Este exemplar corresponde à redação final da Tese defendida pelo aluno José Luis Jiménez Perez e aprovada pela Comissão Julgadora.

Campinas, 12 de Agosto de 1985

"FOTOIONIZAÇÃO ATÔMICA EM CAMPOS DE LÁSER INTENSO"

José Luis Jiménez Pérez

Orientador: *Prof. Dr. Carlos Alberto da Silva Lima*

Tese apresentada ao Instituto de Física "Gleb Wataghin", como parte dos pré-requisitos à obtenção do grau de Mestre em Ciências, pela UNICAMP

julho - 85

Para todas aquelas pessoas a quem amo e quero com muito carinho.

AGRADECIMENTOS

Meus melhores e mais sinceros agradecimentos ao Prof. Dr. Carlos Alberto da Silva Lima por sua paciente e dedicada orientação desta Tese, pelo apoio e estímulo, confiança e amizade que nos brindou, durante o decorrer do trabalho.

Ao Prof. Dr. José Carlos Valladão de Mattos pela confiança e pelo apoio por ocasião da minha chegada à UNICAMP e ao longo da minha estadia aqui, especialmente no trato das questões junto à SUBIN.

Aos Profs(a) Dra. Mirinã Barbosa de Sousa Lima, Dr. Artemio Scalabrin, Dr. Carlos A. Ferrari, Dr. Daniel Pereira, Dr. C. H. de Brito Cruz, pela amizade e oportunidade de proveitosa interação ao lo go da minha permanência no Grupo de Lasers e Aplicações.

Ao Prof. Dr. Paulo H. Sakanaka, pelos ensinamentos na área de computação (VAX).

Ao amigo Alfredo C. Orea muito obrigado pelas discussões frutíferas e pelo auxílio incansável na parte computacional. Obrigado por sua amizade leal e sincera, meus mais profundos agradecimentos.

Ao meu amigo Maurício A. Algatti, por sua amizade leal e desinteressada, com quem convivi e me acompanhou passo a passo, nos momentos de luta, obrigado por sua sua ajuda incansável.

Aos meus colegas do Curso de Pós-Graduação do IFGW pela amizade, convívio e papos frutíferos: Valéria , Niusa,

...

Glória, Nelia, Omar, Hugo, Maurício, Roberto M., Daniel, Tomaselli, Luis Annes e Sérgio.

Meu especial agradecimento aos Profs. Dr. Jorge Silvio Helman, Dr. Feliciano Sanchez Sinencio, Dr. Julio Mendoza e Dr. Juan Luis Peña Chapa do Departamento de Física do "Centro de Investigación y Estudios Avanzados del I.P.N.", cujo apoio possibilitou minha vinda ao Instituto de Física da UNICAMP para fazer o Mestrado.

Agradeço a todo o pessoal administrativo do Instituto de Física da UNICAMP pelos trâmites burocráticos. Em particular agradeço:

Prof. Dr. José Galvão P. Ramos e a secretária Maria Ignez R. Mokarzel. À Ana Toma, pela dedicação e paciência na datilografia desta Tese.

Agradeço a todos meus amigos brasileiros pela sua amizade e convívio neste lindo país.

Ao Convênio SUBIN-UNICAMP pela concessão da Bolsa de Estudos para meu Mestrado.

RESUMO

Nesta Tese abordamos um tratamento não-perturbativo do comportamento de um átomo hidrogênico num campo de laser intenso, bem como os reflexos da ação deste último sobre a taxa de ionização multifotônica atômica.

O átomo no campo intenso é tratado sob uma formulação que explora o uso de uma transformação unitária (translação espacial) que permite obter o potencial efetivo de Lima & Miranda, para descrição do átomo vestido pelo campo. Tomando como estado de partida o nível fundamental do átomo vestido, e levando em devida conta a parametrização, prevista nesta formulação, do potencial de ionização atômico, em função da intensidade do campo, nos foi possível deduzir uma forma fechada para a taxa de ionização multifotônica. Os limites correspondentes aos regimes particulares associados a valores baixos e altos do parâmetro λ, que descreve a intensidade do campo (descritos, no contexto de nosso trabalho, pelas designações relativas de campos "fracos" e campos "intensos") foram obtidos explorando os comportamentos assintóticos da função principal presente na expressão geral analítica fechada, nos limites correspondentes. Em particular, no regime de intensidades por nós designado como regime de campos fracos, nossos resultados reproduzem corretamente a dependência observada experimentalmente, a saber, uma taxa de fotoionização com multiplicidade ν que varia com a intensidade do laser como I^{ν}. Os regimes de intensidades intermediárias e altas intensidades foram, também, analisados. Nossas predições teóricas específicas revelam um comportamento para a taxa de ionização a ν fotons que, eventualmente, declinará quando forem atingidas intensidades de campo suficientemente altas.

ABSTRACT

This Thesis focus on a non-perturbative approach to describe a hydrogenic atom behavior in an intense laser field and how it affects the atomic multiphoton ionization rate.

The atom in the intense field is described under a formulation which explores an unitary transformation (space translation) to obtain the Lima & Miranda dressed atom effective binding potential. A closed form is then derived for the multiphoton ionization rate, up from the dressed-atom ground state, which takes into account the field induced parametrization of the atomic ionization potential on the laser intensity. Special limits are considered to suit the specific regimen of low or high values of the field intensity describing parameter λ (quoted within the contextof the present work under the relative designations of "weak" and "strong" fields) by explicitly implementing the corresponding asymptotic behavior of the main function within the closed analytical general expression. In particular, in the weak field limit, in our context, the results that were obtained correctly reproduce the experimentally observed ν-photons atomic ionization rate dependence on the laser intensity I, which is well known to be represented by a growth proportional to I^{ν}. Both the intermediate and strong field regimen were also analysed. Our theoretical predictions reveal a ν-photon atomic ionization rate behavior which eventually subsides, with the rate decreasing for sufficiently strong laser intensities.

ÍNDICE

CAPÍTULO I - APRESENTAÇÃO 1

CAPÍTULO II - CONSIDERAÇÕES GERAIS SOBRE A INTERAÇÃO CAMPO INTENSO DE RADIAÇÃO V.S. ÁTOMO 5

CAPÍTULO III - ÁTOMOS EM CAMPO DE LASER 12

CAPÍTULO IV - IONIZAÇÃO MULTIFOTÔNICA NUM CAMPO DE LASER 28

a) Cálculo da Taxa de Ionização 38

a.1) Limite de Campo Fraco 39

a.2) Limite de Campo Intenso 40

a.3) Campos Intemediário 41

a.4) Caso Geral 43

CAPÍTULO V - CONCLUSÕES 50

APÊNDICE A 55

REFERÊNCIAS 60

CAPÍTULO I

APRESENTAÇÃO

O estudo do processo de fotoionização constitui uma área de pesquisa de longa tradição em Física Atômica e Molecular. A compreensão básica do processo requer a aplicação de vários aspectos dos conhecimentos físicos levantados a respeito do problema mais amplo da interação entre átomos (moléculas) e campos de radiação eletromagnética. Para uma grande parcela dos átomos e moléculas conhecidos, a ionização com um fóton requer energias fotônicas superiores a 10 eV. Isto quer dizer que, para se obter a ionização de um átomo (ou molécula), pela absorção de um único fóton, temos que usar fótons na região do utravioleta distante.

Os processos primários na ionização são:

(a) ionização direta para o continuum, com ou sem excitação do ion residual;

(b) ionização dissociativa direta;

(c) ionização múltipla direta.

Muitas vezes estes processos primários são seguidos por processos secundários, tais como: fluorescência, proveniente de estados iônicos excitados, dissociação subsequente a um processo de promoção a um estado que, de outra forma, seria estável (pré-dissociação) e processo de ionização múltipla, via processo Auger. O conhecimento destes processos, quer primários, quer secundários tem grande importância básica, em vários campos da ciência.

Há interesse no estudo tanto experimental como teórico da fotoionização. Do ponto de vista experimetal, o objetivo é determinar a seção de choque absoluta de interação , para cada processo específico, ou seja, as secções de choque parciais. Já do ponto de vista teórico, o que se pretende é desenvolver procedimentos de cálculos que nos permitam obter a probabilidade por unidade de tempo, i.e. a taxa e ocorrência, para qualquer evento de fotoionização específico. É claro que, para qualquer cálculo, é necessário que se tenha uma razoável compreensão dos mecanismos de interação. Por exemplo, na interação com um átomo, o campo eletromagnético interage, especificamente, com um elétron ou com vários?. O elétron emergente é influenciado por aqueles na mesma camada ou pelos outros nas demais camadas? Para muitos, por exemplo, o modelo de um elétron parece ser o mais indicado para processos de ionização com um fóton, no caso do elétron emergente originar-se nas camadas internas, ao passo que, para elétrons de valência, a consideração de efeitos de muitos corpos parece ser necessária, para um tratamento mais refinado. É claro que somente medidas experimentais precisas podem elucidar definitivamente a questão.

Nosso interesse, como se observará nos próximos capítulos, centrar-se-á no estudo do processo de fotoionização atômica, admitindo a possibilidade de que o processo seja mediado pela participação de vários fótons, ou seja, o processo de ionização atômica multifotônica, especialmente quando o campo de radiação é bastante intenso.

Em suas linhas gerais, trata-se do estudo do processo de ionização a muitos fótons de um sistema mantido por forças coulombianas de longo alcance, acopladas ao campo da onda eletromagnética, i.e. um processo de ionização que resulta da absorção simultânea de muitos fótons. Como mencionaremos depois, vários tem sido os autores que se dedicaram ao estudo deste processo. A grande motivação foi a possibilidade de um eventual confronto com dados experimentais, cuja obtenção tornou-se possível, com o advento de lasers cada vez mais potentes. Há alguns anos, a ionização multifotônica foi estudada com lasers Q-switched trabalhando com pulsos de ~ 10^{-8}s. Hoje, lasers com pulsos de picosegundos (10^{-12}s), e menos, estão disponíveis para trabalho experimental na área, ensejando intensidades que ultrapassam, em alguns casos, os 10^{16}Watt/cm^2. Além da alta intensidade, o estreitamento temporal dos pulsos na região dos 10^{-12}s melhora, grandemente, a possibilidade de estudos de processos ressonantes, já observados com pulsos de 10^{-8}s. Outro fator relevante, de grande importância na comparação de resultados experimentais com predições teóricas, quase sempre desenvolvidas com hipóteses simplificadoras sobre o feixe de radiação incidente, é o fato de que um pulso de picosegundo, com largura de faixa limitada, é definido como um pulso completamente livre de modulação de intensidade e de frequência. Ele tem uma evolução temporal regular e bem comportada, semelhante aos pulsos de laser de um só modo. Este fato facilita as comparações entre teoria e experimento.

Em nosso trabalho, a questão da ionização multifotônica a laser será tratada com a seguinte organização: após uma breve digressão sobre generalidades a respeito da interação entre radiação e átomos em regime de campos intensos (Cap.II), passamos no Cap. III a fundamentar e desenvolver um tratamento que será dado ao problema de fotoionização, à luz de um modelo desenvolvido por Lima e Miranda[1], explorando a aplicação de uma transformação unitária de translação espacial e usando o mé todo variacional para obter os níveis de energia e as funções de onda do átomo no campo do laser; no Cap. IV abordamos, explicitamente, o cálculo da amplitude de probabilidade de ionização atômica, partindo da matriz S exata e, com algumas aproximações, chega-se a expressão para a taxa de transição ionizante a n-fotons, num campo de laser; este resultado é, então, amplamente discutido e analisado em função, especialmente, do parâmetro que descreve a intensidade do campo de laser. Finalmente, no Cap. V, além de um apanhado retrospectivo geral do trabalho, apresentamos uma breve apreciação crítica de nossos resultados, principalmente nos aspectos em que diferem de outros tratamentos do problema.

CAPÍTULO II

CONSIDERAÇÕES GERAIS SOBRE A INTERAÇÃO CAMPO INTENSO DE RADIAÇÃO VS. ÁTOMO

É um fato de fácil constatação, diante do grande volume de trabalhos de pesquisa publicados nos últimos anos, que a procura de um entendimento mais completo, tanto do ponto de vista teórico como experimental, do problema da interação de elétrons, átomos e moléculas com intensos campos de radiação eletromagnética, continua a merecer grande atenção entre os físicos. Isto se deve, em parte, aos grandes avanços tecnológicos recentes que se tem verificado na produção de lasers ultra-intensos (hoje já na região dos multi-Terawatt/cm^2), como os que têm sido usado em alguns experimentos recentes[2-6]. Por outro lado, este interesse se deve, também, à importância que este melhor conhecimento tem para uma maior compreensão de observações experimentais em áreas onde a interação com campos eletromagnéticos intensos (lasers ou não), tem levado a descoberta de novos e interessantes fenômenos. Em Física de Sólidos, Física de Plasma, Astrofísica, etc., tem se tornado evidente que a interação de campos de tais intensidades com átomos, moléculas ou partículas carregadas, isoladas ou em interação entre si, não pode ser descrita pelos métodos usuais de teoria de perturbação. Na verdade, a procura de novas formulações, mais adequadas, tem ensejado o desenvolvimento de uma variedade de novos esquemas[7-12], muitos deles explorando o uso de tranformações unitárias, algumas apresentadas em trabalhos surgidos logo após a operação dos primeiros lasers de alta potência[8,9]. É, portanto, forçoso reconhecer que os la sers trouxeram idéias completamente novas às pequisas da interação radiação-matéria. A alta intensidade da luz do laser, com tão pequena dispersão em frequência (largura de linha), permitiu a ocorrência de fenômenos de ressonância inteiramente novos, que são manifestações explícitas do atingimento de regimes de extrema não-linearidade nestes fenômenos. Estas ocorrências têm recebido a designação geral de processos multifotônicos, porque seu tratamento quântico os descreve como absorção ou emissão de um certo número de quanta de energia. Os campos de laser de alta intensidade, não obstante, são melhor descritos como radiação clássica não havendo necessidade de apelar para o conceito de fótons (2ª quantização) na formulação teórica do problema, embora continuemos a usá-lo livremente na linguagem descritiva do processo. A frequência de oscilação do campo provê uma série de harmônicos que satisfazem a conservação de energia para os processos de ordem mais alta. Assim, neste sentido, podemos reter a descrição multifotônica, mesmo quando seu único significado está na necessidade de um certo número de quanta para satisfazer as leis de conservação.

A pesquisa de transições multifotônicas têm fortes elos de ligação com aplicações de interesse técnico. Por exemplo, na questão dos plasmas produzidos por laser logo fica claro que questões importantes nesta técnica estavam intimamente ligadas aos mecanismos microscópicos de excitação atômica. A fusão induzida por laser, dada sua importância tecnológica, propiciou a motivação (e os recursos) para extensos trabalhos de investigação e desenvolvimento de equipamento para a pesquisa de transições multifotônicas em átomos. Do mesmo modo a esperança da viabilização, em escala industrial, dos processos de separação isotópica com lasers e de Química com lasers, propiciou enorme desenvolvimento nas investigações de processos multifotônicos em moléculas. Em ambos os campos, muitas foram as questões básicas cuja elucidação teve reflexos imediatos nas aplicações a que se relacionavam, demonstrando assim a importância básica, fundamental, da melhor compreensão dos processos microfísicos da interação radiação-matéria, em regime de campo intenso.

Entre estes problemas, estaremos interessados em tratar, nesta Tese, aquele que se refere ao fenômeno da ionização de um átomo induzida pela presença de um campo de laser intenso, expressa pela transição de um elétron de um estado atômico (ligado) para o continuum de energia.

O estudo da fotoionização, em si, estabelece um campo de pesquisa, que constitue apenas uma área dentro problema mais geral do entendimento de como a radiação interage com um átomo ou molécula. O grande interesse neste particular tipo de processo de interação radiação-matéria tem ensejado inúmeros trabalhos[1-26], que são frequentemente objetos de extensas resenhas críticas[12,27-32]. Um tópico neste tipo de investigações ocupa-se, em particular, de procurar um melhor entendimento do processo de fotoionização quando ele é determinado pela absorção múltipla simultânea de fótons com energia individual inferior ao potencial de ionização atômica mais baixo. Tem havido muito interesse nos cálculos de taxas de transição atômica multifotônica sob diferentes enfoques[7,17-23]. Alguns exploram esquemas perturbativos[20-23], o que questiona sua aplicabilidade a campos muito intensos, outros exploram cálculos aproximados dentro de esquemas que incluem os efeitos do campo de laser na função de onda eletrônica, em toda sua plenitude[7,17-19]. É o caso, por exem plo, dos cálculos baseados na aproximação de translação de momentum[11] ou dos cálculos onde se usa o método da função de Green, com o pressuposto que a interação laser-elétron ligado domina a interação coulombiana elétron-núcleo[20,27].

Neste trabalho, desenvolve-se uma formulação alternativa para o cálculo dessa taxa de transição multifotônica, que tem por base um método proposto recentemente por Lima e Miranda[1,12,24], nesta formulação os estados eletrônicos refletem o fato de que o elétron se encontra na presença simultânea da interação coulombiana elétron-núcleo e da interação elétron-campo do laser, sem tratar esta última como perturbação da primeira.

Nossa formulação contempla o uso de tranformações unitárias no tratamento não-perturbativo do problema da interação átomo-campo de radiação intensa. No tratamento deste tipo de interação, há que se considerar dois aspectos complementares entre si. De um lado a presença do campo intenso reflete-se em mudanças estruturais no sistema atômico que levam ao aparecimento de deslocamentos de energia, alargamento de linha ou, mesmo, desdobramentos (quebra de degenerescência) dos níveis de energia que o átomo exibe na ausência do campo de laser. Falamos, neste caso, de um átomo "vestido" pelo campo. De outro lado a presença do campo intenso (grandes densidades de fótons) reflete-se em sensíveis alterações nas taxas de transição foto-induzidas, isto é nos processos dinâmicos que promovem os mecanismos de mediação destas transições. O exemplo mais contundente é, provavelmente, o efeito sobre as transições ionizantes, (transições estado ligado→continuum) que nos propomos a estudar, nesta Tese. Ao longo das muitas propostas voltadas para resolver diferentes aspectos deste problema, ligados a diferentes quadros de situações experimentais e formulações teóricas (ver por exemplo a excelente resenha de Bayfield, ref. 31) a consideração de transformações unitárias como um esquema de reescrever a equação temporal de Schrödinger para o problema de uma forma eventualmente mais tratável, tem ganho muitos adeptos[12]. Foi, por exemplo, ao longo desta linha que surgiram as propostas de aproximação de translação de momentum[11], aproximação de translação espacial[10], e aproximação de referencial girante[9].

Nossa formulação situa-se no rol das propostas que usam uma transformação unitária, como veremos no capítulo III. Lá, mostraremos que nosso método baseia-se na aplicação, desenvolvida por Lima e Miranda[1,24], do método de translação espacial de Henneberger-Kramer[10], do problema de interação átomo + campo de radiação.

Antes de fechar o presente capítulo, gostaríamos de mencionar, de forma um pouco mais explícita, uma formulação que ganhou vasto reconhecimento na literatura científica, e que trata do problema da ionização de átomos em campos de radiação intenso, por ser o primeiro trabalho a abordar o problema numa formulação não-perturbativa, adequada para aplicação com lasers intensos. Trata-se do trabalho pioneiro de L.V. Keldysh[7], cuja forte motivação experimental foi o desenvolvimento dos lasers de rubi de alta potência na U. Soviética, que atingiram intensidades inimagináveis para a época (1963-65): acima de Gigawatts/cm^2.

Keldysh, em seu trabalho, obtém fórmulas para a probabilidade de ionização de átomos (e de sólidos) submetidos a ação de uma onda eletromagnética intensa cuja frequência é tal que a energia do fóton associado é menor que o potencial de ionização atômica. Em linhas extremamente gerais, sua formulação parte da expressão exata da matriz S para o problema

$$S_{\vec{q},o} = -i/\hbar < \psi_{\vec{q}}^{(-)} , H'\phi_o > \qquad (2.1)$$

onde ϕ_o é o estado incial do átomo.

$$\phi_o = U_o(\vec{r})\, e^{-iW_o t/\hbar} \qquad (2.2)$$

e onde $\psi_{\vec{q}}^{(-)}$ é a função de onda exata (sob inversão temporal). As condições de contorno para ela são dadas em $t \to +\infty$ onde ela vale

$$\lim_{t\to+\infty} \psi_{\vec{q}}^{(-)} = U_{\vec{q}}^{(-)}(\vec{r})e^{-i\omega_q t/\hbar} = \phi_{\vec{q}}^{(-)} \qquad (2.3)$$

A parte espacial das funções de onda satisfaz a equação de Schrödinger na ausência de campo

$$(W_n - H_o)U_n(\vec{r}) = 0, \qquad n = 0,\vec{q} \qquad (2.4)$$

e $H'(t)$ na equação acima vale

$$H'(t) = H(t) - H_o \qquad (2.5)$$

onde $H(t)$ é o Hamiltoniano total. O ingrediente mais importante na aproximação de Keldysh constituiu-se em substituir a função de onda exata por $\chi_{\vec{q}}$, função que representa a situação em que a interação elétron-próton (no átomo de hidrogênio) foi desprezada, em face da interação eletron-laser . Keldysh trabalhou com calibre $\vec{r}.\vec{E}$ e assim, devido ao aparecimento do termo $\vec{p}\,.\,\vec{A}(t)$

na exponencial da função $\chi_{\vec{q}}$, as integrais que tem que ser calculadas tornam-se muito difíceis de fazer. Assim ele teve que introduzir várias aproximações, que são na verdade muito difíceis de avaliar com relação as limitações de aplicabilidade que impõe. No final, ele obtém para a taxa de transição total do estado fundamental → continuum

$$W^{Kel} \doteq \frac{Ry}{\hbar}(3\pi)^{1/2}\, 2^{-5/4}\left(\frac{E}{E_o}\right)^{1/2} \qquad (2.6)$$

expressa em função da razão entre o campo elétrico do laser e o campo elétrico nuclear, ou equivalente, em função da intensidade do laser e do potencial de ionização atômico na ausência de campo.

CAPÍTULO III

IONIZAÇÃO EM CAMPOS DE LASER INTENSO

Consideremos, inicialmente, alguns conceitos elementares sobre ionização atômica. Em nossos cálculos posteriores vamos abordar átomos hidrogenóides, cujo potencial coulombiano é $V_c = -\frac{Ze^2}{r}$. Os estados ligados de um átomo com este potencial tem energias que convergem em direção ao limite de ionização, acima do qual está o continuum de estados do elétron livre, como se indica na Fig. 1-a.

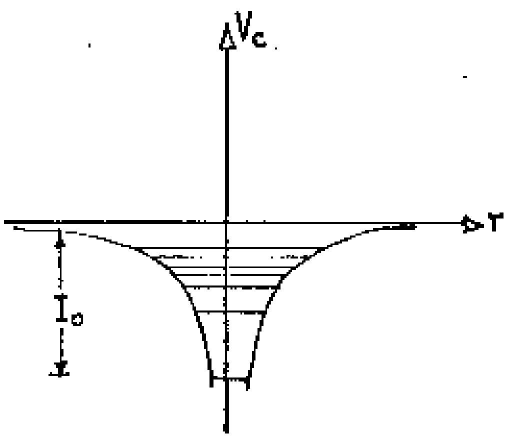

Fig. 1-a

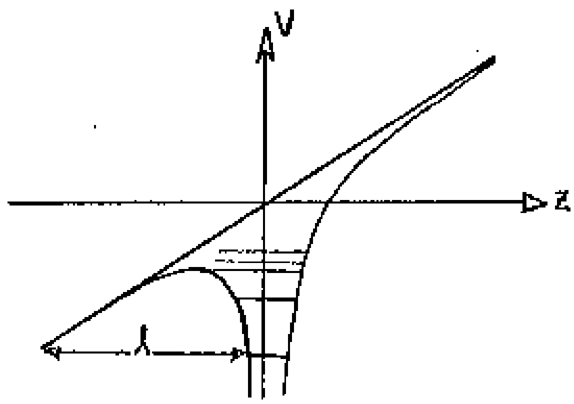

Fig. 1-b

A energia mínima exigida para alcançar este continuum, a partir do estado fundamental, é a energia de ionização I_o. Quando se tem o átomo interagindo com um campo elétrico estático $\vec{E}$, na direção de Z, o potencial total se torna $V = -\frac{Ze^2}{r} + eEz$, cuja forma se mostra na figura 1-b. Definamos ℓ, a dimensão linear da região onde o elétron, no estado fundamental, pode atingir o continuum, via tunelamento quântico, pela relação $\ell = \frac{I_o}{eE}$. Definamos, também, os parâmetros introduzidos por Keldysh γ e ξ, onde $\gamma = \frac{\omega}{\omega_t}$ (frequência do campo/frequência de tunelamento) e $\xi = \frac{I_o}{\hbar\omega}$ que é o número de quanta necessários para se promover a ionização pela absorção simultânea de ξ fótons. A frequência de tunelamento ω_t obtém-se a partir da velocidade V_o do elétron, através de

$$\omega_t = \frac{V_o}{2\ell} \quad \text{onde} \quad V_o = \sqrt{\frac{2I_o}{m_e}} . \tag{3.1}$$

Quando o parâmetro $\gamma << 1$ o campo parece quase estático, os elétrons sofrem tunelamento e vale a equação de tunelamento de Landau

$$P \simeq \frac{4m_e^3 e^9}{\hbar^2 \varepsilon} \exp\left[- \frac{2}{3} \frac{E_o}{E} \right] \tag{3.2}$$

No limite oposto, isto é quando o parâmetro de Keldysh $\gamma >> 1$, a dependência temporal do campo é essencial e a probabilidade de ionização multifotônica decresce exponencialmente com o número de quanta envolvidos, ξ. Para campos suficientemente fortes, tem-se a ionização direta a partir do estado fundamental e a teoria de tunelamento deixa de ser válida.

Em nossa consideração do problema de fotoionização em campo intenso, terá papel fundamental nossa hipótese de que, para campos suficientemente intensos, não é correto usar como estado de partida do elétron, na transição ionizante, um estado atômico na ausência de campo, pois a presença do laser modifica substancialmente estes estados. Portanto, devemos, inicialmente, considerar o problema de um atómo num campo de laser intenso, o que faremos dentro da formulação de Lima e Miranda[1,29].

Comecemos escrevendo a hamiltoniana que governa os estados eletrônicos num átomo de hidrogênio, sob ação de um campo eletromagnético clássico:

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} (\bar{P} + \frac{e}{c} \vec{A}(t))^2 - \frac{e^2}{|\vec{r}|} \qquad (3.3)$$

Aqui $\vec{A}(t)$ representa o potencial vetor do campo eletromagnético, na chamada aproximação de dipolo (ver referência36). A função de onda eletrônica para este hamiltoniano é determinada por

$$i\hbar\dot{\psi} = \bar{H}\psi \qquad (3.4)$$

(onde $\dot{\psi} = \frac{d\psi}{dt}$)

Para tentar obter uma solução analítica para a Eq.(3.4) vamos, primeiramente, transformar esta equação com o já referido método de translação espacial (MTE) de Henneberger[10]. O MTE foi introduzido como uma alternativa para as descrições de estados atômicos, em presença de campos de laser intensos, que usam a teoria de perturbação dependente do tempo. A idéia original era obter-se um potencial de interação efetivo determinado pela média temporal dos efeitos combinados do campo coulombiano e do campo do laser. Os estados atômicos correpondentes a este potencial efetivo representaram uma melhoria sobre os estados não-perturbados, normalmente usados na teoria da perturbação convencional.

Basicamente, o MTE consiste no uso da uma tranformação unitária[1,9], com dependência temporal tal que na equação de Schrödinger tranformada para o elétron atômico, o núcleo aparece como se estivesse oscilando com uma frequência igual ao laser e com amplitude igual a do deslocamento clássico de um elétron livre num campo de radiação. A transformação unitária usada por Hennberger é a mesma proposta por Kramers[33] para remover divergências em eletrodinâmica quântica não-relativística, na aproximação de dipolo.

No presente caso, esta transformação assume a forma

$$U = \exp\left(i\vec{\delta}(t)\cdot\hat{p}/\hbar\right)\exp\left(i\eta(t)\right). \qquad (3.5)$$

onde

$$\vec{\delta}(t) = \frac{-e}{mc}\int^{t}\vec{A}(t')\,dt' \qquad (3.6)$$

e

$$\eta(t) = -\frac{e^2}{2mc^2\hbar}\int^{t} dt'\,\vec{A}^2(t') \qquad (3.7)$$

Nas eqs.(3.6)(3.7) o potencial vetor será tomado como $\vec{A}(t) = A(\hat{x}\cos\omega t + \hat{y}\,\mathrm{sen}\,\omega t)$, isto é uma onda circularmente polarizada, propagando-se na direção OZ.

Definindo ϕ por

$$\psi(\vec{r},t) = U\phi(\vec{r},t) \qquad (3.8)$$

tem-se (ver apêndice A)

$$i\hbar\dot{\phi} = \tilde{H}\phi \qquad (3.9)$$

onde

$$\tilde{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{\delta}(t)|} \qquad (3.10)$$

Baseando-se no MTE, a chamada aproximação de translação espacial (ATE) consite em, de saída, desprezar o deslocamento $\vec{\delta}(t)$ no termo de energia potencial na eq.(3-10), por completo. Isto significa que, na ATE, toma-se a solução da eq. (3.9), $\phi(\vec{r},t)$, como sendo a solução do problema na ausência de campo. Isto pode ser uma aproximação razoável[10] se ocorrer que $|\vec{\delta}(t)| = a = \frac{eA}{m\omega c}$ se torne muito pequeno, comparado com uma dimensão característica do sistema (átomo de hidrogênio, no caso), ou seja se $a \ll a_0$ (Raio de Bohr). Podemos melhorar esta aproximação expandindo

$$V(\vec{r} - \vec{\delta}(t)) = V(\vec{r}) - (\vec{\delta}.\vec{\nabla})\ V(\vec{r}) + \ldots \qquad (3.11)$$

e tratando o segundo termo como uma perturbação do problema na ausência de campo. Este procedimento leva, essencialmente, aos mesmos resultados que aqueles da aproximação de Keldysh[7].

Segundo Henneberger[10] quando se trabalha com a média temporal do hamiltoniano transformado (eq. (3.10)),

$$<\tilde{H}> = \frac{\tilde{p}^2}{2m} - \frac{e^2}{2} \int d^3r\ \frac{e^{i\vec{k}_0.\vec{r}}}{k^2}\ J_0(\vec{k}.\vec{a}) \qquad (3.12)$$

os correspondentes auto-estados de energia ficam dependentes da intensidade do campo e representam uma melhoria sobre o que se consegue com a teoria da perturbação usual. Na eq.(3.12) $|\vec{a}|$ é a amplitude de oscilação do elétron no campo de laser obtida da expressão para $\vec{\delta}(t)$.

Desde sua proposição original, o MTE vem usado em várias áreas da Física de Campos Intensos. Assim, por exemplo, já foi usada em problemas de estrutura de níveis de energia, ionização multifotônicas, colisões atômicas assistidas por lasers, etc. e tem sofrido algumas críticas como no caso de seu uso para cálcular mudanças nos potenciais de ionização. Aqui, a crítica é de que o cálculo dos desvios apenas com a parte não-dependente do tempo do potencial efetivo, não é bastante para explicar todo o desvio observado. Este ponto foi esclarecido posteriormente[34] demonstrando-se que o uso apropiado do Hamiltoniano transformado, no cálculo dos desvios de energia, requer a inclusão de termos além do termo d.c. Em outras pala vras, para obter a variação correta do potencial de ionização torna-se necessário incluir, usando teoria de perturbação de 2ª ordem, a contribuição do primeiro termo dependente do tempo do potencial coulombiano transformado na eq. (3.10). Isto feito, prova-se que os resultados obtidos com MTE coincidem com aqueles da teoria de perturbação convencional.

Uma forma mais apropriada de ser avaliar as implicações do MTE é produzir uma parametrização adequada da média temporal do potencial "vestido" pelo laser (potencial efetivo) a fim de, através de uma expansão adequada, conseguir-se acumular, num número razoavelmente pequeno de termos, a quase totalidade dos efeitos dinâmicos do campo sobre o sistema. Isto foi levado a cabo por Lima e Miranda não só no caso atômico[1,12,24] como no caso molecular[35,36] em sólidos[37] etc. Em resumo, seu procedimento consistiu em gerar a seguinte expansão para o potencial vestido, no caso de um laser circularmente polarizado:

$$V(\vec{r}-\delta(t)) = -\frac{e^2}{|\vec{r}-\vec{\delta}(t)|} = -\frac{e^2}{(r^2+a^2)^{1/2}}\left[1-\frac{2\vec{r}\cdot\vec{\delta}(t)}{r^2+a^2}\right]^{-1/2} = V_{dc}+V_{ac} \tag{3.13}$$

onde

$$a = |\vec{\delta}(t)| = \frac{eA}{m\omega c}$$

$$V_{dc} = \frac{e^2}{(r^2+a^2)^{1/2}}\left\{1+\frac{3}{4}\frac{r^2a^2\operatorname{sen}^2\theta}{(r^2+a^2)^2}+\dots\right\} = V_0+V_2+\dots =$$

$$= -\frac{e^2}{(r^2+a^2)^{1/2}}\sum_{M=0}^{M}\frac{(4\mu)!}{2^{4\mu}(2\mu)!(\mu!)^2}\left(\frac{ra}{r^2\mp a^2}\right)^{2\mu}\operatorname{sen}^{2\mu}(\theta) \tag{3.14}$$

e

$$V_{ac} = - \frac{e^2}{(r^2+a^2)^{1/2}} \{ \frac{\vec{r}.\vec{\delta}(t)}{r^2+a^2} - \frac{3}{4} \frac{r^2a^2 \operatorname{sen}^2\theta \cos[2(\omega t - \phi)]}{(r^2+a^2)^2}$$

$$+ \frac{3.5}{4!} (\frac{\vec{r}.\vec{\delta}(t)}{r^2+a^2})^3 + \ldots \} \qquad (3.15)$$

Na Eq. (3.14) o limite M na soma sobre μ em V_{dc} indica até que ordem se quer levar a descrição do potencial d.c. A distorção introduzida pelo laser no potencial de ligação está contida no potencial d.c. Em outras palavras, os termos a.c. dão conta dos acoplamentos entre os estados vestidos, induzindo assim as transições. Eles, também, contribuem para os desvios de energia nos estados vestidos de V_{dc}, através de efeitos dinâmicos de 2ª ordem ou ordens mais altas.

Como neste trabalho estamos interessados, mais do que em resultados quantitativos apurados, em poder pôr em evidência a importância de se levar em conta de forma não-perturbativa os efeitos do laser em toda sua plenitude, vamos proceder nossos cálculos usando apenas o primeiro termo da expressão de V_{dc}, i.e. trabalharemos com o potencial efetivo em ordem zero. Sabemos que, com isto, estamos deixando de lado os efeitos sobre os potenciais de ionização não só dos demais termos de V_{dc} mas também das contribuições dos termos de V_{ac} que quando integrados aos efeitos de $(V_0)_{dc}$ dão o espectro atômico vestido contendo, em toda sua plenitude, os efeitos induzidos pelo laser intenso, o principal dos quais é enfraquecer a ligação coulombiana elétron-núcleo como mostrado anteriormente por vários autores[1,12,38]. Na verdade, devemos mencionar que em trabalhos anteriores, Lima, Miranda[1,24,38] et al. mostraram que para efeitos qualitativos (e mesmo quantitativos) a aproximação do potencial efeti vo por V_o é bastante boa, podendo a inclusão dos efeitos dos demais termos V_{dc} e V_{ac} ser feita através de formulações perturbativas. Note-se, a propósito, que tomada como um todo a expansão fica:

$$V(\vec{r}-\vec{\delta}(r)) = \frac{-e^2}{(r^2+a^2)^{1/2}}[1-\frac{2\vec{r}.\vec{\delta}(t)}{r^2+a^2}]^{-1/2} = \frac{-e^2}{(r^2+a^2)^{1/2}}\{1+\frac{\vec{r}.\vec{\delta}(t)}{r^2+a^2}+\ldots\}$$

(3.16)

e que sendo

$$0 \le (\frac{\vec{r}.\vec{\delta}(t)}{r^2+a^2})^n \le (\frac{1}{2})^n \tag{3.17}$$

a expansão é convergente, independentemente da intensidade do laser, o que dá plausibilidade à asserção (também numericamente comprovada) de $V_o = -\frac{e^2}{(r^2+a^2)^{1/2}}$ como o termo mais representativo do potencial efetivo e que contém, através do parâmetro $a^2 \alpha \Lambda^2 \alpha I$, a influência intrínseca da presença do laser no potencial de ligação atômica.

Passamos, então, agora, à solução da eq.(3.9) tomada na forma

$$i\hbar\dot{\phi} = (\frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{(r^2+a^2)^{1/2}})\phi \tag{3.18}$$

Vamos usar o método variacional para obtê-la. Para o estado fundamental usemos como função de teste o estado fundamental hidrogênio, i.e.

$$\phi_o = (\frac{\beta^3}{\pi})^{1/2} e^{-\beta r} e^{-i\xi_o t/\hbar} \tag{3.19}$$

onde o parâmetro variacional β obtém-se da condição que

$$<\phi_o \mid \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{(r^2+a^2)^{1/2}} \mid \phi_o> \tag{3.20}$$

Seja mínimo com respeito a β.

Escrevendo a equação (3.20) como

$$<\phi_o \mid H \mid \phi_o> = \frac{<p^2>}{2m} - < \frac{e^2}{(r^2+a^2)^{1/2}} > \tag{3.21}$$

onde

$$\frac{< p^2 >}{2m} = \frac{1}{2m} \int \phi_o^* \, i^2 \hbar^2 \nabla^2 \phi_o dV , \tag{3.22}$$

obtem-se, após os cálculos indicados,

$$\frac{< p^2 >}{2m} = \frac{\beta^2 \hbar^2}{2m} \tag{3.23}$$

e

$$< \frac{e^2}{(r^2+a^2)^{1/2}} > = \int A^2 e^{-\beta r} e^{-iE_o t/\hbar} \frac{e^2}{(r^2+a^2)^{1/2}} e^{-\beta r} e^{+iE_o t/\hbar} \, dV =$$

$$= 4e^2 \beta^3 \; I_1(\beta) \tag{3.24}$$

onde

$$I_1 \; (\beta) = \int_o^\infty \frac{r^2 e^{-2\beta r}}{(r^2+a^2)^{1/2}} \, dr \tag{3.25}$$

Resumindo temos:

$$< \phi_o \mid H \mid \phi_o> = \frac{\beta^2 \hbar^2}{2m} - 4\beta^3 e^2 \; I_1 \; (\beta) \tag{3.26}$$

A condição de mínimo requer

$$\frac{\partial}{\partial \beta} < \phi_o \mid H \mid \phi_o > = 0 \tag{3.27}$$

de onde resulta

$$\frac{2\beta\hbar^2}{2m} - \left(12\beta^2 e^2 I_1(\beta) + 4\beta^3 e^2 I_1'(\beta)\right) = 0 \tag{3.28}$$

Façamos $\beta = \frac{\eta}{a}$ e introduzamos a mudança de variável $\frac{r}{a} = x$. Então, a condição de mínimo se expressa como

$$\frac{\eta}{\lambda} = 12\,\eta^2 I_1(\eta) - 8\eta^3 I_2(\eta) \tag{3.29}$$

onde

$$I_1(\eta) = \int_0^\infty \frac{dx\; x^2 e^{-2\eta x}}{(x^2+1)^{1/2}} \tag{3.30}$$

$$I_2(\eta) = \int_0^\infty \frac{dx\; x^3 e^{-2\eta x}}{(x^2+1)^{1/2}} \tag{3.31}$$

$$\lambda = a/a_0 \quad \text{e} \quad a_0^{-1} = \frac{me^2}{\hbar^2} \tag{3.32}$$

Então, designando por $\bar{\beta}$ o valor de β para o qual se tem a condição de mínimo satisfeita, obtém-se para $E_0 = \langle\phi_0|H|\phi_0\rangle_{min}$

$$E_0 = \frac{\bar{\beta}^2\hbar^2}{2m} - 4\bar{\beta}^3 e^2 \bar{I}_1(\bar{\beta}) \tag{3.33}$$

onde

$$\bar{I}_1(\bar{\beta}) = \int_0^\infty \frac{r^2 e^{-2(\bar{\beta})r}}{(r^2+a^2)^{1/2}}\, dr \tag{3.34}$$

Fazendo $\frac{r}{a} = x$ e $\frac{\bar{\eta}}{a} = \bar{\beta}$

temos

$$\bar{I}_1\left(\frac{\bar{\eta}}{a}\right) = a^2 \bar{I}_1(\bar{\eta}) \tag{3.35}$$

e, portanto,

$$E_o = \frac{\bar{\eta}^2\hbar^2}{2a^2m} - \frac{4\bar{\eta}^3}{a} e^2\bar{I}_1(\bar{\eta}) \tag{3.36}$$

Fazendo, ainda,

$$\epsilon_o = \frac{E_o}{(-e^2/a)} \quad \text{e usando} \quad \frac{1}{a_o} = \frac{me^2}{\hbar^2} \tag{3.37}$$

tem-se

$$\epsilon_o = \frac{-\bar{\eta}^2}{2\lambda} + 4\bar{\eta}^3\bar{I}_1(\bar{\eta}) \tag{3.38}$$

i.e. em unidades atômicas, a Eq. (3.36) equivale a:

$$\frac{2}{\lambda}\epsilon_o = \frac{2}{\lambda}\left(4\bar{\eta}^3 I_1(\bar{\eta}) - \frac{\bar{\eta}^2}{2\lambda}\right) \tag{3.39}$$

Para se obter $\bar{\eta}(\lambda)$ e $\epsilon_0(\lambda)$ a partir das equações acima, desenvolvemos um programa de cálculo Fortran para o computador VAX 11 VMS . As integrais foram calculadas usando-se códigos otimizados que exploram o Método de Simpson. Desenvolvemos, também, programas para apresentação gráfica dos resultados, utilizando sub-rotinas especiais da biblioteca de programas do VAX.

Os resultados deste cáculos para energia do estado fundamental E_0 e o parâmetro variacional β para diversos valores de intensidade do laser, estão mostrados na Tabela I e apresentados graficamente nas Figs. 2 e 3. Em nossos cálculos, introduzimos os parâmetros adimensionais $\lambda = \frac{a}{a_o}$, que mede a intensidade do laser, pois $\lambda = \frac{a}{a_0} = 6.5 \times 10^{24}\,\omega^{-2} I^{1/2}$ relaciona o valor de λ com a frequência e a intensidade do laser, ϵ_0 como uma medida da energia do estado fundamental em unidades de $\frac{e^2}{a}$, i.e., $E_0 = -\frac{e^2\epsilon_0}{a}$ e $\eta = \beta a$ como uma medida do parâmetro variacional β em unidades de a^{-1}. Note que na Figura 2 temos o gráfico de ϵ_0 e η como função de λ, enquanto que na Figura 3 te

TABELA I

$E_I(R_y)=\frac{2\varepsilon_0}{\lambda}$	$E_I/(e^2/a)$	η	λ	λ/η
.98	.025	.05	.05	1.0
.49	.29	.6	1.2	2.0
.37	.38	.8	2.0	2.5
.28	.45	1	3.2	3.2
.22	.51	1.2	4.7	3.9
.17	.56	1.4	6.7	4.8
.13	.61	1.6	9.3	5.8
.1	.65	1.8	13	7.0
.082	.68	2.0	17	8.4
.066	.71	2.2	22	9.9

Tabela I - Valores de energia de ionização do átomo de hidrogênio, medido em Rydbergs (coluna 1) e em unidades de e^2/a (coluna 2) em função do parâmetro de intensidade de campo λ e os correspondentes valores de $\eta = \beta a = \beta\lambda a_0$ e $(\lambda/\eta) = (\beta a_0)^{-1}$.

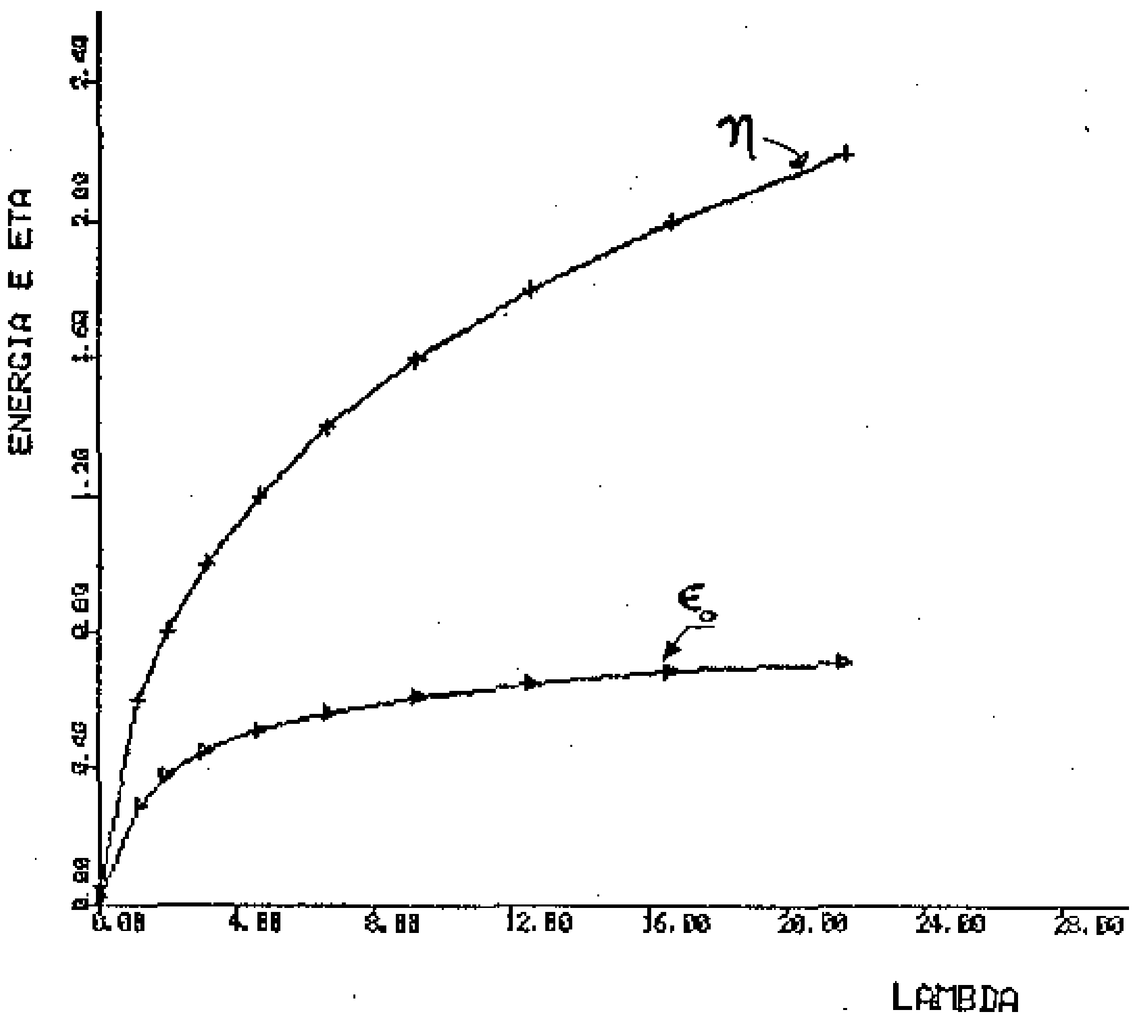

Fig. 2- Variação da $\varepsilon_o = E_I/(e^2/a)$ i.e. da energia para o átomo de hidrogênio e do parâmetro adimensional η em função do parâmetro de intensidade de campo $\lambda = 6,5 \times 10^{24}\ \omega^{-2}\sqrt{I}$ (ω em rad/s e I em Watt/cm^2).

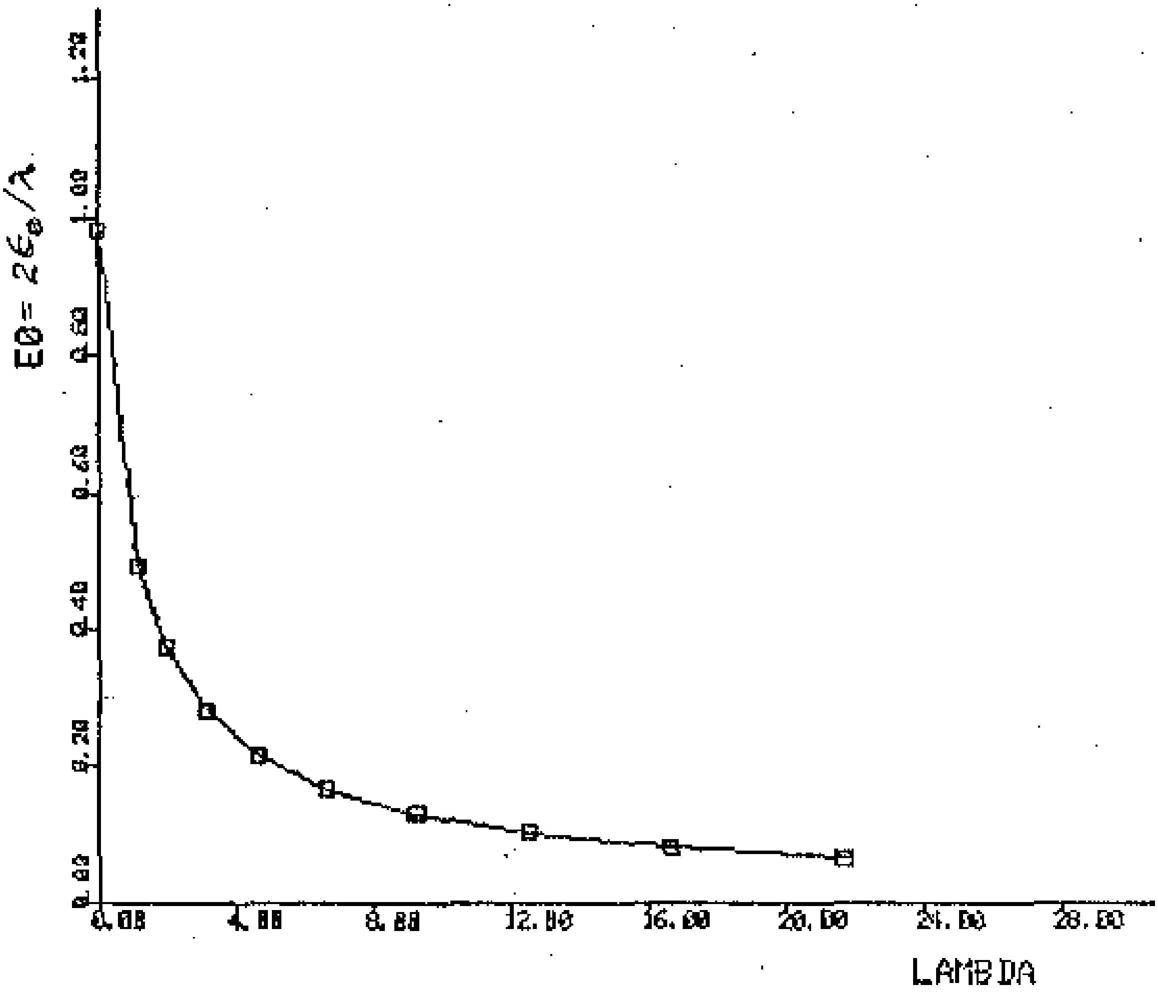

Fig. 3 - Variação do potencial de ionização (em Rydbergs) para átomo de hidrogênio em função do parâmetro de intensidade do campo $\lambda = 6,5 \times 10^{24} \omega^{-2} \sqrt{I}$.

mos a energia do estado fundamental do átomo vestido pelo laser em unidades atômicas i.e

$$E_o = \frac{-e^2}{a}\,\varepsilon_o = \frac{-e^2}{2a_o}\cdot\frac{2a_o}{a}\,\varepsilon_o = \frac{-e^2}{2a_o}\left(\frac{2\varepsilon_o}{\lambda}\right) = \frac{2\varepsilon_o}{\lambda}\,R_y \qquad (3.40)$$

num gráfico em função de λ. Fica claro, na Figura 3, que para pequenos λ temos o resultado esperado para o do átomo na ausência do campo, i.e. $\frac{2\varepsilon_o}{\lambda} \to 1$ enquanto que para λ grande (campos muito intensos) a energia do estado fundamental varia, essencialmente, como λ^{-1}. Na Figura 4, finalmente, temos o gráfico do parâmetro de comprimento do estado fundamental, isto é $(\beta a_o)^{-1} = \frac{\lambda}{\eta}$) em função do campo de laser (i.e de λ). Novamente temos que no limite de campos fracos se obtém-se o valor na ausência de campo, i.e $\frac{\lambda}{\eta} \to 1$ enquanto que para λ grande, i.e. campos fortes, β^{-1} varia proporcionalmente a λ. Vemos assim que o efeito do campo intenso de laser é enfraquecer a ligação elétron-núcleo de tal forma que tanto β como E_o tornam-se funções monotonicamente decrescentes da intensidade do campo de laser. É claro que subjacente a estes resultados está a condição de validade de aproximação de dipolo o que exige que, qualquer que seja I, β^{-1} deve manter-se menor que o comprimento de onda do laser, isto é, $\frac{2\pi c}{\omega} > \frac{a}{\eta}$. Esta condição estabelece um limite superior de intensidade que, não obstante, não tem mais que um significado acadêmico pois situa-se bem acima das intensidades práticas que se pode atingir, mesmo com os lasers mais potentes da atualidade.

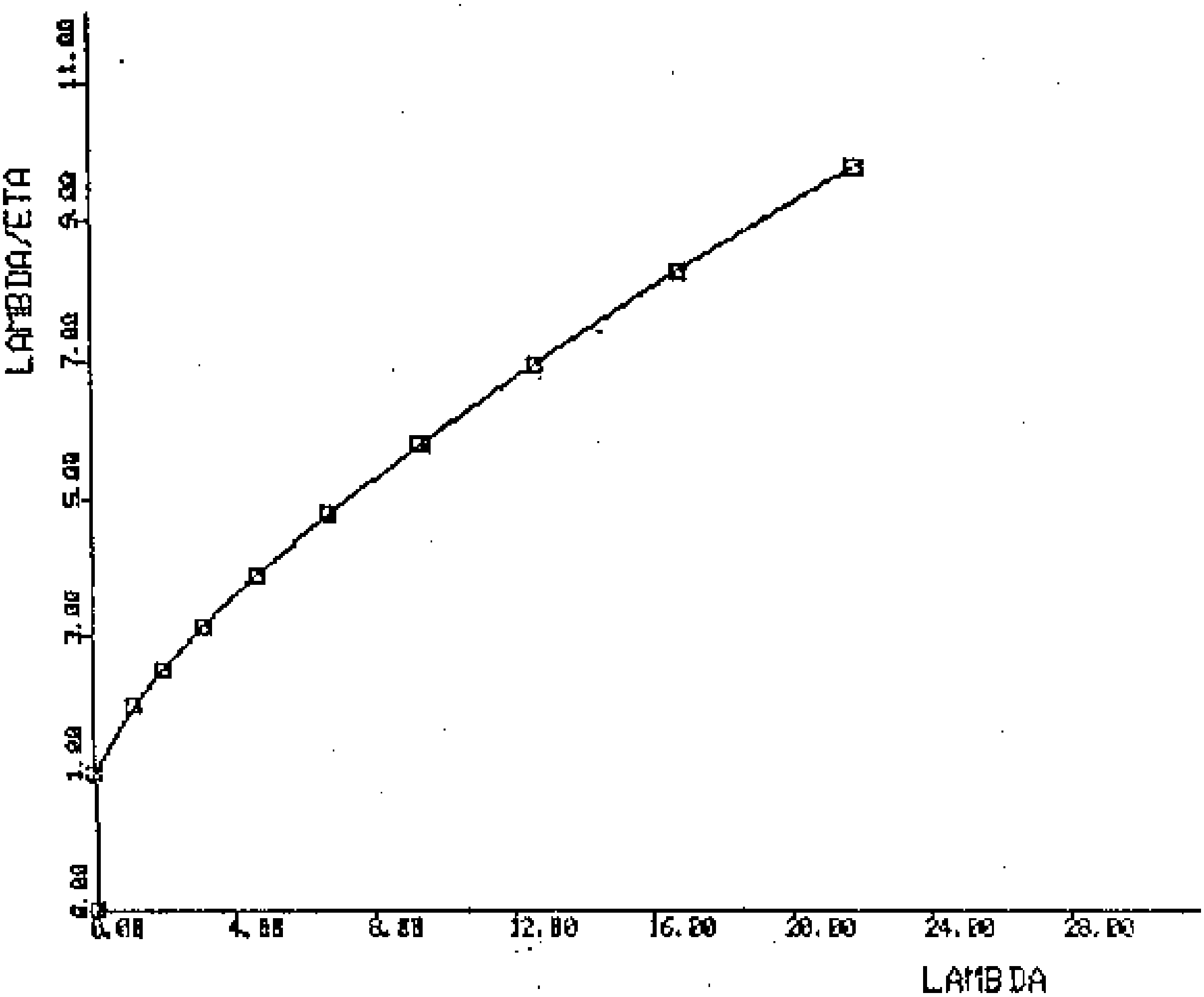

Fig.4 - Variação do parâmetro $\frac{\lambda}{\eta} = (\beta a_o)^{-1}$ em função do parâmetro $\lambda = 6,5 \times 10^{24}\ \omega^{-2}\sqrt{I}$

CAPÍTULO IV

IONIZAÇÃO MULTIFOTÔNICA NUM CAMPO DE LASER

Como enfatizamos no Capítulo I, nosso interesse básico é estudar a dependência da taxa de ionização a muitos fótons induzida pela presença de um campo de laser suficientemente intenso. Na formulação que será dada a seguir incorporaremos nosso conhecimento sobre as funções de onda e os estados vestidos do átomo no campo intenso, obtido no Capítulo III. De fato, lá demonstramos que as soluções $\psi(\vec{r}, t)$ da equação de Schrödinger para o átomo no campo de laser, que satisfazem a equação contendo o hamiltoniano completo, estão associadas aos autoestados $\phi(\vec{r}, t)$ do problema estacionário que descreve os efeitos d.c. do campo sobre o sistema (efeitos temporais médios), que são soluções do problema de autovalores para o hamiltoniano com o potencial coulombiano distorcido pelo campo (Eq.(3.10)) na aproximação que usamos). É entre os níveis de energia deste sistema (eletron num átomo, ligado por um campo coulombiano modificado) que o campo eletromagnético, através de suas interações diretas (dependentes do tempo) com o elétron, induzirá transições de dipólo elétrico. Para campos suficientemente intensos, mesmo quando $\hbar\omega$ é muito inferior ao limiar de ionização, estas transições podem envolver a participação de um número adequado de fótons e promover a ionização multifotônica do átomo.

Lembremos agora que, para transições entre estados distintos $|i\rangle$ e $|f\rangle$ induzidos por um campo de laser ligado (desligado) em $t = -\infty$ ($t = +\infty$) a amplitude de transição de

$|i\rangle$ para $|f\rangle$ é dada, em termos da matriz S, ou equivalentemente da matriz T por:

$$S_{fi} = \langle f|S|i\rangle = -2\pi i \; T_{fi}\delta(E_i - E_f) \tag{4.1}$$

Podemos, na verdade, ver que em completa consistência com a equação acima podemos escrever:

$$S_{fi} = -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt \; T_{fi} \; e^{-\frac{i}{\hbar}(E_i - E_f)t} \tag{4.2}$$

No nosso caso, a transição ionizante será considerada entre o estado fundamental $|i\rangle$ de um átomo de hidrogênio distorcido pelo laser, que como vimos no capítulo anterior é (Eq.(3.19)).

$$|i\rangle = e^{i\vec{\delta}(t).\vec{p}/\hbar} \left(\frac{\beta^3}{\pi}\right)^{1/2} e^{-\beta r} \; e^{-iE_o t/\hbar} \tag{4.3}$$

com energia E_o, que depende da intensidade do campo, conforme a fig 2 e 3 e o estado $|f\rangle$ de um elétron livre, exceto pela interação residual com o caroço iônico, isto é:

$$E_f|f\rangle = \left(\frac{\vec{p}^{\,2}}{2m} - \frac{e^2}{|\vec{r}|}\right)|f\rangle \tag{4.4}$$

Podemos, no entanto, considerar a interação residual de estado final como uma pequena perturbação do estado de partícula livre do elétron e, assim, desprezá-la. Em outras palavras, tomaremos

$$|f\rangle = e^{i\vec{k}.\vec{r}} \; e^{+i\frac{\hbar k^2 t}{2m}} \tag{4.5}$$

com energia $E_f = \frac{p^2}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ (4.6)

O operador de transição $\hat{T}$ representa, como dissemos, uma transição de dipolo, i.e. $\hat{T} = \frac{e\vec{A}(t).\hat{p}}{mc}$, onde $\hat{p}$ é o operador de momentum para o elétron e $\vec{A}(t)$ é o potencial vetor do campo eletromagnético na aproximação de dipolo que, conforme o Capítulo III, tomaremos como um campo de radiação circularmente polarizado:

$$\vec{A}(t) = A_o(\hat{x}\cos\omega t + \hat{y}\,\text{sen}\omega t)$$

$$= \frac{A_o}{2}(\vec{\varepsilon}_- e^{i\omega t} + \vec{\varepsilon}_+ e^{-i\omega t}) \tag{4.7}$$

onde $\vec{\varepsilon}_\pm = \hat{x} \pm i\hat{y}$.

Voltando, então, à Eq. (4.2) temos

$$S_{fi} = -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt \int d^3\vec{r}\; e^{-i\vec{k}.\vec{r}}\, e^{i\hbar k^2 t/2m} \left(\frac{e}{mc}\vec{A}(t).\hat{p}\right) e^{i\vec{\delta}(t).\hat{p}/\hbar} \left(\frac{\beta^3}{\pi}\right)^{1/2} e^{-\beta r}\, e^{-iE_o t/\hbar} \tag{4.8}$$

Usando a hermiticidade de $\hat{p} = -i\hbar\vec{\nabla}$ e o fato de que se $\hat{p}\phi_p = \vec{p}\phi_{\vec{p}}$ então $f(\hat{p})\phi_p = f(\vec{p})\phi_{\vec{p}}$

onde $\phi_{\vec{p}}$ é autofunção de $\hat{p}$ com autovalor $\vec{p}$, vem

$$S_{fi} = -\frac{i}{\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} dt \int d^3\vec{r}\, [\,(e^{i\vec{\delta}(t).\hat{p}/\hbar}\, \frac{e}{mc}\,\vec{A}(t).\hat{p})e^{-i\vec{k}.\vec{r}}\,]\,(\frac{\beta^3}{\pi})^{1/2} e^{-\beta r} e^{i(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_o)t/\hbar}$$

$$= -i\int_{-\infty}^{\infty} dt\; e^{i(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_o)t/\hbar}\, e^{i\vec{\delta}(t).\vec{k}}\, \frac{e}{mc}\,\vec{A}(t).\vec{k}\int d^3\vec{r} e^{-\beta r}\, e^{-i\,\vec{k}.\vec{r}} (\frac{\beta^3}{\pi})^{1/2} \qquad (4.9)$$

Resolvamos a integral em $\vec{r}$:

$$\int d^3\vec{r}\; e^{-\beta r} e^{-i\vec{k}.\vec{r}} = \int_0^{\infty} r^2 dr \int_{-1}^{1} d(\cos\theta) \int_0^{2\pi} d\phi\; e^{-\beta r}\; e^{+kr\cos\theta} = 2\pi i \int_0^{\infty} drr^2 e^{-\beta r} [\,\frac{e^{-ikr} - e^{ikr}}{kr}\,]$$

$$= \frac{2\pi i}{k}\int_0^{\infty} drr(e^{-(\beta+ik)r} - e^{-(\beta-ik)r}) = \frac{8\pi\beta}{(\beta^2 + k^2)^2} \qquad (4.10)$$

Com este resultado e com a expressão para $\vec{A}(t)$, vem:

$$S_{fi} = -i\,\frac{eA_o}{2mc}\,(\frac{\beta^3}{\pi})^{1/2}\,\frac{8\pi\beta}{(\beta^2+k^2)^2}\,[\int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i\vec{\delta}(t).\vec{k}}\; e^{i(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_o - \hbar\omega)t/\hbar}\; \vec{\varepsilon}_+.\vec{k} +$$

$$+ \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_o + \hbar\omega)t/\hbar}\; \vec{\varepsilon}_-.\vec{k}\, e^{i\vec{\delta}(t).\vec{k}}$$

$$= -i(\frac{\beta^3}{\pi})^{1/2}\,\frac{4\pi e A_o \beta}{mc(\beta^2+k^2)^2}\,[\,\vec{\varepsilon}_+.\vec{k}\int_{-\infty}^{\infty} dte^{i(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_o - \hbar\omega)t/\hbar}\; e^{ik_{\perp} a\,\mathrm{sen}(\phi_k - \omega t)} + \qquad (4.11)$$

$$+ \vec{\varepsilon}_-.\vec{k}\int_{-\infty}^{\infty} dte^{i(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_o + \hbar\omega)t/\hbar}\; e^{ik_{\perp} a\,\mathrm{sen}(\phi_k - \omega t)}$$

onde usamos:

$$\vec{\delta}(t).\vec{k} = |\vec{\delta}(t)| k_{\perp} \cos(\phi_k - \omega t - \pi/2) = a k_{\perp} \operatorname{sen}(\phi_k - \omega t) \qquad (4.12)$$

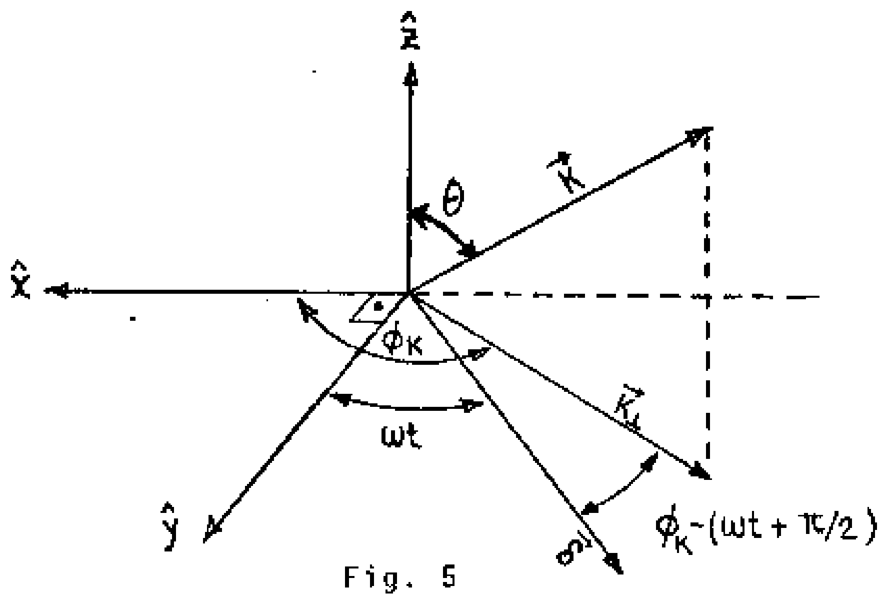

Fig. 5

visto que $\vec{\delta}(t)$ está contido no plano xy

Para resolver a integral temporal usaremos a expansão(39).

$$e^{i\alpha \operatorname{sen}\theta} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(\alpha)\, e^{in\theta} \qquad (4.13)$$

onde $J_n(x)$ é a função de Bessel de ordem n.

Assim, por exemplo,

$$\int dt\, e^{i(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_o - \hbar\omega)t/\hbar}\, e^{ik_{\perp} a \cos(\phi_k - \omega t)} =$$

$$= \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} J_\nu(k_\perp a) \int_{-\infty}^{\infty} dt\, e^{i(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_o - \hbar\omega)t/\hbar}\, e^{i\nu(\phi_k - \omega t)}$$

$$= 2\pi\hbar \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} J_\nu(k_\perp a)\, e^{i\nu\phi_k}\, \delta(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - E_o - (\nu+1)\hbar\omega) \qquad (4.14)$$

onde usamos $\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{ixt}$ e $\delta(ax) = \frac{1}{|a|}\delta(x)$.

Lembremos agora que, de acôrdo com a Eq. (3.6) tem-se $a = |\vec{\delta}(t)| = \frac{eA_0}{mc\omega}$. Podemos, assim, reescrever a Eq(4.11) na forma:

$$S_{fi} = -2\pi i\left\{ \frac{\hbar\omega a}{2}\left(\frac{\beta^3}{\pi}\right)^{1/2} \frac{8\pi\beta}{(\beta^2+k^2)^2}\left[\sum_{\nu=-\infty}^{\nu=\infty} e^{i\nu\phi_k} J_\nu(k_\perp a)(\vec{\epsilon}_+\cdot\vec{k})\delta\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m} - E_0-(\nu+1)\hbar\omega\right) + \right.\right.$$

$$\left.\left. + \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} e^{i\nu\phi_k} J_\nu(k_\perp a)(\vec{\epsilon}_-\cdot\vec{k})\delta\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m} - E_0-(\nu-1)\hbar\omega\right)\right]\right\} \tag{4.15}$$

Notemos que $\vec{\epsilon}_\pm\cdot\vec{k} = k_x \pm ik_y = k_\perp e^{\pm i\alpha}$, onde $k_\perp = (k_x^2 + k_y^2)^{1/2}$.

Assim, redefinindo convenientemente o índice de soma, nas duas parcelas, fazendo $\nu \to \nu \pm 1$, conforme o caso, temos:

$$S_{fi} = -2\pi i\left\{\frac{\hbar\omega}{2}\left(\frac{\beta^3}{\pi}\right)^{1/2} \frac{8\pi\beta}{(\beta^2+k^2)^2}\left[\sum_{\nu=-\infty}^{\infty} e^{i\nu\phi_k}(k_\perp a e^{i\gamma}J_{\nu-1}(k_\perp a)+k_\perp a e^{-i\gamma}J_{\nu+1}(k_\perp a)).\right.\right.$$

$$\left.\left. .\,\delta\left(\frac{\hbar^2k^2}{2m} - E_0 - \nu\hbar\omega\right)\right]\right\} \tag{4.16}$$

onde $\gamma = \alpha - \phi_k$. Na verdade, $\gamma = 0$ pois como se pode ver na Fig. 5 o azimute de $\vec{k}$ e a fase α do complexo $k_x + ik_y$ coincidem. Podemos, agora fazer uso da relação (39).

$$2nJ_n(x) = xJ_{n-1} + x\,J_{n+1}(x) \tag{4.17}$$

Assim:

$$S_{fi} = - 2\pi i \sum_{\nu=-\infty}^{\infty} \frac{\hbar\omega}{2}\left(\frac{\beta^3}{\pi}\right)^{1/2} \frac{8\pi\beta}{(\beta^2+k^2)^2} \; e^{i\nu\phi_k} \; 2\nu J_\nu(k_\perp a)\,\delta\left[\frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - k_\nu^2)\right] \qquad (4.18)$$

onde definimos

$$k_\nu = \pm \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}(\nu\hbar\omega + E_0)} \qquad (4.19)$$

Lembremos, agora, que a probabilidade de transição por unidade de tempo é dada por [42].

$$W_{fi} = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{fi}|^2 \delta(E_i - E_f) \qquad (4.20)$$

Então, tendo em vista a Eq.(4.20) e a expressão acima para S_{fi} chegamos a seguinte expressão para a probabilidade de ionização, por unidade de tempo, via absorção de ν fotons, com elétrons no estado final com momentum $\hbar\vec{k}$

$$W_{fi}^{\nu}(\vec{k}) = \frac{2\pi}{\hbar}(\nu\hbar\omega)^2 \frac{64\pi\beta^5}{(k^2+\beta^2)^4} \; J_\nu^2(k_\perp a)\,\delta\left[\frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - k_\nu^2)\right] \qquad (4.21)$$

Para obter a taxa total devemos integrar sobre todos os possíveis estados finais, i.e. sobre todos os momento $\vec{k}$ possíveis. Resulta, então:

$$W^{\nu} = \frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3\vec{k}\; W_{fi}^{\nu} = \frac{64 m\omega^2\nu^2\beta^5}{\hbar}\int_0^{\pi} d\theta \operatorname{sen}\theta \int_0^{\infty} \frac{dk\,k^2 J_\nu^2(ka\operatorname{sen}\theta)\,\delta(k^2 - k_\nu^2)}{(k^2+\beta^2)^4} \qquad (4.22)$$

onde usamos $k_\perp = k\operatorname{sen}\theta$ (ver Fig. 5).

Lembrando que

$$\delta(k^2-k_\nu^2) = \frac{1}{2k_\nu}\left[\delta(k-k_\nu) + \delta(k+k_\nu)\right] \qquad (4.23)$$

e que, em virtude de $k \geq 0$, apenas a $\delta(k - k_\nu)$ é relevante, obtém-se

$$W^\nu = \frac{32m\omega^2 a^2}{\hbar}\nu^2(k_\nu a)\ \frac{(\beta a)^5}{(k_\nu^2 a^2+\beta^2 a^2)^4}\int_0^\pi d\theta\, \mathrm{sen}\theta\, J_\nu^2(k_\nu a\,\mathrm{sen}\theta) \qquad (4.24)$$

Vamos, agora, introduzir

$$t = k_\nu a = \left[\frac{2m}{\hbar^2}\,a^2(\nu\hbar\omega+E_0)\right]^{1/2} = \lambda\mu^{1/2}(\nu-\bar{\nu})^{1/2} \geq 0 \qquad (4.25)$$

onde definimos $\mu = \frac{\omega}{\omega_b}$; $\bar{\nu} = \frac{2\varepsilon_0}{\mu\lambda}$; $\hbar\omega_b = \frac{e^2}{2a_0}$

De fato:

$$t^2 = \frac{2ma^2}{\hbar^2}\ \frac{e^2}{e^2}\ (\nu\hbar\omega+E_0) = \frac{2a^2}{e^2 a_0}(\nu\hbar\omega+E_0) = \frac{2a_0\lambda^2}{e^2}(\nu\hbar\omega+E_0) =$$

$$= \frac{\lambda^2}{\hbar\omega_b}\,\hbar\omega\left(\nu+\frac{E_0}{\hbar\omega}\right) = \lambda^2\mu\left(\nu+\frac{E_0}{\hbar\omega}\right) \qquad (4.26)$$

Note-se agora que:

$$E_0 = -\varepsilon_0\frac{e^2}{a} = -\varepsilon_0\frac{e^2}{\lambda a_0} = -\frac{2\varepsilon_0}{\lambda}\ \frac{e^2}{2a_0} = -\frac{2\varepsilon_0}{\lambda}\,\hbar\omega_b$$

$$= -\frac{2\varepsilon_0}{\lambda}\ \frac{\omega_b}{\omega}\,\hbar\omega = -\frac{2\varepsilon_0}{\mu\lambda}\,\hbar\omega \qquad (4.27)$$

ou seja: $\frac{E_o}{\hbar\omega} = -\frac{2\varepsilon_o}{\mu\lambda} = -\bar{\nu}$

Portanto, tem-se efetivamente que

$$t = k_\nu a = [\lambda^2\mu(\nu-\bar{\nu})]^{1/2} = \lambda\mu^{1/2}(\nu-\bar{\nu})^{1/2} \tag{4.28}$$

Assim;

$$k_\nu^2 a^2 + \beta^2 a^2 = \lambda^2\mu(\nu-\bar{\nu}) + \eta^2 = \lambda^2\mu[(\nu-\bar{\nu}) + \frac{\eta^2}{\mu\lambda^2}] \tag{4.29}$$

onde, usamos a definição $\eta = \beta a$.

Note que por definição, $\mu = \frac{\hbar\omega}{\hbar\omega_b}$ mede a energia do fóton em unidades do potencial de ionização do átomo, na ausência do campo de laser, $I = \hbar\omega_b$.

Temos, enfim

$$W^\nu = \frac{32\mu^2\omega_b^2 m\lambda^2 a_o^2}{\hbar} \frac{\nu^2\lambda\mu^{1/2}(\nu-\bar{\nu})^{1/2}\eta^5}{\lambda^8\mu^4[(\nu-\bar{\nu})+\frac{\eta^2}{\mu\lambda^2}]^4} \int_0^\pi d\theta \,\mathrm{sen}\theta J_\nu^2(k_\nu a\,\mathrm{sen}\theta) \tag{4.30}$$

$$= \frac{32}{\mu^{3/2}\hbar} \omega_b(\omega_b a_o \frac{\hbar^2}{e^2})(\frac{\eta}{\lambda})^5 \frac{(\nu-\bar{\nu})^{1/2}\nu^2}{[(\nu-\bar{\nu})+\frac{\eta^2}{\mu\lambda^2}]^4} I_\nu(t)$$

Como $\hbar\omega_b = \frac{e^2}{2a_o}$, vem : $\frac{\hbar\omega_b a_o}{e^2} = 1/2$ e, assim,

$$\omega^\nu = \frac{16\omega_b}{\mu^{3/2}} (\eta/\lambda)^5 \frac{(\nu-\bar{\nu})^{1/2}\nu^2}{[(\nu-\bar{\nu}) + \frac{\eta^2}{\mu\lambda^2}]^4} \nu^2 I_\nu(t) \tag{4.31}$$

onde

$$I_\nu(t) = \int_0^\pi d\theta \operatorname{sen}\theta J_\nu^2(t\operatorname{sen}\theta) = \int_{-1}^{1} dx J_\nu^2(t\sqrt{1-x^2})$$

$$= 2\int_0^1 dx J_\nu^2(t\sqrt{1-x^2}) \tag{4.32}$$

Fazendo a substituição

$$y = t\sqrt{1-x^2} \quad \rightarrow \quad dy = -\frac{t}{y}\sqrt{t^2-y^2}\,dx$$

ou seja $\quad dx = -\dfrac{1}{t}\dfrac{y}{\sqrt{t^2-y^2}}\,dy$

$$x = 0 \quad \rightarrow \quad y = t$$

$$x = 1 \quad \rightarrow \quad y = 0$$

vem:

$$I_\nu(t) = \frac{2}{t}\int_0^t dy \frac{y}{\sqrt{t^2-y^2}} J_\nu^2(y) \tag{4.33}$$

A Eq.(4.31) expressa nosso resultado final para a taxa de ionização a ν fótons, dada em termos de nossos parâmetros adimensionais μ, η, λ e $\bar{\nu}$. Para analisar este resultado torna-se necessário computar $I_\nu(t)$. É possível, na verdade, obter uma expressão fechada para $I_\nu(t)$, porém faremos inicialmente o cálculo de W^ν nos regimes especiais de campo muito fracos e campo ultra-intensos, bem como estimaremos seu comportamento para campos intermediários. O cálculo exato será poste riormente apresentado e utilizado na computação numérica de W^{ν}, visto que será expresso através de uma série com convergência relativamente rápida.

(a.1) - Limite de Campos Fracos

Mostrou-se, no Capítulo III que (ver figuras 3 e 4).

$$\lim_{\lambda \to 0} \frac{\lambda}{\eta} \to 1 \quad , \qquad \lim_{\lambda \to 0} \frac{\varepsilon_0}{\lambda} \to 1 \tag{4.34}$$

Portanto, neste limite (campo fraco)

$$\bar{\nu} = \frac{2\varepsilon_0}{\mu\lambda} - \frac{2}{\mu} \quad \text{e} \quad t = \lambda\mu^{1/2}(\nu-\bar{\nu})^{1/2} - \lambda .$$

Lembrando que a função de Bessel

$J_{\nu}(y)$ para y pequenos toma a forma(39).

$$J_{\nu}^{2}(y) \sim \frac{1}{(\nu!)^2}\,(y/2)^{2\nu} \tag{4.35}$$

e usando as aproximações acima na expressão para a taxa de ionização W^{ν}, chegamos a

$$W^{\nu} \simeq \frac{32\omega_b(\nu-2/\mu)^{1/2}\nu^2}{\mu^{3/2}(\nu-\frac{2}{\mu}-\frac{1}{\mu})^4 2^{\nu}} \; \frac{2}{t}\int_0^t \frac{y^{2\nu+1}}{\sqrt{t^2-y^2}}\,dy \tag{4.36}$$

$$= \frac{32\omega_b(\nu-2/\mu)^{1/2}}{(\nu-\frac{1}{\mu})^4} \; \frac{2}{2^{\nu}} \; \frac{\nu^2}{(\nu!)^2} \; \frac{t^{2\nu+1}}{t} \int_0^1 \frac{x^{2\nu+1}}{\sqrt{1-x^2}}\,dx$$

onde usamos[41].

$$\int_0^1 \frac{x^{2\nu+1}}{\sqrt{1-x^2}}\,dx = \frac{2^{2\nu}(\nu!)^2}{(2\nu+1)!} \tag{4.37}$$

Como $t \sim \lambda$, temos finalmente que a dependência de W^ν em λ, neste regime, fica sendo

$$W^\nu \sim t^{2\nu} \sim \lambda^{2\nu} \tag{4.38}$$

ou ainda, visto que

$$\lambda \,\alpha\, a \,\alpha\, E \,\alpha\, I^{1/2} \rightarrow \lambda^2 \,\alpha\, I \tag{4.39}$$

tem-se

$$W^\nu \sim I^\nu \tag{4.40}$$

(a.2) - Limite de Campo Intenso

Neste caso, verificamos que para $\lambda >> 1$ (ver figuras 3 e 4).

$$\eta/\lambda \sim \frac{1}{\lambda} \quad e \quad \frac{2\varepsilon_0}{\lambda} \sim \frac{2}{\lambda}$$

e portanto $\bar{\nu} = \dfrac{2\varepsilon_0}{\mu\lambda} \sim \dfrac{2}{\mu\lambda} << \nu$;

$$t = \lambda\mu^{1/2}(\nu-\bar{\nu})^{1/2} \sim \lambda$$

$J_\nu^2(y)$ para $y >> \nu$ comporta-se como[39,40].

$$J_\nu^2(y) \sim \frac{1}{\pi y} \qquad (4.41)$$

independentemente de ν. Portanto, a expressão da taxa $W^\nu(\lambda,\ \eta,\ \varepsilon_o,\ \bar{\nu},\ \mu)$ assume, neste caso, a forma

$$W^\nu = \frac{32\omega_b(1/\lambda^5)(\nu-1/\mu\lambda)^{1/2}2\nu^2}{\mu^{3/2}(\nu-\frac{1}{\mu\lambda}+\frac{1}{\mu\lambda 2})^4\ t}\int_o^t \frac{dyy(1/\pi y)}{(t^2-y^2)^{1/2}} \qquad (4.42)$$

fazendo $y/t = x$ e notando que para λ grande

$$(\nu - \frac{1}{\mu\lambda}) \sim \nu \qquad \nu - \frac{1}{\mu\lambda} + \frac{1}{\mu\lambda^2} \sim \nu$$

tem-se então

$$W^\nu \simeq \frac{32\omega_b 1/\lambda^5 \nu^{1/2}\nu^2}{\mu^{3/2}\ \nu^4}\ \frac{2}{\pi t}\int_o^1 \frac{dx}{(1-x^2)^{1/2}} \qquad (4.43)$$

então

$$W^\nu \sim \frac{2}{\lambda^5}\ \frac{1}{t}\int_o^1 \frac{dx}{(1-x^2)^{1/2}} \qquad (4.44)$$

$$W^\nu \sim \frac{1}{\lambda^5}\cdot\frac{1}{\lambda}$$

Consequentemente, para campos suficientemente intensos, tem-se

$$W^\nu \sim \frac{1}{\lambda^6} \qquad (4.46)$$

Em resumo, veremos que, para campos fracos (λ pequeno) W^ν cresce com λ como $\lambda^{2\nu}$, enquanto que para campos fortes (λ grande) W^ν decresce como λ^{-6}.

Conclui-se, então, que W^{ν} passa por um máximo para um certo valor $\bar{\lambda}$ de λ.

Para avaliar $\bar{\lambda}$ e estimar seu comportamento com a multiplicidade fotônica, vamos então analisar o comportamento de W^{ν} na região de valores intermediários de campo. Inicialmente observemos que na função de Bessel que nos interessa $J_{\nu}(y)$ temos

$$y = t\,\mathrm{sen}\theta \quad \mathrm{e} \quad t = \lambda\mu^{1/2}(\nu-\bar{\nu})^{1/2} = \nu\lambda/\lambda_c ,$$

com

$$\lambda_c = \frac{\nu}{\mu^{1/2}(\nu-\bar{\nu})^{1/2}} \sim \nu^{1/2}$$

Consequentemente $t \sim \nu^{1/2}$

Portanto, como $y = t\,\mathrm{sen}\theta$ tem o valor máximo t e $t \sim \nu^{1/2}$ pode-se esperar que, em $J_{\nu}(y)$, y permaneça menor que ν, especialmente quando ν for grande. Nessas condições, podemos usar a expressão assintótica da função Bessel $J_{\nu}(y)$, válida quando $y < \nu$. Neste limite a função Bessel toma a forma[41].

$$J_{\nu}(y) \sim \frac{e^{\nu}}{\sqrt{2\pi\nu}} \left(\frac{y}{2\nu}\right)^{\nu} e^{-y^2/2\nu} , \quad \nu > t \geqslant y \qquad (4.46)$$

Procedendo a integração da Eq. (4.31) sob estas condições, obtem-se

$$W^{\nu} = \frac{32\omega_b(\eta/\lambda)^5 (\nu-\bar{\nu})^{1/2} e^{2\nu}(\nu!)^{2\nu} t^{2\nu}\,{}_1F_1(\nu+1,\ \nu+3/2;\ -t^2/\nu)}{\mu^{3/2}(\nu-\bar{\nu}+\eta^2/\mu\lambda^2)^4 \sqrt{\pi}\,\nu^{2\nu+1}\,(2\nu+1)!} \qquad (4.47)$$

onde ${}_1F_1(a,\ b,\ x)$ é a função hipergeométrica degenerada[40].

No caso de $\nu >> 1 \rightarrow a \simeq b$ e assim podemos usar ${}_1F_1(a,b,x) \simeq e^x$ e consequentemente ${}_1F_1(\nu+1 \;, \nu+3/2, \; - t^2/\nu) \simeq e^{-t^2/\nu}$.

Daí, obtêm-se tomando

$$\nu - \bar{\nu} \to \nu; \qquad \nu - \bar{\nu} \to \eta^2/\mu\lambda^2 \to \nu$$

que W^ν depende de λ na forma

$$W^\nu \to \lambda^{2\nu-5} \; e^{-\nu\lambda^2/\lambda_c^2} \tag{4.48}$$

onde usamos $t = \nu\lambda/\lambda_c$. Para determinar $\bar{\lambda}$, impomos a condição $\left.\frac{dW^\nu}{d\lambda}\right|_{\lambda=\bar{\lambda}} = 0$, visto que $W^\nu(\lambda)$ é máximo para $\lambda = \bar{\lambda}$. Assim chegamos à

$$\frac{dW^\nu}{d\lambda} \to [\,(2\nu-5)\lambda^{2\nu-6} - \frac{2\nu\lambda}{\lambda_c^2}\,\lambda^{(2\nu-5)}]\; e^{-\nu\lambda^2/\lambda_c^2} = 0$$

$$(2\nu-5)\lambda^{2\nu-6} - \frac{2\nu}{\lambda_c^2}\,\lambda^{2\nu-4} = 0$$

$$\lambda^{2\nu-5}\,[\,(2\nu-5)\lambda^{-1} - \frac{2\nu\lambda}{\lambda_c^2}\,] = 0$$

A condição $\bar{\lambda}^{2\nu-5} = 0$ implicando $\bar{\lambda} = 0$ ou $\bar{\lambda} = \infty$ dependendo de $2\nu > 5$ ou $2\nu < 5$, respectivamente. Estas soluções não interessam pois correspondem a mínimos de W^ν. resta então:

$$(2\nu-5)\bar{\lambda}^{-1} - \frac{2\nu\bar{\lambda}}{\lambda_c^2} = 0 \quad \rightarrow \quad \bar{\lambda} = \lambda_c\,\sqrt{\frac{2\nu-5}{2\nu}}$$

$$\bar{\lambda} = [\,\frac{2\nu-5}{2\nu}\,]^{1/2}\lambda_c \tag{4.49}$$

ou ainda, para ν grande (> 5/2)

$$\bar{\lambda} = [1-5/2\nu]^{1/2}\lambda_c - \lambda_c - \nu^{1/2} \qquad (4.50)$$

Portanto, na região de λ's intermediários, nas vizinhanças do pico de W^ν tem-se:

$$W^\nu = \frac{32\omega_b \nu^{1/2}\nu^2 e^{2\nu}(\nu!)^2 \bar{\lambda}^{2\nu-5} e^{-\nu\bar{\lambda}^2/\lambda_c^2}}{\nu^4 \nu^{2\nu+1}(2\nu+1)!} \qquad (4.51)$$

e portanto

$$W^\nu \simeq \frac{32\omega_b \nu^{1/2}\nu^2 e^{2\nu}(\nu!)^2 \nu^{2\nu}\, \nu^{-5/2} e^{-\nu}}{\nu^4 \nu^{2\nu+1}(2\nu+1)!}$$

$$W^\nu \sim \frac{32\omega_b \nu^{1/2} e^{2\nu} \nu^{-5/2} e^{-\nu}}{\nu^4 \pi^{-1/2} 2\nu 4^\nu}$$

Assim

$$W^\nu \sim \left(\frac{e}{4}\right)^\nu \frac{1}{\nu^6} \qquad (4.52)$$

Note-se que para ν grande a intensidade de pico de W^ν decresce com ν, enquanto a posição do máximo, a medida que ν cresce, desloca-se em direção a λ's maiores.

Conforme dissemos acima, a Eq. (4.31) pode, por outro lado ser integrada analiticamente, sem aproximações. O resultado final, usando a relação[40].

$$\int_0^{\pi/2} J_\nu^2(z\,\text{sen}t)\,\text{sen}t\,dt = z^{-1}\sum_{m=0}^{\infty} J_{2\nu+2m+1}(z) \,, \qquad (4.53)$$

$$\text{Re}\ \nu > -1$$

é:

$$W^\nu = \frac{32\omega_b(\eta/\lambda)^5(\nu-\bar{\nu})^{1/2}\nu^2}{\mu^{3/2}(\nu-\bar{\nu}+\eta^2/\mu\lambda^2)^4}\ \frac{1}{k_\nu a}\sum_{m=0}^{\infty} J_{2(\nu+m)+1}(k_\nu a) \qquad (4.54)$$

válido para os valores inteiros de ν que nos interessam (ν = 1, 2 ...) e para valores de λ tais que $\nu > \bar{\nu}$.

Com o propósito de tornar evidente o comportamento global da taxa de ionização multifotônica $W^\nu(\lambda)$ com a intensidade do campo, desenvolvemos um programa para seu cálculo no computador VAX 11 VMS. A somatória de funções de Bessel foi calculada usando a relação de recorrência Eq.(4.17) $J_{\nu-1}(z) + J_{\nu+1}(z) = \frac{2\nu}{z} J_\nu(z)$ e as subrotinas do VAX [44,45], que calculam $J_0(x)$ e $J_1(x)$. Mantivemos uma precisão de cálculo de 0,01% na soma. Os cálculos foram desenvolvidos assumindo a ação de um laser de rubi (ω = 2.7 x 10^{15} rad seg^{-1}) e para vários valores de ν. Podemos observar através das Fig. 6 à 10 que o comportamento de W^ν para baixas e altas intensidades de campo correspondem aos resultados pelos nossos cálculos anteriores, para cada regime específico. Pode-se, também, comprovar a evolução do valor de pico e da sua localização com a mudança de multiplicidade fotônica, para o caso de ν grande.

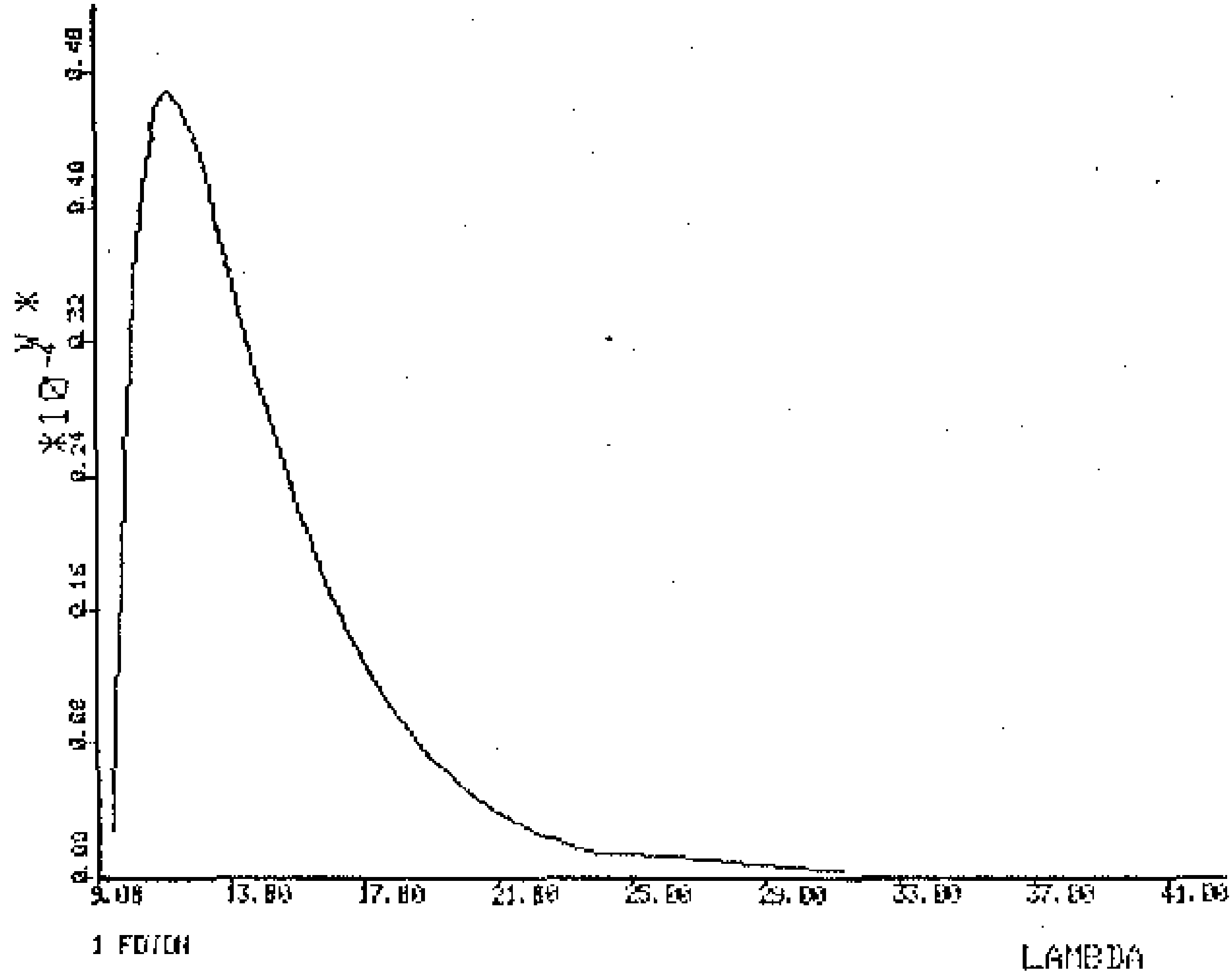

Fig. 6 - Taxa de ionização para hidrogênio a um fóton ($\nu = 1$) em função do parâmetro de intensidade de campo $\lambda = 0{,}89 \times 10^{-6} \sqrt{I(\mathrm{Watt/cm^2})}$ (laser de rubi $\hbar\omega = 1{,}78$ eV). Observe que a intensidade mínima é de $\lambda \sim 9$ quando $E_I(\lambda) \sim 1{,}77$ eV.

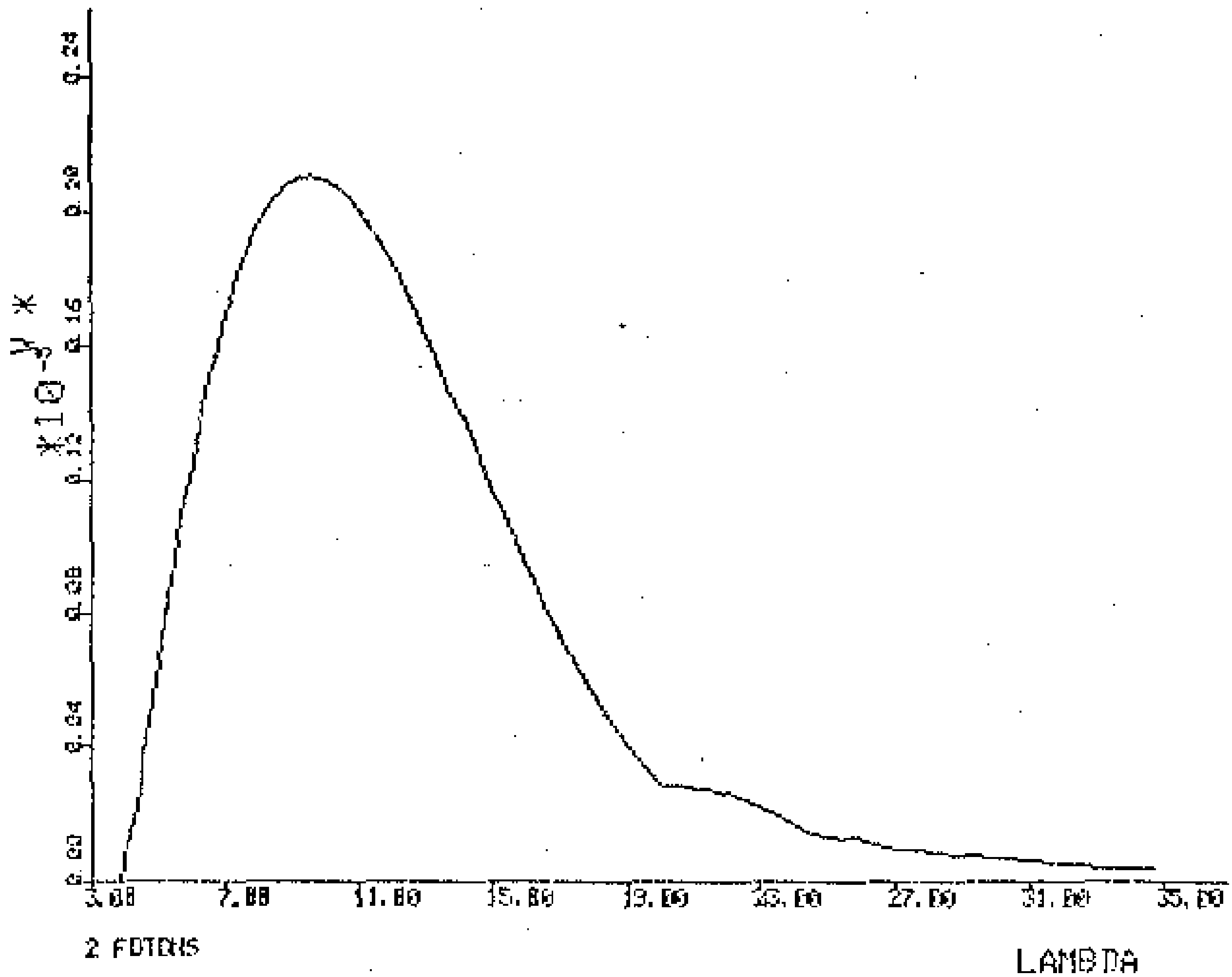

Fig. 7 - Taxa de ionização do hidrogênio a dois fótons ($\nu=2$) em função do parâmetro $\lambda = 0,89 \times 10^{-6} \sqrt{I(Watt/cm^2)}$ (laser de rubi, $\hbar\omega = 1,78$ eV).

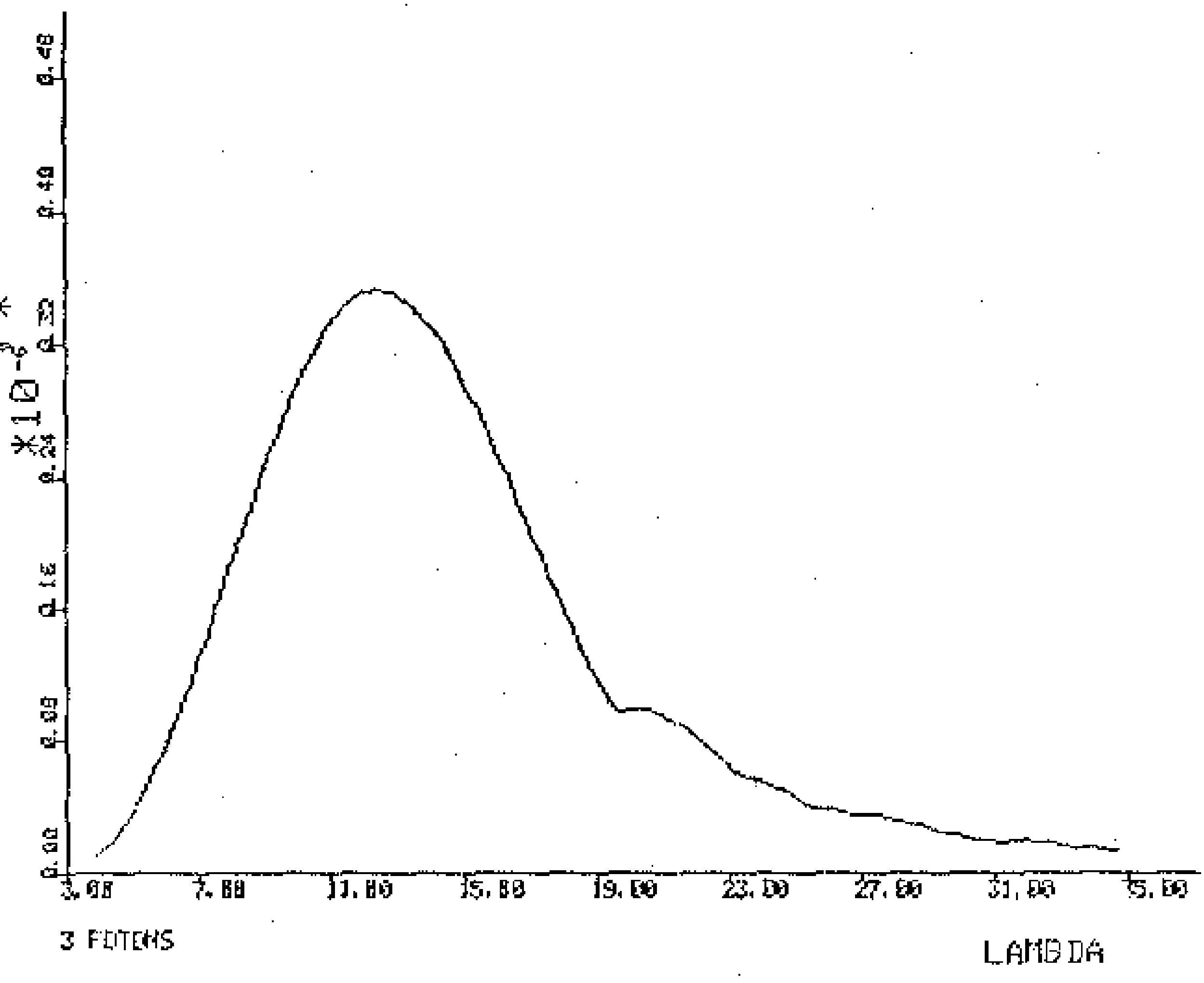

Fig. 8 - Taxa de ionização do hidrogênio, a 3 fótons ($\nu = 3$) em função do parâmetro $\lambda = 0{,}89 \times 10^{-6} \sqrt{I(\text{Watt/cm}^2)}$ (laser de rubi, $\hbar\omega = 1{,}78$ eV.

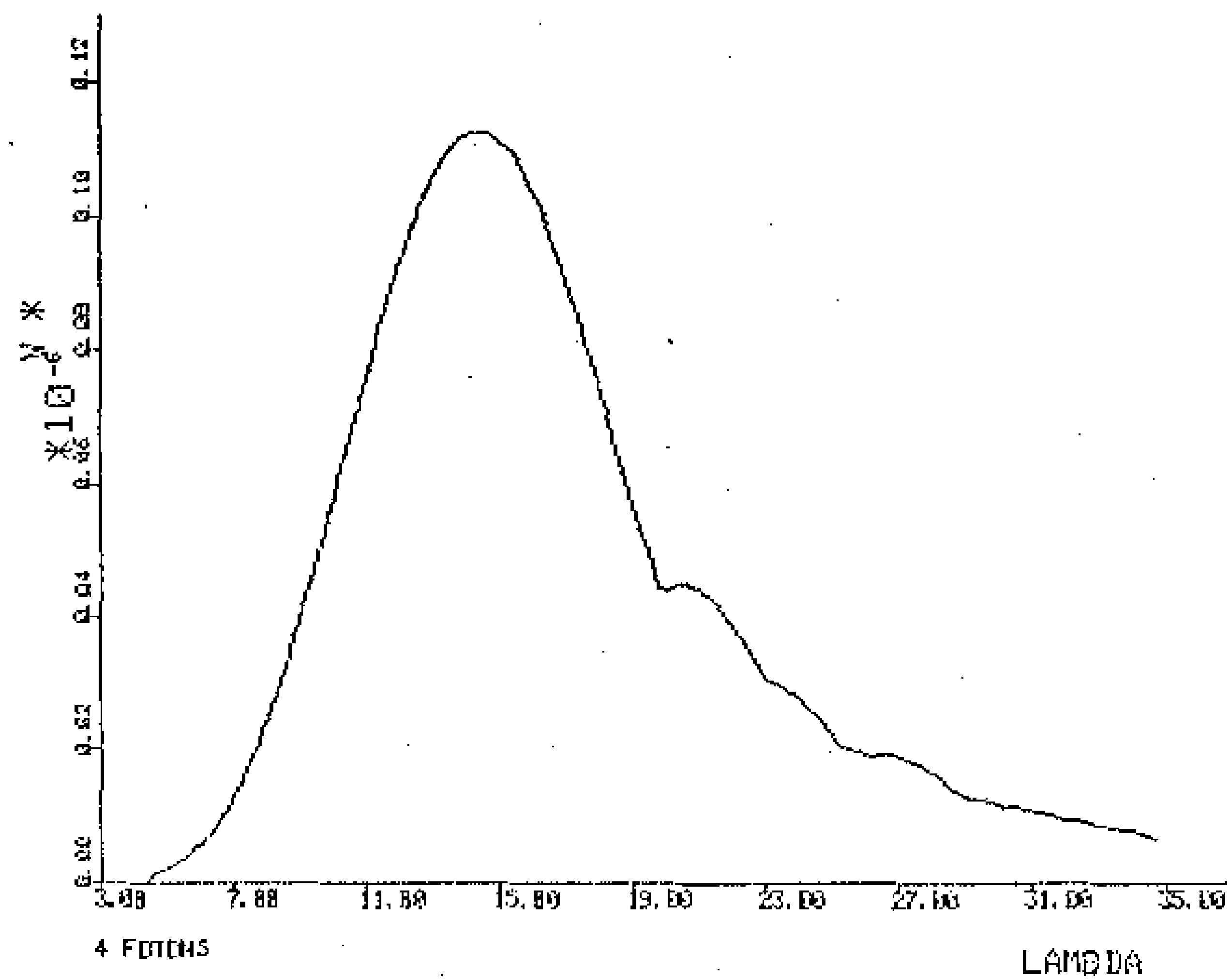

Fig. 9 - Taxa de ionização do hidrogênio a 4 fótons ($\nu = 4$) em função do parâmetro $\lambda = 0{,}89 \times 10^{-6} \sqrt{I(\mathrm{Watt/cm^2})}$ (laser de rubi, $\hbar\omega = 1{,}78$ eV).

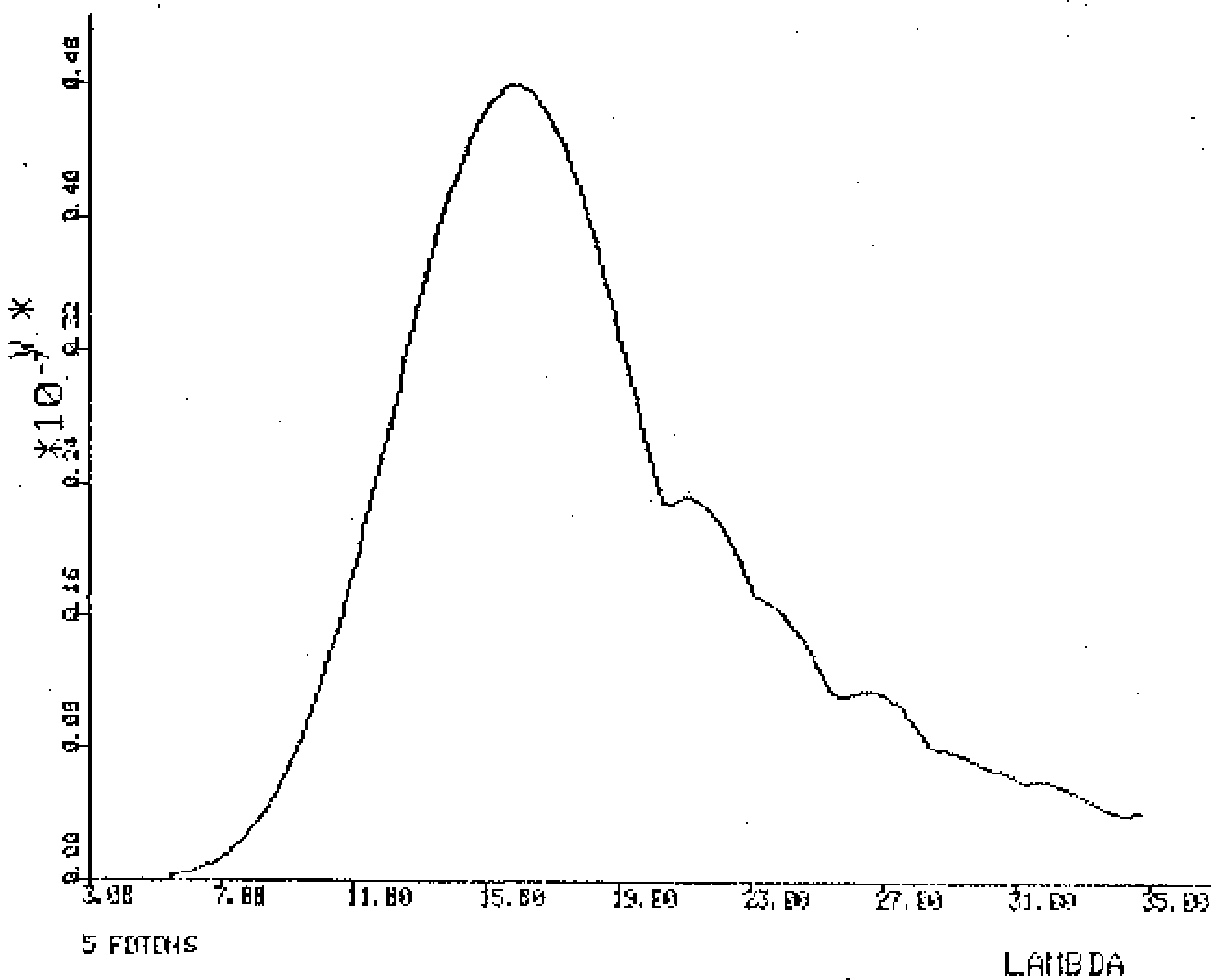

Fig. 10 - Taxa de ionização do hidrogênio a 5 fótons (ν = 5) em função do parâmetro $\lambda = 0{,}89 \times 10^{-6} \sqrt{I(\mathrm{Watt/cm^2})}$ (laser de rubi, $\hbar\omega$ = 1,78 eV).

CAPÍTULO V

CONCLUSÕES

Nesta Tese, o problema da ionização multifotônica de um átomo hidrogênico, num campo de laser intenso, foi tratado dentro de um esquema não-perturbativo que considerou, explicitamente, os reflexos da ação do campo intenso sobre a estrutura atômica.

O interêsse teórico neste tipo de problema continua aberto e tem sido, ao longo dos últimos anos, objeto de intensa investigação, com resultados, frequentemente, contraditórios.

Nosso trabalho teve o propósito de contribuir para a elucidação do problema, muito embora reconheçamos que, em benefício da simplicidade, tenhamos introduzido algumas hipóteses e aproximações que impõe certas limitações de aplicabilidade ao nosso esquema. Não obstante, em sua construção básica, nossa proposição constitui uma formulação teórica adequada, para o problema em pauta.

Na construção de um potencial efetivo que descreva a interação coulombiana atômica, em presença de um campo de laser intenso, seguimos a formulação de Lima e Miranda[1,12,24] que resulta da aplicação do método de translação espacial de Henneberger-Kramer[10] no contexto da aproximação de dipolo elétrico para o campo de radiação. Nossa formulação variacional do problema, para obter o estado fundamental associado a esse potencial efetivo, explorou o uso de um código númerico que desenvolvemos para uso com o computador VAX-11/708 e confirmou inteiramente o comportamento determinado anteriormente[1] e cálculos equivalentes realizados através da integração numérica direta da Equação de Schroedinger, através do Método de Diferenças Finitas[43].

O estado fundamental deste atomo hidrogênico vestido, completamente determinado pelo tratamento acima referido, sob aproximações aceitáveis que mantêm sua aplicabilidade em processos que envolvam a participação de lasers, mesmo que em regime ultra-intenso, é nosso estado de partida para o processo de fotoionização, via absorção de muitos fotons, que nos propusemos a estudar. É natural, pois, que na avaliação de possíveis condicionamentos de nossa descrição de átomos vestidos, para uso em conexão com este processo, consideremos, na comparação com o potencial de ionização atomico, de um lado a energia conjunta dos ν fotons simultâneamente absorvidos e, de outro lado, o fato, hoje amplamente reconhecido, de que quando um átomo é iluminado com um camoo eletromagnético suficientemente intenso, o movimento eletrônico fica determinado mais pelo campo do que pela interação com o núcleo. Isto que dizer que, ainda que o regime de intensidades que se esteja, eventualmente, considerando, situe-se abaixo daquele limite, é claro que o efeito "renormalizador" do campo sobre a interação coulombiana vai sempre na direção do enfraquecimento da ligação atômica e, portanto, do rebaixamento do potencial de ionização. Nosso tratamento, desenvolvido no Cap. III revelou, claramente, este estado de coisas.

A fotoionizção foi descrita no contexto tradicional da matriz S para transições de dipolo elétrico, na formulação em que o operador de transição contém, explicitamente, o potencial vetor que descreve o campo eletromagnético. Após detalhadas e elaboradas manipulações teóricas chegamos, finalmente, a uma expressão analítica fechada para a taxa de transições ionizantes, envolvendo a participação simultânea de ν fotons. Nossos resultados foram, também, estabelecidos para regimes específicos de intensidade de campo, a partir do uso de aproximações adequadas para a função de

Bessel que comparece em nossas expressões para a taxa de transição multifotônica, quer na expressão analítica fechada geral, quer na expressão preliminar, através da introdução das aproximações no integrando da integral que dela faz parte. Estes regimes estão designados, em nosso trabalho, como "limite de campos fracos", "limite de campos fortes" e "campos intermediários". É preciso, aqui, fazer uma observação quanto ao real sentido destas designações, que como veremos, deverão ser tomadas dentro de um contexto de valor relativo. De fato, as intensidade de campo em nosso trabalho são descritas através do parametro λ que guarda com a intensidade a relação $\lambda = 6,5 \times 10^{24}\, \omega^{-2} \sqrt{I}$, para um laser de frequencia angular ω rad/s e de intensidade I Watt/cm^2. Assim, por exemplo, ao dizermos que $0,01 \leqslant \lambda \leqslant 0,1$ designa uma região de campo fraco, no sentido assumido em nosso trabalho, estamos, na verdade, falando, ainda, de intensidades $1,4 \times 10^8 \leqslant I \leqslant 1,4 \times 10^{10}$ Watt/cm^2 para o caso de se tratar de um laser de rubi ($\hbar\omega \simeq 1,8$ eV) ou de intensidades $3,5 \times 10^7 \leqslant I \leqslant 3,5 \times 10^9$ Watt/cm^2, para o caso de um laser de Nd:vidro ($\hbar\omega \simeq 1,2$ eV), o que, seguramente, em muitos outros contextos, seria interpretado como regime de campos bastante intensos. Portanto, repetimos, ao considerar-se nossos resultados, expressos em função do parametro λ, nas Figs. 6 a 10, é necessário ter estes fatos em mente. Como se poderia esperar, nossos resultados reproduzem corretamente a conhecida dependência que a taxa de ionização multifotônica exibe em função da intensidade do campo, para o caso de campos que designamos como fracos, a saber

$$W^{(\nu)} \propto I^{\nu}$$

que, num gráfico log-log de $W^{(\nu)}$ vs. I revela-se como uma reta com inclinação proporcional a ν (multiplicidade fotônica na absorção). Isto fica claramente evidenciado em nossas Figs. 6 a 10 , na redução analítica de nossos resultados teóricos ao limite de campos fracos e nos resultados experimentais, como por exemplo, os apresentados na Fig. 11 . Nela, também, podemos observar que, para intensidades mais elevadas, começa a se tornar evidente um desvio da linearidade inicial. Isto ocorre em função de vários fatores, entre os quais, certamente, podemos incluir a variação dos níveis de energia (potencial de ionização) do átomo vestido e a mudança de dominância de uma certa multiplicidade sobre outra (as medidas experimentais, no caso de processos não-ressonantes, como o que tratamos, fornecem a taxa integrada sobre todas as multiplicidades viáveis) visto que, como mostram nossos resultados, o máximo de fotoionização ocorre para valores de intensidade que variam com a multiplicidade envolvida. Este desvio pode, ainda, ser indicativo da aproximação do regime de intensidades para o qual, independentemente da multiplicidade, nossos resultados prevêm o declínio da taxa de fotoionização.

Para finalizar, gostaríamos de comentar que nossa versão teórica para tratamento do problema da fotoionização multifotônica não-ressonante, em campos super-intensos, desenvolvida neste trabalho foi, por necessidade, uma versão simplificada em vários de seus aspectos, tanto pelo nível de aprofundamento com que a questão poderia ser tratada, a nível de uma Tese de Mestrado, sem comprometer demais o seu carater didático, que fomos orientados sistematicamente em preservar, como também por nosso desejo de procurar evitar soluções cuja complexidade impedisse a maior transparência física dos resultados, que uma solução analítica permite por em evidência e que fica profundamente prejudicada quando apenas uma avaliação numérica dos resultados se torna possível. É claro que o custo disso é que a introdução de hipóteses simplificadoras, e/ou tratamentos aproximados, leva a uma redução do espaço de validade do modelo proposto. Em nosso caso, estamos convencidos que a relação custo/benefício pende a nosso favor. Assim, vários dos aspectos e ingredientes que, pelas razões acima, foram omitidos ou simplificados, serão objeto de estudos em que já estamos presentemente engajados e cujos efeitos sobre a descrição do processo pretendemos brevemente, ver resgatados. É o caso, só para citar um exemplo, potencialmente importante, da consideração da extensão espacial finita do feixe de laser. Além desse, há vários outros aspectos do problema, que serão considerados nos estudos que estão em curso.

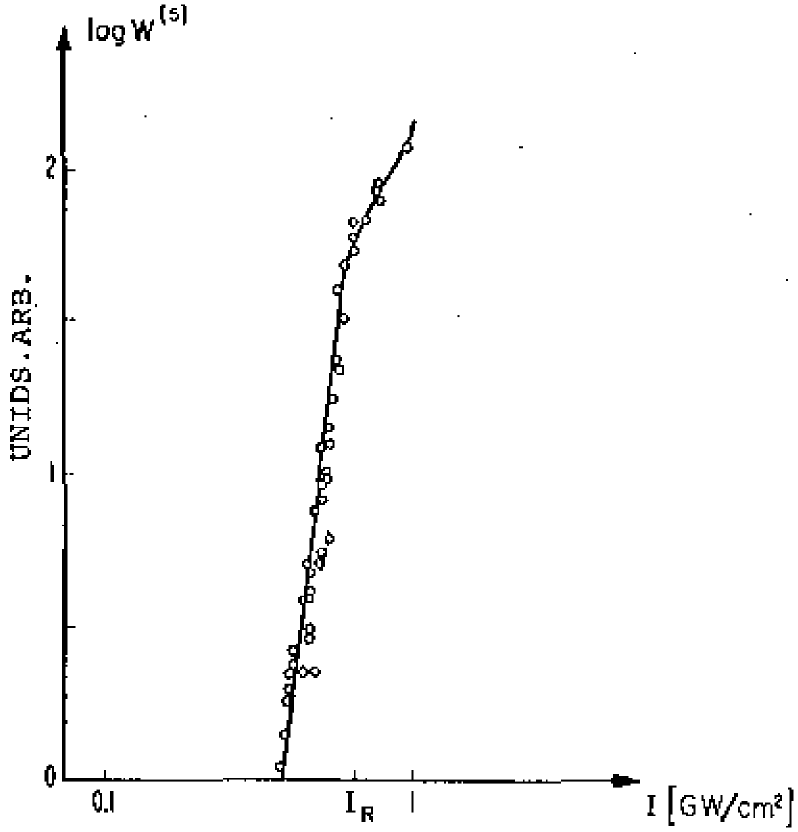

Fig. (a)[46]

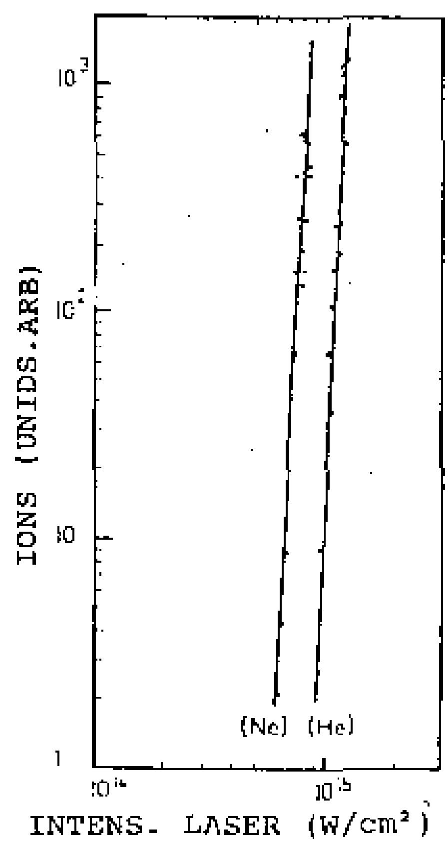

Fig. (b)[47]

Fig. 11 - Taxa de ionização multifotônica

(a) - Ionização de átomos de He, com laser de rubi

(b) - Inonização de He e Ne com laser de Nd:YAG.

Antes de encerrarmos este Capitulo queremos tecer algumas considerações sobre as condicões de aplicabilidade do esquema de cálculo que utilizamos em nosso trabalho. Nossa formulação submete-se, é claro, ãs mesmas restrições de aplicabilidade que o Método de Translação Espacial de Henneberger-Kramers, que utilizamos no tratamento dos efeitos do campo intenso sobre o sistema atomico. Portanto, embora, amparados nas justificativas de manutenção da simplicidade dos cálculos, tenhamos abordado o caso de ionizações que se iniciam no estado fundamental do atomo no campo intenso, queremos aqui examinar as condições que determinam o maior nível de propriedade do uso do MTE no problema que estudamos.

A descrição do sistema atomico no campo intenso com o MTE, para garantia de plena aplicabilidade, requer:(10)

1) que a frequencia do campo (ω_ℓ) não se acople ã transições ressonantes nem enseje transições ionizantes diretas:

$\hbar\omega_\ell < E_n$, ou seja, $\omega_\ell < \dfrac{\omega_b}{n^2}$ com $\omega_b = e^2/2\hbar a_0 = 2,1\times10^{16}\ s^{-1}$ (Hidrog.

2) que a média temporal subtendida no MTE se justifique, o que requer uma frequencia de campo (ω_ℓ) maior que a frequencia de circulação eletronica, i.e.:

$$\omega_\ell > \omega_n = v_n/r_n$$

$v_n = Ze^2/\hbar n$; $r_n = n^2\hbar^2/Ze^2m = n^2a_0/Z$, o que implica

$$\omega_n = Z^2e^2/\hbar n^3a_0 = 2Z^2\,\omega_b/n^3$$

Portanto, para plena aplicabilidade do MTE requer-se:

$$(2Z^2/n^3) < \mu < (Z^2/n^2)$$

onde $\mu = \hbar\omega_\ell/\hbar\omega_b$ é um parâmetro, já introduzido anteriormente, que mede a energia do foton em têrmos da energia do estado fundamental do ãtomo, na ausência do campo.

A condição acima satisfaz-se, para o caso do hidrogênio, se $(2/n^3) < (1/n^2)$, ou seja, para $n \geqslant 2$. Em resumo, o MTE tem suas aplicações tanto mais justificadas e apropriadas, na discussão de fotoionização, quanto mais o estado de partida considerado constitua um estado excitado. Em particular, o esquema se aplica, com muita conveniencia, no trato de fotoionização de estados de Rydberg. Para um determinado estado de partida (n dado) teremos uma certa faixa de valores de μ e, portanto, de frequencias (ω_L), ou comprimentos de onde (λ_L) que seleciona os lasers utilizáveis, no contexto assumido. Por exemplo, para o caso do hidrogênio, podemos ter:

n=3 $\quad 0.07 < \mu < 0,11$ e, tomando $\mu = 0,09$ tem-se

$\omega_L = \mu\,\omega_b = 0,09 \times 2,1\times10^{16} = 1,8\times10^{15}\ s^{-1}$, ou seja,

$\lambda_L \simeq 1\ \mu m$ (p.explo. um laser de Nd:YAG ou Nd:vidro)

n≐7 $\quad 0,6\times10^{-2} < \mu < 2 \times 10^{-2}$; tomando $\mu = 0,9\times10^{-2}$

$\omega_L = 1,9\times10^{14}\ s^{-1}$ e $\lambda_L \simeq 10,6\ \mu m$ (p.explo. laser de CO_2)

n=8 $\quad 0,38\times10^{-2} < \mu < 1,6\times10^{-2}$; tomando $\mu = 0,4\times10^{-2}$

$\omega_L = 8,4 \times 10^{13}\ s^{-1}$ e $\lambda_L = 24\mu m$ (p.explo. laser de CO)

n≐20 $\quad 2,5\times10^{-4} < \mu < 2,5\times10^{-3}$; tomando $\mu = 10^{-3}$

$\omega_L = 2,1\times10^{13}\ s^{-1}$ e $\lambda_L = 90\ \mu m$ (lasers no IVL)

n≐40 $\quad 3,1\times10^{-5} < \mu < 6,3\times10^{-4}$; tomando $\mu = 10^{-4}$

$\omega_L = 2,1\times10^{12}\ s^{-1}$ e $\lambda_L = 900\ \mu m$ (laser no IVL)

n=100 $\quad 2 \times 10^{-6} < \mu < 10^{-4}$; tomando $\mu = 2 \times 10^{-5}$

$\omega_L = 4,2\times10^{11}\ s^{-1}$ e $\lambda_L = 4,8$ mm (masers)

Embora, como vimos acima, o MTE aplique-se, com maior propriedade, aos casos de fotoionização de estados atômicos excitados, o formalismo que desenvolvemos, apelando para simplificação matemática do problema, para ionizações atomicas a partir do estado fundamental (a obtenção variacional das energias e funções atomicas em presença do campo intenso cresce tremendamente em elaboração e cálculo à medida que n cresce), mantém qualitativamente os mesmos resultados quando aplicado a estados de n grande. Isto pode ser apreciado do fato que a Eq. 4.21 pode ser reescrita na forma

$$W_{if}^{\nu}(\vec{k}) = (mk_{\nu}\nu^{2}\,\omega^{2}/2\pi\hbar)\,|\phi_i|^{2}\int_{0}^{\pi} d\theta\, \mathrm{sen}\theta\; J_{\nu}^{2}(k_{\nu}a\, \mathrm{sen}\theta)$$

onde $\phi_i(\vec{k})$ é a transformada de Fourier do estado de partida no processo de fotoionização. No caso de um estado (ns) qualquer, se assumirmos que o parametro variacional β depende pouco do numero quântico n, pode-se mostrar que $|\phi_i(k)|^2$ para $n \neq 1$ não modifica o perfil das curvas de taxa de fotoionizacão multifotonica (Figs. 6 a 10) que calculamos, como já dissemos, por questão de simplicidade, para n=1, reproduzindo-se, assim, para os estados (ns) com $n \geqslant 2$ todas as feições qualitativas importantes de nossos resultados. O trabalho de estabelecer a obtenção quantitativa dos resultados para ionização a partir de estados excitados, embora tediosa e elaborada, está sendo atacada no momento como parte de meu trabalho de extensão e aprimoramento dos resultados já obtidos, como já mencionamos acima.

APÊNDICE A

Método de translação espacial aplicado à solução da equação de Schroedinger Eq. (3.4).

Façamos $\psi(\vec{r}, t) = U\phi(\vec{r}, t)$ (A.1)

com

$$U = e^{\frac{-ie}{\hbar mc}\int^t dt' A(t')\cdot\bar{p}} \, e^{\frac{-i\,e^2}{2mc^2\hbar}\int^t dt' A^2(t')} \qquad (A.2)$$

que podemos escrever como

$$U = e^{\frac{i}{\hbar}\delta(t)\cdot\bar{p}} \, e^{i\eta(t)} = U_1 U_2 \qquad (A.3)$$

com

$$\vec{\delta}(t) = \frac{-e}{mc}\int^t dt' \vec{A}(t') \qquad e \qquad (A.4)$$

$$\eta(t) = \frac{-e^2}{2mc^2\hbar}\int^t dt' A^2(t') \qquad (A.5)$$

ve-se que $U_1 = e^{i\delta(t)\cdot\bar{p}/\hbar}$ é um operador de translação espacial pois $U_i f(\vec{r}) = f(\vec{r} - \vec{\delta}(t))$

Por outro lado, vemos que

$$\frac{\partial\vec{\delta}}{\partial t} = -\frac{e}{mc}\vec{A}(t) \qquad e \qquad \frac{\partial^2\vec{\delta}}{\partial t^2} = \frac{-e}{mc}\frac{\partial A}{\partial t} = \frac{e}{m}\vec{E}(t) \qquad (A.6)$$

o que nos diz que $\vec{\delta}(t)$ deve ser interpretado como o deslocamento clássico do centro de oscilação de um elétron livre em presença de um campo de radiação $\vec{E}(t)$.

Nosso propósito é demonstrar aqui a afirmação de

Hennerberger[10] segundo a qual a Eq. (3.4) original é equivalente a equação transformada

$$i\hbar \frac{\partial\phi(\vec{r},t)}{\partial t} = [\frac{\vec{p}^2}{2m} + V(\vec{r}-\vec{\delta}(t))]\,\phi(\vec{r},t)$$

A transformação $\psi = U\phi$ levada na Eq.(3.4)do Capítulo III dá

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}(U\phi) = (\frac{p^2}{2m} + \frac{e^2}{2mc^2}A^2 + \frac{e^2}{2mc}\vec{p}.\vec{A} + \frac{e^2}{2mc}\vec{A}.\vec{p} + V(\vec{r}))U\phi$$

Desenvolvendo o lado esquerdo:

$$i\hbar \frac{\partial U\phi}{\partial t} = i\hbar\,[U\frac{\partial\phi}{\partial t} + \frac{\partial U}{\partial t}\phi] \qquad (A.7)$$

$$i\hbar\{U\frac{\partial\phi}{\partial t} + e^{i\vec{\delta}.\vec{p}/\hbar}\,e^{i\eta(t)}(i\dot{\delta}(t)\frac{\bar{p}}{t} + i\dot{\eta}(t))\phi(\vec{r},t)\}$$

Como

$$\dot{\vec{\delta}}(t) = -\frac{e}{mc}\vec{A}(t) \quad e \quad \dot{\eta}(t) = \frac{-e^2}{2mc^2\hbar}A^2(t) \qquad (A.8)$$

resulta

$$i\hbar\frac{\partial U\phi}{\partial t} = i\hbar\{U\frac{\partial\phi}{\partial t} + U[\frac{-ie}{mc}\vec{A}(t).\frac{\bar{p}}{\hbar} - \frac{ie^2}{2mc^2}\frac{A^2(t)}{\hbar}]\phi(r,t)$$

O operador U é função de $\bar{p}$ e $\vec{A}$ comuta com estes operadores, se usamos o calibre $\nabla.\vec{A} = 0$ como se verá a seguir daí

$$i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t}\{U\phi\} = Ui\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t}[\frac{e}{mc}\vec{A}(t).\bar{p} + \frac{e^2}{2mc^2}A^2(t)]\,U\phi \qquad (A.9)$$

Agora o lado direito pode ser simplificado notando-se que

$$\hat{p}.\vec{A}\phi(\vec{r},t) = -i\hbar\nabla.(\vec{A}\phi) = -i\hbar(\nabla.A)\phi(r,t) - \vec{A}i\hbar\nabla\phi$$

$$= i\hbar(\nabla.A)\phi(r,t) + \vec{A}.\hat{p}\phi(r,t)$$

Ve-se então que, de fato, a escolha $\vec{\nabla}.\vec{A} = 0$ (calibre de Coulomb) a comutabilidade de $\hat{p}$ com $\vec{A}$ e portanto de $\vec{A}$ com $U = f(\vec{p})$, leva como usado acima. Então o lado direito pode ser escrito:

$$[\frac{p^2}{2m} + \frac{e}{mc}\vec{A}(t).\hat{p} + \frac{e^2}{2mc^2}A^2 + V(r)](U\phi) \qquad (A.10)$$

Comparando-se os dois lados vem

$$U(i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t}) = \frac{p^2}{2m}(U\phi) + V(\vec{r})U\phi$$

$$= U(\frac{p^2}{2m}\phi(r,t)) + V(\vec{r})U\phi(\vec{r},t) \qquad (A.11)$$

usando $U^+U = 1 = UU^+$, visto que U é uma transformação unitária, vem multiplicando por U^+ que:

$$i\hbar\frac{\partial\phi}{\partial t} = \frac{p^2}{2m}\phi + \{U^+V(\vec{r})U\}\phi \qquad (A.12)$$

calculemos

$$U^+V(\vec{r})U = e^{-i\vec{\delta}.\vec{p}}\,V(\vec{r})\,e^{i\vec{\delta}.p}\,e^{in}\,e^{-in}\phi$$

$$= U_1^+V(\vec{r})U_1\,\phi(\vec{r},t) \qquad (A.13)$$

lembrando que

$$U_1^+\,g(\vec{r},t) = g(\vec{r} - \vec{\delta}(t),t) \qquad (A.14)$$

vem

$$U_1^+ \{V(\vec{r})\phi(\vec{r},t)\} = V(\vec{r}.\vec{\delta})\phi(\vec{r}-\vec{\delta},t) \tag{A.15}$$

também

$$U_1^+V(\vec{r})U_1U_1^+\phi(\vec{r},t) = U_1^+V(\vec{r})U_1\phi(\vec{r}-\delta,t) \tag{A.16}$$

Comparando estes dois últimos resultados vem que

$$U_1^+V(\vec{r})U_1 = V(\vec{r}-\vec{\delta}(t)) \tag{A.17}$$

e portanto

$$U^+V(\vec{r})U\phi = U_1^+V(\vec{r})U_1\phi = V(\vec{r}-\delta(t)\phi(\vec{r},t) \tag{A.18}$$

e finalmente

$$\rightarrow i\hbar \frac{\partial\phi}{\partial t} = \frac{p^2}{2m} \phi(\vec{r},t) + V(\vec{r}-\vec{\delta}(t))\phi(\vec{r},t) \tag{A.19}$$

Vamos agora verificar que se tem para o potencial

$$V(\vec{r}-\vec{\delta}(t)) = \frac{-e^2}{|\vec{r} - \vec{\delta}|} \tag{A.20}$$

em primeira aproximação o resultado

$$V(\vec{r}-\vec{\delta}(t)) \simeq - \frac{e^2}{(r^2+a^2)^{1/2}} \tag{A.21}$$

De fato, sendo

$$V(\vec{r}-\vec{\delta}(t)) = - \frac{e^2}{|\vec{r}-\vec{\delta}(t)|} \quad \text{e} \quad |\vec{\delta}(t)| = a = \frac{eA}{mc\omega}$$

vem que

$$\frac{1}{|\vec{r}-\vec{\delta}(t)|} = \frac{1}{\sqrt{r^2-\delta^2-2\vec{r}.\vec{\delta}}} = \frac{1}{(r^2+a^2)^{1/2}} \left\{ \frac{1}{(1- \frac{2\vec{r}.\vec{\delta}}{r^2+a^2})^{1/2}} \right\}$$

usando agora

$$\sqrt{1 \pm X} \simeq 1 \pm 1/2\ X$$

fica

$$\frac{1}{|\vec{r}-\vec{\delta}(t)|} = \frac{1}{(r^2+a^2)^{1/2}} \left\{ \frac{1}{1 - \frac{\vec{r}.\vec{\delta}}{r^2+a^2}} \right\} \tag{A.22}$$

Como, na mesma ordem de aproximação

$$\frac{1}{1 \pm X} \simeq 1 \pm X$$

vem que

$$\frac{1}{|\vec{r}-\vec{\delta}(t)|} = \frac{1}{(r^2+a^2)^{1/2}} \left\{ 1 + \frac{\vec{r}.\vec{\delta}}{r^2+a^2} \cdots \right\} \tag{A.23}$$

Observemos agora que, qualquer que seja $\vec{\delta}(t)$ temos

$$(\vec{r}-\vec{\delta}(t))^2 \geqslant 0 \quad \rightarrow \quad r^2+a^2 - 2\vec{r}.\vec{\delta} \geqslant 0$$

$$\rightarrow \quad r^2+a^2 \geqslant 2\vec{r}.\vec{\delta} \quad \rightarrow \quad \frac{1}{2} \geqslant \frac{\vec{r}.\vec{\delta}}{r^2+a^2}$$

Consequentemente

$$\left(\frac{\vec{r}.\vec{\delta}}{r^2+a^2}\right)^n < \left(\frac{1}{2}\right)^n \tag{A.24}$$

Portanto, mantendo a mesma ordem de aproximação temos que

$$V(\vec{r}-\vec{\delta}(t) \simeq - \frac{e^2}{(r^2+a^2)^{1/2}}$$

aproximação que usamos em nosso trabalho.

REFERÊNCIAS

1. C.A.S. Lima, L.C.M. Miranda, Phys. Rev. 23 A, 3335 (1981)

2. P. Agostini and G. Petite, J. Phys. B: At. Mol. Phys 17, L811 - L816 (1984).

3. M.J. Van der Wiel, Ned. Tijdschr. Natuurkd. A(Netherlands), A50, no 1, 7-9, 13 (1984)(Phys. Abstract Julho 1984 - item no 64436).

4. P. Agostini, M. Clement, F. Fabre e G. Petite, J. Phys. B : At. Mol. Phys. 14, L491-L495 (1981).

5. L. A. Lomprê, G. Mainfray e and C. Manus, J. Phys. B: At. Mol. Phys. 13, 85-99 (1980).

6. B. I. Meerson, Opt. Spectrosc. (USSR) 51(4), Oct. 1981.

7. L. V. Keldysh, Soviet, Phys. JETP. 20, 1307 (1964).

8. A.M. Perelmov e V.S. Popov, Sov. Phys. JETP 25, 336 (1967) e trabalhos nele citados.

9. N. L. Manakov, L. P. Rappoport, Sov. Phys. JETP 42, 430 (1976).

10. W. C. Henneberger, Phys. Rev, Lettrs. 21, 838 (1968).

11. H. R. Reiss, Phys. Rev. 41, 803 (1970), Phys. Rev. A23, 3019 (1981).

12. C.A.S. Lima, L.C.M. Miranda, Unitary Transformation Methods in Intense Field Atomic Physics" 1984, in Essays in Theoretical Physics, Pergamon Press.

13. E. J. Austin, J. Phys. B : At. Mol. Phys., 14, 4045 - (1979).

14. S.M. Kara and M.R.C. Mc Dowell, J. Phys. B : At. Mol. Phys., 14, 1719 - 1739 (1981).

15. M. Ya Amusia, V.K. Ivanov and V.A. Kupchenko, J. Phys. B : At. Mol. Phys. 14, L667 - L671 (1981).

16. G. Wunner, H. Ruder, H. Herold, and W. Schmitt, Astrophys. 117, 156-163 (1983).

17. M. Crance, J. Phys. B : At. Mol. Phys. 17, L635 - L640 (1984).

18. M. Edwards, P. Liwen e L. Armstrong Jr., J. Phys. B : At. Mol. Phys. 17, L515-20 (1984).

19. I. Ya. Bersons, Sov. Phys. JETP 59 (3) 1984.

20. Predag Krstic and Marvin H. Mitlleman, Phys. Rev. A(USA). 25, 1568-79 (1982).

21. H.B. Bebb and A. Gold, Phys. Rev. 143, 1 (1966).

22. S. N. Dixit, At. Georges, P. Lambropulos and P. Zoller, J. Phys. B : At. Mol. Phys. 13, L157-L.58 (1980).

23. J.I. Gersten., M. H. Mitlleman, Phys. Rev. A10, 74 (1974)

24. C.A.S. Lima, and L.C.M. Miranda; Phys. Letters 86 A, 367 (1981).

25. J.E. Bayfield, L.D. Gardner, e P.M. Kock, Phys. Rev.Lett. Rev. Lett. 39, 76-79 (1977).

26. S. Stenholm, Contemp. Phys. 20, 37 (1979).

27. James A. R. Samson, Physics Report 28C, no 4, 305 (1976).

28. J. S. Bakos, Physics Reports 31C, 211 (1977).

29. J.H. Eberly, "Interaction of very intense light with free electrons" in "Progress on Optics, Vol. VII, North Holland Publ. (1969).

30. J.S. Bakos in Advances in Electronics and Electron Phys. 36, 57 (1974).

31. J. E. Bayfield, Phys Report 51, 317 (1979).

32. P. Lambropoulos, in "Advances in Atomic Molecular Phys. 12, 87 (1976).

33. H. A. Kramers, in les Particules Elementaires, Proc. 8th. Solvay Conference (ed. R. Stoops) Wiley, N. York, 1950.

34. P. Lambropoulos, E.A. Power e T. Thirunamachandran Phys. Rev. A14, 1910 (1976).

35. C.A.S. Lima e L.C.M.Miranda, J.Chem. Phys. 78, 6102.(1983).

36. C.A.S. Lima e L.C.M. Miranda, J. Phys. Chem. 89, 1245 (1985).

37. C.A.S. Lima, L.C.M. Miranda, Solid St. Comm. 41, 465 (1982).

38. T. C. Landgraff, J. R. Leite, N. S. Almeida, L.C.M. Miranda, C.A.S. Lima Phys. Lett. 92A, 131 (1982).

39. M. Abramowitz, and Irene A. Stegun, Handbook of Mathematical Function first. Ed. 355, 555 (1965).

40. W. Magnus F. Oberhettinger R. P. Soni, Formulas and Theorems for the Special Functions of Mathematical Physics. third Edition 89 (1966).

41. I.S. Gradsteyn, I.M. Ryzhik, Table of Integrals, séries, and products. 4th, 1980, Academic Press.

42. Paul Roman, Advanced Quantum Theory 1st. Ed., pg. 284, Addeson - Wesley Publ. Co. (1965).

43. Alfredo Cruz Orea , Tese de Mestrado - UNICAMP, 1985 (Orientador: Prof. Dr. Carlos A.S. Lima).

44. Subroutina S17AEF da biblioteca NAG do computador VAX 11/780 VMS, versão 3,7 que calcula os valores da função Bessel $J_0(x)$.

45. Subroutina S17AFF da biblioteca NAG do Computador VAX 11/780 VMS versão 3,7 que calcula os valores da função de Bessel $J_1(x)$.

46. J.B. Bakos, A. Kiss, L.Szabo and M. Tendler, Phys. Lett.41A-(1972) 163.

47. L.A. Lompré, G. Mainfray, C. Manus, S. Repoux R.J. Thebault, Phys. Rev. Lett. 36, 949(1976).