{H}_{l}' = \frac{1}{2m_{e}} \sum_{i=1}^{Z} \hat{\vec{p}}_{i}^{2} + e \sum_{i=1}^{Z} \vec{r}_{i} \cdot \hat{\vec{F}}(t) + V(\vec{r}_{1}, ..., \vec{r}_{Z})$$
(2.2.13)

3. У Крамерс-Хенебергеровој (*Kramers-Henneberg*) калибрацији [55, 56, 57] функција $\Phi_{_{K\!H}}$ и хамилтонијан $\hat{H}'_{_{K\!H}}$ дати су у облику:

$$\Phi_{KH} = \frac{e}{m_e \hbar} \sum_{i=1}^{Z} \int_{-\infty}^{t} \hat{\vec{p}}_i \cdot \hat{\vec{A}}(t') dt' + \frac{Ze^2}{2m_e \hbar} \int_{-\infty}^{t} \hat{\vec{A}}^2(t') dt', \qquad (2.2.14)$$

$$\hat{H}'_{KH} = \frac{1}{2m_e} \sum_{i=1}^{Z} \hat{\vec{p}}_i^2 + V\left(\vec{r}_1 - \vec{\alpha}(t), ..., \vec{r}_Z - \vec{\alpha}(t)\right).$$
(2.2.15)

У горњем изразу, $\vec{\alpha}(t) = \frac{e}{m_e} \int_{-\infty}^{t} \hat{\vec{A}}(t') dt'$ и представља координату класичног електрона који осцилује у ласерском пољу, и то без других интеракција. То значи да хамилтонијан \hat{H}'_{KH} у себи садржи ласерску интеракцију у облику временски зависне просторне транслације атомског потенцијала $V(\vec{r})$ за $\vec{\alpha}(t)$.

При израчунавању физичких величина које су дефинисане изван ласерског поља, резултати добијени у било којој горе наведеној калибрацији морају бити исти, под условом да су прорачуни егзактни. Ако се прорачуни врше апроксимативним методама, различите трансформације (калибрације) дају различите резултате, те би требало изабрати одговарајућу калибрацију. Прорачуни чији су резултати изложени у овој дисертацији рађени су у $\vec{r} \cdot \vec{F}$ калибрацији.

2.3. Прелазак на квазикласичан опис интеракције атома и ласерског поља

У делу поглавља (2.2) опис интеракције атома и ласерског поља одговара приступу у коме се оба објекта посматрају унутар формализма квантне механике (релације (2.2.2), (2.2.6) и (2.2.9)). Због специфичне карактеристике ласерског зрачења (кохерентност), у једном моду ласерског поља налази се велики број фотона, што значи да се ласерско поље може описати и класичним електромагнетним пољем. Као пример се може навести прорачу број фотона за интензитет ласерског зрачења $I = 10^9$ W/cm², енергије фотона $\hbar \omega = 1$ eV у запремини од V = 1 cm³[39, 40]:

$$N_{fot} = \frac{I}{\hbar\omega} \frac{V}{c} \sim 10^{18} .$$
 (2.3.1)

Дакле, чак и у случају примене ласерских поља слабијих интензитета, такво ласерско зрачење се карактерише великим бројем фотона, те се ласерско поље може сматрати *класичним* пољем. За случај интензивних ласерских поља $I > 10^{12}$ W/cm² која се користе у разматрањима ове дисертације, број фотона је још већи. У складу са тим, оператор векторског потенцијала $\hat{\vec{A}}$ може се заменити са векторским потенцијалом $\vec{A}(t)$ који задовољава једначину:

$$\vec{A}(t) = -c \int \vec{F}(t) dt \qquad (2.3.2)$$

Једначина (2.3.2) даје везу векторског потенцијала са електричним пољем ласера, што ће бити од користи у каснијем излагању и анализи резултата.

3. Апроксимативне методе

У општем случају, за описивање процеса јонизације, потребно је решавање временски зависне Шредингерове једначине која описује интеракцију вишеелектронског атомског система са ласерским пољем пољем [58]. Овај проблем је веома комплексан и практично га је немогуће аналитички решити (у делу дисертације који говори о атомима, поглавље 2.1 сажето је приказан поступак решавања временски независне Шредингерове једначине за атом водоника, као најједноставнијег система, а ипак је компликовано решавање). То је разлог зашто се на почетку заснивања теорије уводи низ апроксимација.

Пошто се у овој дисертацији користе:

– једноелектронска апроксимација (Single Active Electron Approximation – SAEA) и

– апроксимација јаког поља (Strong Field Approximation – SFA),

појаснићемо их у овом поглављу.

3.1. Једноелектронска апроксимација

У овој врсти апроксимације се посматра интеракција само једног активног (валентног или оптичког) електрона са ласерским пољем. Практично, то значи да се суме по индексу *i* у свим изразима (из поглавља 2, део 2.2.) могу изоставити. При томе електрон, поред потенцијала интеракције са ласерским пољем, осећа и ефективни статички потенцијал атомског језгра и преосталих електрона. Интеракција активног електрона се моделује помоћу сферно-симетричног потенцијала $V_{\rm at}(\vec{r})$ који укључује интеракцију електрона са језгром атома као и интеракцију са преосталим електронима у омотачу атома [50].

Ова апроксимација је веома корисна јер редукује вишеелектронску временски зависну Шредингерову једначину (*Time-Dependent Schrödinger equation*-TDSE) на једноелектронску једначину.

SAEA апроксимација је оправдана ако се има на уму да је интензитет ласерског поља веома висок, тј. велика је густина фотона у ласерском снопу, па се може сматрати да се енергија спољашњег поља мења континуирано. Пошто је таласна дужина коришћеног ласерског зрачења знатно већа од димензија атома ($\lambda_{\text{ласера}} \sim \mu m$, а димензије атома 10⁻¹⁰ m), може се претпоставити да је у околини атома у датом тренутку вредност електричног поља константна, тј. да је просторна расподела електричног поља хомогена $\vec{F}(\vec{r},t) \approx \vec{F}(t)$ из (1.4.3). Зато је временска промена вектора електричног поља у диполној апроксимацији [48, 59, 60] дата релацијом:

$$F(t) = F_0(t)\cos(\omega_0 t + \phi_0), \qquad (3.1.1)$$

 $F_0(t)$ је временски променљива амплитуда, ω_0 је фреквенција таласа, а ϕ_0 апсолутна фаза. У приступу се занемарују сви релативистички ефекти као и сва међуделовања која су повезана са спином.

Исправност ове апрокимације у случају атома који имају више од једног електрона у спољашњој љусци није очигледна. У свим атомима, осим атома водоника, на унутрашњим љускама се налази одређени број електрона, односно електронски остатак. Под дејством спољашњег поља тај електрични остатак се поларизује, те и сам делује као пертурбација на оптички електрон. У [61] показано је на примеру атома из алкалне групе, да је пертурбација услед динамичке поларизације електричног остатка Z пута мања од директне пертурбације изазване спољашњим пољем (Z – број атомских електрона). У [61] је такође показано да је утицај осталих (валентних) електрона на посматрани оптички електрон занемарљив, што значи да је оправдана примена једноелектронске апроксимације и на ове атоме. SAEA апроксимација се показала успешном и у опису процеса јонизације атома племенитих гасова [21, 62] као и мањих молекула [63, 64, 65, 66], у случају када је $\gamma \ll 1$, (у пракси $\gamma < 0.5$).

3.2. Апроксимација јаког поља

У овом делу поглавља биће описан најзначајнији апроксимативни метод у интеракцији јаког ласерског поља и атомских система – апроксимација јаког поља [24, 25]. Овај метод је наиме генерализација Келдиш-Фајсал-Рајс теорије [12, 13, 14], а заснована је на С-матричном формализму.

3.2.1. С-матрична теорија

Првобитна сврха С-матричне теорије била је описивање процеса расејања (*scattering*) у нуклеарној физици и физици високих енергија и веровало се да је примена овог приступа ограничена само на процесе расејања. Међутим, касније се показало да С-матрични приступ има општу примену у описивању прелаза посматраног физичког система из почетног стања у коначно стање, укључујући прелаз из везаног у везано стање, из везаног у слободно стање, из слободног у везано стање, као и из слободног у слободно стање [14, 23, 67].

У циљу разумевања С-матричног формализма, разматра се следећи проблем. Посматра се атомски систем који је налази у почетном стању Φ_i . Почетно стање задовољава временски зависну једначину:

$$i\hbar\frac{\partial\Phi}{\partial t} = \hat{H}_0\Phi \tag{3.2.1}$$

Решења једначине (3.2.1) чине комплетан скуп линеарно независних функција $\{\Phi_n\}$. У неком тренутку посматрани атомски систем се излаже деловању ласерског поља. Ново стање атомског система је услед тога одређено једначином

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = \left[\hat{H}_0 + \hat{H}_I(t)\right]\Psi. \qquad (3.2.2)$$

Решења једначине (3.2.2) такође чине комплетан скуп линеарно независних функција { Ψ_n }. Након довољно дугог времена ласерско поље се искључи и посматрани систем се нађе у коначном стању Φ_f . Мерни уређаји се налазе изван простора у коме делује ласерско поље, тако да на њих ласерско поље не утиче. То значи да мерни уређаји мере опсервабле система након искључења ласерског поља. Зато је циљ на основу коначног стања Φ_f доћи до закључка шта се десило са системом за време деловања ласерског поља. Према томе, у оквиру С-матричне теорије, потребне су нам информације како је систем припремљен и како се коначно стање анализира.

Уопштено, амплитуда вероватноће прелаза из почетног у коначно стање дата је изразом:

$$a_{fi}(t,t') = \left\langle \Phi_{f}(t) \middle| \hat{U}(t,t_{0}) \middle| \Phi_{i}(t') \right\rangle, \qquad (3.2.3)$$

где је $\hat{U}(t,t')$ оператор временске еволуције који задовољава једначину:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t') = \left[\hat{H}_0 + \hat{H}_I(t)\right]\hat{U}(t,t'), \qquad (3.2.4)$$

а $\hat{H}_{I}(t)$ је хамилтонијан интеракције атома са ласерским пољем у одговарајућој калибрацији¹:

$$\hat{H}_{I}(t) = e\vec{r} \cdot \vec{F}(t) \,. \tag{3.2.5}$$

Решење једначине (3.2.4) може да се напише у интегралном облику:

$$\hat{U}(t,t') = \hat{U}_0(t,t') - \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t} dt_0 \hat{U}(t,t_0) \hat{H}_I(t_0) \hat{U}_0(t_0,t')$$
(3.2.6)

где је $\hat{U}_0(t,t')$ еволуциони оператор који одговара хамилтонијану \hat{H}_0 :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}_0(t,t') = \hat{H}_0 \hat{U}_0(t,t').$$
 (3.2.7)

3.2.2. Амплитуда прелаза у апроксимацији јаког поља

У апроксимацији јаког поља (која је општија од теорије пертурбација) израз за амплитуду прелаза валентног електрона изводи се на следећи начин: полази се од претпоставке да се валентни електрон пре деловања ласерског поља налазио у стању $|\psi_0(t)\rangle$ које је одређено са релацијама

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\psi_0(t)\rangle = \hat{H}_0|\psi_0(t)\rangle, \qquad |\psi_0(t)\rangle = |\psi_0\rangle e^{-\frac{i}{\hbar}E_0t}$$
(3.2.8)

са енергијом $E_0 = -E_i$, тј. јонизационим потенцијалом. После интеракције са електромагнетним пољем, валентни електрон може прећи у невезано стање $|\Psi_{\vec{p}}(t)\rangle$ и бити детектован са импулсом \vec{p} . Ново квантно стање има енергију $E_{\vec{p}} = \frac{\vec{p}^2}{2m_e}$ и својствено је стање оператора \vec{H}_0 . Циљ је да се одреди вероватноћа прелаза између ова два стања, те се најпре дефинише амплитуда прелаза из основног $|\Psi_0(t)\rangle$ у слободно (невезано) стање $|\Psi_{\vec{p}}(t)\rangle$:

¹ Погледати поглавље о калибрационим трансформацијама

$$a_{\bar{p}} = \lim_{\substack{t \to \infty \\ t' \to -\infty}} \left\langle \psi_{\bar{p}}(t) \middle| \hat{U}(t,t') \middle| \psi_0(t') \right\rangle.$$
(3.2.9)

Комбинацијом израза за еволуциони оператор (3.2.6) и за амплитуду прелаза (3.2.9), добија се:

$$a_{\vec{p}} = \lim_{\substack{t \to \infty \\ t' \to \infty}} \left[\left\langle \Psi_{\vec{p}}(t) \middle| \hat{U}_{0}(t,t') \middle| \Psi_{0}(t') \right\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_{t'}^{t} dt_{0} \left\langle \Psi_{\vec{p}}(t) \middle| \hat{U}(t,t_{0}) \hat{H}_{I}(t_{0}) \middle| \Psi_{0}(t') \right\rangle \right]$$
(3.2.10)

Први члан у угластој загради је једнак нули, пошто су стања $|\psi_0(t)\rangle$ и $|\psi_{\bar{p}}(t)\rangle$ међусобно ортогонална:

$$\langle \psi_{\vec{p}}(t) | \hat{U}_0(t,t') | \psi_0(t') \rangle = \langle \psi_{\vec{p}}(t) | \psi_0(t) \rangle = 0,$$

тако да матрични елемент (3.2.10), коришћењем једнакости $\hat{U}_0(t_0, t') | \psi_0(t') \rangle = | \psi_0(t_0) \rangle$ сада прелази у

$$a_{\vec{p}} = -\frac{i}{\hbar} \lim_{t \to \infty} \int_{-\infty}^{t} dt_0 \left\langle \psi_{\vec{p}}(t) \middle| \hat{U}(t, t_0) e\vec{r} \cdot \vec{F}(t_0) \middle| \psi_0(t_0) \right\rangle.$$
(3.2.11)

Изведени матрични елемент (3.2.11) још увек је егзактан. Следећи корак је управо формулација и примена апроксимације јаког поља.

У конкретном случају, апроксимација јаког поља подразумева следеће: стање електрона $\langle \psi_{\vec{p}}(t) | \hat{U}(t,t_0)$ је невезано – слободно стање које је својствено стање хамилтонијана

$$\hat{H}(t_0) = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m_e} + \hat{V}(\vec{r}) + e\vec{r} \cdot \vec{F}(t_0) . \qquad (3.2.12)$$

Зато се уводи, најпре хамилтонијан који одговара атому без утицаја спољашњег поља:

$$\hat{H}_{a} \equiv \hat{H}_{atom} = -\frac{\hbar^{2} \nabla^{2}}{2m_{e}} + \hat{V}(\vec{r}),$$
 (3.2.13)

као и хамилтонијан који одговара слободном (јонизованом) електрону у ласерском пољу (електрон не осећа утицај матичног јона):

$$\hat{H}_{F}(t_{0}) \equiv \hat{H}_{Field}(t_{0}) = -\frac{\hbar^{2}\nabla^{2}}{2m_{e}} + e\vec{r} \cdot \vec{F}(t_{0}).$$
(3.2.14)

У невезаном стању је утицај Кулоновог међуделовања (члан $\hat{V}(\vec{r})$, израз (3.2.13)) мали у односу на интеракцију јонизованог електрона са ласерским пољем, што даље имплицира, да је кретање електрона након јонизације одређено управо хамилтонијаном облика (3.2.14).

Оваква апроксимација је оправдана ако се узме у обзир да је интензитет ласерског поља веома висок и да утицај Кулоновог дејства опада са квадратом удаљености електрона од јонизованог атома.

Према томе, у апроксимацији јаког поља вектор $\langle \Psi_{\vec{p}}(t) | \hat{U}(t,t_0)$ се замењује са вектором $\langle \Psi_{\vec{p}}^{V}(t) | \hat{U}_{F}(t,t_0)$, при чему је $\hat{U}_{F}(t,t_0)$ оператор временске еволуције који одговара хамилтонијану \hat{H}_{F} дефинисаним релацијом (3.2.14).

Новоуведено стање $|\psi_{\vec{p}}^{V}(t)\rangle$ назива се Волковљево стање и одређено је једначином:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\left|\psi_{\bar{p}}^{\mathrm{V}}(t)\right\rangle = \left[-\frac{\hbar^{2}\nabla^{2}}{2m_{e}} + e\vec{r}\cdot\vec{F}(t)\right]\left|\psi_{\bar{p}}^{\mathrm{V}}(t)\right\rangle,\tag{3.2.15}$$

чије је решење у одговарајућој унитарној трансформацији (*length gauge*)² и импулсној репрезентацији облика:

$$\left|\boldsymbol{\psi}_{\vec{p}}^{\mathrm{V}}(t)\right\rangle = \left|\vec{p} + e\vec{A}(t)\right\rangle \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}S_{\vec{p}}(t)},\qquad(3.2.16)$$

при чему је $\left| \vec{p} + e\vec{A}(t) \right\rangle$ стање раванског таласа дефинисано као

$$\left\langle \vec{r} \middle| \vec{p} + e\vec{A}(t) \right\rangle = \left(2\pi\hbar \right)^{-3/2} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \left[\left(\vec{p} + e\vec{A}(t) \right) \cdot \vec{r} \right] \right),$$
 (3.2.17)

а $S_{\vec{p}}(t)$ је акција дата са

$$S_{\vec{p}}(t) = \frac{1}{2m_e} \int dt' \left[\vec{p} + e\vec{A}(t') \right]^2.$$
(3.2.18)

Амплитуда прелаза у апроксимацији јаког поља сада има следећи облик:

$$a_{\vec{p}} = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt_0 \left\langle \psi_{\vec{p}}^{\mathrm{V}}(t_0) \middle| e\vec{r} \cdot \vec{F}(t_0) \middle| \psi_0(t_0) \right\rangle.$$
(3.2.19)

Ова амплитуда описује прелаз електрона из везаног стања $|\psi_0\rangle$ у Волковљево стање $|\psi_{\vec{p}}^V\rangle$ услед интеракције са електромагнетним-ласерским пољем у тренутку t_0 . Физичка

² Погледати поглавље о трансформацијама – length gauge

слика ове апроксимације је да, након што је електрон ослобођен у континуум у тренутку t_0 интеракцијом са ласерским пољем описаном чланом $\hat{H}_1(t_0) = e\vec{r} \cdot \vec{F}_0(t_0)$, дати електрон више не осећа дејство атомског потенцијала и креће се само под утицајем ласерског поља; то је управо Келдишова идеја која није била очекивана [12]. Електрони настали на овај начин називају се директни електрони у процесу јонизације, а амплитуде овог типа су у литератури познате под именом Келдиш-Фајсал-Рајс (КФР) амплитуде [12, 13, 14, 20, 31, 68].

4. Механизми јонизације атома

Међуделовање атомских система и електромагнетних поља (ласерских поља) може, између осталог, водити ка јонизацији атома. Развој овог подручја истраживања почиње радом Гоперт-Мајер из 1931. године [2], када је први пут теоријски разматрана могућност јонизације са два фотона. Прорачуни су показали да је вероватноћа за ту врсту догађаја много мања од вероватноће за једнофотонски процес (када атом апсорбује само један фотон и јонизује се); показало се у датом раду да је пресек јонизације у оваквом процесу јако мали, те да је потребно користити електромагнетне изворе високог интензитета. Проналазак ласера 1960. године обезбедио је јак извор зрачења у оптичкој области спектра и омогућио атому да интерагује са неколико фотона истовремено. Тако су створени технички услови за експериментално проучавање процеса мултифотонске јонизације (на пример доказана је двофотонска јонизација CaF₂ [69]).

Процеси јонизације који се најчешће јављају у интеракцији атома и електромагнетног поља се могу класификовати у зависности од јачине интензитета ласерског поља, када је фреквенција електромагнетног поља мања од оне која је потребна за једнофотонску јонизацију, као: мултифотонска јонизација, јонизација изнад прага, тунелна јонизација и јонизација преко баријере. У делу који следи, биће детаљније анализирани ови процеси јонизације атома.

4.1. Мултифотонска јонизација

У процесу фотојонизације, атом апсорбује фотон из електромагнетног поља и при томе бива јонизован. Један део енергије фотона се потроши на одвајање електрона од атома (савлађивање енергије јонизације E_i) а други на повећање кинетичке енергије ослобођеног електрона. Овај процес се може описати Ајнштајновом релацијом за фотоефекат:

$$E_k = hv - E_i. \tag{4.1.1}$$

Уколико енергија једног фотона није довољна за директну јонизацију, може наступити мултифотонска јонизација: слика 4.1а. Електрон апсорбује више нискоенергетских фотона истовремено, ослободи се дејства Кулоновог привлачења језгра и других електрона и напушта атом класичним путем, односно мултифотонском јонизацијом. У том случају, кинетичка енергија ослобођеног електрона директно зависи од броја апсорбованих фотона n_f као:



 $E_k = n_f h v - E_i \,. \tag{4.1.2}$

Слика 4.1. Механизми јонизације у пертурбационом режиму: а) мултифотонска јонизација; б) јонизација изнад прага.

Прво запажање директне мултифотонске јонизације је забележено 1963. године [6], а касније у раду [70] из 1964. године. Приликом испитивања мултифотонске јонизације атома ксенона, електричним пољем црвеног ласера $\lambda \sim 694nm$, која су вршили Воронов и Делоне 1966. године [4] показано је да вероватноћа јонизације зависи од интензитета ласерског поља.

Први теоријски радови који су описивали појаву мултифотонске јонизације су настали 1964. године и потичу од Гелтмана [71], који се бавио јонизацијом негативних јона; Зерника, који је проучавао јонизацију водониковог атома [72] и Келдиша [12] који је побољшао традиционалну С-матричну теорију, тако што је уместо таласне функције крајњег континуалног стања (чији тачан облик није познат) користио таласну функцију слободног електрона у спољашњем електромагнетном пољу [26, 61].

У почетним експериментима, мултифотонска јонизација је описивана помоћу пертурбационе теорије нижег реда (ПТНР), формулом за брзину јонизације, облика

$$\Gamma_n = \sigma_n I^n \tag{4.1.3}$$

где је n – минималан број фотона неопходан за јонизацију, σ_n је тотални ефикасни пресек, а I је интензитет упадне светлости [7, 73, 74, 75]. Ова формула је нелинеарна и експериментално је потврђена до n = 22, приликом мултифотонске јонизације атомског хелијума и неодијума, применом Nd:YAG ласера [76, 77], слика 4.2. из [76]. Међутим, у раду [78] из 1988. године проверено је слагање са резултатима пертурбационе теорије првог реда и том приликом је показано да постоје велика одступања између теоријских и експерименталних резултата, када се користи пертурбациона теорија нижег реда.



Слика 4.2. Експериментални резултати за мултифотонску јонизацију атома ксенона, криптона и аргона, за таласну дужину ласера $\lambda = 10644$ Å [76].

Веза дата релацијом (4.1.3) важи до критичног интензитета I_{sat} изнад ког долази до промене у наведеној зависности за брзину јонизације, што се објашњава уз помоћ популационог пражњења [79]. Наиме, за ласерски импулс одређеног трајања, постоји максимална вредност интензитета изнад које више нема јонизације, јер су сви посматрани електрони атома мете већ јонизовани. Овај интензитет је познат под називом инензитет засићења или сатурације.

Упркос релативно једноставном облику формуле (4.1.3), σ_n је компликовано израчунати, јер да би се добио тачан пертурбациони опис, потребно је укључити и процесе вишег реда. Додатне тешкоће се јављају када се истражује резонантно понашање; ипак, развијене су методе које могу да реше ове проблеме [60, 80].

Такође, са порастом интензитета упадне светлости; атомска стања се више не сматрају непертурбованим, због јаког "*coupling*" ефекта са ласерским пољем и померања спектралних линија. Тај ефекат је познат под називом Штарков померај. Овакви енергијски помераји нису пертурбације у правом смислу и не уклапају се у оквире пертурбационе теорије нижег реда, иако могу бити укључени у чланове

вишег реда, али се ипак користе за описивање неких ефеката у мултифотонској јонизацији [81, 82].

4.2. Јонизација изнад прага

Јонизација изнад прага (*Above-Threshold-Ionization*) је процес при коме атом или молекул апсорбује више фотона него што му је потребно за саму јонизацију, **слика 4.1.б**. Експерименталну потврду овог процеса дају енергијски спектри ослобођених фотоелектрона. Тако је у раду из 1979. године Агостини и сарадници [9] опажен процес у коме је атом апсорбовао више фотона него што му је потребно за директну јонизацију; наиме, при мултифотонској јонизацији ксенона уочена су два пика у спектру ослобођених електрона: један који је одговарао шестофотонској јонизацији и један који је одговарао седмофотонској.

На слици 4.3. је приказан типичан спектар фотоелектрона насталих јонизацијом изнад прага за два различита интензитета ласерског поља [83]. Спектар се састоји од низа пикова који су удаљени за енергију фотона $\hbar\omega$. У случају да се апсорбује минималан број фотона који је довољан за јонизацију, овај спектар би се састојао само од једног пика. Али, пошто је апсорбовано више фотона него што је потребно да електрон пређе у континуум, тј. пређе праг јонизације, овај ефекат је назван јонизација изнад прага.



Слика 4.3: Спектар фотоелектрона добијених у процесу јонизације изнад прага за два различита интензитета ласерског поља из [73].

Такође, уочени пикови су указали на чињеницу да електрони током кретања у ласерском пољу могу апсорбовати већи број фотона него што је то предвиђено теоријом пертурбације, те самим тим она није могла да објасни овакав спектар фотоелектрона. Зато се каже да је открићем јонизације изнад прага физика јаког поља прешла из пертурбационог у непертурбациони режим.

Евидентно је да се број апсорбованих фотона повећава уколико расте интензитет ласерског поља. Пикови на нижим енергијама су ипак потиснути, јер када је ласерско поље довољно јако, Ридбергова стања и граница континуума се услед Штарковог ефекта приближно померају за енергију:

$$U_{P} = \frac{e^{2}F_{0}^{2}}{4m_{e}\omega^{2}}.$$
(4.2.1)

Ова енергија представља временски усредњену осцилаторну енергију електрона у електромагнетном пољу и назива се пондеромоторни потенцијал. Енергија која је сада потребна за јонизацију атома је $E_i + U_p$. Електрон који напушта фокално подручје ласерског снопа је убрзан градијентом поља, па се његова кинетичка енергија повећава за вредност U_p што поништава помак према континууму. Ако U_p прелази енергију фотона, први пик у спектру емитованих фотоелектрона нестаје.

4.3. Тунелна јонизација

Тунелна јонизација, као квантно-механички феномен, јавља се када на атом делујемо ласерским пољем ниже учестаности (на пример CO_2 ласер); електрон не прими довољно енергије да савлада Кулоново привлачење и јонизује се класично, него тунелује кроз баријеру, која се спусти услед дејства ласерског поља и електрон напушта атом процесом тунелирања.

Ако је упадно поље довољно јако, а његова фреквенција много нижа од орбиталне фреквенције електрона (у оквиру Келдишове стационарне апроксимације), онда инцидентно поље довољно деформише атомски потенцијал, тако да се формира потенцијална баријера кроз коју електрон тунелује [77], слика 4.4а.

50



Слика 4.4. Механизми јонизације у јаком ласерском пољу: **a**) тунелна јонизација; **б**) јонизација преко баријере.

У процесу тунелне јонизације, електрону је омогућено да прође мимо класично недозвољених повратних тачака, и да напусти атом са практично нултом кинетичком енергијом. Што је поље јаче, ширина баријере кроз коју електрон мора да прође све је мања, па тако и брзина тунелне јонизације експоненцијално зависи од јачине ласерског поља. Управо због тога се највећи број електрона ослобађа када је поље максималне јачине (слика 4.5), чиме је истовремено и одређен број ослобођених електрона, јер у оним тачкама поља у којима је поље минималне јачине, електрони се не могу ни ослободити из атома.



Слика 4.5. Тренутна брзина јонизације (осенчена област) за случај атома Хе, при интензитету ласерског поља $5 \cdot 10^{14} \text{ W/cm}^2$. Јонизација се дешава углавном при максималној јачини поља.

Након одвајања од атома, електрони се убрзавају примењеним ласерским пољем. Ако се електрон ослободи када јачина поља има нулту вредност, након половине циклуса он ће имати максималну брзину (стекао је кинетичку енергију). Ако је био ослобођен када је јачина поља највећа, након истека половине циклуса имаће нулту брзину (није стекао кинетичку енергију).

Једном ослобођен дејства атомског потенцијала (деловањем ласера), електрон се понаша као класично наелектрисање у ласерском пољу са одређеном почетном брзином и правцем (које одређује фаза поља у тренутку његовог настајања). То значи да се јонизација одиграва веома брзо и то преко сваког дела оптичког периода близу врха импулса када је пригушење баријере велико. У овом случају, тунелна јонизација као процес се третира квантно-механички, при чему је финално стање Волковљево стање [28, 84], а не слободан, равански талас за јонизацију.

Засићење јонизације је такође битан ефекат који се јавља услед смањења броја расположивих атома у гасу подвргнутом ласерском зрачењу. До засићења долази када се електрони атома мете "потроше" ексцитацијом ласером. За дати ласерски импулс, ово се догађа на нарочитом интензитету I_{sat} ; то је максимални интензитет који атом може поднети и изнад њега више нема јонизације. На слици 4.6 је приказан експериментални сатурациони интензитет I_{sat}^{exp} у функцији јонизационог потенцијала за различите атомске и молекулске врсте који показује добро слагање са теоријским прорачунима за интензитет сатурације из рада [85].



Слика 4.6. Експериментални сатурациони интензитет I_{sat}^{exp} у функцији јонизационог потенцијала за различите атомске и молекулске врсте из [85].

Процес тунеловања су испитивале бројне експерименталне групе и једна општа слика о таквим процесима је успешно експериментално верификована [21, 86].

Конкретно, у раду [21] је по први пут проучавана вишеструка тунелна јонизација атома племенитих гасова; интензитет ласерског поља је био у опсегу 10^{13} W/cm² до 10^{16} W/cm². Показало се следеће: за таласне дужине ласера реда $\lambda_l \sim 1 \mu m$ и трајање ласерског импулса $\tau_l = 1$ рs, јонизација племенитих гасова аргона, криптона, хелијума, ксеона и неона се дешава искључиво у области тунелне јонизације, слика 4.7.



Слика 4.7. Број детектованих јона аргона у функцији ласерског интензитета, у процесу вишеструке тунелне јонизације датог атома [21].

Још један од примера је и јонизација атома калијума, живе и хелијума CO_2 ласером: интеракција између електрона и ласерског поља много је већа од Кулонове силе (привлачења) између електрона и преосталог дела атома; атомски потенцијал се деформише, формирајући потенцијалну баријеру кроз коју електрон као квантна честица тунелује са одређеном вероватноћом, те имамо појаву тунелне јонизације [35, 87, 64], слика 4.8.

Пуна линија на слици 4.8 је теоријски резултат (АДК и ППТ), док је испрекидани део линије "формални" наставак теоријског модела, за случај када је јачина спољашњег поља за ред величине нижа од атомске јачине поља. Са слике 4.8 се може видети да је у случају калијума област тунелне јонизације ограничена (мала разлика између F_{TI} и F_{BSI}), док за атоме живе важи режим тунелне јонизације на читавом опсегу јачине поља.



Слика 4.8. Брзина тунеловања за живу, калијум и хелијум, у зависности од јачине спољашњег електричног поља, приказано на логаритамској скали у (а. ј.) [64].

Процес тунеловања су покушали да објасне Амосов, Делоне и Крајнов у оквиру Келдишове теорије [12], представивши јонизациони процес као подрхтавање електрона у незнатно деформисаном потенцијалу "обученог" атома, са извесном могућношћу да изађе напоље уз помоћ тунелирања [17].



Слика 4.9. Поређење експерименталних резултата за јонизацију ксенона тунеловањем [87] и предвиђања Келдишове теорије и АДК теорије. На у-оси је број јона (у произвољним једницама), док је на х-оси дат интензитет ласерског поља.

На слици 4.9. представљено је поређење експерименталних мерења за Xe⁺, Xe²⁺ и резултата добијених применом Келдишове [12] и АДК теорије [17]. Празни кружићи су

за Xe⁺, а пуни за Xe²⁺. Линија 2 је предвиђање Келдишове теорије [12], а линија 1 предвиђање АДК теорије [17] при чему се уочава добро слагање експерименталних резултата (кружићи) са теоријским прорачунима добијеним коришћењем обе теорије [12, 17].

У раду [88] група сарадника испитивала је колективну тунелну јонизацију атома. Аналитичком методом и нумеричким решавањем једнодимензионалне Шредингерове једначине, показано је да је колективна двоелектронска тунелна јонизација могућа, ако оба електрона остану на једнаким удаљеностима од атомског језгра. Такође, колективно тунеловање може да буде доминантан механизам јонизације у веома јаком статичном (или квази-статичном) пољу, у случају када нема времена за расејање. Дакле, у раду [88] су успешно представљени експериментални резултати доприниса јона за различите ласерске фреквенције, а такође је изведена и формула за вишеелектронску тунелну јонизацију атома, која веома прецизно репродукује већину експерименталних података за дати процес. Исти процес је проучаван и објашњен у [89, 90] за атом хелијума, при чему се јонизација првог електрона третира користећи квантно-механички моделе, а расејањем на датом јону побуђује се или јонизује још један електрон.

4.4. Јонизација преко баријере – Надбаријерна јонизација

Како јачина ласерског поља расте, потенцијална баријера у којој је електрон постаје све мања и нижа (смањује се енергија потенцијалне баријере), све док се у једном тренутку електрон не ослободи из везаног стања.

Када је у питању интензивно ласерско поље ($I > 10^{15}$ W/cm², слика 4.46), онда такво поље потпуно пригуши Кулонов потенцијал тако да се везани електрон једноставно "ослободи" преко врха потенцијалне баријере, дакле без тунеловања. Тај процес се назива јонизација преко баријере или јонизација атома пригушењем баријере (*barrier supression ionization* – BSI).

Кулонов потенцијал атома, као тродимензионалног система, настао комбиновањем потенцијала кулоновог поља атома и статичног електричног поља ласера јачине *F*, које делује дуж *z* – осе, има следећи облик

$$V(r) = -\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} - eFz. \qquad (4.4.1)$$

55

Баријера има седласту тачку, чији се положај r_s може одредити из услова минимума потенцијалне енергије V(r), коришћењем релације за сферне поларне координате $z = r \cos \theta$ [46]:

$$\frac{d}{dr}\left(-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r} - eFr\cos\theta\right) = 0$$

односно

$$-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(-\frac{1}{r^2}\right) - eF\cos\theta = 0,$$
$$\frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 r^2} = F\cos\theta.$$

Даљим сређивањем израза добија се да је положај седласте тачке дат са:

$$r_s = \sqrt{\frac{Ze}{F\cos\theta \,4\pi\varepsilon_0}}\,.\tag{4.4.2}$$

Потенцијална енергија седласте тачке, након замене израза за *r_s* у почетни облик потенцијала, износиће

$$V(r_{s}) = -\frac{Ze^{2}}{4\pi\varepsilon_{0}}\sqrt{\frac{F\cos\theta 4\pi\varepsilon_{0}}{Ze}} - eF\sqrt{\frac{Ze}{F\cos\theta 4\pi\varepsilon_{0}}}\cos\theta$$

$$V(r_{s}) = -2\sqrt{\frac{Ze^{3}F\cos\theta}{4\pi\varepsilon_{0}}}$$
(4.4.3)

Са порастом јачине ласерског поља висина потенцијалне баријере се смањује, тако да и вредност потенцијала седласте тачке опада, све док се у једном тренутку не изједначи са енергијом јонизације електрона и тада електрон више није везан за атом, слика 4.46. Такође, под претпоставком да се електрон најлакше јонизује дуж осе ласерског поља, у овом случају то је z- оса, следи да је члан соз $\theta = \cos 0^\circ = 1$.

Јачина поља на којој се највећа вредност потенцијалне енергије ($V_{\rm S}$) изједначава са енергијом јонизације електрона ($E_{\rm i}$) назива се јачином поља прага између два процеса, и рачуна се помоћу релације

$$-2\sqrt{\frac{Ze^3F}{4\pi\varepsilon_0}} = -E_{\rm i}\,,\tag{4.4.4}$$

тако да је вредност јачине поља прага за процес јонизације преко баријере дата као

$$F_{\rm JPB} = \frac{E_{\rm i}^2 \pi \mathcal{E}_0}{Z e^3}$$

у СИ систему јединица, односно релацијом

$$F_{\rm JPB}\left[\frac{\rm V}{\rm cm}\right] = 1.7 \cdot 10^6 \frac{\left(E_{\rm i}\left[\rm eV\right]\right)^2}{Z}, \qquad (4.4.5)$$

или са

$$F_{\rm JPB} = \frac{E_{\rm i}^2}{4Z}$$
(4.4.6)

у атомском систему јединица.

Наравно, интензитет ласерског поља за јонизацију преко баријере може се такође израчунати уз помоћ релација (1.4.5) и (4.4.5):

$$I_{\rm JPB}\left[\frac{\rm W}{\rm cm^2}\right] = \frac{c\mathcal{E}_0 F_{\rm JPB}^2}{2},$$

односно, уз помоћ релације погодније за нумеричке прорачуне и поређења:

$$I_{\rm JPB}\left[\frac{W}{\rm cm^2}\right] = 4 \cdot 10^9 \frac{\left(E_{\rm i}\left[\rm eV\right]\right)^4}{Z^2}.$$
(4.4.7)

У складу са горњим релацијама, на слици **4.10**. је приказано поређење експериментално одређених интензитета за јонизацију преко баријере (симболи за дати атом) са теоријским прорачунима (пуна линија) на основу релације (4.4.7) за различите атоме (He, Ne, Kr, Ar, Xe), при чему је евидентно одлично слагање између теоријских (АДК теорија [17]) и експерименталних резултата.



Слика 4.10. Поређење експериментално одређених интензитета за јонизацију преко баријере са теоријским прорачунима за различите атомске врсте из [21].

4.5. Параметар адијабатичности ү

Величина која је добијена у теоријским прорачунима, а која одређује у ком режиму се одвија процес јонизације атома је Келдишов параметар γ [12]; у општем случају дефинише се као:

$$\gamma = \frac{\omega_{\text{laser}}}{\omega_{\text{TJ}}} \tag{4.5.1}$$

при чему су ω_{laser} и ω_{TJ} фреквенције ласерског поља и тунеловања, респективно. Фреквенција тунеловања електрона кроз баријеру је обрнуто пропорционална са временом потребним за тунеловање кроз потенцијалну баријеру t_{TI} .

Бездимензиони параметар γ може се извести на следећи начин [91, 28]. Сматра се да се електрон у атому, налази испред потенцијалне баријере просечне ширине $L \cong E_i / e F$ и да се креће брзином једнакој брзини електрона на првој Боровој орбити $v_i = \sqrt{2E_i / m_e}$. На основу ових једначина може да се израчуна време потребно за пролазак кроз баријеру:

$$t_{\rm TJ} = \frac{L}{v_i} \cong \frac{\sqrt{2\,m_e\,E_{\rm i}}}{e\,F}$$

Келдишов параметар једнак је производу фреквенције ласерског поља и времена проласка кроз баријеру:

$$\gamma = \omega_{\text{laser}} t_{\text{TJ}},$$

$$\gamma = \frac{t_{\text{TJ}}}{\omega_{\text{laser}}^{-1}} \cong \frac{t_{\text{TJ}}}{T_{\text{laser}}}$$
(4.5.2)

где је $T_{\text{laser}} \cong \omega_{\text{laser}}^{-1}$ период спољашњег електричног поља – ласерског поља. Због тога се параметар γ може дефинисати као однос времена проласка кроз потенцијалну баријеру t_{TJ} и периода спољашњег поља T_{laser} .

Ако је $\gamma \ll 1$ у питању је процес јонизације за који се примењује адијабатска апроксимација; време проласка кроз баријеру мали је део периода ласерског поља и електрон као да се сусреће са статичком баријером, која је одређена вредношћу јачине поља у датом тренутку. У том случају електрон излази испод баријере уз помоћ тунелирања.

Ако је $\gamma >> 1$, време проласка кроз баријеру је много веће од периода спољашњег поља (поље осцилује брзо у поређењу са временом потребним за тунеловање), баријера постаје непрелазна за електрон и пошто је тунелирање заустављено јонизација се врши уз помоћ мултифотонског процеса. Најчешће, параметар γ се изражава у облику:

$$\gamma = \frac{\omega \sqrt{2m_e E_i}}{e F}, \ \gamma = \frac{\omega \sqrt{2E_i}}{F}$$
(4.5.3)

при чему је први израз у стандардном, а други у атомском систему јединица (а. ј.).

Потребно је нагласити да у принципу у експериментима оваква оштра подела на механизме који доводе до јонизације атома не постоји. У већини експеримената брзина јонизације се може приказати као комбинација карактеристика које потичу од ова два механизма: слика 4.11 из [92]; док се варирање вредности Келдишовог параметра адијабатичности може се постићи или мењањем јачине (односно интензитета) ласерског поља, или променом фреквенције истог [93].



Слика 4.11. Келдишов параметар у зависности од интензитета ласера за различите атоме. У зависности и од врсте атома као и од коришћеног интензитета, јонизација је или тунелна или мултифотонска [92].

За разлику од већине ласера који се користе у пракси, код CO_2 ласера не постоји област у којој би било $\gamma \gg 1$, тако да се мултифотонска јонизација не може јавити. Због тога је јонизациони процес до кога долази применом овог ласера увек чисто тунелна јонизација, па је у поглављу о ласерима више пажње посвећено управо CO_2 ласеру (изведен фактор појачања за CO_2 ласер, продискутоване његове карактеристике итд).

Међутим, Илков, Декер и Чин [22, 64] су у радовима експериментално показали да је услов за тунелну јонизацију ипак прецизније дефинисати преко два критеријума:

$$\gamma < 0.5 \tag{4.5.4}$$

$$F < F_{OTBI}$$

Услов да је $\gamma < 0.5$ је много лакше постићи у експериментима него првобитни услов $\gamma << 1$, тако да је проучавање процеса тунелне јонизације експериметално значајно олакшано.

5. АДК теорија

АДК теорија – (Амосов-Делоне-Крајнов) теорија [17] представља теорију тунелне јонизације комплексних атома интензивним ласерским пољем. У оквиру ове теорије, по аналогији са Келдишовом теоријом [12], атом се третира квантно-механички, а његова таласна функција се апроксимира асимптотским изразом таласне функције валентног електрона, на великим удаљеностима од атомског језгра. Идеја је да се спољашње поље види као статично електрично поље, тако да се електрон везан у атому суочава са потенцијалном баријером коначне ширине, кроз коју може да тунелује и да пређе у континуум.

5.1. Теорија Келдиша

У време када је регистрована директна мултифотонска јонизација [4, 6, 70], Келдиш је за опис процеса предложио слику атомске јонизације, данас познате као теорија Келдиша. У поменутој теорији се полази од амплитуде преласка A_{if} из почетног непертурбованог атомског стања ψ_0 у крајње континуално стање са импулсом \vec{p} , описано тачном таласном функцијом $\psi_{\vec{p}}$, у атомским јединицама:

$$A_{if} = -i \int_{0}^{t} \left\langle \psi_{\vec{p}} \left| V(\vec{r}) \right| \psi_{0} \right\rangle dt$$
(5.1.1)

где је $V(\vec{r})$ потенцијал интеракције атомског електрона са атомским остатком. Овај израз је тачан у оквиру С-матричног приступа (поглавље 3), али пошто тачна таласна функција $\psi_{\vec{p}}$ није позната, Келдиш је предложио да се уместо ње користи таласна функција слободног електрона $\psi_{\vec{p}}^{(0)}$ у спољашњем електромагнетном пољу – тзв. Волковљева стања [26, 61]. Та стања се добијају из таласних функција слободних електрона заменом импулса \vec{p} изразом $\vec{p} + \frac{\vec{A}}{c}$, где је \vec{A} векторски потенцијал електромагнетног поља (члан који се појављује у енергији коначног стања).

Теорија Келдиша се разликује од традиционалне пертурбационе теорије на основу тога што таласна функција коначног стања укључује утицај електромагнетног поља на

електрон. Притом, коначна таласна функција $\psi_{\vec{p}}$ не узима у обзир атомски потенцијал при опису јонизованог електрона. Физичка слика је следећа: електрон везан за атом се креће под утицајем унутрашњих сила атома и спољашње поље није битно за његово кретање; а електрон који је напустио атом креће се само под утицајем спољашњег електромагнетног поља – ласерског поља. Ово су карактеристике *краткодометног потенцијала*, уз услове:

енергија спољашњег поља је мала у поређењу са јонизационим потенцијалом

$$\hbar\omega \ll E_{\rm i} \tag{5.1.2a}$$

јачина поља ласера је мала у поређењу са јачином атомског поља

$$F \ll F_{\rm at} \tag{5.1.26}$$

нема резонанси у стањима дискретног спектра.

Користи се диполна апроксимација и потенцијал интеракције валентног електрона са ласером се описује формулом (у а.ј.)

$$V(\vec{r},t) = \vec{r} \cdot \vec{F}(t) \tag{5.1.3}$$

где је $\vec{F}(t)$ јачина електричног поља у електромагнетном таласу, а \vec{r} је координата електрона. Таласна функција финалног стања, односно Волковљева таласна функција је:

$$\Psi_{f}^{(V)}(\vec{r},t) = \Psi_{\vec{p}} = (2\pi)^{-3/2} \exp\left\{i\vec{r}\left[\vec{p} + \frac{\vec{A}(t)}{c}\right] - i\int_{0}^{t} \left[\vec{p} + \vec{A}(t')/c\right]^{2} dt'/2\right\}$$
(5.1.4)

 $\vec{A}(t)$ је векторски потенцијал електромагнетног поља, повезан са јачином ласерског поља $\vec{F}(t)$ релацијом (2.3.2).

Интеграцијом једначине за амплитуду преласка (5.1.1) по просторној и временској координати комбинацијом одговарајућих једначина (5.1.3, 5.1.4)→(5.1.1), методом седласте тачке [31, 53, 94], уз наведене услове за краткодометни потенцијал (5.1.2a,б), добија се израз за брзину јонизације (вероватноћу јонизације у јединици времена):

$$w_{if} = \frac{\left|A_{if}\right|^2}{t} = \exp\left[-2\frac{E_i}{\omega}f(\gamma)\right]$$
(5.1.5)

пре чему је функција $f(\gamma)$ дефинисана преко параметра адијабатичности γ (релација (4.5.3)) [12, 17] као:

$$f(\gamma) = \left(1 + \frac{1}{2\gamma^2}\right) \operatorname{arsh}(\gamma) - \frac{\sqrt{1 + \gamma^2}}{2\gamma} .$$
 (5.1.6)

Приликом формулисања теорије и одређивања брзине јонизације Келдиш је занемарио детаље атомске структуре и ефекте које на пост-јонизациону динамику електрона има Кулонов потенцијал насталог јона. Наравно, оваква груба апроксимација је управо и разлог зашто ова теорија није успела квантитативно добро да предвиди јонизационе брзине произвољних атома касније разматраних, како теоријски тако и експериментално.

5.1.2. Примена Ландау – Дихнеове адијабатске апроксимације на теорију Келдиша

Општији начин добијања Келдишових резултата је преко услова $\hbar \omega << E_i$, написаних у другачијем облику. Ако се изабере коначно стање f на почетку континуалног спектра, $E_{f_0} = 0$, а почетно стање има енергију E_i , добија се да је:

$$\hbar\omega_{if} = E_i - E_{f_0} \equiv E_i \tag{5.1.7}$$

односно, нови облик услова (5.1.2a) је сада (у атомским јединицама $\hbar = 1$):

$$\frac{\omega}{\omega_{if}} << 1 \tag{5.1.8}$$

Када је фреквенција спољашњег поља (ласера) ω мала, пертурбација је споро променљива величина и имамо могућност примене адијабатске апроксимације [31]. Брзина јонизације у адијабатској апроксимацији Ландау-Дихнеа [30] за атом у спољашњем пољу дата је као:

$$w = \exp\{-2 \cdot \operatorname{Im} S(\tau)\}\tag{5.1.9}$$

где је $S(\tau)$ временски зависни део дејства који се дефинише релацијом:

$$S(\tau) = \int_{0}^{\tau} \left\{ E_{f}(t) - E_{i}(t) \right\} dt$$
 (5.1.10)

а τ је квазикласична (имагинарна) повратна тачка одређена условом:

$$E_i(\tau) = E_f(\tau). \tag{5.1.11}$$

Пошто је јачина спољашњег електричног поља F мала у поређењу са атомском јачином поља (услов 5.1.26), пертурбација континуалног коначног стања f (коју узрокује спољашње поље) много је већа, него пертурбација почетног стања i. Због тога је могуће написати следећи услов:

$$E_i(t) = -E_i; E_i > 0,$$
 (5.1.12)

где је Е_і непертурбовани јонизациони потенцијал атома.

Ако се сада претпостави да након окончане адијабатске пертурбације ослобођени електрон напушта атом са нултим почетним импулсом, те да га електрични део ласерског поља јачине: $\vec{F}(t) = \vec{F} \cos(\omega t)$ (утицај магнетног дела поља је занемарљив у овом случају) убрзава, ослобођени електрон (који је сада под деловањем само ласерског поља) стиче кинетичку енергију

$$E_{f}(t) = \frac{1}{2m_{\rm e}} \left(\vec{p} + \frac{e}{c}\vec{A}\right)^{2},$$
 (5.1.13)

односно, изражено у атомским јединицама (а. ј.)

$$E_f(t) = \frac{1}{2} \left(\vec{p} + \frac{1}{c} \vec{A} \right)^2.$$
(5.1.14)

Коначно стање се бира тако да буде стање слободног електрона у пољу линеарно поларизованог ласерског поља и узима се да је генералисани импулс \vec{p} избаченог електрона једнак нули ($\vec{p} = 0$). Зато се добије

$$E_f(t) = \frac{\vec{A}^2}{2c^2}.$$
 (5.1.15)

Јачина електричног поља и векторски потенцијал повезани су релацијом

$$\vec{F}(t) = -\frac{1}{c}\frac{d\vec{A}}{dt},$$
 (5.1.16)

одакле након одређеног броја елементарних трансформација следи израз за енергију коначног стања:

$$E_{f}(t) = \frac{1}{2c^{2}} \left[-c \int \vec{F}(t) dt \right]^{2} = \frac{F^{2}}{2} \left(-\frac{1}{\omega} \sin(\omega t) \right)^{2}.$$
 (5.1.17)

Уз претпоставку да је почетна енергија електрона у произвољном тренутку увек једнака енергији јонизације, следе изрази

$$\begin{cases} E_i(t) = -E_i \\ E_f(t) = \frac{F^2}{2\omega^2} \sin^2 \omega t \end{cases}$$
(5.1.18)

Услов за одређивање повратне тачке (5.1.11) за облик релације (5.1.18) постаје

$$-E_{\rm i} = \frac{F^2}{2\,\omega^2} \sin^2 \omega \tau \,. \tag{5.1.19}$$

односно

$$\sin(\omega\tau) = i\frac{\omega}{F}\sqrt{2E_{\rm i}} = i\gamma, \qquad (5.1.20)$$

одакле следи и формула за повратну тачку облика:

$$\tau = \frac{1}{\omega} \operatorname{arc\,sin}\left(i\frac{\omega}{F}\sqrt{2E_{i}}\right) = \frac{1}{\omega}\operatorname{arc\,sin}(i\gamma).$$
(5.1.21)

Пошто су инверзна тригонометријска и инверзна хиперболична функција повезане преко израза: $\arcsin(i\theta) = i \, \mathrm{ar} \, \mathrm{sh} \, \theta$, израз (5.1.21) прелази у:

$$\tau = \frac{i}{\omega} \operatorname{arsh}\left(\frac{\omega}{F}\sqrt{2E_{i}}\right).$$

$$\tau = \frac{i}{\omega} \operatorname{arsh}(\gamma)$$
(5.1.21)

односно, добија се израз за повратну тачку τ , у случају нултог почетног импулса избаченог електрона.

Тражена брзина јонизације одређена изразом (5.1.9) сада има облик

$$w_{if} = \exp\left\{-2\operatorname{Im}\int_{0}^{\tau} \left[E_{f}(t) + E_{i}\right]dt\right\}$$
(5.1.22)

Најпре ће бити израчунат временски зависни део дејства $S(\tau)$. Заменом израза за енергије крајњег и почетног стања (5.1.18) у (5.1.10), временски зависни део дејства постаје:

$$S(\tau) = \int_{0}^{\tau} \left[\frac{F^2}{2\omega^2} \sin^2 \omega t + E_i \right] dt$$
 (5.1.23)

Интеграцијом израза (5.1.23), уз коришћење одговарајућих тригонометријских идентитета ($\sin^2 \omega \tau = (1 - \cos(2\omega \tau))/2$), рачуна се вредност интеграла само за горњу границу (пошто је доња реална) и добија се следеће:

$$S(\tau) = \left[\frac{F^2}{4\omega^2} + E_{\rm i}\right]\tau - \frac{F^2}{8\omega^3}\sin(2\omega\tau)$$
(5.1.24)

Даље, заменом релације (5.1.24) у (5.1.9), те користећи тригонометријске формуле $\sin(2\omega\tau) = 2\sin(\omega\tau)\cos(\omega\tau)$, као и на основу релације $\sin(\omega\tau) = i\gamma$ из (5.1.20), следи

$$w_{if} = \exp\left\{-2\operatorname{Im}\left[\left(\frac{F_0^2}{4\omega^2} + E_i\right) \cdot \frac{i}{\omega}\operatorname{arsh}(\gamma) - \frac{F_0^2}{8\omega^3}2i\gamma\sqrt{1+\gamma^2}\right]\right\}$$

Једноставним сређивањем горњег израза, увођењем параметра γ (4.5.3) и узимањем у обзир само имагинарних чланова, добија се Келдишова формула за брзину јонизације (у а. ј.):

$$w_{if} = \exp\left\{-\frac{2E_{i}}{\omega}\left[\left(1 + \frac{1}{2\gamma^{2}}\right)\operatorname{arsh}(\gamma) - \frac{\sqrt{1 + \gamma^{2}}}{2\gamma}\right]\right\}$$

$$w_{if} = \exp\left\{-\frac{2E_{i}}{\omega}f(\gamma)\right\}$$
(5.1.25)

Добијена формула (5.1.25) за брзину јонизације је управо Келдишова формула (5.1.5) већ добијена методом седласте тачке [31, 53, 94], чиме је показано да се коришћењем адијабатске апроксимације Ландау-Дихнеа заиста може добити Келдишова брзина јонизације атома у случају нултог почетног импулса.

Један од главних доприноса Келдишове теорије јесте потврда да су процеси тунелне и мултифотонске јонизације уствари исте физичке природе [12, 86], а да доминација једног или другог начина јонизације атома зависи од вредности параметра адијабатичности (од карактеристика ласерског зрачења (ω), интензитета зрачења (I), као и од врсте озрачених атома (E_i)) управо преко једнакости (4.5.3).

5.1.3. Гранични случајеви Келдишове теорије

Теорија Келдиша разликује се од традиционалне пертурбационе теорије на основу чињенице што таласна функција коначног стања $\psi_{\bar{p}}$, укључује утицај спољашњег (ласерског) поља на електрон, а не узима у обзир атомски потенцијал при опису јонизованог електрона.

При опису таласне функције коначног стања, користе се Волковљева стања, а карактеристична величина помоћу које се разграничавају механизми јонизације је

параметар адијабатичности γ (4.5.3). На основу вредности параметра γ , који се још назива и Келдишов параметар [12], приликом јонизације атома биће доминантан процес или мултифотонске јонизације или тунелне јонизације. Управо ће се ова два гранична случаја Келдишове теорије детаљније проучити у наставку овог поглавља; у зависности од вредности параметра γ биће изведени одговарајући изрази за брзину јонизације.

5.1.3.1. Мултифотонска јонизација

За граничну вредности параметра адијабатичности $\gamma >> 1$, брзина јонизације дата релацијом (5.1.25) постаје:

$$w_{if} = \exp\left\{-\frac{2E_{i}}{\omega}\left[\left(\frac{2\gamma^{2}+1}{2\gamma^{2}}\right)\operatorname{arcsh}(\gamma) - \frac{\sqrt{1+\gamma^{2}}}{2\gamma}\right]\right\},$$

$$\gamma^{2} \gg 1$$

$$w_{if} = \exp\left\{-\frac{2E_{i}}{\omega}\left[\operatorname{arcsh}(\gamma) - \frac{1}{2}\right]\right\}.$$
(5.1.26)

Даље, користећи тригонометријски идентитет $\operatorname{arcsh}(x) = \sin^{-1}(x) = \ln(x + \sqrt{x^2 + 1})$, добија се:

$$w_{if} = \exp\left\{-\frac{2E_{i}}{\omega}\left[\ln(\gamma + \sqrt{\gamma^{2} + 1}) - \frac{1}{2}\right]\right\}, \ \gamma^{2} \gg 1$$
$$w_{if} = \exp\left\{-\frac{2E_{i}}{\omega}\left[\ln(2\gamma) - \frac{1}{2}\right]\right\}.$$

Још мало трансформација претходног израза доводи до:

$$w_{if} = \exp\left\{\left[\ln(2\gamma)^{-\frac{2E_{i}}{\omega}} + \frac{E_{i}}{\omega}\right]\right\} = \left(\frac{1}{2\gamma}\right)^{\frac{2E_{i}}{\omega}} \exp^{\frac{E_{i}}{\omega}}$$

Користећи израз за γ у атомском систему јединица (4.5.3), коначно се добија брзина издвајања електрона из атома у случају мултифотонске јонизације [28] где је (под кореном)е-Неперова константа:

$$w_{\rm MFJ} = \left(\frac{\sqrt{e} F}{2\omega\sqrt{2E_{\rm i}}}\right)^{\frac{2E_{\rm i}}{\omega}}$$
(5.1.27)

Потребно је нагласити да је пертурбациона теорија применљива само када је јачина ласерског поља много мања од јачине атомског поља, односно када у прорачуну важи услов (5.1.26). Прелаз електрона из везаног стања у континуум се састоји од суме виртуелних прелаза, при чему за сваки прелаз важе релације неодређености време– енергија [61].

Осим процеса мултифотонске јонизације, под наведеним условима, јављају се још три различита физичка процеса. Они на неки начин ограничавају дешавање "директног" процеса јонизације на знатно ниже јачине поља у односу на атомску јачину поља, а то су:

1. Штарков померај атомских нивоа у променљивом пољу (тј. ефекат цепања и померања спектралних линија у присуству електричног поља), због чијег постојања је немогуће раздвојити директну и резонантну јонизацију [82, 95, 96]. Овај феномен се даље испитује варирањем јачине поља ласера [95].

2. Јонизација изнад прага – процес у коме електрон апсорбује неколико фотона више него што је потребно да се јонизује атом (објашњено детаљније у поглављу 4, део 4.2.). У овом случају показује се да се изнад прага јонизације апсорпција ласерских зрака врши континуално [9, 83].

3. Стварање вишеструко наелектрисаних јона – преостали део јона се релативно лако јонизује након што се избаци први електрон; тада два или више електрона могу прећи у континуум истовремено. Постоје покушаји да се ова појава објасни колективним одзивом атомске љуске преко електронске корелације више електрона [97, 98, 99].

5.1.3.2. Тунелна јонизација

У супротном граничном случају, $\gamma << 1$, долази до тунеловања електрона кроз баријеру. Брзина тунелне јонизације се такође добија апроксимацијом формуле $f(\gamma)$ (5.1.6), за дати услов.

Поступак је следећи: најпре се нађе први извод функције $f(\gamma)$, по параметру адијабатичности, а потом се одреди њена гранична вредност, када $\gamma \to 0$.

За добијање апроксимиране формуле, користи се Маклоренов ред:

$$F(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \frac{\partial^n F(x)}{\partial x^n} \bigg|_{x=0} \cdot x^n$$

$$F(x) = F(x) \bigg|_{x\to 0} + \frac{\partial F(x)}{\partial x} \bigg|_{x\to 0} \cdot x + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 F(x)}{\partial x^2} \bigg|_{x\to 0} \cdot x^2 + \dots$$

Због мале вредности параметра γ , од интереса су само прва два члана овог реда, уз напомену да је први члан развоја једнак нули. У овом случају, парцијални извод формуле (5.1.6) по параметру γ , даје следећи израз:

$$\frac{\partial}{\partial \gamma} \left[f(\gamma) \right] = -\frac{\operatorname{arcsh}(\gamma)}{\gamma^3} + \frac{1 + \frac{1}{2\gamma^2}}{\sqrt{\gamma^2 + 1}} - \frac{1}{2\sqrt{\gamma^2 + 1}} + \frac{\sqrt{\gamma^2 + 1}}{2 \cdot \gamma^2}$$
(5.1.28)

Упрошћавањем добијеног извода долази се до следећег израза:

$$\frac{\partial}{\partial \gamma} \left[f(\gamma) \right] = \frac{\gamma \sqrt{1 + \gamma^2} - \operatorname{arcsh}(\gamma)}{\gamma^3}$$
(5.1.29)

Примена Лопиталовог правила за граничну вредност даје:

$$\lim_{\gamma \to 0} \left(\frac{\frac{\partial}{\partial \gamma} \left[\gamma \sqrt{1 + \gamma^2} - \operatorname{arcsh}(\gamma) \right]}{\frac{\partial}{\partial \gamma} \left[\gamma^3 \right]} \right) = \lim_{\gamma \to 0} \left(\frac{\frac{2\gamma^2}{\sqrt{1 + \gamma^2}}}{3\gamma^2} \right) =$$
(5.1.30)
$$= \lim_{\gamma \to 0} \left(\frac{2}{3\sqrt{1 + \gamma^2}} \right)$$

У случају граничне вредности горњег извода, када $\gamma \rightarrow 0\,$ следи

$$\lim_{\gamma \to 0} \left(\frac{\partial f[\gamma]}{\partial \gamma} \right) \to \frac{2}{3}.$$
 (5.1.31)

Добијена апроксимација (5.1.31) се помножи са *γ*-релација (4.5.3) и замени у формулу (5.1.25):

$$w_{if} = \exp\left(-\frac{2E_{i}}{\omega}\frac{2}{3}\gamma\right)$$

$$w_{if} = \exp\left(-\frac{2}{3}2E_{i}\frac{\sqrt{2E_{i}}}{F}\right)$$
(5.1.32)

те је тражени израз за брзину тунелне јонизације (у а. ј.) облика:

$$w_{\rm TJ} = \exp\left(-\frac{2}{3}\frac{\sqrt{2E_{\rm i}}^3}{F}\right) \tag{5.1.33}$$

Израз (5.1.33) даје брзину јонизације добијену у случају када број фотона који су потребни за јонизацију са енергијског нивоа E_n расте неограничено и теорија мултифотонске јонизације даје бесконачно мале вероватноће. У таквом, готово статичком пољу, $\omega \rightarrow 0$, тунелни ефекат постаје изузетно важан, јер би теорије мултифотонске јонизације (засноване на пертурбационој теорији) давале бесконачно мале вероватноће и брзине за поменути процес. За тунелну јонизацију посебно је карактеристично то да су само почетна и крајња стања електрона битна, док међустања не играју важну улогу. Такође, испуњеност услова $\hbar\omega \ll E_i$ и $F \ll F_{at}$ омогућава коришћење квазикласичне апроксимације у приступу.

5.2. АДК теорија – основе и примена

АДК теорија јесте теорија о тунелној јонизацији комплексних атома интензивним ласерским пољем [17], при чему се атом третира квантно-механичком методом, а ласерско поље класично. Таласна функција јонизованог електрона се апроксимира асимптотским изразом таласне функције валентног електрона, на великим удаљеностима од атомског језгра (апроксимација јаког поља и једноелектронска апроксимација, поглавље 3). Брзина јонизације атома се добија из брзине тунеловања валентног електрона, кроз потенцијалну баријеру коју ствара ласерско поље ниске фреквенце у складу са КФР теоријом [12, 13, 14].

АДК теорија је заснована на теорији тунеловања Ландау-Лифшица [18, 30], Смирнова- Чибисова [19], Переломова, Попова и Терентјева (ППТ теорија) [20]. У случају комплексних атома, више-електронски ефекат је урачунат увођењем ефективног квантног броја *n** [17].

Переломов, Попов и Терентјев су развили метод за израчунавање вероватноће јонизације везаног стања атома, који се налази у наизменичном електричном пољу [20]; наравно, поменути метод важи за ласерска поља која задовољавају услов: $\omega_{\rm L} \ll \omega_{\rm TJ}$, где је $\omega_{\rm TJ} = F/\sqrt{2E_{\rm i}}$ тунелна фреквенција (у атомским јединицама). На овај начин проблем прорачуна брзине јонизације се може решити управо применом адијабатске апроксимације, јер је док електрон тунелира промена ласерског поља занемарљива.

70

Аутори (ППТ) су у радовима [20, 68] у поступак добијања израза за вероватноћу јонизације укључили и Кулонов потенцијал, тако што су проширили израз за енергију крајњег стања електрона E_f додатним чланом, те се тако добија:

$$E_{i}(t) = -E_{i}$$

$$E_{f}(t) = \frac{1}{2} \left(p - \frac{F}{\omega} \sin(\omega t) \right)^{2} - \frac{\left(2n_{2} + |m_{l}| + 1 \right) \sqrt{2E_{i}}}{\eta(t)}$$
(5.2.1)

Члан којим је проширен израз за енергију коначног стања E_f дат је у параболичним координатама; n_2 је параболични квантни број, m_l је магнетни квантни број, а $\eta(t)$ је параболична координата [30]. Испоставило се да је брзина јонизације произвољног атома у осцилујућем електричном пољу пропорционална брзини јонизације у стационарном електричном пољу, разлика је само у фактору $(3Fn^{*3}/\pi Z^3)^{1/2}$ који се добија усредњавањем брзине јонизације по периоду спољашњег поља. Ово значи да до јонизације долази углавном када су вредности поља максималне. Формула за брзину јонизације у ППТ теорији је облика:

$$w_{\rm ppT}^{\rm lin} = C_{n^*l^*}^2 \left(\frac{3F\,n^{*3}}{\pi\,Z^3}\right)^{1/2} E_{\rm i} \frac{(2l+1)(l+m_l)!}{2^{m_l}(|m_l|)!(l-|m_l|)!} \left(\frac{2Z^3}{F\,n^{*3}}\right)^{2n^*-|m_l|-1} \exp\left(-\frac{2Z^3}{3F\,n^{*3}}\right)$$
(5.2.2)

где је l – орбитални квантни број (приближно је константа кретања када је интеракција ласер – атом много слабија од фине структуре недегенерисаних атомских нивоа, што је у експериментима Ксионга и Чина [87] био случај); m_l – пројекција орбиталног квантног броја, а n^* је ефективни кванти број, l^* – ефективни орбитални квантни број и важи: $l^* = (n^*)_0 - 1$, при чему $(n^*)_0$ представља најмањи ефективни квантни број n^* за који одговарајући квантни број l може имати дату вредност. $C_{n^*l^*}^2$ је нумерички коефицијент који су Переломов, Попов и Терентјев оставили недефинисаним. Овде је битно нагласити да израз (5.2.2) важи ако је $F \ll F_{at}$ и у случају линеарно поларизованог ласерског поља .

Следећи корак на побољшању формуле (5.2.2) су учинили Амосов, Делоне и Крајнов 1986. године [17]. Они су успели да изведу аналитички израз за коефицијент $C_{n^*l^*}$, користећи квазикласичну апроксимацију ($n^* >> 1$). У раду је претпостављено да се спољашње поље унутар атома може занемарити, јер је мало у поређењу са јонизационим потенцијалом. Метод приказан раније (релације (5.2.1)) и даље адекватно описује систем, јер је у посматраној области Кулоново поље којим преостали део атома
делује на ослобођени електрон слабо, док ласерско поље још увек може бити занемарено. У том случају стање система се може описати таласном функцијом слободног електрона и анализирају се одвојено две области (слика 5.3 и дискусија у оквиру дела 5.2.1) [17, 28]. Коефицијент који су Амосов, Делоне и Крајнов добили има следећи облик [17]:

$$C_{n^{*l^*}} = \left(\frac{2e}{n^*}\right)^{n^*} \frac{1}{\sqrt{2\pi n^*}}$$
(5.2.3)

Након замене нумеричког коефицијента (5.2.3) у ППТ израз за брзину јонизације (5.2.2) добија се:

$$w_{if} = \sqrt{\frac{3F n^{*^{3}}}{\pi Z^{3}}} E_{i} \left(\frac{2e}{n^{*}}\right)^{2n^{*}} \frac{1}{2\pi n^{*}} \frac{(2l+1)(l+|m_{l}|)!}{2^{m_{l}}(|m_{l}|)!(l-|m_{l}|)!} \times \left(\frac{2Z^{3}}{F n^{*^{3}}}\right)^{2n^{*}-|m_{l}|-1} \exp\left(-\frac{2Z^{3}}{3F n^{*^{3}}}\right)$$
(5.2.4)

а ако се још искористи релација између енергије јонизације E_i и ефективног квантног броја $n^* E_i = Z^2 / 2n^{*2}$ следи израз

$$w_{if} = \sqrt{\frac{3ZF}{16\pi^{3}n^{*^{3}}}} \left(\frac{2e}{n^{*}}\right)^{2n^{*}} \frac{(2l+1)(l+|m_{l}|)!}{2^{m_{l}}(|m_{l}|)!(l-|m_{l}|)!} \times \left(\frac{2Z^{3}}{Fn^{*^{3}}}\right)^{2n^{*}-|m_{l}|-1}} \exp\left(-\frac{2Z^{3}}{3Fn^{*^{3}}}\right)$$
(5.2.5)

У свим практичним случајевима може се сматрати да основна (непобуђена) стања атома имају орбитални квантни број l = 0 или l = 1, а магнетни квантни број $m_l = 0$ или $m_l = \pm 1$. Ако се претпостави да су вредности квантних бројева l = 1 и $m_l = 0$, следи

$$_{W_{if}} = \sqrt{\frac{3ZF}{16\pi^3 n^{*^3}}} \left(\frac{2e}{n^*}\right)^{2n^*} 3\left(\frac{2Z^3}{F n^{*^3}}\right)^{2n^*-1} \exp\left(-\frac{2Z^3}{3F n^{*^3}}\right),$$
(5.2.6)

пошто су вредности орбиталне нумеричке функције

$$f(l,m_l) = \frac{(2l+1)(l+|m_l|)!}{2^{m_l}(|m_l|)!(l-|m_l|)!}$$
(5.2.7)

за одређене вредности l, m_l једнаке f(0,0) = 1, f(1,0) = f(1,1) = 3.

Даљим сређивањем чланова у степену, добијени израз (5.2.6) може да се напише и као:

$$_{W_{if}} = \left(\frac{4eZ^{3}}{Fn^{*4}}\right)^{2n^{*}} \sqrt{\frac{27}{16\pi^{3}} \frac{ZF}{n^{*3}} \frac{F^{2}n^{*6}}{4Z^{6}}} \exp\left(-\frac{2Z^{3}}{3Fn^{*3}}\right).$$
(5.2.8)

Прошири ли се овај израз јединицом, написаном у облику разломка, добија се

$$W_{if} = \left(\frac{4eZ^3}{Fn^{*4}}\right)^{2n^{*}-\frac{3}{2}} \left(\frac{4eZ^3}{Fn^{*4}}\right)^{\frac{3}{2}} \sqrt{\frac{27}{64\pi^3} \frac{F^3n^{*3}}{Z^5}} \exp\left(-\frac{2Z^3}{3Fn^{*3}}\right), \quad (5.2.9)$$

одакле се, након одређеног броја елементарних трансформација, добија коначна формула за брзину јонизације АДК теорије облика [100]:

$$w_{\text{ADK}} = \left(\frac{3e}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{4eZ^3}{Fn^{*4}}\right)^{2n^* - \frac{3}{2}} \frac{Z^2}{n^{*\frac{9}{2}}} \exp\left(-\frac{2Z^3}{3Fn^{*3}}\right).$$
(5.2.10)

У циљу поређења добијеног израза (5.2.10) са Келдишовом брзином тунелне јонизације (5.1.33), потребно је још заменити члан Z^2/n^{*2} са $2E_i$, те потом следи другачији облик АДК брзине јонизације, тј. облик формуле у коме експлицитно фигурише енергија јонизације:

$$w_{\text{ADK}} = \left(\frac{3e}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{16eE_{i}^{2}}{ZF}\right)^{2n^{*}-\frac{3}{2}} \frac{Z^{2}}{n^{*\frac{3}{2}}} \exp\left(-\frac{2(2E_{i})^{\frac{3}{2}}}{3F}\right)$$

$$w_{\text{ADK}} = \left(\frac{3e}{\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \left(\frac{16eE_{i}^{2}}{ZF}\right)^{2n^{*}-\frac{3}{2}} \frac{Z^{2}}{n^{*\frac{3}{2}}} w_{\text{TJ}}$$
(5.2.11)

Поређењем формула (5.1.33) и (5.2.11) уочава се разлика у односу на Келдишов резултат (у случају нултог почетног импулса електрона), а то је добијени *предекспонент* у изразу (5.2.11).

За случај произвољних вредности орбиталног квантног броја и магнетног квантног броја неког почетног атомског стања, израз (5.2.10) је сложенији и има облик [100]:

$$w_{ADK} = \left(\frac{3}{2\pi}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{(2l+1)(l+|m_l|)!}{2^{|m_l|}(|m_l|)!(l-|m_l|)!} \frac{Z^3}{3n^{*3}} \left(\frac{4e^2}{n^{*2} - l^{*2}}\right)^{n^*} \\ \times \left(\frac{n^* - l^*}{n^* + l^*}\right)^{l+\frac{1}{2}} \left(\frac{2Z^3}{Fn^{*3}}\right)^{2n^* - |m_l| - \frac{3}{2}} \exp\left(-\frac{2Z^3}{3Fn^{*3}}\right)^{n^*}$$
(5.2.12)

Добијени израз (5.2.12) важи у случају линеарно поларизованог нискофреквентног ласерског поља (што се у нашим основним разматрањима подразумева, као и да је оса поларизације усмерена дуж *z*-осе). Теоријски прорачуни [64, 101] показују да највећи допринос јонизацији за линеарно поларизовано ласерско поље имају они електрони који се налазе у стању са магнетним квантним бројем $m_l = 0$, тј. они електрони чија је оса квантизације усмерена дуж осе поларизације ласерског поља.

У даљем развоју АДК теорије, уводи се важан предекспонент у израз за брзину прелаза [91], укључивањем Кулонове интеракције као апроксимације првог реда у повратну тачку (опширније о овоме у делу 5.2.1). Та корекција је побољшала раније развијен метод Переломова, Попова и Терентјева, те се тако омогућило егзактније теоријско проучавање процеса тунелне јонизације.

Сада ће бити продискутовано какво је слагање резултата АДК теорије са експерименталним резултатима.

На основу вредности параметра адијабатичности, процеси јонизације се могу окарактерисати или као мултифотонска јонизација (МФЈ) $\gamma >>1$ или као тунелна јонизација (ТЈ) $\gamma <<1$. Такође, у експериментима постоји и усредњена област $\gamma \sim 1$, која не припада ни МФЈ, ни ТЈ. На основу дефиниције за γ (једначина 4.5.3, у атомским јединицама), уочава се да је за одређени атом јонизационог потенцијала E_i , као и за одређени ласер фреквенције ω , прелазак са МФЈ на ТЈ је могућ само ако повећавамо јачину ласерског поља тј. параметар F. Коришћењем ласера који раде у временском опсегу $10^{-8} - 10^{-9}$ s, могуће је посматрање процеса који се одвијају брзинама прелаза мањим од $10^8 - 10^9 \text{ s}^{-1}$. Због тога, на пример, у случају Nd:YAG или Nd:glass ласера, повећање јачине ласерског поља (у циљу постизања и одржавања услова за тунелну јонизацију, $\gamma <<1$) доводи до сатурације јонизационог процеса и пре него што се тунеловање уопште и догоди. За CO₂ ласере ($\lambda = 10, 6 \mu \text{m}$), ласерски интензитет којим долази до тунелне јонизације атома је 100 пута мањи него у случају Nd:YAG ласера, чија је таласна дужина ($\lambda = 1, 06 \mu \text{m}$).

Као што је већ поменуто у уводу ове дисертације, за CO_2 ласере, када се користе у експериментима, увек важи да је $\gamma <<1$, односно са тим ласерима се ради увек у тунелном режиму. Једна од експерименталних група која ефективно изучава јонизацију атома CO_2 ласерима је група професора Чина (на Универзитету Лавал, Квебек, Канада). Они су експериментално показали да племенити гасови могу релативно лако да се јонизују импулсом CO_2 ласера (у радовима: Чин [35, 16] и Јергеи [34]). Аутори Чин, Јергеи и Лавињ су у [16] експериментално потврдили да се атоми ксенона јонизују искључиво тунеловањем, ако се на те атоме делује кратким CO_2 ласерским импулсима, интензитета 10^{14} W/cm². У експерименту су коришћене две различите таласне дужине

 $(\lambda_1 = 9,55 \mu m, \lambda_2 = 10,55 \mu m, \hbar \omega = 0,117 \text{ eV})$ и посматрани су до три пута јонизовани атоми ксенона, Xe³⁺. Резултати експеримента су били у складу са предвиђањима АДК теорије [34, 35].

У раду Ксионг и Чин из 1991. године [87] снимљени су енергијски спектри електрона калијума и ксенона (К, Хе). Зависност броја јона калијума од интензитета ласера и креирање вишеструко наелектрисаних стања ксенона такође су мерени у овом раду (слика 4.9), при чему је потврђено добро слагање експерименталних резултата са теоријским прорачунима АДК теорије. Та мерења, заједно са ранијим мерењима [34], упоређена су са предвиђањима АДК теорије и пертурбационе теорије најнижег реда и установљено да АДК теорија даје много бољи опис јонизационог процеса него пертурбациона теорија под датим условима [87].

Слике 5.1 и 5.2 илуструју оквирне вредности за брзину јонизације (у јединицама s^{-1} и у атомским јединицама), а на слици 5.2 је поређење нумеричких резултата и резултата које даје АДК теорија, те могућности њене примене у анализи процеса јонизације.



Слика 5.1. Брзина јонизације (у s^{-1} и % по оптичком кругу) за атом водоника на 1064 nm у функцији ласерског интензитета из [95].

На слици 5.1 је приказана брзина јонизације за атом водоника, у функцији ласерског интензитета таласне дужине 1064 nm, где се уочава да брзина јонизације најпре веома брзо расте, а затим долази до сатурације, што је карактеристика процеса тунелне јонизације. На почетку процеса јонизације, код интензитета 2×10^{13} W/cm², брзина јонизације мала, око 10^{-7} % по оптичком кругу. Али, при највишем интензитету ласерског поља, приказаном на слици 5.1, атом водоника се јонизије за мање од пикосекунде, што износи 1% по оптичком кругу.



Слика 5.2. Брзине јонизације за водоник и хелијум у зависности од јачине електричног поља у а.ј. Пуна линија: нумерички резултат; испрекидана линија: АДК формула [102].

На слици 5.2 приказане су брзине јонизације w за атоме водоника и хелијума у зависности од јачине електричног поља F; обе величине су приказане у атомским јединицама. Пуна линија: нумерички резултат; испрекидана линија: АДК формула. Тачкасте линије представљају јачине поља $F_{\rm NBJ}$ на којома долази до пригушења баријере за водоник и хелијум. За поља $F < F_{\rm NBJ}$ резултати које даје АДК се добро слажу са нумеричким резултатима (нарочито за хелијум). Међутим, у случају када је јачина поља F већа од $F_{\rm NBJ}$ прорачуни добијени коришењем АДК формуле превазилазе нумеричке вредности за брзину јонизације w, јер је то област где електрон "слободно" напусти атом услед пригушења баријере (електрон не тунелује).

Наравно, повећањем интензитета ласерских поља за три реда величине за кратко време (услед проналаска методе појачања ласерског импулса [103]), омогућено је проучавање процеса МФЈ/ТЈ преко већег броја експерименталних параметара. У једном таквом експерименту проучавана је јонизација атома хелијума у раду [62], при чему су добијени резултати били у складу са АДК теоријом, нарочито на вишим интензитетима ласерског поља.

Дакле, из свега горе наведеног показало се да формула АДК теорије сасвим добро интерпретира експерименталне резултате за како за једноструку, тако и за вишеструку тунелну јонизацију комплексних атома у јаким ласерским пољима [21, 22, 62, 87, 102].

5. 2. 1. Корекција повратне тачке у оквиру АДК теорије при тунелној јонизацији атома

При формулисању АДК теорије, Кулонова интеракција је била укључена у готово све фазе развоја теорије, сем код одређивања повратне тачке, која је израчунавана до нултог реда апроксимације (у односу на ову интеракцију). У почетку је то занемаривање било оправдано, јер су резултати теорије били су складу са експерименталним резултатима за ласерска поља (интензитета реда 10¹² W/cm²) која су била знатно слабија од атомског поља (које је интензитета реда 10¹⁶ W/cm²) [35, 87].

Наравно, пошто се у експериментима у новије време користе ласерска поља чије су јачине веће чак и од јачине атомског поља (у том случају и домен примене АДК теорије је ограничен), постало је потребно да се Кулонова интеракција укључи и у поступак израчунавања повратне тачке τ , пошто је претпостављено да би то довело до помака у њеном положају. Након извођења коригованог облика повратне тачке τ испитаће се како тај помак утиче на израз за брзину јонизације атома у нискофреквентном ласерском пољу ($\omega \ll \omega_{at}$), односно за поља која су довољно јака да доведу до промене, али су истовремено и слабија од атомског поља (реда 10^{16} W/cm²) тако да АДК теорија ипак важи.

У раним фазама теорије се при процени вероватноће јонизације тј. брзине прелаза у случају краткодометног потенцијала користила чињеница да Кулонов потенцијал не утиче на енергију коначног стања *f* електрона у електромагнетном пољу, пошто је избачени електрон довољно далеко од језгра; што је и суштина Келдишове апроксимације.

Међутим, пошто је у процесу јонизације атома ипак присутна и Кулонова интеракција, њен утицај се узима у обзир додавањем Кулоновог потенцијала (као мале величине) енергији коначног стања (на основу другог Келдишовог услова $F \ll F_{at}$).

Полазни корак у извођењу кориговане повратне тачке јесте да се енергији коначног стања дода члан који описује Кулонову интеракцију, па израз за $E_f(t)$ постаје

$$E_{f}(t) = \frac{1}{2} \left[\vec{p} + \frac{1}{c} \vec{A}(t) \right]^{2} - \frac{Z}{r} =$$

$$= \frac{1}{2} \left[\vec{p} - \int \vec{F}(t) dt \right]^{2} - \frac{Z}{r}$$
(5.2.13)

док се енергија почетног стања и даље сматра једнаком енергији јонизације (сматра се да је почетно стање непертурбовано), као у релацији (5.1.18). Ако се још претпостави да је примењено ласерско поље линеарно поларизовано, и да је импулс избаченог електрона сада различит од нуле (ради комплетности резултата) даље следи

$$E_{f}(t) = \frac{1}{2} \left(\vec{p} - \vec{F} \int \cos(\omega t) dt \right)^{2} - \frac{Z}{r} =$$

$$= \frac{1}{2} \left(\vec{p} - \frac{\vec{F}}{\omega} \sin(\omega t) \right)^{2} - \frac{Z}{r} \qquad (5.2.14)$$

На основу [30] уводи се веза између параболичних и Декартових координата у облику:

$$x = \sqrt{\xi \eta} \cos \theta \qquad \xi = r + z$$

$$y = \sqrt{\xi \eta} \sin \theta \quad \text{или као} \quad \eta = r - z \quad , \qquad (5.2.15)$$

$$z = \frac{\xi - \eta}{2} \qquad \qquad \theta = \operatorname{arc} \operatorname{tg}\left(\frac{y}{x}\right)$$

при чему су границе за параболичне координате: за ξ , $\eta = [0, \infty]$ и за $\theta = [0, 2\pi]$.

Из (5.2.15) следи још једна корисна релација

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = \frac{\xi + \eta}{2}, \qquad (5.2.16)$$

која се мења у (5.2.14), тако да за енергију коначног стања добија облик

$$E_f(t) = \frac{1}{2} \left(\vec{p} - \frac{\vec{F}}{\omega} \sin(\omega t) \right)^2 - \frac{2Z}{\xi + \eta}.$$
(5.2.17)

Пошто енергија јонизације водонику сличног атома уствари представља енергију његовог својственог стања; важи да је $E_i = Z^2/2n^2$, па је зато: $Z = n\sqrt{2E_i}$. Узимајући то у обзир, израз (5.2.17) постаје

$$E_{f}(t) = \frac{1}{2} \left(\vec{p} - \frac{\vec{F}}{\omega} \sin(\omega t) \right)^{2} - \frac{2}{\xi + \eta} n \sqrt{2E_{i}} .$$
 (5.2.18)

Сада је пожељно дефинисати *n* мало другачије: главни квантни број *n* повезан је са параболичним квантним бројевима и магнетним квантним бројем релацијом $n = n_1 + n_2 + |m| + 1$. Пошто се овде разматрају Ридбергова стања за која је: $n_1 = n_2$, добија се да је: $n = 2n_2 + |m| + 1$. Ако се претпостави и да електрон напушта атом у области у којој је: $\xi \approx \eta$, онда се може писати да је: $\xi + \eta \approx 2\eta$, те израз (5.2.18) сада постаје

$$E_{f}(t) = \frac{1}{2} \left(\vec{p} - \frac{\vec{F}}{\omega} \sin(\omega t) \right)^{2} - \frac{(2n_{2} + |m| + 1)\sqrt{2E_{i}}}{\eta}.$$
 (5.2.19)

На овај начин формуле за енергије почетног и крајњег стања у случају када је урачунато и Кулоново међуделовање имају облик

$$\begin{cases} E_{i}(t) = -E_{i} \\ E_{f}(t) = \frac{1}{2} \left(\vec{p} - \frac{\vec{F}}{\omega} \sin(\omega t) \right)^{2} - \frac{(2n_{2} + |m| + 1)\sqrt{2E_{i}}}{\eta}, \quad (5.2.20) \end{cases}$$

што је исти облик као у (5.2.1), док је услов за налажење експлицитног облика повратне тачке (5.1.11) сада:

$$-E_{i} = \frac{1}{2} \left(p - \frac{F}{\omega} \sin(\omega\tau) \right)^{2} - \frac{\left(2n_{2} + |m| + 1\right)\sqrt{2E_{i}}}{\eta(t)}$$

$$-E_{i} = \frac{1}{2} \left(p - \frac{F}{\omega} \sin(\omega\tau) \right)^{2} - \frac{Z}{\eta(t)}$$
 (5.2.21)

Овде треба истаћи да су Переломов, Попов и Терентјев одабрали да у поступак одређивања повратне тачке не укључе горе урачунато Кулоново узајамно деловање (члан $Z/\eta(t)$), те је њихов услов за добијање повратне тачке имао облик

$$-E_{\rm i} = \frac{1}{2} \left(\vec{p} - \frac{\vec{F}}{\omega} \sin(\omega \tau) \right)^2$$
(5.2.22),

при чему се из (5.2.22) може добити користан израз за синус аргумента $\omega \tau$ као:

$$\sin(\omega\tau) = \frac{\omega}{\vec{F}} \left(\vec{p} + i\sqrt{2E_{\rm i}} \right). \tag{5.2.23}$$

Под претпоставком да се за мале углове синусна функција може заменити својим аргументом: $sin(\omega \tau) \approx \omega \tau$, добија се одговарајући облик израза за повратну тачку у нултој апроксимацији

$$\tau_0 = \frac{p + i\sqrt{2E_i}}{F}.$$
 (5.2.24)

У разматраном проблему узајамног деловања ласерског поља са атомом, параболична координата ξ реда је величине атомских растојања, док је η макроскопских димензија, тако да важи услов да је $\xi \ll \eta$ [104]. Зато је на слици 5.3 приказана зависности ефективног потенцијала $U_{\rm ef}$ од параболичне координате η .



Слика 5.3. Ефективни потенцијал $V_{
m ef}$ као функција параболичне координате η .

На слици 5.3 су посебно назначене комплексна повратна тачка $\eta(\tau)$ и произвољна тачка $\eta_a = 2r_a$ у којој се поље преосталог дела атома може сматрати малим, али је ласерско поље још увек занемарљиве јачине: $Z/\eta_a \ll F\eta_a \ll E_i$. Испрекидана водоравна линија означава вредност енергије јонизације. Израз за енергију коначног стања $E_f(t)$ (5.2.19) важи за $t > t_a$ (t_a је време у вези са координатом η_a), тј. онда када је електрон испод баријере, а атомски потенцијал је занемарљив.

Векторски облик класичне једначине кретања за електрон у пољу Кулонове силе је облика

$$m_{el}\,\vec{a} = \vec{F}_{\rm Kul}\,.\tag{5.2.25}$$

Ако се претпостави да ласерско поље делује дуж z – осе, онда ће се и електрон кретати такође у правцу z – осе, па следи

$$m_{el} \, \ddot{z} \, \vec{e}_z = -e_{el} F \, \vec{e}_z \tag{5.2.26}$$

одакле се добија скаларна диференцијална једначина кретања (у а.ј.): $\ddot{z} = -F(t)$, која је за случај линијски поларизованог поља облика

$$\ddot{z} = -F\cos(\omega t). \tag{5.2.27}$$

Интеграцијом (5.2.27) добија се брзина електрона: $\dot{z} = -(F \sin \omega t)/\omega + C_1$.

Ако се претпостави да у почетном тренутку ласерско поље није деловало на атом, сва кинетичка енергија електрона се онда трошила на савлађивање јонизационог потенцијала, па је: $p^2/2 = -E_i$, односно: $\dot{z}(t=0) = \pm i\sqrt{2E_i} = C_1$.

Значи, брзина јонизованог електрона једнака је: $\dot{z} = -(F\sin(\omega t))/\omega + i\sqrt{2E_i}$, где је пред кореном одабран знак плус. Још једном интеграцијом добија се

$$z(t) = \frac{F}{\omega^2} \cos(\omega t) + i\sqrt{2E_i} t + C_2.$$
 (5.2.28)

Под претпоставком да се у почетном тренутку честица налазила у координатном почетку, добија се да је: $z(t=0) = 0 = \frac{F}{\omega^2} \cos 0 + i \sqrt{2E_i} 0 + C_2$, па је константа $C_2 = -F/\omega^2$.

Коначна једначина кретања електрона у правцу z – осе је облика

$$z(t) = \frac{F}{\omega^2} (\cos(\omega t) - 1) + i\sqrt{2E_i} t.$$
 (5.2.29)

Већ је напоменуто да је параболична координата ξ реда величине атомских растојања, док је η макроскопских димензија, што имплицира да је $\xi \ll \eta$, одакле даље следи да је: $z = (\xi - \eta)/2 = -\eta/2$. Тако израз (5.2.29) у параболичним координатама постаје

$$-\frac{\eta(t)}{2} = \frac{F}{\omega^2} (\cos(\omega t) - 1) + i\sqrt{2E_i} t.$$
 (5.2.30)

Пошто је на основу првог Келдишовог услова: $\omega \ll \omega_{if}$, важи да је аргумент косинусне функције мали, па са може се развити у Мек Лоренов ред

$$\cos(\omega t) \approx 1 - \frac{\omega^2 t^2}{2}, \qquad (5.2.31)$$

и тако се добија зависност параболичне координате од времена у следећем облику

$$-\frac{\eta(t)}{2} = -\frac{F}{2}t^2 + i\sqrt{2E_{\rm i}}t. \qquad (5.2.32)$$

Након замене израза (5.2.24) за повратну тачку у горњи израз $t \to \tau_0$, и једноставних израчунавања, добија се израз за параболичну координату нулте апроксимације:

$$\frac{\eta(\tau_0)}{2} = \frac{\frac{p^2}{2} + E_{\rm i}}{F}.$$
(5.2.33)

У релацију (5.1.11) која представља општи услов за одређивање повратне тачке, потребно је заменити формуле за енергије почетног и крајњег стања облика (5.2.21). То је поступак за *корекцију* повратне тачке τ – одређивање повратне тачке у којој фигурише Кулонова интеракција):

$$\frac{1}{2}\left(p - \frac{F}{\omega}\sin(\omega\tau)\right)^2 - \frac{Z}{\eta(t)} = -E_{\rm i}$$
(5.2.34)

Пошто је спољашње поље у горњем изразу нискофреквентно ($\omega \ll \omega_{at}$), синус функција се развија у Мек Лоренов степени ред $\sin(\omega \tau) \approx \omega \tau$, па се тако добија:

$$\frac{1}{2}(p-F\tau)^2 - \frac{Z}{\eta(\tau)} = -E_i$$

или у облику

$$p - F\tau = -\sqrt{\frac{Z}{\eta(\tau)/2} - 2E_{i}} = -i\sqrt{2E_{i}}\sqrt{1 - \frac{Z}{\eta(\tau)E_{i}}}$$
(5.2.35)

Ако се сада у изразу (5.2.35) замени израз (5.2.33) за параболичну координату, следи:

$$p - F\tau = -i\sqrt{2E_{\rm i}}\sqrt{1 - \frac{F}{p^2 + 2E_{\rm i}}\frac{Z}{E_{\rm i}}}.$$
(5.2.36)

Како је Кулонова поправка под кореном врло мала у поређењу са јонизационим потенцијалом E_i , на основу другог Келдишовог услова ($F \ll F_{at}$) могуће је развити корен горњег израза у степени ред применом релације $\sqrt{1-x} \approx 1-x/2$.

Развој члана

$$\frac{F}{p^2 + 2E_{\rm i}} \frac{Z}{E_{\rm i}}$$

под кореном у овом случају даје:

$$\sqrt{1 - \frac{F}{p^2 + 2E_i} \frac{Z}{E_i}} \approx 1 - \frac{ZF}{2E_i(p^2 + 2E_i)}$$

на основу чега (5.2.36) сада постаје:

$$p - F \tau = -i\sqrt{2E_{i}} \left(1 - \frac{ZF}{2E_{i}(p^{2} + 2E_{i})} \right),$$

односно

$$F \tau = p + i\sqrt{2E_{i}} \left(1 - \frac{ZF}{2E_{i}(p^{2} + 2E_{i})} \right).$$
(5.2.37)

Даљим сређивањем горњег израза добија се:

$$\tau = \frac{p}{F} + \frac{i\sqrt{2E_i}}{F} \left[1 - \frac{ZF}{2E_i(p^2 + 2E_i)} \right],$$

одакле следи и коначан израз за кориговану повратну тачку т :

$$\tau = \frac{p + i\sqrt{2E_{i}}}{F} - \frac{iZ}{(p^{2} + 2E_{i})\sqrt{2E_{i}}}.$$
(5.2.38)

Добијена релација (5.2.38) представља кориговани облик повратне тачке који је требало извести. Она се од израза (5.2.24), коришћеног у првобитној варијанти АДК теорије [17], разликује по томе што садржи поправку услед присуства Кулонове интеракције, а то је управо *други члан* израза (5.2.38) изведен у [91].

5.2.2. Утицај коригованог облика повратне тачке на брзину прелаза у АДК теорији

У циљу што бољег разумевања могућности примене АДК теорије у садашњим експерименталним условима, следећи корак ће бити испитивање утицаја коригованог облика повратне тачке (5.2.38) на некориговану АДК формулу за брзину јонизације, добијену раније [17].

У складу са тим, поново ће бити коришћена релација (5.1.9) и примењена Ландау-Дихнеова адијабатска апроксимација у прорачунима, као изрази за енергије почетног и крајњег стања дате у (5.2.21).

Ако се узме у обзир да је параболични квантни број $m_l = 0$ и синус се развије у степени ред (поље је нискофреквентно, уосталом то је већ урађено код извођења повратне тачке (5.2.38)), изрази за енергије почетног и крајњег стања постају

$$E_{i}(t) = -E_{i}$$

$$E_{f}(t) = \frac{1}{2}(p - Ft)^{2} - \frac{(2n_{2} + 1)\sqrt{2E_{i}}}{\eta(t)}$$
(5.2.39)

Параболична координата $\eta(t)$ дата изразом (5.2.33) мења се у (5.2.39), па имагинарни део дејства у изразу за брзину прелаза (5.1.9) сада добија следећи облик:

$$\begin{split} \mathrm{Im} \int_{0}^{\tau} \Big[E_{f}(t) - E_{i}(t) \Big] dt &= \mathrm{Im} \int_{0}^{\tau} \Big[\frac{1}{2} (p - Ft)^{2} - \frac{(2n_{2} + 1)\sqrt{2E_{i}}}{\eta(t)} + E_{i} \Big] dt = \\ &= \mathrm{Im} \int_{0}^{\tau} \Big[\frac{1}{2} (p - Ft)^{2} + E_{i} \Big] dt + \mathrm{Im} \int_{0}^{\tau} - \frac{(2n_{2} + 1)\sqrt{2E_{i}}}{\eta(t)} dt = \\ &= \mathrm{Im} S^{\mathrm{kd}}(\tau) + \mathrm{Im} \, \delta S^{\mathrm{Kul}} \end{split}$$

Први члан у горњем изразу представља допринос краткодометног потенцијала имагинарном делу дејства, а на основу поставки Келдишове теорије [12] познато је да овај тип потенцијала не утиче на енергију коначног стања електрона f у електромагнетном пољу, пошто је избачен електрон довољно далеко од језгра.

Други члан у горњем изразу представља допринос урачунате Кулонове интеракције. У циљу добијања прецизнијих резултата интеграл за $Im\delta S^{Kul}$ биће подељен на два дела, увођењем произвољне тачке t_a , слика 5.3 па имагинарни део дејства услед тога има следећи облик

$$\operatorname{Im} S^{\mathrm{kd}}(\tau) + \operatorname{Im} \delta S^{\mathrm{Kul}} = \operatorname{Im} \int_{0}^{\tau} \left[\frac{1}{2} (p - Ft)^{2} - E_{\mathrm{i}} \right] dt + \operatorname{Im} \int_{0}^{\tau} -\frac{(2n_{2} + 1)\sqrt{2E_{\mathrm{i}}}}{\eta(t)} dt =$$
$$\operatorname{Im} \int_{0}^{\tau} \left[\frac{1}{2} (p - Ft)^{2} - E_{\mathrm{i}} \right] dt + \operatorname{Im} \int_{0}^{t_{\mathrm{a}}} -\frac{(2n_{2} + 1)\sqrt{2E_{\mathrm{i}}}}{\eta(t)} dt + \operatorname{Im} \int_{t_{\mathrm{a}}}^{\tau} -\frac{(2n_{2} + 1)\sqrt{2E_{\mathrm{i}}}}{\eta(t)} dt =$$
(5.2.40)
$$= \operatorname{Im} S^{\mathrm{kd}}(\tau) + \operatorname{Im} \delta S_{0}^{\mathrm{Kul}} + \operatorname{Im} \delta S_{\mathrm{a}}^{\mathrm{Kul}}$$

Нови израз за имагинарни део дејства (5.2.40) има три члана, од којих први даје експоненцијални део брзине јонизације, а остала два члана дефинишу њен предекспонент. Као што се види, повратна тачка τ улази у прорачун само преко трећег члана и довољно је израчунати само њега. Али, у циљу што потпунијег упоређивања утицаја τ_0 и τ на формулу w_{ADK} поступно ће бити изведена сва три члана имагинарног дела дејства. Наиме, чланови из (5.2.40) ће се интегралити најпре без узимања у обзир Кулонове интеракције (повратна тачка нулте апроксимације τ_0), а потом ће се исти чланови израчунати за кориговани облик повратне тачке (5.2.38).

Прорачун започиње израчунавањем временски зависног дела дејства $S^{kd}(\tau)$, на основу првог интеграла у изразу (5.2.40).

$$\operatorname{Im} S^{\mathrm{kd}}(\tau) = \operatorname{Im} \int_{0}^{\tau} \left[\frac{1}{2} (p - Ft)^{2} + E_{\mathrm{i}} \right] dt$$
 (5.2.41)

Како само горња граница утиче на вредност датог интеграла, пошто је доња граница реална, након једноставне интеграције следи израз

Im
$$S^{\rm kd}(\tau) = {\rm Im}\left[\left(E_{\rm i} + \frac{p^2}{2}\right)\tau - \frac{pF}{2}\tau^2 + \frac{F^2}{6}\tau^3\right].$$
 (5.2.42)

Када се замени добијени израз за повратну тачку у нултој апроксимацији (5.2.24) и изаберу само имагинарни чланови $Im(\tau_0)$, $Im(\tau_0^2)$, $Im(\tau_0^3)$, израз (5.2.42) постаје

$$\operatorname{Im} S^{\mathrm{kd}}(\tau_0) = \left(E_{\mathrm{i}} + \frac{p^2}{2}\right) \frac{\sqrt{2E_{\mathrm{i}}}}{F} - \frac{p F}{2} \frac{p^2 \sqrt{2E_{\mathrm{i}}}}{F^2} + \frac{F^2}{6} \left(\frac{3p^2 \sqrt{2E_{\mathrm{i}}}}{F^3} - \frac{(2E_{\mathrm{i}})^{3/2}}{F^3}\right),$$
$$\operatorname{Im} S^{\mathrm{kd}}(\tau_0) = \left(\frac{p^2 + 2E_{\mathrm{i}}}{2}\right) \frac{\sqrt{2E_{\mathrm{i}}}}{F} - \frac{p^2 \sqrt{2E_{\mathrm{i}}}}{F} + \frac{p^2 \sqrt{2E_{\mathrm{i}}}}{2F} - \frac{(2E_{\mathrm{i}})^{3/2}}{6F},$$

даље, једноставним сређивањем горњег израза добија се:

Im
$$S^{\rm kd}(\tau_0) = \frac{(2E_{\rm i})^{3/2}}{3F}$$
. (5.2.43)

Сада, заменом израза за кориговану повратну тачку (5.2.38) у једнакост (5.2.42), те поновним избором само имагинарних чланова $Im(\tau)$, $Im(\tau^2)$, $Im(\tau^3)$ и мањим трансформацијама, добија се:

$$\operatorname{Im} S^{\mathrm{kd}}(\tau) = \left(\frac{p^2 + 2E_{\mathrm{i}}}{2}\right) \left[\frac{\sqrt{2E_{\mathrm{i}}}}{F} - \frac{Z}{(p^2 + 2E_{\mathrm{i}})\sqrt{2E_{\mathrm{i}}}}\right] - \frac{p^2\sqrt{2E_{\mathrm{i}}}}{F} + \frac{p^2Z}{(p^2 + 2E_{\mathrm{i}})\sqrt{2E_{\mathrm{i}}}} - \frac{(2E_{\mathrm{i}})^{3/2}}{6F} + \frac{Z\sqrt{2E_{\mathrm{i}}}}{2(p^2 + 2E_{\mathrm{i}})} + \frac{p^2\sqrt{2E_{\mathrm{i}}}}{2F} - \frac{p^2Z}{2(p^2 + 2E_{\mathrm{i}})\sqrt{2E_{\mathrm{i}}}}$$

у коме су остали само чланови до првог реда Кулонове интеракције тј. реда Z. После елементарних трансформација и сређивања горњег израза следи

$$\operatorname{Im} S^{\mathrm{kd}}(\tau) = \frac{(2E_{\mathrm{i}})^{3/2}}{3F} + \frac{1}{2} \left[-\frac{Z}{\sqrt{2E_{\mathrm{i}}}} + \frac{p^2 Z}{(p^2 + 2E_{\mathrm{i}})\sqrt{2E_{\mathrm{i}}}} + \frac{Z\sqrt{2E_{\mathrm{i}}}}{(p^2 + 2E_{\mathrm{i}})} \right].$$

Израз у средњој загради на десној страни горње једнакости идентички је једнак нули, па се за имагинарни део дејства (услед дејства краткодометног потенцијала) и кориговане повратне тачке τ добија:

Im
$$S^{\rm kd}(\tau) = \frac{(2E_{\rm i})^{3/2}}{3F}$$
. (5.2.44)

Поређењем израза за Im $S^{kd}(\tau_0)$ и Im $S^{kd}(\tau)$ уочава се да су једнаки, што значи да корекција повратне тачке нема никакав утицај на члан који описује краткодометни потенцијал.

Такође, на основу једнакости (5.2.43) и релације (5.1.9) за брзину јонизације се у овом случају добија следећа формула

$$w^{\rm kd} = \exp\left(-\frac{2(2E_{\rm i})^{3/2}}{3F}\right)$$
 (5.2.45)

што управо одговара Келдишовом изразу за брзину јонизације w_{TJ} у случају тунеловања електрона, израз (5.1.33). На основу тога следи да укључивање Кулонове интеракције (до првог реда апроксимације) у повратну тачку τ не утиче на експоненцијални део формуле за брзину прелаза у случају тунелне јонизације.

Сада ће бити израчунат допринос другог члана имагинарног дела дејства Im δS_0^{Kul} из једнакости (5.2.40). Битно је нагласити да су у првој области $\eta < \eta_a$ (слика 5.3) квантни ефекти врло снажни и због тога се та област разматра на потпуно другачији начин од области $\eta > \eta_a$.

У области $\eta < \eta_a$ узајамно деловање између атома и ласерског поља толико је мало у поређењу са енергијом јонизације E_i , тако да се стање система може описати непертурбованом таласном функцијом, која у параболичним координатама гласи

$$\Psi = \left(\frac{2Z\,r\,\mathrm{e}}{n^{*2}}\right)^{n^*} \exp\left(-\frac{Z\,r}{n^*}\right),\tag{5.2.46}$$

где је $r = \eta / 2 \approx -i \sqrt{2E_i} t$, а е је логаритамска основа (а не елементарно наелектрисање!).

Како адијабатска апроксимација представља аналогон квазикласичне апроксимације у временском домену, може се написати да је $\Psi(t) = \exp[i\delta S_0^{\text{Kul}}(t)]$, одакле логаритмовањем леве и десне стране (5.2.46) следи израз

$$i\,\delta S_0^{\text{Kul}} = -\frac{Zr}{n^*} + n^* \ln\left(\frac{2Z\,r\,\mathrm{e}}{n^{*2}}\right).$$
 (5.2.47)

Једини допринос овог израза имагинарном делу дејства потиче од $t_a (r_a = \eta_a / 2)$, па је израз (5.2.47) довољно израчунати за тренутак t_a :

$$i\,\delta S_0^{\rm Kul} = -\frac{Z\,r_{\rm a}}{n^*} + n^*\ln\left(\frac{2Z\,r_{\rm a}\,e}{n^{*2}}\right) = -\frac{Z\eta_{\rm a}}{2n^*} + n^*\ln\left(\frac{Z\eta_{\rm a}e}{n^{*2}}\right),\tag{5.2.48}$$

односно множењем са 1/i, други члан имагинарног дела дејства постаје

$$\delta S_0^{\text{Kul}} = i \cdot \frac{Z\eta_a}{2n^*} - in^* \ln\left(\frac{Ze}{n^{*2}}\eta_a\right).$$
(5.2.49)

У области $\eta < \eta_a$ ће се занемарити интеракција између атома и поља, па ће параболична координата (5.2.32) у овом случају бити једнака

$$-\eta_{\rm a} \equiv -\eta(t_{\rm a}) = 2i\sqrt{2E_{\rm i}} t_{\rm a}$$
. (5.2.50)

Заменом (5.2.50) у (5.2.49) и након неколико елементарних трансформација добија се израз

$$\delta S_0^{\text{Kul}} = \frac{Z\sqrt{2E_i}}{n^*} t_a + n^*\pi + \frac{n^*\pi}{2} - in^* \ln\left(\frac{2Ze}{n^{*2}}\sqrt{2E_i} t_a\right).$$
(5.2.51)

За даљи рачун, по дефиницији је потребан само имагинарни део горњег израза (трећи члан):

Im
$$\delta S_0^{\text{Kul}} = -n * \ln \left(\frac{2Z \,\mathrm{e}}{n^{*2}} \sqrt{2E_{\mathrm{i}}} \, t_{\mathrm{a}} \right).$$
 (5.2.52)

Ако се још узму у обзир стања окарактерисана великим квантним бројевима $(n^* \gg 1)$, односно $n^* \approx (2n^* - 1)/2$, коначно се добија:

Im
$$\delta S_0^{\text{Kul}} = -\frac{2n^* - 1}{2} \ln \left(\frac{2Z \, e}{n^{*2}} \sqrt{2E_i} \, t_a \right).$$
 (5.2.53)

Трећи члан имагинарног дела дејства ${\rm Im}\,\delta S_{\rm a}^{\rm Kul}$ у изразу (5.2.40) дат је интегралом

$$\delta S_{a}^{Kul}(t) = \int_{t_{a}}^{\tau} -\frac{(2n_{2}+1)\sqrt{2E_{i}}}{\eta(t)} dt . \qquad (5.2.54)$$

У горњи израз је потребно заменити формулу (5.2.32) за параболичну координату и тако се добија следећи интеграл

$$\delta S_{a}^{Kul}(t) = \int_{t_{a}}^{\tau} \frac{(2n_{2}+1)\sqrt{2E_{i}}}{2i\sqrt{2E_{i}}t - Ft^{2}} dt =$$
$$= -\frac{(2n_{2}+1)\sqrt{2E_{i}}}{F} \int_{t_{a}}^{\tau} \frac{dt}{t^{2} - \frac{2i\sqrt{2E_{i}}}{F}t}.$$

Применом методе интеграције рационалне функције и после неколико елементарних трансформација следи израз

$$\delta S_{a}^{Kul}(t) = i \frac{2n_{2} + 1}{2} \ln \left(\frac{\tau - \frac{2i\sqrt{2E_{i}}}{F}}{\tau} \cdot \frac{t_{a}}{t_{a} - \frac{2i\sqrt{2E_{i}}}{F}} \right).$$
(5.2.55)

Како у области $\eta > \eta_a$ мора да важи релација $\tau \approx i \sqrt{2E_i} / F \gg t_a$, то значи да се t_a у имениоцу горњег израза може занемарити, што даје

$$\delta S_{a}^{Kul} = i \frac{2n_{2} + 1}{2} \ln \left(\frac{\tau - \frac{2i\sqrt{2E_{i}}}{F}}{\tau} \cdot \frac{t_{a}}{-\frac{2i\sqrt{2E_{i}}}{F}} \right).$$
(5.2.56)

Сада ће се у (5.2.56) најпре заменити израз за повратну тачку нулте апроксимације τ_0 (релација (5.2.24)), након чега горња формула постаје

$$\delta S_{a}^{Kul} = i \frac{2n_{2} + 1}{2} \ln \left(\frac{p - i\sqrt{2E_{i}}}{p + i\sqrt{2E_{i}}} \cdot \frac{t_{a}}{t_{a} - \frac{2i\sqrt{2E_{i}}}{F}} \right).$$
(5.2.57)

Даљим трансформацијама израза (5.2.57) добија се

$$\delta S_{a}^{Kul} = i \frac{2n_{2} + 1}{2} \ln \left(\frac{p - i\sqrt{2E_{i}}}{p + i\sqrt{2E_{i}}} \right) + i \frac{2n_{2} + 1}{2} \ln \left(i \frac{Ft_{a}}{2\sqrt{2E_{i}}} \right),$$

а како је из комплексне алгебре познато да је ln $i = i\pi/2$, даље следи

$$\delta S_{a}^{\text{Kul}} = i \frac{2n_2 + 1}{2} \ln \left(\frac{p - i\sqrt{2E_i}}{p + i\sqrt{2E_i}} \right) - \frac{(2n_2 + 1)\pi}{4} + i \frac{2n_2 + 1}{2} \ln \left(\frac{Ft_a}{2\sqrt{2E_i}} \right).$$
(5.2.58)

За прорачун брзине прелаза у Ландау-Дихнеовој адијабатској апроксимацији је по дефиницији потребан само имагинарни део израза (5.2.58), што се односи на два члана

$$\operatorname{Im} \delta S_{a}^{\operatorname{Kul}} = \frac{2n_{2}+1}{2} \ln \left(\frac{p-i\sqrt{2E_{i}}}{p+i\sqrt{2E_{i}}} \right) + \frac{2n_{2}+1}{2} \ln \left(\frac{Ft_{a}}{2\sqrt{2E_{i}}} \right).$$
(5.2.59)

Од могућих вредности параболичног квантног броја $n_2 = n^* - n_1 - |m_1| + 1$ од интереса је само $n_{2\text{max}}$, пошто је допринос осталих вредности много мањи. Зато се може сматрати да су први параболични квантни број n_1 и магнетни квантни број m_l једнаки нули, на основу чега се може написати да је $n_{2\text{max}} = n^* - 1$, те се коначно добија израз

$$\operatorname{Im} \delta S_{a}^{\operatorname{Kul}} = \frac{2n^{*}-1}{2} \ln \left(\frac{p-i\sqrt{2E_{i}}}{p+i\sqrt{2E_{i}}} \right) + \frac{2n^{*}-1}{2} \ln \left(\frac{Ft_{a}}{2\sqrt{2E_{i}}} \right).$$
(5.2.60)

Сабирањем израза за Im δS_0^{Kul} (5.2.53) и за Im δS_a^{Kul} (5.2.60) добија се имагинарни део укупне измене дејства током јонизације услед урачунате Кулонове интеракције:

$$-2\operatorname{Im}\delta S^{\operatorname{Kul}} = (2n^{*}-1)\ln\left(\frac{2Ze}{n^{*2}}\sqrt{2E_{i}}t_{a}\right) - (2n^{*}-1)\ln\left(\frac{p-i\sqrt{2E_{i}}}{p+i\sqrt{2E_{i}}}\right) - (2n^{*}-1)\ln\left(\frac{Ft_{a}}{2\sqrt{2E_{i}}}\right).$$

Даљим трансформацијама горњег израза добија се

$$-2\operatorname{Im}\delta S^{\operatorname{Kul}} = \ln\left(\frac{p - i\sqrt{2E_{i}}}{p + i\sqrt{2E_{i}}}\right)^{-(2n^{*}-1)} + (2n^{*}-1)\ln\left(\frac{2Ze}{n^{*2}}\sqrt{2E_{i}}t_{a}\cdot\frac{2\sqrt{2E_{i}}}{Ft_{a}}\right). \quad (5.2.61)$$

Раније поменута произвољност тачке t_a овде постаје јасна – она не утиче на горњи израз јер се у датим математичким трансформацијама потире. Такође, модификацијом првог члана из (5.2.61), на основу особине модула комплексног броја, добија се

$$\left(\frac{p - i\sqrt{2E_{i}}}{p + i\sqrt{2E_{i}}}\right)^{-(2n^{*}-1)} = \left(\left|\frac{p - i\sqrt{2E_{i}}}{p + i\sqrt{2E_{i}}}\right|^{2}\right)^{\frac{1-2n^{*}}{2}} = 1$$
(5.2.62)

што значи да овај члан уопште не утиче на члан Im δS^{Kul} , а самим тим и на брзину прелаза. Дакле, оправданом елиминацијом сувишних чланова (t_a и (5.2.62)), за трећи члан имагинарног дела дејства Im δS^{Kul} коначно се добија

$$-2 \operatorname{Im} \delta S^{\operatorname{Kul}} = (2n^* - 1) \ln \left(\frac{4Z \,\mathrm{e}}{F \,n^{*2}} \, 2E_{\mathrm{i}} \right).$$
 (5.2.63)

На основу израза (5.2.43) и (5.2.63), као и узимањем у обзир да је $\sqrt{2E_i} = Z / n^*$, следи да брзина јонизације (у случају занемарене Кулонове интеракције при израчунавању повратне тачке – за случај τ_0) има облик:

$$w_{\rm ADK} = \left(\frac{4Z^3 e}{Fn^{*4}}\right)^{2n^{*-1}} \exp\left(-\frac{2Z^3}{3Fn^{*3}}\right).$$
 (5.2.64)

* * *

Како би се урачунао утицај коригованог израза за повратну тачку τ (5.2.38) на брзину прелаза (5.1.9) у општем случају, анализираће се само део дејства δS_a^{Kul} , дакле само трећи члан из релације (5.2.40), пошто је ово једини израз у прорачунима у којима τ експлицитно фигурише. Све до замене израза за повратну тачку у израз за δS_a^{Kul} , поступак је потпуно аналоган претходном. Зато се може искористити раније добијени израз (5.2.56)

$$\delta S_{a}^{Kul} = i \frac{2n_{2}+1}{2} \ln \left(\frac{\tau - \frac{2i\sqrt{2E_{i}}}{F}}{\tau} \cdot \frac{t_{a}}{-\frac{2i\sqrt{2E_{i}}}{F}} \right)$$

Користећи релацију (5.2.38) за кориговану повратну тачку τ (у којој је садржан утицај Кулонове интеракције), те заменом у горњи израз добија се:

$$\delta S_{a}^{Kul} = i \frac{2n_{2} + 1}{2} \ln \left(\frac{p - i\sqrt{2E_{i}} - \frac{iZ}{\sqrt{2E_{i}}(p^{2} + 2E_{i})}}{p + i\sqrt{2E_{i}} - \frac{iZ}{\sqrt{2E_{i}}(p^{2} + 2E_{i})}} \cdot \frac{t_{a}}{-\frac{2i\sqrt{2E_{i}}}{F}} \right), \quad (5.2.65)$$

или, у облику

$$\delta S_{a}^{Kul} = i \frac{2n_{2} + 1}{2} \ln \left(\frac{p - i\sqrt{2E_{i}}}{p + i\sqrt{2E_{i}}} \cdot \frac{1 - \frac{iZF}{\sqrt{2E_{i}}(p^{2} + 2E_{i})(p^{2} - i\sqrt{2E_{i}})}}{1 - \frac{iZF}{\sqrt{2E_{i}}(p^{2} + 2E_{i})(p^{2} - i\sqrt{2E_{i}})}} \cdot \frac{t_{a}}{-\frac{2i\sqrt{2E_{i}}}{F}} \right).$$
(5.2.66)

На основу особине за логаритамску функцију, као и трансформацијом последњег члана који садржи *t*_a, добија се

$$\begin{split} \delta S_{\mathbf{a}}^{\mathrm{Kul}} &= i \, \frac{2n_2 + 1}{2} \ln \left(\frac{p - i \sqrt{2E_{\mathbf{i}}}}{p + i \sqrt{2E_{\mathbf{i}}}} \right) + i \, \frac{2n_2 + 1}{2} \ln i + i \, \frac{2n_2 + 1}{2} \ln \left(\frac{F \, t_{\mathbf{a}}}{2 \sqrt{2E_{\mathbf{i}}}} \right) + \\ &+ i \, \frac{2n_2 + 1}{2} \ln \left[\frac{1 - \frac{i \, Z F}{(p^2 + 2E_{\mathbf{i}}) \left(p - i \sqrt{2E_{\mathbf{i}}} \right) \sqrt{2E_{\mathbf{i}}}}{1 - \frac{i \, Z F}{(p^2 + 2E_{\mathbf{i}}) \left(p + i \sqrt{2E_{\mathbf{i}}} \right) \sqrt{2E_{\mathbf{i}}}}} \right] \end{split}$$

На основу израза (5.2.62) долази се до још једноставнијег облика за $\delta S_{a}^{\text{Kul}}$ као:

$$\delta S_{a}^{Kul} = i \frac{2n_{2}+1}{2} \ln i + i \frac{2n_{2}+1}{2} \ln \left(\frac{Ft_{a}}{2\sqrt{2E_{i}}}\right) + i \frac{2n_{2}+1}{2} \ln \left[\frac{1 - \frac{i ZF}{(p^{2}+2E_{i})\left(p-i\sqrt{2E_{i}}\right)\sqrt{2E_{i}}}}{1 - \frac{i ZF}{(p^{2}+2E_{i})\left(p+i\sqrt{2E_{i}}\right)\sqrt{2E_{i}}}}\right].$$
(5.2.67)

Ако се још узме у обзир да је $1/(1-x) \approx 1+x$ (Кулонова интеракција се може сматрати малом), па се поново апроксимира параболични квантни број $2n_{2\max} = 2n^* - 2$, добија се израз

$$\begin{split} \delta S_{a}^{Kul} &= i \, \frac{2n^{*}-1}{2} \ln i + i \, \frac{2n^{*}-1}{2} \ln \left(\frac{F t_{a}}{2\sqrt{2E_{i}}} \right) + \\ &+ i \frac{2n^{*}-1}{2} \ln \left\{ \left[1 - \frac{i \, Z \, F}{\sqrt{2E_{i}} \left(p^{2} + 2E_{i}\right) \left(p - i\sqrt{2E_{i}}\right)} \right] \cdot \left[1 + \frac{i \, Z \, F}{\sqrt{2E_{i}} \left(p^{2} + 2E_{i}\right) \left(p + i\sqrt{2E_{i}}\right)} \right] \right\} \end{split}$$

Пошто је $\ln i = i\pi/2$, сређивањем горњег израза и поновним избором само имагинарних чланова следи

$$\operatorname{Im} \delta S_{a}^{\mathrm{Kul}} = \frac{2n^{*}-1}{2} \ln \left\{ \left[1 + \frac{2ZF}{\left(p^{2}+2E_{i}\right)^{2}} + \frac{Z^{2}F^{2}}{2E_{i}\left(p^{2}+2E_{i}\right)^{3}} \right] \left(\frac{Ft_{a}}{2\sqrt{2E_{i}}} \right) \right\}$$
(5.2.68)

На крају је потребно сабрати изразе за имагинарни део дејства (5.2.53) и (5.2.68), што у овом случају даје

$$\operatorname{Im} \delta S^{\operatorname{Kul}} = \operatorname{Im} \delta S_{0}^{\operatorname{Kul}} + \operatorname{Im} \delta S_{a}^{\operatorname{Kul}} = = -\frac{2n^{*} - 1}{2} \ln \left(\frac{2Z e}{n^{*2}} \sqrt{2E_{i}} t_{a} \right) + + \frac{2n^{*} - 1}{2} \ln \left\{ \left[1 + \frac{2Z F}{(p^{2} + 2E_{i})^{2}} + \frac{Z^{2} F^{2}}{2E_{i} (p^{2} + 2E_{i})^{3}} \right] \left(\frac{F t_{a}}{2\sqrt{2E_{i}}} \right) \right\}$$

односно даљим трансформацијама горњег израза добија се

$$\operatorname{Im} \delta S^{\operatorname{Kul}} = \frac{2n^* - 1}{2} \ln \left\{ \left[1 + \frac{2ZF}{(p^2 + 2E_i)^2} + \frac{Z^2F^2}{2E_i(p^2 + 2E_i)^3} \right] \cdot \left(\frac{Fn^{*2}}{4Ze \, 2E_i} \right) \right\}.$$
(5.2.69)

Добијени израз Im δS^{Kul} (5.2.69) представља допринос урачунате Кулонове интеракције у повратну тачку, што ће утицати и на формулу за брзину јонизације w_{ADK} . Како би се то показало, још једном се комбинују изрази (5.2.44) и (5.2.69) у складу са дефинисаном адијабатском апроксимацијом (5.1.9), одакле следи

,

$$w_{\rm cADK} = \exp\left[-2\,{\rm Im}\,S^{\rm kd}(\tau)\right] \left[-2\,{\rm Im}\,S^{\rm Kul}\right]$$

$$w_{\text{cADK}} = \left(\frac{4Ze\,2E_{\text{i}}}{Fn^{*2}} \frac{1}{\left[1 + \frac{2ZF}{\left(p^{2} + 2E_{\text{i}}\right)^{2}} + \frac{Z^{2}F^{2}}{2E_{\text{i}}\left(p^{2} + 2E_{\text{i}}\right)^{3}}\right]}\right)^{2n^{*-1}} \exp\left(-\frac{2Z^{3}}{3Fn^{*3}}\right) (5.2.70)$$

Релација (5.2.70) је управо *коригован* израз за АДК брзину јонизације w_{cADK} , у коме је по први пут урачунат утицај Кулонове интеракције на повратну тачку (5.2.38), због тога што је допринос поменуте корекције био мали за ласерска поља интензитета до 10^{12} W/cm² (раније коришћених у експериментима). Како би се могли упоредити изрази (5.2.64) и (5.2.70), потребно је применити релацију $\sqrt{2E_i} = Z/n^*$ на (5.2.64), одакле постаје очигледно да је:

$$w_{\rm ADK} = \left(\frac{4Ze\,2E_{\rm i}}{Fn^{*2}}\right)^{2n^{*-1}} \exp\left(-\frac{2Z^{3}}{3F\,n^{*3}}\right),\tag{5.2.71}$$

те се из поређења формула за w_{ADK} (5.2.71) и w_{cADK} (5.2.70) лако уочава нови чинилац у средњој загради, тј. члан који представља жељену поправку која потиче од урачунате Кулонове интеракције у повратну тачку τ .

Да резимирамо: у претходним прорачунима Кулонова интеракција је најпре укључена у повратну тачку τ , израз (5.2.38), а затим у имагинарни део дејства δS_a^{Kul} , израз (5.2.56) пошто једино у њему повратна тачка τ експлицитно фигурише. На тај начин је изведена формула за кориговану брзину јонизације у АДК теорији w_{cADK} , где је у предекспоненту израза (5.2.70) садржан утицај Кулонове интеракције на повратну тачку. Поменута корекција предекспонента је од значаја на вишим интензитетима ласерског поља, а с обзиром да ће се у каснијем излагању (поглавље 7) и анализирати брзина тунелне јонизације за различите атоме (у одређеном распону интензитета), упоредиће се резултати које дају формуле за w_{ADK} и w_{cADK} и биће продискутован утицај новог члана предекспонента

$$\frac{1}{\frac{2ZF}{(p^2+2E_i)^2} + \frac{Z^2F^2}{2E_i(p^2+2E_i)^3}}$$

из релације (5.2.70) на брзину прелаза у АДК теорији.

6. Модификација члана за јонизациони потенцијал

Питање које се поставља пред аутора ове дисертације је следеће: може ли укључивање формуле за промену јонизационог потенцијала E_i , односно модификација коришћених релација E_i за вредност ΔE_i да пружи нову слику о тунелној јонизацији (у смислу бољег слагања теоријских и експерименталних резултата) и да се значајније одрази на брзину прелаза у АДК теорији?

Ова теорија је већ позната као једна од водећих теорија у домену јонизације атома калијума, ксенона и других, уз помоћ ниско-фреквентних ласера [16, 34, 35, 102, 105]. Сама теорија је развијана и допуњавана у складу са новим условима експеримената из ове области, како би што боље објаснила процесе тунелне јонизације атома, ишла у корак са све јачим интензитетима ласера који се користе у савременим експериментима, али ипак остала у домену нерелативистичких интензитета ($<10^{18}$ W/cm²).

У протеклим годинама [91, 106] и наш тим учествовао је у прилагођавању примене АДК теорије на јака ласерска поља, анализирајући последице промене атомског стања Z, које се мења током јонизације атома, на брзину јонизације избаченог електрона [107]. Такође, анализиран је и утицај кориговане повратне тачке τ (услед урачунате Кулонове интеракције) на брзину јонизације w_{ADK} у зависности од промене интензитета примењеног ласерског поља [106] и у складу са тим дефинисана је другачија варијанта АДК теорије (5.2.70) која је названа коригованом АДК теоријом.

У складу са нашим претходним истраживањима [107] како би још детаљније био разјашњен утицај промене атомског стања Z, као и утицај варирања интензитета ласерског поља на брзину јонизације атома у АДК теорији, уведене су још неке новине. Наиме, изведен је израз за модификовани јонизациони потенцијал атома E_{imod} , како би била побољшана формула за брзину прелаза w_{ADK} , односно њена коригована варијанта w_{cADK} . У делу који следи, поменуто извођење биће појашњено. Након тога наш резултат, тј. наша поправка јонизационог потенцијала биће уопређена са корекцијом коју су претпоставили и анализирали Амосов и Делоне у раду [108].

6.1. Промена енергије јонизације у интензивним ласерским пољима

Идеја је да се модификује члан за јонизациони потенцијал атома E_i , услед присуства интензивне радијације (спољашњег електромагнетног поља, односно ласерског поља) како би се добила релација уз помоћ које би се премостио јаз између теоријских и експерименталних резултата за брзину јонизације атома.

Од проналаска ласера [3], изучавање процеса јонизације атома (мултифотонска јонизација и тунелна јонизација) постало је веома актуелно. Како су у лабораторијама постизана све интензивнија ласерска поља, то је условило даљу разраду и побољшање теоријских модела и приступа у датој области, ради усклађивања са експерименталним резултатима. Ипак, већина тих прорачуна није у себи садржала и промене енергије везаних електрона у атому ΔE_b и електрона у континууму ΔE_c услед утицаја ласерског поља. На пример, Келдиш [12] је у својим прорачунима узео у обзир промену ΔE_c али не и промену ΔE_b , иако се касније показало да је промена енергије везаних електрона у атому услед утицаја ласерског поља далеко важнија [56]. Како би се избегло коришћење стандардне пертурбационе теорије, у појединим радовима се користила импулсно-транслациона апроксимација коју је развио Рајс [49, 109, 110].

Међутим, касније је постало евидентно да то ипак није погодан метод за генерално решавање проблема утицаја ласерског поља на енергију везаног електрона [111], те је коришћена Крамерс-Хенебергерова унитарна трансформација таласне функције [55, 56]. У том случају проблем се своди на кретање електрона у временски зависном потенцијалу $V(\vec{r} - \vec{R})$, где је $\vec{R}(t)$ класичан померај слободног електрона из центра осциловања у пољу јачине зрачења $\vec{F}(t)$ [56]. Овде треба напоменути да је $\vec{R}(t)$ аналогон $\vec{\alpha}(t)$ из релације (2.2.15), али је на овом месту другачије означен пре свега, како би се разликовао од константе фине структуре – α , као и да би био у складу са релацијама из (за нас битног рада) О` Конела [112].

Такође, метод коришћен у калкулацијама сличан је оном који је користио Велтон [113], али се ипак разликује у односу на два аспекта:

а) разматра се само једна фреквенција, што искључује проблем дивергенције ласерског снопа $\theta_{\rm d}$;

б) усмереност $\vec{R}(t)$ фиксирана је у простору, насупрот произвољним флуктуацијама које стварају осцилације нулте тачке (осцилације основног стања; феномен у вези са Хајзенберговом релацијом неодређености), па се тако могу израчунати доприноси за различите нивое l, а не само за l = 0.

Најпре је у раду [57] нумерички израчуната промена јонизационог потенцијала Δ*E*_i за основна стања атома водоника и хелијума, дата релацијом:

$$\Delta E_{\rm i} = \Delta E_{\rm c} - \Delta E_{\rm b} \,. \tag{6.1.1}$$

Сам израз изведен је у оквиру приступа који се базира на примени временски зависне унитарне трансформације и варијационог рачуна на атоме у ласерским пољима [56]. На тај начин је, коришћењем Беселове функције израчунат ефективни потенцијал који зависи од интензитета поља:

$$V(\vec{r}) = -\frac{e_{el}^{2}}{2\pi^{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{q^{2}} J_{0}(\vec{R}_{0}\cdot\vec{q})d^{3}q$$
(6.1.2)

при чему је \vec{R}_0 амплитуда класичног помераја слободног електрона из центра осциловања под утицајем упадног монохроматског раванског таласа, угаоне фреквенције ω и јачине $\vec{F}(t)$, \vec{q} је произвољна генералисана координата.

Јачина електричног (ласерског) поља садржана је у аргументу Беселове функције J_0 преко релације са вектроским потенцијалом:

$$\vec{R}_0 = \frac{e_e}{m_e \omega c} \vec{A}_0, \qquad (6.1.3)$$

што значи да амплитуда помераја \vec{R}_0 зависи и од интензитета и од фреквенције упадног поља. Коришћењем варијационог метода и одговарајуће секуларне једначине, израчуната су (апроксимативно) својствена стања и својствене вредности Хамилтонијана, који важи за електрон у потенцијалу дефинисаним релацијом (6.1.2), те су добијене вредности за параметар R_0 за два интензитета ласеског зрачења [57] дате у табели 6.1.

Циљ ових резултата био је да се покаже да се јонизациони потенцијали израчунати овим приступом разликују од енергије основног стања. Из релације (6.1.3) се види да са порастом интензитета ласера (ка инфрацрвеној области) и \vec{R}_0 расте; тада аргумент Беселове функције брже осцилује што може довести до мале разлике између матричних елемената основног стања и континуума (у случају равног таласа). Зато је претпостављено да ће у инфрацрвеној области главни ефекат бити управо *померај* јонизационог потенцијала атома *E*_i.

$I(W/cm^2)$	$\lambda(\mu m)$	$R_0(a.j.)$
$2.4 \times 10^{12} \mathrm{W/cm^2}$	0.5293	1.1153
$1.4 \times 10^{12} \mathrm{W/cm^2}$	1.0586	3.4126

Табела 6.1. Вредности параметра R_0 , у зависности од дате таласне дужине и интензитета, за постојеће експерименталне податке из [114-116].

На основу добијених резултата из [57] у раду [112] изведен је аналитички израз за промену јонизационог потенцијала ΔE_i за комплетан спектар водонику сличних атома. У [112] разматран је случај водонику сличних атома у интензивном електромагнетном пољу, у пољу монохроматског раванског таласа угаоне фреквенције ω , користећи диполну апроксимацију и атомски систем јединица (што је уобичајено код прорачуна интеракције атом-ласер). Коришћене су следеће релације:

$$\vec{F}(t) = \vec{F}_0 \cos(\omega t) \tag{6.1.4}$$

$$F_0 = \alpha \,\omega A_0 \tag{6.1.5}$$

при чему су $\vec{F}(t)$, $\vec{A}(t)$ и α електрично поље, векторски потенцијал и константа фине структуре, респективно; F_0 и A_0 су одговарајуће амплитуде. Из ових релација даље следи да је

$$R_{0} = \frac{F_{0}}{\omega^{2}} = \alpha \frac{A_{0}}{\omega}; \ R_{0}^{2} = \frac{2I}{\omega^{4}}$$
(6.1.6)

Прорачунима као у [113] израчунат је ефективни статички потенцијал облика $V(\vec{r}) + \Delta V(\vec{r})$, где је:

$$\Delta V(\vec{r}) = \frac{1}{4} (\vec{R}_0 \cdot \nabla)^2 V(\vec{r}) \,. \tag{6.1.7}$$

Даље, за $V(\vec{r}) = -\frac{Z}{r}$, следи

$$H' \equiv \Delta V(\vec{r}) = \frac{1}{4} Z \left[\frac{4}{3} \pi R_0^2 \delta(\vec{r}) + \frac{R_0^2}{r^3} (1 - 3\cos^2 \theta) \right]$$
(6.1.8)

при чему је θ угао између \vec{R}_0 и \vec{r} . Важи да је укупни Хамилтонијан инваријантан у односу на ротације око *z* – осе и у односу на парност, па су одговарајуће својствене вредности *n* и *m* константе кретања; док *l* није добар квантни број, јер *H'* повезује стања за која важи $\Delta l \equiv l - l' = 0, \pm 2$.

Из претпостављених услова следи ситуација слична као код квадратног Земановог ефекта [118]: за n = 1 и n = 2, пертурбовани енергијски нивои очекиване су вредности H' за одговарајућа стања. Међутим, у општем случају (n > 2), а за дате вредности n и m, неопходно је дијагонализовати матрицу за H'. Примењени интензитети ласерског поља довољно су јаки, тако да су ефекти који потичу од Хамилтонијана H'доминантни у односу на спин-орбитне и релативистичке ефекте.

Ако се непертурбована стања означе са $|nlm\rangle$ следи:

$$\left\langle n l m \left| \cos^2 \theta \right| n l m \right\rangle = \frac{(l+1+m)(l+1-m)}{(2l+1)(2l+3)} + \frac{(l+m)(l-m)}{(2l+1)(2l-1)}$$
(6.1.9)

као и други матрични елемент

$$\langle n l m | r^{-3} | n l m \rangle = \frac{2(Z/n)^3}{l(l+1)(2l+1)}$$
 (6.1.10)

Комбинацијом релација (6.1.8) и (6.1.10) добијају се матрични елементи за n = 1 или n = 2

$$\langle n00|H'|n00\rangle = \left(\frac{Z^4}{3n^3}\right)R_0^2,$$
 (6.1.11)

или за n = 2, l = 1

$$\langle 21m|H'|21m\rangle = \left(\frac{Z^4}{240}\right)R_0^2(3m^2-2)$$
 (6.1.12)

На пример, за основно стање атома водоника, добија се $E_{\rm b} = -1/2$, а $-\Delta E_{\rm i} = 1/3R_0^2$, што је у складу са резултатима из [57] за мале вредности R_0 .

На основу релације (6.1.6) може се закључити да је промена $-\Delta E_i$ пропорционална са четвртим степеном таласне дужине λ^4 . Такође, из (6.1.6) се добија за $\hbar \omega = 2.7 \text{ eV}, R_0^2 \le 1$ када је вредност ласерског интензитета $3.6 \times 10^{12} \text{ W/cm}^2$.

Утицај ласерског поља на слободни електрон (јонизовани електрон) може да се опише нерелативистичком Волковљевом таласном функцијом [26, 118] облика [119]:

$$\Psi = \exp\left[i\vec{P}\cdot(\vec{r}-\vec{R})\right] \exp\left[-i\left(\frac{1}{2}P^2 + \Delta E_c\right)t - i\left(\frac{\Delta E_c}{2\omega}\right)\sin(2\omega t)\right]$$
(6.1.13)

где је са \vec{P} означен импулс јонизованог електрона, а члан ΔE_c класична је осцилаторна енергија електрона у електромагнетном пољу дефинисана као:

$$\Delta E_{\rm c} = \frac{1}{4} \alpha^2 A_0^2 \tag{6.1.14a}$$

или на други начин

$$\Delta E_{\rm c} = \frac{1}{4} R_0^2 \omega^2 \,. \tag{6.1.146}$$

Из релација (6.1.11) и (6.1.14б) даље следи

$$\frac{\Delta E_{\rm c}}{|\Delta E_{\rm i}|} = \frac{1/4 R_0^2 \omega^2}{R_0^2 \left(\frac{Z^4}{3n^3}\right)} = \frac{3/4 n^3 \omega^2}{Z^4}$$
$$\frac{\Delta E_{\rm c}}{|\Delta E_{\rm i}|} \approx \frac{\omega^2 n^3}{Z^4}.$$
(6.1.15)

У случају оптичких фреквенција ($\omega \sim 0.1$), за Z = 1 и n >> 1 из горње релације следи да је $\Delta E_c << |\Delta E_i|$, односно урачунавање ΔE_c повећава јонизациону енергију за малу вредност (Келдиш [12]), док је прецизнија интерпретација добијеног резултата (6.1.15) да енергије јонизације могу бити или *увећане* или *умањене* за релативно велику вредност $|\Delta E_i|$.

Подсећања ради, ΔE_{i} је у основи разлика $\Delta E_{c} - \Delta E_{b}$, тј. члан који се изводи је разлика промене енергија везаних електрона и енергије електрона у континууму.

У нашим прорачунима искоришћен је резултат (6.1.15) из [112] у коме су приближно дефинисане промене јонизационих енергија атома, услед присуства спољашњег поља интензитета I, а у зависности од ангуларне фреквенције ω , наелектрисања Z и главног квантног броја n.

Како би потребне формуле биле доведене у везу са АДК теоријом, примењена је позната релација између електричног поља и векторског потенцијала (5.1.16), тј. веза њихових амплитуда:

$$A_0 = -c \int F_0 \sin(\omega t) dt$$
. (6.1.16)

Комбинацијом релација (6.1.14а) и (6.1.15) даље се добија

$$\left|\Delta E_{\rm i}\right| \sim \frac{\Delta E_{\rm c} Z^4}{\omega^2 n^3} \sim \frac{\frac{1}{4} \alpha^2 A_0^2 Z^4}{\omega^2 n^3},$$
 (6.1.17)

а α је константа фине структуре дефинисана као $\alpha = e^2 / \hbar 4\pi \varepsilon_0 c$, односно у атомском систему јединица $\alpha = 1/c$.

Апроксимацијом члана $sin(\omega t) \sim \omega t \sim \omega$ у случају нискофреквентног статичног поља, те елементарним трансформацијама, укључујући све горепоменуте корелације (као што је дефиниција за α у а. ј.), добија се следећа релација

$$\left|\Delta E_{i}\right| \sim \frac{\frac{1}{4}\alpha^{2}c^{2}F_{0}^{2}\omega^{2}}{\omega^{2}}\frac{Z^{4}}{n^{3}}$$

одакле даљим сређивањем горњег израза имамо:

$$|\Delta E_{\rm i}| \approx \frac{\frac{1}{4}F_0^2 Z^4}{n^3}$$
 (6.1.18).

Након свих трансформација и корисних апроксимација добија се израз за промену јонизационог потенцијала у облику:

$$\left|\Delta E_{\rm i}\right| \approx \frac{F_0^2 Z^4}{n^3}.$$
 (6.1.19)

У стандардном изразу за јонизациони потенцијал *E*_i који се користи у АДК теорији важи релација

$$E_{\rm i} = Z^2 / 2n^{*2}, \tag{6.1.20}$$

дакле, зависност потенцијала E_i од Z и од ефективног квантног броја n^* , а види се да у добијеној релацији (6.1.19) фигурише само n. Како би ова два израза могли да се доведу у везу, потребна је релација која повезује квантне бројеве n и n^* , уз напомену да је брзина прелаза у АДК теорији изведена под претпоставком $n^* >> 1$, што значи да важи за теже атоме и високо побуђена стања [105].

У случају разматрања јонизације комплексних атома (што и проучавамо), потребно је урачунати тзв. ефекат штита (*shielding*), тј. утицај оних електрона који се налазе на енергијским нивоима између језгра и валентних електрона, а који управо штите валентне електроне од привлачне силе позитивно наелектрисаног језгра. Из тог разлога, вредности за E_i дефинишу се као у (6.1.20), док је n^* у ствари главни квантни број n коригован за тзв. квантни дефект δ_i [120, 121, 122]:

$$n^* = n - \delta_l = \frac{Z}{(2E_i)^{1/2}}.$$
(6.1.21)

Квантни дефект разлика је између главног квантног броја атомског стања одређене енергије и ефективног квантног броја; добија се фитовањем енергије потребне за јонизацију атома са датог нивоа са Ридберговом формулом и одређује се емпиријски спектроскопским мерењима. У случају нижих вредности орбиталног квантног броја l, поготово за l = 0, односно за s -стање, квантни дефект је највећи. У случају d -стања, где су веће вредности за l, квантни дефект знатно је мањи, јер је ефекат штита одржан и нема значајног утицаја на потенцијал језгра.

За атом водоника (n=1) важи да је квантни дефект $\delta_l = 0$, па се може написати на основу (6.1.19-21) да модификовани јонизациони потенцијал у случају H атома има облик:

$$E_{\text{imod}}^{\text{H}} \approx \frac{Z^2 (1 + 2F_0^2 Z^2)}{2n^{*3}}.$$
 (6.1.22)

Такође, валентни електрони алкалних атома, који имају високе вредности за l, остају (у општем случају) ван домета језгра, што значи да се крећу у пољу Z – протона и (Z – 1) електрона, те се *понашају* као водоник и у њиховом случају важи $n \rightarrow n^*$, што је и потврђено у раду [123].

Израз за модификовани јонизациони потенцијал E_{imod} , који је у ствари збир стандардног израза за јонизациони потенцијал E_i у АДК теорији (6.1.20) и добијеног израза (6.1.19) има облик:

$$E_{\rm imod} \approx \frac{Z^2 (n^* + 2F_0^2 Z^2)}{2n^{*^3}}.$$
 (6.1.23)

Дакле, у овом делу поглавља изведен је аналитички израз за ΔE_i за спектар водонику сличних атома користећи резултате из [112] као и релације из АДК теорије, што представља оригинални научни допринос кандидата [124].

Сада се може искористити добијени израз (6.1.23) уместо раније форме израза E_i (6.1.20) у формулама за брзину јонизације w_{ADK} (5.2.71) и w_{CADK} (5.2.70), како би се испитало које нове закључке и резултате доноси овај модификовани члан за енергију јонизације E_{imod} у АДК формулама за брзину јонизације.

6.2. Поређење формула за модификовани јонизациони потенцијал *E*_{imod} и *E*_{iAD} корекције

Пре него што се испита утицај модификованог члана E_{imod} на брзину јонизације атома у АДК теорији, упоредиће се резултат E_{imod} (овде изведен) са резултатом (корекцијом) коју су предложили Амосов и Делоне у раду [108]; њихов резултат ће бити означен као E_{iAD} .

Приликом испитивања процеса јонизације атома у интензивним ласерским пољима, анализирајући теоријска предвиђања и добијене експерименталне резултате, дошло се до закључка да је у циљу што прецизније формуле за критичну јачину поља $F_{\rm cr}$ (еквивалент јачини поља када долази до надбаријерне јонизације $F_{\rm NBJ}$, релација (4.4.6)) дефинисане као [125]:

$$F_{\rm cr} = \frac{E_{\rm i}^2}{4Z},$$
 (6.2.1)

где је Z наелектрисање атомског остатка, потребно узети у обзир и Штарков померај, тј. потребно је размотрити варијацију (промену) везивне енергије електрона под утицајем спољашњег поља услед Штарковог ефекта. У случају када је $\gamma \ll 1$, специфична карактеристика овог процеса јонизације је одсуство кашњења – јонизација се дешава унутар временског интервала који је краћи од половине периода јонизујућег поља [12]. То значи да треба узети у обзир само пертурбацију условљену тренутном вредношћу јачине поља, као што је Штарков померај основног стања атома. Тада је у складу са релацијом неодређености $\Delta E \Delta t \ge \hbar^2/2$, омогућено да је $\omega \ll \omega_{10}$, при чему је ω_{10} фреквенција прелаза са основног на најниже побуђено стање (0 \rightarrow 1); време живота електрона у виртуелном стању мање је (или много мање) од периода јонизујућег поља.

Када се атом јонизује тунеловањем, Штарков померај високо побуђених стања не утиче битно на јонизацију са основног стања, пошто се зна да процес тунеловања ослобађа електрон у континуум, а не пребацује дати електрон у побуђено стање са

вишом енеријом. Зато, да би се узела у обзир промена везивне енергије електрона у атому услед присуства променљивог поља, уводи се следећа смена:

$$E_{i} \to E_{i} + \delta E_{i}(F) \tag{6.2.2}$$

при чему је $\delta E_i(F)$ промена енергије основног стања у спољашњем пољу. Иначе, неопходност узимања у обзир Штарковог помераја основног стања приликом прорачуна за брзину јонизације w је већ била назначена у радовима [126-129]. Такође, поређењем вредности за водоников атом добијених применом релације (6.2.1) са вредностима које се добијају тродимензионалним квантно-механичким прорачунима [126-128], установљено је да постоји приметно неслагање резултата за вредности F_{cr} . Разлика у добијеним вредностима може да се објасни на следећи начин: најпре није узет у обзир Штарков померај основног стања иако за $F = F_{cr} \cong 0.201$ а.j. овај померај има вредност $\delta E_i(F) \approx 0.07$ а.j. Ипак, оно што највише доприноси неслагању добијених резултата је тродимензионални карактер разматраног проблема и изузетна симетрија водониковог атома у односу на друге атоме.

Како би се добио што тачнији резултати у случају јонизације сложенијих атома, предложено је да се Штарков померај у променљивом пољу (AC) замени са померајем у статичном пољу (DC) [108], јер је фреквенција ласерског зрачења много нижа од фреквенције прелаза између основног и првог побуђеног стања, што даје следећу релацију:

$$E_{\rm i} \rightarrow E_{\rm i} + \delta E_{\rm i}(F) \cong E_{\rm i} + \frac{\alpha_{\rm sp}F^2}{2} = E_{\rm iAD}$$

$$\Delta E_{\rm iAD} = \frac{\alpha_{\rm sp}F^2}{2}$$
(6.2.3)

где је α_{sp} статичка поларизабилност атома. Вредност за α_{sp} веома зависи од врсте атома: за алкалне атоме овај параметар је два реда величине већи него код атома водоника или атома племенитих гасова [130]. Када се јонизују позитивни јони, поларизација основног стања јона је много мања него за одговарајући атом $\alpha_{sp}^{j} << \alpha_{sp}^{at}$, па самим тим и допринос уведене поправке $\alpha_{sp}F^{2}/2$ постаје занемарљив, те се може користити и релација (6.2.1) за прорачун критичне јачине поља F_{cr} .

Пошто су у раду [108] дискутовани прорачуни за линеарно поларизовано ласерско поље, а да би могао да буде упоређен наш резултат E_{imod} са E_{iAD} , наравно да треба

урадити прорачун и анализу за линеарно поларизовано поље. Такође, ради лакшег поређења, релација (6.1.23) за E_{imod} биће написана у нешто другачијем облику, тако да постоји зависност од (F, Z, E_i) јер и E_{iAD} зависи од (F, Z, α_{sp}) , при чему још важи $F_0 = F$:

$$E_{i \text{mod}} = E_i + F^2 Z (2E_i)^{\frac{3}{2}}$$

$$\Delta E_{i \text{mod}} = F^2 Z (2E_i)^{\frac{3}{2}}.$$
(6.2.4)

Најпре се упоређују резултати за племените гасове и то за ксенон Xe, криптон Kr и аргон Ar.



Слика 6.1. Атом ксенона, испрекидана линија је резултат примене E_{iAD} релације, док је пуна линија резултат E_{imod} релације.

Вредности параметара коришћених у релацијама (6.2.3) и (6.2.4) су: $E_i^{Xe} = 12.13 \text{ eV}$, $Z^{Xe} = 54$ и $\alpha_{sp}^{Xe} = 27 \text{ a.j.}$ Опсег ласерског интензитета изабран је тако да је испуњен услов $F < F_{cr}$, што значи да се дати атом јонизује искључиво тунеловањем. Анализом слике 6.1 види се да у односу на вредност енергије јонизације атома ксенона, примена модификованих формула, односно релација (6.2.3) и (6.2.4) даје сасвим добар резултат у оба случаја, уз напомену да је промена коришћењем израза за E_{imod} нешто израженија у односу на E_{iAD} , што се може уочити и на слици 6.1. Промена енергије јонизације коришћењем релације (6.2.3) је $\Delta E_{iAD} = 0.02 \text{ a.j.} \approx 0.53 \text{ eV}$, док је вредност $\Delta E_{imod} = 0.06 \text{ a.j.} \approx 1.7 \text{ eV}$ за гранични интензитет ласера $5 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$. Може се закључити да је промена енергије јонизације под утицајем ласерског поља израженија у случају примене релације за E_{imod} , односно да изведена корекција повећава енергију јонизације атома ксенона за $\approx 1 \text{eV}$ у односу на прорачун за E_{iAD} корекцију.



Слика 6.2. Атом криптона; испрекидана линија је резултат примене E_{iAD} релације, док је пуна линија резултат примене E_{imod} релације.

За атом криптона вредности параметара коришћених у релацијама (6.2.3) и (6.2.4) су: $E_i^{Kr} = 13.99 \text{ eV}$, $Z^{Kr} = 36$ и $\alpha_{sp}^{Kr} = 17 \text{ a.j.}$ Ласерски интензитет за јонизацију је у опсегу $10^{13} \text{ W/cm}^2 - 5 \cdot 10^{13} \text{ W/cm}^2$, чиме је испуњен услов $F < F_{cr}$, што значи да се дати атом јонизује искључиво тунеловањем. Сада, у односу на вредност енергије јонизације атома криптона, примена модификованих формула, тј. и релација (6.2.3) и (6.2.4) даје задовољавајућ резултат у оба случаја. Ако се промена енергије јонизације рачуна коришћењем израза (6.2.4) за E_{imod} , види се да је разлика између E_i и E_{imod} све већа како се интензитет ласерског поља повећава (слика 6.2). Промена енергије јонизације атома криптона коришћењем релације (6.2.3) износи $\Delta E_{iAD} = 0.012 \text{ a.j.} \approx 0.34 \text{ eV}$, док је вредност корекције из релације (6.2.4) $\Delta E_{imod} = 0.05 \text{ a.j.} \approx 1.3 \text{ eV}$ за гранични интензитет ласера $5 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$. Из ових прорачуна следи да је промена енергије јонизације под утицајем ласерског поља опет израженија у случају примене релације за E_{imod} , односно да наша корекција повећава енергију јонизације атома криптона за $\approx 1 \text{ eV}$ у односу на прорачун за E_{iAD} корекцију.



Слика 6.3. Атом аргона; испрекидана линија је резултат примене E_{iAD} релације, док је пуна линија резултат примене E_{imod} релације.

Вредности параметара коришћених у релацијама (6.2.3) и (6.2.4) за атом аргона: $E_{i}^{Ar} = 15.76 \text{ eV}$, $Z^{Ar} = 18$ и $\alpha_{sp}^{Ar} = 11a.j.$ Опсег ласерског интензитета је опет изабран тако да је испуњен услов $F < F_{cr}$, што значи да се дати атом јонизује искључиво тунеловањем. У овом случају, у односу на вредност енергије јонизације атома аргона, примена модификованих формула, односно релација (6.2.3) и (6.2.4) даје такође добар резултат у оба случаја те се обе релације се могу равноправно користити, уз напомену да је промена коришћењем израза за $E_{\rm imod}$ израженија него промена од $E_{\rm iAD}$ (слика 6.3), али ипак мање него у случају атома ксенона и криптона. Промена енергије релације јонизације У случају атома аргона коришћењем (6.2.3)je $\Delta E_{iAD} = 0.01$ а.j. ≈ 0.32 eV, док је вредност за корекцију енергије јонизације из релације (6.2.4) $\Delta E_{\text{imod}} = 0.03 \text{ a.j.} \approx 0.83 \text{ eV}$, наравно за гранични интензитет ласерског поља 5×10^{13} W/cm². Из ових прорачуна следи да је промена енергије јонизације под утицајем ласерског поља опет израженија у случају примене релације за $E_{\rm imod}$, али мање него код прорачуна за ксенон и криптон. У овом случају наша корекција $E_{\rm imod}$ повећава енергију јонизације атома аргона за $\approx 0.5 \text{ eV}$ у односу на прорачун за E_{iAD} корекцију истог атома. Такође се са слике 6.3 може уочити да је на почетку корекција негативна, што се може протумачити као да примена релације (6.2.4) умањује енергију јонизације датог атома те самим тим и олакшава тунеловање електрона атома аргона.

На основу прорачуна за племените гасове: ксенон, криптон и аргон, може се закључити да примена E_{iAD} и E_{imod} релације даје задовољавајућ резултат, за одређени опсег ласерског интензитета (слике 6.1- 6.3), с тим што је разлика између добијених корекција најмања у случају атома аргона (слика 6.3), док је за ксенон и криптон разлика између прорачуна $\approx 1 \text{eV}$ (слике 6.1 и 6.2).

Сада ће бити анализиране промене јонизационих потенцијала у случају алкалних метала: натријума Na, калијума K и цезијума Cs, јер нас ови атоми највише интересују у смислу проучавања тунелне јонизације водонику сличних атома. Опсег ласерског интензитета за ове атоме је 10^{14} W/cm² – 5×10¹⁴ W/cm².



Слика 6.4. Атом натријума: а) јонизациони потенцијал E_{imod} ; б) јонизациони потенцијал E_{iAD} ; в) промена ΔE_{imod} ; г) промена ΔE_{iAD} .

За атом натријума вредности параметара коришћених у релацијама (6.2.3) и (6.2.4) су: $E_i^{Na} = 5.14 \text{ eV}$, $Z^{Na} = 11$ и $\alpha_{sp}^{Na} = 162 \text{ a. j.}$ Опсег изабраног ласерског интензитета испуњава услов $F < F_{cr}$, што значи да се атом натријума јонизује искључиво тунеловањем. У овом случају, у односу на вредност енергије јонизације атома натријума, примена модификованих формула, тј. релација (6.2.3) и (6.2.4) даје сасвим различите резултате, односно вредности за енергију јонизације које се веома разликују, слика 6.4. Ако се израчуна вредност за корекцију енергије јонизације из релације (6.2.4) за интензитет ласерског поља 2×10^{14} W/cm² добија се $\Delta E_{imod} = 0.015$ а.ј. ≈ 0.4 eV (слика 6.4в), док за исти интензитет, промена енергије јонизације за натријум коришћењем релације (6.2.3) износи чак $\Delta E_{iAD} = 0.47$ а.ј. ≈ 12.7 eV што је 2.5 пута веће од енергије јонизације натријума (слика 6.4г). Даље, корекција енергије јонизације из релације (6.2.4) је $\Delta E_{imod} = 0.03$ а.ј. ≈ 0.8 eV, за гранични интензитет ласерског поља 5×10^{14} W/cm², док је за исти интензитет, промена енергије јонизације за натријум коришћењем релације (6.2.3) превелика и износи чак $\Delta E_{iAD} = 1.17$ а.ј. ≈ 32 eV. Управо због тога је немогуће приказати E_{imod} и E_{iAD} на истом графику, јер није исти опсег варирања вредности за енергију јонизације (слика 6.4а,6). Самим тим, у случају већих распона ласерских интензитета, промена енергије јонизације коришћењем релације (6.2.4) за E_{imod} и дергију јонизације слика 6.4а,6). Самим тим, у случају већих распона ласерских интензитета, промена енергије јонизације коришћењем релације (6.2.4) за E_{imod} даје реалније резултате који се могу упоредити са тренутним експерименталним резултатима.



Слика 6.5. Атом калијума. а) јонизациони потенцијал E_{imod} ; б) јонизациони потенцијал E_{iAD} ; в) промена ΔE_{imod} ; г) промена ΔE_{iAD} .
За атом калијума вредности параметара коришћених у релацијама (6.2.3) и (6.2.4) су: $E_i^{\kappa} = 4.34 \text{ eV}$, $Z^{\kappa} = 19$ и $\alpha_{sp}^{\kappa} = 290$ а.ј. Ласерски интензитет испуњава услов $F < F_{cr}$, што указује на то да се атом калијума јонизује такође тунеловањем. За атом калијума примена модификованих формула, тј. релација (6.2.3) и (6.2.4) даје вредности за поправку енергију јонизације атома које се веома разликују (слика 6.5). Прорачуном корекције енергије јонизације уз помоћ релације (6.2.4), при интензитету ласерског поља од $2 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$ добија се $\Delta E_{imod} = 0.02 \text{ a.j.} \approx 0.5 \text{ eV}$ (слика 6.5в), док промена енергије јонизације коришћењем релације (6.2.3) даје $\Delta E_{iAD} = 0.84 \text{ a.j.} \approx 20 \text{ eV}$ за исти интензитет, што знатно премашује вредност енергије јонизације калијума (слика 6.5г). У случају граничног интензитета ласерског поља $5 \times 10^{14} \text{ W/cm}^2$, добијају се следеће вредности корекција: $\Delta E_{imod} = 0.05 \text{ a.j.} \approx 1.2 \text{ eV}$ и $\Delta E_{iAD} = 2.1 \text{ a.j.} \approx 57 \text{ eV}$. Опет је онемогућено приказивање прорачуна за E_{imod} и E_{iAD} на истом графику (слика 6.5а и 6.56), јер као што се види са слике 6.5г корекција ΔE_{iAD} увелико премашује вредност за енергију јонизације атома калијума $E_i^{\kappa} = 0.16 \text{ a.j.}$



Слика 6.6. Атом цезијума. а) јонизациони потенцијал E_{imod} ; б) јонизациони потенцијал E_{iAD} ; в) промена ΔE_{imod} ; г) промена ΔE_{iAD} .

За атом цезијума вредности параметара коришћених у релацијама (6.2.3) и (6.2.4) су: $E_i^{Cs} = 3.89 \text{ eV}$, $Z^{Cs} = 55$ и $\alpha_{sp}^{Cs} = 400$ а. j. Дискутовани ласерски интензитет испуњава услов *F* < *F*_{cr}, што показије да се атом цезијума јонизује тунеловањем (слика 6.6). И у овом случају примена модификованих формула, тј. релација (6.2.3) и (6.2.4) даје вредности за енергију јонизације које се веома разликују (слике 6.6а,б). Дакле, прорачуном корекције енергије јонизације уз помоћ релације (6.2.4), при интензитету ласерског поља од 2×10¹⁴ W/cm² добија се $\Delta E_{\text{imod}} = 0.04$ а. ј. ≈ 1.12 eV (слика 6.6в), док енергије промена јонизације коришћењем релације (6.2.3)износи $\Delta E_{iAD} = 1.16 \text{ a. j.} \approx 27 \text{ eV}$ за исти интензитет (слика 6.6г) и увелико премашује вредност енергије јонизације цезијума $E_{i}^{Cs} = 0.16a. j.$ У случају граничног интензитета ласерског поља 5×10^{14} W/cm², добија се још већа разлика између корекција енергије јонизације, наиме: $\Delta E_{imod} = 0.12$ а. j. ≈ 2.6 eV и $\Delta E_{iAD} = 2.9$ а. j. ≈ 80 eV. Приказивање прорачуна за E_{imod} и E_{iAD} на истом графику је опет неизводљиво, јер као што се може видети поређењем слике 6.6в и слике 6.6г, корекција ΔE_{iAD} увелико премашује вредност за енергију јонизације цезијума.

Може се закључити, на основу прорачуна за племените гасове: ксенон, криптон и аргон да примена E_{iAD} и E_{imod} релација даје задовољавајућ резултат, за одређени опсег ласерског интензитета (слике 6.1-6.3), с тим што је разлика између добијених корекција најмања у случају атома аргона (слика 6.3), док је за ксенон и криптон разлика између прорачуна $\approx 1 \text{eV}$ (слике 6.1 и 6.2).

Међутим, прорачуни и анализе за атоме натријума, калијума и цезијума (водонику сличних атома) показали су да је промена јонизационог потенцијала далеко реалнија када се рачуна са формулом E_{imod} (изведеном у оквиру ове дисертације), те у том смислу она има предност у односу на E_{iAD} формулу (слике 6.46, 6.56 и 6.66), јер може да се примени у тумачењу већег броја експерименталних података (слике 6.4а, 6.5а и 6.6а).

У проучавању процеса тунелне јонизације применом АДК теорије, од посебног су интереса атоми слични водонику, јер се у том случају може применити једноелектронска апроксимација и проучавати динамика процеса тунелне јонизације, тј. прорачунавати брзина јонизације валентног електрона. Анализом релација (6.2.3) и (6.2.4) је установљено да модификација јонизационог потенцијала изведена управо у [124], односно овде релација (6.2.4) може да има широку примену у проучавању тунелне јонизације атома.

7. Анализа формула за брзину јонизације у АДК теорији у зависности од параметара *E*_i и *E*_{imod}

У делу који следи, анализираће се утицај израза за модификовани јонизациони потенцијал E_{imod} (изведеног у поглављу 6, део 6.1.) на брзину јонизације електрона у АДК теорији. У делу 6.2. такође је показано да је за случај водонику сличних атома промена јонизационог потенцијала далеко реалнија са нашом формулом E_{imod} (6.2.4), те у том смислу она има предност у односу на E_{iAD} формулу (6.2.3), јер може да се примени у тумачењу већег броја експерименталних података у процесима јонизације атома који су нама од интереса (што је и очигледно са слика 6.4а, 6.5а и 6.6а).

Процес тунелне јонизације атома у случају линеарног [12] или циркуларно [20] поларизованог ниско-фреквентног ласерског поља успешно је проучаван протеклих година [131, 132]. Показало се да, како јачина спољашњег поља расте, брзина јонизације расте у области $F < F_{at}$, а опада у области $F > F_{at}$; при чему вредност максимума брзине јонизације одговара атомској јачини поља $F ~ F_{at}$. Пошто је јачина ласерског поља пропорционална интензитету ласера $F ~ \sqrt{I}$, онда се под јаким пољем подразумева оно поље чији су интензитети реда 10^{16} W/cm², а ипак не улазе у опсег релативистичких интензитета (< 10^{18} W/cm²), те се зато могу применити АДК формуле за брзину јонизације изведене у поглављу 5.2.

У овом поглављу биће дискутовани следећи случајеви:

– брзина јонизације за линеарно поларизовано поље w_{ADK}^{lin} у зависности од E_i и E_{imod} ; – брзина јонизације за циркуларно поларизовано ласерско поље w_{ADK}^{cir} у зависности од E_i , E_{imod} и почетног импулса избаченог електрона p

– коригована брзина јонизације w_{cADK} у зависности од релација за E_i и E_{imod} .

На крају овог поглавља биће продискутована могућност примене формуле за брзину јонизације у прорачунима садашњих експеримената који се тичу процеса јонизације атома у ласерском пољу.

7.1. Брзина јонизације за линеарно поларизовано ласерско поље *w*^{lin}_{ADK} у зависности од *E*_i и *E*_{imod}

Како би могла да се анализира брзина јонизације атома у линеарно поларизованом ласерском пољу у зависности од параметара E_i и E_{imod} , формула (5.2.71) биће написана у нешто другачијем облику, наравно користећи познату релацију $\sqrt{2E_i} = Z/n^*$, што даје:

$$w_{\rm ADK}^{\rm lin} = \left[\frac{4e}{FZ} (2E_{\rm i})^2\right]^{\frac{2Z}{\sqrt{2E_{\rm i}}}-1} \exp\left[-\frac{2(2E_{\rm i})^{3/2}}{3F}\right]$$
(7.1.1)

одакле је евидентно да брзина јонизације (7.1.1) зависи од стандардног јонизационог потенцијала E_i , интензитета ласерског поља (преко F) и атомског стања Z; означићемо је као $w_{ADK}^{lin}(E_i)$.

Зависност брзине јонизације w_{ADK}^{lin} од модификованог јонизационог потенцијала уводи се заменом члана E_i са E_{imod} у (7.1.1), те следи:

$$w_{\text{ADKm}}^{\text{lin}} = \left[\frac{4e}{FZ} (2E_{\text{imod}})^2\right]^{\frac{2Z}{\sqrt{2E_{\text{imod}}}-1}} \exp\left[-\frac{2(2E_{\text{imod}})^{3/2}}{3F}\right],$$
(7.1.2)

при чему $w_{ADKm}^{lin}(E_{imod})$ сада означава брзину јонизације атома која зависи од модификованог јонизационог потенцијала E_{imod} дефинисаног релацијом (6.2.4), интензитета ласерског поља (*F*) и наелектрисања атома *Z*.

Анализираће се брзине јонизације атома литијума, натријума, калијума и цезијума, у одговарајућем распону ласерског интензитета, у случају линеарно поларизованог ласерског поља, у зависности од E_i и E_{imod} .

Најпре се проверава вредност за параметар γ у зависности од E_{imod} , а у складу са релацијом (4.5.3) да се провери да ли је при опсегу ласерског интензитета који се овде разматра, а то је опсег $10^{13} - 10^{15}$ W/cm², тунелна јонизација заиста доминантан процес. Прорачуни показују да су вредности за Келдишов параметар у распону $0.02 < \gamma_{mod} < 0.15$, слика 7.1, што имплицира да се може анализирати брзина тунелне јонизације датих атома.

На сликама 7.2-7.5 приказан је утицај модификованог јонизационог потенцијала E_{imod} на брзину јонизације у АДК теорији, у поређењу са стандардним изразом E_i и за случај линеарно поларизованог ласерског поља. Вредности одређених параметара за дати атом (Z, E_i) су исти као у поглављу 6, део 6.2; јачина ласерског поља је садржана у интензитету, при чему за линеарно поље важи релација $F = 27.5\sqrt{I}$, а параметар E_{imod} се рачуна коришћењем релације (6.2.4).



Слика 7.1. Келдишов параметар γ за атоме литијума, натријума, калијума и цезијума, у линеарном ласерском пољу.



Слика 7.2. Брзина јонизације за атом литијума; пуна линија је w_{ADK}^{lin} у зависности од E_i , тачкаста линија w_{ADKm}^{lin} у зависности од E_{imod} .

На слици 7.2. приказан је утицај модификованог јонизационог потенцијала $E_{\rm imod}$ на брзину јонизације $w_{\rm ADK}^{\rm lin}$ атома литијума, наравно у линеарном пољу. Брзина јонизације

 w_{ADK}^{lin} на *y*-оси је дата у атомским јединицама (a.j.), док је интензитет ласерског поља приказан на *x*-оси у јединицама W/cm².



Слика 7.3. Брзина јонизације за атом натријума; пуна линија је w_{ADK}^{lin} у зависности од E_i , тачкаста линија w_{ADKm}^{lin} у зависности од E_{imod} .

Утицај модификованог јонизационог потенцијала на брзину јонизације атома натријума је приказан на слици 7.3; w_{ADK}^{lin} је приказана на *y*-оси у (a.j.), док је интензитет ласерског поља (*x*-оса) у јединицама W/cm².

На основу анализе слика 7.2 и 7.3 може се видети да промена јонизационог потенцијала под утицајем ласерског поља ΔE_{imod} утиче на брзину јонизације у АДК теорији на такав начин да је *умањује* у односу на брзину јонизације која зависи од обичног потенцијала E_i , односно $w_{ADKm}^{lin}(E_{imod}) < w_{ADK}^{lin}(E_i)$. То је последица урачунавања ефекта деловања ласерског поља на енергију јонизације датог атома и промене ΔE_{imod} која *повећава* енергију јонизације датог атома, продубљује потенцијалну јаму и тако отежава јонизацију атома, што је у складу са резултатима из 6.2 (слике 6.4в, 6.5в и 6.6в) и рада Делоне и Крајнов [133]. Што је већа енергија јонизације, брзина јонизације за валентни електрон је мања и услед тога је линија која представља $w_{ADKm}^{lin}(E_{imod})$ нижа у односу на $w_{ADK}^{lin}(E_i)$ (слике 7.2 и 7.3); при том $w_{ADKm}^{lin}(E_{imod})$ пре достиже максимум и у том случају пре долази до сатурације.



Слика 7.4. Брзина јонизације за атом калијума; пуна линија је w_{ADK}^{lin} у зависности од E_i , тачкаста линија w_{ADKm}^{lin} у зависности од E_{imod} .



Слика 7.5. Брзина јонизације за атом цезијума; пуна линија је w_{ADK}^{lin} у зависности од E_i , тачкаста линија w_{ADKm}^{lin} у зависности од E_{imod} .

У случају јонизације атома калијума и цезијума (слике 7.4 и 7.5) уочава се да промена јонизационог потенцијала ΔE_{imod} (услед утицаја ласерског поља) утиче на брзину јонизације у АДК теорији на такав начин да је такође *умањује* у односу на брзину јонизације која зависи од E_i , односно важи да је $w_{ADKm}^{lin}(E_{imod}) < w_{ADK}^{lin}(E_i)$. Дакле, ако се узме у обзир деловање ласерског поља на енергију јонизације датог атома и урачуна промена ΔE_{imod} , видимо да се повећава енергија јонизације датог атома, па се зато добија и мања вредност за брзину јонизације $w_{ADKm}^{lin}(E_{imod})$, што се може и уочити са слика 7.2-7.5. У вези са брзином тунелне јонизације у линеарном пољу (а у зависности од параметара E_i и E_{imod}) може се закључити следеће:

у случају јонизације разматраних атома (литијума, натријума, калијума и цезијума), анализом слика 7.2-7.5 види се да како интензитет ласерског поља расте, брзина јонизације w_{ADKm}^{lin} (која зависи од E_{imod}) опада у односу на w_{ADK}^{lin} (која зависи "само" од E_i), јер се све јаче осећа утицај корекције енергије јонизације (ΔE_{imod}), односно члана корекције који у датом опсегу интензитета ласерског поља, отежава јонизацију валентног електрона, што је у складу са резултатима из дела 6.2. (слике 6.4в, 6.5в и 6.6в) као и са резултатима рада Делоне и Крајнов [133].

7.2. Брзина јонизације за циркуларно поларизовано ласерско поље w_{ADK}^{cir} у зависности од E_i , E_{imod} и почетног импулса избаченог електрона p

У овом делу биће продискутован утицај релације E_{imod} на формулу за брзину јонизације w_{ADK}^{cir} за случај циркуларно поларизованог ниско-фреквентног ласерског поља без и са урачунатим ненултим почетним импулсом избаченог електрона [134].

Анализираће се брзине јонизације атома литијума, натријума, калијума и цезијума у одговарајућем распону ласерског интензитета; најпре без импулса а потом и са урачунатим импулсом у експоненту формуле за брзину јонизације.

Формуле за брзину јонизације АДК теорије за линеарно и циркуларно поларизовано поље се разликују у фактору $\sqrt{3FZ^3/\pi n^{*3}}$ [61], па на основу тога и израза (5.2.64) добија се:

$$w_{\rm ADK}^{\rm cir} = \sqrt{\frac{3FZ^3}{\pi n^{*3}}} \left[\frac{4Z^3 e}{Fn^{*4}}\right]^{2n^{*-1}} \exp\left[-\frac{2Z^3}{3Fn^{*3}}\right]$$
(7.2.1)

Укључивањем ненултог почетног импулса у формулу за брзину јонизације у случају циркуларно поларизованог поља добијена је следећа формула [134]:

$$w_{\text{ADK}}^{\text{cir}} = \sqrt{\frac{3FZ^3}{\pi n^{*3}}} \left[\frac{4Z^3 e}{Fn^{*4}} \right]^{2n^{*-1}} \exp\left[\frac{2Z^3}{3Fn^{*3}} - \frac{p^2 \gamma^3}{3\omega} \right].$$
(7.2.2)

Импулс који се појављује у горњој релацији (7.2.2) функција је параболичне координате η и јачине ласерског поља; при чему је зависност импулса од ових параметара функција облика [135]:

$$p(\eta) = \frac{1}{2} \left(\sqrt{F\eta - 1} + \frac{1}{\eta \sqrt{F\eta - 1}} \right).$$
(7.2.3)

У овом делу поглавља, циљ је испитати како модификовани јонизациони потенцијал E_{imod} (релација (6.2.4)) и ненулти почетни импулс избаченог електрона (дефинисан преко (7.2.3)) заједно утичу на брзину јонизације у АДК теорији у случају циркуларног ласерског поља.

Најпре је потребно да се трансформише израз за w_{ADK}^{cir} (7.2.2) тако што се ефективни квантни број, односно параметар n^* , замени еквивалентним изразом $Z/\sqrt{2E_i}$ (који следи из релације (6.1.20)), па се добија:

$$w_{\text{ADK}}^{\text{cir}} = \left[\frac{3F}{\pi} (2E_{\text{i}})^{3/2}\right]^{1/2} \left[\frac{4e}{FZ} (2E_{\text{i}})^{2}\right]^{\frac{2Z}{\sqrt{2E_{\text{i}}}}-1} \exp\left[-\frac{2(2E_{\text{i}})^{3/2}}{3F} - \frac{p^{2}\gamma^{3}}{3\omega}\right].$$
(7.2.4)

Као што је већ показано у поглављу 6. атомски јонизациони потенцијал E_i се мења под утицајем спољашњег ласерског поља (које изазива јонизацију атома), те ћемо у складу са тим у даљем раду користити израз за модификовани јонизациони потенцијал E_{imod} - релација (6.2.4) у облику:

$$E_{\rm imod} = E_{\rm i} + F^2 Z (2E_{\rm i})^{3/2}$$

Из горње релације следи да формула за брзину јонизације АДК теорије (коју дискутујемо у овом делу поглавља 7), тачније израз (7.2.4) сада има облик [136]:

$$w_{ADKm}^{cir} = \left[\frac{3F}{\pi} (2E_{imod})^{3/2}\right]^{1/2} \left[\frac{4e}{FZ} (2E_{imod})^2\right]^{\frac{2Z}{\sqrt{2E_{imod}}}-1}, \quad (7.2.5)$$
$$\times \exp\left[-\frac{2(2E_i)^{3/2}}{3F} - \frac{p^2 \gamma_{mod}^3}{3\omega}\right]$$

а $\gamma_{\text{mod}} = \omega \sqrt{2E_{\text{imod}}} / F$ представља Келдишов параметар који је сада такође дефинисан преко модификованог јонизационог потенцијала, док је $w_{\text{ADKm}}^{\text{cir}}$ брзина јонизације за циркуларно поље у зависности од E_{imod} (због тога и ознака "m" у доњем индексу израза (7.2.5)).

Упоредо ће бити анализиране формуле w_{ADK}^{cir} и w_{ADKm}^{cir} без урачунатог импулса, које се једноставно добијају занемаривањем другог члана у експоненту израза (7.2.4) и (7.2.5).

Провером вредности за γ_{mod} у опсегу интензитета $10^{14} - 10^{16}$ W/cm², добија се $0.02 < \gamma_{mod} < 0.07$, што показује да су итекако испуњени услови за тунелну јонизацију атома, а то се може и графички показати (слика 7.6).



Слика 7.6. Келдишов параметар γ за атоме литијума, натријума, калијума и цезијума, у случају циркуларно поларизованог ласерског поља.

Пошто је показано да су испуњени услови за јонизацију атома тунеловањем, на основу вредности за параметар γ_{mod} (слика 7.6), даље може да се анализира и дискутује како модификовани јонизациони потенцијал E_{imod} утиче на брзину јонизације у овом случају. То значи да ће се упоређивати резулати које дају горе наведене формуле: (7.2.4) и (7.2.5), без импулса и са урачунатим импулсом. Нови параметри који се јављају у формулама за циркуларно поље имају следеће вредности: $\omega = 0.004298$ а.ј., $\eta = 190$, а веза између јачине електричног поља и интензитета ласера у случају циркуларног поља је $F = 19\sqrt{I}$, што се у прорачунима такође преводи у атомске јединице, дељењем са атомском јачином поља F_{at} .

Анализа формула (7.2.4) и (7.2.5), тј. анализа брзине јонизације атома у циркуларном пољу је урађена у зависности од следећих параметара ($F, Z, \eta, \omega, E_i, E_{imod}$), што је графички представљено на сликама 7.7-7.10. На левој страни слике је брзина w_{ADK}^{cir} без импулса (а), док је на десној страни слике брзина w_{ADK}^{cir} са урачунатим почетним импулсом избаченог електрона (б) [136]. На y-оси приказана је w_{ADK}^{cir} у (а.j.), док је интензитет ласерског поља (x-оса) у јединицама W/cm², при чему је опсег анализираног ласерског интензитета 10¹⁴ – 10¹⁶ W/cm².

Приметно је да, у односу на анализе за линеарно поље (део 7.1) опсег разматраног интензитета у случају циркуларног пољ је повећан, јер се максимуми јачине поља $F_{\text{max}}^{\text{cir}}$ и $F_{\text{max}}^{\text{lin}}$ постижу при различитим интензитетима ласера. Зато је брзина јонизације атома у циркуларном пољу нижа од брзине јонизације у линеарном пољу, при истим интензитетима ласерског поља. На ово треба обратити посебну пажњу у случају када се

експериментално мери допринос јона, како би се избегле велике разлике између резултата које дају линеарно поље и циркуларно поље [137].



Слика 7.7. Брзина јонизације за атом литијума: пуна линија је w_{ADK}^{cir} у зависности од E_i , испрекидана линија w_{ADKm}^{cir} у зависности од E_{imod} ; а) без урачунатог импулса, б) са урачунатим импулсом.

Анализом слике 7.7 за брзину тунелне јонизације атома литијума у циркуларно поларизованом ласерском пољу, без импулса (слика 7.7а) и са импулсом (7.76) види се да је $w_{ADK}^{cir}(E_i)$ доминантно у односу на $w_{ADKm}^{cir}(E_{imod})$ на почетку процеса јонизације атома, у опсегу $10^{14} - 4 \times 10^{15}$ W/cm²; након тога брзина $w_{ADKm}^{cir}(E_{imod})$ у оба случаја (без импулса (слика 7.7а) и са импулсом (слика 7.7б)) је доминантна у односу на брзину $w_{ADK}^{cir}(E_i)$. У случају када је почетни импулс избаченог електрона различит од нуле, брзина јонизације $w_{ADKm}^{cir}(E_{imod})$ је блиска вредности за $w_{ADK}^{cir}(E_i)$, а већ при интензитету 3×10^{15} W/cm² постаје доминантна у односу на $w_{ADK}^{cir}(E_i)$.



Слика 7.8. Брзина јонизације за атом натријума: пуна линија је w_{ADK}^{cir} у зависности од E_i , испрекидана линија w_{ADKm}^{cir} у зависности од E_{imod} ; **a**) без урачунатог импулса, **б**) са урачунатим импулсом.

У случају атома натријума, анализом слике 7.8 за брзину тунелне јонизације у циркуларно поларизованом ласерском пољу, без импулса (слика 7.8а) и са импулсом (7.86) види се да је $w_{ADK}^{cir}(E_i)$ стално доминантна у односу на $w_{ADKm}^{cir}(E_{imod})$ у случају када је импулс једнак нули, слика 7.8а. Међутим, када се урачуна почетни импулс избаченог електрона у брзину јонизације (изрази (7.2.4) и (7.2.5)), добија се нешто другачији однос између брзина јонизације $w_{ADK}^{cir}(E_i)$ и $w_{ADKm}^{cir}(E_{imod})$ за натријум. Са слике 7.86 види се да је у почетку процеса јонизације доминантна $w_{ADKm}^{cir}(E_{imod})$, јер се утицај ласерског поља делом преноси на енергију јонизације E_i , а делом на ненулти почетни импулс избаченог електрона $p(\eta, F)$. Али, како интензитет ласерског поља расте, брзина јонизације $w_{ADKm}^{cir}(E_{imod})$ опада у односу на $w_{ADK}^{cir}(E_i)$, јер је промена енергије јонизације ΔE_{imod} све већа, што се негативно одражава и на одговарајућу брзину јонизације $w_{ADKm}^{cir}(E_{imod})$ у смислу да је умањује (слика 7.86).

У случају јонизације атома калијума и цезијума (слике 7.9 и 7.10), анализом брзина јонизације $w_{ADK}^{cir}(E_i)$ и $w_{ADKm}^{cir}(E_{imod})$ добијају се слични резултате као за атом натријума. Брзина јонизације која зависи од E_i је већа у односу на брзину јонизације која зависи од E_{imod} (слике 7.9а, 7.10а) у случају када није урачунат почетни импулс избаченог електрона, с тим што је у случају атома цезијума приметно да се вредности за брзине јонизације $w_{ADK}^{cir}(E_i)$ и $w_{ADKm}^{cir}(E_{imod})$ највише разликују (слика 7.10а) у односу на остале атоме. То је последица утицаја члана ΔE_{imod} , пошто је код атома цезијума уједно и највећа промена јонизационог потенцијала (прорачуни из 6.2) у односу на остале разматране атоме. Али, како интензитет ласерског поља расте, модификована енергија јонизације E_{imod} умањује брзину јонизације w_{ADK}^{cir} (а. ј.), те и функција која описује овај процес опада.



Слика 7.9. Брзина јонизације за атом калијума: пуна линија је w_{ADK}^{cir} у зависности од E_i , испрекидана линија w_{ADKm}^{cir} у зависности од E_{imod} ; а) без урачунатог импулса, б) са урачунатим импулсом.

Урачунавањем почетног импулса избаченог електрона у брзину јонизације (изрази (7.2.4) и (7.2.5)), однос између брзина јонизације $w_{ADK}^{cir}(E_i)$ и $w_{ADKm}^{cir}(E_{imod})$ се мења у једном делу опсега. У почетку процеса јонизације атома калијума и цезијума (слике 7.96 и 7.106), доминантна је брзина јонизације која зависи од модификованог јонизационог потенцијала $w_{ADKm}^{cir}(E_{imod})$, јер се додатни утицај ласерског поља делом преноси на енергију јонизације E_i , а делом и на ненулти почетни импулс избаченог електрона $p(F \sim \sqrt{I})$. Али, како интензитет ласерског поља расте, брзина јонизације $w_{ADKm}^{cir}(E_{imod})$ опада у односу на $w_{ADK}^{cir}(E_i)$, јер је промена енергије јонизације ΔE_{imod} са порастом интензитета све већа, што се негативно одражава и на одговарајућу брзину јонизације $w_{ADKm}^{cir}(E_{imod})$ у смислу да је умањује (слика 7.96 и слика 7.106), као и код атома натријума (слика 7.86).



Слика 7.10. Брзина јонизације за атом цезијума: пуна линија је w_{ADK}^{cir} у зависности од E_i , испрекидана линија w_{ADKm}^{cir} у зависности од E_{imod} ; а) без урачунатог импулса, б) са урачунатим импулсом.

Дакле, на основу претходних анализа и дискусије може се закључити следеће: у случају када се урачуна почетни импулс избаченог електрона у формулу за брзину прелаза, утицај ласерског поља на промену енергије јонизације E_i компензује се у смислу да помера електрон дубље у потенцијалну јаму, већ се угради у почетни импулс избаченог електрона [138], па је због тога и брзина јонизације када је E_{imod} урачунат, кратко доминантна у односу на брзину у којој фигурише обичан јонизациони потенцијал.

Међутим, како интензитет ласерског поља расте, брзина јонизације $w_{ADKm}^{cir}(E_{imod})$ опада, јер се све јаче осећа утицај корекције енергије јонизације ΔE_{imod} , тј. члана који у

датом опсегу интензитета ласерског поља отежава јонизацију валентног електрона (слике 7.86, 7.96 и 7.106) у случају атома натријума, калијума и цезијума [136].

За процес тунелне јонизације атома литијума у циркуларном пољу, однос између брзина јонизације $w_{ADK}^{cir}(E_i)$ и $w_{ADKm}^{cir}(E_{imod})$ нешто је другачији; наиме, брзина $w_{ADKm}^{cir}(E_{imod})$ постаје доминантна у односу на брзину $w_{ADK}^{cir}(E_i)$, већ при вредности интензитета 3×10^{15} W/cm² (слика 7.7а, 7.7б) и даље расте до интензитета 2×10^{16} W/cm², а након тога опада (што је утврђено додатним математичким прорачунима). Овакво понашање би се могло објаснити чињеницом да литијум има највећу вредност енергије јонизације у односу на преостала три разматрана атома, те да је разлика између енергија јонизације E_i и E_{imod} најмања, а самим тим је и максимална вредност брзине јонизације атома литијума померена на виши интензитет ласерског поља у односу на остале разматране атоме.

7.3. Анализа формуле w_{cADK} у зависности од релација за E_i и E_{imod} у процесу тунелне јонизације атома

У поглављу 5 (део 5.2) изведена је *коригована* брзина јонизације w_{cADK} (5.2.70), у којој је по први пут урачунат утицај Кулонове интеракције на повратну тачку (5.2.38). Израз за брзину w_{cADK} се разликује од израза w_{ADK} (7.1.1) по члану предекспонента [91, 106]

$$\frac{1}{\frac{2ZF}{(p^2+2E_i)^2} + \frac{Z^2F^2}{2E_i(p^2+2E_i)^3}},$$
(7.3.1)

који је од значаја на вишим интензитетима ласерског поља (што је и продискутовано на почетку дела 5.2).

У овом делу поглавља анализираће се кориговану брзина тунелне јонизације w_{cADK} у зависности од релација за E_i и E_{imod} ; наравно, за атоме литијума, натријума, калијума и цезијума у линеарном пољу (јер коригована повратна тачка τ важи само за случај линеарно поларизованог поља), под претпоставком да је почетни импулс избаченог електрона једнак нули p = 0.

Тада уз замену ефективног квантног броја n^* еквивалентим изразом $Z / \sqrt{2E_i}$, формула (5.2.70) постаје [107]:

$$w_{\text{cADK}} = \left[\frac{4e(2E_{i})^{2}}{FZ\left(1 + \frac{2ZF}{(2E_{i})^{2}} + \frac{Z^{2}F^{2}}{(2E_{i})^{4}}\right)}\right]^{\frac{2Z}{\sqrt{2E_{i}}} - 1} \exp\left[-\frac{2(2E_{i})^{3/2}}{3F}\right]$$
(7.3.2)

што ће у дискусији која следи бити означено са $w_{cADK}(E_i)$, док зависност од E_{imod} , односно од релације (6.2.4) даје релацију:

$$w_{cADKm} = \left[\frac{4e(2E_{imod})^2}{FZ\left(1 + \frac{2ZF}{(2E_{imod})^2} + \frac{Z^2F^2}{(2E_{imod})^4}\right)}\right]^{\frac{2Z}{\sqrt{2E_{imod}} - 1}} exp\left[-\frac{2(2E_{imod})^{3/2}}{3F}\right]$$
(7.3.3)

односно, кориговану брзину јонизације која зависи од модификованог јонизационог потенцијала, а биће означена са $w_{cADKm}(E_{imod})$.

Као и у претходним анализама формула за брзину јонизације (делови дисертације 7.1 и 7.2), на x – оси је приказан интензитет ласерског поља у W/cm², док је на y – оси приказана коригована брзина јонизације у атомским јединицама (а. ј.).



Слика 7.11.Коригована брзина јонизације за атом литијума: пуна линија представља $w_{cADK}(E_i)$, а тачкаста линија $w_{cADKm}(E_{imod})$.

Анализом утицаја модификованог израза за јонизациони потенцијал на кориговану брзину јонизације атома литијума (слика 7.11) види се да су брзине $w_{cADK}(E_i)$ и $w_{cADKm}(E_{imod})$ приближно једнаке у почетку процеса јонизације, а да затим, са порастом ласерског поља $w_{cADKm}(E_{imod})$ постаје веће у односу на $w_{cADK}(E_i)$. То је битно другачији резултат него код формуле за брзину w_{ADK} (анализа у делу 7.1, слика 7.2), што значи да је потребно додатно анализирати утицај E_{imod} на кориговану формулу за брзину јонизације w_{cADK} , односно утицај предекспонента (7.3.1) на w_{cADK}

Именилац предекспонента (7.3.1) који потиче од кориговане повратне тачке τ и фигурише у формули w_{cADK} (7.3.2) даје мању вредност када је урачуната зависност од E_{imod} јер се у том случају дели са већим бројем, него када је зависност од стандардног израза за E_i . Како се процес јонизације помера ка вишим интензитетима ласера предекспонент формуле (7.3.3) је константно већи у односу на предекспонент у формули (7.2.2) па је и $w_{cADKm}(E_{imod}) > w_{cADK}(E_i)$, слика 7.11.



Слика 7.12. Коригована брзина јонизације за атом натријума: пуна линија представља $w_{\text{cADK}}(E_{\text{i}})$, док је тачкаста линија $w_{\text{cADKm}}(E_{\text{imod}})$.

Приликом тунелне јонизације атома натријума, када се графички прикаже коригована брзина јонизације w_{cADK} (слика 7.12), на почетку процеса јонизације се уочава да је $w_{cADK}(E_i) > w_{cADKm}(E_{imod})$, док је већ при интензитету поља 2×10^{14} W/cm² приметно да $w_{cADKm}(E_{imod})$ расте у односу на $w_{cADK}(E_i)$. Са слике 7.12 се такође може уочити да $w_{cADK}(E_i)$ много брже опада у односу на $w_{cADKm}(E_{imod})$ како интензитет поља расте.



Слика 7.13. Коригована брзина јонизације за атом калијума: пуна линија представља $w_{cADK}(E_i)$, а тачкаста линија $w_{cADKm}(E_{imod})$.



Слика 7.14. Коригована брзина јонизације за атом цезијума: пуна линија представља $w_{cADK}(E_i)$, а тачкаста линија $w_{cADKm}(E_{imod})$.

У случају јонизације атома калијума и цезијума, однос између брзина јонизације $w_{cADK}(E_i)$ и $w_{cADKm}(E_{imod})$ је сличан, а приметан је пораст $w_{cADKm}(E_{imod})$ у односу на $w_{cADK}(E_i)$ након одређених вредности интензитета ~ 8×10¹³ W/cm² (слике 7.13 и 7.14). Са слике 7.14 такође се уочава да је код цезијума највећа разлика у максимумима брзина јонизације $w_{cADK}(E_i)$ и $w_{cADKm}(E_{imod})$. То је последица утицаја члана ΔE_{imod} , пошто је код атома цезијума уједно и највећа промена јонизационог потенцијала (прорачуни из 6.2) јер је и $Z^{Cs} = 55$ највеће од свих разматраних атома.

Резултати добијени анализом утицаја $E_{\rm imod}$ на кориговану брзину јонизације $w_{\rm cADK}$ имплицирају да увођење кориговане повратне тачке (τ) у брзину јонизације

значајно мења однос између коригованих формула $w_{cADK}(E_i)$ и $w_{cADKm}(E_{imod})$, за разлику од резултата које дају формуле w_{ADK} у случају повратне тачке нулте апроксимације (τ_0), део поглавља 7.1. Поређењем вредности за брзине јонизације w_{ADK} (слике 7.2-7.5) и w_{cADK} (слике 7.11-7.14) уочава се да w_{cADK} даје мање вредности за брзину јонизације као и да помера максимум функције ка нижим интензитетима ласерског поља у односу на w_{ADK} (слике 7.2-7.11; слике 7.3-7.12; слике 7.4-7.13; и слике 7.5 -7.14).

Тако и утицај изведеног предекспонета (7.3.1) у w_{cADK} формули за брзину јонизације добија на значају, те захтева још испитивања и анализа формула (7.3.2) и (7.3.3) у зависности од E_i , E_{imod} и F.

Прорачуни и анализа слика 7.11-7.14 показују да брзина јонизације $w_{cADKm}(E_{imod})$ расте у односу на $w_{cADK}(E_i)$ како расте интензитет ласерског поља, јер тада и предекспонент који зависи од модификованог јонизационог потенцијала E_{imod} из (7.3.3) доминира у односу на предекспонент који зависи од стандардног израза за јонизациони потенцијал E_i (7.3.2). Наиме, како поље расте, именилац израза (7.3.1) који зависи од E_{imod} све је мањи, те је услед тога предекспонент израза $w_{cADKm}(E_{imod})$ све већи у односу на предекспонет из $w_{cADK}(E_i)$.

Уопштено говорећи, теоријски модели и приступи у проучавању процеса јонизације атома се стално усавршавају због потребе да се добије формула која садржи све неопходне параметре и зависности које карактеришу дати процес, а у циљу што бољег слагања теоријских и експерименталних података.

Прорачуни за брзину јонизације преко *w*_{ADK} формула (која првенствено зависи од интензитета ласерског поља), најчећше се користе код израчунавања броја јона и поређења теоријских и експерименталних резултата у том случају [85, 87, 100, 139].

Побољшање формуле за брзину јонизације је неопходно у циљу одређивања што егзактнијег критеријума за дефинисање и раздвајање процеса тунелне и надбаријерне јонизације као и експерименталне потврде истог [105, 108, 140], што оправдава додатне корекције АДК формула за брзину јонизације. Резултати и дискусија у поглављу 7 су оригинални научни допринос кандидата датој области [107, 136].

ЗАКЉУЧАК

У овој дисертацији се за опис интеракције система атом-ласер користи квазикласичан приступ у коме се ласерско поље описује класично, док се атом третира квантно-механички. Због тога су, са више аспеката дефинисане основне карактеристике ласера и атома битне за анализу и разумевање ефеката у јаком ласерском пољу (поглавља 1 и 2) као и приступи који описују интеракцију између њих.

Затим су у поглављу 3 дефинисане апроксимативне методе које се користе приликом решавања проблема јонизације атома, а то су једноелектронска апроксимација и апроксимација јаког поља. У наставку текста дисертације дефинишу се основни механизми јонизације: мултифотонска јонизација, јонизација изнад прага, тунелна јонизација и надбаријерна јонизација, као и поједине важне карактеристике ових процеса (поглавље 4). У оквиру овог поглавља дата је дефиниција параметра адијабатичности γ , чија вредност одређује у ком режиму се одвија процес јонизације.

У овој дисертацији анализирана је примена и валидност формула АДК теорије са више аспеката. Ова теорија је позната као једна од водећих теорија у домену јонизације атома калијума, ксенона и других коришћењем ниско-фреквентних ласера (поглавље 5). Сама теорија је развијана и допуњавана у складу са новим условима експеримената из ове области, како би што боље објаснила процесе тунелне јонизације атома, ишла у корак са све јачим интензитетима ласера који се користе у савременим експериментима, али ипак остала у домену нерелативистичких интензитета (<10¹⁸ W/cm²). Такође су у поглављу 5 изведене корекција повратне тачке τ и формула за кориговану брзину јонизације у АДК теорији w_{cADK} , где је у предекспоненту израза w_{cADK} садржан утицај Кулонове интеракције на повратну тачку [106].

У поглављу 6 изведен је израз за модификовани јонизациони потенцијал атома E_{imod} како би се побољшала формула за брзину прелаза w_{ADK} , односно њена коригована варијанту w_{cADK} . Упоређен је наш резултат [124], тј. наша поправка јонизационог потенцијала, са корекцијом коју су претпоставили и анализирали други аутори E_{iAD} [108]. На основу прорачуна за племените гасове ксенон, криптон и аргон може се закључити да примена E_{iAD} као и E_{imod} релације даје задовољавајућ резултат за

127

одређени опсег ласерског интензитета (слике 6.1- 6.3), с тим што је разлика између добијених корекција најмања у случају атома аргона (слика 6.3), док је за ксенон и криптон разлика између прорачуна 1eV (слике 6.1 и 6.2).

Међутим, у случају јонизације водонику сличних атома (натријума, калијума и цезијума) промена јонизационог потенцијала далеко је реалнија са формулом E_{imod} изведеном у оквиру ове дисертације [124], те у том смислу она има предност у односу на E_{iAD} формулу, јер може да се примени у тумачењу већег броја експерименталних података (слике 6.4a, 6.5a и 6.6a).

У поглављу 7 анализирано је какве нове резултате и закључке доноси модификовани члан за енергију јонизације E_{imod} у АДК формулама за брзину јонизације у случају:

– брзине јонизације за линеарно поларизовано поље $w_{\rm ADK}^{\rm lin}$ у зависности од $E_{\rm i}$ и $E_{\rm imod}$;

– брзине јонизације за циркуларно поларизовано ласерско поље w_{ADK}^{cir} у зависности од E_i , E_{imod} и почетног импулса избаченог електрона $p(\eta)$ и

– кориговане брзине јонизације w_{cADK} у зависности од релација за јонизациони потенцијал E_i и E_{imod} .

Показало се: за брзину јонизације у линеарном пољу w_{ADK}^{lin} у случају водонику сличних атома (литијум, натријум, калијум и цезијум) важи да како интензитет ласерског поља расте, брзина јонизације w_{ADKm}^{lin} (која зависи од E_{imod}) опада у односу на w_{ADK}^{lin} (која зависи од E_i), јер се све јаче осећа утицај корекције енергије јонизације (ΔE_{imod}), односно члана који у датом опсегу интензитета ласерског поља отежава јонизацију валентног електрона, што је у складу са резултатима из 6.2. (слике 6.4в, 6.5в и 6.6в) и са резултатима цитираних аутора [133].

У случају циркуларног поља и урачунатог почетног импулса избаченог електрона показало се да се утицај ласерског поља на промену енергије јонизације E_i компензује у смислу да не помера електрон дубље у потенцијалну јаму, већ се делимично угради у почетни импулс избаченог електрона, па је због тога и брзина јонизације w_{ADK}^{cir} када је E_{imod} урачунат једним делом доминантна у односу на брзину у којој фигурише обичан јонизациони потенцијал E_i [136]. Како интензитет ласерског поља расте, брзина јонизације $w_{ADKm}^{cir}(E_{imod})$ опада, јер се све јаче осећа утицај корекције енергије јонизације ΔE_{imod} , тј. члана који у датом опсегу интензитета ласерског поља отежава јонизацију валентног електрона (слике 7.86, 7.96 и 7.106) у случају атома натријума, калијума и цезијума.

За кориговану брзину јонизације w_{cADK} у зависности од јонизационих потенцијала E_i и E_{imod} показало се следеће: резултати добијени анализом утицаја модификованог потенцијала E_{imod} на кориговану брзину јонизације w_{cADK} имплицирају да увођење кориговане повратне тачке (τ) у формулу за брзину јонизације значајано мења однос између коригованих формула $w_{cADK}(E_i)$ и $w_{cADKm}(E_{imod})$, за разлику од резултата које дају формуле w_{ADK} у случају повратне тачке нулте апроксимације (τ_0), део поглавља 7.1. Тако и утицај уведеног предекспонета добија на значају, те захтева још испитивања и додатних анализа коригованих формула за брзину јонизације [107]. Анализом слика 7.11-7.14 уочено је да брзина јонизације $w_{cADKm}(E_{imod})$ расте у односу на $w_{cADK}(E_i)$ како расте интензитет ласерског поља, јер је тада и предекспонент који зависи од модификованог јонизационог потенцијала E_{imod} већи у односу на предекспонент који зависи стандардног израза за јонизациони потенцијал E_i .

Такође, поређењем вредности за брзине јонизације w_{ADK} (слике 7.2-7.5) и w_{cADK} (слике 7.11-7.14), уочава се да коригована варијанта w_{cADK} даје мање вредности за брзину јонизације у односу на w_{ADK} , као и да помера максимум функције ка нижим интензитетима ласерског поља у односу на w_{ADK} , што се посебно може видети ако се упореде следећи парови слика: слике 7.2 и 7.11; слике 7.3 и 7.12; слике 7.4 и 7.13; слике 7.5 и 7.14.

ЛИТЕРАТУРА

[1] H. Hertz, "Über einen Einfluss des ultravioletten Lichtes auf die electrische Entladung", Annalen der Physik 267, 983-1000 (1887)

[2] M. Göppert-Mayer, "Über Elementarakte mit zwei Quantensprüngen", Ann. Physik 9, 273-95 (1931)

[3] T. H. Maiman, "Stimulated optical radiation in ruby". Nature 187, 493–494 (1960)

[4] G. Voronov, N. Delone, "Many-photon ionization of the xenon atom by ruby laser radiation", Sov. Phys. JETP 23, 54-58 (1966)

[5] F. J. McClung and R. W. Hellwarth, "Giant optical pulsations from Ruby", J. Appl. Phys. 33, 828-829 (1962)

[6] E. K. Damon and R. G. Tomlinson, "Observation of ionization of gases by ruby laser", Appl. Opt. 2, 546-547 (1963)

[7] H. B. Bebl and A. Gold, "Multiphoton ionization of hydrogen and rare-gas atoms", Phys. Rev. 143, 1-24 (1966)

[8] G. Mainfray and C. Manus, Multiphoton ionization of Atoms, Academic Press, Toronto (1984)

[9] P. Agostini, F. Fabre, G. Mainfray, G. Petite, N. Rahmann, "Free-free transitions following six-photon ionization of xenon atoms", Phys. Rev. Lett. 42, 1127-1130 (1979)

[10] A. McPherson, G. Gibbson, H, Jara, U. Johann, T. S. Luk, I. A. McIntyre, K. Boyer and C. K. Rhodes, "Studies of multiphoton production of vacuum-ultraviolet radiation in the rare gases", J. Opt. Soc. Am. B 4, 595 (1987)

[11] M. Ferray, A. L Huillier, H. F. Li, L. A. Lompre, G. Mainfray and C. Manus "Multipleharmonic conversion of 1064 nm radiation in rare gases", J. Phys. B 21, L31 (1988)

[12] L. V. Keldysh, "Ionization in the Field of a Strong Electromagnetic Wave", Soviet Physics JETP 20, 1307-1314 (1965)

[13] F. H. M. Faisal, "Multiple absorption of laser photons by atoms", J. Phys. B 6, L89-L92 (1973)

[14] H. R. Reiss, "Effect of an intense electromagnetic field on a weakly bound system", *Phys. Rev. A* 22, 1786-1813 (1980)

[15] P. H. Bucksbaum, *Atoms in strong fields*, ed. by C. A. Nicolaides, C. W. Clark, M. Nayfeh, Plenum New York (1990)

[16] S. L. Chin, F. Yergeau, and P. Lavigne, "Tunnel ionisation of Xe in an ultra-intense CO₂ laser field (10¹⁴ W/cm²) with multiple charge creation", *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 18, L213 (1985)

[17] M. V. Ammosov, N. B. Delone and V. P. Krainov, "Tunnel ionization of complex atoms and of atomic ions in an alternating electromagnetic field", *Soviet Physics JETP* **64**, 1191-1194 (1986)

[18] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, Quantum Mechanics, Nauka, Moscow (1989)

[19] B. M. Smirnov and M. I. Chibisov, "The breaking up of atomic particles by an electric field and by electron collisions", *Sov. Phys. JETP* **22**, 585–592 (1966)

[20] A. M. Perelomov, V. S. Popov and M. V. Terent'ev, "Ionization of atoms in an alternating electric field", *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **50**, 1393-1409 (1966), *Sov. Phys. JETP*, **23**, 924-934 (1965)

[21] S. August, D. Strickland, D. D. Meyerhofer, S. L. Chin and J. H. Eberly, "Tunneling ionization of noble gases in a high-intensity laser fields", *Phys. Rev. Lett.* **63**, 2212-2215 (1989)

[22] T. D. G. Walsh, F. A. Ilkov, J. E. Decker, and S. L. Chin, "The tunnel ionization of atoms, diatomic and triatomic-molecules using intense 10.6 μm radiation", *J Phys. B:At. Mol. Opt. Phys.* **27**, 3767 (1994)

[23] H. R. Reiss, "Frequency and polarization effects in stabilization", *Phys. Rev. A* **46**, 391-394 (1992).

[24] H. R. Reiss and V. P. Krainov, "Generalized Bessel functions in tunneling ionization", *J. Phys. A: Math. Gen.* **36**, 5575-5585 (2003)

[25] M. Frasca, "Strong-field approximation for the Schrodinger equation", *Phys. Rev. A* 45, 43-45 (1992)

[26] D. M. Volkov, "Über eine Klasse von Lösungen der Diracschen Gleichung", Z. Phys. 94, 250 (1935)

[27] H. R. Reiss and V. P. Krainov, "Approximation for a Coulomb-Volkov solution in strong fields", *Phys. Rev. A* **50**, R910-912 (1994)

[28] V. M. Ristić, Zasnivanje i proširivanje nekih aspekata ADK-teorije – doktorska disertacija, Kragujevac-Moskva (neobjavljeno) (1992)

[29] N. B. Delone and V. P. Krainov, *Atoms in Strong Light Fields*, Springer-Verlag, Berlin, 1984.

[30] L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Non-relativistic Theory*, Pergamon Press (1977)

[31] A. M. Dykhne, "Quantum transitions in the adiabatic approximation", *Sov. Phys. JETP* **11**, 411–415 (1960)

[32] Einstein Albert, "Zur Quantentheorie der Strahlung (On the Quantum Mechanics of Radiation)", *Physikalische Zeitschrift* **18**: 121–128 (1917b)

[33] D. Bauer, *Theory of intense laser-matter interaction*, Max-Planck-Institut, Heildelberg, Germany (2006)

[34] F. Yergeau, S. L. Chin and P. Lavigne, "Multiple ionisation of rare-gas atoms by an intense CO_2 laser (10^{14} W/cm²)", *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **20**, 723-739 (1987)

[35] S. L. Chin, Gy Farkas and F. Yergeau, "Observation of Kr and Xe ions created by intense nanosecond CO₂ laser pulses", *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **16**, 8, 223-226 (1983)

[36] C. K. N. Patel, "Continuous-Wave Laser Action on Vibrational-Rotational Transitions of CO2", *Physical Review* **136** (5A), A1187–A1193 (1964)

[37] W. W. Duley, CO2 laser, effects and applications, Academic Press, New York, 1976

[38] http://en.wikipedia.org/wiki/Carbon_dioxide_laser#Applications

[39] O. Svelto, Principles of Lasers, Springer, Berlin, Heidelberg, 2004

[40] W. T. Silfvast, *Laser Fundamentals*, 2nd edition, Cambrige University Press, Cambrige 2004

[41] R. L. Fork, C. H. B. Cruz, P. C. Becker and C. V. Shank, "Compression of optical pulses to six femtoseconds by using cubis phase compensation", *Opt. Lett.* **12**, 483-485 (1987)

[42] P. Agostini, L. F. Mauro, "The physics of attosecond light pulses", *Rep. Prog. Phys.* 67, 813-855 (2004)

[43] J. M. Dahlström, A. L'.Huillier and A. Maquet, "Introduction to attosecond delays in photoionization", J. Phys. B: A. Mol. Opt. Phys. 45, 183001-32 (2012)

[44] P. A. M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics*, 4ed, Oxford, eq.(74), p. 157. 1958

[45] P. C. W. Davies and D. S. Betts, *Quantum mechanics*, 2nd edition, Taylor and Francis,

p. 111, 1994

[46] D. J. Griffits, *Introduction to quantum mechanics*, Prentice Hall New Jersey, p. 123 (1995)

[47] B. H. Bransden and C. J. Joachain, Physics of Atoms and Molecules, Prentice Hall, 2003

[48] D. Bauer and P. Mulser, "Exact fields ionization rates in the barrier suppression-regime from numerical time dependent Schrödinger-equation calculations", *Phys. Rev. A* **59**, 569-577 (1999)

[49] H. R. Reiss, "Transitions in electromagnetic fields of arbitrary intensity", *Phys. Rev. D* 4, 3533-3542 (1971)

[50] M. H. Mittleman, Introduction to the Theory of Laser-Atom interactions, Plenum, New York (1982)

[51] H. S. Antunes Neto and L. Davidovich, "Convergence of High-Intensity Expansions for Atomic Ionization", *Phys. Rev Lett.* **53**, 2238-2241 (1984)

[52] G. F. Gribakin and M. Yu Kuchiev, "Multiphoton detachment of electrons from negative ions", *Phys. Rev. A* **55**, 3760-3771 (1997)

[53] M. Lewenstein, Ph. Balcon, M. Yu Ivanov, Anne Huillier and P. B. Corkum, "Theory of high harmonic generation by low-frequency laser fields", *Phys. Rev. A* **49**, 2117-2132 (1994)

[54] D. B. Milosevic and W. Becker, "Strong-field approximation for intense-laser-atom processes: The choice of gauge", *Phys Rev A*, **72**, 023415-5 (2005)

[55] H. A. Kramers, Collected Scientific Papers, North-Holand, Amsterdam (1956)

[56] W. C. Henneberger, "Perturbation method for atoms in intense light beams", *Phys. Rev. Lett.* **21**, 838-841 (1968)

[57] C. C. Choi, W. C. Henneberger and F. C. Sanders, "Intensity-dependent ionization potentials for H and He in intense laser beams", *Phys. Rev. A* **9**, 1895-1897 (1974)

[58] A. D. Bandrauk and H. Z. Lu, *Special Volume of Handbook of Numerical Analysis* Vol.X, ed. by P. G. Ciarlet, (Elsevier Science, Amsterdam, 2003)

[59] K. K. Kulander, "Multiphoton ionization of hydrogen: A time-dependent theory", *Phys. Rev. A* **35**, 445-447 (1987); "Time-dependent theory of multiphoton ionization of xenon", *Phys. Rev. A* **38**, 778-787 (1988).

[60] F. H. M. Faisal, Theory of Multiphoton Processes, Plenum, New York, p.8 (1987)

[61] N. B. Delone i V. P. Krainov, Multiphoton Processes in Atoms, Springer Berlin (1984)

[62] B. Walker, B. Sheehy, L. F. DiMauro, P. Agostini, K. J. Schafer and K. C. Kulander, "Precision measurement of strong field double ionization of helium", *Phys. Rev. Lett.* **73**, 1227-1230, (1994)

[63] A. Talebpour, S. Larochelle and S. L. Chin, "Suppressed tunnelling ionization of the molecule in an intense Ti:Sapphire laser pulse" *J. Phys. B* **31**, L49 (1998); "Multiphoton ionization of unsaturated hydrocarbons", *J. Phys. B* **31** 2769 (1998).

[64] F. A. Ilkov, J. E. Decker, and S. L. Chin, "Ionization of atoms in the tunneling regime with experimental evidence using Hg atoms," *J. Phys. B* **25**, 4005-4020 (1992)

[65] C. Guo, "Multielectron effects on single-electron strong field ionization", *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2276-79 (2000)

[66] X. M. Tong, Z. H. Zhao and C. D. Lin, "Theory of molecular tunneling ionization", *Phys. Rev. A* 66, 033402-11 (2002)

[67] Ta-You Wu and T. Ohmura, *Quantum Theory of Scattering*, Prentice Hall, Englewood Clifs, N Y (1962)

[68] A. M. Perelomov, V. S. Popov, and M. V. Terent'ev, "Ionization of atoms in an alternating electric field II", *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **51**, 309 (1966), *Sov. Phys. JETP* **24**, 207 (1966)

[69] W. Kaiser, G. Garrett, "Two-photon excitation in CaF₂:Eu²⁺", *Phys. Rev. Lett.* 7, 229-231 (1961)

[70] J. L. Hall, E. J. Robinson and L. M. Branscomb, "Laser double quantum photodetachment of I", *Phys. Rev. Lett.* **14**, 1013-16 (1964)

[71] S. Geltman, "Ionization of a model atom by a pulse coherent radiation", J. Phys. B: At. Mol. Phys. 10, 831 (1977)

[72] W. Zernik, Two-photon ionization of atomic hydrogen", *Phys. Rev.* **135**, A51-A57 (1964)

[73] L. A Lompre, G. Mainfray, C. Manus, S. Repoux and J. Thebault, "Multiphoton ionization of rare gases at very high intensity (10^{15}W/cm^2) by a 30-psec laser pulse at 1,06 µm", *Phys. Rev. Lett.* **36**, 949-952 (1975)

[74] F. Fabre, G. Petite, P. Agostini and M. Clement, "Multiphoton above-threshold ionization of xenon at 0,53 and 1,06 μm", *J. Phys B: At. Mol. Phys.* **15**, 1353 (1982)

[75] G. Petite, F. Fabre, P. Agostini, M. Crance and M. Aymar, "Nonresonant multiphoton ionization of cesium in strong fields: Angular distributions and above-threshold ionization", *Phys. Rev. A* **29**, 2677-89 (1984)

[76] L. A Lompre, G. Mainfray, C. Manus and J. Thebault, "Multiphoton ionization of rare gases by a tunable-wavelength 30-psec laser pulse at 1,06 μ m", *Phys. Rev. A* **15**, 1604-12 (1977)

[77] M. Protopapas, C. H. Keitel and P. L. Knight, *Atomic physics for SHI laser, Rep. Prog. Phys.* **60**, 389-486 (1997).

[78] L. A. Collins and A. L. Merts, "Model calculations for an atom interacting with an intense, time-dependent electric fields", *Phys. Rev A* **37**, 2415-31 (1988)

[79] A. L'Huillier, L. A. Lompre, G. Mainfray and C. Manus "Multiply charged ions induced by multiphoton apsorption processes in rare-gas atoms at 1,064 μ m", *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* **16**, 1363 (1983); L. A. Lompre, A. L' Huillier, G. Mainfray and C. Manus, "Laserintensity effects in the energy distributions of electrons produced in multiphoton ionization of rare gases", *JOSA B* **2**, 1906-12 (1985)

[80] P. Lambropoulos, "Topic on multiphoton processes in atoms", *Adv. At Mol. Phys.* **12**, 87-158 (1976)

[81] R. R. Freeman, P. H. Bucksbaum, H. Milchberg, S. Darack, D. Schumacher and M. E. Geusic, "Above-threshold ionization with subpicosecond laser pulses", *Phys. Rev Lett.* **59**, 1092-95 (1987)

[82] P. Agostini, P. Berger, A. L'Huiller, H. G. Muller, G. Petite, A. Antonetti and A. Migus, "Giant Stark shifts in multiphoton ionization" *Phys. Rev Lett.* **63**, 2208-11 (1989a,b) [83] G. Petite, P. Agostini and H. G. Muller, "Intensity dependence of non-perturbative above-threshold ionisation spectra: experimental study", *J. Phys. B:At. Mol. Opt. Phys.* 21, 1095-4105 (1988)

[84] N. B. Delone, *Interaction of Laser Radiation with Matter*, Nauka Moscow (1989) (in Russian)

[85] S. L. Chin, J. E. Decker, T. D. G. Walsh, Y, Liang and G. Xu, "Tunnel ionization of molecules by an intense CO₂ laser", *Las. Phys.* **3**, 298-306 (1993)

[86] E. Mevel, P. Breger, R. Trainham, G. Petite. P. Agostini, A. Migus and A. Antonetti, "Atoms in strong optical fields: evolution from multiphoton to tunnel ionization", *Phys. Rev. Lett.* **70**, 406-9 (1993)

[87] W. Xiong and S. L. Chin "Tunnel ionization of K and Xe atoms by an intense CO₂ laser", *Sov. Phys. JETP* **99**, 481-487 (1991)

[88] U. Eichmann, M. Dorr, H. Maeda, W. Becker and W. Sandner, "Collective multielectron tunneling ionization in strong fields", *Phys. Rev. Lett.* **84**, 3550-53 (2000)

[89] T. Brabec, M.Y. Ivanov and P. B. Corkum, "Coulomb focusing in intense atomic processes", *Phys. Rev. A* 54, R2551-54 (1996)

[90] D. N. Fittinghoff, P. R. Bolton, B. Chang and K. C. Kulander, "Observation of non-sequential double ionization of helium with optical tunneling", *Phys Rev Lett* **69**, 2642-2645 (1992)

[91] V. M. Ristić, M. M. Radulović and V. P. Krainov, "Improved treatment of the turning point in tunnel ionization of atoms in a low-frequency electromagnetic fields", *Laser Physics* 8, No 4, 928-932 (1998)

[92] F. Lindner, *Atoms in intense ultra short laser pulses and the apsolute phase* – doc. dissertation, München (2004)

[93] Gy. Farkas and S. L. Chin, *Multiphoton Processes*, Springer-Verlag (1985)

[94] D. B. Milosevic, G. G. Paulus, D. Bauer and W. Becker, "Above–threshold ionization by few–cycle pulses", *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **39**, R203-R262 (2006)

[95] J. L. Krausse, K. J. Schafer and K. C. Kulander, "Calculation of photoemission from atoms subject to intense laser fields", *Phys. Rev. A* **45**, 4998-10 (1992)

[96] B. J. Shortt, P. J. M. van der Burgt, F. Giammanco, J. A. Slevin and W. Lanigan, "Wavelength-dependent collective effects in the multiphoton ionization of atomic deuterium", *Phys. Rev. E* **66**, 046411-10 (2002)

[97] G. Mainfray and G. Manus, "Multiphoton ionization of atoms", *Rep. Prog. Phys.* 54, 1333-72 (1991)

[98] D. G. Lappas and R. van Leeuwen, "Electron correlation effects in the double ionization of He", *J. Phys. B: A. Mol. Opt. Phys.* **31**, L249 (1998)

[99] M. V. Ammosov, "Interaction of charges produced by the focusing of laser radiation into low–pressure gas", *Las. Phys.* **4**, 431-456 (1994)

[100] V. P. Krainov, W. Xiong and S. L. Chin, "An introductory overview of tunnel ionization of atoms by intense laser fields", *Las. Phys.* **2**, 467-75 (1992)

[101] S. F. J. Larochelle, A. Talebpour and S. L. Chin, "Coulomb effect in mutiphoton ionization of rare-gas atoms", *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys* **31**, 1215-24 (1998)

[102] A. Scrinzi, M. Geissler and T. Brabec, "Ionization above Coulomb barrier", *Phys. Rev. Lett.* **83**, 706-9 (1999)

[103] D. Strickland and G. Mourou, "Compression of amplified chirped optical pulses", *Opt. Commun.* **56**, 219 (1985) (first paper on CPA)

[104] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu and F. Laloe, *Quantum Mechanics*, J. Wiley and Sons, New York (1977)

[105] S. Augst, D. D. Meyerhofer, D. Strickland and S. L. Chin, "Laser ionization of noble gases by Coulomb-barrier suppression", *JOSA B*, **8**, 858-867 (1991)

[106] V. M. Ristić, J. M. Stevanović and M. M. Radulović, "Transition rate dependence on the improved turning point in ADK-theory", *Las. Phys. Lett.* **3**, 298-300 (2006)

[107] V. M. Ristić and J. M. Stevanović, "Transition rate dependence on the atom charge states, Z", *Las. Phys. Lett.* **4**, 354-356 (2007)

[108] M. V. Ammosov and N. B. Delone, "Tunneling ionization and above-barrier decay of atoms under the action of pulsed laser radiation", *Las. Phys.* **7**, 79-83 (1997)

[109] H. R. Reiss, "Semiclassical electrodynamics of bound systems in intense fields", *Phys. Rev. A* **1**, 803-818 (1970)

[110] N. K. Rahman and H. R. Reiss, "Multiphoton transition in hydrogen between 1s and 2p levels", *Phys. Rev. A* **6**, 1252-1255 (1972)

[111] A. Decoster, "Validity and meaning of the momentum-translation approximation for bound states in a radiation field", *Phys. Rev. A* **9**, 1446-1449 (1974)

[112] R. F. O'Connell, "Ionization energies of hydrogenlike atoms in intense electromagnetic fields", *Phys. Rev. A* **12**, 1132-1134 (1975)

[113] T. A. Welton, "Some observable effects of the quantum-mechanical fluctuations of the electromagnetic fields", *Phys. Rev.* **74**, 1157-1167 (1948)

[114] P. Agostini, G. Barjot, G. Mainfray, C. Manus and J. Thebault, "Multiphoton ionization of rare gases at 1.06µ and 0.53µ", *IEEE J. Quantum Electron.* **QE-6**, 782–788 (1970)

[115] B. Held, G. Mainfray, C, Manus, J. Morellec and F. Sanchez, "Resonant multiphoton ionization of a cesium atomic beam by a tunable-wavelength Q-switched neodymium-glass laser", *Phys. Rev. Lett.* **30**, 423-426 (1973)

[116] M. LuVan, G. Mainfray, C. Manus and I. Tugov, "Multiphoton ionization of atomic and molecular hydrogen at 0.53 μ", *Phys. Rev. A* **7**, 91-98 (1973)

[117] L. I. Schiff and H. Snyder, "Theory of the quadratic Zeeman effect", *Phys. Rev.* 55, 59-63 (1939)

[118] V. B. Beresteskii, E. M. Lifshitz and L. P. Pitaevskii, *Relativistic Quantum Theory* (Addison-Wesley, Reading, Mass.), p.123 (1971)

[119] J. H. Eberly, Progress in Optics (North-Holland, Amsterdam), Vol. VII, p.361 (1969)

[120] M. J. Seaton, "Quantum defect theory", Rep. Prog. Phys. 46, 167 (1983)

[121] U. Fano, C. E. Theodosiou and J. L. Dehmer, "Electron-optical properties of atomic fields", *Rev. Mod. Phys.* 48, 49-68 (1976)

[122] A. R. P. Rau and M. Inokuti, "The quantum defect: Early history and recent developments", *Am. J. Phys.* 65, 221-225 (1997)

[123] S. P. Goreslavski, N. B. Delone and V. P. Krainov, "Probabilities of radiative transitions between highly excited atomic states", *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **82**, 1789-1797 (1982)

[124] V. M. Ristić and J. M. Stevanović, "Atom charge states, Z and comparing the ADK and cADK-theories", *Las. Phys.* **19**, 989-992 (2009)

[125] H. Bethe and E. Salpeter, *Quantum mechanics of atoms with one and two electrons*, Moscow: Fizmatig, in Russian, (1960)

[126] 114 V. M. Vainberg, V. D. Mur, V. S. Popov and A. V. Sergeev, "Stark effect for the Rydberg states of the hydrogen atom", *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **46**, 178-182 (1987)

[127] M. Dörr, R M Potvliege and R. Shakeshaft, "Tunneling ionization of atomic hydrogen by an intense low-frequency field", *Phys. Rev. Lett.* **64**, 2003-2006 1990

[128] V. S. Popov and V. D. Mur, "The Stark effect in strong fields: perturbation theory, 1/n expansion and scaling", *Las. Phys.* **3**, 462-474 (1993)

[129] R. V. Kulyagin and V. D. Taranukhin, "Tunneling ionization of atoms and ions in a strong laser field and the effect of local ionization suppression", *Las. Phys.* **3**, 644-650 (1993)

[130] http://www.phy.davidson.edu/StuHome/joesten/IntLab/final/rydberg.htm

[131] N. B. Delone and V. P. Krainov, "Atomic stabilisation in laser fields", *Phys. Usp.* 38, 1247-1268 (1995)

[132] N. B. Delone and V. P. Krainov, "Tunneling and barrier suppression ionization of atoms and ions in laser radiation fields", *Phys.–Usp.* **41**, 469-485 (1998)

[133] N. B. Delone and V. P. Krainov, "AC Stark shift of atomic energy levels", *Phys. Usp.*42, 669 (1999)

[134] V. P. Krainov and V.M. Ristic, "Electron energy spectra in tunneling ionization of atoms and ions by a strong low-frequency electromagnetic field", *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **101**, 1479-1486 (1992)

[135] V. M. Ristić, T. B. Miladinović and M. M. Radulović, "Transition rate dependence on the non-zero initial momentum in the ADK-Theory", *Acta Phys. Pol. A*, **112**, No. 5, 909-914 (2007)

[136] J. M. Stevanović, T. B. Miladinović, M. M. Radulović and V. M. Ristić, "Ionization rate for circularly polarized laser fields with modified ionization potential included", *Phys. Scr.* **T149**, 014046 (2012)

[137] S. Augst and D. D. Meyerhofer, "Field ionization of noble gas atoms with a Keldysh adiabaticity parameter of the order of one", *Las. Phys.* **4**, 1155-1159 (1994)

[138] V. M. Ristić, T. B. Miladinović and M. M. Radulović, "Calculating ionization transition rate for circularly polarized fields, including non-zero initial momentum", *Acta Phys. Pol. A*, **116**, No. 4, 504-506 (2009)

[139] J. E. Decker, G. Xu and S. I. Chin, "Stable operation of a powerfull 3-Hz line tunable TEA CO₂ oscilattor-amplifiers system", *Appl. Opt.* **30**, 1888-1890 (1991)

[140] X. M. Tong and C. D. Lin, "Empirical formula for static field ionization rates of atoms and molecules by lasers in the barrier-suppression regime", *J. Phys. B: A. Mol. Opt. Phys.* **38**, 2593-2600 (2005)

АПСТРАКТ

Изведен је израз за модификовани јонизациони потенцијал атома у циљу урачунавања утицаја ласерског поља на енергију јонизације атома и побољшања формула за брзину прелаза у АДК теорији. Резултати су показали да овакав облик потенцијала утиче на брзину јонизације на такав начин да је умањује, јер се услед Штарковог ефекта валентни електрон помера дубље у потенцијалну јаму.

SUMMARY

By incorporating the influence of laser field on ionization potential of atoms, formula for ionization rate of existing ADK (Ammosov-Delone-Krainov) theory was improved. The results showed that this form of potential reduced the ADK ionization rate, since the Stark effect due to laser field moves valence electron deeper into the potential hole.

КЉУЧНЕ РЕЧИ Коригована АДК теорија Брзина јонизације Енергија јонизације Повратна тачка Интензитет ласера KEYWORDS Corrected ADK theory Ionization rate Ionization energy Turning point Laser intensity

БИОГРАФИЈА

Јасна Стевановић рођена је 15. 10. 1979. године у Крагујевцу, од оца Милољуба и мајке Границе. Основну и средњу школу завршила је у Крагујевцу.

Године 1998. уписала се на Природно-математички факултет, група физика, смер физика – информатика. Студије је завршила 2004. године са просечном оценом 9,01. Исте године уписала је последипломске студије на Институту за физику Природноматематичког факултета у Крагујевцу, усмерење Атомска, молекулска и оптичка физика.

Дана 27.09.2007. године одбранила је магистарску тезу под насловом Зависност вероватноће прелаза од интензитета ласерског поља у АДК-теорији, чиме је стекла назив магистра физичких наука. Ментор магистарског рада био је проф. др Владимир Ристић, тада ванредни професор Природно-математичког факултета у Крагујевцу.

Од маја 2004. године до априла 2009. године мр Јасна Стевановић била је запослена на Природно-математичком факултету у Крагујевцу, у звању истраживач-приправник на Институту за физику факултета.

Од априла 2009. године мр Јасна Стевановић била је запослена на Природноматематичком факултету у Крагујевцу, у звању истраживач-сарадник на Институту за физику факултета.

Од септембра 2013. године мр Јасна Стевановић запослена је у звању асистента на Институту за физику Природно-математичког факултета Универзитета у Крагујевцу.

354

Abstract: Here are shown two different transition rates, one obtained in the ADK-theory [1,2] and the other one for ADK result with turning point corrected with the Coulomb interaction – let us denote it cADK [1,3], in both cases the changing of charge states Z of atoms was performed. If plotted for the fields from 10^{12} W/cm² to 10^{17} W/cm² and for Z = 1 to Z = 10, the two variants give behavior which were not predicted before, Fig. 1 and Fig. 2, showing in the cADK case pick which is not shown in the ADK case. But from results shown on Fig. 3 and Fig. 4, although they are giving only the illustration of the real behavior of the transition rates, the actual situation can be predicted. On Fig. 4 one has results of cADK, and obtains the strongest tunnel effect at 10^{13} W/cm², differing from the ADK case (Fig. 3), which gives this effect at 10^{14} W/cm², in accordance with our earlier result [1].



 W_{ADK} plotted vs. laser field intensities and atom charge states, Z

© 2007 by Astro Ltd.

Published exclusively by WILEY-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA

Transition rate dependence on the atom charge states, Z

V.M. Ristić * and J.M. Stevanović

Department of Physics, Faculty of Science, Kragujevac University, R. Domanovića 12, Kragujevac 34000, Serbia and Montenegro

Received: 13 December 2006, Accepted: 20 December 2006 Published online: 4 January 2007

Key words: laser radiation intensity; charge state Z; turning point; ADK-theory; Keldysh parameter

PACS: 32.80.-t, 32.80.Fb, 32.80.Rm

1. Introduction

As it was shown in paper [1], and elsewhere, estimation of transition rate of ionization of atoms when made for short-range potential were based on assumptions of Keldysh approximation [4] that the external potential does not affect the energy of the final state of ejected electron, when it leaves the atom, because the electron is far enough from the nucleus. The main effect of applied field is speeding up of ionized electron. Coulomb potential was then treated as perturbation of final state energy thus leading to the ADK-theory [2]. In [3,5] it was noticed that, when constructing ADK-theory, the Coulomb interaction was not included into calculations for the turning point τ . This was not so important at the time as the laser fields in experiments were of the order of 10^{12} W/cm² [6], and corresponding corrections were of the order of 0.10876478 [1,2,6].

In accordance with the fact that the laser fields in experiments were constantly increasing (and above mentioned corrections became significantly higher [3]), there emerged a necessity for ADK-theory to include these cases as well. Indeed, the ADK-theory was recently extended to the case of superstrong laser fields [3,7–9], and therefore, our calculations now include extension of potential range up to 10^{17} W/cm², which is justified by the results of [1, 5,10]. That resulted in the shift of the position of the turning point τ and new transition rate dependence, which we denoted W_{cADK} [1].

Throughout this paper the atomic unit system ($e = \hbar = m_e = 1$) will be used.

Here we are developing the idea of including charge states, Z, into cADK-theory in order to judge closer the prediction from paper [1], that the tunneling effect is gaining in its intensity at laser field intensities of 10^{13} W/cm². The results of this paper fully confirm that.



^{*} Corresponding author: e-mail: ristic@kg.ac.yu


Figure 1 W_{ADK} plotted vs. atom charge states Z, for laser field intensity $I = 5 \times 10^{13}$ W/cm²



Figure 2 W_{cADK} plotted vs. atom charge states Z, for laser field intensity $I = 5 \times 10^{13}$ W/cm²

2. Judging the influence of charge state, Z

The method for calculating the transition rate including Coulomb correction is given in [1,3,5], and it results in the new turning point

$$\tau = \frac{p + i\sqrt{2E_i}}{F} - \frac{iZ}{(p^2 + 2E_i)\sqrt{2E_i}}.$$
 (1)

where E_i is the initial energy of atomic electron in the external electromagnetic field, and τ is the complex time, related to the turning point. Because external field F is much smaller than the atomic field F_{at} (and that is so even in the case of superstrong fields – 10^{17} W/cm² is the highest value we are taking into account – because as shown in [1], after intensities of laser fields of 10^{14} W/cm² the atoms are ionized so that $Z \sim 10$, thus producing the atomic

(4)

field stronger then external, and allowing the Keldysh approximation to be applied), we have taken in consideration influence of external field only on final state E_f , while assuming that initial state is non-perturbed (see [4,2]).

Compared to earlier result

$$\tau_0 = \frac{p + i\sqrt{2E_i}}{F} \,, \tag{2}$$

Eq. (1) gives new turning point which is influenced by charge state Z. Earlier we have calculated the transition rates for ADK and cADK (which denotes ADK-theory with included Coulomb interaction in calculating the turning point τ , see Eq. 1) [1,3] and obtained:

$$W_{ADK} = \left(\frac{4Z^3e}{Fn^{*4}}\right)^{2n^*-1} \exp\left(-\frac{2Z^3}{3Fn^{*3}}\right),$$
 (3)

 $W_{cADK} =$

$$= \left[1 + \frac{2ZF}{(p^2 + 2E_i)^2} + \frac{Z^2F^2}{2E_i(p^2 + 2E_i)^3}\right]^{-1} W_{ADK}.$$

Now we shall look into the dependance of transition rates in ADK- and cADK-theory on the charge state Z, in more detail. We have chosen the intensity of the laser field to be $I = 5 \times 10^{13}$ W/cm², as our estimations in [1] predict that the strongest effect of tunnel ionization is achieved at that intensity of laser field, which is also confirmed by our next result presented on Fig. 3 and Fig. 4.

Here we use arbitrary units on y-axis. One can see here pretty strange outcome of our analysis: in the case of cADK-theory (Fig. 2) the transition rate has a peak at Z = 2 and is deminished from Z = 4 to 10, while for standard ADK-theory the transition rate is zero before Z = 6, which is not realistic at all, and then goes to infinity, which is yet less realistic.

3. The change of transition rate influenced both by the increase of laser field intensities, and the change of atom charge states, *Z*

Now we shall examine more complicated, and assumingly, more realistic situation. Namely we shall plot both transition rates (3) and (4) for external laser field changing its intensity from $10^{13} - 10^{15}$ W/cm² (because in that region most of the essential changes occur) and charge states Z changing from 1 to 10. This includes into our model a low-frequency laser whose intensity is gaining in its strength all the time the transition rate is plotted, which, taking into account that every laser needs some time to gain its maximal intensity, is pretty much realizable. Also the limits of change of the laser intensity are estimated in accordance with our earlier results [1].

On Fig. 3 in a 3D graph the transition rate W_{ADK} (arbitrary units) is plotted for changeable intensity of the low-frequency laser (CO₂, for instance) and changeable



Laser Physics

356

Figure 3 (online color at www.lphys.org) W_{ADK} plotted vs. laser field intensities and atom charge states, Z



Figure 4 (online color at www.lphys.org) W_{cADK} plotted vs. laser field intensities and atom charge states, Z

charge states. It shows that in plain ADK-theory the maximal tunneling effect is expected around laser intensities of 10^{14} W/cm². But on Fig. 4 (also a 3D graph, other conditions pretty much the same, except for the limits on the abscess axis) the maximal tunnel effect is shown to be at laser intensities of 10^{13} W/cm² as already predicted in [1]).

Thus Fig. 4 indicates the strong tunnel ionization at intensities of laser field about 10^{13} W/cm², as expected after the results in [1]. And it is a further confirmation of that expectation because the values for charge states, Z, are included.

4. Final remarks

Finally, it can be noticed that, for the fields whose intensities vary from 10^{13} W/cm² up to 10^{15} W/cm², transition rates, given by Figs. 1, 2, 3, and 4, show behavior on Fig. 3, which was predicted many times, i.e. on Fig. 3 is shown the sudden decrease at laser-field intensities near 10^{14} W/cm² and saturation further on. On Fig. 4, which shows the case of the ADK-theory with the turning point corrected to the Coulomb interaction, this occurs right after intensities of order 10^{13} W/cm². But this figure also indicates an enormous activity at fields 10^{13} W/cm², which is due to strong tunneling effect for these energies of laser field, as predicted [1]. This is, let us stress, all applicable only to multi-charged ions with the ion charge larger or equal to ten and with at least one electron left in a bound state. In our model the using of a laser whose intensity grows was assumed, thus giving atoms the opportunity to be multiply ionized via tunneling effect, while obtaining nucleus charge of $Z \ge 10$, see, also [1,6]. Yet Fig. 1 and Fig. 2 give entirely new situation, yet not completely understood: in the case of cADK-theory (Fig. 2) the transition rate has a peak at Z = 2 and is diminished from Z = 4to 10, while for standard ADK-theory the transition rate is zero before Z = 6, and then goes to infinity, both cases being unrealistic. So this should be examined by experiment, if possible.

Acknowledgements This work was supported in part by the Ministry of Science and Ecology, Republic of Serbia (Project 141023).

References

- V.M. Ristić, J.M. Stevanović, and M.M. Radulović, Laser Phys. Lett. 3, 298–300 (2006).
- [2] M.V. Ammosov, N.B. Delone, and V.P. Krainov, Sov. Phys. JETP 64, 1191–1194 (1986).
- [3] V.M. Ristić, M.M. Radulović, and V.P. Krainov, Laser Phys. 8, 928–932 (1998).
- [4] L.V. Keldysh, Sov. Phys. JETP 20, 1307–1316 (1965).
- [5] V.M. Ristić, The Foundation and Extension of Some Aspects of ADK-Theory, Ph.D. Thesis (Moscow, Kragujevac, 1992).
- [6] V.M. Ristić, M.M. Radulović, and T.S. Premović, Laser Phys. Lett. 2, 314–317 (2005).
- [7] V.P. Krainov, J. Opt. Soc. Am. B 14, 425-431 (1997).
- [8] N. Milošević, V.P. Krainov, and T. Brabec, Phys. Rev. Lett. 89, 193001 (2002).
- [9] N.B. Delone and V.P. Krainov, Multiphoton Processes in Atoms (Springer, Berlin, 2000).
- [10] N.B. Delone and V.P. Krainov, Atoms in Strong Light Fields (Springer, Berlin, 1985).

Atom Charge States, Z and Comparing the ADK and cADK—Theories¹

V. M. Ristić* and J. M. Stevanović

Department of Physics, Faculty of Science, Kragujevac University, R. Domanovića 12, 34000 Kragujevac, Serbia *e-mail: ristic@kg.ac.rs

Received December 1, 2008; in final form, December 4, 2008

Abstract—During the process of adjusting the ADK-theory for the superstrong laser fields we took some part in few past years [1, 7, 8], mainly in analyzing the consequences of the influence of atom charge Z, being changed during the ionization of atoms, on the transition rate of ejected electrons. In this activity we introduced a slightly changed variant of ADK-theory [3], which we began to call corrected ADK-theory, cADK, for short [8]. Now, cADK-theory is not experimentally challenged yet, but it's results are in accordance with many predictions [see, for instance 1, 7–9]. In present work, we used calculations of modified ionization potential of atom E_i , in order to improve formula for transition rate W_{cADK} . As we already discussed the transition rate dependence on the atom charges state Z [1], now we explained better the differences of the two variants of the theory, ADK and cADK. Of course, our predictions need experimental check.

PACS numbers: 32.80.-t, 32.80.Fb, 32.80.Rm

DOI: 10.1134/S1054660X0905017X

1. INTRODUCTION

The so called ADK-theory has been tested over and over [5-10, and references therein] as one of the leading theories in the domain of low frequency lasers ionizing atoms of potassium, xenon, and so on. Though it had to be exposed to some corrections [1, 3, 7, 8] it survived the development of the technology and managed to describe the cases of superstrong fields [5-10].

In this process of adjusting the ADK-theory for the superstrong laser fields we took some part during these past years [1, 3, 7, 8], mainly in analyzing the consequences of the influence of atom charge Z, being changed during the ionization of atoms, on the transition rate of ejected electrons. Yet we introduced a slightly changed variant of ADK-theory [3], which we call corrected ADK-theory, cADK, for short [8].

Following the lead we have found in our earlier investigations [1] we shall now try to clarify the situation with changing atomic charge, Z, in the cADK-theory. In order to accomplish this we studied paper of O'Connell [4]. There we found the calculation of the change of the energies of the bound and continuum electrons (ΔE_b , ΔE_c , respectively), due to the intense field.

In our work, we used his approach and some calculations of modified ionization potential of atom E_i , in order to improve formula for transition rate W_{cADK} . As we already discussed [1] about transition rate dependence on the atom charges state Z, now we will be able to explain better the differences of the two variants of the theory, ADK and cADK.

2. CALCULATION OF THE MODIFIED IONIZATION POTENTIAL

Main goal of this work is to include the modification in the ionization potentials of atoms due to the presence of the intense radiation (external field), which should serve to close the gap between theoretical and experimental ionization probabilities. As laser fields in experiments were constantly increasing, most attention has been given to the improved calculation of transition probabilities.

In work of O'Connell [4], concerning ionization energies of hydrogenlike atoms in intense external fields, was derived an analytic expression for ΔE_I for the complete spectrum of H-like atoms. He considered a hydrogenlike atom, in the field of a monochromatic plane wave of angular frequency ω , using dipole approximation and atomic units system (which is common in this calculations).

Here we used the aforementioned approach, with some improvements, to obtain modified ionization potential of atom E_i . Atomic unit system ($\hbar = m_e = e = 1$) will be used throughout this paper.

Relation

$$\frac{\Delta E_c}{|\Delta E_i|} \sim \frac{\omega^2 n^3}{Z^4} \tag{1}$$

from [4] is used here instead of initial expression $E_i = \frac{Z^2}{2n^3}$ for ionization potential in our formula for W_{cADK} .

¹ The article is published in the original.

As a reminder, ΔE_i is in essence $\Delta E_c - \Delta E_b$, where ΔE_b and ΔE_c are the changes of the energies of the bound and continuum electrons respectively,

$$\Delta E_c = \frac{1}{4} \alpha_2 A_0^2 \tag{2}$$

is simply the classical oscillation energy of an electron in an electromagnetic field and α is fine- structure con-

stant
$$\alpha = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0}$$
, or in CGS-system $\alpha = \frac{e^2}{\hbar c 4\pi\varepsilon_0}$.

In connecting expression (1) and cADK, theory, we use well-known relation between electric field and vector potential, expressed over their amplitudes:

$$A_0 = -\frac{c}{\omega} F_0 \sin \omega t.$$

From relations (1) and (2) we get

$$|\Delta E_i| \sim \frac{\Delta E_c Z^4}{\omega^2 n^3} \sim \frac{\frac{1}{4} \alpha^2 A_0^2 Z^4}{\omega^2 n^3}.$$

After some elementary transformations, including all above-mentioned correlations, approximating term $\sin \omega t \sim \omega$ we have the following relation:

$$\left|\Delta E_{i}\right| \sim \frac{F_{0}^{2}Z^{4}}{\omega^{2}n^{3}}$$

As angular frequency ω has constant value in our calculation, we will drop term $\frac{1}{\omega^2}$ in further calculations, and therefore the change of ionization potential becomes:

$$\left|\Delta E_{i}\right| \sim \frac{F_{0}^{2}Z^{4}}{n^{3}}.$$
(3)

Modified or reduced ionization potential E_{ir} is simply proportional to a sum of the initial expression for ionization potential and expression (3)

$$E_{ir} \approx \frac{Z^2 (1 + 2F_0^2 Z^2)}{2n^3}.$$
 (4)

We use this expression instead of usual form of E_i , in formula for W_{cADK} .

Now, the results concerning modified ionization potential may be used as the basis of calculation of transition probabilities in an intense external field.

3. TRANSITION RATE CHANGE AS A COSEQUENCE OF A MODIFIED IONIZATION POTENTIAL

Now a step backwards [1, 3, 7, 8], The transition rates for ADK and cADK-theories are, with corrections to the energies due to the change of atom charge Z, respectively:

$$W_{\rm ADK} = \left(\frac{4Z^3 e}{Fn^{*4}}\right)^{2n^* - 1} \exp\left(-\frac{2Z^3}{3Fn^{*3}}\right),\tag{5}$$

$$W_{\text{cADK}} = \left[\frac{4Z^{3}e}{Fn^{*4}}\frac{1}{1 + \frac{2ZF}{\left(p^{2} + 2E_{ir}\right)^{2}} + \frac{Z^{2}F^{2}}{2E_{ir}\left(p^{2} + 2E_{ir}\right)^{2}}}\right]^{2n^{*}-1}\exp\left(-\frac{2}{3}\frac{Z^{3}}{Fn^{*3}}\right).$$
(6)

Above (expression (6)) in transition rate W_{cADK} , (which is the new result, published in [3]) the second rational term in the parentheses is a correction of the turning point due to the Coulomb interaction. As the turning point τ is essential in the development of the ADK-theory we think this correction is being important. For the fields up to 10^{12} W/cm², the correction added to the old result (5):

$$\frac{2ZF}{(p^2+2E_i)^2} + \frac{Z^2F^2}{2E_i(p^2+2E_i)^2}$$

is small and could be neglected (for instance, in the case of potassium ionization in the laser field of 10^{12} W/cm², its value is 0.10876478, [3]). In [3], the fields that were

used had intensities of 10^{14} W/cm² < $I_{at} \sim 10^{16}$ W/cm² and correction was greater (for instance, other conditions unchanged, 10^{14} W/cm² gives 1.340258). For stronger fields the correction, naturally, gains in its amount (10^{17} W/cm² gives 314.185).

Now, we shall draw a two dimensional graph of W_{ADK} and W_{cADK} depending on Z, in the case of modified ionization potential E_{ir} . Namely we shall plot the W_{ADK} , W_{cADK} transition rate vs. atom charge states Z, and later on a 3D graph of W_{cADK} vs. laser field intensities and atom charge states, Z.

Thus we plotted the above transition rates as in [1], but now with E_i changing when Z changes, (yet in case of Fig. 1 it has no influence whatsoever, as E_i is not

LASER PHYSICS Vol. 19 No. 5 2009



Fig. 1. W_{ADK} , in arbitrary units, plotted vs. atom charge states Z, for laser field intensity $I = 5 \times 10^{13} \text{ W/cm}^2$.

explicitly present in transition rate expression for standard ADK-theory) and we can see that there is seemingly a minor difference between this new Fig. 3 and corresponding Fig. 4 in [1]. Only the very beginning of Fig. 3 is showing a different behavior—a peak in the transition rate curve can be seen for very low atom charge $Z \leq 2$). This is the reason we inverted values for Z compared to previous paper [1], as thus it can be visualized better. This difference indicates that the Figures 1 and 2 should be now checked more thoroughly, as they show us the behavior of ADK and cADK variants of the theory indicating they have pretty much different outcome when the atom charge Z is varied. Indeed, in the case of the ADK-theory the changing of Z results in steep rising of transition rate after the Z = 6, which is not observed in any experiment whatsoever (we delicately called this behavior unrealistic in [1]). But in the corrected case of the cADK-theory one has a peak from Z = 0 to 2, and after that normal behavior, indicating that applying cADK variant to the cases of Z = 10, needed to justify the usage of this theory for the fields greater than atomic [5-9], is founded. This behavior could be called normal as the units for W_{cADK}



Fig. 2. W_{cADK} , in arbitrary units, depending on Z, in the case of modified ionization potential E_{ir} .

on Fig. 3 are arbitrary, so zero corresponds to the normal activity of an atom in the superstrong laser field.

Examining Eqs. (3) and (4) explains the difference between Figs. 1 and 2. The exponent is predominated by the preexponential part until Z becomes 6 in the case of ADK-theory Fig. 1, and after that the exponential part takes over, but in the case of cADK-theory exponential part of the Eq. (5) is dominated by the preexponent all over, except for the small interval for value of Z from 0–2. Thus corrected preexponent, so to speak, irons out the rest of the Fig. 2.

4. CONCLUSIONS

In present work, we, following [4], calculated modified ionization potential of atom E_{ir} , in order to improve formula for transition rate W_{cADK} (we did not expect to do that with the original version of the ADKtheory as its formula (5) shows no dependence E, and thus less dependence on Z than cADK, Eq. (6)). As we already discussed the transition rate dependence on the atom charge state Z, [1], now we were able to explain better the differences of the two variants of the theory,



Fig. 3. W_{cADK} plotted vs. laser field intensities and atom charge states, Z, E_{ir} (expression modified).

LASER PHYSICS Vol. 19 No. 5 2009

ADK and cADK. Of course, our predictions need experimental confirmation or denial. So comparing our results with experiments of the type of Yamakawa et al. [9], will be our next goal. Also there is a possibility of extending our result to the case of nonzero initial momentum of ejected electron [11]. Yet this result supports earlier extension of the ADK-theory, in it's cADK variant, to the case of superstrong laser intensities [5–10].

We have shown that the behavior of ADK and cADK variants of the theory have pretty much different outcome when the atom charge Z is varied. In the corrected case, i.e., cADK-theory, one has a peak from Z = 0 to 2, and after that normal behavior, indicating that applying cADK variant to the cases of Z = 10, needed to justify the usage of this theory for the fields greater than atomic [5–9], is founded. This behavior we call normal as the units for W_{cADK} on Fig. 3 are arbitrary, so zero can correspond to the standard [5–8] activity of an atom in the superstrong laser field.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was supported in part by the Ministry of Science, Republic of Serbia (project no. 141023).

REFERENCES

- 1. V. M. Ristić and J. M. Stevanović, Laser Phys. Lett. **4**, 354 (2007).
- 2. M. V. Ammosov, N. B. Delone, and V. P. Krainov, Sov. Phys. JETP **64**, 1191 (1986).
- V. M. Ristić, M. M. Radulović, and V. P. Krainov, Laser Phys. 8, 928 (1998).
- 4. R. F. O'Conell, Phys. Rev. A 12, 1132 (1975).
- 5. V. P. Krainov, J. Opt. Soc. Am. B 14, 425 (1987).
- N. Milošević, V. P. Krainov, and T. Brabec, Phys. Rev. Lett. 89, 19300-1 (2002).
- V. M. Ristić, M. M. Radulović, and T. S. Premović, Laser Phys. Lett. 2, 314 (2005).
- V. M. Ristić, J. M. Stevanović, and M. M. Radulović, Laser Phys. Lett. 3, 298 (2006).
- K. Yamakawa, Y. Akahane, Y. Fukuda, M. Aoyama, N. Inoue, H. Ueda, and T. Utsumi, Phys. Rev. Lett. 92, 123001-1 (2004).
- E. A. Chowdhury, C. P. J. Barty, and B. C. Walker, Phys. Rev. A 63, 042712-1 (2001).
- 11. V. M. Ristić, T. B. Miladinović, and M. M. Radulović, Laser Phys. **18**, 1183 (2008).

Ionization rate for circularly polarized laser fields with modified ionization potential included

J M Stevanović, T B Miladinović, M M Radulović and V M Ristić

Department of Physics, Faculty of Science, Kragujevac University, Kragujevac, Serbia

E-mail: jasnas@kg.ac.rs

Received 22 August 2011 Accepted for publication 23 November 2011 Published 27 April 2012 Online at stacks.iop.org/PhysScr/T149/014046

Abstract

During the ionization of atoms with low-frequency laser fields, tunneling ionization occurs when the Keldysh parameter $\gamma \ll 1$. One of the most widely used theories is the Ammosov–Delone–Krainov (ADK) theory, which was developed for both linearly and circularly polarized laser fields. This paper studies the influence of modified ionization potential on ionization rate in the ADK theory for the case of a circularly polarized laser field. The studied atoms are K, Na, Li and Cs; they are ionized by CO₂ laser in the intensity regime between 10^{14} and 10^{16} W cm⁻². It is found that ionization rates of atoms with similar values of ionization potential behave in a similar manner; also, the influence of modified ionization potential on ionization rates is much stronger at higher laser intensities.

PACS numbers: 32.80.-t, 32.80.Fb, 32.80.Rm

(Some figures may appear in colour only in the online journal)

1. Introduction

The process of tunneling ionization of atoms by strong low-frequency laser fields—which are both linearly [1, 2] and circularly [3] polarized—has been successfully studied in recent years [4]. It has been shown [5] that as the strength of the external field F rises, the ionization rate increases in the range $F < F_{at}$ and decreases in the range $F > F_{at}$. The maximum ionization rate corresponds to an atomic field strength $F \sim F_{at}$. Because the laser field strength is proportional to the laser field intensity, i.e. $F \sim \sqrt{I}$, the fact that the fields are strong means that applied intensities are increasing toward $10^{16} \, \mathrm{W \, cm^{-2}}$. The theoretical approach to the tunneling problem is based on a single-active-electron approximation, where the idea is that only one electron is involved in the ionization process. The Ammosov-Delone-Krainov (ADK) theory is one of the most widely used theories in this area, and one of its main accomplishments is the resulting formula for ionization rate (in its correct form, obtained in [6] by including the influence of non-zero initial momentum of the ejected electron), in the case of linearly polarized light:

$$W_{\rm ADK}^{\rm lin} = \left(\frac{4eZ^3}{Fn^{*4}}\right)^{2n^*-1} \exp\left(-\frac{2Z^3}{3Fn^{*3}} - \frac{p^2\gamma^3}{3\omega}\right), \qquad (1)$$

and in the case of linearly polarized light:

$$W_{\rm ADK}^{\rm cir} = \sqrt{\frac{3FZ^3}{\pi n^{*3}}} \left(\frac{4eZ^3}{Fn^{*4}}\right)^{2n^*-1} \exp\left(-\frac{2Z^3}{3Fn^{*3}} - \frac{p^2\gamma^3}{3\omega}\right),\tag{2}$$

where *F* is strength of the laser field, *Z* is the charge number, n^* is the effective principal quantum number, ω is the angular laser frequency and γ is the Keldysh parameter of adiabaticity, defined as $\gamma = \omega \sqrt{2E_i}/F$. It divides the laser–atom interactions into two regimes: multiphoton and tunneling. It is obvious that the difference between formulae (1) and (2) lies in the expression under the square root.

The above formulae are expressed in the atomic unit system $\hbar = m_e = e = 1$, which will be used throughout this paper.

The formula for momentum has been obtained in [7-9] in the following form:

$$p = \frac{1}{2} \left(\sqrt{F\eta - 1} + \frac{1}{\eta \sqrt{F\eta - 1}} \right). \tag{3}$$

Now we try to further develop the observations in our previous work [10], by examining to what extent the modified ionization potential [11] influences the ionization rates with non-zero momentum included.

The transition rate formula for circularly polarized field (2) is transformed by replacing the effective quantum number n^* with its equivalent expression $Z/\sqrt{2E_i}$:

$$W_{ADK}^{cir} = \left[\frac{3F}{\pi} \left(2E_{i}\right)^{3/2}\right]^{1/2} \left[\frac{4e}{FZ} \left(2E_{i}\right)^{2}\right]^{\frac{2Z}{\sqrt{2E_{i}}}-1} \times \exp\left[-\frac{2(2E_{i})^{3/2}}{3F} - \frac{p^{2}\gamma^{3}}{3\omega}\right].$$
 (4)

Also, the atomic ionization potential E_i that manifests itself in (4) will be modified under the influence of an external laser field, which causes ionization; this will lead to the following expression for modified ionization potential:

$$E_{i \,\text{mod}} = E_i + F^2 Z \left(2E_i\right)^{3/2}.$$
 (5)

Consequently, the formula for the ionization rate (2) assumes the following form:

$$W_{\text{mod}}^{\text{cir}} = \sqrt{\frac{3F}{\pi} (2E_{\text{i mod}})^{3/2}} \left[\frac{4e}{FZ} (2E_{\text{i mod}})^2 \right]^{\frac{2Z}{\sqrt{2E_{\text{i mod}}}} - 1} \\ \times \exp\left[-\frac{2(2E_{\text{i mod}})^{3/2}}{3F} - \frac{p^2 \gamma_{\text{mod}}^3}{3\omega} \right], \tag{6}$$

where $\gamma_{\rm mod} = \omega \sqrt{2E_{\rm i \, mod}}/F$ represents the Keldysh parameter with the modified ionization potential included. Checking the values of $\gamma_{\rm mod}$ for the intensity range 10^{14} – $10^{16} \, {\rm W \, cm^{-2}}$, the condition for tunnel ionization is fulfilled since $0.02 < \gamma_{\rm mod} < 0.07$.

Since all the required relation and formulae are introduced, we shall now present the new results obtained.

2. Influence of modified ionization potential on ionization rate for circularly polarized laser fields

We studied the influence of modified ionization potential (5) on ionization rate ((4) and (6)) in the ADK theory for the case of a circularly polarized laser field [12, 13]. The studied atoms are K, Na, Li and Cs; they are ionized by CO_2 laser in the intensity regime between 10^{14} and 10^{16} W cm⁻².

In figure 1 the ionization rates for Li and Na are given, separately and together. There are two lines: one line with ionization potentials without any corrections to the ionization potential and the other line where the modified ionization potential is included. From this figure, it is obvious that for the intensity 10^{14} W cm⁻² the influence of $E_{i \text{ mod}}$ on ionization rate can be neglected. For values higher than 2×10^{15} W cm⁻², its influence increases the values of ionization



Figure 1. Ionization rates for (a) the Li atom, (b) the Na atom and (c) both atoms. One set of lines shows the influence of modified ionization potential $E_{i \mod}$, while the other shows the influence of unmodified ionization potential E_i .



Figure 2. Ionization rates for (a) the K atom, (b) the Cs atom and (c) both atoms. One set of lines shows the influence of modified ionization potential $E_{i \mod}$, while the other shows the influence of unmodified ionization potential E_i .

rate (dashed for lithium and dash-dotted line for sodium). Since Na and Li have similar values of ionization potentials, $E_i^{\text{Li}} = 5.392 \text{ eV}$ and $E_i^{\text{Na}} = 5.139 \text{ eV}$, respectively, their ionization rates behave in similar manners, although the ionization rate for sodium has a larger maximum than lithium, because sodium atoms are easier to ionize.

Next was analyzed the behavior of ionization rate in the case of K and Cs atoms (figure 2). One of the two lines represents the ionization rate with unmodified ionization potential, while the other shows how modified ionization potential influences the same quantity for both elements. For intensities lower than 10^{15} W cm⁻², the influence of $E_{i \text{ mod}}$ on ionization rate can be neglected for both atoms. But for higher values of intensity, the influence of $E_{i \text{ mod}}$ leads to an increase in the values of ionization rate (dashed line for potassium and dash-dotted line for cesium). K and Cs atoms have rather different values of ionization potential, $E_i^{K} = 4.341 \text{ eV}$ and $E_i^{Cs} = 3.894 \text{ eV}$, but their ionization rates behave in similar manners. Still, the ionization rate for cesium has a much larger maximum than potassium, because E_i^{K} is much larger than E_i^{Cs} and therefore Cs atoms can be more readily ionized.

3. Conclusion

We have shown that modified ionization potential has a much greater influence on tunneling ionization rate than was suspected earlier. This is seen from figures 1 and 2, where the introduction of a modified ionization potential $E_{i \mod}$ resulted in a strong influence at higher laser intensities, in the range $10^{15}-10^{16}$ W cm⁻².

Also it was found that the ionization rates of atoms with similar values of ionization potential behave in an analogous manner; we have compared lithium and sodium atoms in figure 1, and potassium and cesium atoms in figure 2. The ionization rate for sodium has a larger maximum than lithium; hence, the Na atom is more easily ionized than the Li atom, see figure 1. Nevertheless, the ionization rate for cesium has a much larger maximum than that for potassium, because E_i^{Cs} is much smaller than E_i^K , which leads to more rapid ionization (figure 2).

Acknowledgment

This work was supported in part by the Ministry of Science and Technological Development, Republic of Serbia (project 171021).

References

- [1] Keldysh L V 1965 Sov. Phys.—JETP 20 1307–14
- [2] Perelomov A M, Popov V S and Terent'ev M V 1966 *Sov. Phys.—JETP* **23** 924–34
- [3] Ammosov V M, Delone N B and Krainov V P 1986 Sov. Phys.—JETP 64 1191–4
- [4] Delone N B and Krainov V P 1998 Phys.—Usp. 41 469–85
- [5] Delone N B and Krainov V P 1991 Usp. Fiz. Nauk 161 141-51
- [6] Krainov V P and Ristić V M 1992 Zh. Eksp. Teor. Fiz. 101 1479–86
- [7] Landau L D and Lifshitz E M 1991 *Quantum Mechanics: Non-Relativistic Theory* 3rd edn (London: Butterworth-Heinemann)
- [8] Bauer D 2002 *Theory of Laser–Matter Interaction* (Heidelberg: Max-Planck Institute)
- [9] Ristić V M, Miladinović T B and Radulović M M 2009 Acta Phys. Pol. A 116 504–6
- [10] Ristić V M, Miladinović T B and Stevanović J M 2011 Acta Phys. Pol. A 119 761–3
- [11] Ristić V M and Stevanović J M 2009 Laser Phys. 19 989-92
- [12] Gubbini E 2004 Multiple ionization of heavy atoms in super strong laser fields *PhD Thesis* Technical University of Berlin
- [13] Kornev A S, Tulenko E B and Zon B A 2003 *Phys. Rev.* A 68 043414